



**HAL**  
open science

## Mélanger des gaz raides pour créer de nouvelles lois d'état

Lucie Quibel, Philippe Helluy, Marie Chion, Philippe Ricka

► **To cite this version:**

Lucie Quibel, Philippe Helluy, Marie Chion, Philippe Ricka. Mélanger des gaz raides pour créer de nouvelles lois d'état. [Rapport de recherche] IRMA, Université de Strasbourg; EDF R&D. 2019. hal-02114552

**HAL Id: hal-02114552**

**<https://hal.science/hal-02114552v1>**

Submitted on 29 Apr 2019

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Rapport SEME, EDF R&D : Mélanger des gaz raides pour créer de nouvelles lois d'état

Lucie Quibel, Philippe Helluy, Marie Chion, Philippe Ricka

12-16 Novembre 2018

**Abstract :** EDF needs reliable numerical simulations of two-phase flow phenomena for safety issue. Some hypothetical accidental scenarios involve rapid transients with important mass transfer. A model able to account for thermodynamical disequilibria may be needed. Currently, to describe each phase, the codes use either simple analytical equations of state like the stiffened gas equation of state, realistic only around a reference point ; or look-up tables of complex equations of state, CPU-time consuming. During the "Semaine d'Etudes Maths Entreprise" (SEME), we wondered if the water steam could be approached by a stiffened gas or a mix of two stiffened gases. We first conducted an analysis of thermodynamics equations in order to formulate a state equation in the  $(p, T)$  plane, before building a parameters optimization algorithm to approximate the IAPWS-97 formulation, the reference equation of state for water built from a set of measurements.

KEYWORDS : modeling, thermodynamics, optimization, stiffened gas.

**Résumé :** EDF réalise des études numériques afin de consolider la démonstration de sûreté du parc nucléaire. Afin de simuler des scénarii accidentels pouvant hypothétiquement affecter le réacteur, les codes de calculs doivent être en mesure de représenter des situations physiques complexes, fortement instationnaires avec une thermodynamique potentiellement hors-équilibre. A l'heure actuelle, les codes utilisent soit des lois d'états physiques assez simples, de type gaz raides, réalistes uniquement près d'un point de fonctionnement ; soit des tabulations, coûteuses en temps de calcul. L'objectif de ce travail est de proposer des lois d'états réalistes pour l'eau, mais qui restent relativement simples analytiquement. Pendant la Semaine d'Etudes Maths Entreprise" (SEME), nous nous sommes intéressés à la modélisation de la vapeur d'eau. Notre idée de départ est la suivante : la vapeur d'eau peut-elle être modélisée par un mélange de deux gaz raides ? Nous avons d'abord mené une analyse des équations de la thermodynamique de façon à formuler une équation d'état dans le plan  $(p, T)$ . Nous avons ensuite implémenté un algorithme pour optimiser les paramètres de ces équations afin de minimiser l'écart avec la formulation IAPWS-97, qui sert ici de loi d'état de référence pour l'eau.

MOTS-CLEFS : modélisation, thermodynamique, optimisation, gaz raide.

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Loi d'état d'un mélange miscible de deux gaz raides</b>	<b>4</b>
1.1	Notion de plan thermodynamique . . . . .	4
1.2	Equation d'état d'un gaz raide . . . . .	4
1.3	Mélange miscible de deux gaz raides . . . . .	5
1.4	Vitesse du son . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Loi de référence industrielle : IAPWS-IF97</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Méthode d'optimisation du mélange de gaz raides</b>	<b>6</b>
<b>4</b>	<b>Implémentation pratique</b>	<b>7</b>
<b>5</b>	<b>Résultats</b>	<b>8</b>
5.1	Quelques commentaires sur la méthode utilisée . . . . .	8
5.2	Cas Vapeur, 40b-210b, 700K-1000K . . . . .	9

## Introduction

Afin de consolider la démonstration de sûreté des installations nucléaires, EDF réalise des simulations numériques de scénarii accidentels pouvant hypothétiquement affecter le réacteur. Un exemple classique est l'accident par perte de réfrigérant primaire, dans lequel une brèche du circuit primaire est envisagée : de l'eau à  $155\text{bars}$  et  $300^\circ\text{C}$  se retrouverait alors au contact d'air à  $1\text{bar}$ . L'importante différence de pression entraînerait alors une vaporisation brutale de l'eau, ainsi que la propagation d'une onde de détente faisant rapidement chuter la pression dans le primaire. Pour connaître le plus précisément possible les niveaux de pression au cours d'un tel scénario, il est nécessaire de disposer d'un modèle compressible, capable de simuler des transitions de phase hors équilibre thermodynamique.

La R&D d'EDF développe depuis quelques années un code basé sur le modèle proposé par Helluy-Barberon [1] qui capte les comportements hors équilibre [4]. Un des axes clés d'amélioration du modèle porte sur les lois d'états utilisées pour décrire l'eau liquide et l'eau vapeur dans le code. Pour l'instant, deux choix sont possibles :

- l'eau liquide et l'eau vapeur sont décrites par des lois d'état très simples de type "gaz raide" (Stiffened Gas); ces lois d'état sont analytiques, très simples à utiliser, mais ne sont précises qu'autour d'un point de référence.
- l'eau liquide et l'eau vapeur sont décrites via des lois industrielles de référence, les lois IAPWS-IF97 [7], plus réalistes mais très coûteuses en mémoire et en temps CPU.

D'un point de vue pratique, il serait souhaitable de disposer de lois d'états "intermédiaires", qui seraient à la fois plus réalistes que les lois d'état de gaz raide, mais plus simples et moins coûteuses que les lois IAPWS. Dans le cadre de la Semaine d'Etudes Maths Entreprise (SEME) qui a eu lieu à Strasbourg du 12 au 16 novembre 2018, nous nous sommes proposés de travailler sur l'idée suivante : un mélange miscible de gaz raides peut-il être considéré pour décrire l'eau de façon plus réaliste qu'un seul gaz raide ? Ce sujet a été proposé dans le cadre de la thèse de Lucie Quibel, dirigée par Philippe Helluy et encadrée par Olivier Hurisse.

# 1 Loi d'état d'un mélange miscible de deux gaz raides

## 1.1 Notion de plan thermodynamique

Une loi d'état est la donnée d'une fonction dans un plan thermodynamique. Un plan thermodynamique est constitué par deux grandeurs intensives, c'est-à-dire qui ne sont pas proportionnelles à la quantité de matière (par exemple, la température, mais aussi la masse volumique, l'énergie massique etc).

On est amenés en pratique à travailler dans plusieurs plans thermodynamiques : en effet, le plan naturel pour résoudre le système d'équations décrivant le mélange diphasique est le plan  $(\tau, e)$ , où  $\tau$  est le volume spécifique ( $m^3 kg^{-1}$ ) et  $e$  est l'énergie interne spécifique ( $J kg^{-1}$ ), alors que le plan le plus intuitif pour décrire les changements d'état est le plan  $(p, T)$ , avec  $p$  la pression ( $Pa$ ) et  $T$  la température ( $K$ ).

## 1.2 Equation d'état d'un gaz raide

Le gaz raide est une extension du gaz parfait, avec des paramètres supplémentaires permettant de l'adapter à un liquide. La loi d'état de gaz raide est classiquement la donnée de l'entropie dans le plan  $(\tau, e)$ . Celle-ci s'exprime ainsi :

$$s(\tau, e) = C \ln((e - Q - \pi\tau)\tau^{\gamma-1}) + s_0 \quad (1.1)$$

Les paramètres intervenant dans la loi d'état sont les suivants :

- $C$  ( $JK^{-1}kg^{-1}$ ) est la chaleur massique à volume constant,
- $\gamma$  est l'exposant polytropique,
- $-\pi$  ( $Pa$ ) est la pression minimale,
- $Q$  ( $Jkg^{-1}$ ) est une valeur de référence d'enthalpie,
- $s_0$  ( $JK^{-1}kg^{-1}$ ) est l'entropie de référence.

Ces paramètres sont calés à l'aide de données expérimentales mesurées en un point de référence [2]. Par conséquent, l'équation est exacte au point de référence, mais sa précision diminue au fur et à mesure qu'on s'en écarte. Afin d'évaluer la qualité d'une loi d'état, il est plus simple de travailler

dans le plan  $(p, T)$  : en effet, les visualisations y sont beaucoup plus faciles et intuitives. Changer de plan thermodynamique implique de changer de fonction pour la loi d'état. L'équivalent de l'entropie  $s$  dans le plan  $(\tau, e)$  est la donnée du potentiel chimique  $\mu$  dans le plan  $(p, T)$ .

On part de la relation de Gibbs :

$$Tds = de + pd\tau$$

d'où

$$ds = \frac{1}{T}de + \frac{p}{T}d\tau$$

et en particulier :

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial s}{\partial e} \right|_{\tau} \quad ; \quad \frac{p}{T} = \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_e$$

De plus, à partir de la formule de l'entropie pour un gaz raide, on a :

$$\left. \frac{\partial s}{\partial e} \right|_{\tau} = \frac{C}{e - Q - \pi\tau} \quad ; \quad \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_e = \frac{(\gamma - 1)C}{\tau} - \frac{\pi C}{e - Q - \pi\tau}$$

d'où finalement :

$$CT = e - Q - \pi\tau \quad ; \quad p + \pi = (\gamma - 1)\rho CT.$$

La définition du potentiel chimique  $\mu$  est la suivante :

$$\mu = e - Ts + p\tau.$$

A partir des relations précédentes, on peut finalement exprimer le potentiel chimique  $\mu$  d'un gaz raide uniquement en fonction de  $(p, T)$  et des coefficients :

$$\mu(p, T) = \gamma CT + Q - T(\gamma C \ln(T) - (\gamma - 1)C \ln(p + \pi) + K)$$

où l'on a introduit  $K$  ( $JK^{-1}kg^{-1}$ ) qui regroupe des termes constants.

Cette équation d'état est une équation complète : cela signifie que l'on peut retrouver toutes les grandeurs thermodynamiques à partir des dérivées partielles de  $\mu$  par rapport à  $p$  et à  $T$ .

— **À partir des dérivées premières** de  $\mu$ , on calcule l'entropie spécifique  $s$  ( $JK^{-1}kg^{-1}$ ) et le volume spécifique  $\tau$  ( $m^3kg^{-1}$ ) :

$$\left. \frac{\partial \mu}{\partial T} \right|_P = -s \quad ; \quad \left. \frac{\partial \mu}{\partial p} \right|_T = \tau.$$

— **À partir des dérivées secondes** de  $\mu$ , on calcule la capacité thermique à pression constante  $C_p$  ( $JK^{-1}kg^{-1}$ ), le coefficient de dilatation thermique isobare  $\alpha_p$  ( $K^{-1}$ ) et le coefficient de compressibilité isotherme  $\chi_T$  ( $Pa^{-1}$ ) :

$$-T \left. \frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2} \right|_P = C_p \quad ; \quad \frac{1}{\tau} \left. \frac{\partial^2 \mu}{\partial p \partial T} \right|_{T,p} = \alpha_p \quad ; \quad -\frac{1}{\tau} \left. \frac{\partial^2 \mu}{\partial p^2} \right|_T = \chi_T.$$

### 1.3 Mélange miscible de deux gaz raides

On considère un mélange de deux gaz miscibles. Dans un mélange miscible, on suppose que les deux gaz raides sont à l'**équilibre thermodynamique**. On peut montrer que cela se traduit par les égalités suivantes [3] :

$$\begin{cases} p = p_1 + p_2 \\ T_1 = T_2 \\ \mu_1 = \mu_2 \end{cases} \quad (1)$$

On souhaite trouver l'équation d'état du mélange à une pression de mélange  $p$  et une température de mélange  $T$  données. On peut réexprimer le système (1) ainsi : il faut trouver la pression  $p_1$  d'équilibre entre les deux gaz, telle que :

$$f(p_1) = \mu_1(p_1, T) - \mu_2(p - p_1, T) = 0 \quad (2)$$

où :

$$f(p_1) = (\gamma_1 C_1 - \gamma_2 C_2)T + Q_1 - Q_2 - T[(\gamma_1 C_1 - \gamma_2 C_2) \ln(T) - (\gamma_1 - 1)C_1 \ln(p_1 + \pi_1) + (\gamma_2 - 1)C_2 \ln(p - p_1 + \pi_2) + K_1 - K_2]$$

Les inégalités suivantes doivent être vérifiées :

$$\begin{cases} p_1 + \pi_1 > 0 \\ p - p_1 + \pi_2 > 0 \\ -\pi_1 < p_1 < p + \pi_2 \end{cases}$$

En examinant notre fonction  $f$ , et en particulier son comportement lorsque  $p_1 \rightarrow -\pi_1$  et  $p_1 \rightarrow p + \pi_2$ , on remarque qu'elle est monotone, change de signe, et par conséquent admet un zéro sur cet intervalle. Ainsi, l'équation 2 possède une unique solution : l'équation d'état de mélange miscible de deux gaz raides est bien définie. Finalement, l'équation d'état de mélange deux gaz raides dans le plan  $(p, T)$

est la suivante :

$$\mu^{MIX}(p, T) = \mu_1(p_1, T) = \mu_2(p - p_1, T)$$

avec  $p_1$  la solution de l'équation 2.

## 1.4 Vitesse du son

La vitesse du son s'exprime aussi à partir des dérivées secondes de  $\mu$ . En effet par définition :

$$c^2 = \left( \frac{\partial p}{\partial \tau} \right) \Big|_s^{-1} = - \frac{\tau^2}{\left( \frac{\partial \tau}{\partial p} \right) \Big|_s}.$$

Or

$$\left( \frac{\partial \tau}{\partial p} \right) \Big|_s = \frac{\partial}{\partial p} \left( \tau(p, T(p, s)) \right) \Big|_s = \left( \frac{\partial \tau}{\partial p} \right) \Big|_T + \left( \frac{\partial \tau}{\partial T} \right) \Big|_p \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right) \Big|_s$$

et

$$ds = \left( \frac{\partial s}{\partial p} \right) \Big|_T dp + \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right) \Big|_p dT$$

donne

$$\left( \frac{\partial T}{\partial p} \right) \Big|_s = - \frac{\left( \frac{\partial s}{\partial p} \right) \Big|_T}{\left( \frac{\partial s}{\partial T} \right) \Big|_p}.$$

D'où :

$$c^2 = -\tau^2 / \left( \left( \frac{\partial \tau}{\partial p} \right) \Big|_T - \left( \frac{\partial \tau}{\partial T} \right) \Big|_p \frac{\left( \frac{\partial s}{\partial p} \right) \Big|_T}{\left( \frac{\partial s}{\partial T} \right) \Big|_p} \right),$$

qui se réécrit en utilisant  $\frac{\partial \mu}{\partial T} \Big|_P = -s$  ;  $\frac{\partial \mu}{\partial p} \Big|_T = \tau$  et  $-T \frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2} \Big|_P = C_p$  ;  $\frac{1}{\tau} \frac{\partial^2 \mu}{\partial p \partial T} \Big|_{T,p} =$

$\alpha_p$  ;  $-\frac{1}{\tau} \frac{\partial^2 \mu}{\partial p^2} \Big|_T = \chi_T$  :

$$c^2 = \left( \frac{\chi_T}{\tau} - \frac{T \alpha_p^2}{C_p} \right)^{-1}. \quad (3)$$

## 2 Loi de référence industrielle : IAPWS-IF97

La loi IAPWS-IF97 [7] est la loi d'état industrielle de référence pour décrire l'eau. Il s'agit d'une loi analytique, obtenue à partir d'une interpolation d'un très grand nombre de données expérimentales. Dans notre travail, nous avons utilisé IAPWS pour nous constituer un set de données dans le plan  $(p, T)$  :  $\mu(p, T)$ ,  $\tau(p, T)$ ,  $s(p, T)$ ,  $C_p(p, T)$ ,  $\alpha_p(p, T)$  et  $\chi_T(p, T)$ . Nous avons pris ces données comme des références, que notre loi d'état construite à partir de deux gaz raides doit reproduire le plus fidèlement possible.

## 3 Méthode d'optimisation du mélange de gaz raides

Étant donnée une carte de valeurs expérimentales  $\mu^{IAPWS}$  dans le plan  $(p, T)$ , notre objectif est de déterminer les valeurs des paramètres de deux gaz raides miscibles pour lesquelles la loi du mélange  $\mu^{MIX}$  est en adéquation avec les données calculées avec IAPWS. Notre travail ayant une visée prédictive, nous entendons par "adéquation" la minimisation de l'erreur quadratique moyenne normalisée :  $E(\gamma_1, C_1, Q_1, \pi_1, K_1, \gamma_2, C_2, Q_2, \pi_2, K_2) = E(\text{param}_1, \text{param}_2)$  avec

$$\begin{aligned}
E(\text{param}_1, \text{param}_2) = &= \frac{\|\mu^{IAPWS} - \mu^{MIX}\|_2}{\|\mu^{IAPWS}\|_2} \\
&+ \frac{\|s^{IAPWS} - s^{MIX}\|_2}{\|s^{IAPWS}\|_2} + \frac{\|\tau^{IAPWS} - \tau^{MIX}\|_2}{\|\tau^{IAPWS}\|_2} \\
&+ \frac{\|C_p^{IAPWS} - C_p^{MIX}\|_2}{\|C_p^{IAPWS}\|_2} + \frac{\|\alpha_p^{IAPWS} - \alpha_p^{MIX}\|_2}{\|\alpha_p^{IAPWS}\|_2} + \frac{\|\chi_T^{IAPWS} - \chi_T^{MIX}\|_2}{\|\chi_T^{IAPWS}\|_2}.
\end{aligned}$$

La fonction coût comprend également les écarts de capacité thermique isobare  $C_p$ , de dilatation isobare  $\alpha_p$ , de compressibilité isotherme  $\chi_T$ , d'entropie  $s$  et de volume spécifique  $\tau$  car ces grandeurs correspondent aux dérivées premières et secondes  $\mu$  par rapport à  $p$  et  $T$ . En effet, caler également les dérivées est important pour que notre loi d'état puisse être utilisée en pratique : si les dérivées sont trop irréalistes, il est probable que notre loi d'état ne nous permettent pas de changer de plan thermodynamique correctement. On rappelle que :

$$\mu^{MIX}(p, T) = \mu_1(p_1, T) = \mu_2(p - p_1, T)$$

où  $p_1$  est donné implicitement. Ainsi,  $p_1$  est donc une fonction de l'ensemble des paramètres de chacun des gaz impliqués et des variables, c'est à dire :

$$p_1 = p_1(p, T, \gamma_1, C_1, Q_1, \pi_1, K_1, \gamma_2, C_2, Q_2, \pi_2, K_2)$$

En pratique, la valeur de  $p_1$  pour un tel jeu de paramètres est déterminée grâce à la méthode de Newton appliquée au problème :

$$f(p_1) = \mu_1(p_1, T) - \mu_2(P - p_1, T) = 0$$

Le problème à deux gaz raides peut se formuler de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } \{\gamma_1, C_1, Q_1, \pi_1, K_1, \gamma_2, C_2, Q_2, \pi_2, K_2\} \\ \text{minimisant } E(\gamma_1, C_1, Q_1, \pi_1, K_1, \gamma_2, C_2, Q_2, \pi_2, K_2). \end{array} \right.$$

Pour chaque jeu de paramètres  $(\gamma_1, C_1, Q_1, \pi_1, K_1, \gamma_2, C_2, Q_2, \pi_2, K_2)$  on doit donc calculer les six grandeurs de mélange  $\Phi^{MIX}$  à l'aide de la pression  $p_1$  obtenue implicitement par résolution d'un algorithme de Newton.

## 4 Implémentation pratique

Nous avons implémenté la méthode d'optimisation des coefficients avec différents outils :

1. R : la résolution du calcul implicite de la pression  $p_1$  par une méthode de Newton a posé problème (manque de précision).
2. Python : un algorithme a été implémenté, avec une fonction de coût tenant compte seulement de l'écart entre les potentiels chimiques  $\mu$  pendant la SEME. L'algorithme converge trop lentement pour obtenir des résultats en pratique. La méthode exploitée est celle du gradient descendant, appliquée à la fonction d'erreur normalisée :

$$E(\gamma_1, C_1, Q_1, \pi_1, K_1, \gamma_2, C_2, Q_2, \pi_2, K_2) = \frac{\|\mu^{IAPWS} - \mu^{MIX}\|_2}{\|\mu^{IAPWS}\|_2}$$

Les grandes différences dans les ordres de grandeurs des différentes quantités impliquées ainsi que la sensibilité de  $\mu$  aux variations de ces quantités nous ont conduites à utiliser la bibliothèque python `mpmath` permettant d'augmenter arbitrairement la précision des calculs. Des simulations ont été réalisées avec 10, 15 et 50 chiffres significatifs. Dans le premier cas,

la précision n'était pas suffisante pour que l'algorithme converge. Dans les deux autres cas, l'erreur décroît visiblement, mais à une vitesse bien trop faible pour permettre de répondre à notre question en un temps raisonnable. Toutefois, plusieurs améliorations pourraient être réalisées, qui augmenteraient sensiblement la vitesse de calcul. En particulier, certains segments de l'algorithme se prêtent bien à la parallélisation.

3. C++ : deux stratégies ont été implémentées :
  - un algorithme de gradient a été implémenté, utilisant la bibliothèque "multiprecision" de boost (MPFR) [5]
  - un algorithme en double précision appelant la bibliothèque Optimlib [6].

En pratique, la précision arbitraire n'a finalement pas été utilisée : elle n'améliore pas les résultats obtenus en double précision, mais ralentit significativement le calcul. Parmi les algorithmes de la librairie Optimlib, les algorithmes de Nelder-Mead et de Particle Swarm Optimization sont suffisamment robustes pour permettre de diminuer significativement l'erreur. Néanmoins, nous ne sommes pas parvenus à faire diminuer l'erreur autant que souhaité. Notre critère d'arrêt est ici purement pragmatique : les paramètres d'optimisation sont les paramètres considérés comme optimisés si les algorithmes de Nelder-Mead ou de Particle Swarm Optimization n'en trouvent pas de meilleurs après 5000 itérations.

## 5 Résultats

Le but est de fitter un gaz raide ou un mélange de gaz raide sur des données IAPWS, sur des domaines plus ou moins étendus qui nous semblent plus ou moins simples à représenter par un gaz raide :

1. un domaine vapeur étendu (P variant de 40 bar à 210 bar, T variant de 700 K à 100 K) ;
2. un domaine vapeur restreint (P variant de 0.5 bar à 25 bar, T variant de 550 K à 1000K) ;
3. un domaine liquide "difficile" (P variant de 0.5 bar à 210 bar, T variant de 275 K à 350 K) ;
4. un domaine liquide "facile" (P variant de 0.8 bar à 210 bar, T variant de 350 K à 500 K) ;

Le travail n'est pas encore terminé et des résultats sont toujours en cours d'obtention. Après avoir fait quelques commentaires sur notre méthode (section 5.1), nous présentons quelques premiers résultats pour le cas 1 avec un domaine vapeur étendu (section 5.2).

### 5.1 Quelques commentaires sur la méthode utilisée

- Dans l'optimisation d'un seul gaz raide, nous connaissons un point de départ simple, obtenu grâce à la méthode empirique classiquement utilisée pour caler les paramètres d'un gaz raide (voir annexe). Pour le cas de mélange, le point de départ est choisi arbitrairement, ce qui demande très certainement à être amélioré.
- Le mélange miscible de deux fois le même gaz raide n'est pas le gaz raide lui-même (voir annexe). Par conséquent, même si l'intuition nous dit qu'on doit pouvoir faire mieux avec un mélange à 10 coefficients qu'avec un gaz raide à 5 paramètres, on n'est pas sûrs d'y parvenir en pratique.
- L'adimensionnement par rapport aux données calculées au point de référence, y-compris des paramètres de la loi d'état, ainsi que la normalisation des écarts par les normes de  $\mu^{IAPWS}$ ,  $s^{IAPWS}$ ,  $\tau^{IAPWS}$ ,  $C_p^{IAPWS}$ ,  $\alpha_p^{IAPWS}$  et  $\chi_T^{IAPWS}$  sont deux éléments clefs pour que l'optimisation agisse bien sur l'ensemble des coefficients. Dans nos premiers essais sans adimensionnement, le rôle de  $\gamma$  était prépondérant et rendait négligeable l'influence des autres paramètres.
- Nous cherchons encore dans les tests en cours à déterminer l'importance relative des écarts dans la fonctionnelle  $E$ . Faut-il vraiment optimiser les écarts sur les six grandeurs  $\mu$ ,  $s$ ,  $\tau$ ,  $C_p$ ,  $\alpha_p$ ,  $\chi_T$  ? Faut-il optimiser en priorité les grandeurs  $\tau$ ,  $C_p$ ,  $\alpha_p$ ,  $\chi_T$  ? En effet, elles nous semblent caractériser le fluide de manière plus fondamentale que  $\mu$  et  $s$ , dont les valeurs

ne sont données qu'à une valeur de référence près. Faut-il pondérer les écarts avec des coefficients à déterminer ? Ce sont des pistes ouvertes que nous essayons encore d'explorer.

## 5.2 Cas Vapeur, 40b-210b, 700K-1000K

Le domaine d'étude est montré sur la figure 1. C'est un domaine vapeur étendu, assez régulier

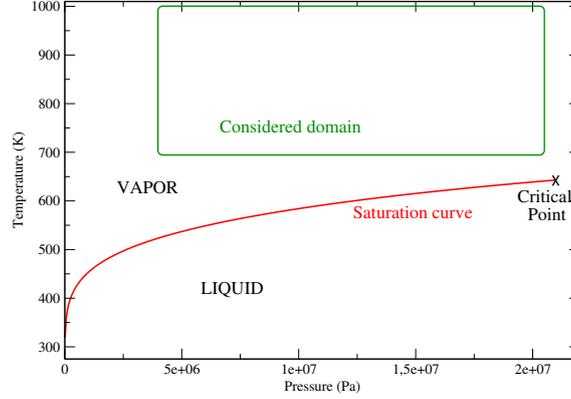


FIGURE 1: Plan pT et domaine d'étude pour le cas vapeur 40b-210b, 700K-1000K

donc classiquement plutôt bien représenté par une équation de gaz raide. La fonctionnelle utilisée dans cet exemple est la suivante :

$$\begin{aligned}
 E(\text{param}_1, \text{param}_2) = &= \frac{\|\mu^{IAPWS} - \mu^{MIX}\|_2}{\|\mu^{IAPWS}\|_2} \\
 &+ \frac{\|s^{IAPWS} - s^{MIX}\|_2}{\|s^{IAPWS}\|_2} + \frac{\|\tau^{IAPWS} - \tau^{MIX}\|_2}{\|\tau^{IAPWS}\|_2} \\
 &+ \frac{\|C_p^{IAPWS} - C_p^{MIX}\|_2}{\|C_p^{IAPWS}\|_2} + \frac{\|\alpha_p^{IAPWS} - \alpha_p^{MIX}\|_2}{\|\alpha_p^{IAPWS}\|_2} + \frac{\|\chi_T^{IAPWS} - \chi_T^{MIX}\|_2}{\|\chi_T^{IAPWS}\|_2}.
 \end{aligned}$$

Les tables qui suivent présentent les coefficients des gaz raides considérés :

- sur la table 1, on trouve les coefficients du gaz raide initial, calé avec la méthode empirique (voir annexe 1) et ceux du gaz raide optimisé ;
- sur la table 2, on trouve les coefficients des deux gaz raides constituant le mélange optimisé.

Coefficients	Gaz raide initial (méthode empirique)	Un seul gaz raide optimisé
$\gamma$	1.214477077	1.20145802133373e+00
$C$ ( $JK^{-1}kg^{-1}$ )	2.108076293e+03	2.13920664140770e+03
$Q$ ( $Jkg^{-1}$ )	1.369643105e+06	1.41694137339728e+06
$\pi$ (Pa)	6.315490501e+05	-2.37137965486010e+05
$K$ ( $JK^{-1}kg^{-1}$ )	-3.14402501406409e+03	-3.57678186497858e+03

TABLE 1: Gaz raide de référence et coefficients du gaz raide optimisé

Coefficients	Gaz 1 du mélange optimisé	Gaz 2 du mélange optimisé
$\gamma$	1.20311950806197e+00	1.19466896995444e+00
$C$ ( $JK^{-1}kg^{-1}$ )	2.03207400575592e+03	2.32919476948296e+03
$Q$ ( $Jkg^{-1}$ )	1.38800916756918e+06	1.52312801605455e+06
$\pi$ ( $Pa$ )	6.57340674871949e+06	-6.82721810684994e+06
$K$ ( $JK^{-1}kg^{-1}$ )	6.46385664735901e+03	6.55679096146362e+03

TABLE 2: Coefficients des deux gaz raides du mélange miscible optimisé

L'optimisation permet d'obtenir des coefficients en général proches des coefficients du gaz raide initial calé empiriquement (sauf pour le  $\pi$ ). Le meilleur mélange est constitué de deux gaz raides assez proches l'un de l'autre (sauf les  $\pi$ ) : pour autant, il est difficile d'en tirer une conclusion, car le mélange de deux gaz raides identiques n'a pas exactement la même équation d'état que le gaz raide initial (voir annexe 2). Les résultats sont donnés sur la table 3. L'optimisation permet de faire baisser l'erreur totale de moitié par rapport au gaz raide initial de référence : cependant, le mélange de gaz raides ne fait pas significativement mieux que le meilleur gaz raide optimisé, ce qui paraît surprenant, vu que l'on double le nombre de coefficients utilisés. L'amélioration est plus ou moins importante suivant la grandeur considérée.

- Le mélange est plus précis qu'un seul gaz raide pour  $\mu$ ,  $\tau$ ,  $C_p$ . On peut d'ailleurs noter que pour améliorer la précision sur les dérivées, le gaz raide optimisé détériore d'un demi-ordre de grandeur la précision sur  $\mu$ , alors que le mélange parvient à améliorer la précision sur  $\mu$  tout en améliorant certaines dérivées.
- Le mélange est moins précis qu'un seul gaz raide pour  $s$  et  $\chi_T$ , mais les écarts sont assez faibles.
- Mélange et gaz sont précis de la même manière sur  $\alpha_p$ .

Erreurs	Gaz raide initial	Un seul gaz raide optimisé	Mélange optimisé
Erreur totale	4.78866218924500e-02	2.57292995555250e-02	2.39562743862582e-02
Erreur $\mu$	1.64485602593960e-05	4.36455573529491e-04	1.05615437908557e-05
Erreur $\tau$	7.54984994462873e-03	1.02017962651521e-03	8.14583537509500e-04
Erreur $s$	1.07952848308229e-04	9.54886315568107e-05	1.82357435983658e-04
Erreur $C_p$	1.92417437049477e-02	1.89677880568179e-02	1.77333060740906e-02
Erreur $\alpha_p$	1.40366102175399e-03	1.40366102175399e-03	1.40366102175400e-03
Erreur $\chi_T$	1.95669658125537e-02	3.80572664535179e-03	3.81180477312983e-03

TABLE 3: Somme des erreurs relatives en chaque point du domaine entre les données IAPWS et le gaz raide initial calé par la méthode empirique, un gaz raide optimisé et un mélange miscible de deux gaz raides optimisé. Les contributions à l'erreur totale pour chaque grandeur sont aussi présentées.

Enfin, nous présentons à titre d'illustration des cartes d'erreur relative par rapport à la référence IAPWS pour  $\mu$  (figures 2, 3, 4),  $\tau$  (figures 5, 6, 7) et  $s$  (figures 8, 9, 10). Ces résultats sont encourageants :

- la précision du mélange optimisé sur  $\mu$  et  $\tau$  est meilleure sur des domaines un peu plus étendus par rapport au gaz raide initial, sans dégradation dans les zones initialement bien estimées ;
- la dégradation de la précision pour l'entropie du mélange par rapport au gaz raide initial reste assez limitée et diffuse sur l'ensemble du domaine ;
- le meilleur gaz raide dégrade la précision  $\mu$  de manière assez importante dans zone haute pression basse température du domaine. Pour ce gaz, il n'y a plus de zone à erreur quasi nulle, contrairement au gaz de départ et au mélange optimisé.

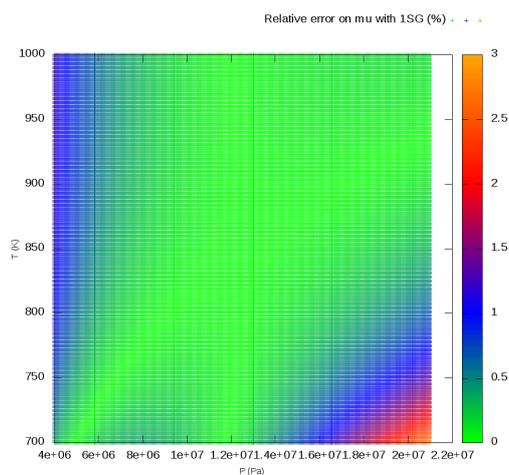


FIGURE 2: Erreur relative sur  $\mu$  par rapport à IAPWS pour le gaz raide initial

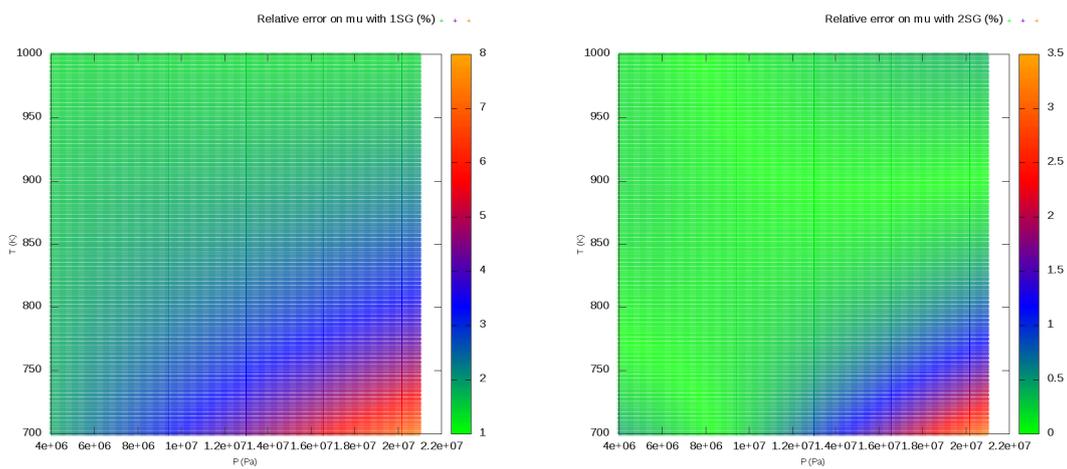


FIGURE 3: Erreur relative sur  $\mu$  par rapport à IAPWS pour le gaz raide optimisé

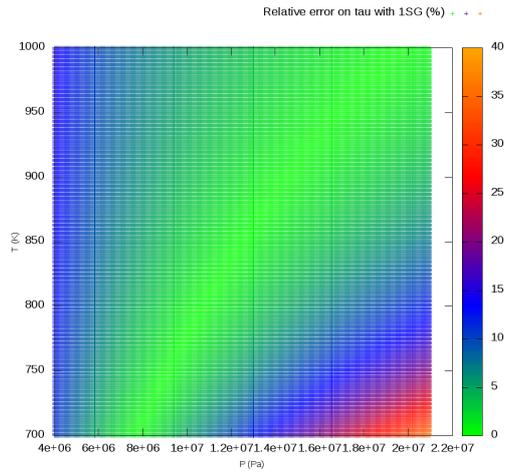


FIGURE 5: Erreur relative initiale sur  $\tau$

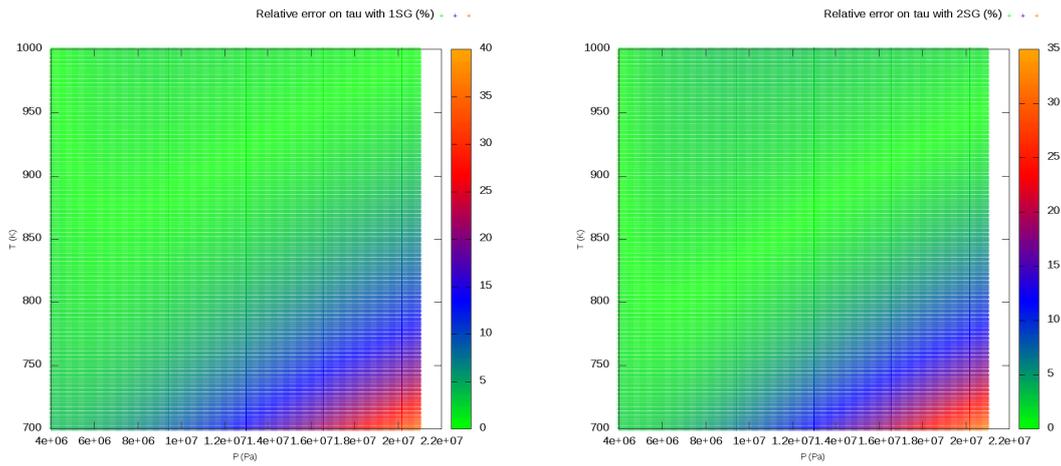


FIGURE 6: Erreur relative sur  $\tau$  par rapport à IAPWS pour le gaz raide optimisé

FIGURE 7: Erreur relative sur  $\tau$  par rapport à IAPWS pour le mélange optimisé

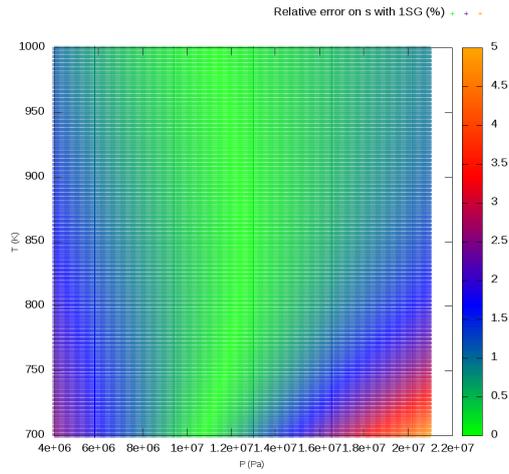


FIGURE 8: Erreur relative initiale sur  $s$

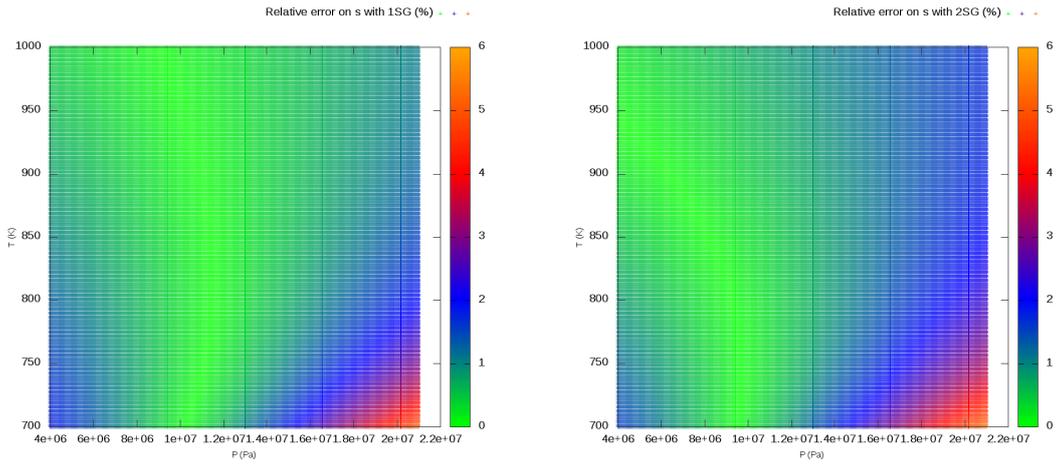


FIGURE 9: Erreur relative sur  $s$  par rapport à IAPWS pour le gaz raide optimisé

FIGURE 10: Erreur relative sur  $s$  par rapport à IAPWS pour le mélange optimisé

## Conclusions

Afin de créer des lois d'état plus réalistes pour l'eau, nous avons implémenté une méthode d'optimisation de paramètres afin de fitter des gaz raides ou un mélange miscible de gaz raides à des données de référence dans le plan  $(p, T)$ .

La loi d'état d'un mélange miscible de deux gaz raides n'est pas analytique dans le plan  $(p, T)$  : une inversion via un algorithme de Newton est nécessaire.

Le problème d'optimisation est difficile à résoudre en pratique : la convergence des algorithmes n'a pu être menée à bien. Différentes pistes ont été explorées pour résoudre ce problème :

- la sur-sensibilité de certains coefficients a été maîtrisée par l'adimensionnement par rapport à un point de référence central dans le domaine ;
- les inversions thermodynamiques nécessitent une bonne maîtrise de la précision : la résolution de l'algorithme de Newton pour le calcul de la loi de mélange a posé problème dans R. Néanmoins, la précision arbitraire n'a pas résolu les difficultés de convergence des algorithmes d'optimisation.

Optimiser un gaz raide ou un mélange de gaz raide permet de réduire l'erreur totale sur  $\mu$ ,  $\tau$ ,  $s$ ,  $C_p$ ,  $\alpha_p$  et  $\chi_T$  de moitié par rapport au gaz raide de référence calé empiriquement. Le mélange de gaz raides donne de meilleurs résultats que le gaz raide optimisé, notamment sur  $\mu$ . Cependant, nous nous attendions à une amélioration plus significative par rapport à un seul gaz raide car le mélange double le nombre de paramètres de la loi d'état. Ces résultats sont tout de même encourageants et des études complémentaires sont en cours :

- D'autres domaines thermodynamiques vont être considérés, sur lesquels l'équation d'état de gaz raide est connue pour être moins précise.
- Parmi les pistes à explorer, la plus prometteuse concerne la pondération des écarts dans la fonctionnelle : faut-il optimiser sur toutes les grandeurs thermodynamiques avec des pondérations différentes ? seulement sur les dérivées secondes ?
- Il est possible que la loi de gaz raide soit "trop régulière" pour être réaliste. D'autres lois d'état pourraient être mélangées pour obtenir des mélanges plus complexes.

## Références

- [1] T. Barberon and P. Helluy. Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers and Fluids*, 34(7) :832–858, 2005.
- [2] F. Daude, P. Galon, Z. Gao, and E. Blaud. Numerical experiments using a hllc-type scheme with ale formulation for compressible two-phase flows five-equation models with phase transition. *Computers & Fluids*, 94 :112–138, 05 2014.
- [3] Gloria Faccanoni and H el ene Mathis. Admissible Equations of State for Immiscible and Miscible Mixtures. working paper or preprint, November 2018.
- [4] O. Hurisse. Numerical simulations of steady and unsteady two-phase flows using a homogeneous model. *Computers and Fluids*, 2017, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01489039/file/numerical-homogeneous-two-phase-2016.pdf>.
- [5] John Maddock and Christopher Kormanyos. Boost multiprecision library, 2002.
- [6] Keith O’Hara. Optimlib library, 2018.
- [7] W. Wagner and H.-J. Kretzschmar. *International Steam Tables : Properties of Water and Steam Based on the Industrial Formulation IAPWS-IF97*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.

## Annexe 1 : Méthode empirique pour caler un gaz raide

La méthode de calage empirique des coefficients d'un gaz raide, définie à l'aide de [2], est la suivante :

1. On choisit un point de référence, représentatif de l'état physique dominant la simulation :  $(p_0, T_0)$ . On obtient à l'aide de la loi IAPWS le volume spécifique  $\tau_0(p_0, T_0)$  ainsi que la vitesse du son  $c_0(p_0, T_0)$  pour cet état physique  $(p_0, T_0)$ .
2. On fixe arbitrairement un  $\Delta T$  tel que :  $T_1 = T_0 - \Delta T$ ;  $T_2 = T_0 + \Delta T$  On calcule ainsi deux enthalpies de référence à l'aide de IAPWS :  $h_1(P_0, T_1)$  et  $h_2(P_0, T_2)$ .
3. On obtient les coefficients du gaz raide grâce aux approximations suivantes :

$$C_p = \frac{h_1 - h_2}{T_1 - T_2}; \quad Q = \frac{T_2 h_1 - T_1 h_2}{T_2 - T_1}; \quad \gamma = c_0^2 / (C_p T_0) + 1$$

$$C_v = \frac{C_p}{\gamma}; \quad \Pi = (\gamma - 1)C_v T_0 \rho_0 - P_0$$

4. On fixe enfin  $e^{SG}$  et  $s^{SG}$  en définissant  $s^0$  de façon à caler  $\mu^{SG} = \mu^{IAPWS}(P_0, T_0)$ .

## Annexe 2 : Mélange miscible d'un même gaz raide

Nous considérons un gaz raide avec les coefficients  $\text{param}_0 = (\gamma_0, C_0, Q_0, \Pi_0, K_0)$ . On considère le mélange miscible de ce gaz avec lui-même. Dans le cas général :

$$\mu^{MIX}(p, T) = \mu_1(p_1, T) = \mu_2(p - p_1, T).$$

Dans le cas particulier que l'on considère :

$$\mu^{SAME}(p, T) = \mu_0(p_1, T) = \mu_0(p - p_1, T)$$

avec

$$\mu_0(p, T) = \gamma_0 C_0 T + Q_0 - T(\gamma_0 C_0 \ln(T) - (\gamma_0 - 1)C_0 \ln(p + \pi_0) + K_0).$$

L'équation  $\mu_0(p_1, T) = \mu_0(p - p_1, T)$  nous donne :

$$\boxed{p_1 = \frac{p}{2}}.$$

Finalement :

$$\mu^{SAME}(p, T) = \mu_0\left(\frac{p}{2}, T\right).$$

Or :

$$\mu_0\left(\frac{p}{2}, T\right) = \mu_0(p, T) + T(\gamma_0 - 1)C_0 \ln\left(1 - \frac{p}{2(p + \pi_0)}\right).$$

D'où :

$$\mu^{SAME}(p, T) = \mu_0(p, T) + T(\gamma_0 - 1)C_0 \ln\left(1 - \frac{p}{2(p + \pi_0)}\right)$$

On ne retrouve pas la même équation d'état ! Le terme supplémentaire dépend de  $T$  et de  $p$  donc va également jouer sur les dérivées de  $\mu$ .