

Les Bond Graphs et le Logiciel 20-sim pour la Modélisation, la Simulation et l'Estimation d'Etat de Colonnes de Distillation

César Pichardo-Almarza

Department of Computer Science, University of Sheffield, Regent Court, 211 Portobello Street, S1 4DP, Royaume-Uni
Phone: +44 (0) 114 22 21800
e-mail: c.pichardo@sheffield.ac.uk

RESUME. Dans ce travail, une approche bond graph est utilisée pour la modélisation, la simulation et l'estimation d'état de colonnes de distillation. Le logiciel 20-sim a été sélectionné comme outil de simulation car les modèles bond graph peuvent être implantés dans 20-sim d'une façon graphique très directe. Pour l'estimation d'état, un observateur à grand gain est proposé. La conception et le calcul de l'observateur est réalisée en utilisant des méthodes graphiques et en profitant des propriétés structurelles du modèle bond graph. Des résultats de simulation sont utilisés pour montrer le comportement dynamique des variables de la colonne et pour l'évaluation de la performance de l'observateur.

Mot clés: Observateur à Grand Gain, Système non-linéaire, Bond Graphs, Colonne de Distillation.

1 INTRODUCTION

Dans ce travail nous essayons de montrer comment le modèle bond graph peut être utilisé pour la modélisation, la simulation et la construction des observateurs dans le cas des systèmes complexes. En particulier, nous construisons des observateurs pour des systèmes de distillation modélisés par pseudo bond graph.

Ces procédés possèdent un comportement fortement non linéaire dû principalement à l'interaction de plusieurs phénomènes de natures diverses et l'association de composants technologiques qui mettent en œuvre des lois issues de disciplines différentes (mécanique, thermique, chimie...). Le comportement dynamique de ce type de système est décrit généralement par des équations différentielles ou algèbro – différentielles non linéaires. Leur modélisation peut être bénéficiée avec l'utilisation d'une approche unifiée capable de mettre en évidence la nature physique et la localisation des variables d'état.

L'application des *bond graphs* pour la modélisation des procédés est justifiée principalement par le fait que l'on peut affiner le modèle en ajoutant ou en supprimant des éléments bond graphs (d'une façon graphique) en fonction des hypothèses simplificatrices. Pour adapter le modèle, il suffit alors simplement d'ajouter par exemple des éléments dissipatifs R pour les phénomènes de transfert thermique ou de résistance hydraulique, des éléments C pour la compressibilité des fluides, pour les capacités thermiques des parois et pour le stockage de masse et de volume et des éléments I pour toute apparition de phénomènes d'inertie [3].

Il est donc également souhaitable que pour l'estimation d'état, l'observateur repose sur une conception capable de prendre en compte les formalismes de modélisation choisis, indépendamment du contexte d'utilisation du modèle.

Dans ce travail, nous construisons un observateur à grand gain à partir du modèle pseudo bond graph d'une colonne de distillation binaire (benzène – toluène).

2 MODELISATION DE LA COLONNE DE DISTILLATION

Dans cette partie nous allons construire le modèle pseudo bond graph d'une colonne de distillation binaire [6]. Le système est décrit dans la section suivante.

2.1 Le Système

L'exemple considéré est une colonne de distillation binaire avec trois plateaux, un condenseur partiel et le bouilleur (5 étapes). Le mélange d'alimentation de la colonne est un mélange benzène-toluène. Le diagramme de la colonne est donné par la Figure 1a ; les spécifications de la colonne, les conditions initiales et les constantes de l'équation d'Antoine, sont résumées dans les Tables 1, 2 et 3.

Le modèle simplifié du système utilisé tient compte des hypothèses suivantes :

1. Le liquide et la vapeur à chaque étage sont en équilibre thermodynamique
2. La composition de sortie du liquide de chaque étage est égale à la composition du liquide dans l'étage.
3. Les flux entre les plateaux, le flux d'alimentation, l'accumulation du liquide dans les étages et les paramètres physiques sont considérés constants.
4. La masse de vapeur accumulée dans les étages est négligée.
5. Le liquide est une solution idéale et la vapeur est un gaz parfait.

Ces hypothèses impliquent forcément pour chaque étage un plateau idéal. Grâce à la dernière hypothèse formulée, la loi de Raoult peut être utilisée:

$$\tilde{P}_k = y_k P = x_k P_k^0 \Rightarrow y_k = \frac{P_k^0}{P} x_k \quad (1)$$

La pression de vapeur (P_k^0) du composant "k" (k = benzène, toluène) est calculée en utilisant l'équation d'Antoine, avec les constantes données dans la Table 3.

$$\text{Pour le benzène: } \log_{10}(P_B^0) = \frac{-A_B}{((T-32)/1.8+273)+B_B}; \Rightarrow P_B^0(T) = 10^{\frac{-A_B}{((T-32)/1.8+273)+B_B}} \quad (2)$$

$$\text{Pour le toluène: } \log_{10}(P_T^0) = \frac{-A_T}{(T + 459.59) + B_T}; \Rightarrow P_T^0 = 10^{\frac{-A_T}{(T+459.59)+B_T}} \quad (3)$$

Table 1. Spécifications de la colonne de distillation

	Paramètre	Valeur
Flux d'alimentation (Le flux d'alimentation est un liquide saturé à son point de bulle)	F	1125 mol/hr
	x_B^F	0.3
	T^F	394 K
Condenseur	Taux de reflux Accumulation du liquide (H^5)	3 22.5 mol
Plateaux	Accumulation du liquide ($H^i, i = 2, 3, 4$)	5.625 mol
Bouilleur	Accumulation du liquide (H^1)	270 mol
Flux de liquide molaire	L	2025 mol/hr
Flux de vapeur molaire	V	2700 mol/hr

Table 2. Conditions Initiales

	Variable	Valeur
Condenseur	x_B	0,3
Plateaux	x_B	0,25
Bouilleur	x_B	0,2

Table 3. Constantes de l'équation d'Antoine

Composant	Constante	Valeur
Benzène	A_B	1686,8
	B_B	7,6546
Toluène	A_T	3179
	B_T	4.6

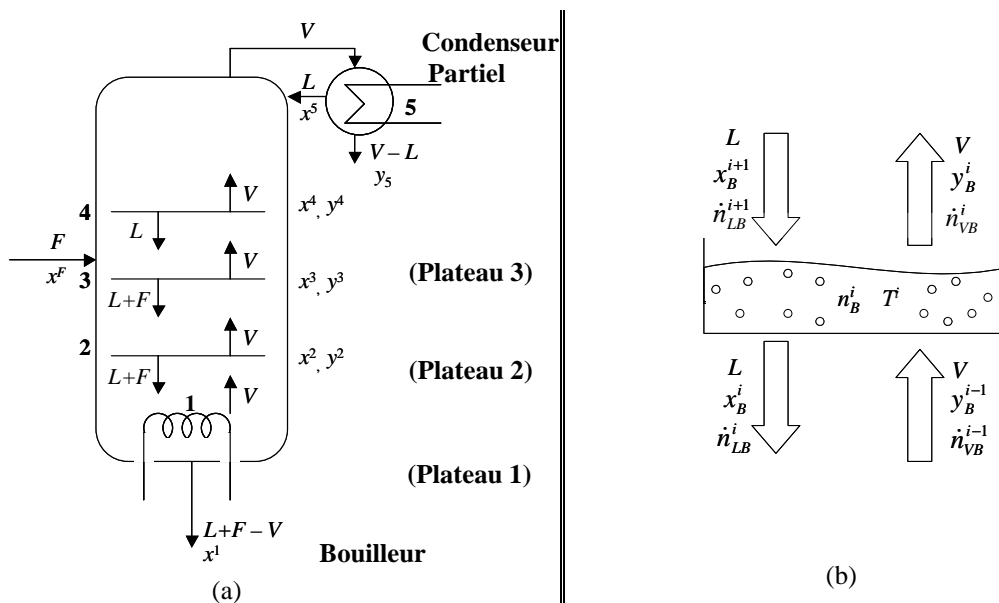


Figure 1. (a) la colonne de distillation binaire; (b) étage "i" de la colonne

2. 2 Le modèle pseudo bond graph

L'utilisation des modèles pseudo bond graphs pour la modélisation des systèmes de distillation multicomposants nous permet de représenter le système en fonction de ses bilans d'énergie et de matière. Il est donc possible, d'obtenir un modèle graphique plus simple.

Pichardo-Almarza [5] a montré que le modèle pseudo bond graph des systèmes de distillation multicomposants peut être représenté par 3 sous-systèmes: un hydraulique, un thermique et un chimique. Chaque sous-système est divisé en deux parties, une pour la phase liquide et l'autre pour la phase vapeur.

Nous allons considérer une dernière hypothèse pour simplifier encore un peu plus le modèle. Il s'agit de considérer les flux molaires totaux (F, L, V) constants. Dans ce cas, seul le domaine chimique peut être utilisé pour calculer les changements des compositions matérielles. Cependant, ce sous-système n'est pas suffisant pour déterminer les compositions, car l'équilibre entre la phase liquide et la phase vapeur doit être vérifiée et le calcul de la température¹ est requis à chaque étage.

¹ En régime permanent, pour modéliser un système de distillation multicomposant, le calcul d'une température implicite est nécessaire. Autrement dit, il n'y existe pas d'équation explicite pour calculer cette température. Cependant, en utilisant une méthode itérative dans chaque étage, il est possible de trouver la valeur de la température qui correspond au fait que la somme des fractions molaires de la vapeur soit égale à 1. Ce calcul est aussi nécessaire dans le cas de la modélisation dynamique des systèmes multicomposants (voir [8]).

Ici, à cause des hypothèses mentionnées précédemment, nous introduisons une nouvelle zone, que nous appellerons la **zone d'équilibre**. Cette zone, introduite pour vérifier l'équilibre dans chaque étage, est incluse dans le sous-système chimique pour être utilisée dans le calcul implicite de la température, suivant les relations montrées dans le diagramme de la Figure 2.

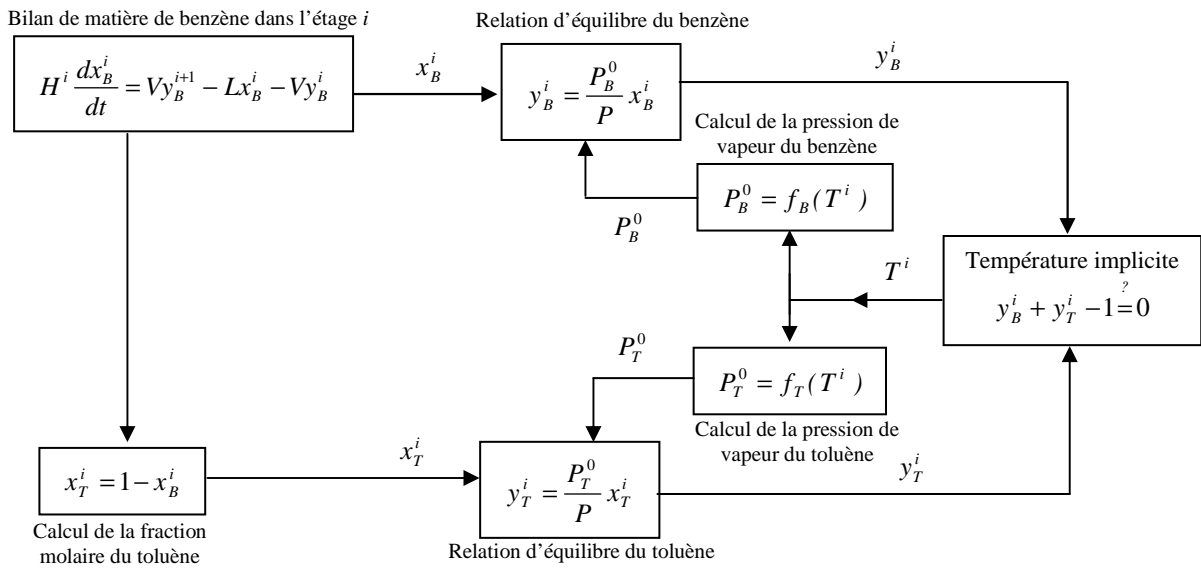


Figure 2. Bloc diagramme pour le calcul des variables du système dans chaque étage

La Figure 3 montre le modèle pseudo bond graph d'un étage générique de la colonne. Le modèle montre la zone d'équilibre avec le sous-système chimique. La partie non linéaire de chaque étage représentée par un élément R (R_3) est liée causalement à un R multiports (R_2) (ce qui implique un calcul implicite). Le calcul implicite associé à ces éléments est celui de la température, requise pour chaque étage de la colonne. L'utilisation des pseudo bond graphs nous permet de représenter ce calcul implicite d'une manière graphique ; les relations d'équilibre sont couplées au bilan molaire total de la phase vapeur à température constante (représentée par la jonction 0). De cette manière, l'effort supplémentaire d'implémentation de ce calcul implicite dans l'ordinateur n'est pas nécessaire. En utilisant un logiciel orienté bond graph tel que 20-sim [2], l'utilisateur a juste besoin d'introduire le modèle bond graph avec les équations constitutives spécifiques pour chaque élément, et le simulateur résoudra les équations implicites.

Les Tables 4 et 5 définissent respectivement les variables du modèle pseudo bond graph de la Figure 3 et les équations correspondantes aux éléments bond graph.

Table 4. Définition des variables pour le modèle pseudo bond graph de la colonne de distillation

	Effort	Flux
Domaine Chimique	Fraction Molaire [mol/mol]	Flux Molaire [mol/h]
Zone d'équilibre	Température [K]	Flux Molaire [mol/h]

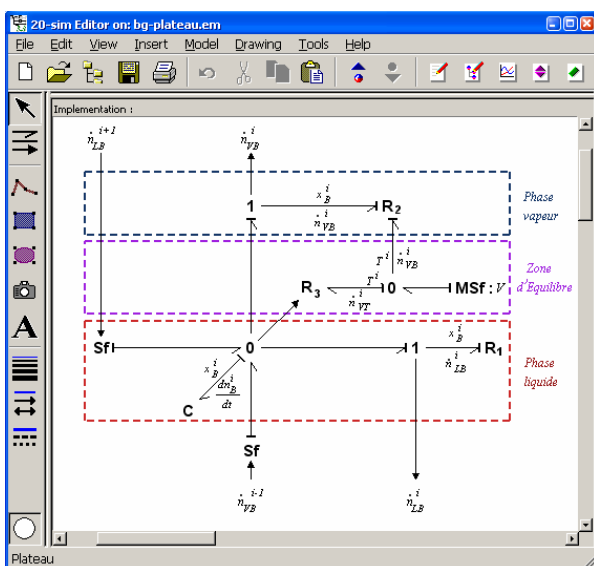


Figure 3. Modèle pseudo bond graph d'un étage générique de la colonne de distillation binaire.

Table 5. Equations des éléments du modèle pseudo bond graph

	Élément	Equation
Domaine Chimique	Élément 0	$\frac{dn_B^i}{dt} = \dot{n}_{L,B}^{i+1} + \dot{n}_{V,B}^{i-1} - \dot{n}_{L,B}^i - \dot{n}_{V,B}^i$
	Élément C ₁	$x_B^i = \frac{1}{H^i} \int \left(\frac{dn_B^i}{dt} \right) dt$
	Élément R ₁	$\dot{n}_{L,B}^i = Lx_B^i$
	Champ R ₂	$\dot{n}_{V,B}^i = Vy_B^i = V \left(\frac{P_B^0(T^i)}{P^i} \right) x_B^i$
Zone d'équilibre	Élément 0	$\dot{n}_{V,T}^i = Vy_T^i = V - \dot{n}_{V,B}^i = V - Vy_B^i$
	Élément R ₃	$T^i = \frac{-A_T}{\log_{10} \left(\frac{\dot{n}_{V,T}^i P^i}{V(1-x_B^i)} \right) - B_T} - 459.69$
	Champ R ₂	$\dot{n}_{V,B}^i = V \left(\frac{P_B^0(T^i)}{P^i} \right) x_B^i$

Enfin, le modèle pseudo bond graph de la colonne est obtenu en connectant les sous-modèles des 5 étages (les 3 plateaux, le condenseur et le bouilleur) (Figure 5a). Dans le modèle du plateau d'alimentation (Plateau 2), une source de flux doit être ajoutée au modèle pseudo bond graph de la Figure 3 afin de représenter le flux d'alimentation molaire (Fx_B^F). Dans le modèle du bouilleur (respectivement du condenseur partiel), la source de flux qui représentent le flux molaire en provenance du plateau 1 (respectivement du plateau 3), doit être supprimée. Pour cet exemple, nous considérerons que seule la fraction molaire de benzène dans le bouilleur peut être mesurée.

$$Y = x_B^1 = \frac{1}{H^1} X_1$$

Les variables d'état (X) sont celles associées aux éléments dynamiques en causalité intégrale (éléments C).

$$X = [X_1 X_2 X_3 X_4 X_5]^T = [n_B^1 \quad n_B^2 \quad n_B^3 \quad n_B^4 \quad n_B^5]^T = [H^1 x_B^1 \quad H^2 x_B^2 \quad H^3 x_B^3 \quad H^4 x_B^4 \quad H^5 x_B^5]^T$$

Finalement, nous considérerons que la composition du benzène dans le liquide d'entrée est connue (x_B^F) et nous considérons comme entrées de commande, les flux molaires associés aux sources de flux. Le vecteur de commande est, donc:

$$u = [F \quad V \quad (V-L)]^T$$

3 ESTIMATION D'ETAT : L'OBSERVATEUR A GRAND GAIN

Dans cette partie nous proposons de construire un observateur à grand gain pour la colonne de distillation binaire (benzène – toluène). La procédure décrite dans [6] est appliquée, ce que nous permet d'éviter des transformations non linéaires sur le modèle. L'implantation du modèle et l'observateur dans 20-sim est montrée dans la Figure 4.

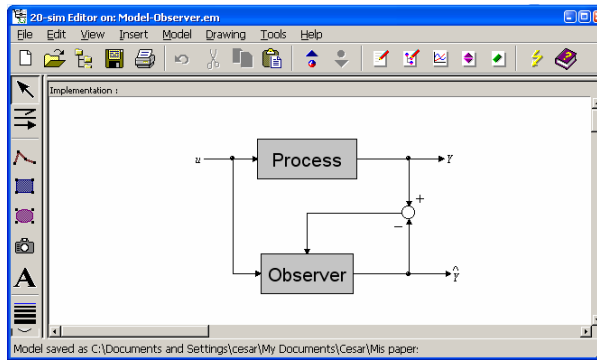


Figure 4. Implantation du modèle de la colonne et l'observateur dans 20-sim.

3.1 Conditions pour la construction de l'observateur

Pour la construction de ce type d'observateur nous devons vérifier les conditions suivantes (une condition associée à la partie non linéaire et une autre associée à la partie linéaire du modèle) [6]:

C.1 Le calcul des compositions de vapeur (y_B) est-il une fonction Lipschitzienne²?

Deza [4] a montré que le calcul des compositions de vapeur (y_B) dans chaque étape de la colonne est une fonction Lipschitzienne par rapport à x quand une distillation non azéotropique est considérée. Même si cette non linéarité du modèle n'est pas globale (y_B est définie dans l'intervalle $[0, 1]$), [4] a montré que la fonction y_B peut être étendue à \mathfrak{R}^n pour que cette hypothèse soit globalement valable.

C.2 La partie linéaire du modèle est-il structurellement observable?

L'observabilité structurelle de la partie linéaire du modèle peut être vérifiée directement sur le modèle pseudo bond graph, en utilisant les techniques proposées par [7]. Les Figures 6a et 6b montrent le modèle linéaire avec causalité intégrale et causalité dérivé respectivement. L'analyse de ces figures permet de conclure que le modèle est structurellement observable par le détecteur De.

Remarque 1. L'observabilité structurelle des modèles bond graph linéaires peut être vérifiée automatiquement avec le logiciel ARCHER [1].

Remarque 2. Il semble clair qu'il existe des restrictions physiques par rapport aux flux (F , L , V) de la colonne de distillation. Tout comme Deza [4], nous utilisons les hypothèses suivantes:

$$\begin{aligned} F &> V - L \\ L &> 0 \\ V - L &> 0 \end{aligned}$$

Cela signifie que les flux dans la colonne sont toujours positifs, ce qui garantit l'observabilité du modèle, car le modèle est inobservable si $L = 0$, $V = 0$, $F + L = 0$ et $V - L = 0$ (elles sont des entrées singulières).

3.2 Construction du modèle bond graph de l'observateur.

En utilisant les changements indiqués par [6] sur le modèle initial du système, nous obtenons le modèle pseudo bond graph de l'observateur à grand gain (Figure 5b). Le calcul des gains de l'observateur est résumé dans [6].

² $g(x, u)$ est **Lipschitzienne**, s'il existe une constante M (indépendante de u) tel que : $\|g(x_1, u) - g(x_2, u)\| \leq M \|x_1 - x_2\|$ pour tout (x_1, x_2) et tout u .

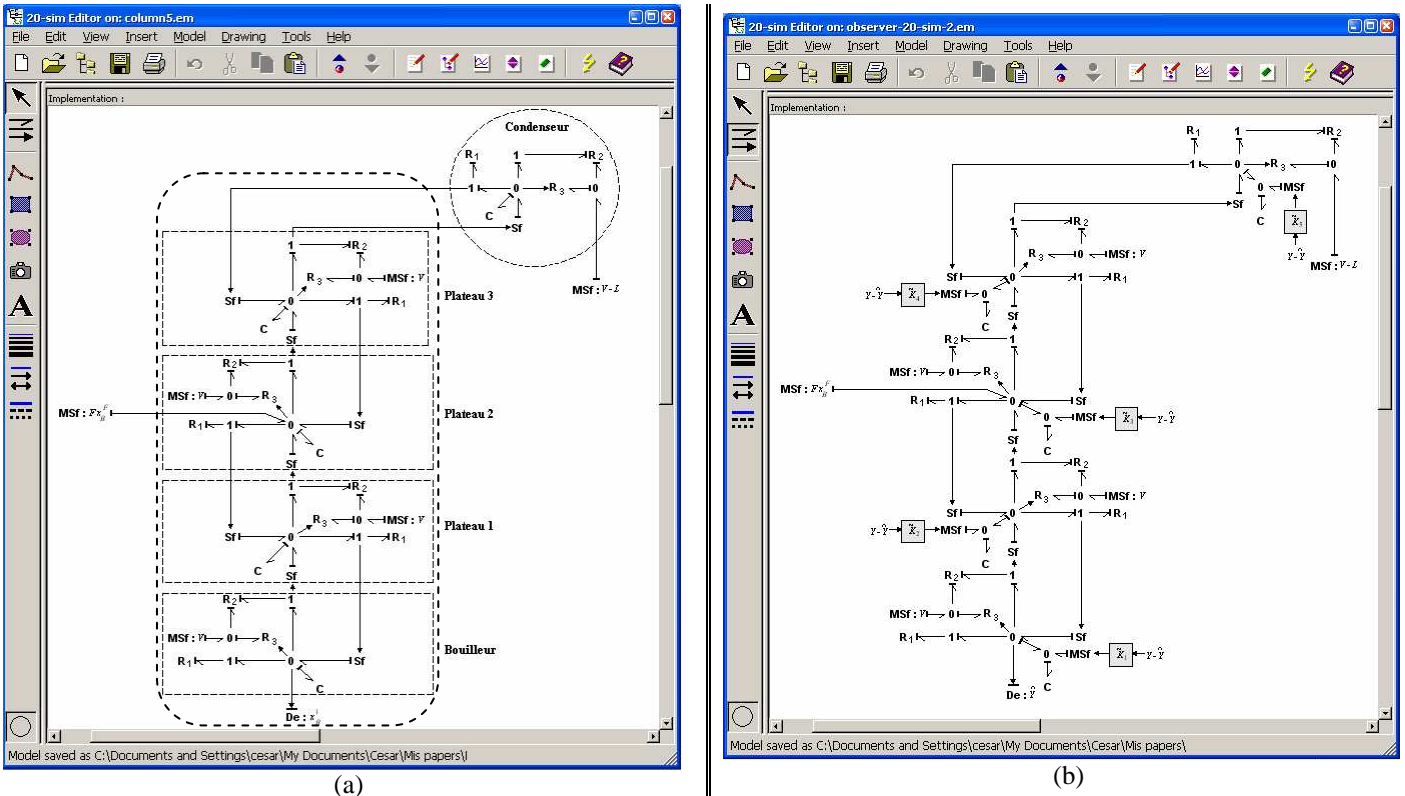


Figure 5. (a) Modèle pseudo bond graph de la colonne de distillation binaire ; (b) Modèle pseudo bond graph de l'observateur à grand gain.

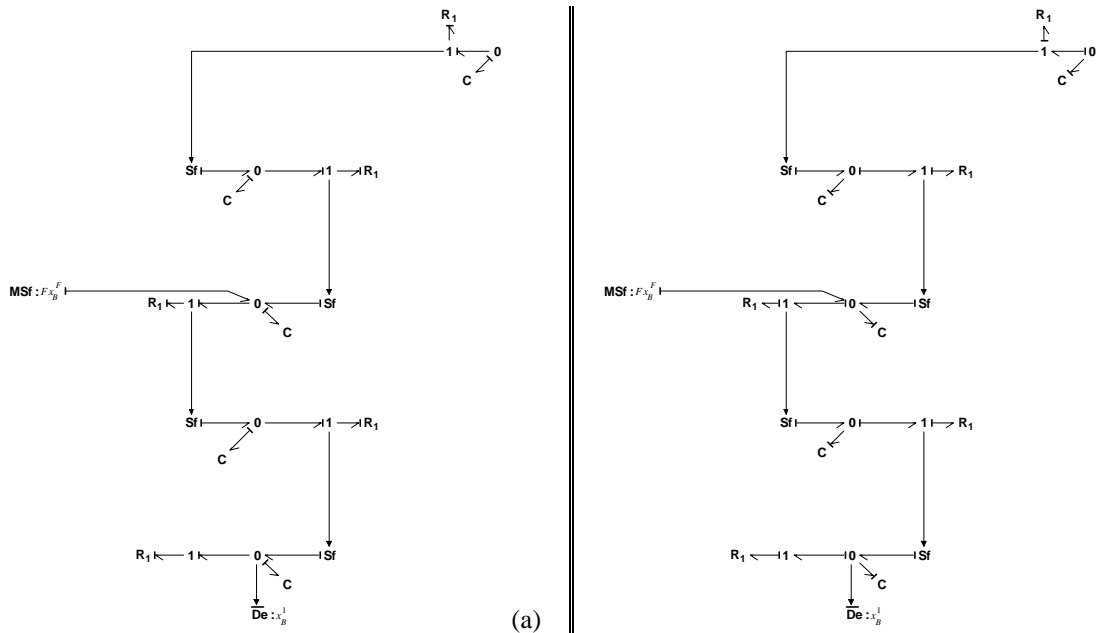


Figure 6. (a) Modèle pseudo bond graph de la partie linéaire de la colonne de distillation en causalité intégrale (BGI) (b) Idem en causalité dérivée (BGD). Tous les éléments C en causalité intégrale sont causalement connectés au capteur De dans le bond graph en causalité intégrale préférentielle (Figure 6a). La Figure 6b montre que tous les éléments C acceptent la causalité dérivée si une causalité dérivée préférentielle est assignée au modèle bond graph (BGD). Puisque les deux conditions sont remplies, la partie linéaire du modèle est structurellement observable par le capteur De [7].

4 LES SIMULATIONS

Dans cette section nous évaluons le comportement dynamique du modèle de la colonne de distillation et la performance de l'observateur à grand gain. Pour les simulations le logiciel 20-sim [2] a été utilisé.

Les Figures 7a et 7b montrent des résultats de simulation très similaires de ceux reportée par [8]. La Figure 7c montre que les erreurs de l'estimation convergent vers zéro quand l'observateur à grand gain est utilisé pour estimer les variables d'état. Cela a pour conséquence pour notre exemple la possibilité d'estimer la température dans chaque étage. Même si l'observateur n'a pas été construit pour estimer la température (la température est une variable auxiliaire, mais n'est pas une variable d'état du modèle), l'observateur peut s'avérer utile pour l'estimation de cette variable. La Figure 7d regroupe les résultats de l'estimation de la température.

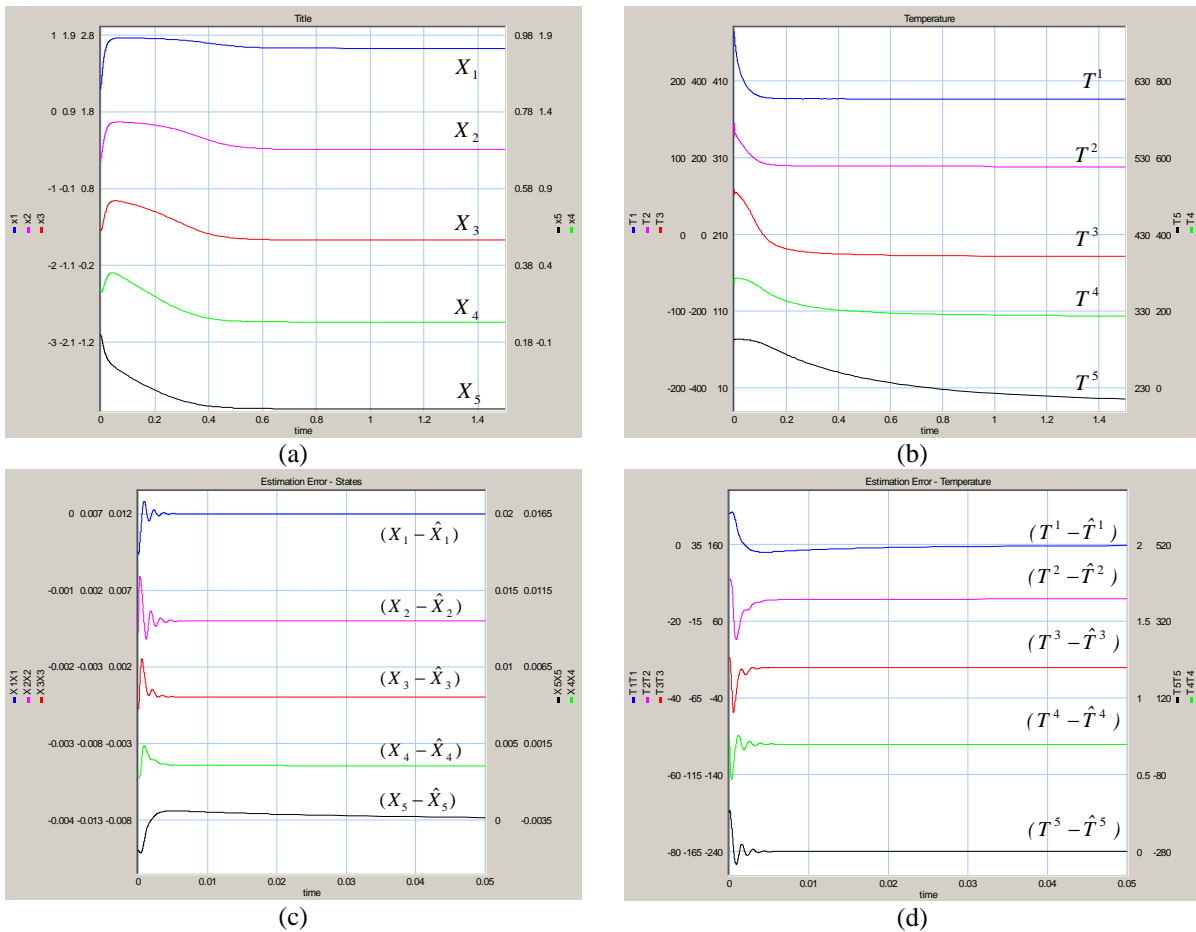


Figure 7. (a) Réponse dynamique des compositions de benzène (X_b^i); (b) Réponse dynamique des températures (T);
(c) Erreurs d'estimation ($X - \hat{X}$) de l'observateur; (d) Erreurs d'estimation ($T - \hat{T}$) de l'observateur

5 CONCLUSIONS

Dans ce travail nous avons montré comment utiliser une approche bond graph pour la modélisation, la simulation et l'estimation d'état de colonnes de distillation. Nous avons construit un observateur à grand gain à partir du modèle non linéaire d'une colonne de distillation. Nous avons trouvé des avantages pour la construction et l'implantation de l'observateur grâce à l'interface graphique (très amicale) du logiciel 20-sim.

La méthode d'estimation d'état proposée présente un avantage certain quand le modèle du système est sous forme bond graph, puisque l'observateur ainsi construit possède une structure graphique similaire. Le modèle bond graph de l'observateur obtenu permet de calculer graphiquement les gains à partir des manipulations causales dans les modèles bond graph [6]. Cependant, quand le nombre de variables d'état du système est relativement important, le nombre de cycles causaux dans le modèle bond graph de l'observateur est assez élevé, donc le calcul des gains de ces derniers peut s'avérer trop long. Nous avons essayé de formuler les méthodes de construction des observateurs avec un formalisme général (autant que possible) afin qu'elles puissent être programmées dans un logiciel bond graph (i.e., 20-sim) et que le calcul des gains soit automatisable.

REFERENCES

1. **Azmani, A. et G. Dauphin-Tanguy**, "Archer: a program for computer aided modelling and analysis". *Bond graphs for Engineers*, pp. 263-277. IMACS, North Holland. (1992).
2. **Controllab Products B.V.**, 20-sim for Microsoft Windows version 3.3. <http://www.20sim.com>
3. **Dauphin-Tanguy G.**, "Les Bond Graphs", Traité IC2, Hermes Sciences, (2000).
4. **Deza, F.**, Contribution à la synthèse d'observateurs exponentiels. Application à un procédé industriel : les colonnes à distiller, Thèse de doctorat, INSA de Rouen. (1991)
5. **Pichardo-Almarza, C.**, "Metodología de Pseudo bond graphs para el Modelaje y Simulación de Procesos Químicos". MSc. Thesis, Universidad Simón Bolívar, Caracas - Venezuela (2001).
6. **Pichardo-Almarza, C., A. Rahmani, G. Dauphin-Tanguy et M. Delgado**, "High gain observers for non linear systems modelled by bond graphs". *Journal of Systems and Control Engineering*. Vol. 19, 477-498. (2005).
7. **Sueur, C. et G. Dauphin-Tanguy**, "Bond Graph Approach for Structural Analysis of MIMO Linear Systems". *Journal of the Franklin Institute*. Vol. 328, N° 1, pp. 55-70. (1991).
8. **Ramirez, W.**, "Computational Methods for Process Simulation". Butterworth-Heinemann, 2nd edition. (1997).