République **A**lgérienne **D**émocratique et **P**opulaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'**E**nseignement **S**upérieur et de la **R**echerche **S**cientifique
جامعة يحي فارس بالمدية
Université Yahia Farès de Médéa
كلية العلوم والتكنولوجيا
Faculté des Sciences et de la Technologie



THESE

En vue de l'obtention du Doctorat en Sciences en Génie des Procédés

Spécialité : Génie des Procédés

Présentée par Mr. Brahim MOHAMEDI

THEME

Simulation de l'établissement de l'ébullition nucléée par l'approche CFD

Soutenue devant le jury :

Mr. Liès DEKAR	MCA, Université Yahia FARES, Médéa	Président
Mr. Abdallah OUAGUED	Professeur, Université Hassiba Ben Bouali, Chlef	Examinateur
Mr. Hamou ZAHLOUL	Professeur, Université Hassiba Ben Bouali, Chlef	Examinateur
Mr. Salah HANINI	Professeur, Université Yahia FARES, Médéa	Directeur de thèse
Mr. Anis BOUSBIA SALAH	Directeur de Recherche, Bruxelles, Belgique	Co-directeur de thèse

2015 – 2016

Dédicace

A l'unique femme de ma vie,
A mes beaux-parents,
A mes enfants : Wail, Farouk et Israa,
A mes frères et sœurs,
A mes beaux-frères et belles-sœurs,
A mes neveux et nièces,
A tous mes proches,
A tous mes amis,
A tous ceux qui m'ont aidé et encouragé,

Parce qu'ils sont pour moi l'exemple de la ténacité, je dédie ce travail à ma mère et à la mémoire de mon père, puisse Dieu le miséricordieux ait pitié de son âme.

Remerciements

Avant de tourner la page des années de thèse, enfin concrétisée par ce mémoire, j'ai très envie de m'adonner à l'exercice ultime et sincère des remerciements.

J'aimerais bien évidemment débuter cette page en remerciant le ***Dieu ALLAH le tout Puissant*** *qui ma donné la force, le courage et la patience de bien mener ce travail.*

J'adresse mes reconnaissances à mes directeurs de thèse, Docteur ***S. HANINI****, Professeur à l'Université Yahia Farès de Médéa et Docteur* ***A. BOUSBIA SALAH,*** *Directeur de Recherche à BEL V, Bruxelles, Belgique pour tout le temps qu'ils m'ont accordé mais aussi pour la sympathie qu'ils me témoignent.*

Je suis sensible à l'honneur que m'a fait le Docteur ***L. DEKAR*** *Maitre de Conférences A à l'Université Yahia Farès de Médéa en acceptant la présidence du jury de thèse. Je le prie de bien vouloir trouver ici l'expression de ma gratitude.*

Mes remerciements s'adressent aussi au Docteur ***A. OUAGUED*** *Professeur à l'université Hassiba Ben Bouali de Chlef et au Docteur* ***H. ZAHLOUL*** *Professeur à l'université Hassiba Ben Bouali de Chlef, pour avoir bien voulu examiner le contenu de ce travail et participer à la soutenance.*

Sans pouvoir, malheureusement, recenser tous ceux qui participent à rendre meilleur mon environnement de travail, je pense à Mrs ***A. KERRIS*** *et* ***A. BENAZZA*** *respectivement directeur général et secrétaire général du centre de recherche nucléaire de Birine (CRNB), aux services administratifs et le département de formation & information du Centre de Recherche Nucléaire de Birine. Je voudrais adresser un merci particulier à Monsieur* ***S. BOUHLI*** *directeur de division au CRNB de m'avoir accueilli au sein de la* Division de Sûreté Nucléaire et Radioprotection (*DSNR).*

Je tiens à exprimer mes reconnaissances à Messieurs ***N. MELLAL, A. BOUZIDI, M. TOUIZA, A. ARAREM, A. BOURENANE, H. BENKHARFIA, K. REZOUG, A. HANNACHE, A. AIDOUNI, Y. TIRECHE*** *et* ***M. SALHI*** *chercheurs au CRNB, collègues de longues dates pour leur soutien inconditionnel, leur amitié a beaucoup d'importance pour moi. Mes remerciements vont aussi à Messieurs* ***S. LAOUAR, M. MOUGHARI, O.GHEZIEL,*** *Chercheurs au CRNB pour leur aide fructueuse.*

Que tous mes amis et camarades du Centre de Recherche Nucléaire de Birine (CRNB), de l'Université Dr. Yahia Farès de Médéa ainsi que ceux d'Ain Oussera dont j'ai pu apprécier l'esprit d'entraide, soient ici remerciés.

Résumé: *Simulation de l'établissement de l'ébullition nucléée par l'approche CFD*

L'objectif de ce travail de thèse est la modélisation par une approche numérique en utilisant un code CFD, pour Computational Fluid Dynamics en Anglais, pour la prédiction de la fraction de la vapeur d'un écoulement en ébullition sous saturée à travers les assemblages combustibles d'un réacteur nucléaire. Contrairement au code commercial ANSYS-CFX ou la formulation industrielle d'IAPWS 1997 est implémentée, le code ANSYS-Fluent offre seulement la possibilité d'utilisation d'équations d'états, comme la loi des gaz parfaits, l'équation Redlich-Kwong et les interpolations polynomiales. A cet effet, nous avons développé deux UDF, pour User Defined Function en Anglais, pour la prédiction de dix (10) propriétés thermodynamiques et de transport, la densité, la chaleur spécifique, la viscosité dynamique, la conductivité thermique et la vitesse du son de l'eau légère et la vapeur saturée, dans des conditions de température et de pression variables. La première en utilisant les réseaux de neurones, la deuxième en implémentant la formulation industrielle d'IAPWS 1997. Une fois, l'UDF est attachée au code, via l'interface graphique (GUI pour Graphical User Interface en Anglais), les données sont passées au code et sont disponibles à l'utilisation chaque fois que la fonction est appelée.

Ainsi, le solveur ANSYS-Fluent devient compétitif avec d'autres codes CFD dont ANSYS-CFX dans ce domaine. En effet, le couplage du modèle RPI, pour Rensselaer Polytechnical Institute en Anglais, modèle à répartition du flux pariétal et l'UDF développée s'est révélé être utile pour la prédiction de la fraction volumique de la vapeur dans un écoulement en ébullition sous-saturée. De manière globale, la confrontation des résultats numériques, à savoir les distributions de fraction de volume de la vapeur et le profil de température, montre une bonne concordance avec les expériences.

Mots clés: *CFD, Prediction, Ebullition, IAPWS-IF97, ANSYS-Fluent, RPI.*

Abstract: *Simulation of the nucleate boiling by CFD approach.*

The objective of this thesis is numerical modeling approach using CFD code (Computational Fluid Dynamics) for the prediction of the fraction of vapor flow boiling in saturated through the fuel assemblies of a nuclear reactor. Contrary to the commercial ANSYS-CFX code, where the industrial formulation IAPWS 1997 is implemented, the ANSYS-FLUENT code provides only the possibility of using equations of state (EOS), such as the ideal gas law, the Redlich-Kwong EOS and piecewise polynomial interpolations. For that purpose, we have developed two UDFs (User Defined Function), for the prediction of ten (10) thermophysical properties of light water and saturated steam respectively density, specific heat, dynamic viscosity, thermal conductivity and the speed of sound at variable temperature and pressure conditions. The first UDF is using artificial neural networks of multilayer type (MLP), the second by implementing the industrial formulation IAPWS 1997. Once the UDF is attached to the code via the graphical user interface (GUI), the data is passed to the code and are available to use every time the function is called.

Thus, the solver ANSYS-FLUENT becomes competitive with other CFD codes whose ANSYS-CFX in this field. Indeed, the coupling of the RPI model (Rensselaer Polytechnical Institute) wall boiling model or heat partitioning model and UDF developed proved to be useful for the prediction of the volume fraction of vapor in a flow boiling sub saturated. Overall, the comparison of the numerical results, namely the vapor volume fraction distributions and the temperature profile shows good agreement with experiments.

Keywords: *CFD, Prediction, Boiling, IAPWS-IF97, ANSYS-Fluent, RPI.*

الملخص: محاكاة إنشاء الغليان المتنوي باستخدام التعليمات البرمجية CFD

يهدف هذا العمل الى النمذجة العددية باستخدام التعليمات البرمجية CFD (Computational Fluid Dynamics بالإنجليزية) ذات الصلة بديناميكية الموائع الحاسوبية، للتنبؤ بنسبة البخار المحتواة في تدفق في حالة غليان شبه مشبع حول وقود مفاعل نووي. على عكس التعليمات البرمجية ANSYS_CFX الذي يتضمن الصياغة الصناعية IAPWS_1997، التعليمة البرمجية ANSYS_FLUENTلاتوفر الا إمكانية استخدام معادلات الحالة، مثل قانون الغازات المثالية، معادلة Redlich_Kwong واستيفاء متعددات الحدود. تحقيقا لهذه الغاية، وضعنا وطورنا وظيفتي تعريف المستخدم UDF (User_Defined_Function بالإنجليزية)للتنبؤ بعشرة (10) خصائص ذات صلة بالديناميكو- حرارية والنقل مثل الكثافة، الحرارة النوعية، اللزوجة الديناميكية، التوصيل الحراري وسرعة صوت للماء والبخار المشبع، تحت درجة حرارة وضغط متغيرين. الأولى باستخدام الشبكات العصبية، والثانية عن طريق تنفيذ الصياغة الصناعية IAPWS. 1997وبمجرد ارفاق UDF إلى التعليمات البرمجية من خلال واجهة المستخدم الرسومية GUI (Graphical User Interface بالإنجليزية)، يتم تمرير البيانات إلى التعليمات البرمجية وتصبح متاحة للاستخدام في كل مرة تدعى فيها الوظيفة.

وهكذا، فإن ANSYS_Fluent يصبح تنافسيا مع التعليمات البرمجية CFD الأخرى مثل ANSYS_CFX في هذا المجال. في الواقع، اقتران النموذج RPI (Rensselaer Polytechnical Institute بالإنجليزية) نموذج تقسيم التدفق الجداري وUDF المطورة أثبت نجاعته للتنبؤ بنسبة حجم البخار في التدفق المغلي شبه المشبع. عموما، المقارنة بين النتائج العددية، وهي توزيعات نسبة حجم البخار و تغيرات درجة الحرارة أظهرت اتفاق جيد مع التجارب.

الكلمات المحورية : *CFD، التنبؤ، الغليان، IAPWS-IF97، RPI، ANSYS-Fluent.*

" La théorie, c'est quand on sait tout et que rien ne fonctionne.
La pratique, c'est quand tout fonctionne et que personne ne sait pourquoi.
Ici, nous avons réuni théorie et pratique : Rien ne fonctionne... et personne ne sait pourquoi ! "

Albert Einstein

Table des Matières

Dédicace ii

Remerciements iii

Résumé iv

Abstract iv

الملخص iv

Nomenclature xv

Abréviation xvii

Introduction Générale 18

CHAPITRE I
ETAT DE L'ART

I.1. Principaux types de réacteurs 21

I.1.1. Réacteurs à eau pressurisée PWR 22

I.1.2. Réacteurs à eau bouillante BWR 24

I.2. Sûreté des réacteurs 25

I.3. Ebullition nucléée sous refroidie 27

I.4. Mécanique des fluides numériques 28

I.5. monographie 29

I.6. Motivations et objectifs de l'étude 31

CHAPITRE II
MODELISATION DE L'EBULLITION NUCLEEE SOUS-SATUREE CONVECTIVE

II.1. Configurations d'écoulements et les mécanismes de l'ébullition en convection forcée à l'intérieur d'un tube chauffant 32

II.2. Ecoulement à ébullition sous-saturée 36

II.2.1. L'ébullition sous-saturée à haute pression 37

II.2.2. Corrélations empiriques monodimensionnelles 38

II.2.2.1. Ebullition sous-saturée partielle 38

II.2.2.2. Ebullition sous-saturée développée 39

II.2.2.3. Corrélations d'ébullition nucléée sous-saturée 39

II.2.3. Modèles mécanistes 41
II.2.3.1. Présentation du modèle RPI 42
II.2.3.1.1. Influence de la surface 44
II.2.3.1.2. Influence de la fréquence de détachement de bulles 45
II.2.3.1.3. Influence de la densité de sites de nucléation 45
II.2.3.1.4. Influence du diamètre de détachement de la bulle 46
II.3. Conclusion 48

CHAPITRE III
STRUCTURE DU CODE ANSYS FLUENT

III.1. Echelles d'analyse 49
a) DNS 49
b) CFD 49
c) Composant 49
d) Système 49
III.2. Avantages des codes CFD 50
a) Reproductibilité 50
b) Paramétrage 50
c) Economie 50
d) Flexibilité 51
e) Pleine échelle 51
f) Analyse 51
III.3. Vérification et validation 51
III.4. Modélisation des écoulements multiphasiques par une approche Eulérienne 53
III.4.1. Equations principales 53
a) Fraction volumique 54
b) Equation de conservation de la masse 54
c) Equation de conservation de la quantité de mouvement 54
d) Equation de l'énergie 56
III.4.2. Transfert de la quantité de mouvement à l'interface 56
1. Aire de l'interface 57
a. Modèle de la particule 57
b. Modèle symétrique 57
c. Modèle Ishii 57

2. Force de portance de l'interface (Drag force) 57
3. Force de traînée de l'interface (Lift force) 57
4. Force de la masse virtuelle (Virtual mass force) 58
5. Force de dispersion turbulente (Turbulent dispersion force) 58
6. Force de lubrification pariétale (Wall lubrication force) 58
III.4.3. Transfert de chaleur à l'interface 58
1. Transfert de chaleur au liquide 58
2. Transfert de chaleur à la vapeur 59
III.4.4. Transfert de masse 59
1. Transfert de masse de la paroi à la vapeur 59
2. Transfert de masse à l'interface 59
III.5. Modélisation de la turbulence 60
III.6. Méthodes de discrétisation 63
III.6.1. Discrétisation spatiale 65
III.6.2. Discrétisation temporelle 67
III.6.3. Discrétisation des équations 67
III.7. Traitement de la paroi 68
III.8. Conclusion 71

CHAPITRE IV
MODELISATION DES PROPRIETES DE L'EAU ET DE LA VAPEUR ET L'IMPLEMENTATION DES UDF

IV.1. Equations du formalisme IAPWS 72
IV.1.1. Constantes de référence 73
IV.1.2. Formulation industrielle d'IAPWS 1997 74
IV.1.2.1. Caractéristiques d'IAPWS-IF97 74
IV.1.2.1.1. Structure d'IAPWS-IF97 74
IV.1.2.1.2. Qualité d'IAPWS-IF97 76
IV.1.2.2. Equations de base de l'IAPWS-IF97 76
IV.1.2.2.1. Equation auxiliaire pour la frontière entre les régions 2 et 3 77
IV.1.2.2.2. Equation de base de la région 1 78
IV.1.2.2.3. Equation de base et équation supplémentaire pour la région 2 80
IV.1.2.2.3.1. Equation de base 80
IV.1.2.2.3.2. Equation supplémentaire pour la région de la vapeur métastable 82

IV.1.2.2.4. Equation de base pour la région 3 83
IV.1.2.2.5. Equation de base pour la région 4 86
IV.1.2.2.5.1 Equation de la pression de saturation 86
IV.1.2.2.5.2 Equation de la température de saturation 87
IV.1.2.2.6 Equation de base pour la région 5 87
IV.2. Réseau de neurones artificiels 89
IV.2.1 Neurone formel 90
IV.2.1.1. Entrées Xi 91
IV.2.1.2. Poids synaptiques Wi 91
IV.2.1.3. Seuil θ 91
IV.2.1.4. Fonction d'activation F 92
IV.2.1.5. Sortie du neurone S 93
IV.2.2. Architecture du réseau 94
IV.2.3. Apprentissage 94
IV.2.4. Règles d'apprentissage 94
IV.2.5. Théorie de la généralisation 95
IV.2.6. Critère d'arrêt pour l'apprentissage 95
IV.2.7. Procédure de modélisation neuronale 95
IV.2.8. Méthodologie de calcul 97
IV.2.9. Base de données 97
IV.2.9.1. Sélection des entrées du modèle neuronal 98
IV.2.9.2. Règle des phases de Gibbs 98
IV.2.9.3. Collecte des données 99
IV.2.9.4. Mise en forme des données 99
IV.2.9.5. Normalisation des données 99
IV.2.10. Conception des réseaux 99
IV.2.11. Région diphasique 100
IV.2.12. Etude comparative 104
IV.3.1. Utilisation des UDF 105
IV.3.2. Etapes de base pour l'utilisation des UDF dans FLUENT 106
IV.3.3. Implémentation des propriétés de l'eau et de la vapeur dans les UDF 106
IV.4. Conclusion 108

CHAPITRE V
Mise en œuvre numérique

V.1. Processus de simulation 110
- Formulation du problème 110
- Maillage 110
- Spécification d'écoulement 110
- Solution numérique 111
- Analyse des résultats 111

V.2. Etude de l'ébullition sous-refroidie dans un canal vertical (Benchmark1) 111
V.2.1. Description du benchmark 112
V.2.2. Procédure de résolution avec l'UDF (ANN) 112
V.2.3. Indépendance de maillage 113
V.2.4. Validation du couplage UDF-RPI 114
V.2.5. Résultats et discussion 115
V.3. Etude de l'ébullition sous-refroidie dans un canal vertical avec transfert de chaleur conjugué (Benchmark2) 123
V.3.1. Description du benchmark 124
V.3.2. Maillage et conditions aux limites 125
V.3.3. Modèle mathématique 126
V.3.4. Procédure de résolution avec l'UDF (IAPWS) 127
V.3.5. Résultats 127
V.4. Modélisation en 3D de l'ébullition nucléée sous-saturée (Benchmark3) 131
V.4.1. Boucle FRIGG pour la simulation d'un BWR 131
V.4.2. Description de la boucle FRIGG 132
V.4.3. Description du benchmark 133
V.4.4. Procédure de résolution avec l'UDF (ANN) 134
V.4.5. Maillage 135
V.4.6. Résultats 137
V.5. Conclusion 141
Conclusion Générale 142
Références bibliographiques 144

Table des Figures

Fig.I.1: Réacteurs de puissance (NPP) dans le monde [2] 21
Fig.I.2: Diagramme de fonctionnement des centrales 22
Fig.I.3: Type de réacteurs en utilisation à travers le monde [2] 22
Fig.I.4: Schéma de principe d'un PWR 23
Fig.I.5: Variation de température dans les circuits PWR 23
Fig.I.6: Schéma de principe d'un BWR 24
Fig.I.7: Variation de température dans les circuits BWR 25
Fig.I.8: Conditions d'opération d'un PWR et d'un BWR [8] 25
Fig.I.9 : Endommagement par "isolation" de la paroi chaude du liquide de refroidissement [9] 26
Fig.I.10: Couche limite adjacente à la paroi chauffée [42] 31

Fig.II.1 : Evolution des températures, configuration d'écoulement et régimes de transfert de chaleur associés pour un flux de chaleur pariétal faible [43] 34
Fig.II.2 : Schématisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective [44] 35
Fig.II.3 : Régimes de transfert de chaleur et transitions [45] 36
Fig.II.4 : Schéma du modèle de partitionnement de la chaleur selon Kurul et Podowski [70] 43

Fig.III.1 : Développement, vérification et validation d'un modèle [72] 52
Fig.III.2 : Modèles de la turbulence [80] 61
Fig.III.3 : Eléments de maillage 65
Fig.III.4 : Types de cellules [79] 66
Fig.III.5 : Elément du volume de contrôle [79] 66
Fig.III.6 : Lois de la couche limite [84] 69

Fig.IV.1 : Régions et équations de la formulation IAPWS-IF97 [90] 75
Fig.IV.2 : L'attribution des équations de base aux cinq régions d'IAPWS-IF97 [90] 77
Fig.IV.3 : Mise en correspondance neurone biologique / neurone artificiel [102] 90
Fig.IV.4 : Neurone formel [105] 91
Fig.IV.5 : Neurone formel modèle étendu [105] 92
Fig.IV.6 : Fonction de transfert : (a) du neurone "seuil" ; (b) du neurone "linéaire" et (c) du neurone "sigmoïde" [95] 93
Fig.IV.7 : Taxinomie des architectures des réseaux non bouclés et récurrents 94
Fig.IV.8 : Optimisation des paramètres d'un réseau de neurone artificiel [105] 96
Fig.IV.9 : Procédure de modélisation par les réseaux de neurones [105], [113] 97
Fig.IV.10 : Schéma synoptique du modèle 100
Fig.IV.11 : Schéma simplifié de l'architecture du réseau neuronal [132] 101
Fig.IV.12 : Comparaison de la viscosité dynamique cible avec la valeur prédite par le réseau (phase d'apprentissage) 102
Fig.IV.13 : Points d'accès de l'utilisateur au solveur FLUENT [84] 106
Fig.IV.14 : Implémentation de l'UDF développée dans le code ANSYS-FLUENT (a) Groupe de 8 propriétés; (b) Groupe de 2 propriétés 107
Fig.IV.15 : Schéma synoptique d'utilisation de deux macros [84] 108

Fig.V.1 : Schéma synoptique du processus de simulation 111
Fig.V.2 : Schéma synoptique du benchmark [132] 112
Fig.V.3 : Indépendance de la solution du maillage 114
Fig.V.4 : Architecture proposée pour l'étude du benchmark 114
Fig.V.5 : Conditions aux limites du canal vertical 115
Fig.V.6 : Vérification de l'indépendance de maillage de la fraction de la vapeur le long de la conduite ... 116
Fig.V.7 : Résiduel de la simulation de l'ébullition 118
Fig.V.8 : Historique de la convergence du bilan de masse 118
Fig.V.9 : Historique de la convergence de la fraction moyenne de la vapeur à la sortie de la conduite 119
Fig.V.10 : Comparaisons de profil axial de la fraction volumique de la vapeur (a) et le profil axial de la température du liquide (b) 120
Fig.V.11 : Taux de vide pour différents régimes de l'ébullition sous saturée [138] 121
Fig.V.12 : Profils radiaux de la fraction de vapeur (a) et de la température du liquide (b) aux 5 endroits le long de la conduite 122
Fig.V.13 : Processus présents dans l'ébullition dans un transfert de chaleur conjugué [140] 123
Fig.V.14 : Schéma synoptique du benchmark 124
Fig.V.15 : Maillage adopté et conditions aux limites du benchmark en 2D 126
Fig.V.16 : Distribution de la fraction de vapeur à la sortie du canal 127
Fig.V.17 : Profil axial de la fraction de la vapeur 128
Fig.V.18 : Comparaison du profil axial de la fraction de la vapeur 129
Fig.V.19 : Comparaison du profil axial de la température du liquide 129
Fig.V.20 : profils radiaux de la fraction de la vapeur a six endroits le long du canal 130
Fig.V.21: diamètre des bulles le long du canal 130
Fig.V. 22 : Arrangement basique de la boucle d'essai FRIGG-BWR (a) et détails de la section d'essai avec comparaison de taille (b) [142] 131
Fig.V. 23 : Schéma synoptique de la boucle FRIGG [141] 132
Fig.V. 24 : Schéma de six cannes chauffantes de la section d'essai de la boucle FRIGG (FT-6a) 133
Fig.V. 25 : Zones de mesures de la boucle FRIGG (FT-6a) 134
Fig.V. 26 : Géométrie totale de la section d'essai (a), Division de 72 degrés de la géométrie (b), Maillage adopté de la division (c) 136
Fig.V. 27 : Architecture adopté pour la simulation de la section FT-6a 137
Fig.V. 28 : Distribution axiale de la fraction de vide de la section FT-6a Zone1 (a), Zone2 (b), Zone3 (c) 138
Fig.V. 29 : Distribution radiale de la température de la section FT-6a x=304 mm (a), x=1148 mm (b), ... 139
Fig.V. 30 : Contours le long de la section FT-6a fraction de vapeur (a), distribution de la fraction de la vapeur en 4 endroits (b), température du liquide (c), distribution de la température en 4 endroits (d) 140
Fig.V. 31 : Contour à la sortie de la section FT-6a fraction de la vapeur (a), température du liquide (b) .. 140

Liste des Tableaux

Tableau II.1 : Différents modèles de densité de sites de nucléation 47
Tableau II.2 : Différents modèles de diamètre de détachement de bulle 47
Tableau II.3 : Différents modèles de la fréquence de détachement de bulles 48
Tableau II.4 : Différents modèles de la fréquence de détachement de bulles mis en œuvre dans ANSYS-CFX 48

Tableau III.1 : Comportement et utilisation du modèle de turbulence RANS [80] 61
Tableau III.2 : Valeurs des constantes empiriques du modèle k-ε 63

Tableau IV.1 : Coefficients des équations IV.1 et IV.2 ($p_{B23}(T)$ et $T_{B23}(p)$) 78
Tableau IV.2 : Coefficients et exposants de l'équation de base $g_1(p,T)$ sous la forme adimensionnelle, équation IV.3 78
Tableau IV.3 : Relation des propriétés thermodynamiques à l'énergie libre de Gibbs Adimensionnelle γ et de ses dérivées en utilisant l'équation IV.3 79
Tableau IV.4 : Energie libre de Gibbs adimensionnelle γ, équation IV.3 et de ses dérivées 79
Tableau IV.5 : Coefficients et exposants pour les gaz parfait γ^o de l'équation IV.7 80
Tableau IV. 6 : Coefficients et exposants pour la partie résiduelle γ^r de l'équation IV.8 80
Tableau IV.7 : Relations des propriétés thermodynamiques avec la partie gaz parfait γ^o et la partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de ses dérivées en utilisant les équations IV.6 et IV.9 81
Tableau IV.8 : Partie gaz parfait γ^o de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.7 et de ses dérivées 82
Tableau IV.9 : Partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.8 et de ses dérivées 82
Tableau IV.10 : Coefficients et exposants pour la partie résiduelle γ^r de l'équation IV.10 83
Tableau IV.11 : Partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.10, et de ses dérivées 83
Tableau IV.12 : Coefficients et exposants de l'équation de base $f_3(\rho,T)$ sous sa forme adimensionnelle, équation IV.11 84
Tableau IV.13 : Relation des propriétés thermodynamiques avec l'énergie libre adimensionnelle de Helmholtz et de ses dérivées en utilisant l'équation IV.11 84
Tableau IV.14 : Energie libre de Helmholtz adimensionnelle, équation IV.11 et de ses dérivées 85
Tableau IV.15 : Coefficients des équations de bases pour la région 4, les équations de IV.12 à IV.15 86
Tableau IV.16 : Coefficients et exposants pour les gaz parfait γ^o de l'équation IV.18 88
Tableau IV.17 : Coefficients et exposants pour la partie résiduelle γ^r de l'équation IV.19 88
Tableau IV.18 : Relations des propriétés thermodynamiques avec la partie gaz parfait γ^o et la partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de ses dérivées en utilisant l'équation IV.17 88
Tableau IV.19 : Partie gaz parfait γ^o de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.18, et de ses dérivées 89

Tableau IV.20 : Partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.19 et de ses dérivées 89
Tableau IV.21 : Fonctions de transfert S = f(P) [107] 92
Tableau IV.22 : Structure du réseau neuronal 101
Tableau IV.23 : Performance statistique du réseau 103
Tableau IV. 24 : Etude comparative entre le MN et le modèle WASP [133] par rapport aux valeurs expérimentales [91] 104

Tableau V.1 : Conditions thermohydrauliques 112
Tableau V.2 : Propriétés thermophysiques de l'eau liquide 113
Tableau V.3 : Propriétés thermophysiques de la vapeur à 530.55 K 113
Tableau V.4 : Propriétés thermophysiques de l'Acier inoxydable 113
Tableau V.5 : Inputs du modèle ébullition sous-saturée sous ANSYS-Fluent R14.5 116
Tableau V.6 : Conditions thermohydrauliques 125
Tableau V. 7 : Données principales 132
Tableau V. 8 : zonage de la section FT-6a 134
Tableau V. 9 : Conditions thermohydrauliques 135
Tableau V. 10 : Propriétés thermophysiques de l'eau liquide 135
Tableau V. 11 : Propriétés thermophysiques de la vapeur à 537 K 135
Tableau V. 12 : Propriétés thermophysiques de Zircaloy 135

Nomenclature

Caractères latins

A_b	: Surface de la bulle	[m^2]
b_i	: Biais du neurone	[-]
C_p	: Capacité thermique isobare	[kJ/kgK]
D	: Diamètre	[mm]
e	: Epaisseur	[mm]
F	: Fonction d'activation du neurone, facteur d'amplification	[-]
f	: fréquence de détachement de la bulle, Energie libre de Helmholtz	[1/s], [kJ/kg]
g	: Energie libre de Gibbs, Constante de la gravitation	[kJ/kg], [m/s^2]
H, h	: Enthalpie, Coefficient d'échange	[kJ/kg], [kW/m^2K]
h_{fv}	: Chaleur de latente d'évaporation	
M	: Masse molaire	[kg/kmol]
N	: Nombre d'entrées du neurone	[-]
N_w	: Densité de site de nucléation	
n	: Coefficient	[-]
p	: Pression, Potentiel d'action (somme pondérée)	[bar], [MPa]
G_{in}	: Débit massique	[kg/sm^2]
R	: Constante spécifique des gaz, Coefficient de corrélation,	[kJ/kgK]
r	: Rayon	[mm]
R_m	: Constante molaire des gaz	[kJ/kmolK]
T_{sat}	: Température de saturation	[°C], [K]
T_w, T_p	: Température de la paroi	[K]
T_l	: Température du liquide	[-]
Q	: Flux de chaleur	[MW/m^2]
S , s	: Vecteur de sorties du neurone, Facteur de surpression, Entropie	[kJ/kgK]
s_i	: Sortie du neurone	[-]
u	: Energie interne	[kJ/kg]
v	: Volume massique, Variance	[m^3/kg]
W	: Vitesse du son	[m/s]
w_i	: Poids synaptiques du neurone	[-]
w_{ij}^t	: Ancien poids	[-]
w_{ij}^{t+1}	: Nouveau poids	[-]
w^*	: Poids minimum	[-]
Δw^t	: Adaptation des poids à l'itération t	[-]
X	: Vecteur d'entrée	[-]
X_{eq}	: Titre thermodynamique	[%]
x_i	: Entrées du neurone	[-]

Caractères grecs

α_p	: Coefficient de la pression relative	[1/K]
α_v	: Coefficient de dilatation isobare	[1/K]
β_T	: Coefficient isothermique de pression	[-]
ΔT	: Sous saturation	[K]

ϕ	: Energie libre adimensionnelle de Helmholtz, Variable, Diamètre	[mm]
η	: Viscosité dynamique	[Pas]
k_T	: Compressibilité isothermique	[1/kPa]
λ	: Conductivité thermique, Diffusivité thermique	[W/m K], [m^2/s]
π	: Pression réduite	[-]
θ	: Température réduite, Seuil	[-]
ρ	: masse volumique	[kg/m^3]
σ	: Tension superficielle	[N/m]
χ_{tt}	: Paramètre de Martinelli	[-]

Nombres adimensionnels

R_e	: Nombre de Reynolds
P_r	: Nombre de Prandtl
P_e	: Nombre de Péclet
Ja	: Nombre de Jacob

Exposants

$'$	: Etat liquide saturé
$''$	: Etat vapeur saturée
$*$	: Quantité réduite
0	: Partie gaz parfait
r	: Partie résiduelle
t	: Itération ou transposé

Indices

b	: Ebullition
c, C	: Critique, Convection
E	: Evaporation
Q	: Quenching (conduction)
l	: Phase liquide
s	: Etat de saturation
t	: Point triple
v	: Phase vapeur
w	: Wall

Abréviation

AAE : Average Absolute Error
Adaline : Adaptative Linear Element
AE : Absolute Error
ANN : Artificiel Neural Network
ANSYS : ANalysis SYStem
ASME : American Society of Mechanical engineering
BWR : Boiling Water Reactor
Cathare : Code Avancé Thermo-Hydraulique pour Accidents des Réacteurs à Eau
CEA : Commissariat à l'Energie Atomique
CFD : Computational Fluid Dynamics
CHF : Critical Heat Flux
CMFD : Computational Multi-Fluid Dynamics
CP : Chicago Pile
CRNB : Centre de Recherche Nucléaire de Birine
DNB : Departure of Nucleate Boiling
DNS : Direct Numerical Simulationen
FBR : Fast Breeder Reactors
FDB : Fully Developed Subcooled Boiling
HCLWR : High Conversion Light Water Reactor
IAPWS : International Association for the Properties of Water and Steam
LES : Large Eddy Simulations
LOCA : Lost Of Coolant Accident
LOFA : Loss Of Flow Accident
MLP : Multi-Layer Perceptron
MOX : Mixed OXide
NRS : Nuclear Reactor Safety
NPP : Nuclear Power Plant
ONB : Onset of Nucleate Boiling
OSV : Onset of Significant Void
PTS : Pressurized Thermal Shock
PWR : Pressurized Water Reactor
RANS : Reynolds-averaged Navier-Stokes
REB : Réacteurs à Eau Bouillante
RELAP : Reactor Excursion and Leak Analysis Program
REP : Réacteurs à Eau Pressurisée
RMS : Reynolds Stress Model
RMSE : Root Mean Square Error
RNA : Réseau de Neurones Artificiels
RPI : Rensselaer Polytechnical Institute
SCWR : SuperCritical Water Reactor
SFR : Sodium Fast Reactors
SLB : Stream Line Break
SST : Shear-Stress Transport
STDEV : Standard Deviation
UDF : User Defined Functions
WGAMA : Working Group on Analysis and Management of Accidents

Introduction Générale

La conception des réacteurs nucléaires repose sur un assemblage complexe de systèmes thermodynamiques interconnectés de façon à générer une grande quantité de chaleur qui elle même alimentera un autre usage à savoir la production de vapeur pour un travail mécanique, production d'électricité, production de radio-isotope ou production d'eau douce par dessalement. Cette chaleur est produite par le phénomène de fission de noyaux lourds du combustible nucléaire dans le cœur du réacteur. La chaleur dégagée dans le cœur, qui est constitué, généralement, d'une centaine d'assemblage de crayons de combustible composés de pastilles d'uranium enrichi, est évacuée par un fluide caloporteur dans des conditions qui permettent d'assurer l'intégrité des éléments combustibles.

Il est indispensable, lors de la conception thermohydraulique des réacteurs nucléaires, de prendre en compte tous les phénomènes possibles pouvant affecter les barrières de confinement, en considérant tous les régimes de fonctionnement du réacteur : nominal, transitoire, incidentel ou accidentel. La conception d'un réacteur permet une bonne maitrise du procédé pour assurer la pérennité de l'installation, ainsi que le faible impact radiologique pour l'environnement et les populations dans toutes les conditions de fonctionnement envisageables.

Il existe deux types distincts de réacteurs nucléaires, les réacteurs à eau sous pression REP (PWR pour Pressurized Water Reactor en Anglais) et les réacteurs à eau bouillante REB (BWR pour Boiling Water Reactor en Anglais). Le plus commun des deux types est le PWR, le but de son système de pressurisation est de chauffer l'eau à des températures les plus grandes possibles afin d'améliorer l'efficacité et empêcher l'ébullition qui pourrait conduire à la rupture de la gaine.

Au début des années 1900, l'industrie de la vapeur connaissait une croissance rapide, et développait sa gamme d'opération à des pressions et des températures plus élevées. Un obstacle significatif de la progression était le manque des données précises et normalisées des propriétés thermodynamiques de l'eau et de la vapeur. Différents ensembles de "tables de vapeur " des propriétés ont été développées, en particulier à des pressions plus élevées. En raison de la nature de plus en plus internationale de l'industrie de l'énergie électrique, conventionnelle, des efforts ont été entrepris dans beaucoup de pays, la coopération internationale a été solidifiée par une série de conférences internationales sur les "tables de vapeur".

L'avènement du nucléaire vers les années 1950, surgi le problème de la limitation de la gamme de la température et de la pression, de ce fait ASME, a mené des recherches afin de combler ces lacunes, d'améliorer l'exactitude des données et au développement de nouvelles normes pour la détermination des propriétés de l'eau et de la vapeur. La sûreté des installations nucléaires de la nouvelle génération requiert une connaissance incontestable des propriétés de l'eau et/ou de la vapeur à tout instant selon la température et/ou la pression.

Au début des années 1990, l'apparition des codes d'analyse de sûreté des installations nucléaires fait relancer la recherche sur l'exactitude et l'élargissement de la gamme des propriétés de l'eau, dès lors, l'IAPWS a commencé à développer de nouvelles normes, tirant

profit de nouvelles données et des avancées technologiques pour développer des formulations nouvelles des propriétés thermodynamiques.

Plusieurs manières de s'intéresser aux propriétés thermodynamiques et de transport : tout d'abord à travers les différentes équations d'état et ensuite par un certain nombre de fonctions d'approximation. Parallèlement au développement des codes de calcul thermohydrauliques et dans un souci de gain de temps et de place-mémoire des gros ordinateurs utilisés, diverses formulations d'approximation de propriétés se sont développées.

Dans cette étude nous présentons le formalisme, soit le plus utilisé dans le domaine nucléaire, de l'IAPWS (association internationale pour les propriétés de l'eau et de la vapeur) utilisé par le code système Relap et le code CFD ANSYS-CFX. Dans le domaine double phase (mélange de liquide et de vapeur à saturation), les propriétés thermodynamiques de l'eau dépendent d'une seule variable d'état (on retient en général la température, la pression ou quelquefois l'enthalpie pour les codes de calcul).

Une autre approche semble donc s'offrir à nous, où l'on cherche à s'inspirer du traitement de l'information effectué par le cerveau. Les réseaux de neurones artificiels sont dotés de propriétés qui, comme l'apprentissage à partir d'exemples, semblent prometteuses dans certains domaines d'applications. En fait, est considéré comme éligible, tout problème qui se représente sous la forme d'une fonction de mise en correspondance entre un espace d'entrée et un espace de sortie, dès lors que l'on ne dispose que d'exemples de comportement de cette fonction. Les réseaux de neurones utilisés dans cette étude, les réseaux supervisés, sont appliqués pour prédire les propriétés thermodynamiques et de transport pour l'eau légère aux états liquide et vapeur.

L'objectif de la présente étude est la prédiction de l'ébullition nucléée sous-saturée convective en utilisant les nouvelles techniques et approches de simulation numériques les plus avancées. Le code CFD ANSYS FLUENT, avec le couplage du modèle RPI et les UDF développées, est l'outil de calcul qui a été choisi pour réaliser cette étude. La démarche de sélection des modèles numériques a été la suivante. Dans un premier temps nous nous sommes attachés à déterminer les modèles les plus aptes à simuler l'ébullition nucléée pour un fluide diphasique. Les implantations Fluent de différents modèles de turbulence, présélectionnés sur des bases bibliographiques, ont ainsi été évaluées grâce aux résultats expérimentaux disponibles dans la littérature. Dans ce contexte, nous avons organisé la présente thèse en cinq chapitres :

Le premier chapitre est consacré à l'état de l'art ou on a présenté les deux types de réacteurs, soient les plus répondus dans le monde et leur modes de fonctionnement. Un aperçu sur l'importance de la sûreté des installations nucléaires, l'ébullition nucléée sous-saturée et l'application des CFD pour la modélisation de ces phénomènes pour la prédiction des fonctionnements anormaux des réacteurs. Une synthèse bibliographique nous a permis de rassembler les travaux publiés qui traitent l'utilisation de la mécanique des fluides numérique pour la modélisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective afin d'améliorer la prédiction des grandeurs locales dans les écoulements diphasiques bouillants principalement dans le domaine nucléaire et enfin les motivations et objectifs du projet de thèse sont présentés.

Le deuxième chapitre a pour objectif de présenter la modélisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective. Des méthodes de prédiction des différentes limites d'ébullition des différentes configurations d'écoulements bouillants convectifs en relation avec les régimes de transfert thermique rencontrés. Une analyse bibliographique de modèles mécanistes

d'ébullition nucléée qui sont les seuls pouvant fournir les conditions limites à la paroi nécessaires aux codes de calcul de type CFD.

Le troisième chapitre est consacré exclusivement à la présentation de la structure du code ANSYS-Fluent ou les différentes techniques pour modéliser les processus physiques impliqués dans l'ébullition nucléée sous-saturée convective sont examinées. Les nombreux modèles et les options actuellement disponibles dans la version V14.0.5 sont présentés.

Quant au quatrième chapitre, on y présente la modélisation des propriétés thermodynamiques et de transports de l'eau à l'état liquide et vapeur ainsi que l'implémentation des UDF. Une synthèse bibliographique nous a permis de rassembler les fondements théoriques du formalisme de l'association internationale pour les propriétés de l'eau et de la vapeur (IAPWS). Présentation des réseaux de neurones d'une façon générale, nous avons mis l'accent sur les réseaux non bouclés type MLP (Multi-Layer Perceptron) du fait qu'ils sont utilisés dans la modélisation des propriétés de l'eau et de la vapeur. En fin, le modèle neuronal établi a été confronté aux autres modèles classiques dans le but de mesurer leurs performances.

On se propose dans ce chapitre, le cinquième, de présenter l'ensemble des éléments nécessaires à la mise en œuvre numérique et la comparaison entre modèle numérique et mesures expérimentales. Nous apporterons alors une description détaillée des benchmarks afin de mettre en avant les caractéristiques du domaine d'étude et de dégager une stratégie de modélisation nécessaire à la mise en place des calculs numériques (code de calcul ANSYS-FLUENT).

On trouvera, en conclusion, une synthèse des différents travaux menés et des apports de ce travail de thèse. Enfin diverses perspectives de recherche ouvertes par ce travail seront exposées.

CHAPITRE I

Etat de l'art

L'objectif de ce chapitre est de dresser un état actuel des connaissances, à partir de la littérature scientifique, sur les écoulements en ébullition sous saturée dans une conduite simulant un canal d'un réacteur nucléaire comportant un crayon combustible. La première partie de ce chapitre, après une succincte histoire du nucléaire, résume le fonctionnement des deux types de réacteurs les plus répondus dans le monde ainsi que leur sûreté, qui vise à prévenir tout risque de contamination de l'environnement.

Les sections suivantes résument l'état de l'art sur la modélisation numérique par une approche CFD pour la prédiction de la fraction de la vapeur d'un écoulement en ébullition sous saturée.

I.1. Principaux types de réacteurs

La découverte, dans les toutes dernières années du XIX^{ème} siècle, de la radioactivité naturelle a valu le prix Nobel à Henri Becquerel et Pierre et Marie Curie. La radioactivité artificielle fut découverte au début des années trente par Frédéric et Irène Joliot-Curie et la fission juste avant la deuxième guerre mondiale : la scène était dressée.

Si l'on excepte les "réacteurs naturels" d'Oklo, l'histoire des réacteurs nucléaires commence le 2 décembre 1942 sous les tribunes d'un stade de Chicago, où s'établit, dans le réacteur CP1, construit sous la direction d'Enrico Fermi, la première réaction en chaîne entretenue. La première, bien modeste, production d'électricité nucléaire remonte à 1951 et il faudra attendre le milieu des années cinquante pour les premiers réacteurs électrogènes "commerciaux" en Union soviétique et Grande-Bretagne… et le premier sous-marin nucléaire américain.

En l'an 2009, 55 ans plus tard, quelques 439 réacteurs électrogènes ont produit 2400 milliards de kWh, plus de 17 % de la production mondiale d'électricité, ce qui égale la production de tous les barrages hydrauliques, la moyenne mondiale va progresser 19% en 2015 et 22% en 2030 [1]. La figure I.1 montre la répartition des réacteurs de puissance à travers le monde.

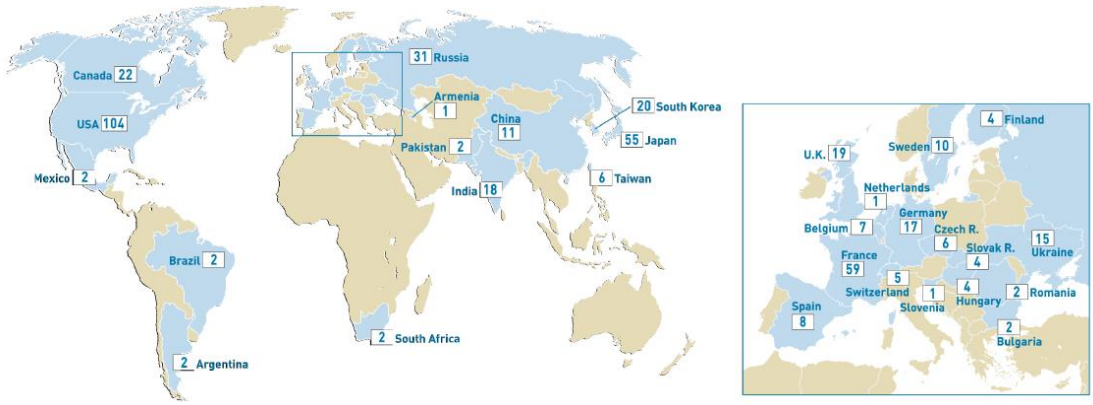


Fig.I.1: Réacteurs de puissance (NPP) dans le monde [2]

Une centrale nucléaire est destinée à extraire l'énergie dégagée par les réactions de fission des noyaux de combustible nucléaire (le plus fréquemment de l'oxyde d'uranium enrichi UO_2) qui se produit spontanément au sein de ce combustible afin de produire de l'électricité. Il s'agit de la réaction en chaîne. Cette réaction dégage de la chaleur. Cette chaleur demande alors à être récupérée pour mettre en rotation l'alternateur. Pour réaliser cette conversion thermomécanique, on utilise un fluide caloporteur. Dans l'industrie nucléaire, l'eau est généralement le fluide caloporteur retenu. Cette eau chauffée par la réaction de fission permet d'obtenir de la vapeur. La pression existante au sein de cette vapeur met en rotation une turbine sur laquelle est fixé l'alternateur. Ce principe de fonctionnement pour les centrales nucléaires se résume au diagramme suivant, figure I.2 :



Fig.I.2: Diagramme de fonctionnement des centrales

Les différentes centrales peuvent être classées en filières nucléaires, définies par les natures du combustible, du modérateur (pour les réacteurs à neutron thermique) et du fluide caloporteur. Dans une grande majorité des réacteurs nucléaires, l'eau circulant dans le cœur assure à la fois les fonctions de fluide caloporteur et de modérateur. Les filières de réacteurs les plus répandues en 2014 sont en effet les réacteurs à eau sous pression REP (PWR pour Pressurized Water Reactor en Anglais) et les réacteurs à eau bouillante REB (BWR pour Boiling Water Reactor en Anglais) [3], la figure I.3 montre les portions des réacteurs en utilisation à travers le monde.

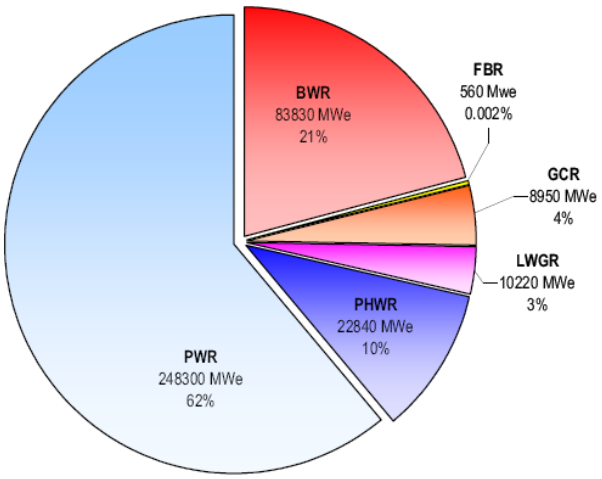


Fig.I.3: Type de réacteurs en utilisation à travers le monde [2]

I.1.1. Réacteurs à eau pressurisée PWR

Dans les réacteurs à eau sous pression, figure I.4, l'eau ordinaire joue à la fois le rôle de modérateur et de caloporteur. L'eau est maintenue à forte pression, environ 150 bars, grâce à un pressuriseur, sa température est de l'ordre de 330 degrés. Le combustible se présente sous la forme d'assemblages de crayons d'environ 1 cm de diamètre et 4 m de hauteur, placés verticalement dans une cuve [4]. Chaque crayon est un tube en zircaloy (alliage à base de zirconium) rempli de

pastilles d'oxyde d'uranium enrichi à 3 ou 4 %. On peut aussi utiliser du combustible "MOX" (mélange d'oxydes d'uranium et de plutonium).

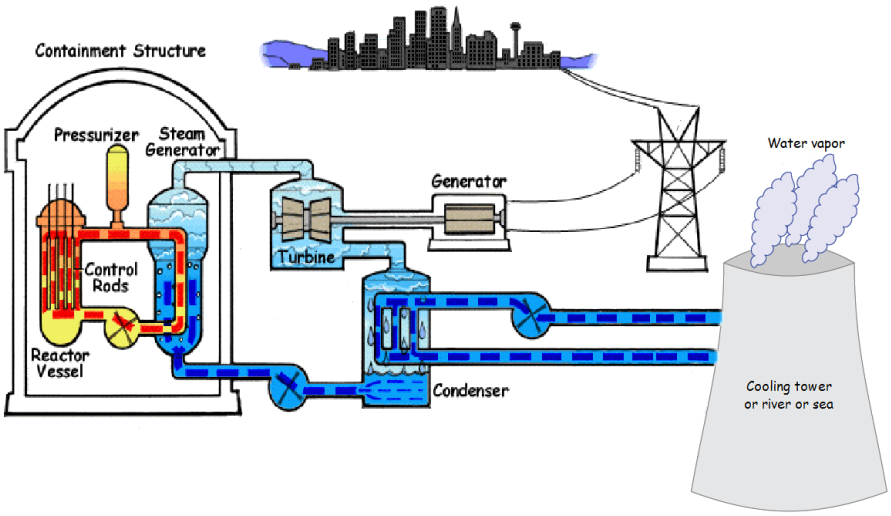


Fig.I.4: Schéma de principe d'un PWR

Le Réacteur à eau sous pression est le réacteur électrogène le plus fréquent. Son architecture est principalement caractérisée par la présence de deux circuits de refroidissement [5]: le circuit primaire, dans lequel circule le fluide de refroidissement du cœur et le circuit secondaire, qui sert à la production de vapeur et à la production d'énergie mécanique à la turbine. Le cycle thermodynamique d'un PWR est le cycle de Rankine.

Un réacteur PWR se décompose en trois parties ou plutôt circuit. Dans le circuit primaire, la chaleur dégagée par les réactions de fission est emmenée vers l'extérieur du cœur du réacteur via l'eau du circuit primaire qui sert de modérateur et de caloporteur. Elle reste sous forme liquide en raison de la pression élevée (de l'ordre de 150 bars) qui règne dans le circuit [6]. L'eau du circuit primaire passe ensuite dans un échangeur (générateur de vapeur) afin que la chaleur du circuit primaire soit transférée au circuit secondaire. N'étant pas sous pression, l'eau du circuit secondaire se vaporise et entraîne les turbines produisant l'électricité. Ensuite, cette eau passe par le condensateur, où, par refroidissement elle redevient liquide. Le circuit tertiaire ou circuit de refroidissement a pour objectif de condenser la vapeur. Ce peut être un circuit d'eau de rivière ou bien des tours de refroidissement. Cette eau sera, en fin de chaîne énergétique, refroidie au contact de l'air circulant dans les aéroréfrigérants par le courant d'air qui monte dans la tour. La figure I.5 présente la variation de la température dans les circuits du réacteur de type PWR.

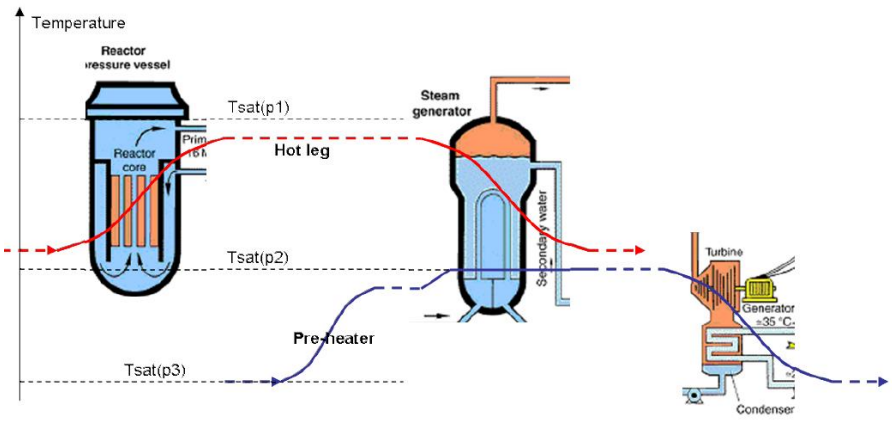


Fig.I.5: Variation de température dans les circuits PWR

I.1.2. Réacteurs à eau bouillante BWR

L'autre variante des réacteurs à eau est celle des réacteurs à eau bouillante, figure I.6. Il constitue le second type de réacteur le plus utilisé pour la production d'électricité. Ce réacteur, tout comme le PWR, utilise un combustible à oxyde d'uranium enrichi ou un mélange oxyde d'uranium-oxyde de plutonium (MOX) [5].

L'eau circulant dans le cœur assure à la fois les fonctions de caloporteur et de modérateur. Le contrôle neutronique du cœur est uniquement assuré par des barres de contrôle. L'eau de refroidissement est partiellement vaporisée dans le cœur. Du fait de l'encombrement des parties supérieures de la cuve par les séparateurs et sécheurs, les barres de contrôle sont insérées par le bas du cœur. La principale différence entre les types de réacteurs est la pression qui est environ deux fois plus faible pour l'eau du circuit primaire, de sorte que l'ébullition se produit dans le cœur. A la sortie du cœur, après séparation des gouttelettes résiduelles, la vapeur est directement envoyée aux turbines. Le schéma de principe du BWR est donc plus simple que celui du PWR, la contrepartie est la nécessité d'une radioprotection au niveau des circuits classiques, notamment des turbines, car l'eau s'active légèrement dans le cœur (dans les PWR, le circuit secondaire est totalement exempt de radioactivité, puisqu'il n'y a pas d'échange de matière au niveau des générateurs de vapeur) [7].

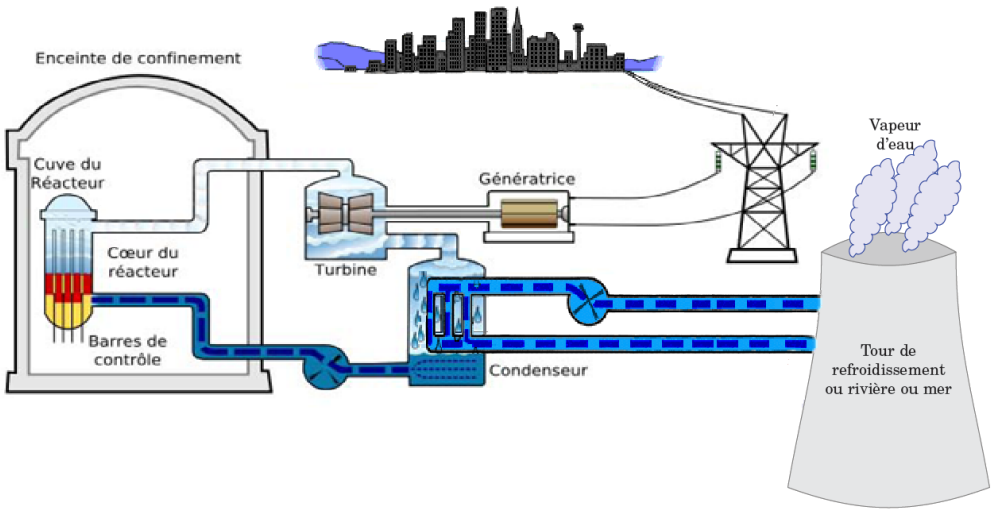


Fig.I.6: Schéma de principe d'un BWR

Alors que la conception d'ensemble des réacteurs à eau sous pression a peu évolué depuis les premiers prototypes, les réacteurs à eau bouillante ont fait l'objet de nombreuses évolutions qui concernent à la fois le mode de fonctionnement global de l'installation et les simplifications permanentes qui ont été apportées au circuit de refroidissement ou aux systèmes de sauvegarde.

Le cycle de base d'un réacteur à eau bouillante est un cycle de Rankine. A l'origine, ce concept de réacteur utilisait un cycle dual. La vapeur produite dans le cœur était séparée dans un ballon de vapeur pour être turbinée. L'eau à saturation du ballon passait par la suite dans un générateur de vapeur qui, dans sa partie secondaire, utilisait à la turbine de la vapeur à une pression légèrement inférieure à la pression primaire. En sortie de turbine, après condensation, l'eau était redirigée vers la cuve et le secondaire du générateur de vapeur. La turbine était esclave de la puissance neutronique par l'intermédiaire d'une vanne de régulation du débit vapeur du circuit secondaire [7]. La figure I.7 présente la variation de la température dans les circuits du réacteur de type PWR.

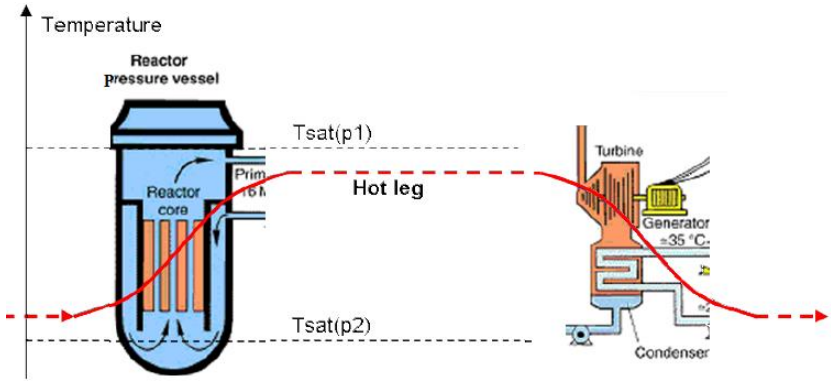


Fig.I.7: Variation de température dans les circuits BWR

I.2. Sûreté des réacteurs

La sûreté des réacteurs, visant à prévenir tout risque de contamination de l'environnement, est garantie par trois barrières de confinement de la radioactivité :

1. la gaine des crayons de combustible,
2. le circuit primaire,
3. le Bâtiment Réacteur ou BR.

C'est pourquoi, il est nécessaire de prendre en compte, lors de la conception thermohydraulique des réacteurs, tous les phénomènes possibles pouvant affecter ces barrières, en considérant tous les régimes de fonctionnement de la centrale : nominal, transitoire, incidentel ou accidentel. La figure I.8 montre la plage de la température d'opération du circuit primaire d'un PWR comparativement à un BWR.

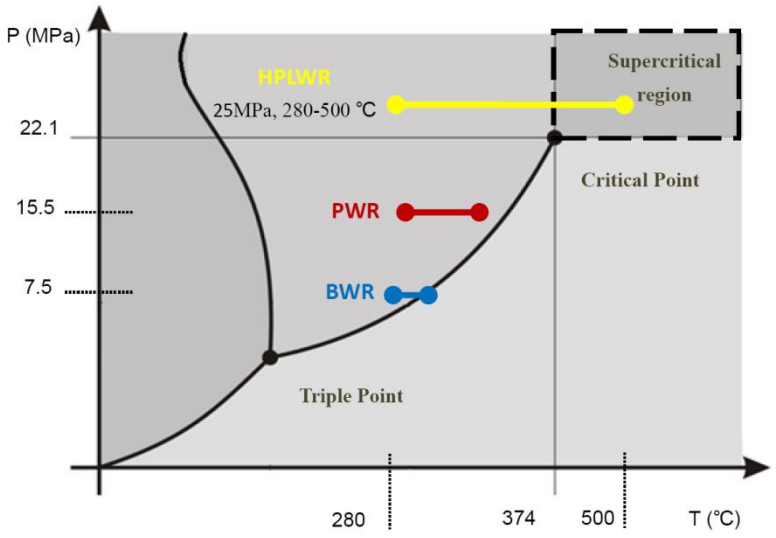


Fig.I.8: Conditions d'opération d'un PWR et d'un BWR [8]

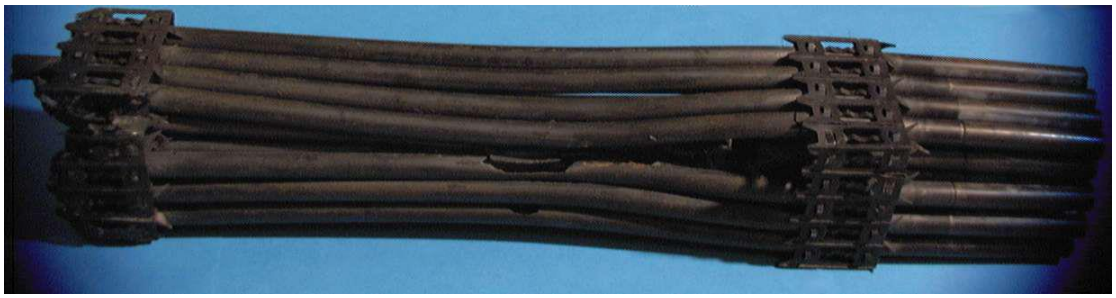
La sûreté et l'amélioration des performances des centrales nucléaires nécessitent d'avoir une connaissance précise des écoulements dans les circuits des réacteurs. La thermohydraulique, qui s'intéresse à la modélisation globale d'un réacteur dans lequel circule le fluide caloporteur, permet de comprendre le comportement du système en cas d'accident ou de prévoir son évolution à la

suite d'un incident d'exploitation. La majorité des études de thermohydraulique menées aux laboratoires porte sur le comportement de ce fluide en cas d'écart au fonctionnement normal.

L'accident le plus communément envisagé pour le dimensionnement des systèmes de sûreté d'un PWR est celui de la perte du réfrigérant du circuit primaire qui refroidit le cœur du réacteur (LOCA pour Lost of Coolant Accident en Anglais). La violente dépressurisation qui en découlerait provoquerait l'ébullition de l'eau du circuit et la formation d'un écoulement diphasique (mélange d'eau et vapeur), dont il s'avère indispensable de bien prédire les caractéristiques pour déterminer avec suffisamment de fiabilité le comportement de l'installation. L'ébullition de l'eau peut se rencontrer aussi lors de l'éjection d'une barre de contrôle. Dans les deux cas, un film de vapeur, plus mauvais conducteur de chaleur que l'eau, pourrait se former soudainement autour d'un ou plusieurs crayons. Ceux-ci seraient alors "isolés" de l'eau de refroidissement et la température du combustible pourrait atteindre très rapidement des valeurs très importantes, jusqu'à la fusion de la gaine métallique qui sépare l'uranium de l'eau (voir la figure I.9) [9].



(a) Crayon combustible



(b) Assemblage combustible

Fig.I.9 : Endommagement par "isolation" de la paroi chaude du liquide de refroidissement [9]

Concrètement, la maîtrise de l'extraction de la chaleur de cœurs de réacteurs nécessite l'acquisition de connaissances sur les écoulements de fluides diphasiques (c'est-à-dire des mélanges d'eau et de vapeur) que l'on étudie de l'échelle microscopique à celle du système complet. Cette étude étant très complexe, ce domaine repose en grande partie sur la modélisation et la simulation numérique.

Pour mieux comprendre le phénomène de l'ébullition dans le cœur d'un réacteur nucléaire, il est opportun de rappeler quelques concepts de base du fonctionnement d'une centrale nucléaire. De très nombreuses formules ont été expérimentées depuis les débuts de l'ère nucléaire industrielle mais seulement un petit nombre d'entre elles ont été sélectionnées pour les différentes générations de réacteurs opérationnels électrogènes. Cette problématique de sûreté nucléaire est décrite plus précisément dans cette partie introductive.

I.3. Ebullition nucléée sous refroidie

L'écoulement diphasique apparaît trompeusement simple, mais il est assez complexe à modéliser. La plupart des processus qui impliquent les écoulements diphasiques se produisent dans des systèmes fermés (généralement non accessibles à l'observation directe) d'où la modélisation est un outil nécessaire pour mieux comprendre ces phénomènes. Les résultats de la simulation peuvent ensuite être utilisés comme base pour l'amélioration de la conception et les analyses de sûreté du système.

La plupart des études de modélisation sur les écoulements diphasiques réalisées au cours des 30 dernières années, ont porté sur les conditions de haute pression adaptées pour la plupart des applications industrielles, en particulier les centrales nucléaires. Le développement de centrales nucléaires a donné une impulsion pour l'étude et la modélisation des écoulements à ébullition sous des conditions de haute pression. Bien que le phénomène des écoulements à deux phases ne soit pas encore entièrement discerné, les tentatives de caractérisation et modélisation mathématique de ce type d'écoulements ont parcourus un long chemin depuis ses modestes débuts dans les années 1960. L'introduction de divers modèles mécanistes, cartes de régime d'écoulement, relations constitutives, corrélations empiriques et leurs améliorations ultérieures et grâce aux progrès parallèles dans la technologie informatique a conduit à l'émergence de différents codes de modélisation informatique spécialisés. La prolifération de la conception spécifique et codes hautement spécialisés pour l'industrie nucléaire en dit long sur les progrès réalisés dans ce domaine.

Les modèles numériques pour des applications à haute pression (par exemple, les centrales nucléaires) ne sont pas utilisables pour celles de basse pression (par exemple les réacteurs de recherche nucléaire) en raison des différences fondamentales dans des conditions d'exploitation. Pour les codes qui puissent être utilisés, des modifications sont nécessaires pour être présentée sous la forme de nouveaux concepts dans la modélisation de la dynamique de la bulle ainsi que des corrélations appropriées et / ou relations constitutives [10], [11], [12], [13], [14]. Ces résultats de recherche ont des implications importantes en particulier dans la conception et les analyses de sûreté des réacteurs de recherche nucléaires.

L'ébullition est l'une des méthodes les plus efficaces de transfert de chaleur. Elle présente un avantage lorsque les flux de chaleur élevés peuvent être obtenus même à de faibles variations de la température de la surface chauffée. Cependant, le processus d'ébullition doit être contrôlé car il peut facilement devenir instable et les conditions de fonctionnement optimales sont souvent confinées à une gamme étroite. Dans les canaux d'ébullition, la chaleur est transférée soit par l'ébullition nucléée ou par la convection forcée à deux phases [15].

Le processus de transfert de chaleur par ébullition est largement utilisé dans les industries chimiques, pétrochimiques et de production de l'énergie. Les applications industrielles comprennent la production de vapeur dans les chaudières, évaporateurs dans les précédés industriels et les réacteurs nucléaires. La conception des chaudières à tubes, fours tubulaires, les réacteurs nucléaires refroidis à l'eau, équipement de réfrigération et de climatisation, pompes à

chaleur, rebouilleurs, condenseurs et beaucoup d'autres éléments dans les installations chimiques et électriques dépendent de la connaissance de l'interaction thermo-fluide pendant l'ébullition par convection.

L'intérêt du phénomène de l'écoulement à ébullition sous-refroidie est motivé par les besoins de l'industrie nucléaire [13], [14]. Comme les expériences réelles conduisant à l'accident de perte du caloporteur (LOCA) ne sont pas pratiques, pour effectuer des analyses de sûreté, la modélisation numérique en condition de travail doit être entreprise pour analyser l'événement.

Les processus à deux phases sont rencontrés dans une variété de systèmes d'ingénierie et naturels, y compris les systèmes à ébullition utilisés dans les centrales nucléaires. Au cours des trente dernières années, les connaissances théoriques et la base de données empiriques pour l'écoulement diphasique a considérablement augmenté. Tentatives de modéliser analytiquement ces écoulements ont progressé à partir des premières méthodes semi-empiriques aux modèles mécanistes à deux fluides d'aujourd'hui.

Les cartes du régime d'écoulement et les corrélations utiles pour la modélisation numérique est le résultat des travaux expérimentaux sur les écoulements à ébullition. Cependant, en raison de la spécificité opérationnelle des écoulements à ébullition, les corrélations empiriques ne peuvent pas couvrir toutes les situations envisageables. Dans les cas où une solution analytique ne peut être établie, les sous-modèles sont proposés en particulier pour la croissance de la bulle, cycle de l'ébullition, interaction des bulles dans un écoulement et notamment les mécanismes de transfert de chaleur, entre autres.

En raison de la complexité du comportement de l'écoulement polyphasique, il présente un grand défi pour l'étude des mécanismes d'écoulement et la mesure de l'écoulement polyphasique. La mesure précise des paramètres de l'écoulement à deux phases a toujours été une question clé et un travail difficile depuis des décennies. Bien que certains progrès aient été obtenus, la solution n'est pas encore satisfaisante jusqu'ici.

I.4. Mécanique des fluides numériques

La mécanique des fluides numériques (CFD pour Computational Fluid Dynamics en Anglais) est une technologie de calcul qui nous permet d'étudier la dynamique des choses qui sont en mouvement. Le code CFD nous donne le pouvoir de simuler les écoulements de gaz et de liquides, de transfert de chaleur et de masse, déplacement des corps, physique polyphasique, réactions chimiques, interactions fluide-structure et l'acoustique grâce à la modélisation informatique. En utilisant le code CFD, nous pouvons construire un "prototype virtuel" d'un système ou d'un dispositif que nous voulons analyser et ensuite appliquer la physique du monde réel et de la chimie au modèle et le code nous fournira des images et des données, qui prédisent la performance de cette conception. La dynamique des fluides numériques (CFD) présente un excellent outil pour accomplir un tel objectif en raison de sa capacité à simuler les écoulements chimiquement réactifs, transfert de chaleur et de masse, ainsi que le mélange et les phénomènes connexes impliquant la turbulence [16].

La base fondamentale de tout problème CFD est les équations de Navier-Stokes, qui définissent tout écoulement de fluide monophasique. Ces équations peuvent être simplifiées en supprimant les termes décrivant la viscosité pour obtenir les équations d'Euler. Le facteur le plus fondamental en CFD est de savoir comment traiter un fluide continu de manière discrétisée sur un ordinateur. Une méthode consiste à discrétiser le domaine spatial en petites cellules pour former un maillage volumique ou une grille et ensuite appliquer un algorithme approprié pour résoudre les équations

du mouvement (équations d'Euler pour les non visqueux et de Navier-Stokes pour un écoulement visqueux). En outre, une telle maille peut être soit irrégulière (par exemple constitué de triangles en 2D ou solides pyramidaux en 3D) soit régulière (par exemple constitué de carrés en 2D ou volumes en 3D).

Il est possible de résoudre directement les équations de Navier-Stokes pour les écoulements laminaires et pour les écoulements turbulents lorsque toutes les échelles de longueur pertinentes peuvent être résolues par la grille (une simulation numérique directe). Cependant, en général, la gamme des échelles de longueur appropriée au problème est plus grande que même les ordinateurs massivement parallèles peuvent d'aujourd'hui modéliser. Dans ces cas, des simulations d'écoulement turbulent nécessitent l'introduction d'un modèle de turbulence.

La simulation à grande échelle (LES pour Large Eddy Simulations en Anglais) et la formulation Moyenne de Reynolds Navier-stokes (RANS pour Reynolds-averaged Navier-Stokes en Anglais) avec le modèle k-ε ou le modèle de contrainte de Reynolds sont deux techniques pour faire face à ces échelles.

Dans de nombreux cas, d'autres équations sont résolues en même temps que les équations de Navier-Stokes. Ces autres équations peuvent inclure celles décrivant la concentration des espèces (de transfert de masse), réactions chimiques, transfert de chaleur, etc. Les codes les plus avancés permettent la simulation de cas plus complexes impliquant des écoulements multiphasiques (par exemple liquide/gaz, solide/gaz, liquide/solide), des fluides non-newtoniens (tel que le sang) ou les écoulements chimiquement réactifs (comme la combustion).

I.5. Monographie

Dans cette section, nous présentons une synthèse bibliographique, des travaux publiés qui traitent l'utilisation de la mécanique des fluides numérique CFD pour la modélisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective afin d'améliorer la prédiction des grandeurs locales dans les écoulements diphasiques bouillants principalement dans le domaine nucléaire. Quelques exemples de ces références ont été pris comme Benchmark pour la validation de notre modèle.

W.K. In et al. ont entamé la vérification et la validation des codes CFD dans les assemblages combustibles des réacteurs nucléaires par l'analyse numérique de l'écoulement, transfert de chaleur et évaluation des modèles de turbulence RANS dans un assemble combustible. Le même auteur, dans un assemblage combustible avec des ailettes de mélange pour le brassage du réfrigérant, a réalisé une étude numérique du brassage du liquide de refroidissement causé par les déflecteurs de débit dans un combustible nucléaire [17], [18], [19].

T. Ikeno et T. Kajishima ont utilisé le modèle de turbulence LES par l'analyse de structure dynamique d'un écoulement dans un assemblage combustible carré [20]. W. K. In et al. Ont étudié l'amélioration de transfert de chaleur dans un assemblage combustible muni d'ailettes de mélange par la publication en 2008 d'un article sur le calcul numérique de l'amélioration du transfert de chaleur dans un assemblage combustible avec des ailettes de mélange d'un réacteur de puissance type PWR [21].

H. Anglart et al. ont entamé l'étude des écoulements diphasiques dans un assemblage combustible, en effet les auteurs ont prédit l'écoulement et la distribution de phase dans l'assemblage combustible avec des espaceurs en utilisant un code CFD, T. Ikeno et al., à leur tour ont prédit numériquement la distribution du vide d'un écoulement turbulent diphasique dans un sous canal d'un assemblage combustible carré, suivi par W. K. In et al. avec l'évaluation par CFD des

modèles diphasiques pour un écoulement à ébullition sous saturé dans un assemblage combustible à six crayons [22], [23], [24].

W. K. In et al. sont revenus sur l'utilisation des codes CFD dans les réacteurs nucléaires de nouvelles générations, en effet les auteurs, pour l'optimisation des ailettes de mélange, ont publié un article sur l'analyse des écoulements pour la conception optimale des ailettes de mélange d'un assemblage combustible d'un réacteur PWR. Les mêmes auteurs pour le même type de réacteurs ont, dans un autre article, publié leur travaux sur le calcul et les corrélations empiriques de la perte de pression dans les assemblages combustibles avec grilles d'espacement [25], [26].

Plus tard, des études sur la compréhension des transferts de chaleur dans les assemblages combustibles des réacteurs nucléaires de puissance type PWR ont été réalisées. En effet, M. E. Conner, et al., ont communiqué, dans la conférence Top Fuel en 2003, un article intitulé comprendre et prédire le champ d'écoulement dans un cœur de réacteur, E. Krepper, et al., dans les écoulements bouillants sous refroidis ont utilisé les CFD pour la conception des assemblages combustibles par la validation d'un modèle numérique et enfin S. Mimouni, et al. ont modélisé, avec le code CFD NEPTUNE, la cavitation et l'écoulement bouillant à bulles [27], [28], [29].

E. Merzari, H. Ninokata, E. Baglietto ont réalisé des études, numériques par des codes CFD, sur les différents types d'assemblages combustibles en réseau étanche (Tight-Lattice Fuel Bundle) des réacteurs rapides à caloporteur sodium (SFR, pour Sodium Fast Reactors en Anglais) et la filière des réacteurs à eau légère de haute conversion (HCLWR, pour High Conversion Light Water Reactor en Anglais). H. Ninokata, E. Merzari, A. Khakim ont mené, sur le même type d'assemblages combustible des réacteurs de nouvelles générations et avec le même outil, une analyse des écoulements turbulent à bas Reynolds [30], [31]. D. Chang, S. Tavoularis ont réalisé des études sur les écoulements turbulents instationnaires dans un assemblage combustible avec 37 crayons [32].

X. Cheng, et al., ont étudié le transfert de chaleur dans le réacteur refroidi par de l'eau à l'état supercritique (SCWR, pour SuperCritical Water Reactor en Anglais) réacteur de génération IV le plus à l'étude au Canada. W. Pointer et al., ont communiqué en 2008 un article sur la simulation des écoulements turbulents, en utilisant le modèle RANS d'un code CFD, dans un assemblage combustible d'un réacteur surgénérateur rapide (FBR, pour Fast Breeder Reactors en Anglais) [33], [34].

Le défi d'utilisation des codes CFD dans la recherche et développement dans le domaine nucléaire est l'implication de ces codes dans l'analyse de sûreté des installations nucléaires par le groupe de travail sur l'analyse et la gestion des accidents (WGAMA, pour Working Group on Analysis and Management of Accidents en Anglais), en effet, B. L. Smith a évalué les CFD dans la sûreté des réacteurs nucléaires (NRS, pour Nuclear Reactor Safety en Anglais) par l'étude des écoulements monophasiques. Pour les écoulements diphasiques, D. Bestion, et al. ont étudié l'extension des codes CFD aux problèmes de sûretés dus aux écoulements diphasiques et enfin J. Mahaffy a étudié le choc thermique pressurisé (PTS, pour Pressurized Thermal Shock en Anglais) en synthétisant les résultats d'une jonction tee [35], [36] [37].

L'utilisation de la mécanique multi-fluide numérique (CMFD, pour Computational Multi-Fluid Dynamics en Anglais) dans le domaine nucléaire est initiée par M. Z. Podowski en publiant un article sur la cohérence de la modélisation mécaniste multidimensionnelle d'un écoulement diphasique gaz/liquide suivi par R. T. Lahey Jr. en publiant un article sur la simulation numérique directe des écoulements diphasiques et enfin, dans l'analyse multi-physique, J. S. Lee et al. ont communiqué un article, en 2009, intitulé analyse de point chaud autour de la zone de contact entre

l'assemblage de combustible et la grille d'espacement [38], [39] [40]. Enfin mon collègue, Bouaichaoui du Centre de Recherche Nucléaire de Birine à réaliser des mesures expérimentales suivi d'une étude numérique, publier en 2014, en utilisant le code CFD ANSYS-CFX des transferts thermiques en convection forcée lors du changement de phase dans un canal de géométrie annulaire simulant, dans une certaine mesure, un canal d'un réacteur nucléaire avec un assemblage combustible comportant un seul élément combustible [41].

I.6. Motivations et objectifs de l'étude

Les phénomènes d'ébullition ont fait l'objet d'études approfondies lors de la conception thermohydraulique des réacteurs nucléaires. En effet en régime d'ébullition il y a d'un côté le risque d'apparition des phénomènes d'instabilité de l'écoulement et de l'autre côté le risque d'une excursion de puissance pour les configurations à coefficient de rétroaction de vide positif.

La présente étude s'inscrit dans le cadre de la prédiction de ce phénomène en utilisant les nouvelles techniques et approches de simulation numériques les plus avancées. Les phénomènes de transfert de chaleur et de changement de phases sont principalement régis par des mécanismes locaux de la couche limite adjacente à la paroi chauffée, voir la figure I.10 ci-dessous, (nucléation de bulles, croissance des bulles, glissement et détachement des bulles, concentration des bulles sur la paroi, éclatement après détachement, etc.).

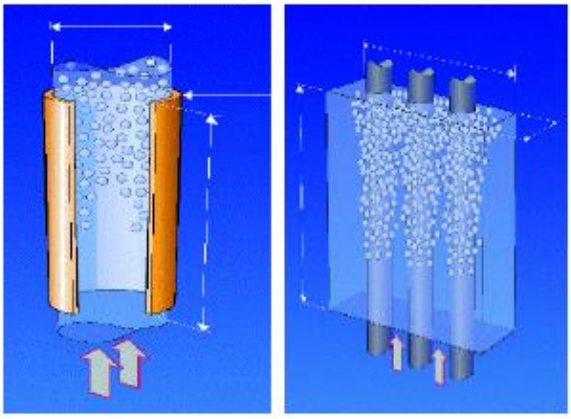


Fig.I.10: Couche limite adjacente à la paroi chauffée [42]

Traditionnellement, ces phénomènes sont prédits par des corrélations empiriques qui souvent dépendent des conditions des tests dans lesquelles elles sont issues et ne reflètent donc pas de façon précise la dynamique de l'ébullition et les phénomènes qu'elle engendre.

Les objectifs du projet de thèse est donc de chercher :

1. à établir une simulation par l'approche CFD qui tient compte des mécanismes locaux de la couche limite adjacente à la paroi chauffée (nucléation de bulles, croissance des bulles, glissement et détachement des bulles, concentration des bulles sur la paroi, éclatement après détachement, etc.).
2. le modèle le plus approprié pour la simulation de ces phénomènes dans les conditions d'opération d'une centrale nucléaire.
3. développer des compétences pour le développement des modèles en utilisant un logiciel de simulation CFD.

CHAPITRE II

Modélisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective

Lors du chapitre précédent, on s'est intéressé aux différents régimes d'écoulement à travers les sous canaux d'un certains types de réacteurs classées en filières. L'étude détaillée s'est portée sur les PWR et les BWR soit les plus répandus au monde.

L'objectif de ce chapitre est de mettre en évidence les méthodes de prédiction des différentes limites d'ébullition locale ainsi que l'évaluation du transfert de chaleur pour l'ébullition nucléée sous-saturée.

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons présenté une description générale des différentes configurations d'écoulements bouillants convectifs en relation avec les régimes de transfert thermique rencontrés.

La seconde partie est consacrée aux modèles mécanistes d'ébullition nucléée qui sont les seuls pouvant fournir les conditions limites à la paroi nécessaires aux codes de calcul de type CFD, le modèle RPI implanté dans le code ANSYS-Fluent est présenté en détail dans cette partie.

II.1. Configurations d'écoulements et les mécanismes de l'ébullition en convection forcée à l'intérieur d'un tube chauffant

La Figure II.1 représente l'évolution d'un écoulement dans un canal vertical chauffé aux parois de façon uniforme avec un débit constant du liquide sous-refroidi à l'entrée, la chaleur est transférée au liquide sous-refroidi en termes de convection forcée monophasique [43]. Pour un flux de chaleur donné, l'évolution des températures pariétales et du fluide le long du tube, configurations de l'écoulement ainsi que les régions de transfert de chaleur sont données sur la figure susdite, sur cette dernière, on distingue six régions, où se produisent des phénomènes bien caractéristiques :

- **Région A** : dans la partie inférieure du tube, la température de la paroi et celle du liquide augmentent. Tant que la température de la paroi est inférieure à un certain seuil (température minimale requise pour déclencher la nucléation), on a affaire à un écoulement monophasique liquide dont le transfert de chaleur avec la paroi est appelé convection monophasique liquide. Cet écoulement peut être laminaire ou turbulent.

- **Région B** : à une côte donnée de la paroi chauffante, la température de la paroi devient suffisante pour déclencher la nucléation *(ONB* pour *Onset of Nucleate Boiling* en Anglais*).* A cette côte débute l'ébullition nucléée sous saturée associée à un changement de configuration d'écoulement avec l'apparition de l'écoulement à bulles (bulles attachées à la paroi dans un premier temps). La température du liquide à la paroi est alors supérieure de quelques degrés à la température de saturation tandis que la température du liquide au cœur de l'écoulement tend vers la température de saturation. On distingue deux parties (Figure II.2) :

- **Région b1** : dans un premier temps, un nombre réduit de sites de nucléation est actif et par conséquent, peu de bulles apparaissent sur la paroi. Elle est située tout de suite après l'*ONB*. Au fur et à mesure que l'écoulement progresse plus en aval du point de déclenchement de l'ébullition nucléée, les conditions thermodynamiques pour la nucléation deviennent plus favorables avec l'augmentation du nombre de sites actifs de nucléation. Le critère de démarrage de l'ébullition nucléée est associé à une température minimum de la paroi $T_{w,ONB}$. L'ébullition nucléée sous saturée est dite partielle.

- **Région b2** : située en aval de l'ébullition partielle, elle est initiée à partir du moment où les premières bulles de vapeur décollent de la paroi. Elle correspond donc à un changement de configuration d'écoulement caractérisé par le décollage des premières bulles de vapeur de la paroi *(OSV* pour *Onset of Significant Void* en Anglais*)* et une nette prédominance des transferts de chaleur par nucléation (vaporisation et conduction instationnaire). La nucléation devient si importante qu'elle est équivalente au processus de nucléation dans un liquide au repos saturé. Le critère d'apparition significative de la vapeur correspond à une température du liquide minimum $T_{l,OSV}$. l'ébullition est dite pleinement développée.

- **Région C** : elle correspond à l'ébullition nucléée saturée. La transition entre l'ébullition nucléée sous-saturée et l'ébullition nucléée saturée s'effectue à partir du moment où le titre thermodynamique $X_{eq}(z)$ est égal à 0. L'augmentation du titre thermodynamique conduit à de nouveaux changements de configuration avec l'apparition de l'écoulement à poches (phénomène de coalescence). Le transfert de chaleur par ébullition nucléée est alors remplacé par la convection forcée au travers du film liquide entraînant une diminution de l'épaisseur du film liquide par vaporisation à l'interface liquide/vapeur.

- **Région D** : les bouchons se rejoignent en un cœur de vapeur continu, la paroi est baignée par un mince film annulaire de liquide, d'où le nom de l'écoulement annulaire. La température de la paroi diminue et ne permet plus de maintenir la nucléation.

- **Région E** : l'épaisseur du film décroît au fur à mesure que l'évaporation augmente jusqu'à la rupture de ce film. C'est le phénomène d'assèchement de la paroi, elle donne naissance à un écoulement à gouttelettes. Lorsque le film liquide disparaît on assiste au phénomène de la crise d'ébullition *(dry out* en Anglais*)* qui peut lui aussi entraîner le *burnout*.

- **Région F** : l'écoulement monophasique vapeur apparaît lorsque toutes les gouttelettes se sont évaporées. L'échange thermique s'effectue alors par convection monophasique dans la vapeur.

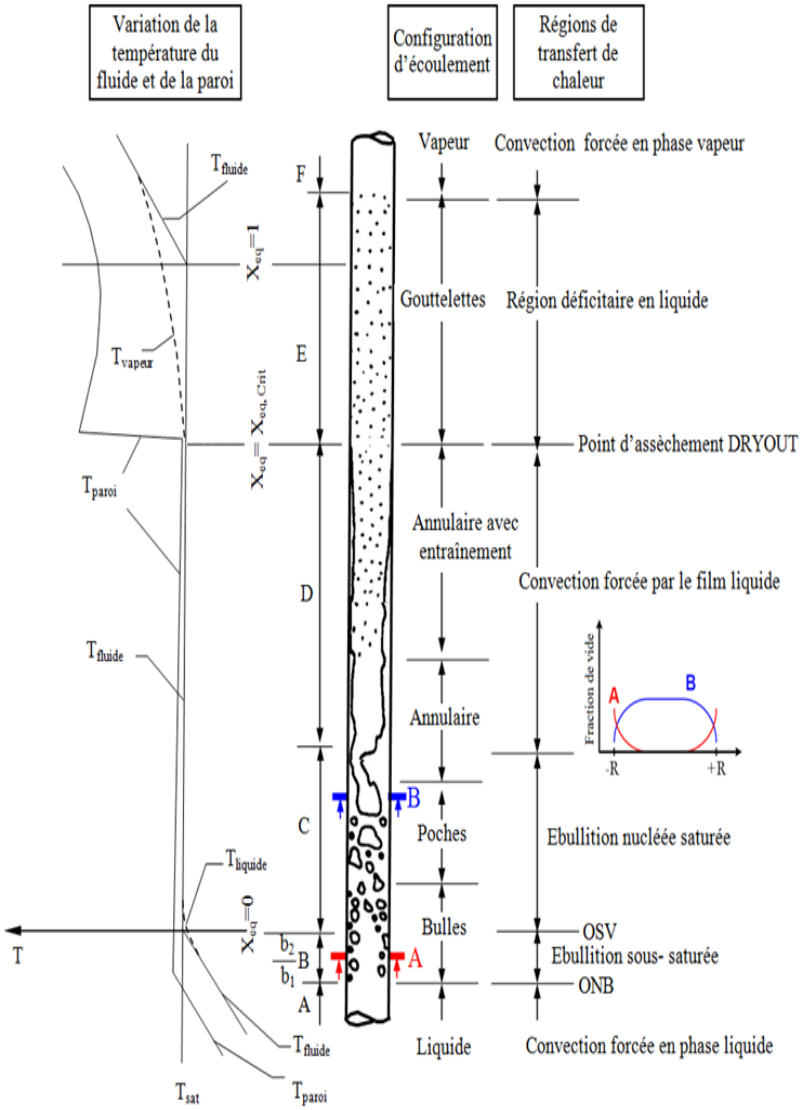


Fig.II.1 : Evolution des températures, configuration d'écoulement et régimes de transfert de chaleur associés pour un flux de chaleur pariétal faible [43]

En ce qui concerne la classification de régions de transfert de chaleur, la région à ébullition sous-saturée est identifiée comme étant le point de transition en aval de la section de transfert de chaleur convective monophasique. L'importance de la compréhension du phénomène d'ébullition sous-saturée ne peut pas être sous-estimée, elle est à l'avant plan du processus de transition. Les changements dans les caractéristiques de l'écoulement et le processus de transfert de chaleur qui se produisent pendant cette phase de transition réalisent les analyses de l'ébullition sous-saturée à la fois un commencement intéressant et complexe.

La Figure II.2 montre les différentes limites de la région d'ébullition sous-saturée appelée encore ébullition locale et le taux de vide correspondant dans la distance axiale.

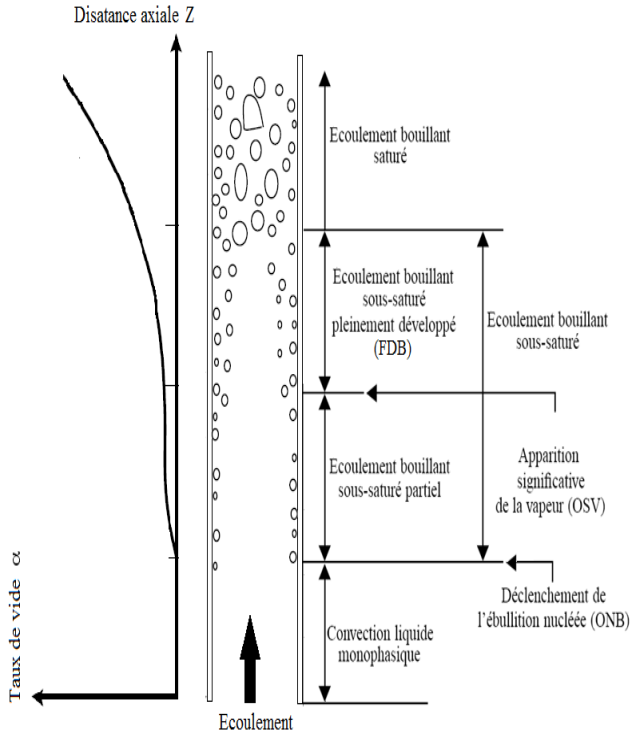


Fig.II.2 : Schématisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective [44]

L'implémentation du modèle de transfert de chaleur, le cas d'une densité de flux thermique élevée comprend plus de régimes que celui pour une faible densité de flux thermique. La Figure II.3 présente la principale philosophie de la mise en œuvre des séquences des modes de transfert de chaleur et les régimes avec séquence et transitions d'occurrence appropriée en fonction de conditions locales particulières thermiques et hydrodynamiques (branches en pointillé de la figure II.3 liées à des cas de DNB, pour Departure of Nucleate Boiling en Anglais, de faible qualité, sont en cours d'élaboration]. Deux branches caractéristiques de la courbe d'ébullition peuvent être clairement vues à la fois pour l'assèchement (dryout propagation branch] et du remouillage (rewetting propagation branch] de la propagation du front [45].

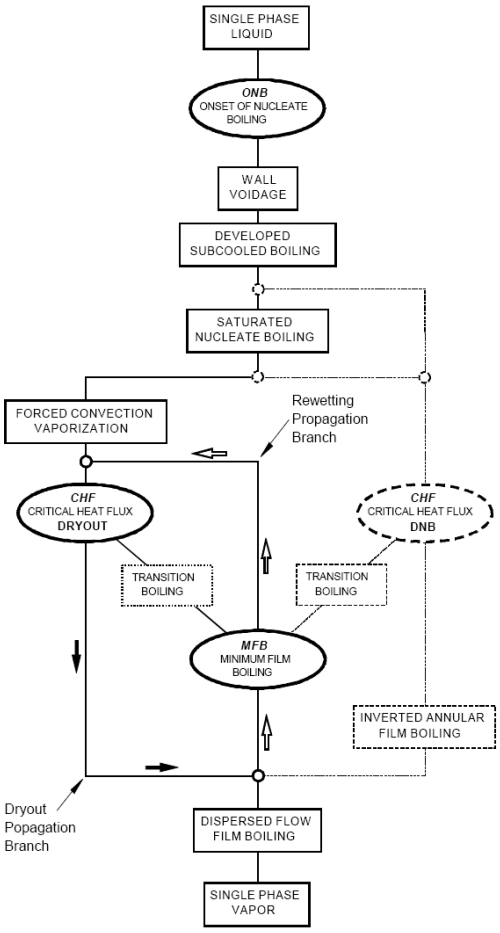


Fig.II.3 : Régimes de transfert de chaleur et transitions [45]

II.2. Ecoulement à ébullition sous-saturée

Les régions de transferts, les profils de température et le taux de vide de l'écoulement à ébullition sous-saturée sont illustrés dans les Figures II.1, II.2 et II.3. Un liquide sous-saturé ou sous-refroidi, circulant dans un canal chauffé, reste à l'état monophasique tant que la température de la paroi reste inférieure à la température de saturation du liquide pour la pression locale. Lorsque la température de la paroi devient égale à celle de saturation locale, l'ébullition ne peut apparaître sur la paroi car elle est insuffisante pour l'activation des sites de nucléation. L'apparition des bulles correspond au début de l'ébullition locale *(ONB)* indicatif de l'initiation du processus d'ébullition où le double effet de la convection et la vaporisation est remarquable. L'ébullition locale est caractérisée par l'initiation et activation de sites de nucléation et la formation de bulles par le fait qu'il n'existe pas d'équilibre thermodynamique [46].

Les bulles créées ne peuvent croître car, dès qu'elles grossissent, elles se condensent à partir de leur dôme au contact avec le liquide sous-refroidi. Une fine couche de bulles tapisse sur la paroi du canal, leur nombre et leur taille augmentent dans le sens de l'écoulement avec la diminution du sous-refroidissement. Au fur et à mesure que le fluide continue à s'échauffer et comme le nombre de sites croit, la contribution de l'ébullition augmente au détriment de la convection monophasique c'est la zone de l'ébullition sous saturée partielle. Lorsque les bulles se détachent de la paroi, c'est le point d'apparition significative de vapeur *(OSV),* qui correspond au début d'une augmentation significative du taux de vide moyen dans le tube. Cette région de transition est d'un intérêt primordial car il est théoriquement admis que l'instabilité de l'écoulement sera plus susceptible de se produire à proximité de ce point [47]. La température de la paroi reste

sensiblement constante, ce point est souvent supposé coïncider avec la transition entre l'ébullition sous-saturée partielle et l'ébullition sous-saturée pleinement développée *(FDB* pour *Fully Developed Subcooled Boiling* en Anglais*)* où la contribution de la convection devient négligeable.

II.2.1. L'ébullition sous-saturée à haute pression

La plupart des efforts de recherche dans les quatre dernières décades ont été consacrés à la compréhension des mécanismes fondamentaux de l'ébullition sous-saturée dans des conditions de haute pression, principalement pour les applications de production de l'énergie nucléaire. W. K. IN et H. ANGLART ont étudié un écoulement diphasique dans un faisceau d'un assemblage combustible de 6 crayons [48] [49] et T. IKENO et al. ont étudié un écoulement diphasique dans un faisceau de crayons d'un assemblage combustible carré [50].

La modélisation numérique des écoulements à ébullition sous-saturée requière que les modèles et les sous-modèles des mécanismes doivent être formulées en conséquence notamment lorsque le phénomène ne peut pas être décrit avec précision. Ces modèles mécanistes sont généralement basés sur des expériences et des observations justifiant ainsi des degrés divers de l'empirisme.

A commencer par les anciennes cartes de configuration d'écoulement, tels que celles proposées par Bergelin et Kosterin [51], pour la sélection des couples de paramètres appropriés pour représenter les limites de transition de la configuration d'écoulement pour une grande variété de cartes de configuration pour l'écoulement diphasique dans les canaux. La motivation pour les expériences effectuées au CEA Grenoble sur l'étude de l'ébullition est due aux besoins de développement de modèle mécaniste [52].

Les modèles mécanistes de l'ébullition sous-saturée basée sur des mécanismes de transfert de chaleur soit à convection monophasique soit à transport de chaleur latente ou à micro-convection en raison de l'agitation de bulles ont été proposées par Lahey [53]. Le transfert de chaleur latente à partir de la base de la bulle par évaporation microcouche à son sommet par condensation a d'abord été proposée par Bankoff [54] et depuis lors exploré par d'autres chercheurs. Gunther et Kreith ont suggéré que la présence de la phase vapeur induit un mélange turbulent ou micro-convection supplémentaire [52].

La plupart des études ont analysé la relation entre la chaleur et la paroi surchauffée au point d'ébullition introduisant ainsi un critère pour la croissance de la bulle [55]. Ceci est basé sur l'hypothèse selon laquelle une bulle croît à partir d'un site de nucléation si la température du liquide à l'extrémité de la bulle est supérieure à celle de la vapeur saturante.

Unal [56] a utilisé la photographie à haute vitesse pour mesurer l'initiation de l'ébullition de l'eau et a proposé une corrélation de flux de chaleur à l'ONB. Serizawa et Kenning [52] ont utilisé un bilan thermique pour estimer les conditions à l'OSV qui inclut le transfert de chaleur à l'interface liquide-vapeur. Ce modèle requiert la prédiction du coefficient de transfert thermique interfaciale.

Les modèles qui prédisent la localisation de l'OSV peuvent être divisés en trois groupes. Les conceptions antérieures localisent l'OSV au point de début d'ébullition nucléée pleinement développé. Les taux de production de vapeur et de condensation sont alors supposés être égaux puisque le flux de chaleur totale de paroi est utilisé pour générer de la vapeur et, à son tour, le flux total de chaleur est fourni par les bulles de condensation au liquide sous-saturé. D'autres corrèles le taux de transfert de chaleur à l'OSV au détachement de la bulle et l'initiation de l'ébullition pleinement développé. Saha et Zuber [57] ont proposé que l'OSV pourrait être thermiquement ou hydrodynamique contrôlé et défini la transition au nombre de Péclet (Pe = 70000 par exemple).

Un autre groupe de modèles sont basés sur l'hypothèse que l'OSV est situé au moment où les premières bulles partent de la paroi chauffée. Cependant, il peut être démontré que les forces statiques utilisées pour estimer les diamètres de détachement de la bulle pour ces modèles ne donnent pas de résultats satisfaisants pour les cas des écoulements à ébullition sous-saturée à basse pression [55].

Le troisième groupe de modèles supposent l'existence de la couche de bulles et donc l'OSV est le point où l'éjection de la bulle se produit dans la couche de bulles. Serizawa et Kenning [52] ont exploré l'idée de l'existence de la couche de bulles attribués à l'action des forces thermocapillaires. Lorsque les bulles deviennent instables dans la couche de bulles, ils sont éjectés par la suite au cœur du liquide.

Les modèles précédents ont été développés pour des applications à haute pression où leur applicabilité aux écoulements à l'ébullition sous-saturée à basse pression sont incertains. D'une part, les bulles dans des conditions de basse pression se comportent différemment et se détacher bien avant l'OSV. Aussi les bulles générées semblaient être plus grandes et plus plates en apparence comparativement aux plus petites, près de bulles sphériques dans les écoulements à haute pression.

II.2.2. Corrélations empiriques monodimensionnelles

Elaborées pour un sous-régime ou l'ensemble des régimes d'ébullition nucléée sous-saturée, elles sont souvent utilisées dans les codes de calcul de type *"1-D"* ne nécessitant pas de connaître la répartition des flux à un niveau local.

II.2.2.1. Ebullition sous-saturée partielle

La côte de la section à convection liquide monophasique, Figure II.3, transition entre les deux premières régions, est difficile à déterminer car l'estimation de la surchauffe nécessaire à la création d'une bulle de vapeur demeure délicate par ce qu'elle dépend de nombreux paramètres comme la rugosité, le vieillissement de la paroi et le dégazage du fluide [58].

La prédiction de la limite inférieure de la température de la paroi nécessaire pour obtenir l'amorçage de l'ébullition nucléée peut être calculée à l'aide de la corrélation de *Bergles* et *Rohsenow* [59] :

$$(\Delta T_{sat})_{ONB} = 0.556\left[\frac{q''_{ONB}}{1082p^{1.156}}\right]^{0.463p^{0.0234}} \quad \text{(II.1)}$$

Où p est en bar, q''_{ONB} est en W/m^2 et T est en °C. Cette corrélation n'est valable que pour l'eau à des pressions allant de 1.02 à 138 bars.

Une solution analytique a été établie par Davis et Anderson [59].

$$(\Delta T_{sat})_{ONB} = \left(T_p - T_{sat}\right)_{ONB} = \left(\frac{8\sigma q''_{ONB}}{k_l h_{lv} \rho_v}\right)^{1/2} \quad \text{(II.2)}$$

Où σ est la tension superficielle en N/m et T_{sat} en Kelvin. Les propriétés physiques du fluide sont calculées à la température de saturation.

L'ébullition nucléée partielle est un régime d'ébullition nucléée situé en amont de l'apparition de la vapeur dans l'écoulement *(OSV)*. Par conséquent, les corrélations associées ne concernent que les configurations où la vapeur n'est pas présente dans l'écoulement. Elles ne permettent pas de renseigner les composantes du terme source de vapeur nécessaires au code de calcul *CFD* [44].

II.2.2.2. Ebullition sous-saturée développée

Les corrélations, pour les plus connues, exprimées de manière simple en fonction du flux pariétal q'' en MW/m^2, de la surchauffe pariétale ΔT_{sat} en K et de la pression p en MPa. On peut citer notamment les corrélations de *Jens* et *Lottes* [60] :

$$\Delta T_{sat} = 25(q'')^{1/4} e^{-p/6.2} \tag{II.3}$$

Celle de *Thom* et *al*. [60] :

$$\Delta T_{sat} = 22.65(q'')^{1/2} e^{-p/8.7} \tag{II.4}$$

Et celle de *Yin* [59] :

$$\Delta T_{sat} = 7.195 q'' \gamma^{1.82} p^{-0.072} \ \ pour \ \ 0.7 < \gamma < 1 \tag{II.5}$$

II.2.2.3. Corrélations d'ébullition nucléée sous-saturée

Ces corrélations modélisent à la fois l'ébullition nucléée sous-saturée partielle et l'ébullition nucléée sous-saturée développée, elles sont conçues autour de deux types d'échanges de chaleur différents, un échange de chaleur par convection forcée et un échange de chaleur par ébullition nucléée. On peut citer notamment :

- Corrélation de *Chen* [61]: Elle est largement utilisée dans la littérature, elle contient deux termes représentant deux mécanismes physiques différents *(h_{tp})*. Le premier terme traduit la contribution de l'ébullition nucléée sur la paroi *(h_{nb})*. Il est obtenu à partir de la corrélation d'ébullition nucléée en vase clos de *Zuber-Forster* pondérée par un facteur d'atténuation *S*. Le second terme *(h_{cb})* représente l'effet de la convection forcée monophasique due au liquide, modifiée par un facteur d'amplification *F* et calculée à partir de la corrélation de *Dittus-Boelter*. La formulation de l'expression en tenant compte de ces deux mécanismes est :

$$h_{tp} = S * h_{nb} + F * h_{cb} \tag{II.6}$$

$$h_{nb} = 0.00122 \left[\frac{k_l^{0.79} \, Cp_l^{0.45} \, \rho_l^{0.49}}{\sigma^{0.5} \, \mu_l^{0.29} \, h_{lv}^{0.24} \, \rho_v^{0.24}} \right] \Delta T_{sat}^{0.24} \, \Delta P_{sat}^{0.75} \tag{II.7}$$

$$h_{cb} = 0.023 Re_l^{0.8} Pr_l^{0.4} \, \frac{k_l}{D} \tag{II.8}$$

En remplaçant *Re* et *Pr* par leur expression on obtient :

$$h_{cb} = 0.023\left[\frac{G(1-x)D}{\mu_l}\right]^{0.8}\left[\frac{\mu Cp}{k}\right]_l^{0.4}\frac{k_l}{D} \quad \text{(II.9)}$$

S est le facteur de suppression de l'ébullition nucléée agissant sur h_{nb} avec :

$$S = \left(\frac{1}{1 + 0.00000253[Re_l F^{1.25}]^{1.17}}\right) \quad \text{(II.10)}$$

F peut être considéré comme un facteur d'accroissement de convection diphasique :

$$F = 2.35\left(\frac{1}{\chi_{tt}} + 0.213\right)^{0.736} \quad \text{(II.11)}$$

χ_{tt} est le paramètre de *Martinelli* utilisé pour l'effet du diphasique sur la convection :

$$\chi_{tt} = \left(\frac{1-x}{x}\right)^{0.9}\left(\frac{\rho_v}{\rho_l}\right)^{0.5}\left(\frac{\mu_l}{\mu_v}\right)^{0.1} \quad \text{(II.12)}$$

- Corrélation de *Gungor* et *Winterton* [62] : En effectuant 4300 tests sur différentes substances liquides et en reprenant l'équation originale de *Chen*, *Gungor* et *Winterton* ont proposé les corrélations suivantes :

$$h_{tp} = S * h_{nb} + F * h_{cb} \quad \text{(II.13)}$$

$$h_{nb} = 55Pr^{0.12}\left(-0.4343ln(Pr)\right)^{-0.55}M^{-0.5}(q")^{0.67} \quad \text{(II.14)}$$

$$h_{cb} = 0.023\left[\frac{G(1-x)D}{\mu_l}\right]^{0.8}\left[\frac{\mu Cp}{k}\right]_l^{0.4}\frac{k_l}{D} \quad \text{(II.15)}$$

$$F = 1 + 24000Bo^{1.16} + 1.37\left(\frac{1}{\chi_{tt}}\right)^{0.86} \quad \text{(II.16)}$$

$$Bo = \frac{q"}{G * h_{lv}} \quad \text{(II.17)}$$

$$S = \left(\frac{1}{1 + 0.00000253[Re_l F^{1.25}]^{1.17}}\right) \quad \text{(II.18)}$$

M est la masse moléculaire.

- Corrélation de *Liu* et *Winterton* [63] et [64] : *Liu* et *Winterton* ont proposé un nouveau modèle basé sur la somme asymptotique des deux termes de l'ébullition saturée (nucléation et convection). Le modèle proposé se résume comme suit :

$$h_{tp} = [(S * h_{nb})^2 + (F * h_{cb})^2]^{0.5} \quad \text{(II.19)}$$

$$h_{nb} = 55Pr^{0.12}\left(-0.4343ln(Pr)\right)^{-0.55} M^{-0.5}(q")^{0.67} \quad \text{(II.20)}$$

$$h_{cb} = 0.023\left[\frac{G(1-x)D}{\mu_l}\right]^{0.8}\left[\frac{\mu Cp}{k}\right]_l^{0.4}\frac{k_l}{D} \quad \text{(II.21)}$$

$$F = \left[1 + xPr_l\left(\frac{\rho_l}{\rho_v} - 1\right)\right]^{0.35} \quad \text{(II.22)}$$

$$Pr_l = \left[\frac{\mu_l Cp_l}{k_l}\right] \quad \text{(II.23)}$$

$$S = (1 + 0.55F^{0.1}Re_l^{0.16})^{-1} \quad \text{(II.24)}$$

Aucune de ces corrélations empiriques ne fournit une des caractéristiques du terme source requises par la modélisation *CFD*, elles sont donc incompatibles avec une implantation dans un code *CFD*.

II.2.3. Modèles mécanistes

L'approche empirique consiste en l'élaboration d'une corrélation représentant au mieux des mesures expérimentales de flux critique. Celles-ci ont l'inconvénient de n'être valables que dans le domaine pour lesquelles elles ont été établies, toute utilisation en dehors de ce domaine étant très incertaine.

L'approche physique consiste en l'identification et la modélisation des mécanismes de base régissant l'ébullition, ces modèles sont le plus souvent dits mécanistes car ils résolvent des équations mathématiques classiques de la mécanique des fluides qui décrivent les écoulements. Plusieurs modèles mécanistes ont été proposés pour expliquer et prédire la répartition du flux de chaleur pariétal à partir du flux pariétal imposé. L'avantage de ces modèles est de gagner en précision, de mieux s'adapter à de nouvelles configurations et de mieux contrôler l'écoulement en ébullition.

Les modèles de type mécaniste sont généralement utilisés dans les codes de calcul de la mécanique de fluide numérique *(CFD* pour *Computational Fluid Dynamics* en Anglais*)* car ils modélisent a priori plus finement et précisément les transferts de chaleur pariétaux. En particulier, ils modélisent le flux de chaleur pariétal en flux de chaleur sensible et flux de chaleur latente net "représentant" respectivement la quantité de chaleur dédiée au réchauffement du liquide et la quantité de chaleur nette pour la génération des bulles de vapeur quittant la paroi.

Nous présentons trois modèles mécanistes de l'ébullition nucléée avec le flux pariétal imposé et la température de la paroi est la seule inconnue des modèles.

a. Modèle *RPI*, développé par *Kurul* & *Podowski* dans *Rensselaer Polytechnic Institute* [65] implanté dans les codes *CFX* et *FLUENT* de *ANSYS*, qui sera développé plus loin.

b. Modèle de *Basu* et *al*. [66] [67],

c. Modèle de *Yeoh* et *al*. [68] [69].

II.2.3.1. Présentation du modèle RPI

Le modèle *RPI* a été développé initialement par *Kurul* et *Podowski* et a été appliqué dans les codes *CFD*. Ce modèle a été mis en œuvre dans *FLUENT* au début via des fonctions définies par l'utilisateur *(UDF* pour *User Defined Function* en Anglais*)*, en conjugaison avec le modèle Eulérien multiphasique.

Le terme "*ébullition sous saturée*" est utilisé pour décrire l'état physique où la température de la paroi est suffisamment élevée pour enclencher l'ébullition au niveau de la paroi, quoique la température moyenne du liquide dans le volume est inférieure à la température de saturation. Dans ce cas, l'énergie est directement transférée de la paroi au liquide. Une partie de cette énergie fera augmenter la température du liquide qui produira de la vapeur. Le transfert de chaleur de l'interface fera, également, augmenter la température moyenne du liquide, cependant la vapeur saturée se condensera. En plus, une partie de l'énergie peut être transférée directement à partir de la paroi à la vapeur. Ces mécanismes sont les bases du modèle *RPI*.

Il y a plusieurs mécanismes liés au cycle d'ébullition nucléée sous-saturée convective. Ils diffèrent selon les caractéristiques des écoulements modélisés mais peuvent être en général divisés en deux étapes successives :

1. Naissance et croissance d'une bulle à partir d'un germe de vapeur piégé dans un site de nucléation (cavité de la paroi),
2. Croissance (éventuelle) de la bulle lors du glissement de celle-ci sur la paroi.

Les modèles d'ébullition nucléée existant relient en général deux inconnues principales moyennées spatialement et temporellement : la température de la paroi et la densité de flux pariétal, figure II.4.

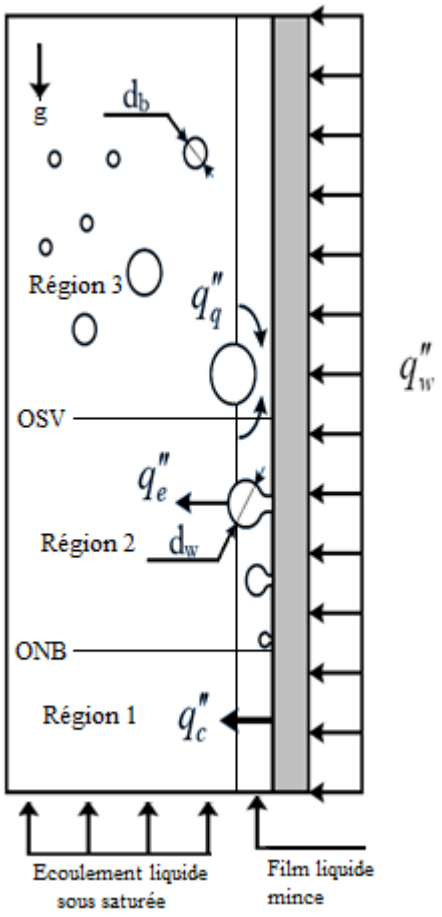


Fig.II.4 : Schéma du modèle de partitionnement de la chaleur selon Kurul et Podowski [70]

Ce modèle se base sur une répartition du flux pariétal q''_w en trois contributions :

- q''_C est le flux de chaleur monophasique par convection forcée,
- q''_Q est le flux de chaleur par conduction instationnaire (*quenching heat flux*),
- q''_E est le flux net de chaleur par évaporation,

On obtient alors :

$$q''_W = q''_C + q''_Q + q''_E \qquad \text{(II.25)}$$

La surface de la paroi chauffée est subdivisée en la zone A_b, qui est couverte par des bulles de nucléation et une partie $(1- A_b)$, qui est recouverte par le liquide.

- Le flux de chaleur monophasique par convection forcée q''_C, à pour expression :

$$q''_C = h_C(T_w - T_l)(1 - A_b) \qquad \text{(II.26)}$$

  - h_C désigne coefficient de transfert de chaleur monophasique,
  - T_w est la température de la paroi,
  - T_l est la température du liquide.

- Les modèles du flux de chaleur par conduction instationnaire (*quenching heat flux*) $q"_Q$, est la moyenne cyclique de transfert d'énergie transitoire liée au liquide de remplissage au voisinage de la paroi, après détachement de la bulle est exprimé par :

$$q"_Q = \frac{2k_l}{\sqrt{\pi \lambda_l T}}(T_w - T_l) \tag{II.27}$$

  - k_l désigne la conductivité,
  - T est la période,
  - λ_l représente la diffusivité définie par :

$$\lambda_l = \frac{k_l}{\rho_l C_{pl}} \tag{II.28}$$

- Le flux net de chaleur par évaporation $q"_E$ est donné par :

$$q"_E = V_d N_w \rho_v h_{fv} f \tag{II.29}$$

  - V_d désigne le volume de la bulle basé sur son diamètre de détachement,
  - N_w est la densité de sites de nucléation actif,
  - ρ_v représente la densité de la vapeur,
  - h_{fv} est la chaleur latente d'évaporation,
  - f représente la fréquence de détachement de la bulle.

La modélisation des paramètres principaux suivants permettent la fermeture du système d'équations :

II.2.3.1.1. Influence de la surface

Elles basée sur le diamètre de détachement de la bulle et la densité de sites de nucléation

$$A_b = K \frac{N_w \pi D_w^2}{4} \tag{II.30}$$

Pour éviter les instabilités numériques, en raison de non consolidation des corrélations empiriques pour la densité de sites de nucléation, la zone d'influence doit être limitée comme suit:

$$A_b = min\left(1, K \frac{N_w \pi D_w^2}{4}\right) \tag{II.31}$$

La valeur de constante empirique est généralement égale 4, mais elle n'est pas universelle et peut varier entre 1,8 et 5. Une relation pour cette constante a été implémentée sur la base de constatations de Del Valle et Kenning, elle est définie comme suit :

$$K = 4.8e^{\left(-\frac{Ja_{sub}}{80}\right)} \tag{II.32}$$

Ja_{sub} est le nombre de Jacob sous saturée défini comme suit :

$$Ja_{sub} = \frac{\rho_l C_{pl} \Delta T_{sub}}{\rho_v h_{fv}} \quad \text{(II.33)}$$

Où ΔT_{sub} est définie comme suit :

$$\Delta T_{sub} = T_{sat} - T_l \quad \text{(II.34)}$$

II.2.3.1.2. Influence de la fréquence de détachement de bulles

Le modèle *RPI* utilise la fréquence de détachement de la bulle comme celle basée sur le contrôle de l'inertie de croissance (non applicable à l'ébullition sous saturée)

$$f = \frac{1}{T} = \sqrt{\frac{4g(\rho_l - \rho_v)}{3\rho_l D_w}} \quad \text{(II.35)}$$

II.2.3.1.3. Influence de la densité de sites de nucléation

La densité de sites de nucléation est généralement représentée par une corrélation en fonction de la surchauffe de la paroi. L'expression générale est de la forme suivante :

$$N_w = C^n (T_w - T_{sat})^n \quad \text{(II.36)}$$

Ici, les paramètres empiriques de *Lemmert* et *Chawla* sont utilisés, où *n=1.805* et *c=210*. D'autres formules sont également disponibles, comme *Kocamustafaogullari* et *Ishii* défini comme suit :

$$N_w^* = f(\rho^*) r_C^{*-4.4} \quad \text{(II.37)}$$

Où :

$$N_w^* = N_w D_w^2 \quad \text{(II.38)}$$

$$r_C^* = {}^{2r_C}/_{D_w} \quad \text{(II.39)}$$

$$r_C = \frac{2\sigma T_{sat}}{\rho_v h_{fv} \Delta T_w} \quad \text{(II.40)}$$

$$\rho^* = {}^{(\rho_l - \rho_v)}/_{\rho_v} \quad \text{(II.41)}$$

Avec D_w diamètre de détachement de la bulle est la fonction de densité définie comme suit :

$$f(\rho^*) = 2.157e^{-7} \rho^{*-3.2} (1 + 0.0049\rho^*)^{4.13} \quad \text{(II.42)}$$

II.2.3.1.4. Influence du diamètre de détachement de la bulle

Pour le modèle *RPI*, par défaut le diamètre de détachement de la bulle en mm est basé sur des corrélations empiriques et se calcule par l'expression suivante :

$$D_w = min\left(0.0014, 0.0006e^{-\frac{\Delta T_w}{45}}\right) \tag{II.43}$$

Tandis que *Kocamustafaogullari et Ishii* utilisent la corrélation suivante :

$$D_w = 0.0012(\rho^*)^{0.9}0.0208\emptyset\sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_l - \rho_v)}} \tag{II.44}$$

Avec $\emptyset$ désigne l'angle de contact en degré.

Le diamètre de détachement de la bulle, en mm, selon l'expression d'*Unal* est calculé par :

$$D_w = 2.42e^{-5}P^{0.709}\left(\frac{a}{\sqrt{b\varphi}}\right) \tag{II.45}$$

$$a = \frac{\Delta T_{sat}\lambda_w}{2\rho_v H_{lv}\sqrt{\pi a_w}} \tag{II.46}$$

$$b = \frac{\Delta T_{sub}}{2\left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_l}\right)} \tag{II.47}$$

$$\varphi = \begin{cases} \left(\frac{U_b}{U_0}\right)^{0.47} & \rightarrow U_b > 0.61\ ms^{-1} \quad U_0 = 0.61\ ms^{-1} \\ 1 & \rightarrow U_b \leq 0.61\ ms^{-1} \end{cases} \tag{II.48}$$

- P désigne la pression en Pa,
- $\Delta T_{sat}=T_w-T_{sat}$ est la surchauffe pariétale,
- $\Delta T_{sub}=T_{sat}-T_l$ est la sous saturation du liquide pariétale,
- H_{lv} représente la chaleur latente,
- U_b est la vitesse du liquide au cœur de l'écoulement,
- a_w représente la diffusivité thermique de la paroi,
- λ_w représente la conductivité thermique de la paroi.

Les tableaux II.1, II.2, II.3 et II.4 résument respectivement les différents modèles de densité de sites de nucléation, les différents modèles de diamètre de détachement de bulle, les différents modèles de la fréquence de détachement de bulles et enfin les différents modèles de la fréquence de détachement de bulles mis en œuvre dans ANSYS-CFX.

Tableau II.1 : Différents modèles de densité de sites de nucléation

Auteur	Modèle
Kocamustafaogullari et Ishii (1983)	$N_n^* = f(\rho^*)R_c^{*-4.4} \cong f(\rho^*)\left(\frac{2\sigma T_{sat}}{\rho_g h_{fg}\Delta T_{sat}}\right)^{-4.4}$
Yang et Kim (1988)	$N_n = \bar{N}_n \int_0^{\theta} \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} exp\left(\frac{-(\beta-\bar{\beta})^2}{2s^2}\right) d\beta exp(-\lambda R_c) = Cexp\left(\frac{-K}{\Delta T_{sat}}\right)$
Wang et Dhir (1993)	$N_{np} = 7.81e^{-29}(1-cos\theta)R_c^{-6}$
Benjamin et Balakrishnan (1997)	$N_{np} = 218.8Pr^{1.63}\left(\frac{1}{\gamma}\right)\Theta^{-0.4}\Delta T_w^3$
Basu, Warrier et Dhir (2002)	$N_{nc} = 0.34(1-cos\theta)\Delta T_w^2 \quad \Delta T_{ONB} < \Delta T_w < 15°C$ $N_{nc} = 0.34e^{-5}(1-cos\theta)\Delta T_w^{5.3} \quad \Delta T_w \geq 15°C$
Hibiki et Ishii (2003)	$N" = \bar{N}_n\left(1-exp\left(-\frac{\theta^2}{8\mu^2}\right)\right)\left(exp\left(f(\rho^+)\frac{\lambda'}{R_c}\right)-1\right)$
Lemmert et Chwala	$N" = [210(T_w - T_{sat})]^{1.805}$

Tableau II.2 : Différents modèles de diamètre de détachement de bulle

Auteur	Modèle
Levenspiel (1959)	$D_{max} = \frac{2.42e^{-5}P^{0.709}\left(q - h_{sp}(T_s - T_l)\right)^{1/3} kY_u}{2Cu^{1/3}\rho_g h_{fg}(\pi a)^{1/2}(b_u\phi_u)^{1/2}}$
Farajisarir (1993)	$\frac{D_{max}\sigma}{\rho_l a^2} = 10.02e^9 Ja_w^{-1.65}\left(\frac{T_w - T_l}{T_w - T_s}\right)^{-1.62}$
Kocamustafaogullari and Ishii (1983)	$D_d = 2.64e^{-5}\theta\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_g}\right)^{0.9}\sqrt{\frac{\sigma}{g\Delta\rho}}$
Unal(1976)	$D_d = \frac{2.42e^{-5}P^{0.709}a}{\sqrt{b\Phi}}$
Fritz (1935)	$D_d = 0.208\theta\sqrt{\frac{\sigma}{g\Delta\rho}}$
Tolubinskiy and Kostanchuk (1970)	$D_d = min\left[0.0006exp\left(\frac{-\Delta T_{sub}}{45}\right), 0.0014\right]$
Cole (1967)	$D_d = 4e^{-2}\sqrt{\frac{\sigma}{g\Delta\rho}}\frac{\rho_f C_{pf}\Delta T}{\rho_g h_{fg}}$
Cole and Rosenhow (1968)	$D_d = 1.5e^{-4}\sqrt{\frac{\sigma}{g\Delta\rho}}\left(\frac{\rho_f C_{pf}\Delta T}{\rho_g h_{fg}}\right)^{5/4}$

Tableau II.3 : Différents modèles de la fréquence de détachement de bulles

Auteur	Modèle
Cole (1960)	$f = \sqrt{\frac{4g(\rho_f - \rho_g)}{3D_d\rho_l}}$
Ivey (1967)	$f = 0.9\sqrt{\frac{g}{D_d}}$
Stephan (1992)	$f = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{g}{2D_d}}\left(1 + \frac{4\sigma}{D_d^2\rho_g}\right)^{0.5}$
Zuber (1963)	$f = \frac{1.18}{D_d}\left(\frac{\sigma g \Delta\rho}{\rho_f^2}\right)^{0.25}$

Tableau II.4 : Différents modèles de la fréquence de détachement de bulles mis en œuvre dans ANSYS-CFX

Paramètre	Modèle
Facteur de l'influence de la bulle K	4
densité de sites de nucléation N''	$[185(T_w - T_{sat})]^{1.805}$
fréquence de détachement de bulles f	$\sqrt{\frac{4g(\rho_f - \rho_g)}{3D_d\rho_f}}$
Temps d'attente de la bulle t_w	$\frac{0.8}{f}$
Coefficient de transfert de chaleur h_c	$St.\rho_f.C_{pf}.u_f$

II.3. Conclusion

L'écoulement diphasique apparaît trompeusement simple, mais il est assez complexe à modéliser. La plupart des processus qui impliquent les écoulements diphasiques se produisent dans des systèmes fermés (généralement non accessibles à l'observation directe) d'où la modélisation est un outil nécessaire pour mieux comprendre ces phénomènes. Les résultats de la simulation peuvent ensuite être utilisés comme base pour l'amélioration de la conception et les analyses de sûreté du système.

CHAPITRE III

Structure du code ANSYS Fluent

Lors du chapitre précédent, on s'est intéressé à la modélisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective afin d'améliorer la prédiction des grandeurs locales dans les écoulements diphasiques bouillants proches des configurations des cœurs PWR.

Dans la première partie de ce chapitre, nous proposons une description générale des échelles d'analyse qui permettent la prédiction d'écoulement fluides, l'objectif de cette partie est de mettre en évidence les avantages de la mécanique des fluides numériques CFD par rapport aux autres méthodes scientifiques.

La seconde partie est consacrée à l'examen des différentes techniques de la mécanique des fluides numériques (CFD) qui sont utilisés pour modéliser les processus physiques impliqués dans l'ébullition nucléée sous-saturée convective, ou le code CFD ANSYS FLUENT est l'outil de calcul qui a été choisi pour réaliser cette étude.

Ce code de calcul multiphasique propose de nombreux modèles, ainsi que des modèles nécessaires à leur fermeture, tels qu'ils sont actuellement disponibles dans la version V14.0.5. Dans ce qui suit, nous nous attardons essentiellement sur les options que propose le code Fluent pour des problèmes tels que les notre.

III.1. Echelles d'analyse

Il existe un grand nombre de codes industriels conviviaux, permettant la prédiction d'écoulement fluides par la résolution des équations de Navier-Stokes grâce aux méthodes des volumes finis, des différences finies ou des éléments finis. Chaque type d'échelle d'analyse lui correspond des codes spécifiques, on cite ci-dessous quatre types d'échelles.

a) **DNS** : Pour Direct Numerical Simulation en Anglais : C'est la simulation numérique direct qui est une échelle submillimétrique, elle décrit la dynamique spatio-temporelle du fluide dans son détail, elle sert à l'analyse des phénomènes individuels comme le cas du flux de chaleur critique (CHF pour Critical Heat Flux en Anglais). Parmi les codes en retrouve Trio-U,
b) **CFD** : Pour Computational Fluid Dynamics en Anglais : C'est la mécanique des fluides numériques qui est une échelle millimétrique, elle sert à l'analyse locale en 3D des phénomènes complexes comme l'ébullition et le choc thermique pressurisé (PTS pour Pressurized Thermal Shock en Anglais). Parmi les codes en retrouve Fluent, CFX et STAR-CD,
c) **Composant** : C'est un code canal qui est une échelle centimétrique, ce type de code sert à l'analyse d'objets technologiques comme le cœur d'un réacteur, générateur de vapeur ou condenseur. Parmi les codes en retrouve THYCA, FLICA et GENEPI,
d) **Système** : C'est une échelle système, elle sert à l'analyse du fonctionnement global du système, ce type de codes traitent généralement les accidents de perte de réfrigérant (LOCA pour Loss Of Coolant Accident en Anglais) et la rupture d'une ligne de vapeur (SLB pour Stream Line Break en Anglais). Parmi les codes en retrouve RELAP et CATHARE.

Comme il a été dit précédemment, pour notre cas, nous avons eu recours à l'échelle millimétrique via le code FLUENT, soit le code le plus populaire, commercialisé par ANSYS Incorporated

version 14.0.5, la première version était lancée en Octobre 1983. C'est un code écrit avec le langage de programmation C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offertes par ce langage (allocation de la mémoire dynamique). En outre, il utilise une architecture qui lui permet de s'exécuter en tant que plusieurs processus simultanés sur le même poste de travail ou sur des postes séparés (calcul parallèle), pour une exécution plus efficace.

Les équations de la dynamique des fluides et les algorithmes numériques nécessaires pour les résoudre, ont été bien connues depuis des siècles. Cependant ce ne fut que le développement de l'ordinateur, il ya plusieurs décennies, qu'il est devenu possible de modéliser le comportement des fluides.

Le solveur FLUENT est un code CFD à usage général. Les grandes capacités de modélisation physique du FLUENT ont été appliquées à des applications industrielles allant de l'écoulement de l'air sur une aile d'avion jusqu'à la combustion dans un four, des colonnes à bulles à la production de verre, de la circulation sanguine à la fabrication de semi-conducteurs, de la conception de salles propres aux usines de traitement des eaux usées. La capacité du logiciel à modéliser les moteurs à cylindres, l'aéroacoustique, les turbomachines et les systèmes à plusieurs phases a permis d'élargir sa portée.

Fluent propose de nombreux modèles physiques et schémas numériques avec lesquels l'utilisateur est normalement en mesure de modéliser tous les écoulements fluides, compressibles ou incompressibles, impliquant des phénomènes physiques complexes tels que la turbulence, le transfert thermique, les réactions chimiques, les écoulements multiphasiques... etc. Toutefois, il existe dans la nature une multitude de comportements physiques différents et il est impossible pour un logiciel de tous les prendre en compte. C'est pourquoi, l'un des avantages de FLUENT réside dans la possibilité de créer des fonctions définies par l'utilisateur (UDF) se sont des sous-programmes (macros) en écrit C dans le but de spécifier des options trop compliquées pour être prévues par le logiciel. Sur le plan physique, elles permettent par exemple de spécifier des conditions initiales et aux limites, d'ajouter des termes sources à certaines équations, de modifier des lois de comportement au niveau des parois. Sur le plan numérique, elles rendent également possible la spécification d'une grille variant avec le temps, la modification des schémas de résolution, le contrôle et l'optimisation de la convergence au cours des itérations.

III.2. Avantages des codes CFD

La mécanique des fluides numérique CFD a un certain nombre d'avantages par rapport aux autres méthodes scientifiques, en particulier si on le compare à l'expérimentation physique. Parmi ces avantages on cite [71]:

a) **Reproductibilité** : Comme il n'y a pas de variables hors du contrôle de l'expérience, le modèle va reproduire les mêmes résultats à chaque exécution,
b) **Paramétrage** : Une fois qu'un modèle est mis en place, il est triviale de modifier une valeur d'entrée et de ré-exécuter. Beaucoup de codes CFD ont un mode batch pour permettre à de nombreux cas de mettre en attente et exécutées sans intervention de l'utilisateur. Ceci peut être utilisé, par exemple, pour l'obtention des résultats sur une plage de débits, ou à "optimiser" la valeur de certains paramètres,
c) **Economie** : Une étude numérique ne nécessite que très peu d'équipement, d'espace et d'homme-heures. Bien que le temps réel du processus de modélisation soit moins pour la plupart des écoulements, la possibilité d'exécuter des expériences directes 24x7, signifie que le temps global pour une étude est réduit, ce qui conduit généralement à des avantages économiques. (par exemple, réduction des délais de commercialisation, etc.) De la même

manière, les expériences physiques peuvent avoir un "coût" en termes d'impact sur l'environnement et les considérations de santé et de sécurité, qui ne serait pas applicable à une simulation numérique,

d) Flexibilité : Un modèle CFD permet la variation indépendante de tous les paramètres du modèle, avec très peu de limitations. L'expérimentation physique tend à être beaucoup plus limitée. Par exemple, la pente d'un véritable tunnel est fixe, mais dans un modèle CFD le vecteur de gravité peut prendre n'importe quelle valeur,

e) Pleine échelle : Les techniques CFD ne nécessitent pas une mise à l'échelle artificielle, qui est souvent une limitation des expériences physiques,

f) Analyse : L'expérimentation physique nécessite de l'instrumentation (thermocouples, sondes de vitesse, capteurs de pression, infrarouge (IR) imagerie, etc.) afin de produire des données quantitatives. Cette instrumentation est toujours limitée et est souvent le principal obstacle de la procédure expérimentale. En revanche, un modèle CFD contient intrinsèquement toutes les données (et plus) qui pourrait jamais être nécessaires.

Toutefois, les CFD ne devraient pas être considérés comme un remplacement de l'expérimentation physique ou de l'analyse théorique. Les résultats d'un modèle CFD sont dénués de sens sans la validation des données expérimentales.

III.3. Vérification et validation

Dans le contexte de la modélisation par CFD, la vérification, comme indiquée dans la Fig.III.1, est définie comme le processus de détermination que l'implémentation du modèle représente avec précision la description conceptuelle du développeur du modèle et la solution du modèle. Alors que la validation est le processus de détermination du degré auquel un modèle est une représentation exacte de la réalité du point de vue des utilisations prévues du modèle [71].

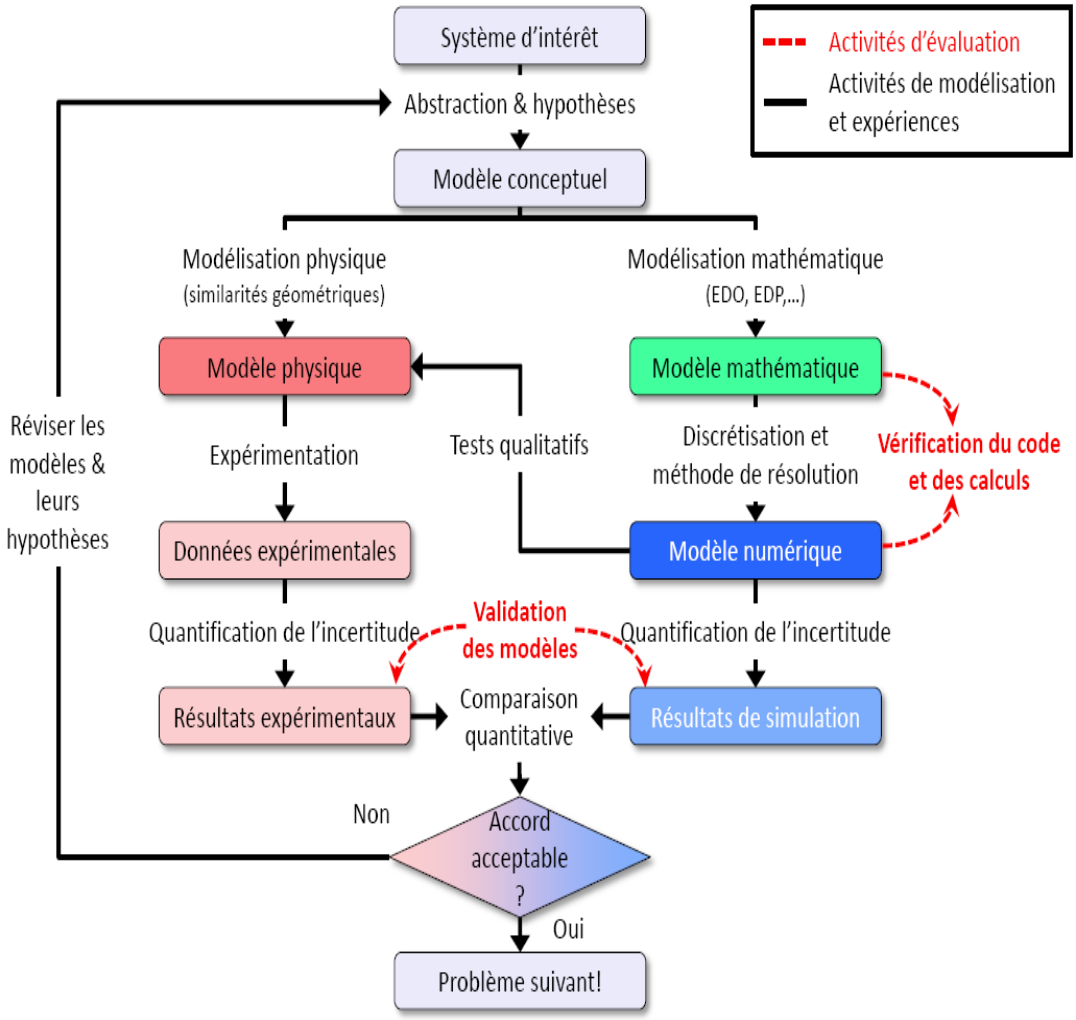


Fig.III.1 : Développement, vérification et validation d'un modèle [72]

La vérification est peut-être plus facile par rapport à la validation, en particulier lors de l'utilisation des codes bien établies, telles que FLUENT ou CFX, qui sont testés périodiquement dans le cadre de leur développement. Néanmoins, le processus de vérification doit inclure les décisions de mise en œuvre effectuées par l'utilisateur, notamment le maillage, mais aussi le pas du temps, schéma de discrétisation, facteur de sous-relaxation, les critères de convergence, le choix des sous-modèles, et ainsi de suite, cas par cas.

Il est important de ne pas faire preuve de complaisance en se fondant sur la réputation d'un code particulier, comme il est fréquent, en particulier lors de l'utilisation des fonctionnalités nouvelles (ou fortement modifiées), de surgir des bugs évidents et des erreurs de programmation. Il est tout à fait possible, par conséquent, que les bugs plus subtiles existent et sont restés inconnus en dépit d'une large base d'utilisateurs. En ce sens, la vérification à 100% n'est pas possible.

D'autre part, la validation est le processus d'indication que les résultats du modèle correspondent à ce qui se trouve dans le monde réel, elle est simplement obtenue en comparant directement les résultats expérimentaux avec ceux des modèles. La validation peut, également, être réalisée en fonction des résultats d'analyse où en l'absence de résultats directement applicable, une validation secondaire (où la validation est effectuée sur un autre scénario, mais liés) pourrait être envisagée. Les données utilisées dans la validation devraient être adaptées à l'usage prévu du modèle. Par exemple, si les données de température de certains thermocouples peuvent être utilisées pour

valider les résultats d'un modèle, il ne découle pas nécessairement que les vitesses dans le modèle seront également correctes. En ce sens, la validation à 100% n'est également pas possible.

III.4. Modélisation des écoulements multiphasiques par une approche Eulérienne

Il y a deux approches pour la modélisation des écoulements multiphasiques : l'approche Euler-Lagrange et l'approche Euler-Euler.

Dans l'approche Euler-Lagrange, la phase liquide est traitée comme étant un continuum en résolvant les moyennes temporelles des équations de Navier-Stokes, tandis que la phase dispersée est résolue par le suivi d'un grand nombre de particules, bulles ou gouttelettes à travers le calcul du champ d'écoulement. Une hypothèse fondamentale dans ce modèle est que la phase dispersée occupe une fraction faible du volume, bien que la forte charge massique soit acceptable, rendant le modèle inapproprié pour des applications où la fraction volumique de la phase dispersée est non négligeable.

Dans les écoulements dispersés, les bulles ou les particules séparées peuvent être suivis en utilisant des phénomènes physiques détaillées pour l'interaction entre la phase dispersée et la phase continue. Si le nombre de particules / bulles est faible et la réaction de la phase continue est négligeable, le temps de calcul est faible. Mais, pour un nombre élevé de particules réparties sur l'ensemble du domaine de calcul de la rétroaction de la phase continue, le temps de calcul augmente de manière significative, en particulier pour le suivi des particules stochastiques [70].

Dans l'approche Euler-Euler, les différentes phases sont traitées, mathématiquement, comme un continuum interpénétrant. Etant donné que le volume d'une phase ne peut pas être occupé par les autres phases, le concept de la fraction volumique de phase est introduit. Ces fractions de volume sont supposées être des fonctions spatio-temporelles continues et leur somme est égale à l'unité. Une formulation plus générale est utilisée par cette technique. Ici, les interactions entre les deux phases sont des volumes moyens pour toutes les interactions au sein d'un volume de contrôle. Cette technique convient très bien pour la méthode des volumes finis [70].

Dans le logiciel commercial CFD, ANSYS Fluent, trois différents modèles multiphasiques Euler-Euler sont disponibles : modèle de volume de fluide (VOF), modèle de mixture et le modèle Eulérien. Dans la présente étude, le modèle Eulérien est utilisé, ce modèle est le mieux adapté pour notre cas, à savoir l'étude de l'ébullition nucléée pour la prédiction de la fraction de la vapeur lors d'un écoulement en ébullition sous saturée.

III.4.1. Equations principales

Pour décrire mathématiquement l'état d'un fluide en mouvement, on a besoin de décrire la distribution des vitesses du fluide $v = v(x; y; t)$ ainsi que celle de ses caractéristiques thermodynamiques telles que la pression $P = P(x; y; t)$, la température $T = T(x; y; t)$ et la densité $\rho = \rho(x; y; t)$.

En écoulement multiphasique par l'approche *Euler-Euler*, les phases sont supposées être en interpénétration continues. L'une des phases est définie comme étant continue et l'autre comme dispersée. Les vecteurs de pression et de gravité sont partagés par les deux phases, tandis que d'autres variables sont en phase spécifique. Le seul changement notable à la solution de la première phase est la présence de forces interfaciales.

Ce modèle est le plus général et le plus complexe parmi tous les modèles des écoulements multiphasiques. Chaque phase est supposée former un milieu continu. Son mouvement est simulé avec son propre système d'équations de Navier-Stokes, équation de continuité et l'équation de l'énergie. Selon ce modèle, les équations écrites pour chaque phase sont résolus conjointement. A des valeurs élevées de α_g, seul le modèle Eulérien est utilisé pour la simulation adéquate de ces écoulements. L'ensemble d'équations gouvernantes qui régissent ce modèle sont :

a) Fraction volumique

La caractérisation de l'écoulement multiphasique, comme il est décrit dans le modèle Eulérien, dépend de la notion de fractions volumiques phasiques. Fraction de volume qui est désigné ici par V_q représente le volume occupé par chaque phase. Les équations de conservation de masse et de mouvement devraient être satisfaites pour chaque phase, individuellement. Ensemble, la moyenne de la balance locale instantanée pour chacune des phases peut être utilisée dans la dérivation des équations de conservation [73]. La dérivation des équations de conservation peut également être faite grâce à l'utilisation de l'approche de la théorie de mélange [73]. Le volume de la phase *q*, noté V_q, est définie par :

$$V_q = \int_V \alpha_q \, dv \tag{III.1}$$

Avec

$$\sum_{q=1}^{n} \alpha_q = 1 \tag{III.2}$$

La densité effective de la phase q est définie en tant que :

$$\overline{\rho_q} = \alpha_q \rho_q \tag{III.3}$$

Où ρ_q est la densité physique de la phase *q*.

b) Equation de conservation de la masse

L'équation de continuité de la $q^{ième}$ phase du modèle *Eulérien* multiphasique s'écrit comme suit [74], [16] :

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q)}{\partial t} + \nabla.(\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) = \sum_{p=1}^{n} (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \tag{III.4}$$

Où l'indice *p* indique la $p^{ième}$ phase et *n* est le nombre de phase dans le système. α_q, ρ_q et $\bar{u}_q$ représentent respectivement la fraction de volume, la densité et la vitesse du vecteur de la $q^{ième}$ phase. $\dot{m}_{pq}$ caractérise le taux de transfert de masse de la $p^{ième}$ à la $q^{ième}$ phase et $\dot{m}_{qp}$ caractérise le taux de transfert de masse de la $q^{ième}$ à la $p^{ième}$ phase par évaporation ou condensation. S_{mq} représente la source de masse de la $q^{ième}$ phase.

c) Equation de conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement pour la $q^{ième}$ phase s'écrit comme suit [75], [16]:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial(\alpha_q\rho_q\vec{u}_q)}{\partial t}+\nabla.(\alpha_q\rho_q\vec{u}_q\vec{u}_q)\\&=-\alpha_q\nabla p+\alpha_q\rho_q\vec{g}+\nabla.\alpha\vec{\vec{\tau}}_q+\sum_{p=1}^{n}(\vec{R}_{pq}+\dot{m}_{pq}\vec{u}_{pq}-\dot{m}_{qp}\vec{u}_{qp})\\&+(\vec{F}_q+\vec{F}_{drag,q}+\vec{F}_{lift,q}+\vec{F}_{vm,q}+\vec{F}_{turbulent,q}+\vec{F}_{wall,q})\end{aligned} \quad \text{(III.5)}$$

Dans l'équation (III.5), p représente la pression, $\vec{\vec{\tau}}_q$ le tenseur des contraintes visqueuses, $\vec{g}$ représente le vecteur gravité, $\vec{R}_{pq}$ la force d'interaction entre phases, $\vec{u}_{pq}$ et $\vec{u}_{qp}$ désigne les vitesses relatives entre phases et les forces $\vec{F}_q$, $\vec{F}_{lift,q}$ et $\vec{F}_{vm,q}$ désignent respectivement toutes les forces externes volumiques, la force de portance et la force de la masse virtuelle de la $q^{ième}$,

$$\vec{\vec{\tau}}_q=\alpha_q\mu_q\left[(\nabla\vec{u}_q+\nabla\vec{u}_q^T)\right]-\frac{2}{3}\alpha_q\mu_q\nabla.\vec{u}_qI \quad \text{(III.6)}$$

Où μ_q désigne la viscosité de la $q^{ième}$ phase, I désigne le tenseur unité, $\vec{g}$ représente le vecteur gravité et $\vec{u}_{pq}$ désigne la vitesse de l'interface définie comme suit :

$$\begin{aligned}&\dot{m}_{pq}>0\ (de\ la\ p^{ième}\ \text{à}\ la\ q^{ième}phase)\ \rightarrow\ \vec{u}_{pq}=\vec{u}_p\\&\dot{m}_{pq}<0\ (de\ la\ q^{ième}\ \text{à}\ la\ p^{ième}phase)\ \rightarrow\ \vec{u}_{pq}=\vec{u}_q\\&\dot{m}_{qp}>0\ (de\ la\ q^{ième}\ \text{à}\ la\ p^{ième}phase)\ \rightarrow\ \vec{u}_{qp}=\vec{u}_q\\&\dot{m}_{qp}<0\ (de\ la\ p^{ième}\ \text{à}\ la\ q^{ième}phase)\ \rightarrow\ \vec{u}_{qp}=\vec{u}_p\end{aligned} \quad \text{(III.7)}$$

La force d'interaction entre phases $\vec{R}_{pq}$ a pour forme :

$$\sum_{p=1}^{n}\vec{R}_{pq}=\sum_{p=1}^{n}K_{pq}(\vec{u}_p-\vec{u}_q) \quad \text{(III.8)}$$

K_{pq} représente le coefficient d'interaction entre phases. Pour les écoulements gaz-liquide, la phase liquide est supposée de forme gouttelettes. Le coefficient d'interaction pour ce genre d'écoulements peut s'écrit sous la forme générale suivante :

$$K_{pq}=\alpha_q\alpha_p\rho_p\,f_{dr}/\tau_{par} \quad \text{(III.9)}$$

τ_{par} désigne le temps de relaxation des particules défini comme suit :

$$\tau_{par}=\rho_p d_{pq}^2/18\,\mu_q \quad \text{(III.10)}$$

Avec d_{pq}est le diamètre des gouttelettes de la q^{ième} phase et f_{dr} est la force de trainée définie par le modèle de *Schiller and Naumann* entre un gaz et un liquide comme suit :

$$f_{dr}=C_DRe_{pq}/24 \quad \text{(III.11)}$$

C_D désigne un coefficient de trainé, défini comme suit :

$$C_D=24\left(1+0.15Re_{pq}^{0.687}\right)/Re_{pq} \quad \text{(III.12)}$$

Re_{pq} représente le nombre de *Reynolds* relatif entre la $p^{ième}$et la $q^{ième}$ phase. Ce nombre pour la phase primaire *p* et la phase secondaire *q* est défini comme suit :

$$Re_{pq} = \rho_q d_p \left|\vec{u}_p - \vec{u}_q\right| / \mu_q \tag{III.13}$$

d) Equation de l'énergie

Similairement, l'équation de conservation de l'énergie pour la $q^{ième}$ phase s'écrit comme suit [74], [16], [75] :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial(\alpha_q \rho_q H_q)}{\partial t} + \nabla.(\alpha_q \rho_q \vec{u}_q H_q) = -\alpha_q \frac{\partial p_q}{\partial t} + \vec{\bar{\tau}}_q \\ &: \nabla.\vec{u}_q - \nabla.\vec{q}_q + S_q + \sum_{p=1}^{n}(Q_{pq} + \dot{m}_{pq} H_{pq} - \dot{m}_{qp} H_{qp}) \end{aligned} \tag{III.14}$$

Où H_q désigne l'enthalpie de la $q^{ième}$ phase, $\vec{q}_q$ est le flux de chaleur, S_q est la source de chaleur externe, Q_{pq} représente l'échange de chaleur entre phase et H_{pq} et H_{pq} sont les enthalpies d'interphase, par exemple, l'enthalpie de la vapeur dans le cas de l'évaporation et l'enthalpie du liquide en cas de condensation.

Le flux de chaleur $\vec{q}_q$, est défini ainsi :

$$\vec{q}_q = -k_q \, {}^{\partial T}/_{\partial \vec{r}} \tag{III.15}$$

Où k_q est la conductivité thermique de la $q^{ième}$ phase.

Le taux de transfert d'énergie revient à la différence de température entre phases défini comme suit :

$$Q_{pq} = h_{pq}(T_p - T_q) \tag{III.16}$$

Le coefficient de transfert de chaleur entre la $p^{ième}$ et la $q^{ième}$ H_{pq}, est lié par le nombre de *Nusselt* de la $p^{ième}$phase :

$$h_{pq} = 6k_q \alpha_p \alpha_q \, Nu_p / d_p \tag{III.17}$$

Nu_p représente le nombre de *Nusselt* de la $p^{ième}$ phase. Défini, pour le transfert de chaleur entre liquide et gaz, par la corrélation de *Ranz-Marshal* comme suit :

$$Nu_p = 2 + 0.6 Re_p^{0.5} Pr_q^{0.33} \tag{III.18}$$

Où Re_p est le nombre de *Reynolds* basé sur le diamètre des bulles de la $p^{ième}$ phase et Pr_q est le nombre de *Prandtl* de la $q^{ième}$ phase.

III.4.2. Transfert de la quantité de mouvement à l'interface

Le transfert de la quantité de mouvement à l'interface peut inclure quatre forces : force de traînée, force de portance, force de la masse virtuelle et la force de dispersion turbulente, décrites dans les équations de conservation, coefficients interphasiques d'échange et les modèles de turbulence.

1. Aire de l'interface

L'aire interfaciale est un paramètre important pour la force de portance et le processus de transfert de chaleur. Pour l'ébullition dispersée, l'aire de l'interface, est basée sur le diamètre de la bulle. Cependant, au cours de la coalescence de bulle, l'aire doit être modifiée [74]:

a. Modèle de la particule

$$A_i = \frac{6\alpha_v}{D_b} \tag{III.19}$$

b. Modèle symétrique

$$A_i = \frac{6\alpha_v(1-\alpha_v)}{D_b} \tag{III.20}$$

c. Modèle Ishii

$$A_i = \frac{6\alpha_v(1-\alpha_v)min\left(\alpha_v,\ \alpha_{v,crit}\right)}{D_b\left(1-min\left(\alpha_v,\ \alpha_{v,crit}\right)\right)} \tag{III.21}$$

2. Force de portance de l'interface (Drag force)

La force de portance de l'interface est calculée selon le modèle de la particule, équation (III.19). Sa forme générale est [70] :

$$\vec{F}_{lv}^{D} = -\vec{F}_{vl}^{D} = 0.75\frac{\rho_v}{D_b}\rho_l C_D\left|\vec{V}_l - \vec{V}_v\right|\left(\vec{V}_l - \vec{V}_v\right) \tag{III.22}$$

Où D_b est le diamètre de Sauter, diamètre moyen de la bulle qui peut être une constante, une fonction *UDF* ou une corrélation de la sous saturation locale $\Delta T_{sub} = T_{sat} - T_l$ [76], [74]:

$$D_b = \begin{cases} 0.00015 & \rightarrow \quad \Delta T_{sub} > 13.5\ K \\ 0.00015\text{-}0.0001\ \Delta T_{sub} & \rightarrow \quad 0 \leq \Delta T_{sub} \leq 13.5\ K \\ 0.00015 & \rightarrow \quad \Delta T_{sub} < 0\ K \end{cases} \tag{III.23}$$

Et C_D désigne le coefficient de portance, donné par la corrélation d'*Ishii*.

3. Force de traînée de l'interface (Lift force)

$$\vec{F}_{lv}^{L} = -\vec{F}_{vl}^{L} = -C_L\alpha_v\rho_l\left(\vec{V}_v - \vec{V}_l\right)\times\left(\nabla\times\vec{V}_l\right) \tag{III.24}$$

Avec C_L représente le coefficient de la traînée calculé à partir de la corrélation proposé par *Moraga*. Dans cette corrélation, le coefficient de la traînée est calculé à partir du produit du nombre de *Reynolds* de la bulle et le nombre de *Reynolds* de cisaillement de la bulle [74], [76], [77].

Le coefficient de la traînée combine l'action des deux forces opposées :

i. la force classique de la traînée aérodynamique qui résulte de l'interaction entre la bulle et le cisaillement du liquide, influence positive sur C_L,
ii. l'interaction entre la bulle et le sillage des tourbillons des bulles détachés, influence négative sur C_L.

4. Force de la masse virtuelle (Virtual mass force)

$$\vec{F}_{lv}^{VM} = -\vec{F}_{vl}^{VM} = C_{VM}\alpha_v\rho_l\left[\left(\frac{\partial\vec{V}_l}{\partial t} + \vec{V}_l.\nabla\vec{V}_l\right) - \left(\frac{\partial\vec{V}_v}{\partial t} + \vec{V}_v.\nabla\vec{V}_v\right)\right] \quad \text{(III.25)}$$

Où C_{VM} est le coefficient de la force de la masse virtuelle et est égal à 0.5 [77], [76], [74].

5. Force de dispersion turbulente (Turbulent dispersion force)

$$\vec{F}_{lv}^{TD} = -\vec{F}_{vl}^{TD} = -C_{TD}\rho_l k_l \nabla\alpha_v \quad \text{(III.26)}$$

Où C_{TD} est le coefficient de dispersion turbulente et est égal à 1 et k_l désigne l'énergie cinétique de la turbulence du liquide [76], [74].

6. Force de lubrification pariétale (Wall lubrication force)

Le champ d'écoulement autour d'une particule est modifié dans le voisinage d'une paroi. Cela donne lieu à une force de lubrification visqueuse, ce qui tend à repousser les particules loin de la paroi. En supposant que les bulles ont une forme sphérique, cette force a été modélisée par Antal et al. [78]. Pour un écoulement à faible vide laminaire on a [77] :

$$\vec{F}_{lv}^{W} = -\vec{F}_{vl}^{W} = -\frac{\alpha_v\rho_l\left(\vec{V}_l - \vec{V}_v\right)^2}{D_b} max\left[C_{w1} + C_{w2}\frac{D_b}{y_w}, 0\right]\vec{n}_w \quad \text{(III.27)}$$

Avec y_w est la distance à la paroi la plus proche, $\vec{n}_w$ est l'unité normale pointant vers l'extérieur à partir de la paroi et $C_{w1} = -0.01$ et $C_{w2} = 0.05$ sont les coefficients de lubrification pariétaux.

III.4.3. Transfert de chaleur à l'interface

1. Transfert de chaleur au liquide

Comme les bulles partent de la paroi et se déplacent vers la région sous saturée, il y a un transfert de chaleur de la bulle vers le liquide, qui est définie comme suit [74], [76]:

$$Q_{li} = h_{li}A_i(T_{sat} - T_l) \quad \text{(III.28)}$$

Où h_{li} est le coefficient de transfert chaleur, la corrélation de *Ranz-Marshall* donne :

$$h_{li} = \frac{\lambda_l}{D_b}Nu \quad \text{(III.29)}$$

Avec D_b le diamètre de Sauter (diamètre moyen de la bulle), A_i est l'aire interfaciale déterminée selon l'équation (III.19) et Nu est le nombre de *Nusselt*.

Cas de condensation ($Ja < 0$), *Nusselt* se calcule comme suit :

$$Nu = 2 + 0.6Re^{0.5}Pr^{0.33} \quad \text{(III.30)}$$

$$Re = \frac{D_b V_{rel}}{\nu_l} \quad \text{(III.31)}$$

Pr désigne le nombre de *Prandtl* du liquide, V_{rel} désigne la grandeur de la vitesse relative entre phases, ν_l est la viscosité cinématique du liquide et Ja est le nombre de *Jacob* calculé selon l'équation (II.33).

Cas d'évaporation, *Nusselt* se calcule comme suit :

$$Nu = max\left(\sqrt{\frac{4Pe}{\pi}}, \frac{12}{\pi}Ja, 2\right) \quad \text{(III.32)}$$

Pe est le nombre de *Péclet* et se calcule par :

$$Pe = \frac{D_b V_{rel}}{a_l} \quad \text{(III.33)}$$

a_l représente la diffusivité thermique du liquide.

2. Transfert de chaleur à la vapeur

L'interface de transfert thermique à la vapeur est calculée en utilisant la méthode de "*A pas de temps de retour à saturation*". En supposant que la vapeur conserve la température de saturation par évaporation/condensation rapide [76], [74].

$$Q_{vi} = \frac{\alpha_v \rho_v C_{pv}}{\delta t}(T_{sat} - T_v) \quad \text{(III.34)}$$

Où δt est le pas de temps égale à 0.05 (par défaut), C_{pv} désigne la capacité calorifique isobare de la vapeur.

III.4.4. Transfert de masse

1. Transfert de masse de la paroi à la vapeur

Le débit massique d'évaporation est appliqué à la cellule proche de la paroi et il est dérivé du flux de chaleur d'évaporation, l'équation (III.34) [76], [74].

$$\dot{m}_E = \frac{\dot{q}_E}{h_{fv} + C_{pl}\Delta T_{sat}} \quad \text{(III.35)}$$

2. Transfert de masse à l'interface

Le transfert de masse interfaciale dépend directement du transfert de chaleur interfaciale. En supposant que la totalité de la chaleur transférée à l'interface est utilisée dans le transfert de masse

(par exemple évaporation ou condensation), le taux de transfert de masse interfaciale s'écrit comme suit [76], [74]:

$$\dot{m} = \dot{m}_{lt} + \dot{m}_{vt} = \frac{\dot{q}_{lt} + \dot{q}_{vt}}{h_{fv}} \quad \text{(III.36)}$$

III.5. Modélisation de la turbulence

L'écoulement turbulent est un phénomène très important dans le domaine industriel. La turbulence est un phénomène nature qui a lieu au sein des fluides lorsque les gradients de vitesse sont importants, cela dérive en une perturbation dans le domaine de l'écoulement comme une fonction d'espace et de temps par exemple la fumée dans l'air, la condensation de l'eau sur la paroi, les vagues entre autres. Un écoulement turbulent est caractérisé par [79]:

- Irrégularité dans le temps et dans l'espace : L'écoulement est très sensible aux perturbations, même faibles, celles-ci ayant tendances à s'amplifier pour de faibles viscosités. Ainsi, l'état turbulent n'est connu qu'à travers des grandeurs moyennes et fluctuantes. L'analyse de tels écoulements se fait ainsi de manière statistique. Sa modélisation est donc très délicate,
- Présence des structures de tailles très différentes qui interagissent entre elles : Plus le nombre de Reynolds est important, plus la différence de taille entre les plus petites structures et les plus grandes présentées dans l'écoulement est importante,
- Caractère dissipatif : La viscosité du fluide est à l'origine de la dissipation de l'énergie cinétique turbulente produite aux grandes échelles. Cette énergie se transforme en chaleur,
- Caractère diffusif : La turbulence augmente le taux de mélange et de diffusion des espèces chimiques.

Dans le cas des écoulements monophasiques, les modèles de fermeture sont normalement utilisés afin de montrer les influences des fluctuations de la vitesse turbulente et les quantités scalaires. En comparaison aux écoulements monophasiques, la modélisation de la turbulence dans les simulations multiphasiques est extrêmement complexe en raison du grand nombre de termes dans les équations de quantité de mouvement nécessitant la modélisation. La modélisation de la turbulence dans les écoulements diphasiques peut être réalisée en utilisant soit des modèles k-ε ou modèles Reynolds-Stress (RSM) [73].

La Fig.III.2 résume les différents types de modèles de turbulence : Moyenne de Reynolds des équations Navier-Stokes (RANS), Simulation des grandes échelles (LES) et la Simulation Numérique Direct (DNS). Le cadre en gras indique les modèles disponibles dans les codes standards CFD comme celui utilisé dans cette étude, FLUENT.

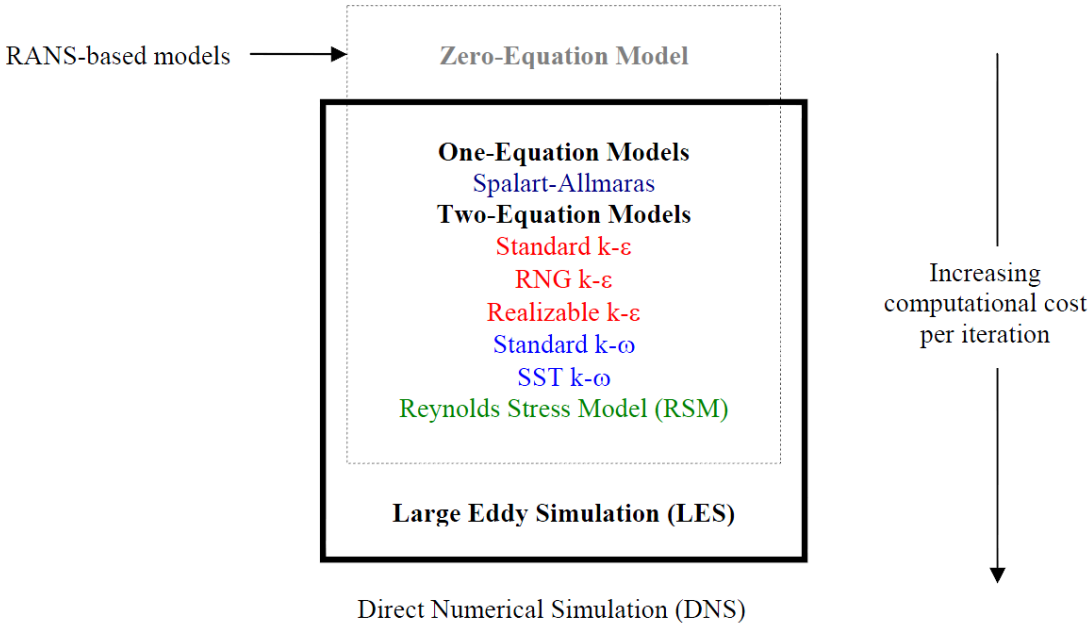


Fig.III.2 : Modèles de la turbulence [80]

Le tableau III.1 résume le comportement des modèles de turbulence RANS et fournit des directives pour les situations où leur utilisation est appropriée. Le modèle *k-ε* et le modèle *k-ω* sont réputés pour fournir des performances supérieures dans les couches limites d'un écoulement à proximité immédiate des parois et les plus appropriés pour la couche limite des écoulements complexes sous un gradient de pression.

Tableau III.1 : Comportement et utilisation du modèle de turbulence RANS [80]

Modèle	**Comportement et Utilisation**
Spalart-Allmaras	Economique pour le maillage grossier. Performances faibles pour les écoulements 3D, les écoulements cisaillés libres et les écoulements avec une forte séparation. Approprié aux écoulements externes/internes modérément complexe (quasi-2D) et les écoulements dans les couches limites sous gradient de pression (surfaces aérodynamiques, ailes, fuselage d'avion, les missiles, les coques de navires).
Standard *k-ε*	Robuste. Largement utilisé, malgré les limites connues du modèle. Mauvaise performance pour les écoulements complexes impliquant ∇p sévère, la séparation, la forte courbure aérodynamique. Convient pour les versions initiales, première sélection des conceptions alternatives et des études paramétriques.
RNG *k-ε*	Approprié aux écoulements de cisaillement complexes impliquant la déformation rapide, tourbillon modérée, vortex et les écoulements localement transitoires (par exemple, la séparation de la couche limite, séparation massive et décollement de tourbillon derrière de corps non profilés, perte de vitesse dans les diffuseurs de grand angle, ventilation des pièces).
Realizable *k-ε*	Offre en grande partie les mêmes avantages et a les mêmes applications que RNG. Incapable d'utiliser de multiples référentiels. Peut-être plus précis et plus facile à converger que le RNG.
Standard *k-ω*	Une performance supérieure pour les écoulements dans les couches limites, cisaillement libre et les écoulements à faibles *Re*. Convient pour les écoulements complexes dans les couches limites sous gradient de pression (aérodynamique externe et turbo-machines). Peut être utilisé pour les écoulements de transition tend cependant à prévoir début de la transition). La séparation est généralement prévue pour être excessive et précoce.
SST *k-ω*	Des avantages similaires que le modèle standard *k-ω*. La dépendance de la distance de la paroi rend ce modèle moins approprié pour les écoulements de cisaillement.

RSM	Physiquement, c'est le modèle le plus solide des modèles RANS. Evite l'hypothèse de viscosité turbulente isotrope. Nécessite plus de temps CPU et de mémoire. Plus difficile à converger en raison de la fermeture du couplage des équations. Convient pour les écoulements complexe 3D avec une forte courbure aérodynamique, forte turbulence/rotation (par exemple, conduites courbés, des chambres de combustion de très grande turbulence à l'entrée, cyclones).

Fluent propose trois catégories de modèles de turbulence multiphasiques et elles sont toutes applicables à l'ébullition : Mixture, dispersée et par phase. Sous chaque catégorie, une gamme à 2 équations et à 7 équations des modèles de turbulence sont disponibles. Introduction de ϕ pour représenter les équations scalaires de turbulence (soit un mélange, pour le modèle de mixture, ou une variable de phase). Après option pour les équations différentielles à résoudre, s'agissant ici de la modélisation mathématique, il est nécessaire par ailleurs de transformer ces équations en équations algébriques (modélisation numérique), où toutes les variations continues des variables de l'écoulement doivent être représentées par des valeurs en des points discrets dans l'espace, les équations de modélisation de la turbulence ont la forme générale suivante [74], [16]:

$$\frac{\partial\left(\alpha_q \rho_q \emptyset_q\right)}{\partial t} + \nabla.\left(\alpha_q \rho_q \vec{u}_q \emptyset_q\right) = \nabla.\left(\alpha_q \Gamma_{\emptyset q} \nabla \emptyset_q\right) + \alpha_q S_{\emptyset q} \tag{III.37}$$

Où $\Gamma_{\emptyset q}$ est le terme de diffusion, $S_{\emptyset q}$ est le terme source comportant production, dissipation et termes extra source résultant des interactions des bulles turbulentes. Pour les modèles de turbulence de la mixture, le volume de la fraction de la phase α_q est égal à *1.0* pour l'équation de mixture. ρ_q est la masse volumique de la phase mixture et $\vec{u}_q$ est la vitesse de la mixture ou de la phase (en fonction des équations).

Le modèle de mixture représente la première extension du modèle monophasique *k-ε*, c'est le modèle le plus utilisé dans la littérature ainsi que dans les codes commerciaux tel que Fluent, il s'agit d'un modèle à deux équations introduit pour la première fois par Chou en 1945 et dont on doit la forme actuelle à Launder et Sharma, en 1974. Ce modèle est considéré comme le modèle de turbulence multiphasique par défaut. Lorsque le rapport de densité entre les phases est proche de 1 et lorsque les phases se séparent, pour des écoulements diphasiques stratifiés, ce modèle peut être appliqué de façon appropriée. Dans chacun de ces deux cas, en utilisant les vitesses de mélange et des propriétés est suffisant afin de capturer les caractéristiques importantes de l'écoulement turbulent. L'équation de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation qui décrit ce modèle sont [73], [16], [81]:

$$\frac{\partial(\rho_m k)}{\partial t} + \nabla.(\rho_m \vec{u}_m k) = \nabla.\left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_k}\nabla k\right) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon + S_k \tag{III.38}$$

et

$$\frac{\partial(\rho_m \varepsilon)}{\partial t} + \nabla.(\rho_m \vec{u}_m \varepsilon) = \nabla.\left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\varepsilon}\nabla \varepsilon\right) + \frac{\varepsilon}{k}\left(C_{1\varepsilon} G_{k,m} - C_{2\varepsilon}\rho_m \varepsilon\right) + S_\varepsilon \tag{III.39}$$

où ρ_m et $\vec{u}_m$ sont la densité et la vitesse du mélange et sont calculées comme suit :

$$\rho_m = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \, \rho_i \tag{III.40}$$

et

$$\vec{u}_m = \frac{\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i \vec{u}_i}{\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \rho_i} \quad \text{(III.41)}$$

La viscosité turbulent, $\mu_{t,m}$, est calculé ainsi:

$$\mu_{t,m} = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{(III.42)}$$

et la production d'énergie cinétique turbulente, $G_{k,m}$, est calculée par :

$$G_{k,m} = \mu_{t,m}(\nabla \vec{u}_m + (\nabla \vec{u}_m)^T) : \nabla \vec{u}_m \quad \text{(III.43)}$$

les deux termes supplémentaires qui ont été inclus pour décrire l'agitation de la bulle et la dissipation : l'un dans l'équation de l'énergie cinétique turbulente (S_k), et l'autre dans l'équation du taux de dissipation (S_ε):

$$S_k = \frac{3}{4} \frac{a_v(1-a_v)\rho_l C_D}{D_b} |\vec{u}_l - \vec{u}_v|^2 \quad \text{(III.44)}$$

$$S_\varepsilon = C_{\varepsilon 3} \frac{3C_D}{D_b} |\vec{u}_l - \vec{u}_v| S_k \quad \text{(III.45)}$$

Les valeurs des constantes des équations du modèle, obtenues expérimentalement avec l'écoulement d'air et d'eau utilisées dans le code Fluent, sont résumées dans le tableau III.2 ci-dessous.

Tableau III.2 : Valeurs des constantes empiriques du modèle k-ε

Constantes	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	$C_{3\varepsilon}$	C_μ	σ_k	σ_ε
Valeurs	1.44	1.92	0.45	0.09	1.0	1.3

III.6. Méthodes de discrétisation

Il est impossible de résoudre directement les équations décrites dans les sections précédentes (qui forment un ensemble d'équations simultanées aux dérivées partielles non linéaires). Au lieu de cela les équations sont converties à une forme algébrique simple qui peut être résolue numériquement. Ce processus est appelé discrétisation parce que des variables continues, comme ϕ, sont réduites à un ensemble de valeurs discrètes ϕ_i et les différentielles et les intégrales sont simplement des différences et des somme, de ces valeurs discrètes. Théoriquement [71] :

$$\left(\frac{\partial \emptyset}{\partial x}\right)_i \Rightarrow \frac{\emptyset_{i+1} - \emptyset_{i-1}}{2\Delta x} \quad \text{(III.46)}$$

$$\int \emptyset dx \Rightarrow \sum_i \emptyset_i \Delta x \quad \text{(III.47)}$$

Les valeurs discrètes sont localisées dans les centres de cellules (ou nœuds) dans une maille, et doivent être interpolées aux valeurs à face centrée au besoin.

Dans notre cas, les équations décrites précédemment n'ont pas de solution analytique. Pour ce faire, il faut choisir une méthode de discrétisation adaptée au problème. Les méthodes de discrétisations approchent la solution des équations différentielles avec une série d'équations algébriques, qui seront résolues en chaque point d'un ensemble de positions dans l'espace et dans le temps.

Les positions où les équations sont résolues sont définies par le maillage. Il existe une grande variété de méthodes de discrétisation, mais les plus implémentées en mécanique des fluides CFD sont [79] :

- Méthodes des différences finies,
- Méthodes des volumes finis,
- Méthodes des éléments finis.

Les choix des schémas de discrétisation, du solveur et des paramètres de contrôle des solutions sont ceux proposés par défaut par le logiciel. Ces choix font partie des règles de bonnes pratiques identifiées notamment dans les guides d'utilisation du logiciel.

Dans le code commercial Fluent V12.0.5, la méthode des volumes finis est utilisée. Cette méthode permet de résoudre les équations différentielles pour des géométries complexes. Les équations de conservations sont résolues dans chaque volume de contrôle. Le centre de la cellule contient le nœud ou les équations seront résolue, figure III.3. Il est nécessaire d'utiliser des méthodes d'interpolation pour relier les nœuds.

En général, les schémas de discrétisation peuvent être évalués en termes de leur précision, stabilité et efficacité [71] :

i) Précision : la précision est souvent considérée en termes d'erreurs de troncature des séries de Taylor. La plupart des schémas sont aux premiers ou deuxièmes ordre, cependant, certains codes implémentent des schémas d'ordre supérieur et hybrides (où le schéma varie d'une cellule à une autre sur la base des propriétés de l'écoulement tel que le nombre de Péclet). En plus de l'erreur de série de Taylor, certains schémas, tels que la différenciation en amont, sont sujettes à des fausses diffusions.

ii) Stabilité : la stabilité d'un schéma est sa capacité à produire une solution valable sur un large éventail de problèmes. Le schéma de discrétisation est stable quand il n'amplifie pas les erreurs au cours du processus de la solution numérique. Dans la pratique, la stabilité ne peut être assurée que si un schéma est :

- **Conservateur :** le flux calculé de la variable ϕ sur la face commune entre deux cellules doit être indépendant de la cellule considérée. Cela garantit que le principe de la conservation utilisée pour le calcul des équations principales est maintenu. Puisque les équations à résoudre obéissent aux lois de conservation, le schéma numérique doit être aussi. Ceci veut dire que les quantités conservées qui quittent un volume fermé doivent être égales aux quantités entrantes dans le cas stationnaire. Cette propriété est très importante puisqu'elle impose une contrainte sur l'erreur de la solution,

- **Délimitée** : la valeur de la variable ϕ dans un nœud devrait normalement (en l'absence de termes sources) se situent entre la valeur de la variable ϕ en nœuds voisins. La solution numérique doit être liée à ses propres limites (bornes), les quantités physiquement non

négatives telles que la densité et l'énergie cinétique turbulente doivent toujours être positives. Cette propriété est difficile à garantir surtout quand les mailles sont grossières. Les schémas du premier ordre garantissent parfois cette propriété,

- **Transport** : à savoir, le schéma respecte l'importance relative de la convection et la diffusion (i.e. le nombre de Péclet) et la direction de l'écoulement.

iii) Efficacité : l'efficacité est la quantité de calcul nécessaire pour parvenir à une solution définitive, elle est fortement dépendante du cas. Par exemple, bien que les schémas d'ordre supérieur nécessitent plus de calcul par cellule, ils sont souvent en mesure de produire une solution en moins d'itérations ou en utilisant un maillage plus grossier de même précision produites par une solution de premier d'ordre.

La méthode des volumes finis, comme la méthode des éléments finis et bien d'autres, discrétise le problème comme suit :

- Discrétisation spatiale : division du domaine de l'espace en un ensemble de cellules,
- Discrétisation temporelle : pour des problèmes transitoires, en divisant le domaine temporel en un nombre fini d'intervalles de temps, ou pas de temps,
- Discrétisation des équations : génération d'un système d'équations algébriques en termes de quantités discrètes définies à des endroits spécifiques dans le domaine, à partir des équations qui caractérisent le problème.

III.6.1. Discrétisation spatiale

La première démarche à suivre dans la résolution du problème numérique est la création du maillage. C'est une étape extrêmement importante qui consiste à diviser le domaine géométrique du problème en un nombre précis de sous domaine ou de volumes de contrôle. L'ensemble des volumes de contrôle forme le maillage. La figure III.3 schématise les volumes de contrôle en 2D et 3D.

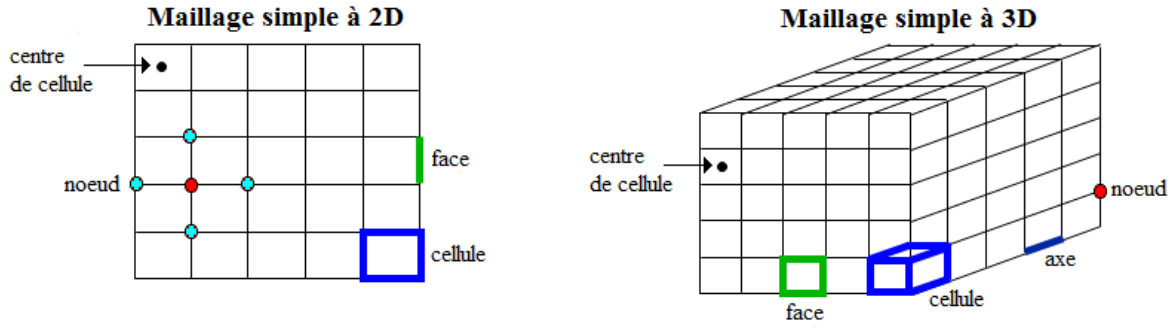


Fig.III.3 : Eléments de maillage

Un maillage peut être structuré ou non structuré, en fonction des types de cellules qui le composent. Chaque volume de contrôle à un nombre précis de faces ainsi qu'un nombre précis de nœuds. La figure III.4 schématise les types de cellules. Les maillages structurés sont constitués par des volumes de contrôle avec une forme de quadrilatère en configuration 2D et d'hexaèdre ou prisme en configuration 3D. L'intérêt principal est de créer une structure qui puisse être alignée avec l'écoulement, de manière à minimiser la diffusion numérique. Néanmoins, les maillages structurés ne sont utilisables que pour des structures géométriques simples.

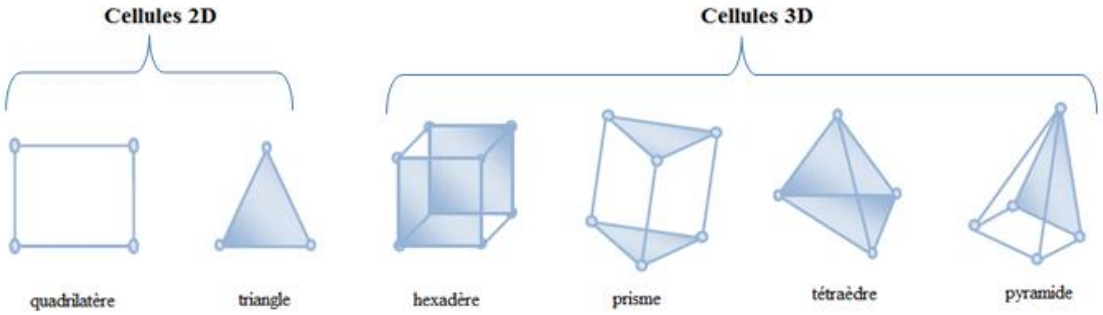


Fig.III.4 : Types de cellules [79]

Une alternative pour des géométries très complexes est d'utiliser des maillages non structurés. Ils n'ont pas de restriction dans les nombres d'éléments voisins et peuvent avoir en théorie n'importe quelle forme. En pratique, les maillages non structurés sont formés de volume de contrôle triangulaires pour les géométries en 2D, et tétraédriques ou pyramidaux en 3D. Le principal inconvénient dans ce type de maillage est l'irrégularité de la structure des données.

L'utilisation de maillages hybrides est une alternative intéressante pour des systèmes complexes. Il est possible de créer des volumes de contrôle structurés dans des zones avec des géométries simples et non structurées dans les zones avec des géométries plus complexes. La principale difficulté lors de l'utilisation des maillages hybrides vient de la nécessité de concordance aux interfaces des zones structurées et non structurées. La qualité de chaque volume de contrôle est mesurée par le coefficient de déformation géométrique, Ξ (equiangle skew, en Anglais) qui est défini par [79], [16]:

$$\Xi = max\left[\frac{\theta_{max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{min}}{\theta_e}\right] \qquad \text{(III.48)}$$

Où θ_e est l'angle d'élongation idéale (face/cellule), il est égal à 90° pour la cellule quadrilatère et hexaèdre et est égal à 60° pour la cellule triangle et tétraèdre, voir figure III.5.

La grandeur Ξ varie de 0 à 1, zéro correspond à un maillage de très bonne qualité et 1 correspond à un maillage de mauvaise qualité. La valeur limite recommandée est Ξ =0.9. Des volumes de contrôle de bonne qualité permettront une convergence plus rapide en réduisant les erreurs de calcul numérique.

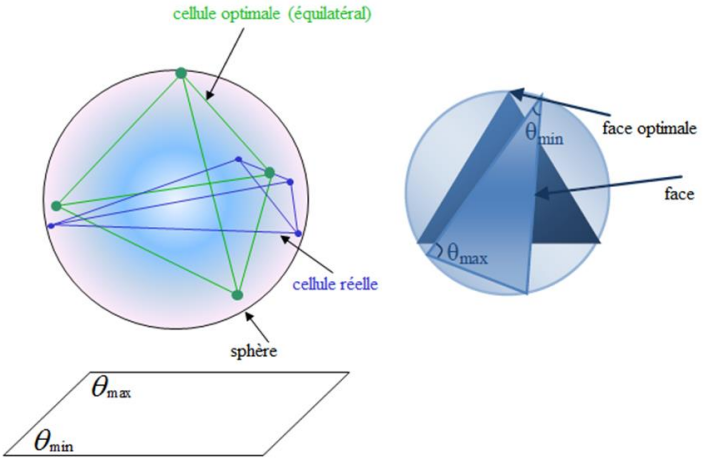


Fig.III.5 : Elément du volume de contrôle [79]

III.6.2. Discrétisation temporelle

La discrétisation spatiale n'est pas suffisante lorsqu'il s'agit d'écoulements transitoires. Une discrétisation temporelle, par une division du temps de simulation en différents pas de temps *dt*, qui soit compatible avec le maillage et avec les modèles physiques choisis, s'avère nécessaire pour procéder ensuite à une intégration de chaque équation de conservation, des mécanismes physiques auxquels on s'intéresse, sur chaque pas de temps.

IL existe une grande variété de méthodes de discrétisation temporelle, mais les plus implémentées en mécanique des fluides CFD sont :

- Schémas d'Euler,
- Schémas de Runge-Kutta,
- Schémas avec discrétisation du terme source (Crank-Nicolson, Adams-Bashforth).

Pour les solutions transitoires, c'est-à-dire

$$\frac{\partial(\rho\emptyset)}{\partial t} \neq 0 \qquad \text{(III.49)}$$

Le domaine temporel du problème est divisé en pas de temps discrets de taille finie. Ce processus est similaire à la discrétisation spatiale décrite dans la section III.8

Une fois que le schéma numérique est établi et que le problème discret est formulé, il s'agit non seulement de le résoudre, mais encore de s'assurer que la solution discrète converge vers la solution exacte lorsque les pas du maillage tendent vers 0.

Pour certains schémas dits explicites, il est possible d'ordonner les inconnues de telle sorte que chacune d'elle puisse être déterminée récursivement à partir des précédentes qui sont supposées être déjà calculées (la valeur de ϕ à un pas de temps ne se trouve que par référence à la solution au pas de temps précédent). Pour les schémas implicites, il est parfois possible d'éviter de résoudre l'ensemble du système de toutes les équations. C'est en particulier le cas pour un système évolutif dont l'état, caractérisé par des variables spatiales, est défini par des conditions initiales (t = 0), puis évolue progressivement au cours du temps : le schéma numérique reste explicite dans la variable temporelle et son caractère implicite ne concerne que les variables spatiales (la valeur pour ϕ est déterminée par référence à la fois au pas de temps précédent et au pas de temps actuel). Les schémas implicites sont stables et pour cette raison sont préférés pour la plupart des applications malgré leur complexité accrue.

III.6.3. Discrétisation des équations

Dans tous les cas, chaque équation du schéma numérique ne concerne qu'un petit nombre d'inconnues. Dans un environnement linéaire, cette propriété conduit à formuler le problème discret à l'aide de matrices creuses et à en tirer profit pour le résoudre en utilisant des méthodes appropriées. Cet avantage est indéniable lorsque la taille du maillage dépasse le cadre d'une étude didactique.

La résolution des schémas numériques s'appuie en général sur des méthodes algébriques classiques. Cependant d'autres formulations équivalentes peuvent faire appel à des méthodes d'optimisation.

Le système algébrique obtenu après discrétisations spatiale et temporelle est énorme et les équations sont fortement couplées. Des méthodes itératives sont alors utilisées pour obtenir une solution. Le nombre d'itérations pour résoudre les équations à chaque pas de temps doit être fixé, ou alternativement, un critère indiquant la convergence de la solution doit être défini. Les paramètres qui peuvent être suivis, pendant le calcul d'une solution pour juger de la convergence de la solution, sont variables d'un outil CFD à un autre et il peut donc être plus ou moins facile de s'assurer de la convergence [82].

III.7. Traitement de la paroi

L'objectif de ce paragraphe est de fournir quelques éléments de compréhension de la physique des écoulements turbulents anisothermes près de la paroi, afin d'en envisager la modélisation par des modèles de parois ou d'en tenir compte lors de simulations de référence fines.

Les modèles de turbulence ne sont plus valides dans les zones proches des parois, caractérisées par de fortes contraintes et un gradient de vitesse très important et où le moteur de la diffusion de quantité de mouvement n'est plus associé à la turbulence mais à la diffusion moléculaire. L'adhérence sur les murs impose une vitesse nulle à la paroi. Un écoulement dans la couche limite classiquement observé est présenté sur la figure III.6. On notera que dans ce graphique, des grandeurs sans dimension, basées sur des caractéristiques de l'état de turbulence sont utilisées. On définit pour cela une vitesse caractéristique u_τ , appelée vitesse de frottement et une longueur caractéristique *l* (demi-hauteur d'un canal, ou rayon d'un tuyau par exemple) [83] :

$$u_\tau = \left(\nu \frac{\partial u}{\partial x_n}\right)_w^{1/2} \tag{III.50}$$

$$l = \frac{\nu}{u_\tau} \tag{III.51}$$

Où x_n désigne la direction normale à la paroi et ν désigne la viscosité cinématique.

Les grandeurs rendues sans dimension telles que la vitesse, notée u^+, et les distances, y^+, seront exprimées en unités de paroi par [83]:

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \tag{III.52}$$

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \tag{III.53}$$

Où *y* désigne la distance à la paroi.

A partir de cet adimensionnement, on peut aussi exprimer un temps caractéristique de la turbulence de paroi par :

$$t_\tau = \frac{\nu}{u_\tau^2} \tag{III.54}$$

Et un nombre de Reynolds turbulent tel que :

$$Re_\tau = \frac{lu_\tau}{\nu} \tag{III.55}$$

Les couches limites turbulentes canoniques sont caractérisées par 3 zones distinctes, figure III.6 [83]:

- La sous couche visqueuse pour $0 \leq y^+ < 5$, la couche la plus proche du mur. L'écoulement y est laminaire et la viscosité moléculaire joue un rôle important,

$$u^+ = y^+ \tag{III.56}$$

- La zone intermédiaire pour $5 \leq y^+ < 30$, au sein de laquelle les effets de la viscosité moléculaire et de turbulence sont d'égales importances, c'est une zone tampon, complexe située entre les deux régions précédentes. On définit une fonction qui assure la continuité entre les lois de la sous couche visqueuse et la région à la loi logarithmique,

$$u^+ = \frac{1}{0.2} lny^+ - C_1 \tag{III.57}$$

  0ù C_1 est une constante d'intégration, C_1 = 3.05,

- Enfin, la couche extérieure, appelée couche pleinement turbulente pour y^+>30, c'est la zone la plus éloignée de la paroi dans laquelle l'écoulement est conditionné par la vitesse maximale et il est peu influencé par les effets de la viscosité moléculaire. L'écoulement suit une loi logarithmique,

$$u^+ = \frac{1}{k} lny^+ + C_2 \tag{III.58}$$

  0ù k est la constante de Karman, k = 0.41 et C_2 = 5.45.

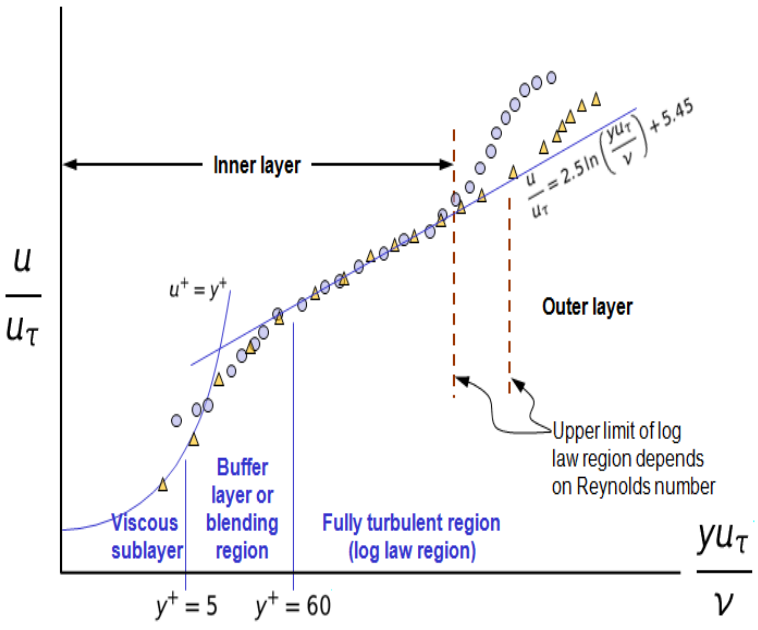


Fig.III.6 : Lois de la couche limite [84]

Pour la température, nous obtenons de la même manière [85]:

- zone laminaire pour $y^+ < 10$

$$T^+ = Pr\, y^+ \tag{III.59}$$

- zone log pour $y^+ > 10$

$$T^+ = \frac{Pr_t}{k} lny^+ + \beta \tag{III.60}$$

Où Pr_t est le nombre de Prandtl turbulent,

$$Pr_t = \frac{\nu_t}{a_t} \tag{III.61}$$

Et

$$\beta = 13.7Pr^P - 7.5 \tag{III.62}$$

Où a_t est la diffusivité thermique et P la pression.

Ceci illustre une loi de paroi de type "log" à une échelle. Il est donc fait l'hypothèse d'un écoulement turbulent en proche paroi. Il existe d'autres lois de paroi (loi log à deux échelles, modèle à deux couches. Suivant le régime d'écoulement (convection naturelle, forcée ou mixte), elles seront plus ou moins valables [85].

La couche limite est divisée en plusieurs zones : la zone interne et la zone externe. Plusieurs approches sont disponibles avec Ansys-Fluent® pour modéliser la sous-couche visqueuse et la zone tampon de la zone interne [86]:

- La première approche est d'utiliser une Wall Function Approach. Cette dernière utilise une loi de paroi semi-empirique en régime turbulent lisse pour modéliser l'effet de la couche limite turbulente sur l'écoulement. Il suffit alors d'une seule maille associée à cette loi pour modéliser la couche limite de proche paroi. Cette approche, moins précise, nécessite beaucoup moins de mailles de calcul. Elle impose cependant une contrainte sur la dimension des mailles situées sur les bords qui doivent correspondre à peu près à la couche modélisée. Il faut ainsi que

$$30 < y^+ < 300 \tag{III.63}$$

En supposant que la taille caractéristique des premières mailles est de l'ordre du centimètre, il faut vérifier que la vitesse caractéristique moyenne de l'écoulement u soit bien comprise entre

$$0.1\ ms^{-1} < u < 100\ ms^{-1} \tag{III.64}$$

FLUENT propose quatre options pour traiter la turbulence près des parois : les fonctions standard de parois (Standard Wall-Functions), les fonctions de parois évolutives (Scalable Wall-Functions), les fonctions de parois non équilibrées (Non-equilibrium wall-function) est particulièrement adaptée pour les écoulements complexes, soumis à de forts gradients de

pression et un traitement amélioré des lois de parois (Enhanced wall treatment) qui tient le plus compte de l'effet de paroi. Dans chacun de ces cas, une vérification a posteriori doit être faite afin de vérifier le maillage. Cela se fait en regardant les valeurs que prend y^+ [84].

- La deuxième approche est de mailler finement cette zone et calculer exactement les écoulements dans la sous couche visqueuse et dans la région de recouvrement avec la Near-Wall Model Approach. Cette technique, plus précise, nécessite un affinement du maillage en proche paroi, ce qui requiert un grand nombre de mailles.

III.8. Conclusion

Tout au long de ce chapitre, nous avons tenté de donner un maximum d'informations sur la structure du code Fluent, au début de ce chapitre, nous avons passé en revue les échelles d'analyse qui permettent la prédiction des écoulements fluides. Ensuite, les avantages, développement, vérification et validation d'un modèle sous des codes CFD ont été discutés. Dans ce chapitre, la procédure de solution numérique a été discutée. Enfin, les stratégies de discrétisations spatiales et temporelles, les techniques de stabilisation et traitement de la paroi ont été présentés.

CHAPITRE IV

Modélisation des propriétés de l'eau et de la vapeur et l'implémentation des UDF

Lors du chapitre précédent, on s'est intéressé aux différentes échelles d'analyse et à l'examen des différentes techniques des CFD qui sont utilisées pour modéliser les processus physiques impliqués dans l'ébullition nucléée sous-saturée convective. La structure du code Fluent a été développée, essentiellement les options que propose ce code pour des problèmes tels que les notre.

L'objectif de ce chapitre est la modélisation des propriétés de l'eau en son état liquide et vapeur dans une gamme d'opération à des pressions et des températures élevées. La première partie est consacrée à la présentation du fondement théorique du formalisme de l'association internationale pour les propriétés de l'eau et de la vapeur (IAPWS, pour International Association for the Properties of Water and Steam en Anglais) implémenté dans le code CFD ANSYS-CFX et le code système Relap.

La deuxième partie de ce chapitre est dédiée au développement d'une nouvelle approche basée sur les réseaux de neurones pour le calcul des propriétés thermodynamiques et de transport de l'eau aux états liquide et vapeur. Cette approche inspirée du traitement de l'information effectué par le cerveau, semble offrir un nouvel espace de modélisation.

La dernière partie de ce chapitre est destinée à l'implémentation des fonctions définies par les utilisateurs (UDF, pour User Defined Functions en Anglais) pour la personnalisation du solveur Fluent. Ces fonctions sont des codes écrits en langage C.

IV.1. Equations du formalisme IAPWS

Pour qu'un système d'approximation de propriétés physiques soit idéal il doit [87] :

- fournir les propriétés physiques et thermodynamiques fiables pour les substances pures et composés à n'importe quelle température, pression et composition,
- indiquer la phase (solide, liquide ou gaz),
- exiger un minimum de données d'entrée,
- choisir le chemin de moindre erreur (c.-à-d. la meilleure méthode d'évaluation),
- indiquer l'erreur probable,
- réduire au minimum le temps de calcul.

Parallèlement au développement des codes de calcul thermohydrauliques et dans un souci de gain de temps et de place-mémoire des gros ordinateurs utilisés, diverses formulations d'approximation de propriétés se sont développées. Ainsi, des fonctions d'approximation permettent de déterminer les principales propriétés de l'eau.

Dans le domaine double phase (mélange de liquide et de vapeur à saturation), les propriétés thermodynamiques de l'eau dépendent d'une seule variable d'état (on retient en général la température, la pression ou quelquefois l'enthalpie pour les codes de calcul). Pour la simple phase (eau liquide ou vapeur surchauffée), l'élaboration des formulations est plus laborieuse car l'évolution des propriétés thermodynamiques est alors fonction de deux variables d'état (on retient en général les couples p,T ou p,h). Les fonctions mises au point sont plus complexes mais toujours performantes et en tout cas compétitives vis-à-vis des tables à condition de bien cerner le domaine d'utilisation [88], [89].

Dans ce paragraphe, nous présentons le formalisme, le plus utilisé dans le domaine nucléaire, le formalisme de l'IAPWS (association internationale pour les propriétés de l'eau et de la vapeur) utilisée par le code CFD ANSYS-CFX et le code système Relap [90].

IV.1.1. Constantes de référence

Ce paragraphe récapitule toutes les constantes de référence requises pour évaluer les équations du formalisme IAPWS [90].

La constante spécifique des gaz de l'eau ordinaire,

$$R = 0.461\,526\ kJ/kgK$$

La valeur recommandée de la constante molaire des gaz,

$$R_m = 8.314\,51\ kJ/kmolK$$

Et à partir de la masse molaire de l'eau ordinaire,

$$M = 18.015\,257\ kg/kmol$$

Les valeurs des paramètres critiques, correspondantes aux publications d'IAPWS :

$$T_c = 647.096\ K$$
$$p_c = 22.064\ MPa$$
$$\rho_c = 322\ kg/m$$

Selon ITS-90 (International Temperature Scale of 1990), la température du point-triple est :

$$T_t = 273.16\ K$$

Et la pression du point-triple est déterminée par Guildner et al.

$$p_t = 611.657\ Pa$$

Selon la norme scientifique de la formulation IAPWS-95, pour les propriétés thermodynamiques de l'eau ordinaire, la température du point d'ébullition normal (à une pression de *0.101325 MPa* (*1 atm*)) s'élève à :

$$T_b = 373.1243\ K$$

IV.1.2. Formulation industrielle d'IAPWS 1997

Lors de la réunion d'IAPWS dans Erlangen, l'Allemagne en 1997, la "formulation industrielle d'IAPWS 1997 pour les propriétés thermodynamiques de l'eau et de la vapeur" a été adoptée en tant que nouvelle norme industrielle internationale pour les propriétés thermodynamiques de l'eau et de la vapeur. Cette nouvelle norme industrielle s'appelle également "la formulation industrielle d'IAPWS 1997" ou "IAPWS-IF97" pour l'abréviation. La formulation IAPWS-IF97 a remplacé la norme industrielle précédente IFC-67 [91]. En comparaison avec IFC-67, l'IAPWS-IF97 améliore de manière significative l'exactitude et la vitesse de calcul des propriétés thermodynamiques.

Ce paragraphe présente toutes les informations sur les différentes équations d'IAPWS-IF97 nécessaire pour le calcul des propriétés thermodynamiques de l'eau et de la vapeur. Il inclut également les équations régressives supplémentaires développées après 1997 et adoptées par l'IAPWS entre 2001 et 2005 et également une nouvelle équation de base pour la région à hautes températures *1073.15 K* à *2273.15 K* pour des pressions jusqu'à *50 MPa* (*10 MPa* précédemment) [92].

IV.1.2.1. Caractéristiques d'IAPWS-IF97

Cette section fournit des informations générales au sujet de la structure de la formulation industrielle IAPWS-IF97, y compris le domaine de validité, la qualité d'IAPWS-IF97 et l'uniformité le long des frontières des régions.

En outre, des rapports sur la vitesse de calcul non seulement quand les équations de bases sont employées pour des calculs des propriétés qui ne dépendent pas de la pression et de la température, mais également quand les équations régressives supplémentaires sont utilisées.

IV.1.2.1.1. Structure d'IAPWS-IF97

La formulation industrielle d'IAPWS 1997 se compose d'un ensemble d'équations pour différentes régions qui couvrent le domaine de validité suivante [90] :

$$273.15\ K \le T \le 1073.15\ K \qquad 0 < p \le 100\ MPa$$
$$1073.15\ K < T \le 2273.15\ K \qquad 0 < p \le 50\ MPa$$

La figure IV.1 montre les cinq régions, lesquelles divisent le domaine de validité d'IAPWS-IF97. Les régions 1 et 2 sont couvertes chacune par une équation fondamentale pour l'énergie libre spécifique de Gibbs $g(p,T)$, la région 3 par une équation fondamentale pour l'énergie libre spécifique de Helmholtz $f(\rho,T)$ et la région 4, région biphasée (correspond à la courbe de saturation dans le diagramme de p-T), par une équation de saturation-pression $p_s(T)$. La région à hautes températures, la région 5, est également couverte par l'équation $g(p,T)$. Ces cinq équations, montrées dans des boîtes rectangulaires dans la figure IV.1, forment les équations de bases.

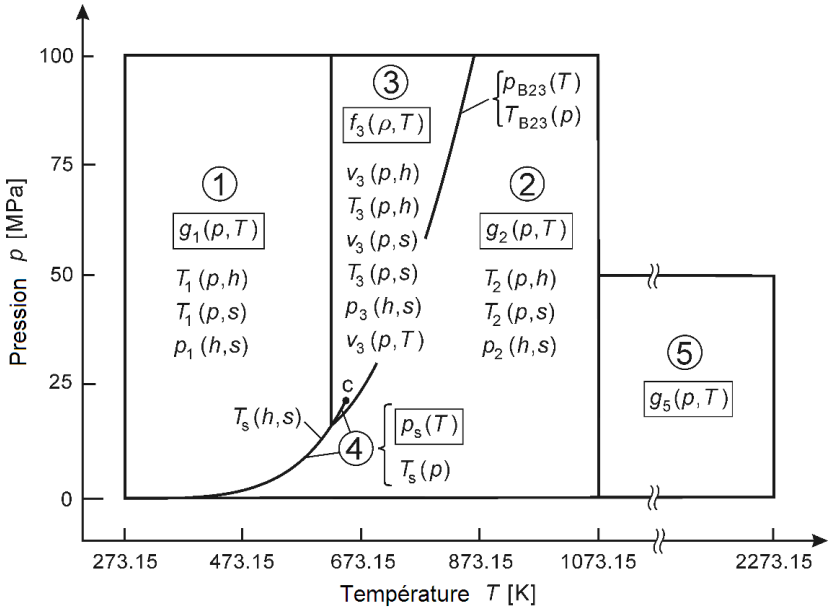


Fig.IV.1 : Régions et équations de la formulation IAPWS-IF97 [90]

La norme industrielle IAPWS-IF97 a été couplée à la norme scientifique, la "formulation 1995 d'IAPWS pour les propriétés thermodynamiques de l'eau ordinaire pour l'usage général et scientifique", ci-après abrégée à IAPWS-95 [91]. Ce couplage a été réalisé en adaptant les équations de base des régions 1, 3 et 5 aux valeurs du volume spécifique *v*, de l'enthalpie spécifique *h*, de la capacité thermique isobare spécifique C_p et de la vitesse du son *W* calculée à partir d'IAPWS-95 [92]. En conséquence, l'équation de base pour la région 4, l'équation de la pression de saturation, a été adaptée aux valeurs de la pression de saturation p_s calculée à partir d'IAPWS-95.

En plus de ces équations de bases, les équations régressives sont données pour toutes les régions excepté la région 5, où les équations régressives sont valides seulement pour les pressions $p \geq p_s$ *(273.15 K)* $\approx$ *0.000611 MPa*. Ces équations régressives ont été développées par la combinaison des variables suivantes :

- Pour les régions 1 et 2 les équations de la forme *T(p,h), T(p,s),* et *p(h,s),*
- Pour région 3 les équations de la forme *v(p,h), T(p,h), v(p,s), T(p,s), p(h,s),* et *v(p,T),*
- Pour la région 4 (entière), l'équation de la température de saturation de la forme $T_s(p)$, et techniquement pour la partie la plus importante de la région 4 (de $s \geq s''$ (*623.15 K*)) l'équation de la température de saturation de la forme $T_s(h,s)$.

Dans la figure IV.1, en plus des équations de bases (encadrées), tous ces types d'équations régressives sont assignés à la région correspondante d'IAPWS-IF97. Les indices inférieurs se rapportent à la région pour laquelle l'équation est valide.

Ces équations régressives ont été développées de telle manière qu'elles soient numériquement très compatibles avec l'équation de base correspondante. Ainsi, les propriétés en fonctions de *(p,h), (p,s)* et *(h,s)* pour les régions 1, 3, de (*p*) pour l'entière région 4 et de (*h,s*) techniquement pour la partie la plus importante de la région 4 peuvent être calculées sans n'importe quelle itération. En raison de l'équation régressive *v(p,T)* pour la région 3, le volume spécifique peut être calculé pour cette région sans nécessité de son itération à partir de l'équation de base $f_3(\rho,T)$. En conséquence, les propriétés telles que *s(p,h)* et *h(p,s)* peuvent être calculées directement à partir de l'équation régressive correspondante ou par combinaison avec l'équation de base correspondante, par

exemple, *h(p,s)* par l'intermédiaire de la relation *h(p,T(p,s))*. Le résultat de ce concept spécial de la norme industrielle IAPWS-IF97, est que la plus part des propriétés importantes peuvent être calculées extrêmement rapidement [88].

IV.1.2.1.2. Qualité d'IAPWS-IF97

La qualité globale atteinte de la formulation industrielle IAPWS-IF97 est caractérisée par les résultats généraux suivants à la lumière des trois critères d'exactitude, d'uniformité entre les équations de base le long des frontières de région et entre les équations régressives le long des frontières de sous-région et la vitesse de calcul.

L'exactitude d'IAPWS-IF97 est illustrée par le fait que pour tout le domaine de validité seulement *0.2%* des valeurs calculées de *v*, *6%* des valeurs de C_p, *2%* des valeurs de *W* et aucune des valeurs de p_s sont en dehors de l'incertitude des valeurs correspondantes d'IAPWS-95 [92]. En effectuant le même test avec la norme industrielle précédente IFC-67, entre *47%* (pour *v*) et *80%* (pour la p_s) des valeurs IFC-67 étaient en dehors de l'incertitude des valeurs correspondantes d'IAPWS-95. Basant sur toutes les comparaisons faites on peut conclure qu'IAPWS-IF97 est plus précise que l'IFC-67. En plus de la représentation des propriétés pour les régions homogènes stables et à la saturation, les équations IAPWS-IF97 correspondantes rapportent également des valeurs raisonnables pour la région liquide surchauffé métastable et la région vapeur sous-refroidie métastable près de la ligne du liquide saturé et de la ligne de la vapeur saturée, respectivement.

IV.1.2.2. Equations de base de l'IAPWS-IF97

La figure IV.2 montre l'attribution des cinq équations de base aux régions correspondantes. Les frontières des régions peuvent être prises directement de la figure IV.2 excepté la frontière entre les régions 2 et 3, cette frontière est définie par l'équation dite B23 illustrée dans la section §IV.1.2.2.1.

La frontière *T=623.15 K* appartient aux régions 1 et 3, la frontière correspondante à la ligne p_{B23} (la ligne T_{B23} est exactement la même ligne, voir les équations. (IV.1) et (IV.2)) appartient aux régions 2 et 3 et la frontière *T=1073.15 K* appartient aux régions 2 et 5. Ainsi, les propriétés le long de ces frontières peuvent être calculées à partir des équations g_1(p,T) ou $f_3(\rho,T)$ sur la frontière *T = 623.15 K*, à partir des équations $g_2(p,T)$ ou $f_3(\rho,T)$ sur la frontière $p_{B23}(T)$ et à partir des équations $g_2(p,T)$ ou $g_5(p,T)$ sur la frontière *T=1073.15 K*. De cette façon, sur ces frontières on obtient des valeurs légèrement différentes à partir des équations g_1 et f_3, des équations g_2 et f_3, et des équations g_2 et g_5. Afin d'éviter de telles ambiguïtés, la frontière *T=623.15 K* est considérée comme appartenant à la région 1 et les frontières $p_{B23}(T)$ et *T=1073.15 K* sont considérées comme appartenant à la région 2. Ainsi, les propriétés le long de ces frontières peuvent être calculées clairement à partir des équations g_1 et g_2, respectivement [90].

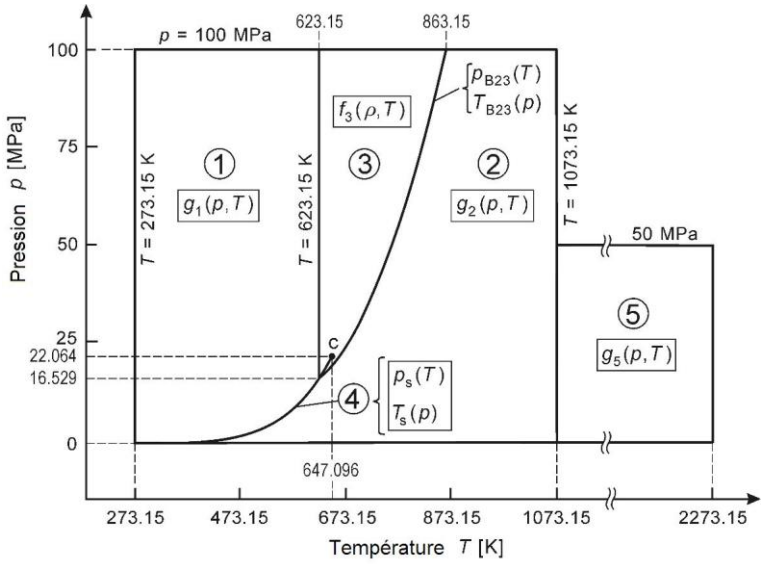


Fig.IV.2 : L'attribution des équations de base aux cinq régions d'IAPWS-IF97 [90]

Bien que l'équation de la température de saturation $T_s(p)$ est formellement une équation régressive [93], elle est néanmoins incluse dans cette section parce qu'elle a été dérivée de la même équation quadratique implicite pour la ligne de saturation, équation IV.12, comme l'équation de la pression de saturation $p_s(T)$, elle est, en opposée avec les équations régressives "normales", complètement compatible avec l'équation $p_s(T)$. Ainsi, l'équation de la température de saturation $T_s(p)$ est considérée comme une équation de base.

En utilisant seulement les équations de base pour le calcul de toutes les propriétés thermodynamiques en fonction des combinaisons les plus importantes des variables d'entrées autres que *(p,T)*, par exemple *(p,h)*, *(p,s)*, et *(h,s)*, en raison des itérations nécessaires, le calcul est clairement plus lent que le calcul par l'intermédiaire des équations régressives, mais compatible à toutes les propriétés à un point donné par les deux variables d'entrée choisies.

IV.1.2.2.1. Equation auxiliaire pour la frontière entre les régions 2 et 3

La frontière entre les régions 2 et 3, voir figure IV.2, est définie par la relation quadratique simple pression-température suivante (l'équation *B23*) :

$$\frac{p_{B23}(T)}{p^*} = \pi(\theta) = n_1\theta + n_2\theta + n_3\theta^2 \qquad \text{(IV.1)}$$

Où : $\pi = p/p^*$ et $\theta = T/T^*$ avec $p^* = 1MPa$ et $T^* = 1K$. Les coefficients n_1, n_2 et n_3 de l'équation IV.1 sont énumérés dans le Tableau IV.1. L'équation IV.1 décrit la ligne isentropique, les valeurs d'entropie suivant cette ligne de frontière sont entre $s = 5.047\ kJ/kgK$ et $s = 5.261\ kJ/kgK$. Alternativement, l'équation IV.1 peut être exprimée explicitement en température comme :

$$\frac{T_{B23}(p)}{T^*} = \theta(\pi) = n_4 + \left[\frac{(\pi - n_5)}{n_3}\right]^{0.5} \qquad \text{(IV.2)}$$

Avec θ et π comme défini pour l'équation IV.1 et les coefficients n_3, n_4 et n_5 sont énumérés dans le Tableau IV.1. Les équations IV.1 et IV.2 couvrent la gamme de *623.15 K* à *16.5292 MPa* à *863.15 K* à *100 MPa.*

Tableau IV.1 : Coefficients des équations IV.1 et IV.2 ($p_{B23}(T)$ et $T_{B23}(p)$)

i	n_i	i	n_i
1	0.348 051 856 289 69 × 10^{3}	4	0.572 544 598 627 46 × 10^{3}
2	- 0.116 718 598 799 75 × 10^{1}	5	0.139 188 397 788 70 × 10^{2}
3	0.101 929 700 393 26 × 10^{-2}		

IV.1.2.2.2. Equation de base de la région 1

L'équation de base pour cette région est l'équation fondamentale de l'énergie libre spécifique de Gibbs *g*. Cette équation est exprimée en forme adimensionnelle comme suit :

$$\frac{g_1(p,T)}{RT} = \gamma(\pi,\tau) = \sum_{i=1}^{34} n_i\,(7.1-\pi)^{I_i}(\tau-1.222)^{J_i} \qquad \text{(IV.3)}$$

Où : $\pi=p/p^{*}$ et $\tau=T^{*}/T$ avec $p^{*}=16.53MPa$ et $T^{*}=1386K$, $R=0.461526\ kJ/kgK$ selon l'équation IV.1. Les coefficients n_i et les exposants I_i et J_i de l'équation IV.3 sont énumérés dans le Tableau IV.2.

Toutes les propriétés thermodynamiques peuvent être dérivées de l'équation IV.3 en utilisant les combinaisons appropriées de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de ses dérivées. Les relations des propriétés thermodynamiques appropriées et leurs dérivés sont récapitulées dans le Tableau IV.3. En outre, toutes les dérivées partielles formées par les propriétés *p, T, v, u, h, s, g* et *f* peuvent être facilement calculées.

Toutes les dérivées requises de l'équation pour l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.3, sont explicitement données dans le Tableau IV.4.

Depuis la 5ème Conférence Internationale sur les propriétés de la vapeur à Londres en 1956, l'énergie interne spécifique et l'entropie spécifique du liquide saturé au point triple ont été fixées à zéro :

$$u_t^{'} = 0;\ s_t^{'} = 0 \qquad \text{(IV.4)}$$

Afin de remplir cette condition à la température et à la pression du point triple, voir les équations IV.7 et IV.8, les coefficients n_3 et n_4 de l'équation IV.3 ont été ajustés en conséquence, qui a comme résultat une enthalpie spécifique du liquide saturé au point triple donné par :

$$h_t^{'} = 0.000611783\ kJ/kg \qquad \text{(IV.5)}$$

Tableau IV.2 : Coefficients et exposants de l'équation de base $g_1(p,T)$ sous la forme adimensionnelle, équation IV.3

i	I_i	J_i	n_i	I	I_i	J_i	n_i
1	0	-2	0.146 329 712 131 67	18	2	2	-0.441 418 453 308 46 × 10^{-5}
2	0	-1	-0.845 481 871 691 14	19	2	2	-0.726 949 962 975 94 × 10^{-15}
3	0	0	-0.375 636 036 720 40 × 10^{1}	20	3	3	-0.316 796 448 450 54 × 10^{-4}
4	0	1	0.338 551 691 683 85 × 10^{1}	21	3	3	-0.282 707 979 853 12 × 10^{-5}
5	0	2	-0.957 919 633 878 72	22	3	6	-0.852 051 281 201 03 × 10^{-9}
6	0	3	0.157 720 385 132 28	23	4	-5	-0.224 252 819 080 00 × 10^{-5}
7	0	4	-0.166 164 171 995 01 × 10^{-1}	24	4	-2	-0.651 712 228 956 01 × 10^{-6}
8	0	5	0.812 146 299 835 68 × 10^{-3}	25	4	10	-0.143 417 299 379 24 × 10^{-12}
9	1	-9	0.283 190 801 238 04 × 10^{-3}	26	5	-8	-0.405 169 968 601 17 × 10^{-6}
10	1	-7	-0.607 063 015 658 74 × 10^{-3}	27	8	-11	-0.127 343 017 416 41 × 10^{-8}
11	1	-1	-0.189 900 682 184 19 × 10^{-1}	28	8	-6	-0.174 248 712 306 34 × 10^{-9}

12	1	0	$-0.325\,297\,487\,705\,05 \times 10^{-1}$	29	21	-29	$-0.687\,621\,312\,955\,31 \times 10^{-18}$
13	1	1	$-0.218\,417\,171\,754\,14 \times 10^{-1}$	30	23	-31	$0.144\,783\,078\,285\,21 \times 10^{-19}$
14	1	3	$-0.528\,383\,579\,699\,30 \times 10^{-4}$	31	29	-38	$0.263\,357\,816\,627\,95 \times 10^{-22}$
15	2	-3	$-0.471\,843\,210\,732\,67 \times 10^{-3}$	32	30	-39	$-0.119\,476\,226\,400\,71 \times 10^{-22}$
16	2	0	$-0.300\,017\,807\,930\,26 \times 10^{-3}$	33	31	-40	$0.182\,280\,945\,814\,04 \times 10^{-23}$
17	2	1	$0.476\,613\,939\,069\,87 \times 10^{-4}$	34	32	-41	$-0.935\,370\,872\,924\,58 \times 10^{-25}$

Tableau IV.3 : Relation des propriétés thermodynamiques à l'énergie libre de Gibbs Adimensionnelle γ et de ses dérivées en utilisant l'équation IV.3

Propriété	Relation
Volume spécifique $v = (\partial g/\partial p)_T$	$v(\pi,\tau)\dfrac{p}{RT} = \pi\gamma_\pi$
Enthalpie spécifique $h = g - T(\partial g/\partial T)_p$	$\dfrac{h(\pi,\tau)}{RT} = \tau\gamma_\tau$
Energie interne spécifique $u = g - T(\partial g/\partial T)_p - p(\partial g/\partial p)_T$	$\dfrac{u(\pi,\tau)}{RT} = \tau\gamma_\tau - \pi\gamma_\pi$
Entropie spécifique $s = -\left({\partial g}/{\partial T}\right)_p$	$\dfrac{s(\pi,\tau)}{R} = \tau\gamma_\tau - \gamma$
Capacité thermique isobare spécifique $C_p = \left({\partial h}/{\partial T}\right)_p$	$\dfrac{C_p(\pi,\tau)}{R} = -\tau^2\gamma_{\tau\tau}$
Capacité thermique isochore spécifique $C_v = \left({\partial u}/{\partial T}\right)_v$	$\dfrac{C_v(\pi,\tau)}{R} = -\tau^2\gamma_{\tau\tau} + \dfrac{(\gamma_\pi - \tau\gamma_{\pi\tau})^2}{\gamma_{\pi\pi}}$
Célérité du son $w = v\left(-\left({\partial p}/{\partial v}\right)_s\right)^{0.5}$	$\dfrac{w^2(\pi,\tau)}{RT} = \dfrac{\gamma_\pi^2}{\dfrac{(\gamma_\pi - \tau\gamma_{\pi\tau})^2}{\tau^2\gamma_{\tau\tau}} - \gamma_{\pi\pi}}$
Coefficient de dilatation isobare $\alpha_v = v^{-1}\left({\partial v}/{\partial T}\right)_p$	$\alpha_v(\pi,\tau)T = 1 - \dfrac{\tau\gamma_{\pi\tau}}{\gamma_\pi}$
Compressibilité isothermique $k_T = -v^{-1}\left({\partial v}/{\partial p}\right)_T$	$k_T(\pi,\tau)p = -\dfrac{\pi\gamma_{\pi\pi}}{\gamma_\pi}$
$\gamma_\pi = \left(\frac{\partial\gamma}{\partial\pi}\right)_\tau$, $\gamma_{\pi\pi} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\pi^2}\right)_\tau$, $\gamma_\tau = \left(\frac{\partial\gamma}{\partial\tau}\right)_\pi$, $\gamma_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\tau^2}\right)_\pi$, $\gamma_{\pi\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\pi\partial\tau}\right)$	

Tableau IV.4 : Energie libre de Gibbs adimensionnelle γ, équation IV.3 et de ses dérivées

$\gamma = \sum_{i=1}^{34} n_i(7.1-\pi)^{I_i}(\tau-1.222)^{J_i}$	$\gamma_\tau = \sum_{i=1}^{34} n_i(7.1-\pi)^{I_i}J_i(\tau-1.222)^{J_i-1}$
$\gamma_\pi = \sum_{i=1}^{34} -n_iI_i(7.1-\pi)^{I_i-1}(\tau-1.222)^{J_i}$	$\gamma_{\tau\tau} = \sum_{i=1}^{34} n_i(7.1-\pi)^{I_i}J_i(J_i-1)(\tau-1.222)^{J_i-2}$
$\gamma_{\pi\pi} = \sum_{i=1}^{34} n_iI_i(I_i-1)(7.1-\pi)^{I_i-2}(\tau-1.222)^{J_i}$	$\gamma_{\pi\tau} = \sum_{i=1}^{34} -n_iI_i(7.1-\pi)^{I_i-1}J_i(\tau-1.222)^{J_i-1}$
$\gamma_\pi = \left(\frac{\partial\gamma}{\partial\pi}\right)_\tau$, $\gamma_{\pi\pi} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\pi^2}\right)_\tau$, $\gamma_\tau = \left(\frac{\partial\gamma}{\partial\tau}\right)_\pi$, $\gamma_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\tau^2}\right)_\pi$, $\gamma_{\pi\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma}{\partial\pi\partial\tau}\right)$	

Domaine de validité : L'équation IV.3 couvre la région 1 de l'IAPWS-IF97 défini par la gamme de la température et de la pression suivante, voir figure IV.2 :

$$273.15\ K \leq T \leq 623.15\ K \qquad p_s(T) < p \leq 100\ MPa$$

En plus des propriétés dans la région liquide monophasée stable, l'équation IV.3 donne également de bons résultats dans la région métastable du liquide surchauffé près de la ligne du liquide saturé.

IV.1.2.2.3. Equation de base et équation supplémentaire pour la région 2

IV.1.2.2.3.1. Equation de base

L'équation de base pour cette région est une équation fondamentale pour l'énergie libre spécifique de Gibbs. Cette équation est exprimée en forme adimensionnelle, $\gamma = g/(RT)$ et est séparée en deux parties, une partie de gaz idéal γ^0 et une partie résiduelle γ^r, de sorte qu'elle soit :

$$\frac{g_2(p,T)}{RT} = \gamma(\pi,\tau) = \gamma^0(\pi,\tau) + \gamma^r(\pi,\tau) \qquad \text{(IV.6)}$$

Où : $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $R=0.461526\ kJ/kgK$ selon γ^0 et γ^r des équations IV.7 et IV.8. L'équation de la partie de gaz idéal adimensionnelle γ^0 de l'équation de base $g_2(p,T)$ est :

$$\gamma^0(\pi,\tau) = ln\pi + \sum_{i=1}^{9} n_i^0 \tau^{J_i^0} \qquad \text{(IV.7)}$$

Où : $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $p^*=1\ MPa$ et $T^*=540\ K$. Les coefficients n_i^0 et les exposants J_i^0 de l'équation IV.7 sont donnés dans le Tableau IV.5

Tableau IV.5 : Coefficients et exposants pour les gaz parfait γ^0 de l'équation IV.7

I	J_i^0	n_i^0	i	J_i^0	n_i^0
1	0	-0.969 276 865 002 17 × 10^{1}	6	-2	0.142 408 191 714 44 × 10^{1}
2	1	0.100 866 559 680 18 × 10^{2}	7	-1	-0.438 395 113 194 50 × 10^{1}
3	-5	-0.560 879 112 830 20 × 10^{-2}	8	2	-0.284 086 324 607 72
4	-4	0.714 527 380 814 55 × 10^{-1}	9	3	0.212 684 637 533 07 × 10^{-1}
5	-3	-0.407 104 982 239 28			

La forme de la partie résiduelle adimensionnelle γ^r de l'équation de base $g_2(p,T)$ est comme suit :

$$\gamma^r(\pi,\tau) = \sum_{i=1}^{43} n_i \pi^{I_i} (\tau - 0.5)^{J_i} \qquad \text{(IV.8)}$$

Où: $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $p^*=1\ MPa$ et $T^*=540\ K$. Les coefficients n_i et les exposants I_i et J_i de l'équation IV.8 sont donnés dans le Tableau IV.6

Toutes les propriétés thermodynamiques peuvent être dérivées de l'équation IV.6 en employant les combinaisons appropriées de la partie gaz parfait γ^0, équation IV.7 et la partie résiduelle γ^r, équation IV.8, de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de leurs dérivées. Les relations des propriétés thermodynamiques les plus utiles de γ^0 et γ^r et de leurs dérivés sont récapitulées dans le Tableau IV.7. Toutes les dérivées partielles constituées par les propriétés p, T, v, u, h, s, g et f peuvent être très facilement calculées. Toutes les dérivées nécessaires aux équations pour γ^0 et γ^r sont explicitement données respectivement dans le Tableau IV.8 et le Tableau IV.9.

Tableau IV. 6 : Coefficients et exposants pour la partie résiduelle γ^r de l'équation IV.8

i	I_i	J_i	n_i	i	I_i	J_i	n_i
1	1	0	-0.177 317 424 732 13 × 10^{-2}	23	7	0	-0.590 595 643 242 70 × 10^{-17}
2	1	1	-0.178 348 622 923 58 × 10^{-1}	24	7	11	-0.126 218 088 991 01 × 10^{-5}
3	1	2	-0.459 960 136 963 65 × 10^{-1}	25	7	25	-0.389 468 424 357 39 × 10^{-1}
4	1	3	-0.575 812 590 834 32 × 10^{-1}	26	8	8	0.112 562 113 604 59 × 10^{-10}
5	1	6	-0.503 252 787 279 30 × 10^{-1}	27	8	36	-0.823 113 408 979 98 × 10^{1}

6	2	1	-0.330 326 416 702 03 × 10^{-4}	28	9	13	0.198 097 128 020 88 × 10^{-7}
7	2	2	-0.189 489 875 163 15 × 10^{-3}	29	10	4	0.104 069 652 101 74 × 10^{-18}
8	2	4	-0.393 927 772 433 55 × 10^{-2}	30	10	10	-0.102 347 470 959 29 × 10^{-12}
9	2	7	-0.437 972 956 505 73 × 10^{-1}	31	10	14	-0.100 181 793 795 11 × 10^{-8}
10	2	36	-0.266 745 479 140 87 × 10^{-4}	32	16	29	-0.808 829 086 469 85 × 10^{-10}
11	3	0	0.204 817 376 923 09 × 10^{-7}	33	16	50	0.106 930 318 794 09
12	3	1	0.438 706 672 844 35 × 10^{-6}	34	18	57	-0.336 622 505 741 71
13	3	3	-0.322 776 772 385 70 × 10^{-4}	35	20	20	0.891 858 453 554 21 × 10^{-24}
14	3	6	-0.150 339 245 421 48 × 10^{-2}	36	20	35	0.306 293 168 762 32 × 10^{-12}
15	3	35	-0.406 682 535 626 49 × 10^{-1}	37	20	48	-0.420 024 676 982 08 × 10^{-5}
16	4	1	-0.788 473 095 593 67 × 10^{-9}	38	21	21	-0.590 560 296 856 39 × 10^{-25}
17	4	2	0.127 907 178 522 85 × 10^{-7}	39	22	53	0.378 269 476 134 57 × 10^{-5}
18	4	3	0.482 253 727 185 07 × 10^{-6}	40	23	39	-0.127 686 089 346 81 × 10^{-14}
19	5	7	0.229 220 763 376 61 × 10^{-5}	41	24	26	0.730 876 105 950 61 × 10^{-28}
20	6	3	0.167 147 664 510 61 × 10^{-10}	42	24	40	0.554 147 153 507 78 × 10^{-16}
21	6	16	-0.211 714 723 213 55 × 10^{-2}	43	24	58	-0.943 697 072 412 10 × 10^{-6}
22	6	35	-0.238 957 419 341 04 × 10^{2}				

Domaine de validité : L'équation IV.6 couvre la région 2 de l'IAPWS-IF97 défini par la gamme de la température et de la pression suivante, voir figure IV.2 :

$$273.15\ K \leq T \leq 623.15\ K \qquad 0 < p \leq p_s(T)$$
$$623.15\ K < T \leq 863.15\ K \qquad 0 < p \leq p_{B23}(T)$$
$$863.15\ K < T \leq 1073.15\ K \qquad 0 < p \leq 100\ MPa$$

Où : $p_s(t)$ est calculé à partir de l'équation IV.13 et $p_{B23}(T)$ à partir de l'équation IV.1. En plus des propriétés dans la région monophasée de la vapeur stable, l'équation IV.6 donne de bons résultats dans la région de la vapeur métastable pour des pressions au dessus de *10 MPa*. L'équation IV.6 n'est pas valide dans la région de la vapeur métastable pour des pressions $P \leq 10\ MPa$.

Tableau IV.7 : Relations des propriétés thermodynamiques avec la partie gaz parfait γ^0 et la partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de ses dérivées en utilisant les équations IV.6 et IV.9

Propriété	Relation
Volume spécifique $v = (\partial g/\partial p)_T$	$v(\pi,\tau)\dfrac{p}{RT} = \pi(\gamma_\pi^0 + \gamma_\pi^r)$
Enthalpie spécifique $h = g - T(\partial g/\partial T)_p$	$\dfrac{h(\pi,\tau)}{RT} = \tau(\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r)$
Energie interne spécifique $u = g - T(\partial g/\partial T)_p - p(\partial g/\partial p)_T$	$\dfrac{u(\pi,\tau)}{RT} = \tau(\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r) - \pi(\gamma_\pi^0 + \gamma_\pi^r)$
Entropie spécifique $s = -\left({}^{\partial g}/_{\partial T}\right)_p$	$\dfrac{s(\pi,\tau)}{R} = \tau(\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r) - (\gamma^0 + \gamma^r)$
Capacité thermique isobare spécifique $C_p = \left({}^{\partial h}/_{\partial T}\right)_p$	$\dfrac{C_p(\pi,\tau)}{R} = -\tau^2(\gamma_{\tau\tau}^0 + \gamma_{\tau\tau}^r)$
Capacité thermique isochore spécifique $C_v = \left({}^{\partial u}/_{\partial T}\right)_v$	$\dfrac{C_v(\pi,\tau)}{R} = -\tau^2(\gamma_{\tau\tau}^0 + \gamma_{\tau\tau}^r) + \dfrac{(1 + \pi\gamma_\pi^r - \tau\pi\gamma_{\pi\tau}^r)^2}{1 - \pi^2\gamma_{\pi\pi}^r}$
Célérité du son $w = v\left(-\left({}^{\partial p}/_{\partial v}\right)_s\right)^{0.5}$	$\dfrac{w^2(\pi,\tau)}{RT} = \dfrac{1 + 2\pi\gamma_\pi^r + \pi^2{\gamma_\pi^r}^2}{(1 - \pi^2\gamma_{\tau\tau}^r) + \dfrac{(1 + \pi\gamma_\pi^r - \tau\pi\gamma_{\pi\tau}^r)^2}{\tau^2(\gamma_{\tau\tau}^0 + \gamma_{\tau\tau}^r)}}$
Coefficient de dilatation isobare $\alpha_v = v^{-1}\left({}^{\partial v}/_{\partial T}\right)_p$	$\alpha_v(\pi,\tau)T = \dfrac{1 + \pi\gamma_\pi^r - \tau\pi\gamma_{\pi\tau}^r}{1 + \pi\gamma_\pi^r}$
Compressibilité isothermique $k_T = -v^{-1}\left({}^{\partial v}/_{\partial p}\right)_T$	$k_T(\pi,\tau)p = \dfrac{1 - \pi^2\gamma_{\pi\pi}^r}{1 + \pi\gamma_\pi^r}$

$\gamma_\pi^r = \left(\frac{\partial \gamma^r}{\partial \pi}\right)_\tau, \gamma_{\pi\pi}^r = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \pi^2}\right)_\tau, \gamma_\tau^r = \left(\frac{\partial \gamma^r}{\partial \tau}\right)_\pi, \gamma_{\tau\tau}^r = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \tau^2}\right)_\pi, \gamma_{\pi\tau}^r = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \pi \partial \tau}\right), \gamma_\tau^0 = \left(\frac{\partial \gamma^0}{\partial \tau}\right)_\pi, \gamma_{\tau\tau}^0 = \left(\frac{\partial^2 \gamma^0}{\partial \tau^2}\right)_\pi$

Tableau IV.8 : Partie gaz parfait γ^0 de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.7 et de ses dérivées

$\gamma^0 = ln\pi + \sum_{i=1}^{9} n_i^0 \tau^{J_i^0}$	$\gamma_\tau^0 = \sum_{i=1}^{9} n_i^0 J_i^0 \tau^{J_i^0 - 1}$
$\gamma_\pi^0 = \pi^{-1}$	$\gamma_{\tau\tau}^0 = \sum_{i=1}^{9} n_i^0 J_i^0 (J_i^0 - 1) \tau^{J_i^0 - 2}$
$\gamma_{\pi\pi}^0 = -\pi^{-2}$	$\gamma_{\pi\tau}^0 = 0$
$\gamma_\pi^0 = \left(\frac{\partial \gamma^0}{\partial \pi}\right)_\tau, \quad \gamma_{\pi\pi}^0 = \left(\frac{\partial^2 \gamma^0}{\partial \pi^2}\right)_\tau, \quad \gamma_\tau^0 = \left(\frac{\partial \gamma^0}{\partial \tau}\right)_\pi, \quad \gamma_{\tau\tau}^0 = \left(\frac{\partial^2 \gamma^0}{\partial \tau^2}\right)_\pi, \quad \gamma_{\pi\tau}^0 = \left(\frac{\partial^2 \gamma^0}{\partial \pi \partial \tau}\right)$	

Tableau IV.9 : Partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.8 et de ses dérivées

$\gamma^r = \sum_{i=1}^{43} n_i \pi^{I_i} (\tau - 0.5)^{J_i}$	$\gamma_\tau^r = \sum_{i=1}^{43} n_i \pi^{I_i} J_i (\tau - 0.5)^{J_i - 1}$
$\gamma_\pi^r = \sum_{i=1}^{43} n_i I_i \pi^{I_i - 1} (\tau - 0.5)^{J_i}$	$\gamma_{\tau\tau}^r = \sum_{i=1}^{43} n_i \pi^{I_i} J_i (J_i - 1)(\tau - 0.5)^{J_i - 2}$
$\gamma_{\pi\pi}^r = \sum_{i=1}^{43} n_i I_i (I_i - 1) \pi^{I_i - 2} (\tau - 0.5)^{J_i}$	$\gamma_{\pi\tau}^r = \sum_{i=1}^{43} n_i I_i \pi^{I_i - 1} J_i (\tau - 0.5)^{J_i - 1}$
$\gamma_\pi^r = \left(\frac{\partial \gamma^r}{\partial \pi}\right)_\tau, \quad \gamma_{\pi\pi}^r = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \pi^2}\right)_\tau, \quad \gamma_\tau^r = \left(\frac{\partial \gamma^r}{\partial \tau}\right)_\pi, \quad \gamma_{\tau\tau}^r = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \tau^2}\right)_\pi, \quad \gamma_{\pi\tau}^r = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \pi \partial \tau}\right)$	

IV.1.2.2.3.2. Equation supplémentaire pour la région de la vapeur métastable

Comme l'équation de base $g_2(p,T)$, équation IV.6, l'équation supplémentaire pour la région de la vapeur métastable est donnée sous la forme adimensionnelle de l'énergie libre de Gibbs, du $\gamma=g/(RT)$, se composant d'une partie de gaz parfait γ^0 et d'une partie résiduelle γ^r, de sorte que :

$$\frac{g_{2,meta}(p,T)}{RT} = \gamma(\pi,\tau) = \gamma^0(\pi,\tau) + \gamma^r(\pi,\tau) \qquad \text{(IV.9)}$$

Où : $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $R=0.461526\ kJ/kgK$ selon γ^0 et γ^r des équations IV.7 et IV.10. L'équation de la partie de gaz idéal adimensionnelle γ^0 est identique à celle de l'équation IV.7. L'équation pour la partie résiduelle γ^r de l'équation IV.9 est :

$$\gamma^r(\pi,\tau) = \sum_{i=1}^{13} n_i \pi^{I_i} (\tau - 0.5)^{J_i} \qquad \text{(IV.10)}$$

Où: $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $p^*=1\ MPa$ et $T^*=540\ K$. Les coefficients n_i et les exposants I_i et J_i de l'équation IV.10 sont donnés dans le Tableau IV.10.

Il n'y a aucune donnée expérimentale à laquelle une équation peut être adaptée dans la région de la vapeur métastable. Ainsi, l'équation IV.9 est basée seulement sur des valeurs d'entrée extrapolées de la région 2 monophasée stable.

Tableau IV.10 : Coefficients et exposants pour la partie résiduelle γ^r de l'équation IV.10

I	I_i	J_i	n_i	i	I_i	J_i	n_i
1	1	0	- 0.733 622 601 865 06 × 10^{-2}	8	3	4	-0.634 980 376 573 13 × 10^{-2}
2	1	2	-0.882 238 319 431 46 × 10^{-1}	9	3	16	-0.860 430 930 285 88 × 10^{-1}
3	1	5	-0.723 345 552 132 45 × 10^{-1}	10	4	7	0.753 215 815 227 70 × 10^{-2}
4	1	11	-0.408 131 785 344 55 × 10^{-2}	11	4	10	-0.792 383 754 461 39 × 10^{-2}
5	2	1	0.200 978 033 802 07 × 10^{-2}	12	5	9	-0.228 881 607 784 47 × 10^{-3}
6	2	7	-0.530 459 218 986 42 × 10^{-1}	13	5	10	-0.264 565 014 828 10 × 10^{-2}
7	2	16	-0.761 904 090 869 70 × 10^{-2}				

Toutes les propriétés thermodynamiques peuvent être dérivées de l'équation IV.9 en employant les combinaisons appropriées de la partie gaz parfait γ^0, équation IV.7 et la partie résiduelle γ^r, équation IV.10, de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de leurs dérivées. Les relations des propriétés thermodynamiques appropriées à γ^0 et à γ^r et de leurs dérivées sont récapitulées dans le Tableau IV.7.

Toutes les dérivées partielles des propriétés *p, T, v, u, h, s, g* et *f* peuvent être calculées facilement. Toutes les dérivées requises pour les équations pour γ^0 et γ^r sont explicitement données dans le Tableau IV.8 et le Tableau IV.11, respectivement.

Domaine de validité : L'équation IV.9 est valide dans la région de la vapeur métastable à partir de la ligne de la vapeur saturée jusqu'à *5%* de la ligne d'équilibre d'humidité (correspondant à la fraction $X = 0.95$ de la vapeur, déterminé à partir des valeurs d'équilibre h' et h'') aux pressions de la pression de point triple, voir équation IV.8, jusqu'à *10 MPa*. L'uniformité de l'équation IV.9 avec l'équation de base $g_2(p,T)$, équation IV.6, suivant la ligne de la vapeur saturée est caractérisé par les maximum inconsistant des propriétés *v, h, c_p, s, g* et *W* suivants:

$|\Delta v|_{max} = 0.014\%$ $\quad$ $|\Delta s|_{max} = 0.082$ J/kg K
$|\Delta h|_{max} = 0.043$ kJ/kg $\quad$ $|\Delta g|_{max} = 0.023$ kJ/kg
$|\Delta c_p|_{max} = 0.78\%$ $\quad$ $|\Delta w|_{max} = 0.051\%$

Tableau IV.11 : Partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.10 et de ses dérivées

$\gamma^r = \sum_{i=1}^{13} n_i \pi^{I_i} (\tau - 0.5)^{J_i}$	$\gamma^r_\tau = \sum_{i=1}^{13} n_i \pi^{I_i} J_i (\tau - 0.5)^{J_i - 1}$
$\gamma^r_\pi = \sum_{i=1}^{13} n_i I_i \pi^{I_i - 1} (\tau - 0.5)^{J_i}$	$\gamma^r_{\tau\tau} = \sum_{i=1}^{13} n_i \pi^{I_i} J_i (J_i - 1)(\tau - 0.5)^{J_i - 2}$
$\gamma^r_{\pi\pi} = \sum_{i=1}^{13} n_i I_i (I_i - 1)\pi^{I_i - 2} (\tau - 0.5)^{J_i}$	$\gamma^r_{\pi\tau} = \sum_{i=1}^{13} n_i I_i \pi^{I_i - 1} J_i (\tau - 0.5)^{J_i - 1}$
$\gamma^r_\pi = \left(\frac{\partial \gamma^r}{\partial \pi}\right)_\tau$, $\gamma^r_{\pi\pi} = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \pi^2}\right)_\tau$, $\gamma^r_\tau = \left(\frac{\partial \gamma^r}{\partial \tau}\right)_\pi$, $\gamma^r_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \tau^2}\right)_\pi$, $\gamma^r_{\pi\tau} = \left(\frac{\partial^2 \gamma^r}{\partial \pi \partial \tau}\right)$	

IV.1.2.2.4. Equation de base pour la région 3

L'équation de base pour cette région est une équation fondamentale pour l'énergie libre spécifique de Helmholtz *f*. Cette équation est exprimée sous forme adimensionnelle $\phi = f/(RT)$, comme suit :

$$\frac{f_3(\rho, T)}{RT} = \emptyset(\delta, \tau) = n_1 ln\delta + \sum_{i=2}^{40} n_i \delta^{I_i} \tau^{J_i} \qquad \text{(IV.11)}$$

Où : $\delta=\rho/\rho^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $\rho^* = \rho_c=322\ kg/m^3$, $T^*=T_c= 647.096\ K$ et $R=0.461526\ kJ/kgK$. Les coefficients n_i et les exposants I_i et J_i de l'équation IV.11 sont donnés dans le Tableau IV.12.

Tableau IV.12 : Coefficients et exposants de l'équation de base $f_3(\rho,T)$ sous sa forme adimensionnelle, équation IV.11

I	I_i	J_i	n_i	i	I_i	J_i	n_i
1	-	-	$0.106\,580\,700\,285\,13 \times 10^{1}$	21	3	4	$-0.201\,899\,150\,235\,70 \times 10^{1}$
2	0	0	$-0.157\,328\,452\,902\,39 \times 10^{2}$	22	3	16	$-0.821\,476\,371\,739\,63 \times 10^{-2}$
3	0	1	$0.209\,443\,969\,743\,07 \times 10^{2}$	23	3	26	$-0.475\,960\,357\,349\,23$
4	0	2	$-0.768\,677\,078\,787\,16 \times 10^{1}$	24	4	0	$0.439\,840\,744\,735\,00 \times 10^{-1}$
5	0	7	$0.261\,859\,477\,879\,54 \times 10^{1}$	25	4	2	$-0.444\,764\,354\,287\,39$
6	0	10	$-0.280\,807\,811\,486\,20 \times 10^{1}$	26	4	4	$0.905\,720\,707\,197\,33$
7	0	12	$0.120\,533\,696\,965\,17 \times 10^{1}$	27	4	26	$0.705\,224\,500\,879\,67$
8	0	23	$-0.845\,668\,128\,125\,02 \times 10^{-2}$	28	5	1	$0.107\,705\,126\,263\,32$
9	1	2	$-0.126\,543\,154\,777\,14 \times 10^{1}$	29	5	3	$-0.329\,136\,232\,589\,54$
10	1	6	$-0.115\,244\,078\,066\,81 \times 10^{1}$	30	5	26	$-0.508\,710\,620\,411\,58$
11	1	15	$0.885\,210\,439\,843\,18$	31	6	0	$-0.221\,754\,008\,730\,96 \times 10^{-1}$
12	1	17	$-0.642\,077\,651\,816\,07$	32	6	2	$0.942\,607\,516\,650\,92 \times 10^{-1}$
13	2	0	$0.384\,934\,601\,866\,71$	33	6	26	$0.164\,362\,784\,479\,61$
14	2	2	$-0.852\,147\,088\,242\,06$	34	7	2	$-0.135\,033\,722\,413\,48 \times 10^{-1}$
15	2	6	$0.489\,722\,815\,418\,77 \times 10^{1}$	35	8	26	$-0.148\,343\,453\,524\,72 \times 10^{-1}$
16	2	7	$-0.305\,026\,172\,569\,65 \times 10^{1}$	36	9	2	$0.579\,229\,536\,280\,84 \times 10^{-3}$
17	2	22	$0.394\,205\,368\,791\,54 \times 10^{-1}$	37	9	26	$0.323\,089\,047\,037\,11 \times 10^{-2}$
18	2	26	$0.125\,584\,084\,243\,08$	38	10	0	$0.809\,648\,029\,962\,15 \times 10^{-4}$
19	3	0	$-0.279\,993\,296\,987\,10$	39	10	1	$-0.165\,576\,797\,950\,37 \times 10^{-3}$
20	3	2	$0.138\,997\,995\,694\,60 \times 10^{1}$	40	11	26	$-0.449\,238\,990\,618\,15 \times 10\text{-}4$

En plus de la présentation des propriétés thermodynamiques dans la région monophasée suivant la ligne de saturation pour les températures de $623.15\ K$ à $T_c = 647.096\ K$, l'équation IV.11 remplit la condition d'équilibre de phase pour la phase de coexistence de vapeur et de liquide (l'égalité de l'énergie libre spécifique de Gibbs pour les deux phases en tenant compte du critère de Maxwell, voir le Tableau IV.14). D'ailleurs, l'équation IV.11 reproduit exactement les paramètres critiques selon les équations de IV.4 à IV.6 et rend les deux premières dérivées de la pression à zéro en respectant la densité au point critique.

Toutes les propriétés thermodynamiques peuvent être dérivées de l'équation IV.11 en employant les combinaisons appropriées de l'énergie libre adimensionnelle de Helmholtz ϕ et ses dérivés. Les relations des propriétés thermodynamiques adéquates à ϕ et ses dérivés sont récapitulées dans le Tableau IV.13.

Toutes les dérivées partielles constituées par les propriétés p, T, v, u, h, s, g et f peuvent être facilement calculées. Les dérivées requises de l'équation pour l'énergie libre adimensionnelle de Helmholtz ϕ sont explicitement données dans le Tableau IV.14.

Tableau IV.13 : Relation des propriétés thermodynamiques avec l'énergie libre adimensionnelle de Helmholtz et de ses dérivées en utilisant l'équation IV.11

Propriété	Relation
Pression $p = p^2(\partial f/\partial\rho)_T$	$\frac{p(\delta,\tau)}{\rho RT} = \delta\emptyset_\delta$
Enthalpie spécifique $h = f - T(\partial f/\partial T)_\rho + \rho(\partial f/\partial\rho)_T$	$\frac{h(\delta,\tau)}{RT} = \tau\emptyset_\tau + \delta\emptyset_\delta$
Energie interne spécifique $u = f - T(\partial f/\partial T)_\rho$	$\frac{u(\delta,\tau)}{RT} = \tau\emptyset_\tau$
Entropie spécifique	$\frac{s(\delta,\tau)}{R} = \tau\emptyset_\tau - \emptyset$

$s = -\left({}^{\partial f}/_{\partial T}\right)_{\rho}$	
Capacité thermique isobare spécifique $C_p = \left({}^{\partial h}/_{\partial T}\right)_{p}$	$\frac{C_p(\delta,\tau)}{R} = -\tau^2 \emptyset_{\tau\tau} + \frac{(\delta\emptyset_{\delta} - \delta\tau\emptyset_{\delta\tau})^2}{2\delta\emptyset_{\delta} + \delta^2\emptyset_{\delta\delta}}$
Capacité thermique isochore spécifique $C_v = \left({}^{\partial u}/_{\partial T}\right)_{v}$	$\frac{C_v(\delta,\tau)}{R} = -\tau^2 \emptyset_{\tau\tau}$
Célérité du son $w = \left(\left({}^{\partial p}/_{\partial \rho}\right)_{s}\right)^{0.5}$	$\frac{w^2(\delta,\tau)}{RT} = 2\delta\emptyset_{\delta} + \delta^2\emptyset_{\delta\delta} - \frac{(\delta\emptyset_{\delta} - \delta\tau\emptyset_{\delta\tau})^2}{\tau^2\emptyset_{\tau\tau}}$
Coefficient de dilatation isobare $\alpha_v = v^{-1}\left({}^{\partial v}/_{\partial T}\right)_{p}$	$\alpha_v(\delta,\tau)T = \frac{\emptyset_{\delta} - \tau\emptyset_{\delta\tau}}{2\emptyset_{\delta} + \delta\emptyset_{\delta\delta}}$
Compressibilité isothermique $k_T = -v^{-1}\left({}^{\partial v}/_{\partial p}\right)_{T}$	$k_T(\delta,\tau)\rho RT = \frac{1}{2\delta\emptyset_{\delta} + \delta^2\emptyset_{\delta\delta}}$
Coefficient de la pression relative $\alpha_p = p^{-1}\left({}^{\partial p}/_{\partial T}\right)_{v}$	$\alpha_p(\delta,\tau)T = 1 - \frac{\tau\emptyset_{\delta\tau}}{\emptyset_{\delta}}$
Coefficient isothermique de pression $\beta_T = -p^{-1}\left({}^{\partial p}/_{\partial v}\right)_{T}$	$\frac{\beta_p(\delta,\tau)}{\rho} = 2 + \frac{\delta\emptyset_{\delta\delta}}{\emptyset_{\delta}}$
Condition d'équilibre de phase (Critère de Maxwell)	$\frac{p_s}{RT\rho'} = \delta'\emptyset_{\delta}(\delta',\tau);\ \frac{p_s}{RT\rho''} = \delta''\emptyset_{\delta}(\delta'',\tau)$; $\frac{p_s}{RT}\left(\frac{1}{\rho''} - \frac{1}{\rho'}\right) = \emptyset(\delta',\tau) - \emptyset(\delta'',\tau)$
$\emptyset_{\delta} = \left(\frac{\partial\emptyset}{\partial\delta}\right)_{\tau}$, $\emptyset_{\delta\delta} = \left(\frac{\partial^2\emptyset}{\partial\delta^2}\right)_{\tau}$, $\emptyset_{\tau} = \left(\frac{\partial\emptyset}{\partial\tau}\right)_{\delta}$, $\emptyset_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\emptyset}{\partial\tau^2}\right)_{\delta}$, $\emptyset_{\delta\tau} = \left(\frac{\partial^2\emptyset}{\partial\delta\partial\tau}\right)$	

Tableau IV.14 : Energie libre de Helmholtz adimensionnelle, équation IV.11 et de ses dérivées

$\emptyset = n_1 ln\delta + \sum_{i=2}^{40} n_i \delta^{I_i} \tau^{J_i}$	$\emptyset_{\tau} = \sum_{i=2}^{40} n_i \delta^{I_i} J_i \tau^{J_i - 1}$
$\emptyset_{\delta} = n_1\delta^{-1} + \sum_{i=2}^{40} n_i I_i \delta^{I_i - 1} \tau^{J_i}$	$\emptyset_{\tau\tau} = \sum_{i=2}^{40} n_i \delta^{I_i} J_i (J_i - 1) \tau^{J_i - 2}$
$\emptyset_{\delta\delta} = -n_1\delta^{-2} + \sum_{i=2}^{40} n_i I_i (I_i - 1)\delta^{I_i - 2} \tau^{J_i}$	$\emptyset_{\delta\tau} = \sum_{i=2}^{40} n_i I_i \delta^{I_i - 1} J_i \tau^{J_i - 1}$
$\emptyset_{\delta} = \left(\frac{\partial\emptyset}{\partial\delta}\right)_{\tau}$, $\emptyset_{\delta\delta} = \left(\frac{\partial^2\emptyset}{\partial\delta^2}\right)_{\tau}$, $\emptyset_{\tau} = \left(\frac{\partial\emptyset}{\partial\tau}\right)_{\delta}$, $\emptyset_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\emptyset}{\partial\tau^2}\right)_{\delta}$, $\emptyset_{\delta\tau} = \left(\frac{\partial^2\emptyset}{\partial\delta\partial\tau}\right)$	

Domaine de validité : L'équation IV.11 couvre la région 3 de l'IAPWS-IF97 défini par la gamme de la température et de la pression suivante, voir figure IV.2 :

$$623.15\ K \leq T \leq 863.15\ K \qquad p_{B23}(T) < p \leq 100\ MPa$$

Où $p_{B23}(T)$ est calculée à partir de l'équation IV.1. En plus des propriétés dans la région monophasée stable définie ci-dessus, l'équation IV.11 donne également de bonnes valeurs dans les régions métastables (liquide surchauffé et vapeur sous refroidie) près des lignes du liquide saturé et de la vapeur saturée.

Comme indiqué au début, la frontière entre les régions 1 et 2 est considérée comme appartenant à la région 1 et la frontière entre les régions 2 et 3 est considérée comme appartenant à la région 2. Ainsi, les propriétés le long de ces frontières ne sont pas déterminées à partir l'équation de base de la région 3, $f_3(\rho,T)$, équation IV.11, mais les propriétés le long de la frontière entre les régions 1 et 3 sont calculées à partir de l'équation de base $g_1(p,T)$, équation IV.3 et les propriétés le long de la

frontière entre les régions 2 et 3 sont déterminées à partir de l'équation de base $g_2(p,T)$, équation IV.6.

IV.1.2.2.5. Equation de base pour la région 4

En ce qui concerne la pression de saturation p_s et la température de saturation T_s , l'équation pour décrire la ligne de saturation est une équation quadratique implicite, qui peut être résolue directement. L'équation est comme suit :

$$\beta^2 v^2 + n_1\beta^2 v + n_2\beta^2 + n_3\beta v^2 + n_4\beta v + n_5\beta + n_6 v^2 + n_7 v + n_8 = 0 \qquad \text{(IV.12)}$$

Où :

$$\beta = (p_s/p^*)^{0.25} \qquad \text{(IV.13)}$$

Et

$$v = \frac{T_s}{T^*} + \frac{n_9}{\left({}^{T_s}/_{T^*}\right) - n_{10}} \qquad \text{(IV.14)}$$

Avec $p^*=1\ MPa$ et $T^*=1\ K$; pour les coefficients de n_1 à n_{10} voir le Tableau IV.16.

IV.1.2.2.5.1 Equation de la pression de saturation

La solution de l'équation IV.12 concernant la pression de saturation p_s est comme suit :

$$\frac{p_s}{p^*} = \left[\frac{2C}{-B + (B^2 - 4AC)^{0.5}}\right]^4 \qquad \text{(IV.15)}$$

Où $p^*=1MPa$ et

$$A = v^2 + n_1 v + n_2$$
$$B = n_3 v^2 + n_4 v + n_5$$
$$C = n_6 v^2 + n_7 v + n_8$$

Avec v selon l'équation IV.14. Les coefficients n_i de l'équation IV.15 sont donnés dans le Tableau IV.15

Tableau IV.15 : Coefficients des équations de bases pour la région 4, les équations de IV.12 à IV.15

i	n_i	I	n_i
1	$0.116\,705\,214\,527\,67 \times 10^4$	6	$0.149\,151\,086\,135\,30 \times 10^2$
2	$-0.724\,213\,167\,032\,06 \times 10^6$	7	$-0.482\,326\,573\,615\,91 \times 10^4$
3	$-0.170\,738\,469\,400\,92 \times 10^2$	8	$0.405\,113\,405\,420\,57 \times 10^6$
4	$0.120\,208\,247\,024\,70 \times 10^5$	9	$-0.238\,555\,575\,678\,49$
5	$-0.323\,255\,503\,223\,33 \times 10^7$	10	$0.650\,175\,348\,447\,98 \times 10^3$

Les équations de IV.12 à IV.15 reproduisent exactement les valeurs du diagramme *p-T* au point triple selon les équations IV.7 et IV.8, au point d'ébullition normal selon l'équation IV.9 et au point critique selon les équations IV.4 et IV.5.

Domaine de validité : L'équation IV.15 est valide suivant la ligne entière de saturation de vapeur-liquide de $273.15\ K$ à la température critique T_c de sorte qu'elle couvre la gamme de température

$$273.15\ K \leq T \leq 647.096\ K.$$

IV.1.2.2.5.2 Equation de la température de saturation

La solution de l'équation IV.12 concernant la température de saturation T_s est comme suit :

$$\frac{T_s}{T^*} = \frac{n_{10} + D - [(n_{10} + D)^2 - 4(n_9 + n_{10}D)]^{0.5}}{2} \quad \text{(IV.16)}$$

Où $T^*=1K$ et

$$D = \frac{2G}{-F - (F^2 - 4EG)^{0.5}}$$

Avec

$$E = \beta^2 + n_3\beta + n_6$$
$$F = n_1\beta^2 + n_4\beta + n_7$$
$$G = n_2\beta^2 + n_5\beta + n_8$$

Et β selon l'équation IV.15. Les coefficients n_i de l'équation IV.16 sont donnés dans le Tableau IV.15.

Domaine de validité : L'équation IV.16 à la même gamme de validité que l'équation IV.15 ce qui signifie qu'elle couvre la ligne de saturation de vapeur-liquide selon la gamme de pression

$$611.212677\ Pa \leq p \leq 22.064\ MPa.$$

La valeur de 611.212677 Pa correspond à la pression de saturation à 273.15 K.

IV.1.2.2.6 Equation de base pour la région 5

La région à hautes températures *(1073.15 K à 2273.15 K)* est couverte par une équation de base $g_5(p,T)$ qui est valide pour des pressions jusqu'à *10 MPa*. Cependant, afin de permettre à des utilisateurs de calculer des valeurs des propriétés thermodynamiques pour concevoir de futurs cycles à hautes températures et d'autres processus pour des pressions au-dessus de *10 MPA*, une nouvelle équation de base $g_5(p,T)$ a été développée qui couvre la région 5 à hautes températures pour des pressions allant jusqu'à *50 MPa*. Cette équation a été adoptée lors de la réunion d'IAPWS en 2007 [94].

L'équation de base pour cette région à hautes températures est une équation fondamentale pour l'énergie libre spécifique de Gibbs. Cette équation est exprimée sous la forme adimensionnelle, $\gamma=g/(RT)$ et est séparée en deux parties, une partie de gaz parfait γ^0et une partie résiduelle γ^r, de sorte que :

$$\frac{g_5(p,T)}{RT} = \gamma(\pi,\tau) = \gamma^0(\pi,\tau) + \gamma^r(\pi,\tau) \quad \text{(IV.17)}$$

Où : $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $R=0.461526\ kJ/kgK$ selon γ^0 et γ^r des équations IV.18 et IV.19. L'équation de la partie de gaz idéal adimensionnelle γ^0 de l'énergie libre de Gibbs est :

$$\gamma^0(\pi,\tau) = ln\pi + \sum_{i=1}^{6} n_i^0 \tau^{J_i^0} \qquad \text{(IV.18)}$$

Où : $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $p^*=1\ MPa$ et $T^*=1000\ K$. Les coefficients n_i^0 et les exposants J_i^0 de l'équation IV.18 sont donnés dans le Tableau IV.16.

Tableau IV.16 : Coefficients et exposants pour les gaz parfait γ^0 de l'équation IV.18

i	J_i^0	n_i^0	I	J_i^0	n_i^0
1	0	-0.131 799 836 742 01 × 10^2	4	-2	0.369 015 349 803 33
2	1	0.685 408 416 344 34 × 10^1	5	-1	-0.311 613 182 139 25 × 10^1
3	-3	-0.248 051 489 334 66 × 10^{-1}	6	2	-0.329 616 265 389 17

La forme de la partie résiduelle adimensionnelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs est comme suit :

$$\gamma^r(\pi,\tau) = \sum_{i=1}^{6} n_i \pi^{I_i} \tau^{J_i} \qquad \text{(IV.19)}$$

Où: $\pi=p/p^*$ et $\tau=T^*/T$ avec $p^*=1\ MPa$ et $T^*=1000\ K$. Les coefficients n_i et les exposants I_i et J_i de l'équation IV.19 sont donnés dans le Tableau IV.17.

Toutes les propriétés thermodynamiques peuvent être dérivées de l'équation IV.17 en employant les combinaisons appropriées de la partie gaz parfait γ^0, équation IV.18 et la partie résiduelle γ^r, équation IV.19, de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de leurs dérivés. Les relations des propriétés thermodynamiques les plus utiles de γ^0 et γ^r et de leurs dérivés sont récapitulées dans le Tableau IV.7. Toutes les dérivées partielles constituées par les propriétés *p, T, v, u, h, s, g* et *f* peuvent être très facilement calculées.

Les dérivées nécessaires aux équations pour γ^0 et γ^r sont explicitement données respectivement dans le Tableau IV.19 et le Tableau IV.20.

Tableau IV.17 : Coefficients et exposants pour la partie résiduelle γ^r de l'équation IV.19

i	I_i	J_i	n_i	i	I_i	J_i	n_i
1	1	1	0.157 364 048 552 59 × 10^{-2}	4	2	3	0.224 400 374 094 85 × 10^{-5}
2	1	2	0.901 537 616 739 44× 10^{-3}	5	2	9	-0.411 632 754 534 71 × 10^{-5}
3	1	3	-0.502 700 776 776 48 × 10^{-2}	6	3	7	0.379 194 548 229 55 × 10^{-7}

Tableau IV.18 : Relations des propriétés thermodynamiques avec la partie gaz parfait γ^0 et la partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle et de ses dérivées en utilisant l'équation IV.17

Propriété	Relation
Volume spécifique $v = (\partial g/\partial p)_T$	$v(\pi,\tau)\dfrac{p}{RT} = \pi(\gamma_\pi^0 + \gamma_\pi^r)$
Enthalpie spécifique $h = g - T(\partial g/\partial T)_p$	$\dfrac{h(\pi,\tau)}{RT} = \tau(\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r)$
Energie interne spécifique $u = g - T(\partial g/\partial T)_p - p(\partial g/\partial p)_T$	$\dfrac{u(\pi,\tau)}{RT} = \tau(\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r) - \pi(\gamma_\pi^0 + \gamma_\pi^r)$
Entropie spécifique $s = -\left({}^{\partial g}/_{\partial T}\right)_p$	$\dfrac{s(\pi,\tau)}{R} = \tau(\gamma_\tau^0 + \gamma_\tau^r) - (\gamma^0 + \gamma^r)$

Capacité thermique isobare spécifique $C_p = \left(\partial h/\partial T\right)_p$	$\frac{C_p(\pi,\tau)}{R} = -\tau^2(\gamma^0_{\tau\tau} + \gamma^r_{\tau\tau})$
Capacité thermique isochore spécifique $C_v = \left(\partial u/\partial T\right)_v$	$\frac{C_v(\pi,\tau)}{R} = -\tau^2(\gamma^0_{\tau\tau} + \gamma^r_{\tau\tau}) + \frac{(1+\pi\gamma^r_\pi - \tau\pi\gamma^r_{\pi\tau})^2}{1-\pi^2\gamma^r_{\pi\pi}}$
Célérité du son $w = v\left(-\left(\partial p/\partial v\right)_s\right)^{0.5}$	$\frac{w^2(\pi,\tau)}{RT} = \frac{1+2\pi\gamma^r_\pi + \pi^2{\gamma^r_\pi}^2}{(1-\pi^2\gamma^r_{\tau\tau}) + \frac{(1+\pi\gamma^r_\pi - \tau\pi\gamma^r_{\pi\tau})^2}{\tau^2(\gamma^0_{\tau\tau}+\gamma^r_{\tau\tau})}}$
Coefficient de dilatation isobare $\alpha_v = v^{-1}\left(\partial v/\partial T\right)_p$	$\alpha_v(\pi,\tau)T = \frac{1+\pi\gamma^r_\pi - \tau\pi\gamma^r_{\pi\tau}}{1+\pi\gamma^r_\pi}$
Compressibilité isothermique $k_T = -v^{-1}\left(\partial v/\partial p\right)_T$	$k_T(\pi,\tau)p = \frac{1-\pi^2\gamma^r_{\pi\pi}}{1+\pi\gamma^r_\pi}$
$\gamma^r_\pi = \left(\frac{\partial\gamma^r}{\partial\pi}\right)_\tau, \gamma^r_{\pi\pi} = \left(\frac{\partial^2\gamma^r}{\partial\pi^2}\right)_\tau, \gamma^r_\tau = \left(\frac{\partial\gamma^r}{\partial\tau}\right)_\pi, \gamma^r_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma^r}{\partial\tau^2}\right)_\pi, \gamma^r_{\pi\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma^r}{\partial\pi\partial\tau}\right), \gamma^0_\tau = \left(\frac{\partial\gamma^0}{\partial\tau}\right)_\pi, \gamma^0_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma^0}{\partial\tau^2}\right)_\pi$	

Tableau IV.19 : Partie gaz parfait γ^0 de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.18 et de ses dérivées

$\gamma^0 = ln\pi + \sum_{i=1}^{6} n_i^0 \tau^{J_i^0}$	$\gamma^0_\tau = \sum_{i=1}^{6} n_i^0 J_i^0 \tau^{J_i^0 - 1}$
$\gamma^0_\pi = \pi^{-1}$	$\gamma^0_{\tau\tau} = \sum_{i=1}^{6} n_i^0 J_i^0 (J_i^0 - 1)\tau^{J_i^0 - 2}$
$\gamma^0_{\pi\pi} = -\pi^{-2}$	$\gamma^0_{\pi\tau} = 0$
$\gamma^0_\pi = \left(\frac{\partial\gamma^0}{\partial\pi}\right)_\tau, \quad \gamma^0_{\pi\pi} = \left(\frac{\partial^2\gamma^0}{\partial\pi^2}\right)_\tau, \quad \gamma^0_\tau = \left(\frac{\partial\gamma^0}{\partial\tau}\right)_\pi, \quad \gamma^0_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma^0}{\partial\tau^2}\right)_\pi, \quad \gamma^0_{\pi\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma^0}{\partial\pi\partial\tau}\right)$	

Tableau IV.20 : Partie résiduelle γ^r de l'énergie libre de Gibbs adimensionnelle, équation IV.19 et de ses dérivées

$\gamma^r = \sum_{i=1}^{6} n_i \pi^{I_i} \tau^{J_i}$	$\gamma^r_\tau = \sum_{i=1}^{6} n_i \pi^{I_i} J_i \tau^{J_i - 1}$
$\gamma^r_\pi = \sum_{i=1}^{6} n_i I_i \pi^{I_i - 1} \tau^{J_i}$	$\gamma^r_{\tau\tau} = \sum_{i=1}^{6} n_i \pi^{I_i} J_i (J_i - 1)\tau^{J_i - 2}$
$\gamma^r_{\pi\pi} = \sum_{i=1}^{6} n_i I_i (I_i - 1)\pi^{I_i - 2} \tau^{J_i}$	$\gamma^r_{\pi\tau} = \sum_{i=1}^{6} n_i I_i \pi^{I_i - 1} J_i \tau^{J_i - 1}$
$\gamma^r_\pi = \left(\frac{\partial\gamma^r}{\partial\pi}\right)_\tau, \quad \gamma^r_{\pi\pi} = \left(\frac{\partial^2\gamma^r}{\partial\pi^2}\right)_\tau, \quad \gamma^r_\tau = \left(\frac{\partial\gamma^r}{\partial\tau}\right)_\pi, \quad \gamma^r_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma^r}{\partial\tau^2}\right)_\pi, \quad \gamma^r_{\pi\tau} = \left(\frac{\partial^2\gamma^r}{\partial\pi\partial\tau}\right)$	

Domaine de validité : L'équation IV.17 couvre la région 5 de l'IAPWS-IF97 définie par la gamme de la température et de la pression suivante, voir figure IV.2 :

$$1073.15 \leq T \leq 2273.15 \qquad 0 < p \leq 50\ MPa.$$

Dans cette gamme, l'équation IV.15 est seulement valide pour l'eau pure indécomposable, n'importe quelle décomposition devra être tenue compte séparément.

IV.2. Réseau de neurones artificiels

Un réseau de neurones artificiel (ANN, pour Artificial Neural Network en anglais) est un modèle de calcul utilisé en intelligence artificielle et dont la conception est schématiquement inspirée du

fonctionnement de vrais neurones (humains ou non), pour prendre des décisions s'appuyant davantage sur la perception que sur le raisonnement. Le cerveau humain contient environ 100 milliards de neurones. Ces neurones nous permettent entre autre, de lire un texte tout en maintenant une respiration régulière permettant d'oxygéner notre sang, en actionnant notre cœur qui assure une circulation efficace de ce sang pour nourrir nos cellules, etc. Ils nous permettent même de comprendre certaines idées [95]. Chacun de ces neurones est par ailleurs fort complexe. Essentiellement, il s'agit de tissu vivant et de chimie. Les neurophysiciens commencent à peine à comprendre quelques uns de leurs mécanismes internes. On croit en général que leurs différentes fonctions neuronales, y compris celle de la mémoire sont stockées au niveau des connexions (synapses) entre les neurones [96].

L'approche neuronale, très en vogue, sert aujourd'hui à toutes sortes d'application dans divers domaines. Par exemple, un autopilote pour avion, ou encore un système de guidage pour automobile, systèmes de lecture automatique de chèques bancaires et d'adresses postales, des systèmes de traitement du signal pour différentes applications militaires, système pour la synthèse de la parole. Des réseaux sont aussi utilisés pour bâtir des systèmes de vision par ordinateur, pour faire des prévisions sur les marchés monétaires, pour évaluer le risque financier ou en assurance, pour différents processus manufacturiers, pour le diagnostic médical, pour l'exploration pétrolière ou gazière, en robotique, en télécommunication et bien d'autres. Bref, les réseaux de neurones ont aujourd'hui un impact considérable et, il y a fort à parier, que leur importance ira grandissant dans le futur surtout dans le domaine nucléaire à savoir leur intégration dans les systèmes de surveillance et diagnostique des réacteurs de puissance pour la prévention des accidents graves [97], [98], [99], [100], [101].

IV.2.1 Neurone formel

La modélisation consiste à mettre en œuvre un système de réseaux neuronaux sous un aspect non pas biologique mais artificiel, cela suppose que d'après le principe biologique on aura une correspondance pour chaque élément composant le neurone biologique, donc une modélisation pour chacun d'entre eux (Figure IV.3).

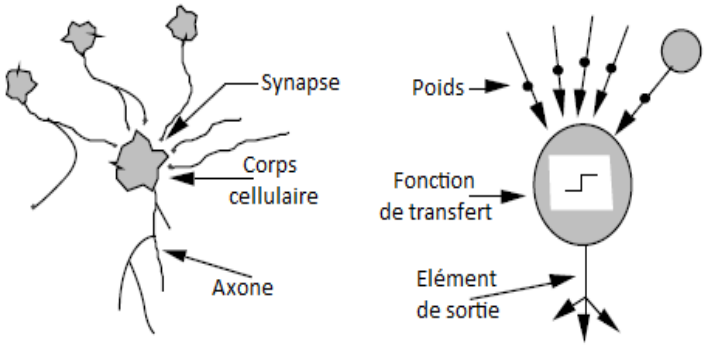


Fig.IV.3 : Mise en correspondance neurone biologique / neurone artificiel [102]

Les réseaux de neurones formels sont à l'origine d'une tentative de modélisation mathématique du cerveau humain. Le premier neurone formel a été modélisé par W. Mc Culloch et W. Pitts, en 1943 [103], [104]. Un neurone formel ou artificiel est un opérateur mathématique très simple. Un neurone possède des entrées qui peuvent être des sorties d'autres neurones, ou des entrées de signaux extérieurs et une sortie. La valeur de la sortie résulte du calcul de la somme des entrées pondérées par des coefficients (dits poids de connexions ou poids synaptiques) et du calcul d'une fonction non linéaire (dite fonction d'activation) de cette somme pondérée (Figure IV.4). Un neurone formel peut être défini par les cinq éléments suivants [104] :

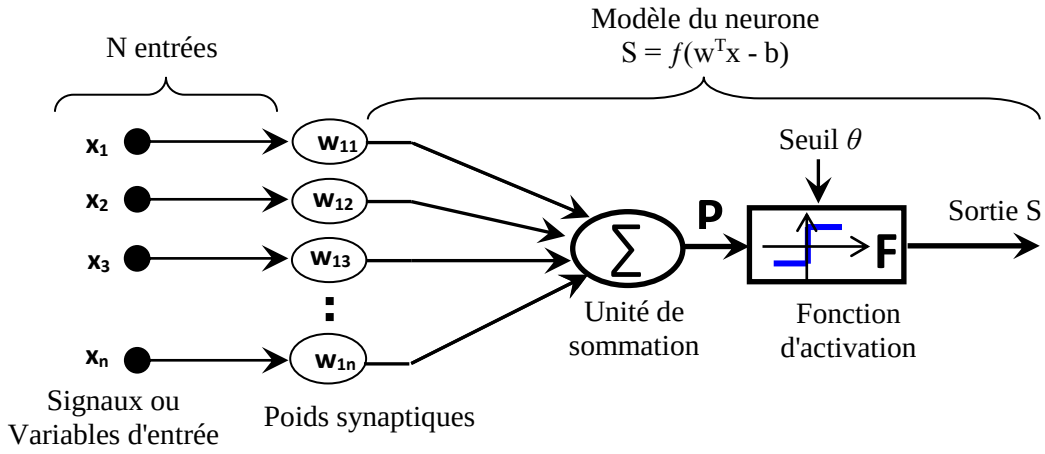


Fig.IV.4 : Neurone formel [105]

IV.2.1.1. Entrées Xi

Les valeurs d'entrée sont des stimuli externes en provenance de l'environnement ou des sorties d'autres neurones artificiels. Elles peuvent être [106] :

- Booléennes,
- Binaires (0, 1) ou bipolaires (-1, 1),
- Réelles.

IV.2.1.2. Poids synaptiques Wi

Les paramètres w_n (Figure IV.4) sont souvent désignés sous le nom de "poids" ou, en raison de l'inspiration biologique des réseaux de neurones, "poids synaptiques". Ce sont des valeurs réelles qui déterminent la contribution de chaque entrée. Un algorithme d'apprentissage permet de déterminer le meilleur ensemble de poids pour le problème considéré. Trouver l'ensemble optimal est souvent un compromis entre temps de calcul, minimisation de l'erreur et conservation de la capacité de généralisation pour le réseau.

La première chose que fait un neurone formel est de calculer la somme pondérée des poids et des entrées. Conformément à l'usage (également inspiré par la biologie), cette somme pondérée est appelée potentiel (niveau d'activation), à laquelle se soustrait souvent un terme constant *b* appelé biais (seuil d'activation).

$$P = \sum_{j=1}^{n-1} w_{1j}\, x_j - b \qquad \text{(IV.20)}$$

Les *N* entrées du neurone correspondent au vecteur $X = [x_1, x_2, \ldots x_n]^T$, alors que $w = [w_{1,1} w_{1,2} \cdots w_{1,n}]^T$ représente le vecteur des poids du neurone. La sortie P de l'intégrateur est donnée par l'équation IV.20 que l'on peut aussi écrire sous la forme matricielle suivante :

$$P = W^T X - b \qquad \text{(IV.21)}$$

IV.2.1.3. Seuil θ

Le seuil est un nombre réel qui est soustrait de la somme pondérée des valeurs d'entrée. Pour des raisons de simplicité, le seuil peut être vu comme une entrée supplémentaire associée à un poids, où *(w = θ) et (x = -1)*, tel qu'il est illustré par la Figure IV.5 suivante :

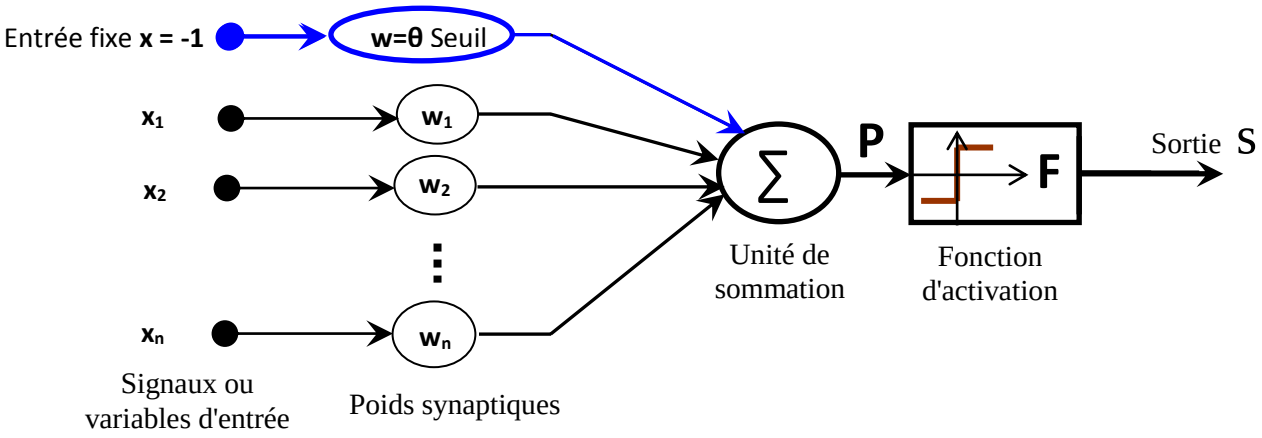


Fig.IV.5 : Neurone formel modèle étendu [105]

IV.2.1.4. Fonction d'activation F

La fonction d'activation ou de transfert calcule la valeur de l'état du neurone. C'est cette valeur qui sera transmise aux neurones avals. Il existe de nombreuses formes possibles pour la fonction de transfert. A la différence des neurones biologiques dont l'état est binaire, la plupart des fonctions de transfert sont continues, offrant une infinité de valeurs possibles comprises dans l'intervalle *[0, +1]* ou *[-1, +1]*.

Différentes fonctions de transfert pouvant être utilisées comme fonction d'activation du neurone sont énumérées au tableau IV.21. Les trois, les plus utilisées, sont les fonctions "seuil" (en anglais "hard limit"), "linéaire" et "sigmoïde".

Tableau IV.21 : Fonctions de transfert S = f(P) [107]

Nom de la fonction	**Relation d'entrée/sortie**	**Icône**	**Nom MATLAB**
Seuil	$s = 0 \text{ si } p < 0$ $s = 1 \text{ si } p \geq 0$		Hardlim
Seuil symétrique	$s = -1 \text{ si } p < 0$ $s = 1 \text{ si } p \geq 0$		Hardlims
Linéaire	$s = n$		Purelin
Linéaire saturée	$s = 0 \text{ si } p < 0$ $s = p \text{ si } 0 \leq p \leq 1$ $s = 1 \text{ si } p > 1$		Satlin
Linéaire saturée symétrique	$s = -1 \text{ si } p\, n < -1$ $s = p \text{ si } -1 \leq p \leq 1$ $s = 1 \text{ si } p > 1$		Satlins
Linéaire positive	$s = 0 \text{ si } p < 0$ $s = p \text{ si } p \geq 0$		Poslin
Sigmoïde	$s = \frac{1}{1 + e^{-p}}$		Logsig

Tangente hyperbolique	$s = \frac{e^{p} - e^{-p}}{e^{p} + e^{-p}}$		Tansig
Compétitive	*s = 1 si n maximum* *s = 0 autrement*		Compet

Comme son nom l'indique, la fonction seuil applique un seuil sur son entrée. Plus précisément, une entrée négative ne passe pas le seuil, la fonction retourne alors la valeur *0* (on peut interpréter ce *0* comme signifiant *faux*), alors qu'une entrée positive ou nulle dépasse le seuil et la fonction retourne *1 (vrai)*. Utilisée dans le contexte d'un neurone, cette fonction est illustrée à la figure IV.6a. On remarque alors que le biais *b* dans l'expression de $s = hardlim(w^T x - b)$ (équation IV.21) détermine l'emplacement du seuil sur l'axe $w^T x$, où la fonction passe de *0* à *1*. Cette fonction permet de prendre des décisions binaires. La fonction linéaire est très simple, elle affecte directement son entrée à sa sortie :

$$S = P \tag{IV.22}$$

Appliquée dans le contexte d'un neurone, cette fonction est illustrée à la figure IV.6b. Dans ce cas, la sortie du neurone correspond à son niveau d'activation dont le passage à zéro se produit lorsque $w^T x = b$. La fonction de transfert sigmoïde est quant à elle illustrée à la figure IV.6c. Son équation est donnée par :

$$s = \frac{1}{1 + e^{-p}} \tag{IV.23}$$

Elle ressemble soit à la fonction seuil, soit à la fonction linéaire, selon que l'on est loin ou près de *b*, respectivement. La fonction seuil est très non-linéaire car il y a une discontinuité lorsque $w^T x = b$. De son côté, la fonction linéaire est tout à fait linéaire. Elle ne comporte aucun changement de pente. La sigmoïde est un compromis intéressant entre les deux précédentes. Notons finalement, que la fonction "tangente hyperbolique" est une version symétrique de la sigmoïde.

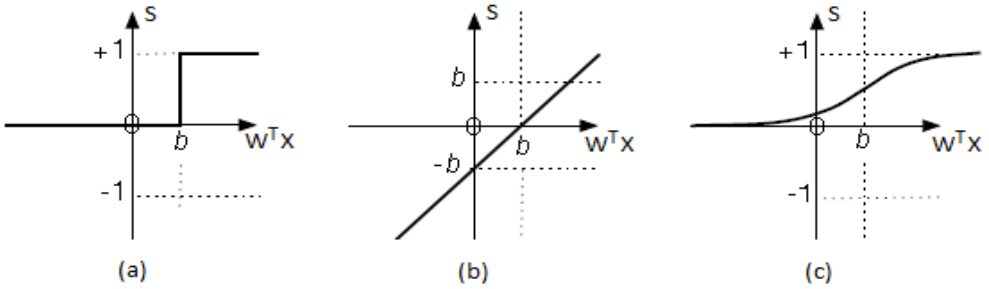


Fig.IV.6 : Fonction de transfert : (a) du neurone "seuil" ; (b) du neurone "linéaire" et (c) du neurone "sigmoïde" [95]

IV.2.1.5. Sortie du neurone S

La sortie du neurone n_i d'autre que l'application de la fonction de transfert à la somme pondérée de ces entrées selon l'équation suivante :

$$S = F\left(\sum_{j=1}^{n-1} w_{1j}\, x_j - b\right) \qquad \text{(IV.24)}$$

La sortie calculée, qui peut être discrète ou réelle selon la fonction d'activation utilisée, passe aux autres neurones ou directement à l'environnement extérieur.

IV.2.2. Architecture du réseau

Par définition, un réseau de neurones est un maillage de plusieurs neurones, généralement organisés en couches. Selon le mode de connexion des neurones, on distingue les réseaux suivants (Figure IV.7) [108] :

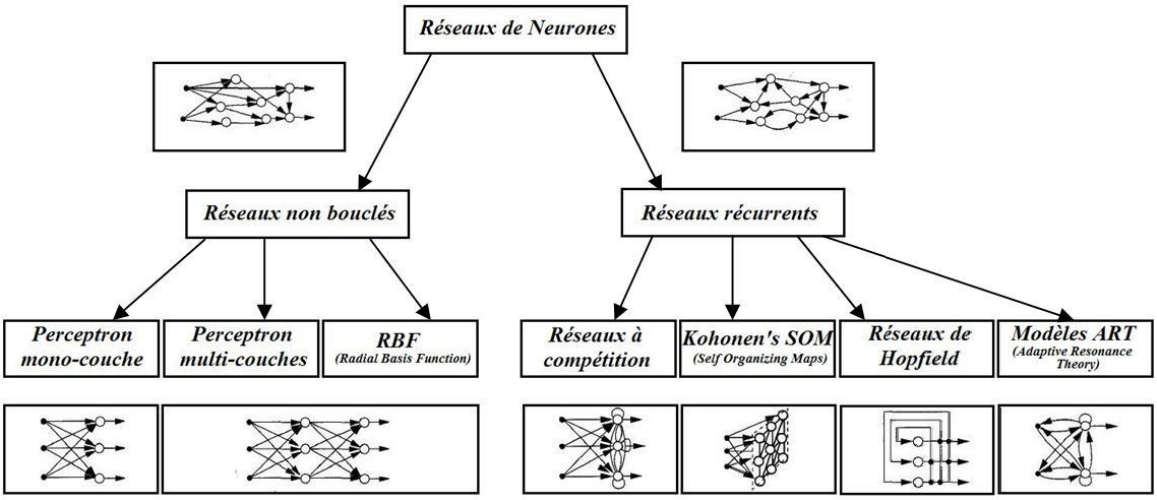


Fig.IV.7 : Taxinomie des architectures des réseaux non bouclés et récurrents

IV.2.3. Apprentissage

L'apprentissage est vraisemblablement la propriété la plus intéressante des réseaux neuronaux. Elle ne concerne cependant pas tous les modèles, mais les plus utilisés. L'apprentissage est une phase du développement d'un réseau de neurones durant laquelle le comportement du réseau est modifié jusqu'à l'obtention du comportement désiré. L'apprentissage fait appel à des exemples de comportement du processus à modéliser [109].

IV.2.4. Règles d'apprentissage

L'apprentissage peut être considéré comme le problème de la mise à jour des poids des connexions au sein du réseau, afin de réussir la tâche qui lui est demandée. L'apprentissage est la caractéristique principale des réseaux de neurones artificiels et il peut se faire de différentes manières et selon différentes règles :

- Règle d'apprentissage de Hebb,
- Règle d'apprentissage du perceptron de F. Rosenblatt,
- Règle d'apprentissage de Windrow-Hoff (ADALINE),
- Algorithme de rétropropagation du gradient :
  - Méthode de Newton,
  - Méthode de quasi-Newton,
  - Méthode Levenberg-Marquardt.

IV.2.5. Théorie de la généralisation

La généralisation concerne la tâche accomplie par le réseau une fois son apprentissage achevé [110]. Elle peut être évaluée en testant le réseau sur des données qui n'ont pas servi à l'apprentissage. Elle est influencée essentiellement par quatre facteurs : la complexité du problème, l'algorithme d'apprentissage, la complexité de l'échantillon (le nombre d'exemples et la manière dont ils représentent le problème) et enfin la complexité du réseau (nombre de poids). La complexité du problème est déterminée en partie par sa nature même : on peut parler de "complexité intrinsèque". Par ailleurs, l'algorithme d'apprentissage influe sur la généralisation par son aptitude à trouver un minimum local assez profond, sinon le minimum global [105].

Cependant une manière d'évaluer la faculté de généraliser la représentation construite par le réseau de neurones à toutes les données, y compris celles n'appartenant pas à l'ensemble d'apprentissage, consiste à mesurer les performances du réseau sur des données représentatives du problème non apprises. Il s'agit d'une évaluation de l'erreur de généralisation. La différence entre l'erreur d'apprentissage et l'erreur de généralisation représente une mesure de la qualité de l'apprentissage effectué [111].

IV.2.6. Critère d'arrêt pour l'apprentissage

L'une des méthodes qui permet de contrôler la capacité d'un réseau de neurones consiste à arrêter l'apprentissage "à temps". De ce fait, différents critères ont été développés qui permette de décider quand il faut stopper l'algorithme d'apprentissage :

- quand l'erreur d'apprentissage atteint un seuil fixé ;
- après un nombre fixé de cycles d'apprentissage ;
- quand une estimation de l'erreur de généralisation est minimum.

IV.2.7. Procédure de modélisation neuronale

Le modèle boite noire constitue la forme la plus primitive de modèle mathématique : il est réalisé uniquement à partir de données expérimentales ou d'observations, il peut avoir une valeur prédictive, dans un certain domaine de validité, mais il n'a aucune valeur explicative [112]. A l'opposé, un modèle de connaissance, que l'on pourrait qualifier de boite blanche, est issu de l'analyse des phénomènes physiques, chimiques, biologiques, etc., dont résulte la grandeur que l'on chercher à modéliser. Ces phénomènes sont mis en équation à l'aide des connaissances théoriques disponibles au moment de l'élaboration du modèle. La démarche scientifique s'efforce, dans la mesure du possible, de construire des modèles de connaissance : l'élaboration d'un modèle de connaissance nécessite l'existence d'une théorie, alors qu'un modèle boite noire requiert seulement la disponibilité de mesures.

L'objectif de la modélisation boite noire est de trouver, à partir des données ou des mesures disponibles, une relation déterministe, si elle existe, entre les variables d'entrées du modèle *x* et la grandeur à modéliser *y*.

La procédure de développement d'un réseau de neurone qui répond à une modélisation statique peut se résumer aux points suivants :

1. Sélection des données
2. Collecte des données
3. Séparation des bases de données,
4. Normalisation des données,
5. Choix du type de réseau de neurones,

6. Choix du nombre de neurones dans la couche cachée
7. Choix de la fonction de transfert
8. Estimation des paramètres ou apprentissage,
9. Validation et généralisation (Figure IV.8).

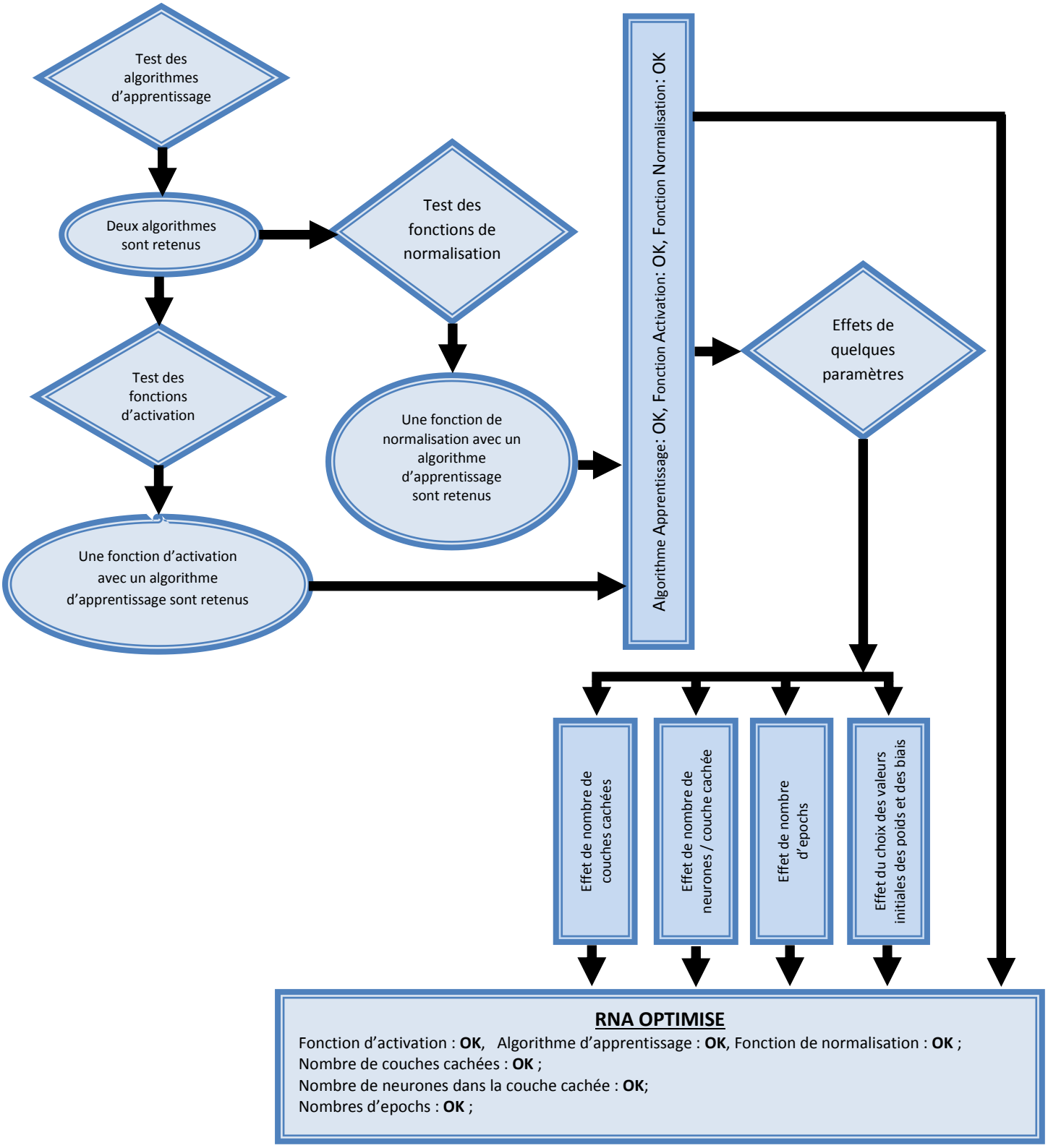


Fig.IV.8 : Optimisation des paramètres d'un réseau de neurone artificiel [105]

IV.2.8. Méthodologie de calcul

Les réseaux de neurones artificiels sont dotés de propriétés qui, comme l'apprentissage à partir d'exemples, semblent prometteuses dans certains domaines d'applications. En fait, est considéré comme éligible, tout problème qui se représente sous la forme d'une fonction de mise en correspondance entre un espace d'entrée et un espace de sortie, dès lors que l'on ne dispose que d'exemples de comportement de cette fonction [102]. Les réseaux de neurones utilisés dans ce paragraphe, les réseaux supervisés, sont appliqués pour prédire les propriétés thermodynamiques et de transport pour l'eau légère aux états liquide et vapeur.

La méthodologie adoptée pour le calcul des propriétés thermodynamiques et de transport de l'eau légère par la technique neuronale, est illustrée par l'organigramme de la figure IV.9.

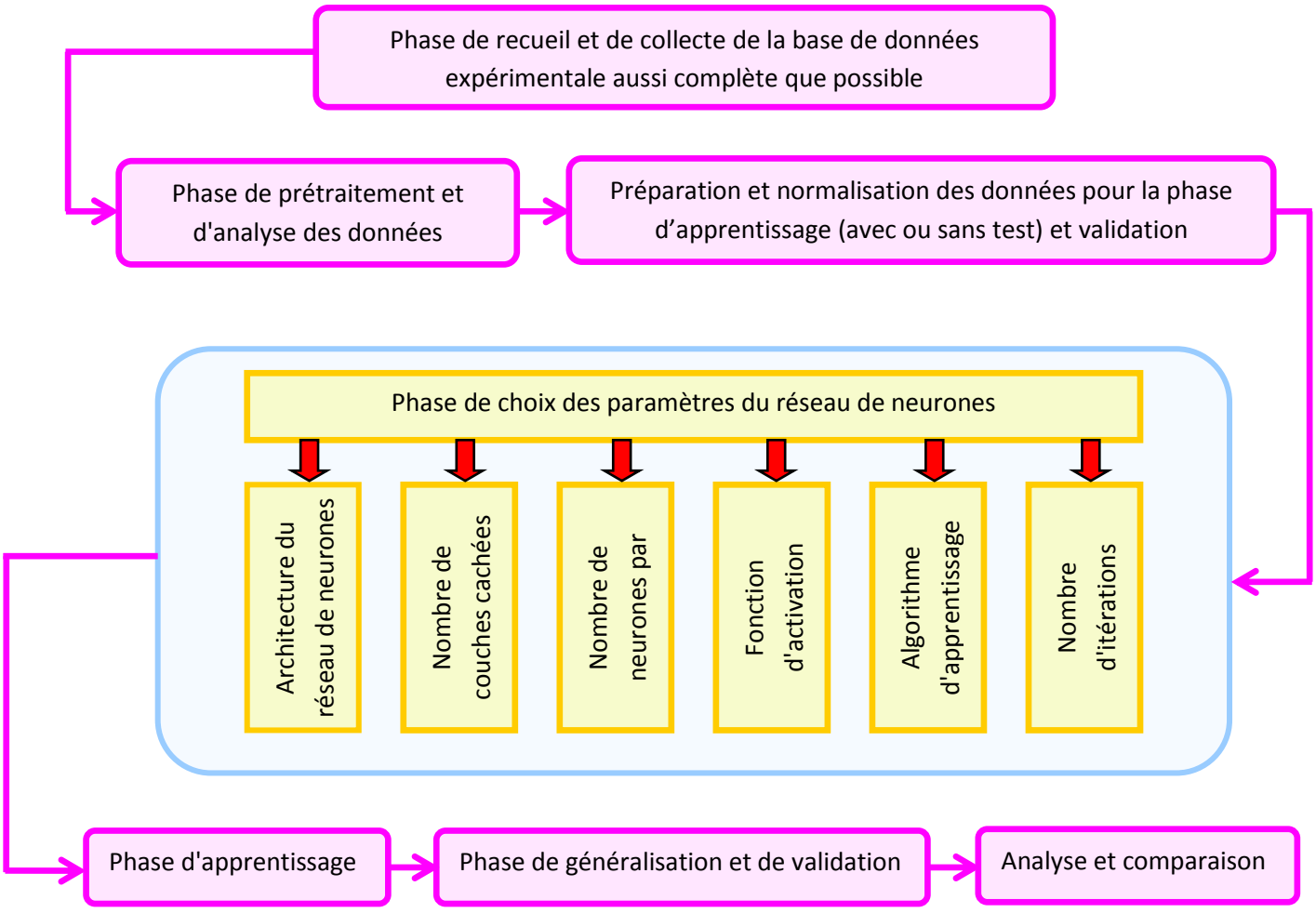


Fig.IV.9 : Procédure de modélisation par les réseaux de neurones [105], [113]

IV.2.9. Base de données

L'élaboration d'une base de données, tout l'intervalle de la phase de saturation, à partir de la base de données expérimentales [91], [92], [114], [90], [115], [116], [117], [118], est une phase décisive dans la conception d'un modèle neuronal. Elle doit être exécutée avec la plus grande précaution car toute erreur à ce stade va connaître des influences importantes tant sur la convergence du modèle que sur la généralisation.

Dans le but de constituer une base de données fiable et représentative, nous avons suivi une méthodologie, inspirée de l'étude bibliographique [112], qui revêt les étapes suivantes :

- sélection des entrées du modèle neuronal,
- collecte des données,
- mise en forme des données,
- normalisation des données.

IV.2.9.1. Sélection des entrées du modèle neuronal

La sélection des entrées consiste à déterminer les variables pertinentes par rapport à la grandeur à modéliser. Elle vise deux points essentiels [112] :

- réduction de la dimension de l'espace de représentation des variables du modèle,
- élimination des entrées qui n'ont pas ou peu d'influence sur la sortie.

Il est important de mentionner que chaque ajout d'une variable encombre le modèle et entraîne une multiplication des paramètres du réseau. Raison pour laquelle, la représentation des entrées doit contenir tous les facteurs pertinents par rapport à la grandeur à modéliser, mais seulement ceux-ci. Dans notre cas, on applique la règle des phases de Gibbs [119].

IV.2.9.2. Règle des phases de Gibbs

Comme on le sait, la matière se présente sous trois phases : solide, liquide et gazeuse. Un système thermodynamique peut être constitué d'un seul corps pur, ou en comporter plusieurs. Dans ce dernier cas, le mélange est caractérisé par sa composition, molaire ou massique. Chacun des constituants du mélange peut se trouver présent sous une ou plusieurs phases. Si les constituants et leurs phases sont répartis uniformément dans le volume délimité par les frontières du système, le mélange est homogène, sinon il est hétérogène. Les propriétés d'un mélange dépendent bien évidemment de son homogénéité.

La variance d'un système thermodynamique donné peut être déterminée grâce à la règle des phases de Gibbs [120], [121] :

$$v = c + n - \varphi \qquad \text{(IV.25)}$$

Avec :

- $\boldsymbol{v}$: est la variance du système, c'est-à-dire le nombre de variables indépendantes qui décrivent l'état du système à l'équilibre (ses degrés de liberté thermodynamiques);
- $\boldsymbol{c}$: est le nombre de constituants indépendants (dans les applications que nous envisagerons ce sera le nombre total de constituants);
- $\boldsymbol{n}$: est le nombre de facteurs physiques de l'équilibre, le plus souvent la température et la pression, donc $n \leq 2$
- $\boldsymbol{\varphi}$: est le nombre de phases.

Cette loi n'est valable que si les hypothèses de définition des phases sont respectées. Dans notre cas, nous traiterons un corps pur, ce qui signifie c = 1. Si le fluide considéré se présente sous une

seule phase, sa variance est égale à 2 et tout couple de variables d'état indépendantes permet de le représenter, les diagrammes utilisent généralement les couples (T,s), (h,P), ou (h,s).

Lorsque le fluide est présent sous deux phases (liquide et vapeur généralement), il devient monovariant c'est-à-dire sa variance est égale à 1. Cela indique qu'il existe une variable que l'on peut se donner indépendamment pour caractériser l'état du fluide, par exemple la température ou la pression. Toutes les autres variables sont fonctions de l'une qui a été initialement choisie.

IV.2.9.3. Collecte des données

Une fois les entrées pertinentes du modèle sont sélectionnées, l'objectif de cette étape est de les recueillir. La base de données ainsi constituée doit répondre à deux exigences [112] :

- contenir le maximum d'échantillons ou d'exemples (génériques et/ou expérimentaux,
- être représentative des données susceptibles d'intervenir en phase d'utilisation du modèle neuronal.

IV.2.9.4. Mise en forme des données

Dans cette étape les données sont d'abord subdivisées, au moins, en deux sous ensembles, un ensemble pour l'apprentissage et l'autre est réservé à la validation. L'échantillonnage des deux ensembles est fait de façon qu'ils reflètent parfaitement la base de données de départ. C'est-à-dire, on choisit toujours, à partir du tableau des données, deux lignes pour l'apprentissage et la troisième pour la validation et ainsi de suite jusqu'à la fin, soit 75% de la totalité de la base de données pour l'apprentissage et les 25% pour la validation [122]. Ensuite, l'ensemble des données est écrit sous forme matricielle. Comme il s'agit là d'un apprentissage supervisé, on a donc des matrices représentant l'entrée du modèle et des matrices représentants des sorties désirées selon le cas.

IV.2.9.5. Normalisation des données

La normalisation est une étape importante dans le processus de l'élaboration des données. Elle devient, dans la plus part des cas, une exigence pour les matrices des inputs, du fait qu'on utilise souvent des fonctions de transfert bornées de type sigmoïdes dans les modélisations statiques.

Dans notre travail, on a normalisé l'entrée par la fonction log et la sortie qui comprend plusieurs paramètres est normalisée par l'instruction ''mapminmax'', dont l'algorithme est indiqué ci-dessous, en langage Matlab qui effectue une normalisation de la valeur maximale et minimale de chaque rangée [122].

$$y = \frac{(y_{max} - y_{min})(x - x_{min})}{(x_{max} - x_{min})} + y_{min} \qquad \text{(IV.26)}$$

IV.2.10. Conception des réseaux

La conception d'un modèle neuronal consiste à faire une étude d'évaluation des éléments constitutifs du réseau en fonction de la performance de modélisation souhaitée. Elle vise à fixer les éléments suivants :

- le type du réseau,
- le nombre de couches cachées,
- le nombre de neurones dans les couches,
- la fonction de transfert des neurones,
- l'algorithme d'apprentissage,
- le nombre d'itérations (cycles).

Dans notre cas, il s'agit d'approximer les propriétés thermodynamiques et de transport de l'eau légère, qui sont des fonctions suffisamment régulières, par un réseau de neurones. Il est donc question, de faire une modélisation statique indépendamment du temps, le réseau adéquat au vue de la monographie consultée [123], [124], [125], [112], [126], [127], [128], [129], [130], [131], ne peut être en général qu'un réseau non bouclé type MLP (pour Multi Layer Perceptron en Anglais). La propriété fondamentale de ces réseaux est l'approximation universelle, qui s'énonce de la façon suivante :

"Toute fonction bornée suffisamment régulière peut être approchée uniformément, avec une précision arbitraire, dans un domaine fini de l'espace de ses variables, par un réseau de neurones comportant une ***couche de neurones cachés*** *en nombre fini, possédant tous la même fonction d'activation et un neurone de* ***sortie linéaire***" [112], [105].

C'est cette propriété appelée encore théorème d'existence [112] qui a justifié notre choix de l'architecture de réseaux de neurones à une couche cachée, type MLP, avec des tangentes sigmoïdes comme fonctions de transfert des neurones cachés et une fonction linéaire (identité) pour le neurone de sortie. L'algorithme d'apprentissage le mieux adapté, d'après la bibliographie [112] et après confirmation par une étude évaluative, est celui de Levenberg-Marquardt.

IV.2.11. Région diphasique

C'est la seule région qui nous intéresse avec la température de saturation comme paramètre d'entrée et on a à prédire dix paramètres indiqués ci-dessous (figures IV.10 et IV.11) :

- Volume phase liquide v' ;
- Volume phase vapeur v'' ;
- Capacité thermique isobare phase liquide C_p' ;
- Capacité thermique isobare phase vapeur C_p'' ;
- Célérité du son phase liquide w' ;
- Célérité du son phase vapeur w'' ;
- Viscosité dynamique phase liquide η' ;
- Viscosité dynamique phase vapeur η'' ;
- Conductivité thermique phase liquide λ' ;
- Conductivité thermique phase vapeur λ''.

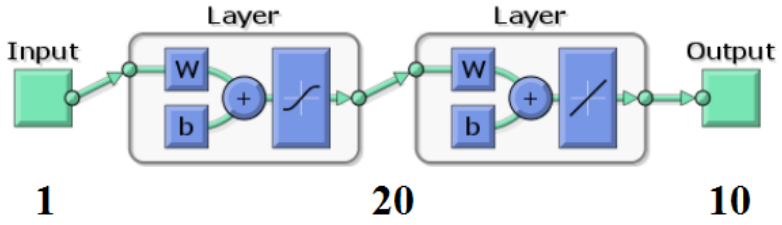


Fig.IV.10 : Schéma synoptique du modèle

Le tableau IV.22 résume l'architecture du réseau développé pour la région diphasique.

Tableau IV.22 : Structure du réseau neuronal

Type du réseau	Nbr. de neurones dans la couche cachée	Fonction de transfert des neurones de la couche cachée	Fonction de transfert du neurone de sortie	Algorithme d'apprentissage	Nombre d'itération ou de cycles
MLP à 2 couches	20 Neurones	Sigmoïde tangentielle	Fonction identité	Levenberg-Marquardt	24546

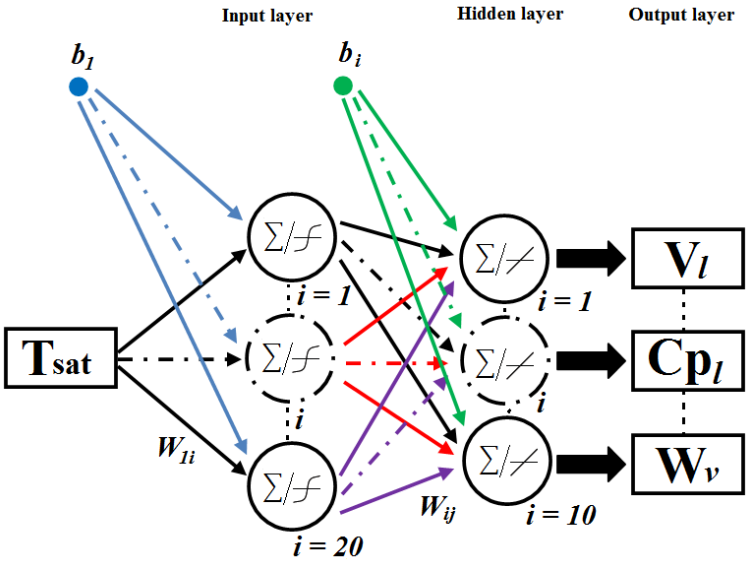


Fig.IV.11 : Schéma simplifié de l'architecture du réseau neuronal [132]

Pour l'étude statistique et afin d'évaluer la performance du réseau, on a utilisé les paramètres suivants, Figure IV.12 :

- Squared correlation coefficient R (Coefficient de corrélation) :

$$R = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_0)^2} \qquad \text{(IV.27)}$$

Avec

$$y_0 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t) \qquad \text{(IV.28)}$$

- Root mean square error RMSE (Racine de l'erreur quadratique moyenne) :

$$RMSE = \left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t)^2\right]^{1/2} \qquad \text{(IV.29)}$$

- Bias (Biais)

$$Bias = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t) \tag{IV.30}$$

- Absolute error AE (Erreur absolue) :

$$AE_i = \left(\frac{\left||y_i^t| - |y_i|\right|}{|y_i^t|}\right)100 \tag{IV.31}$$

- Average absolute error AAE (Erreur absolue moyenne) :

$$AAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} AE_i \tag{IV.32}$$

- Standard deviation STDEV (Déviation standard) :

$$STDEV = \left[\frac{n\sum_{i=1}^{n} AE_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} AE_i)^2}{n(n-1)}\right]^{1/2} \tag{IV.33}$$

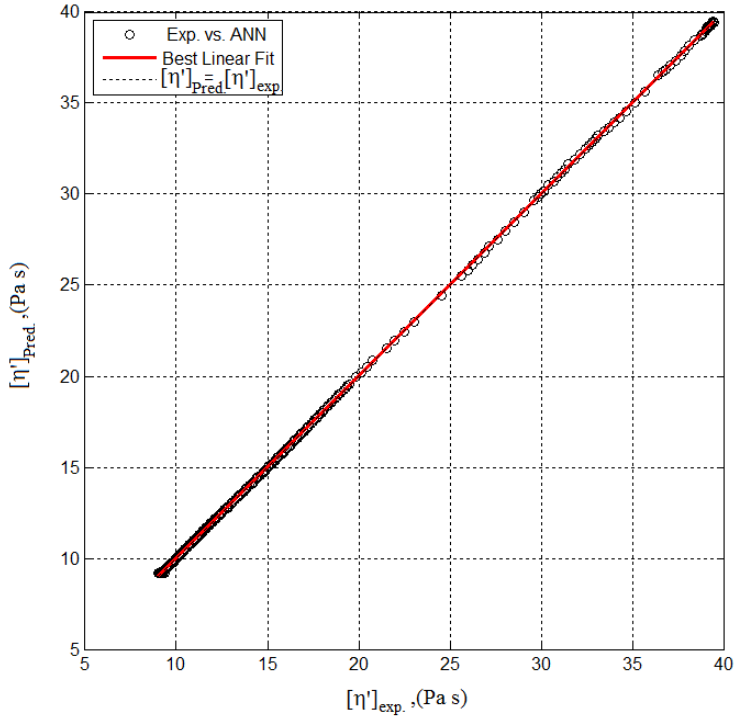


Fig.IV.12 : Comparaison de la viscosité dynamique cible avec la valeur prédite par le réseau (phase d'apprentissage)

Le tableau IV.23 récapitule l'étude statistique.

Tableau IV.23 : Performance statistique du réseau

Propriété	Performance	Apprentissage	Généralisation	Validation
Volume phase liquide v'	R	1	1	1
	RMSE	193 .609e-03	01.1529e00	869.756e-03
	Bias	11 .6751e-03	-153.366e-03	-124.251e-03
	AAE (%)	68.0568e-03	71.7552e-03	70.5532e-03
	STDEV (%)	49.9458e-03	48.0309e-03	47.7705e-03
	AE(Max) (%)	239.477e-03	02.9176e-03	230.004e-03
Volume phase vapeur v''	R	1	1	1
	RMSE	314.268e-03	08.8973e00	29.3890e00
	Bias	-18.951e-03	-12.221e00	-04.1984e00
	AAE (%)	151.700e-03	174.408e-03	171.873e-03
	STDEV (%)	110.612e-03	127.033e-03	127.873e-03
	AE(Max) (%)	641.917e-03	654.794e-03	665.369e-03
Capacité thermique isobare phase liquide C_p'	R	1	1	1
	RMSE	392.060e-03	02.1549e-03	04.8671e-04
	Bias	23.6421e-03	-296.000e00	-123.881e-03
	AAE (%)	359.826e-03	533.622e-03	04.3675e-03
	STDEV (%)	561.540e-03	809.980e-03	2.18972e-03
	AE(Max) (%)	03.2168e-00	03.8187e00	03.2409e00
Capacité thermique isobare phase vapeur C_p''	R	1	1	1
	RMSE	251.340e-03	01.0114e-03	04.9342e-03
	Bias	15.1568e-03	138.930e-03	-01.8943e-03
	AAE (%)	529.977e-03	21.5902e-03	14.1959e-03
	STDEV (%)	491.322e-03	22.9906e-03	03.4094e-03
	AE(Max) (%)	02.4516e+00	119.380e-03	02.7472e00
Célérité du son phase liquide w'	R	1	1	1
	RMSE	19.1937e-03	47.1213e-03	429.379e-03
	Bias	01.1574e-03	06.4726e-03	-61.3400e-03
	AAE (%)	104.205e-03	35.2207e-03	115.575e-03
	STDEV (%)	134.845e-03	27.1299e-03	154.677e-03
	AE(Max) (%)	862.053e-03	136.671e-03	810.874e-03
Célérité du son phase vapeur w''	R	1	1	1
	RMSE	07.0982 e -03	01.8695e+03	124.919e-03
	Bias	-428.037e-03	-256.800e00	17.8456e-03
	AAE (%)	32.8391e-03	287.599e-03	33.1103e-03
	STDEV (%)	26.5159e-03	270.125e-03	25.7553e-03
	AE(Max) (%)	180.526e-03	1.70782e00	127.076e-03
Viscosité dynamique phase liquide η'	R	1	1	1
	RMSE	88.0611e-03	630.887e-03	203.5346e-03
	Bias	05.3102e-03	-86.659e-03	-29.0781e-03
	AAE (%)	249.809e-03	288.153e-03	310.731e-03
	STDEV (%)	207.046e-03	219.917e-03	249.526e-03
	AE(Max) (%)	01.0165e-00	997.804e-03	923.497e-03
Viscosité dynamique phase vapeur η''	R	1	1	1
	RMSE	01.9265e-03	24.2017e-03	523.589e-03
	Bias	116.176e-06	-03.3244e-03	-74.7984e-03
	AAE (%)	194.091e-03	215.237e-03	647.349e-03
	STDEV (%)	254.294e-03	301.495e-03	632.842e-03
	AE(Max) (%)	02.0948e00	01.6823e00	02.1955e00
Conductivité thermique phase liquide λ'	R	1	1	1
	RMSE	59.1811e-03	02.1135e00	02.2848e00
	Bias	03.5687e-03	-290.321e-03	-326.396e-03
	AAE (%)	212.403e-03	194.944e-03	185.359e-03
	STDEV (%)	211.881e-03	198.676e-03	200.961e-03

Conductivité thermique phase vapeur λ''	AE(Max) (%)	01.2867e00	01.3479e00	01.3477e00
	R	1	1	1
	RMSE	50.9622e-03	928.988e-03	861.870e-03
	Bias	03.0441e-03	-127.606e-03	-123.124e-03
	AAE (%)	271.322e-03	309.275e-03	319.047e-03
	STDEV (%)	191.362e-03	203.598e-03	203.994e-03
	AE(Max) (%)	698.180e-03	834.318e-03	829.799e-03

Pour la présentation des résultats, nous commençons d'abord par les résultats obtenus lors de la phase de conception du modèle neuronal, c'est-à-dire la phase d'apprentissage et de généralisation. La figure IV.12 ainsi que le tableau IV.23 présentent ces résultats, nous remarquons par exemple que pour la première propriété à savoir le volume phase liquide v', la valeur moyenne de l'erreur relative par rapport aux données utilisées est inférieure à 0.068% pour l'apprentissage et de 0.072% pour la phase de généralisation. Le coefficient de corrélation R de la courbe de linéarisation (v' estimée en fonction de v' de la base de données ou de référence) est égal à 1. Il est important de rappeler, que la taille des matrices utilisées pour effectuer l'apprentissage est de 275, la validation de 53 et pour la généralisation de 43 colonnes.

Nous remarquons également dans cette phase que le modèle neuronal reproduit parfaitement les données qui ont servi à l'apprentissage et à la validation. L'erreur commise sur l'ensemble de validation, inférieure à 0.071%, montre bien que le réseau de neurones arrive à suivre l'évolution de la température de saturation entre le point d'apprentissage ce qui le met hors des domaines de sous ou sur apprentissage.

IV.2.12. Etude comparative

Toujours dans le but de mesurer la performance du modèle neuronale conçu, nous l'avons confronté aux modèles proposés dans la littérature et aussi à un échantillon de données expérimentales repérées dans la référence [91], [92]. Le tableau IV.24 présente cette étude évaluative et ce pour quelques paramètres. Les résultats obtenus, comme on peut le remarquer, sont en parfaite concordance avec les autres modèles si non meilleurs. L'erreur relative moyenne commise sur l'ensemble de ce test (par rapport aux valeurs expérimentales) oscille entre 0.015% pour la célérité du son phase vapeur w'' et 1.31 % pour la capacité thermique isobare phase vapeur C_p''.

Tableau IV. 24 : Etude comparative entre le MN et le modèle WASP [133] par rapport aux valeurs expérimentales [91]

Propriété	**T [K]**	**Valeur expérimentale**	**Erreur relative en valeur absolue [(calc. – exp.)/exp.]*100 [%]**			
			WASP		**Modèle neuronal**	
			Valeur	**ER**	**Valeur**	**ER**
1/V'	273.160	999.7890	999.86	0.007	999.773	0.002
[kg/m^3]	308.150	993.9896	994.05	0.006	993.515	0.048
	548.150	759.2100	759.35	0.018	759.724	0.068
	603.226	640.3770	640.29	0.014	640.316	0.010
	623.226	574.3500	573.81	0.094	574.734	0.067
ERM [%]	**-**	**-**	**-**	**0.028**	**-**	**0.039**
1/V''	273.1600	0.0048524	0.004850	0.050	0.00485508	0.055
[kg/m^3]	303.1406	0.0303746	0.030340	0.114	0.03036680	0.026
	323.1396	0.0830185	0.082980	0.046	0.08292540	0.112
	523.2110	19.982300	19.99200	0.049	19.9919000	0.048
	638.227	166.75700	166.3300	0.256	166.800000	0.026
ERM [%]	**-**	**-**	**-**	**0.103**	**-**	**0.053**
C_p'	283.144	4.19400	4.1894	0.110	4.19717	0.076

[kJ/kgK]	373.124	4.21700	4.2248	0.185	4.22199	0.118
	563.182	5.50090	5.4323	1.247	5.53787	0.672
	593.186	6.55020	6.2628	4.388	6.49226	0.885
	628.185	11.7412	9.3609	20.27	11.6965	0.381
ERM [%]	**-**	**-**	**-**	**5.240**	**-**	**0.426**
C_p''	323.127	1.92050	1.8737	2.437	1.93646	0.831
[kJ/kgK]	403.130	2.23140	2.1653	2.962	2.26261	1.399
	483.157	3.10710	2.9754	4.239	3.12826	0.681
	573.184	6.25500	6.0061	3.979	6.28345	0.455
	628.185	21.2621	-	-	20.5850	3.185
ERM [%]	**-**	**-**	**-**	**3.404**	**-**	**1.310**
W'	275.779	1414.6	-	-	1414.92	0.023
[m/S]	303.410	1509.3	-	-	1510.42	0.074
	401.546	1505.9	-	-	1505.67	0.015
	442.165	1418.8	-	-	1418.47	0.023
	534.653	1096.9	-	-	1101.27	0.398
ERM [%]	**-**	**-**	**-**	**-**	**-**	**0.107**
W''	273.1800	409.0	-	-	408.970	0.007
[m/s]	303.3330	430.0	-	-	430.099	0.023
	423.1653	493.0	-	-	493.041	0.008
	499.7527	505.0	-	-	504.907	0.018
	559.0804	489.0	-	-	488.917	0.017
ERM [%]	**-**	**-**	**-**	**-**	**-**	**0.015**

IV.3.1. Utilisation des UDF

Le solveur FLUENT est un code CFD à usage général. Les grandes capacités de modélisation physique du FLUENT ont été appliquées à des applications industrielles allant de l'écoulement de l'air sur une aile d'avion jusqu'à la combustion dans un four, de colonnes à bulles à la production de verre, de la circulation sanguine à la fabrication de semi-conducteurs, de la conception de salles propres aux usines de traitement des eaux usées. La capacité du code à modéliser les moteurs à cylindres, l'aéroacoustique, les turbomachines et les systèmes à plusieurs phases a permis d'élargir sa portée.

La modification des lignes de programmation du code n'est pas permise. Néanmoins, Afin de personnaliser le solveur FLUENT (l'interface standard ne peut pas être programmée pour anticiper tous les besoins), les utilisateurs peuvent introduire des équations supplémentaires ou des termes sources dans les équations de transport existantes, spécifier des conditions aux limites, définir les propriétés du fluide (objet de notre travail), initialiser la solution et modifier certains paramètres spécifiques de modèles (la turbulence,...) grâce aux UDF. Ces fonctions sont programmées en langage C et sont introduites dans le code. Cependant, on ne peut pas avoir accès à toutes les variables ou à tous les modèles par les UDF, la figure IV.13 indique les points d'accès de l'utilisateur au solveur FLUENT pour une éventuelle modification.

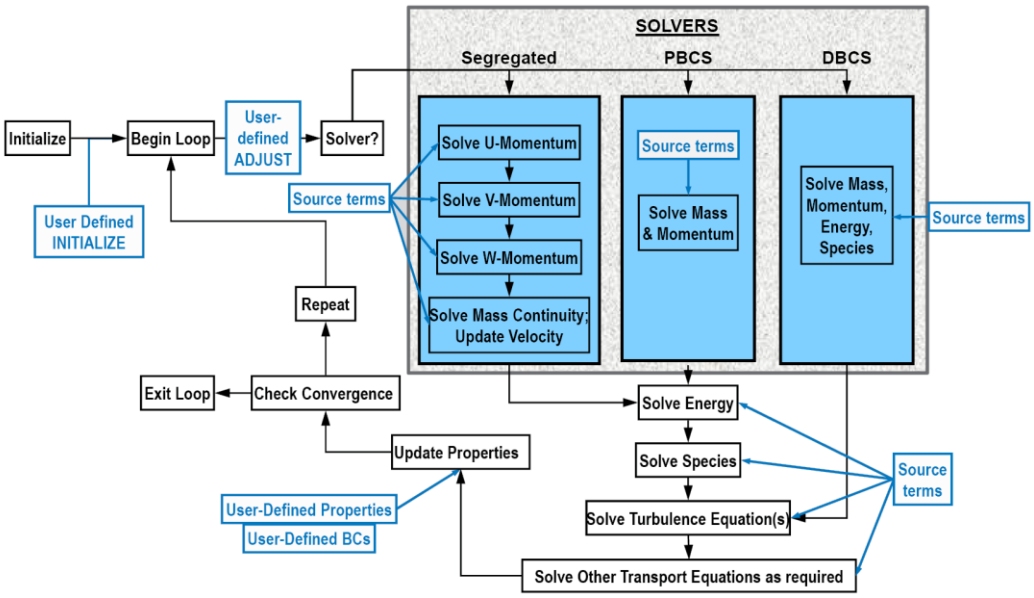


Fig.IV.13 : Points d'accès de l'utilisateur au solveur FLUENT [84]

L'accès aux données à partir du solveur Fluent est accompli en attachant une fonction UDF au code via l'interface graphique (GUI). Une fois que l'UDF est correctement attachée, les données du solveur sont passées à la fonction et sont disponibles à l'utilisation chaque fois que la fonction est appelée. Ces données sont automatiquement transmises par le solveur à l'UDF comme arguments de fonction. Notez que toutes les données du solveur, indépendamment du fait qu'ils sont passés à l'UDF par le solveur ou retournés au solveur par l'UDF, sont spécifiées en unités SI.

IV.3.2. Etapes de base pour l'utilisation des UDF dans FLUENT

Pour l'implémentation d'une UDF dans le code Fluent, l'utilisateur doit assurer certaines étapes :

- Identification du problème à résoudre ;
- Vérification de la convivialité et les limitations des modèles standards du solveur FLUENT ;
- Programmation de l'UDF i.e. création du fichier contenant le code source de l'UDF ;
- Lancement du solveur FLUENT et lecture dans les fichiers de données (case/data) ;
- Interprétation ou compilation de l'UDF dans la session du solveur FLUENT ;
- Attribution de l'UDF à la variable et à la zone appropriée dans le panneau définition des propriétés des matériaux ou panneau des conditions aux limites selon le cas;
- Réglage de la fréquence de la mise à jour de l'UDF dans le panneau des itérations ;
- Lancement du calcul ;
- Examination des résultats.

IV.3.3. Implémentation des propriétés de l'eau et de la vapeur dans les UDF

Parmi les applications les plus évidentes des réseaux neuronaux, déjà développées précédemment, est le développement d'une UDF pour le calcul des propriétés thermodynamiques et de transport de l'eau légère (corps pur) pour la région diphasique. Cette UDF est de grande importance pour le code CFD ANSYS-Fluent, contrairement au code ANSYS-CFX ou la formulation industrielle d'IAPWS 1997 est implémentée. En effet, le code ANSYS-Fluent offre seulement la possibilité d'utilisation d'équation d'états, comme la loi des gaz parfaits, l'équation Redlich-Kwong et les interpolations polynomiales [84]. En absence de cette UDF et dans le cas d'utilisation des

interpolations polynomiales, non seulement nous perdons de la précision, comme on le verra plus tard dans le chapitre V, mise en œuvre numérique, mais l'utilisateur est amené à effectuer des calculs qui peuvent s'avérer complexes et consommateurs de temps. Traditionnellement, l'utilisateur a dû se familiariser avec l'utilisation des tables thermodynamiques. L'emploi des tables donne lieu à de fastidieux calculs, souvent très répétitifs, qui détournent l'intérêt du principal objet du code à savoir la simulation. La figure IV.14 montre l'implémentation de l'une des UDF, celle développée avec les réseaux de neurones, dans le code CFD ANSYS-Fluent comportant 10 propriétés thermophysiques de l'eau et de la vapeur.

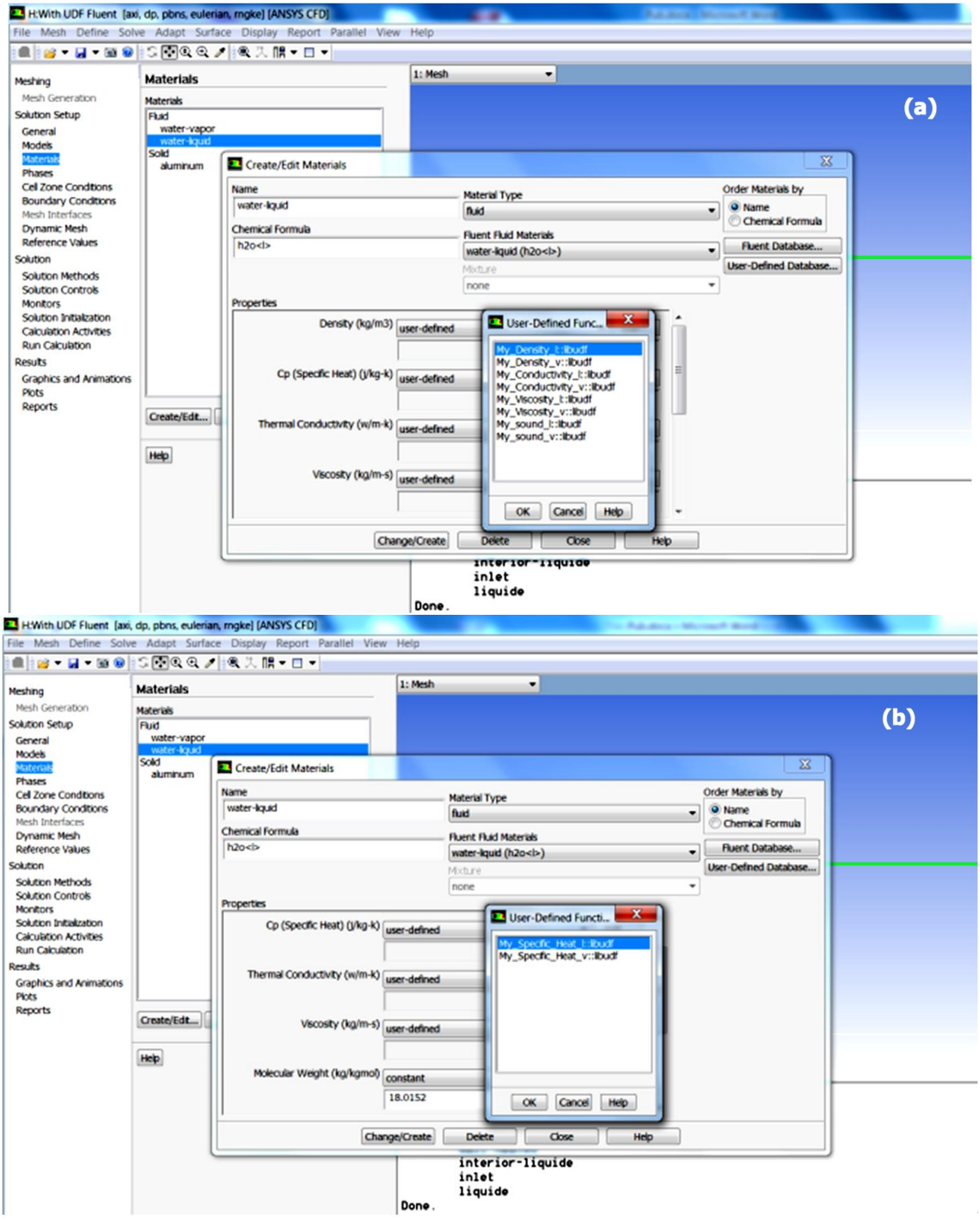


Fig.IV.14 : Implémentation de l'UDF développée dans le code ANSYS-FLUENT (a) Groupe de 8 propriétés; (b) Groupe de 2 propriétés

C'est pour répondre à cette attente que nous avons intégré la modélisation des propriétés thermodynamiques et de transport (densités, conductivités thermiques, viscosités, etc…) de l'eau légère phase liquide et phase vapeur, dans des conditions de température et de pression variables par deux méthodes. La première en développant une UDF en utilisant les réseaux de neurones, ce travail est publié dans le journal NST (Nuclear Science and Techniques) [132], la deuxième en implémentant la formulation industrielle d'IAPWS 1997 dans une autre UDF, ce travail est communiqué dans les Journées d'Études Nationales de Mécanique, JENM'2015 Ouargla du 21-22 Avril 2015 [134]. La figure IV.15 montre la manière d'utilisation de deux macros pour la programmation de l'UDF :

1. Une pour effectuer l'affectation de la condition aux limites (DEFINE_PROFILE),
2. Et l'autre, pour la boucle sur les centres de l'entrée des faces (begin_f_loop).

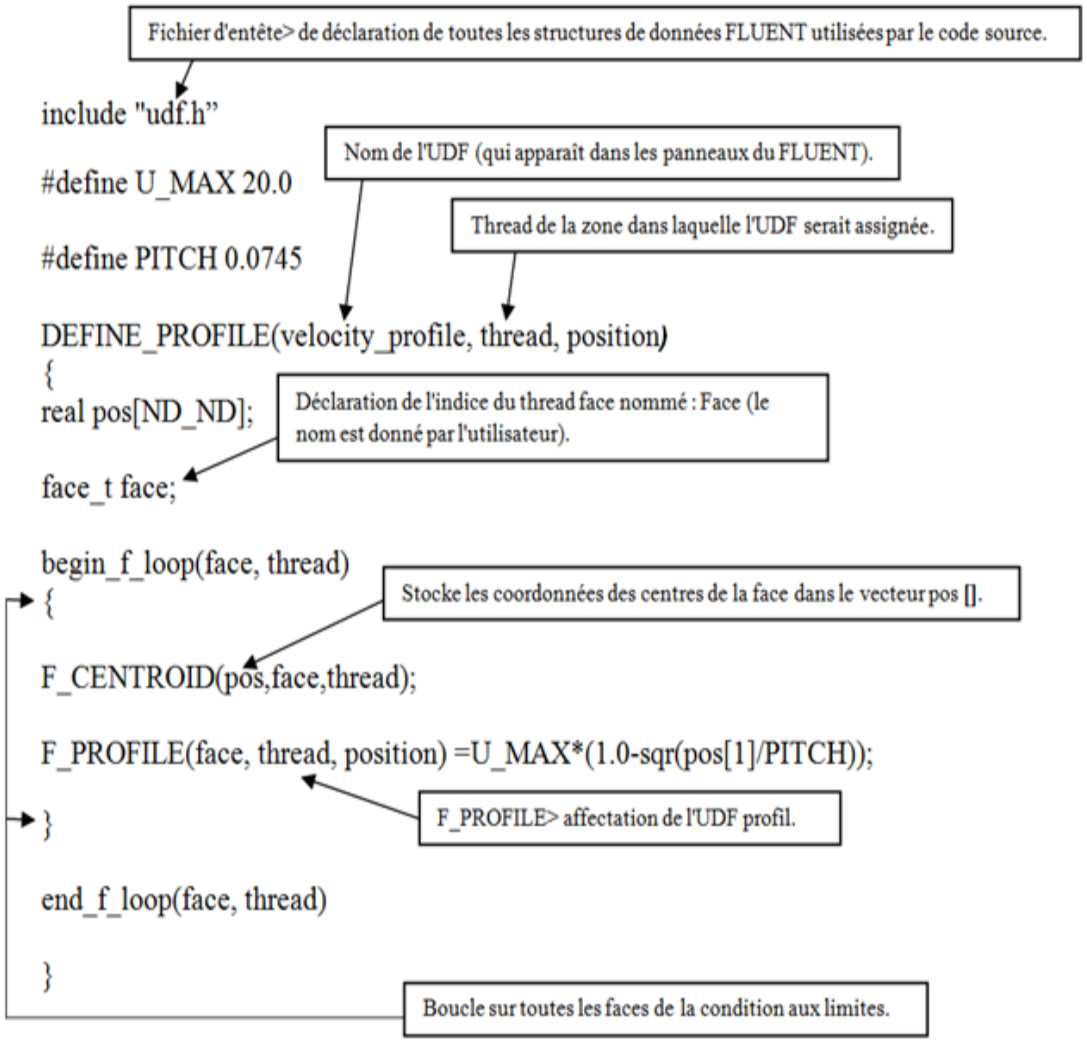


Fig.IV.15 : Schéma synoptique d'utilisation de deux macros [84]

IV.4. Conclusion

Au terme de ce chapitre, nous pouvons conclure que, les propriétés thermodynamiques de transport, bien que nécessaires pour l'étude des phénomènes physiques, les démarches de leur détermination demeurent une opération très délicate. Par voie de conséquence, une recherche dans

le sens d'apporter une amélioration à la façon de leur estimation est plus que nécessaire au vu de leurs importances.

La formulation industrielle IAPWS-IF97 pour le calcul des propriétés thermodynamiques de l'eau et de la vapeur pour usage industriel est implémentée dans plusieurs codes de calculs, code système (Relap) ou code CFD (Cathare, ANSYS-CFX etc…). C'est une formulation de base pour le calcul des centrales nucléaires et d'autres applications industrielles depuis la fin des années 1960. L'IAPWS-IF97 améliore considérablement la précision et la vitesse de calcul des propriétés thermodynamiques. Beaucoup d'utilisateurs, en particulier les fabricants des chaudières et des turbines mais aussi les entreprises d'exploitation de centrale électrique et des bureaux d'ingénierie apportent des modifications de leur code de conception maison par l'implémentation de la formulation IAPWS-IF97 particulièrement l'ingénierie de l'énergie dans l'industrie nucléaire et l'industrie chimique.

Une nouvelle technique basée sur les réseaux de neurones artificiels, qui sont une classe d'algorithmes d'apprentissage statistique qui offrent des perspectives intéressantes pour la régression mathématique, est mise à l'épreuve. L'application de la méthode des réseaux de neurones dans les calculs et la prédiction des propriétés thermodynamiques et de transport de l'eau aux états liquide et vapeur s'avère bénéfique. La puissance de cette méthode est mise en évidence par la bonne concordance, lors de la comparaison entre les résultats obtenus par les réseaux de neurones et les travaux antérieurs issus de la littérature et de l'expérience. Les erreurs commises restent très acceptables, en effet les études comparatives effectuées lors de la confrontation des résultats témoignent de leurs efficacités et de leurs performances.

Le code FLUENT permet la modification partielle du code numérique à l'aide des fonctions dites "Fonctions définies par l'utilisateur" (UDF), ces fonctions externes que l'utilisateur peut les écrire en langage C ou C^{++} sont mises en œuvre dans le code. L'UDF est un outil très puissant pour la modification du code de base et l'optimiser pour une portée souhaitée.

L'utilisateur peut accéder et manipuler presque toutes les données du solveur FLUENT et de contrôler pleinement le processus de solution via les UDF.

CHAPITRE V

Mise en œuvre numérique

Lors du chapitre précédent, on s'est intéressé à la modélisation des propriétés de l'eau en son état liquide et vapeur par deux méthodes en l'occurrence, par le formalisme de l'association internationale pour les propriétés de l'eau et de la vapeur (IAPWS) et par les réseaux de neurones, enfin du chapitre on a présenté les UDF, soient les fonctions définies par les utilisateurs et leur implémentation dans le solveur ANSYS-Fluent.

L'objectif de ce dernier chapitre, mise en œuvre numérique, est la validation de ce qui a été fait lors du chapitre précédent par la confrontation du modèle numérique, modèle RPI Eulérien couplé avec les UDF développées, avec les mesures expérimentales. Trois benchmarks sont à étudiés dans ce contexte. Le premier benchmark concernera la simulation de l'ébullition nucléée sous saturée dans un canal vertical en utilisant l'UDF développée avec les réseaux de neurones. Le deuxième benchmark est la simulation de l'ébullition nucléée sous saturée dans un canal vertical, mais cette fois ci, avec transfert de chaleur conjugué et en utilisant l'UDF développée avec l'implémentation de l'IAPWS. Le troisième benchmark est la simulation de l'ébullition nucléée sous saturée d'un assemblage de cinq éléments chauffants en 3D (boucle de FRIGG) avec l'UDF utilisant les réseaux de neurones.

V.1. Processus de simulation

Le processus de simulation sous un code CFD, ANSYS-Fluent en l'occurrence, est composé des étapes, on cite entre autres :

- **Formulation du problème**

La physique du problème affecte les équations à résoudre, c'est-à-dire un problème compliqué nécessite un modèle de turbulence sophistiqué, généralement il est nécessaire de recourir à des simplifications sans en aucun cas affecté la précision de la solution pour simplifier le problème.

- **Maillage**

C'est une étape critique dans une analyse CFD, car le problème peut changer en fonction des nombres et types des mailles utilisées. Généralement, les régimes d'écoulement à fort gradient de pression doivent être raffinés et encore plus recommandés au voisinage proche de parois.

- **Spécification d'écoulement**

Une fois le maillage élaboré, on passe à l'application des conditions aux limites et à l'initialisation, ainsi que l'introduction des propriétés du fluide qui a fait l'objet de développement de notre UDF.

Ces trois premières étapes sont connues pour les analystes de pre-processing dans une analyse CFD.

- **Solution numérique**

C'est la phase de la solution numérique des équations après discrétisation, en utilisant des critères de convergence après le choix de la méthode de résolution cette étape est connue sous le nom de post-processing.

- **Analyse des résultats**

Les résultats obtenus de l'étape de la solution numérique seront vérifiés avec l'aspect physique recherché et les différents paramètres de l'écoulement seront représentés sous formes de graphes, contour…etc. La figure V.1 présente le schéma synoptique d'un processus de simulation sous un code CFD.

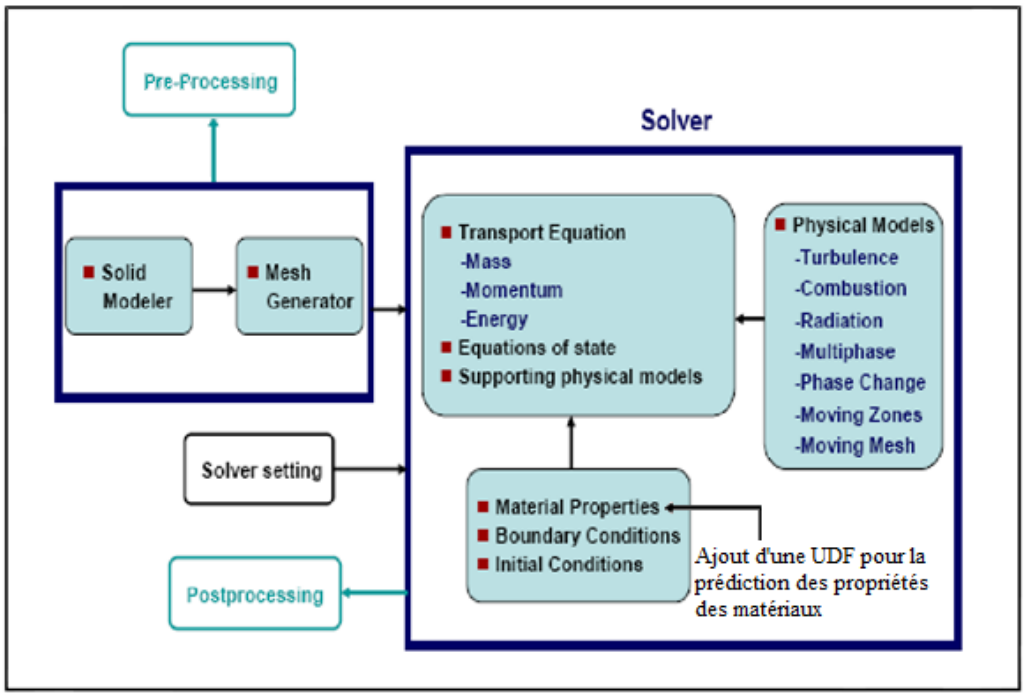


Fig.V.1 : Schéma synoptique du processus de simulation

V.2. Etude de l'ébullition sous-refroidie dans un canal vertical (Benchmark1)

Le développement du nucléaire a donné lieu à des études systématiques, qui n'avaient pas été faites auparavant. Dans le nucléaire, l'ébullition est rencontrée, selon le cas, en :

1. Fonctionnement normal : Réacteurs bouillants et générateurs de vapeur,
2. Situations accidentelles : Accident de perte de réfrigérant, LOCA pour Loss Of Coolant Accident en Anglais et l'accident de perte de débit, LOFA pour Loss Of Flow Accident en Anglais.

Ce type d'échange présente l'avantage d'une amélioration importante du transfert de chaleur, mais ceci n'est pas sans limites. A partir d'un certain seuil, il peut arriver que cet échange se dégrade suite au remplacement du liquide par la vapeur à la surface de la paroi chauffante : c'est la crise d'ébullition.
L'objectif de l'étude de ce benchmark est la validation du couplage de l'UDF développée et implémentée dans le code CFD ANSYS-Fluent, comme indiquée dans la figure IV.14, avec le

modèle Eulérien-RPI pour la prédiction de la fraction de la vapeur pour un écoulement en ébullition sous saturée avec transfert de chaleur.

V.2.1. Description du benchmark

On considère un benchmark, étudié expérimentalement par Bartolemei et Chanturiya [135], où un écoulement ascendant d'un liquide sous saturé dans une conduite verticale avec apport de chaleur de Q = 0.57 MW/m^2 réparti uniformément le long de la paroi de la conduite. Le liquide entre du bas de la conduite cylindrique verticale avec un débit massique constant de G_{in}=900 kg/sm^2, à une température de 473.15 K et une pression de fonctionnement de 4.54 MPa, soit à une température de saturation inférieure à 58.2 K. La géométrie adoptée est bidimensionnelle de longueur de Z=2 m et de diamètre de D=14.5mm, voir la figure V.2.

Les données expérimentales disponibles comprennent les températures moyennes du caloporteur le long de la paroi de la conduite et les fractions moyennes de la vapeur le long du tube. L'ébullition pariétale est dans le régime de l'ébullition nucléée [136] [137] [74].

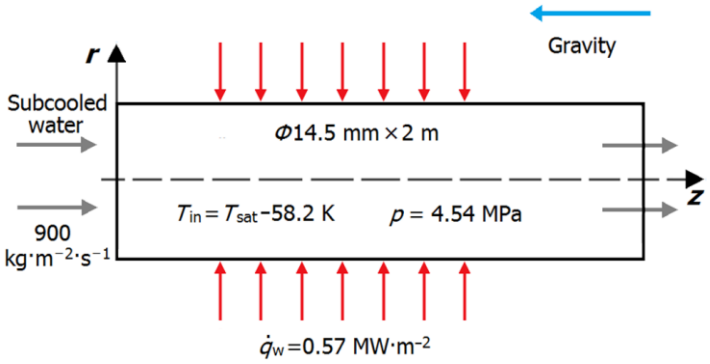


Fig.V.2 : Schéma synoptique du benchmark [132]

V.2.2. Procédure de résolution avec l'UDF (ANN)

Pour valider l'UDF développée avec les réseaux de neurones et implémentée dans le code ANSYS-Fluent, on doit réaliser une étude comparative. Pour cela, le modèle Eulérien à répartition du flux pariétal (RPI) a été adopté, d'où le couplage de l'UDF(ANN) avec le modèle Eulérien-RPI d'une part et d'autre part le modèle Eulérien-RPI avec définition des propriétés de l'eau et de la vapeur par une interpolation linéaire en fonction de la température en deux points. A cet effet, on résume dans le tableau V.1 les valeurs des paramètres thermohydrauliques à savoir la pression de fonctionnement, le débit massique de l'écoulement, le flux de chaleur pariétal uniformément réparti le long de la paroi chauffante et la température de l'écoulement monophasique en entrée. Ces paramètres sont nécessaires pour le lancement du code *CFD*.

Tableau V.1 : Conditions thermohydrauliques

Paramètre*	**Valeur**
Rayon **r** de la conduite	7.7 mm
Pression **P**	4.5 MPa
Débit massique $\mathbf{G_{in}}$	900 kg/sm^2
Flux de chaleur **Q**	0.57 MW/m^2
Température à l'entrée $\mathbf{T_{in}}$	473.15 K
Sous saturation$\mathbf{\Delta T}$	58.2 K

* Conduite en Acier inoxydable et H_2O comme fluide caloporteur

Les propriétés thermophysiques de l'eau liquide sont résumées dans le tableau V.2 et celles de la vapeur à la température de saturation de 530.55K qui correspond à la pression de fonction de 4.5 MPa sont résumées dans le tableau V.3. Les propriétés de l'eau sont déterminées par un profil linéaire de température en deux points à T= 473.15 K et à T= 543.15 K obtenues à partir des tables thermodynamiques basées sur la formulation industrielle IAPWS-IF97. Dans le tableau V.4 on présente les propriétés de l'Acier inoxydable.

Tableau V.2 : Propriétés thermophysiques de l'eau liquide

		473.15 K	**543.15 K**
Propriété*	**Unité**	**Valeur**	**Valeur**
Densité	kg/m^3	864.7	770.6
Chaleur spécifique Cp	J/kg.K	4494	5067
Conductivité thermique λ	W/m.K	0.664	0.5928
Viscosité η	kg/m.s	$1.339e^{-04}$	$9.995e^{-05}$

* Eenthalpie à l'état standard de l'eau liquide est nulle, c'est à dire 0 J/kg.mol.

Tableau V.3 : Propriétés thermophysiques de la vapeur à 530.55 K

Propriété	**Unité**	**Valeur**
Densité	kg/m^3	23.75
Chaleur spécifique Cp	J/kg.K	4221
Conductivité thermique λ	W/m.K	0.0528
Viscosité η	kg/m.s	$1.79e^{-05}$
Masse moléculaire M	kg/kg.mol	18.0152
Tension interfaciale σ	N/m	0.02382
Enthalpie à l'état standard H	j/kg.mol	$2.992325e^{+7}$
Température de référence T_{ref}	K	298.15

Tableau V.4 : Propriétés thermophysiques de l'Acier inoxydable

Propriété	**Unité**	**Valeur**
Densité	kg/m^3	8030
Chaleur spécifique Cp	J/kg.K	502.48
Conductivité thermique λ	W/m.K	16.27

V.2.3. Indépendance de maillage

Pour l'adoption d'une discrétisation spatiale finale, une division du domaine de calcul est nécessaire, cette division de l'espace n'est encadrée par aucune règle particulière. Pour représenter parfaitement la physique réelle, qui est continue, un nombre infini de point de calcul serait idéal. Évidemment, des raisons pratiques obligent à utiliser un nombre fini d'éléments et leur nombre est souvent basé sur la puissance des processeurs disponibles, le temps disponible pour réaliser le calcul ou la précision recherchée. Toutefois, des résultats de calcul fiables doivent être indépendants de la discrétisation, c'est-à-dire qu'un raffinement du maillage ne doit pas altérer la physique calculée par le logiciel. L'indépendance de maillage n'annule par contre pas l'erreur implicite au critère de convergence, figure V.3.

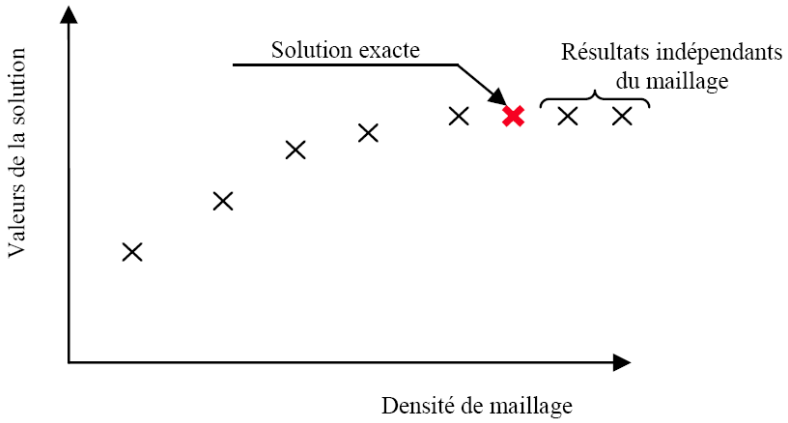


Fig.V.3 : Indépendance de la solution du maillage

La figure V.4 présente l'architecture arrêtée, écoulement monophasique suivi d'un écoulement diphasique, pour la résolution du *benchmark* considéré, en effet, une seule géométrie suffit, elle est conçu avec *DesignModeler*, logiciel inclus dans le package d'*ANSYS*.

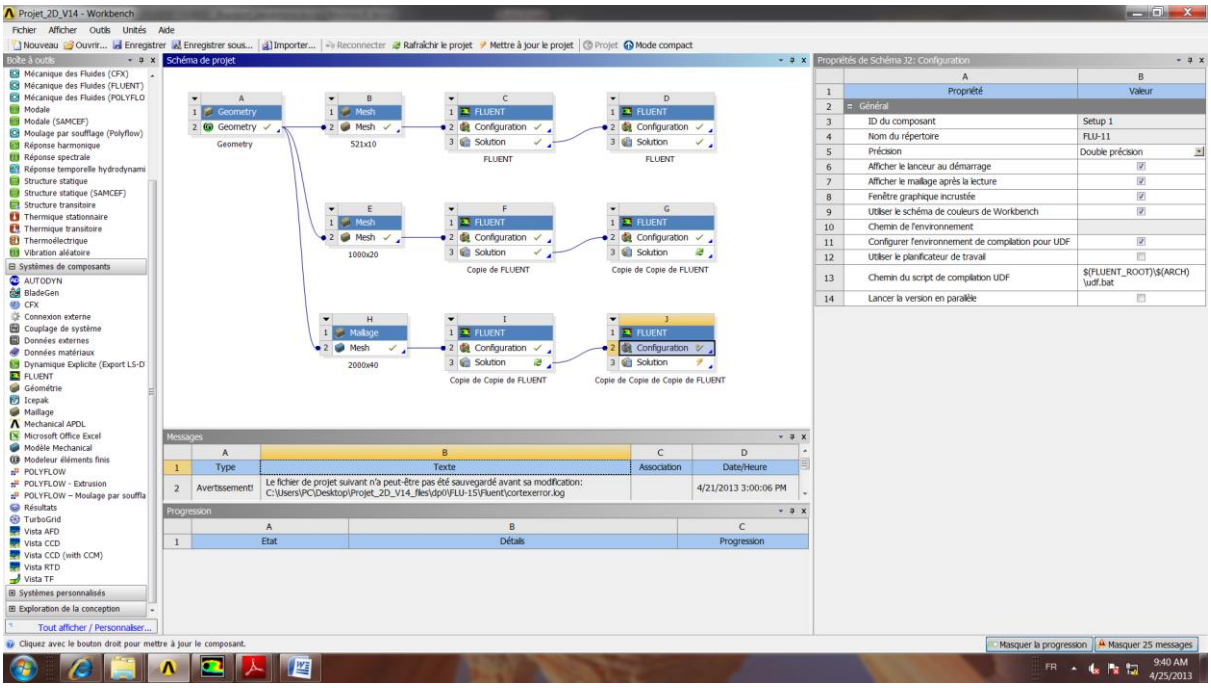


Fig.V.4 : Architecture proposée pour l'étude du benchmark

V.2.4. Validation du couplage UDF-RPI

L'objectif de ce paragraphe est la comparaison, par rapport aux données expérimentales de Bartolemei et Chanturiya et d'autres auteurs [135] [136] [137], de la modélisation de la nucléation pariétale de l'ébullition sous-saturée de la convection forcée à l'aide du modèle Eulérien sous le code ANSYS-Fluent version 14.5.0 disponible au niveau de la bibliothèque des codes du Centre de Recherche Nucléaire de Birine (CRNB).

Comme indiqué dans la figure V.4, on génère tout d'abord une solution pour un écoulement monophasique pour assurer le profil de la vitesse et les paramètres de la turbulence, entièrement développé à la sortie du canal, qui servent comme une entrée pour la simulation de l'ébullition

nucléée en diphasique avec le modèle Eulérien, une fois couplé avec l'UDF et une autre fois avec un profil linéaire de température en deux points à T= 473.15 K et à T= 543.15 K, pour la prédiction du taux de vide.

Le canal est caractérisé par une géométrie cylindrique, ce qui permet de réaliser un maillage bidimensionnel avec axe de symétrie au niveau de la ligne médiane de la conduite. C'est un axe de rotation utilisé pour simplifier la géométrie, donc on procède à la modélisation de la moitié de la géométrie.

Pour le maillage, le choix s'est arrêté sur le type structuré vu la simplicité de la géométrie afin de permettre l'économie en éléments de maillage et de réduire le risque d'erreur. Une fois on définit la géométrie et le maillage, maillage structuré, on crée les sélections nommées pour chaque arrête du canal. La figure V.5 représente le schéma de la géométrie avec les conditions aux limites les plus importantes utilisées pour un modèle d'écoulement turbulent à l'intérieur d'une conduite avec transfert de chaleur.

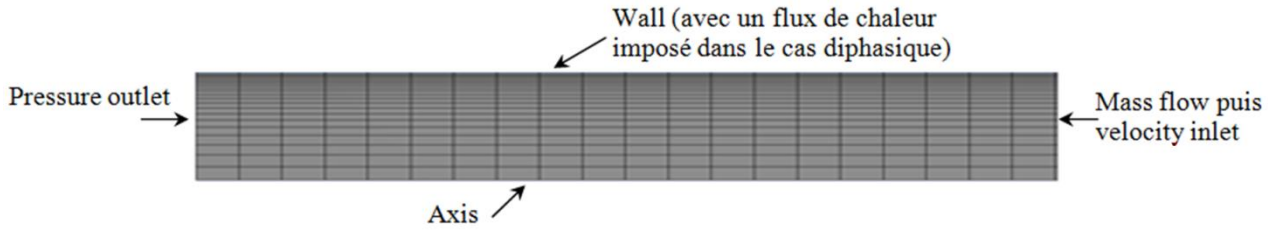


Fig.V.5 : Conditions aux limites du canal vertical

V.2.5. Résultats et discussion

Le modèle numérique adopté est à deux dimensions 2D axisymétrique avec quatre grilles de résolutions pour assurer l'indépendance de maillage. Le problème est traité comme étant un écoulement turbulent diphasique eau-vapeur dans une conduite cylindrique verticale à l'état stationnaire avec occurrence d'ébullition sur la surface chaude. D'une part, les propriétés thermophysiques de l'eau, phase liquide, variées avec la température selon la loi linéaire comme indiqué dans le tableau V.2, cependant que les propriétés thermophysiques de la phase vapeur sont celles de la saturation aux alentours de 530.55 K qui varie avec la pression du caloporteur résumées dans le tableau V.3 et d'autre par l'utilisation de l'UDF pour la prédiction de 10 propriétés thermophysiques de l'eau et de la vapeur en utilisant les réseaux de neurones.

Le premier résultat a considéré est l'indépendance du maillage de la fraction de la vapeur au cœur de l'écoulement le long de la conduite. En effet, les grilles de résolutions 1000x80, 1500x80 et 2000x100 sont pratiquement confondues comme indiqué dans la figure V.6, ce qui fait que les solutions des exécutions sont quasi identiques, de ce fait, on conclut que l'indépendance de maillage est atteinte, après plusieurs tentatives pour trouver les meilleures mailles de calcul, nous avons adopté la grille avec 1000 éléments uniformes axiaux et 80 éléments uniformes radiaux. La densité du maillage est plus fine dans la zone de contact (près de la paroi chauffée) afin de fournir une meilleure répartition des paramètres d'écoulement locales et de parvenir à une solution stable. Donc la grille de résolution de 1000x80 avec une densité de maillage fine près de la paroi chauffée, qui sera retenue comme solution exacte est tous les résultats ci-dessous se porteront à cette grille.

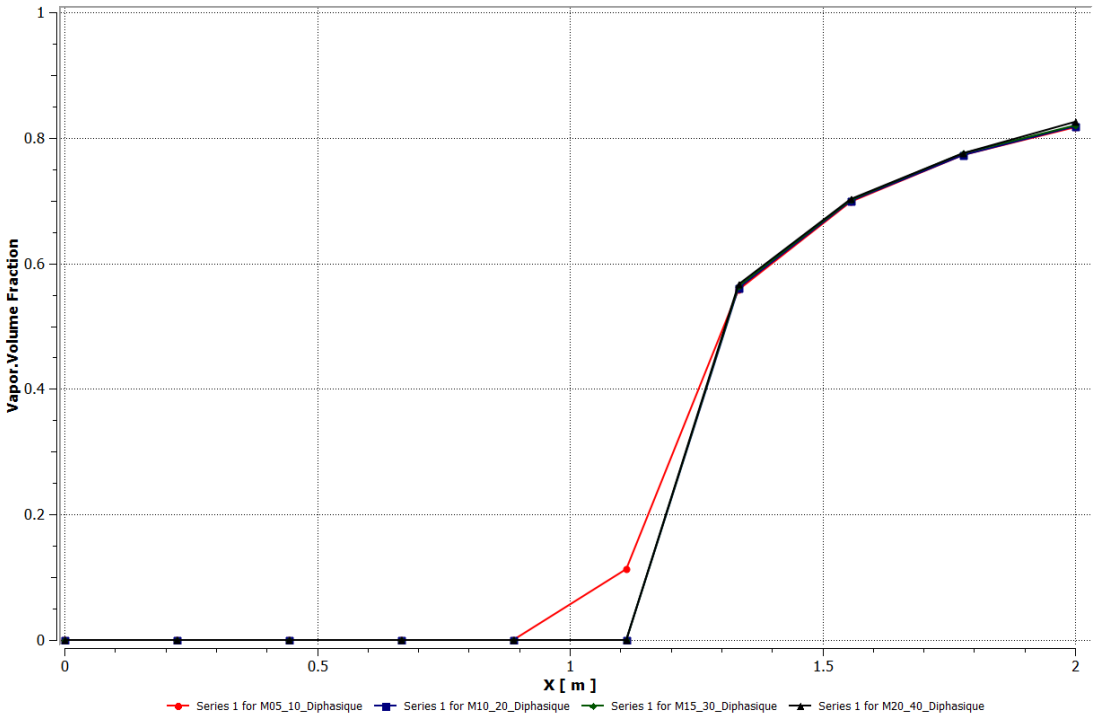


Fig.V.6 : Vérification de l'indépendance de maillage de la fraction de la vapeur le long de la conduite

Dans cette étude, nous avons utilisé le "RPI Boiling Model" du modèle multiphasique Eulérien couplé avec le modèle de turbulence RNG k-ε en combinaison avec "enhanced wall treatment" pour le traitement près de la paroi, la valeur de y^+=5 est considérée raisonnable par l'approche du traitement près de la paroi. Ces modèles sont généralement utilisés pour les écoulements diphasiques bouillants à bulles, ce choix est dicté par leur vaste utilisation dans la littérature et après plusieurs essais de convergence par combinaison de divers modèles multiphasiques et ceux de la turbulence à savoir, en plus des deux premiers, le modèle VOF et MIXTURE pour le multiphasique et SST k-ω pour la turbulence. Le tableau V.5 présente les paramètres de l'entrée (Inputs) du modèle arrêté pour l'étude du benchmark.

Tableau V.5 : Inputs du modèle ébullition sous-saturée sous ANSYS-Fluent R14.5

Input	**Value**
Geometry	
Pipe Diameter	15.4 mm
Pipe Length	2 m
Material	Stainless steel
2D Space	Axisymmetric
Solver	
Time	Steady
Type	Pressure Based
Velocity Formulation	Absolute
Gravity	-9.81 m/s^2 (X-direction)
Models	
Energy	Active
Multiphase	Eulerian

Parameters	Boiling
Options	RPI
Scheme	Implicit
Viscous	RNG k-ε
Near Wall Treatment	Enhanced
Turbulence	Mixture
Phase Interaction	
Drag	Ishii
Lift	Moraga
Turbulent Dispersion	Lopez-De-Bertodano
Turbulent Interaction	Troshko-Hassan
Heat Transfer	Ranz-Marshall
Mass Transfer	Boiling
Bubble Departure Diameter	Tolubinski-Kostanchuk
Frequency of Bubble Departure	Cole
Nucleation Site Density	Lemmert-Chawla
Area Influence Coeff.	Devalle-Kenning
Interfacial Area	ia-symmetric
Bubble Diameter	Sauter-Mean
Initial Conditions	
Mass Flux	900 kg/sm^2
Inlet Liquid Temperature	473.15 K
Wall Heat Flux	570 kW/m^2
Pressure	4.5 MPa
Material Properties	
Fluid	
Water	Tableau V.2 (UDF)
Vapor	Tableau V.3 (UDF)
Solid	
Stainless-Steel	Tableau V.4 (UDF)
Solution Methods	
Scheme	Coupled, Coupled with Volume Fractions
Gradient	Least Square Cell Based
Momentum	First Order Upwind
Volume Fraction	First Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	First Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	First Order Upwind
Energy	First Order Upwind

Pour les écoulements diphasiques, le tracé du résiduel de la simulation, figure V.7, ne suffit pas pour la confirmation de la convergence de la solution vu les paliers trompeurs, d'où il faut pousser la convergence avec d'autres indicateurs de convergence comme le bilan de masse entre l'entrée et sortie de la conduite, figure V.8, et la fraction moyenne de la vapeur à la sortie de la conduite, figure V.9.

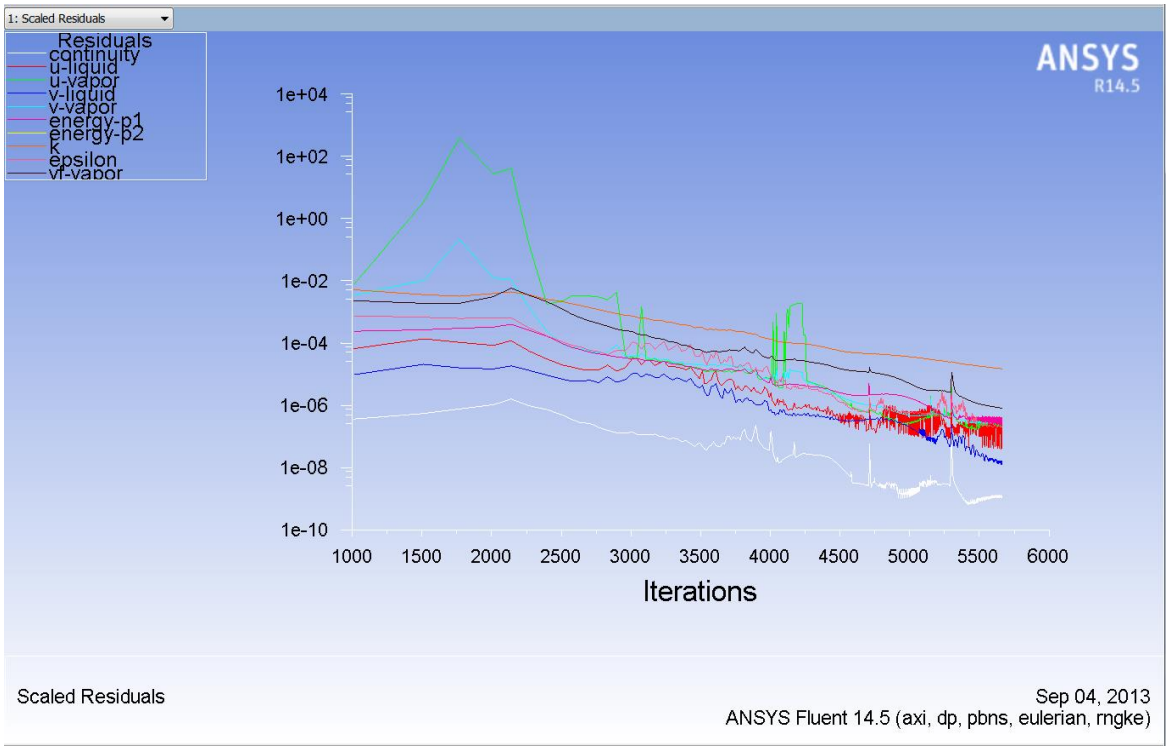


Fig.V.7 : Résiduel de la simulation de l'ébullition

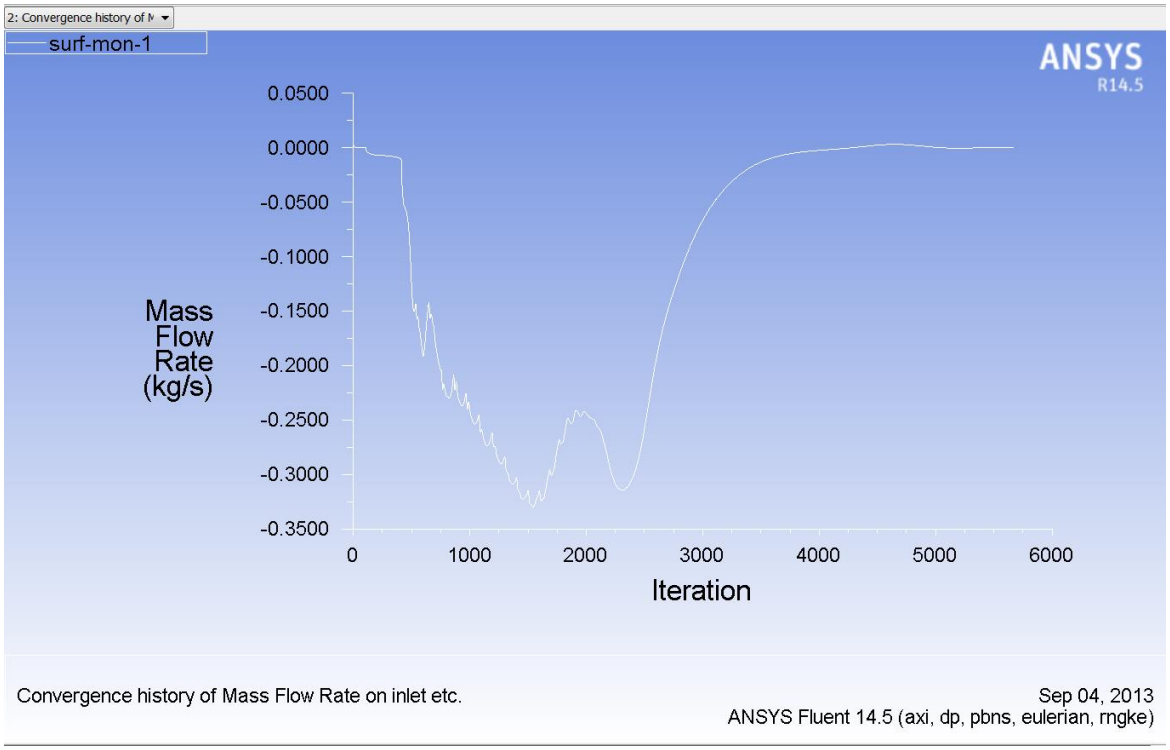


Fig.V.8 : Historique de la convergence du bilan de masse

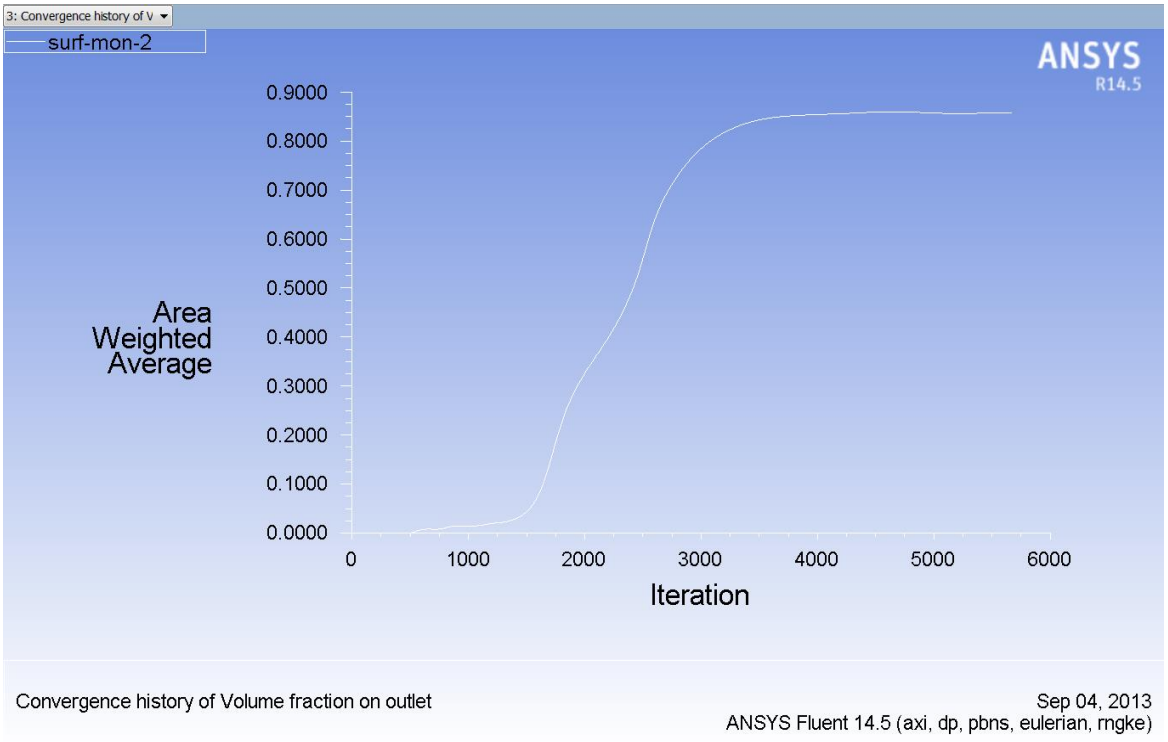


Fig.V.9 : Historique de la convergence de la fraction moyenne de la vapeur à la sortie de la conduite

Après confirmation de la convergence de la solution et vérification de l'indépendance de maillage avec la grille de résolution 1000x80, on passe à la discussion des résultats par l'étude des graphes des différents profils.

Pour valider l'UDF développée couplée avec le modèle à répartition du flux pariétal (RPI), une comparaison a été effectuée entre le modèle RPI (profil linéaire de température) avec le modèle couplé RPI+UDF et les données expérimentales de Bartolomei et Chanturiya pour un tube vertical chauffé sous une pression de 4.5MPa [135]. La figure V.10(a) montre que le profil axial de la fraction de la vapeur le long de la conduite chauffée du modèle proposé UDF+RPI est en bon accord avec les données expérimentales [135]. Idem pour le profil de température du liquide le long du tube. La figure V.10(b) montre que le profil axial de la température du liquide du modèle proposé UDF+RPI est en bon accord avec le profil axial de la température du liquide mesurée expérimentalement. Une comparaison des prédictions avec les données expérimentales est démontrée.

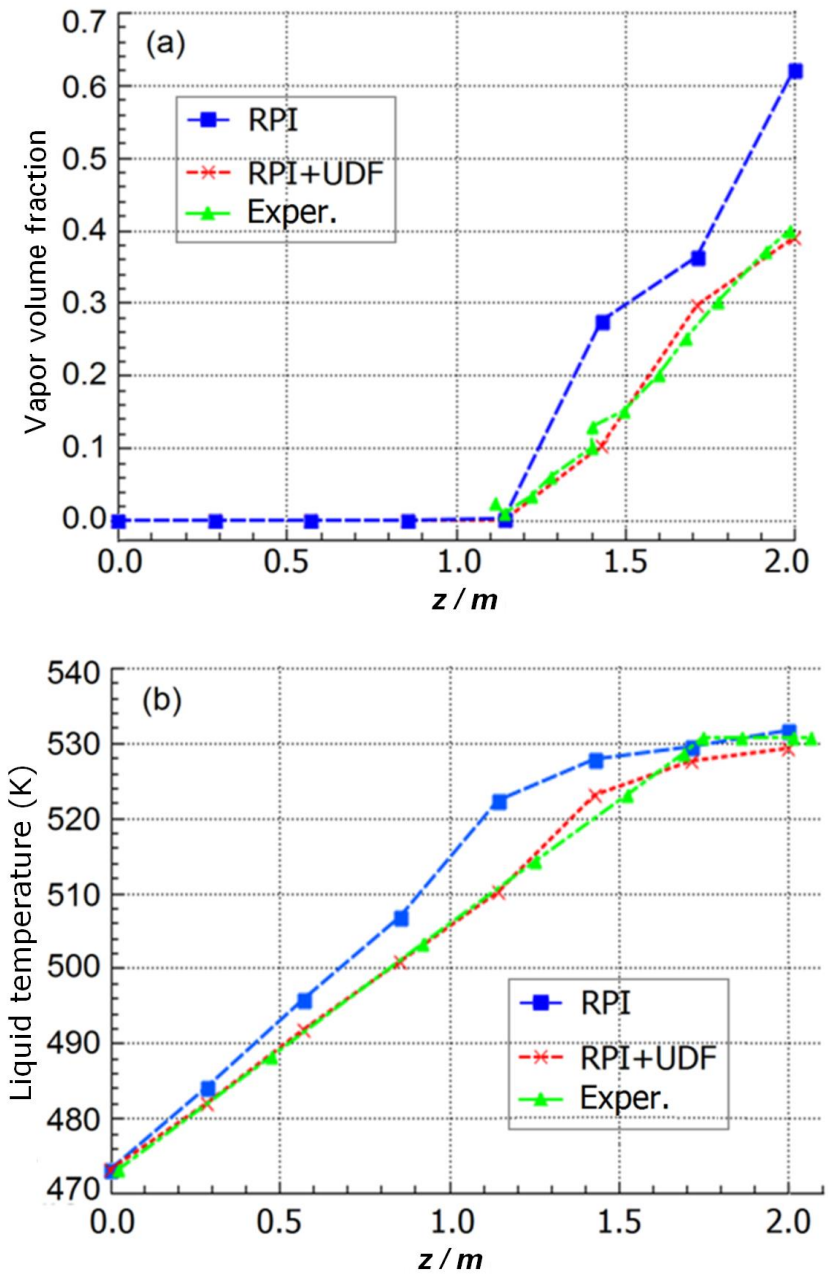


Fig.V.10 : Comparaisons de profil axial de la fraction volumique de la vapeur (a) et le profil axial de la température du liquide (b)

Lorsque l'eau sous forme liquide sous-refroidie passe à travers une surface chaude dans n'importe quel système, la distribution de la température adjacente à la tranche chaude provoque une possible initiation du processus d'ébullition sous refroidie. Comme l'indique la figure V.10, où l'ébullition sous refroidie continue en aval de l'écoulement mais sans que la fraction de la vapeur n'augmente significativement du fait d'un sous-refroidissement élevé. A la sortie de la conduite on remarque l'augmentation rapide du taux de vide par suite d'un léger sous-refroidissement du liquide.

Les bulles de vapeur n'apparaissent pas sur la paroi dès que sa température T_w atteint la température de saturation T_{sat}. Il faut, en effet, que la surchauffe T_w-T_{sat} de la paroi atteigne une certaine valeur liée à la tension interfaciale σ entre le liquide et la vapeur et le diamètre de décollage des bulles. Dans notre cas et d'après la figure V.10, on remarque qu'à l'élévation 1.1 m,

au niveau de la paroi chaude, que l'ébullition sous saturée débute ou "Onset of Nucleate Boiling (ONB)" et qu'à 1.45 m que l'ébullition sous saturée développée débute, appelé point d'apparition significative de vapeur "Onset of Signficant Void (OSV)". Théoriquement la courbe de la variation du taux de vide a été divisée en deux régions figure V.11 :

- Région faiblement sous- saturée (Detached Voidage) : Dans cette région, le taux de vide augmente rapidement quand la sous saturation décroît. Les bulles peuvent avoir le temps de migrer au sein de l'écoulement avant de se condenser,

- Région fortement sous- saturée (Wall Voidage) : Dans cette région, la température du liquide près de la paroi est suffisamment élevée pour permettre la formation de petites bulles de vapeur. Ces bulles se condensent plus rapidement alors qu'elles restent attachées à la paroi, ou elles se glissent sur la paroi du tube.

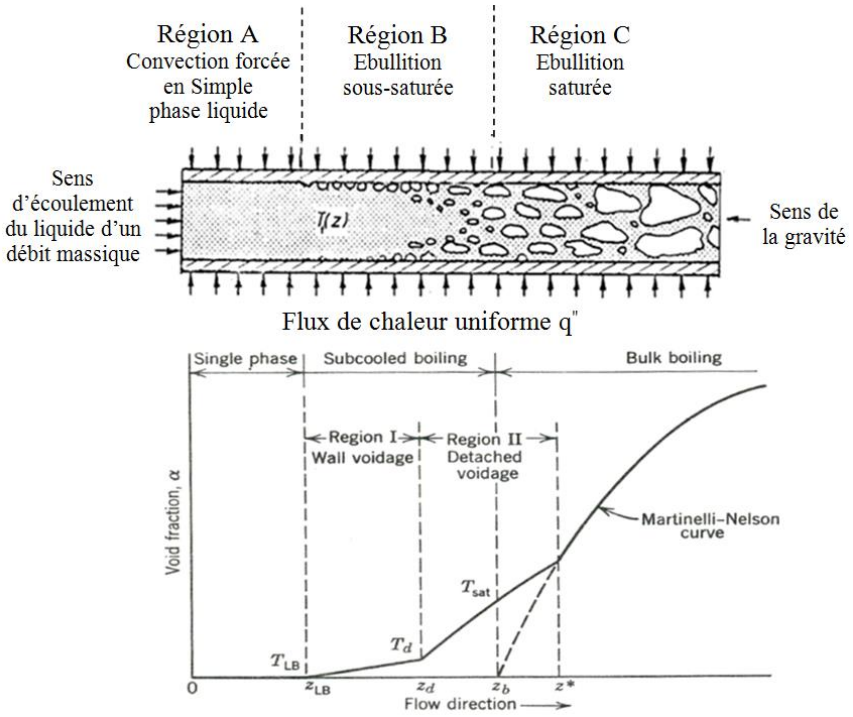


Fig.V.11 : Taux de vide pour différents régimes de l'ébullition sous saturée [138]

Lorsque la densité du flux de chaleur augmente, la vapeur apparaît de plus en plus près de l'entrée de la section chauffante. On désigne par zone d'ébullition sous saturée, région B de la figure V.11, la région où les bulles se forment à la paroi et se recondensent au centre du canal, là où le liquide n'a pas encore atteint la température de saturation. La vapeur est produite par deux mécanismes qui sont la nucléation à la paroi et la vaporisation directe sur les interfaces liquide-vapeur situées au sein de l'écoulement. Ce dernier mécanisme devient de plus en plus important lorsqu'on s'élève dans le canal, il y a de moins en moins de liquide entre la paroi et les interfaces, qui restent à la température de saturation.

Parallèlement aux travaux consacrés aux profils axiaux de la fraction de la vapeur et de la température du liquide, la distribution radiale aux différents emplacements axiaux le long du tube a été évaluée. La figure V.12 montre les profils radiaux de la fraction de la vapeur et de la température du liquide à 5 endroits le long du tube du modèle proposé, à savoir le couplage de l'UDF avec le modèle à répartition du flux pariétal (RPI) [139]. Selon la figure V.12(a),

l'ébullition est concentrée près de la paroi chauffée pour le régime d'écoulement considéré dans le benchmark. On voit que la fraction de la vapeur est sensiblement plus élevée près de la paroi et diminue vers le centre. Les profils radiaux de la température aux 5 endroits sont indiqués sur la figure V.12(b). Le non-équilibre thermique est évident. Il ya de grandes différences de température entre le centre et la paroi du tube à z = 1.1 m, où la production des bulles commence près de la paroi tandis que la température au centre est inférieure à la température de saturation. Les conditions du non-équilibre diminuent le long de la conduite et la distribution uniforme radiale de la température est atteinte autour de z=1.7 m.

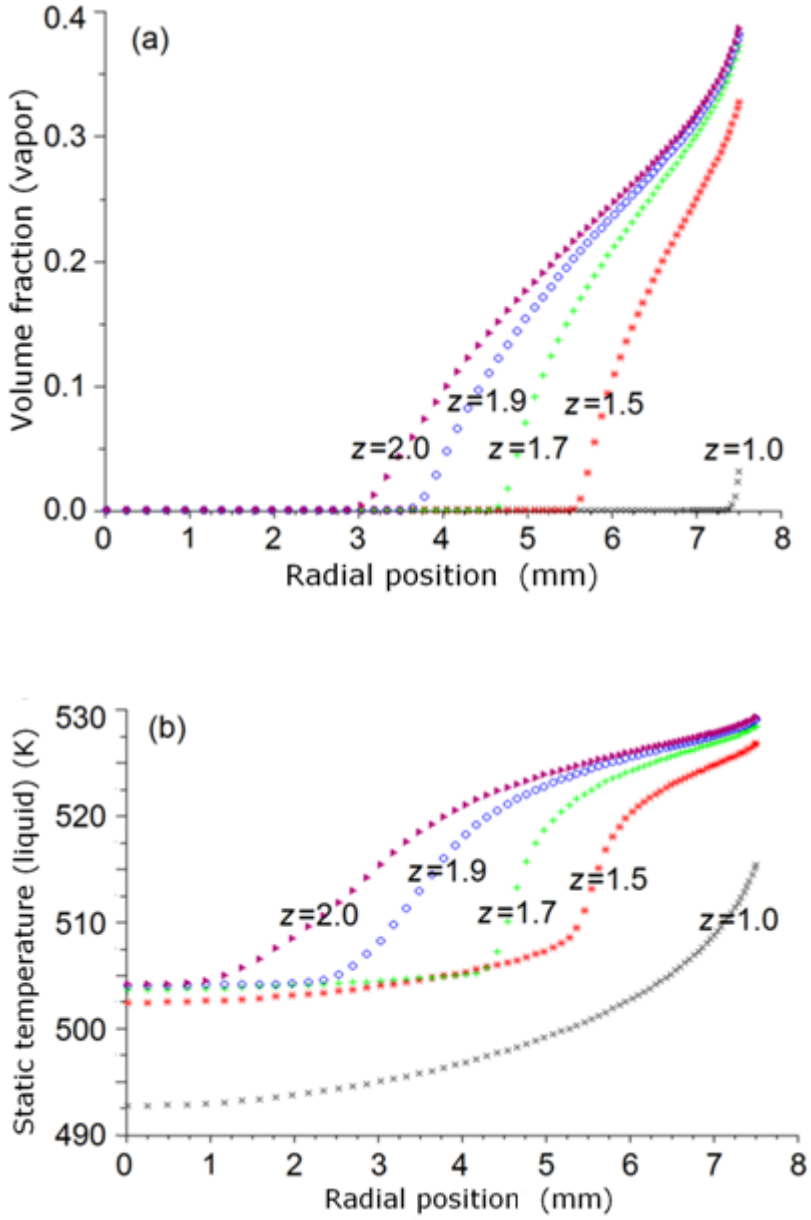


Fig.V.12 : Profils radiaux de la fraction de vapeur (a) et de la température du liquide (b) aux 5 endroits le long de la conduite

En conséquence de la comparaison de la présente étude, il est clair que le modèle proposé, couplage de l'UDF (basé sur les réseaux de neurones artificiels) avec le modèle à répartition du flux pariétal (RPI) est raisonnable. Ceci démontre la forte non-linéarité de la forme des propriétés thermophysiques de l'eau et de la vapeur entre les deux points de température 473,15 K et 543,15 K qui nécessite souvent des interpolations polynomiales pour définir la solution dépendante des

propriétés des matériaux, ce qui fait la différence entre les deux modèles (RPI+ profil linéaire de température et RPI+UDF) par rapport aux données expérimentales de Bartolomei et Chanturiya comme illustré dans la figure V.10.

V.3. Etude de l'ébullition sous-refroidie dans un canal vertical avec transfert de chaleur conjugué (Benchmark2)

Les transferts de chaleur conjugués interviennent lors de processus tels que les écoulements à travers les sous-canaux. L'étude de ces problèmes, largement rencontrés dans l'industrie nucléaire, peut nécessiter l'utilisation d'un outil numérique capable de prédire l'évolution spatio-temporelle du champ de température et du taux de vide avec une certaine précision. Dans le nucléaire par exemple, la réduction des marges d'erreurs pour la conception des cœurs engendre une amélioration des performances. Les principales difficultés liées aux méthodes de couplage résident dans les disparités des temps caractéristiques entre le fluide et le solide ainsi que le traitement spécial que nécessitent leurs interfaces. La figure V.13 schématise les phénomènes présents dans l'ébullition, depuis le fluide jusqu'à la paroi chauffante.

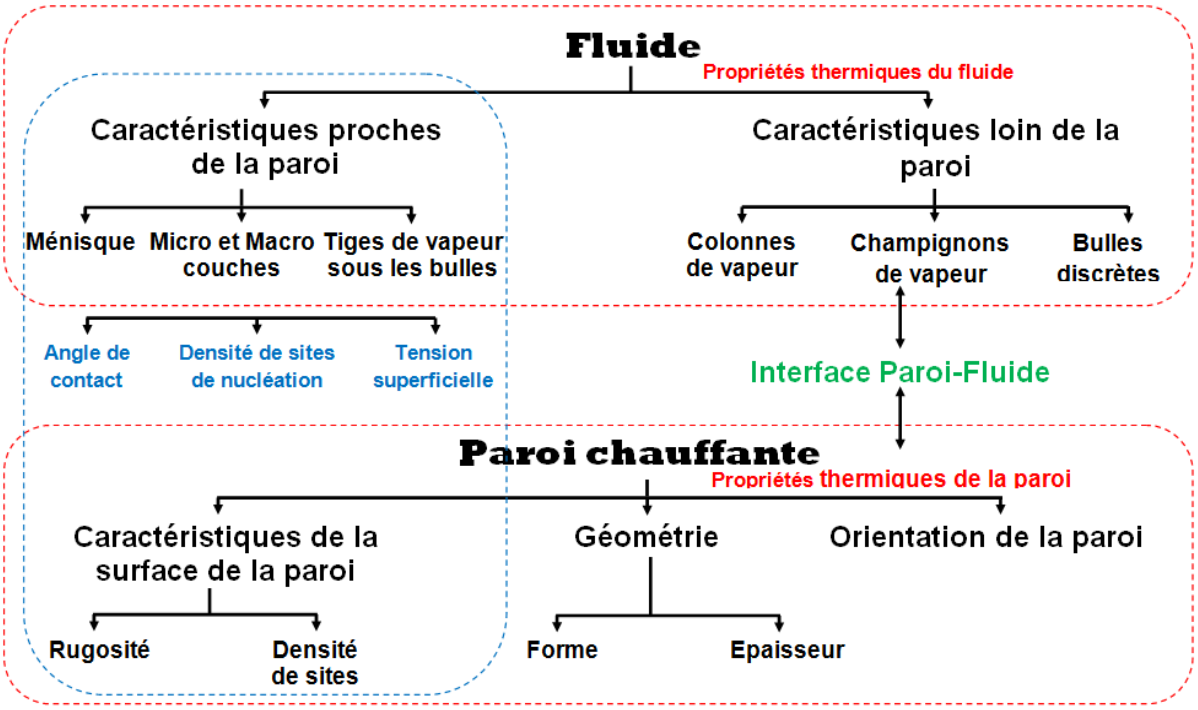


Fig.V.13 : Processus présents dans l'ébullition dans un transfert de chaleur conjugué [140]

Les écoulements bouillants sous-saturés est une forme très efficace de transfert de chaleur qui est décrite comme ayant des taux de transfert de chaleur élevée avec de faibles surchauffes pariétales. Cette forme de transfert de chaleur est essentielle pour les applications de refroidissement nécessitant des taux de transfert de chaleur élevés, comme les réacteurs nucléaires et les chaudières à combustibles fossiles. La figure V.11 montre les différents régimes d'ébullition en fonction de la fraction de vide.

Si le flux de chaleur d'une paroi chauffée est progressivement augmentée pour un ensemble de conditions initiales, un point, connu comme le début de l'ébullition nucléée, sera atteint où le

passage de la convection monophasique à l'écoulement bouillant sous-saturé se produit. Au cours de l'ébullition nucléée, les taux de transfert de chaleur augmentent considérablement en raison de la formation de bulles à la surface chauffée. Comme le taux de génération des bulles augmente, la chaleur transportée par des bulles devient la partie la plus importante de l'énergie totale transférée. Si le flux de chaleur pariétal peut augmenter d'avantage, le passage d'un écoulement bouillant sous-saturé à un écoulement bouillant saturé se produit lorsque la température du cœur du fluide atteint le point de saturation. Bien que l'écoulement en ébullition saturée soit une forme importante du transfert de chaleur, le sujet principal de notre étude est l'écoulement bouillant sous-saturé.

V.3.1. Description du benchmark

On peut rencontrer plusieurs configurations d'écoulement dans un tube vertical chauffé uniformément par un flux thermique. Ces configurations sont basées sur la répartition spatiale et la quantité de vapeur présente dans l'écoulement qui évolue en fonction des grandeurs thermohydrauliques de l'écoulement et thermiques à la paroi. Le tube est alimenté en liquide sous-saturé à l'entrée et est de longueur suffisante pour autoriser un écoulement en vapeur en sortie.

Le benchmark de référence proposé, comme indiqué dans la figure V.14, expérimentalement étudiée par Bartolemei et Chanturiya [136], il s'agit de l'évolution d'un écoulement liquide vapeur avec apport de chaleur à la paroi. Le liquide entre en bas de la conduite cylindrique verticale à débit massique constant de G_{in} = 0.161 Kg/s et à une température de 473.15 K inférieure à la température de saturation de 58.2 K. La géométrie adoptée est bidimensionnelle, la longueur du canal est Z = 2 m, son diamètre est D = 15.4 mm et l'épaisseur du conduit en Acier est e = 5 mm. On impose un flux de chaleur uniformément réparti à la paroi de la conduite de Q_w = 0.3456 MW/m^2 sur toute la longueur du canal.

Les données expérimentales disponibles comprennent les températures le long de la paroi et de l'axe du tube, la température moyenne de liquide et la fraction moyenne du volume de la vapeur de la section transversale le long du tube. L'ébullition de la paroi correspond au régime de l'ébullition nucléée [138] [136] [137] [76].

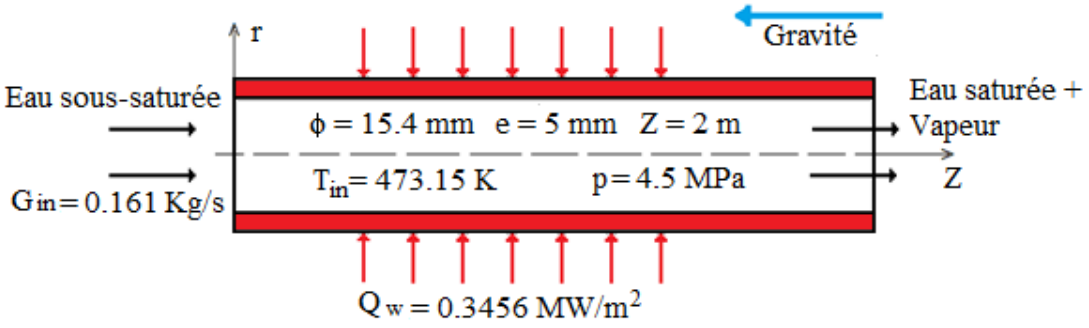


Fig.V.14 : Schéma synoptique du benchmark

Le tableau V.6 présente les valeurs des paramètres thermohydrauliques à savoir la pression imposé, le débit massique de l'écoulement, le flux de chaleur pariétal uniformément réparti le long de la paroi chauffante et la température de l'écoulement monophasique en entrée. Ces paramètres sont nécessaires pour le lancement du code *CFD*.

Tableau V.6 : Conditions thermohydrauliques

Paramètre*	Valeur
Rayon **r** de la conduite	7.7 mm
Epaisseur **e** de la conduite	5 mm
Pression **P**	4.5 MPa
Débit massique $\mathbf{G_{in}}$	0.161 Kg/s
Flux de chaleur **Q**	0.3456 MW/m^2
Température à l'entrée $\mathbf{T_{in}}$	473.15 K
Sous saturation$\mathbf{\Delta T}$	58.2 K

* Conduite en Acier inoxydable et H_2O comme fluide caloporteur

Du fait que le caloporteur du 2ème benchmark est de l'eau légère aux mêmes conditions de température et de pression que le 1er benchmark, donc les propriétés thermophysiques de l'eau et de la vapeur ne changent pas. Ainsi, les propriétés thermophysiques de l'eau liquide sont résumées dans le tableau V.2 et celles de la vapeur à la température de saturation de 530.55K qui correspond à la pression de fonction de 4.5 MPa sont résumées dans le tableau V.3. Les propriétés de l'eau sont déterminées par un profil linéaire de température en deux points à T= 473.15 K et à T= 543.15 K obtenues à partir des tables thermodynamiques basées sur la formulation industrielle IAPWS-IF97. Dans le tableau V.4 sont présentées les propriétés de l'Acier inoxydable.

V.3.2. Maillage et conditions aux limites

Le canal est caractérisé par une géométrie cylindrique creuse, ce qui permet de réaliser un maillage bidimensionnel axisymétrique au niveau de la ligne médiane de la conduite. Comme la formulation du problème est axisymétrique, le domaine simulé est seulement une tranche 2-D avec une largeur égale au rayon du tube plus l'épaisseur. L'axe de symétrie est utilisé pour simplifier la géométrie, donc on procède à la modélisation de la moitié de la géométrie, cette division est subdivisée en 2 blocs (épaisseur de la conduite et le rayon du passage du fluide) ce qui permet de définir le maillage pour chacun d´entre eux. Pour le maillage, Le manuel du solveur ANSYS Fluent recommande l'utilisation d'un maillage de calcul quadrilatère pour le modèle Eulérien multiphasique, c'est un maillage structuré vu la simplicité de la géométrie afin de permettre l'économie en éléments de maillage et de réduire le risque d'erreur [16].

La figure V.15 illustre la discrétisation spatiale finale adoptée, après plusieurs tentatives (indépendance de maillage), pour la division du domaine de calcul, dans la direction axiale 1000 pour le domaine fluide et 1000 pour le domaine solide et dans la direction radiale 30 pour le domaine fluide et 5 pour le domaine solide. Une densité de maille plus fine dans la zone de contact (près de la paroi chauffée) afin de fournir une meilleure répartition des paramètres de l'écoulement locale et de parvenir à une solution stable.

La figure V.15 représente le schéma de la géométrie avec les conditions aux limites de la division du domaine de calcul les plus importantes utilisées pour un modèle d'écoulement turbulent à l'intérieur d'une conduite avec transfert de chaleur conjugué.

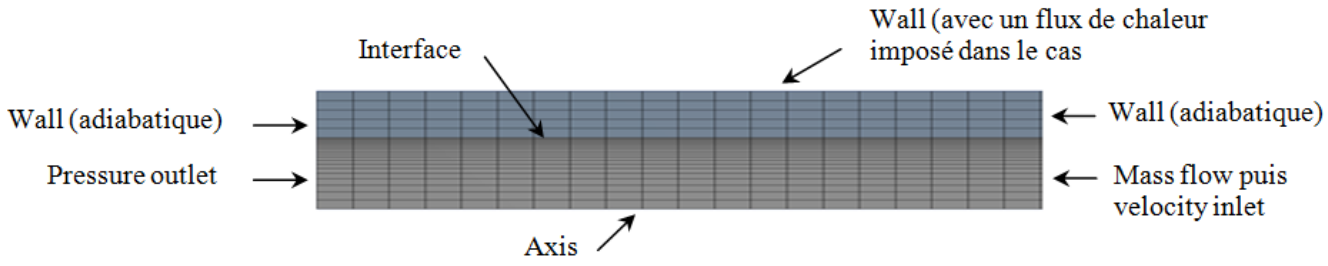


Fig.V.15 : Maillage adopté et conditions aux limites du benchmark en 2D

Toujours, comme le 1er benchmark et selon l'architecture arrêtée (figure V.4), on génère tout d'abord une solution pour un écoulement monophasique pour assurer le profil de la vitesse et les paramètres de la turbulence, entièrement développés à la sortie du canal, comme une entrée pour la simulation en diphasique.

Comme indiquer dans les paragraphes précédents, pour les écoulements diphasiques, le tracé du résiduel de la simulation ne suffit pas pour la confirmation de la convergence de la solution, donc on doit suivre la convergence avec d'autres indicateurs comme le bilan de masse entre l'entrée et sortie de la conduite et la fraction moyenne de la vapeur à la sortie de la conduite.

V.3.3. Modèle mathématique

En écoulement multiphasique par l'approche Euler-Euler, les phases sont supposées être en interpénétration continue. L'une des phases est définie comme étant continue et l'autre comme dispersée. Les vecteurs de pression et de gravité sont partagés par les deux phases, tandis que d'autres variables sont en phase spécifique. Le seul changement notable à la solution de la première phase est la présence de forces interfaciales.

Ce modèle est le plus général et le plus complexe parmi tous les modèles des écoulements multiphasiques. Chaque phase est supposée former un milieu continu. Son mouvement est simulé avec son propre système d'équations de Navier-Stokes, équation de continuité et l'équation de l'énergie. Selon ce modèle, les équations écrites pour chaque phase sont résolues conjointement. A des valeurs élevées de α_g, seul le modèle eulérien est utilisé pour la simulation adéquate de ces écoulements.

Pour l'équation de l'énergie dans la région solide, Fluent permet de créer des régions solides dans lesquelles les équations de transfert de chaleur sont résolues, mais sans débit. Ceci est connu comme le transfert de chaleur conjugué et les régions solides sont connues comme des domaines solides.

Dans les domaines solides, l'équation de conservation de l'énergie peut représenter le transport de chaleur due au mouvement solide, la conduction et les sources de chaleur volumiques, équation V.1.

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla.(\rho \vec{u}_s h) = \nabla.(\lambda \nabla T) + S_e \qquad \text{(V.1)}$$

où h, ρ, λ et S_e sont respectivement l'enthalpie, la densité, la conductivité thermique du solide et la source de chaleur volumique en option. Le terme ayant la vitesse du solide $\vec{u}_s$ est facultatif, il représente le mouvement du solide par rapport au plan de référence.

Pour la région fluide, les équations de continuité, de la quantité de mouvement et de l'énergie ainsi que le modèle de la turbulence sont décrits dans le chapitre III et le modèle d'ébullition pariétal RPI est décrit dans le chapitre II.

V.3.4. Procédure de résolution avec l'UDF (IAPWS)

Pour valider l'UDF développée avec IAPWS et implémentée dans le code ANSYS-Fluent, on doit réaliser une étude comparative. Pour cela, le modèle Eulérien à répartition du flux pariétal (RPI) a été adopté, d'où le couplage de l'UDF avec le modèle Eulérien-RPI d'une part et d'autre part le modèle Eulérien-RPI avec définition des propriétés de l'eau et de la vapeur par une interpolation linéaire en fonction de la température en deux points.

Le modèle numérique adopté est à deux dimensions 2D axisymétrique i.e. la moitié du canal. Le problème est traité comme étant un écoulement turbulent diphasique eau-vapeur dans une conduite cylindrique verticale à l'état stationnaire avec occurrence d'ébullition sur la surface chaude et avec un transfert de chaleur conjugué. Comme indiqué en haut, on génère tout d'abord une solution pour un écoulement monophasique pour assurer le profil de la vitesse et les paramètres de la turbulence, entièrement développé à la sortie du canal, comme une entrée pour la simulation de l'ébullition nucléée en diphasique avec le modèle Eulérien pour la prédiction du taux de vide.

Dans cette étude, nous avons utilisé le "RPI Boiling Model" du modèle multiphasique Eulérien couplé avec le modèle RNG k-ε pour la turbulence. Ce couplage de modèles est utilisé généralement pour les écoulements diphasiques bouillants à bulles, ce choix est dicté par leur vaste utilisation dans la littérature. Les propriétés thermophysiques de l'eau étant déterminées selon la loi linéaire du solveur ANSYS Fluent entre deux points 473.15 K et 543.15 K et celles de la vapeur sont déterminées à la température de saturation qui est aux alentours de 530.55 K.

V.3.5. Résultats

La figure V.16 montre l'évolution de la vapeur au mur chaud le long de la conduite. Lorsque l'eau sous forme liquide sous-refroidie passe à travers une surface chaude dans n'importe quel système, la distribution de la température adjacente à la tranche chaude provoque une possible initiation du processus d'ébullition sous refroidie. Comme l'indique la figure V.16, l'ébullition sous refroidie continue en aval de l'écoulement mais sans que la fraction de la vapeur n'augmente significativement du fait d'un sous-refroidissement élevé. A la sortie de la conduite on remarque l'augmentation rapide du taux de vide par suite d'un léger sous-refroidissement du liquide.

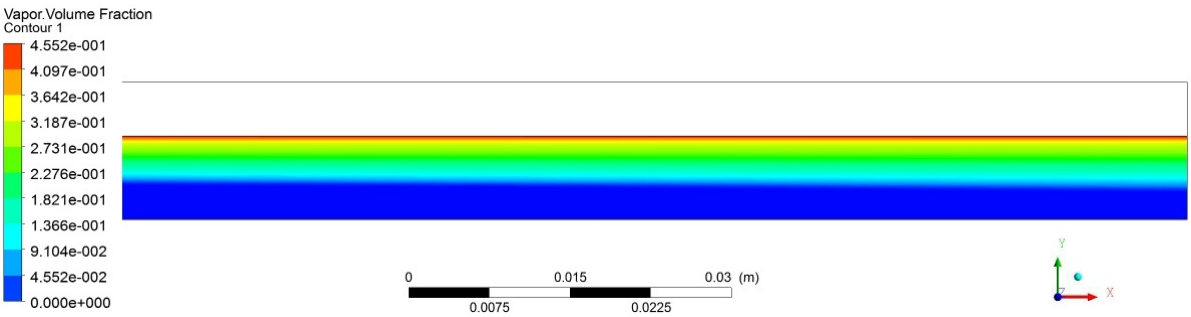


Fig.V.16 : Distribution de la fraction de vapeur à la sortie du canal

Les bulles de vapeur n'apparaissent pas sur la paroi dès que sa température T_w atteint la température de saturation T_{sat}. Il faut, en effet, que la surchauffe T_w-T_{sat} de la paroi atteigne une

certaine valeur liée à la tension interfaciale σ entre le liquide et la vapeur et le diamètre de décollage des bulles. Dans notre cas et d'après la figure V.17, on remarque qu'à l'élévation 0.6 m, au niveau de la paroi chaude, que l'ébullition sous saturée débute ou (ONB pour Onset of Nucleate Boiling en Anglais).

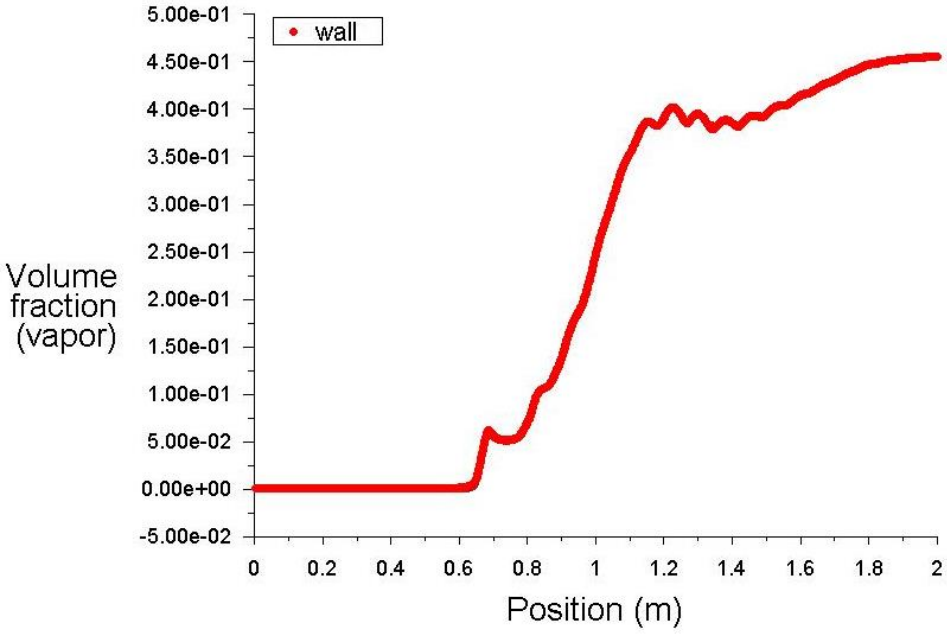


Fig.V.17 : Profil axial de la fraction de la vapeur

Lorsque la densité du flux de chaleur augmente, la vapeur apparaît de plus en plus près de l'entrée de la section chauffante. On désigne par zone d'ébullition sous saturée, la région où les bulles se forment à la paroi et se recondensent au centre du canal, là où le liquide n'a pas encore atteint la température de saturation. La vapeur est produite par deux mécanismes qui sont la nucléation à la paroi et la vaporisation directe sur les interfaces liquide-vapeur situées au sein de l'écoulement. Ce dernier mécanisme devient de plus en plus important lorsqu'on s'élève dans le canal, il y a de moins en moins de liquide entre la paroi et les interfaces, qui restent à la température de saturation.

Une étude comparative est réalisée pour la validation de l'UDF (IAPWS) développée avec la formulation internationale IAPWS couplée avec le modèle RPI et le modèle RPI avec la fonction linéaire du solveur ANSYS Fluent pour la détermination des propriétés thermophysiques de l'eau entre deux points 473,15 K et 543,15 K confrontées aux données expérimentales de Bartolomei et Chanturiya pour un tube vertical chauffé à 4.5MPa [136]. La figure V.18 montre que la distribution axiale de la fraction de la vapeur UDF-RPI proposée est en bon accord avec les données expérimentales. Idem pour le profil de température du liquide le long du tube. La figure V.19 montre que la distribution axiale de la température du liquide du modèle UDF-RPI est en bon accord avec celles mesurées expérimentalement. Une comparaison des prédictions avec les données expérimentales est démontrée.

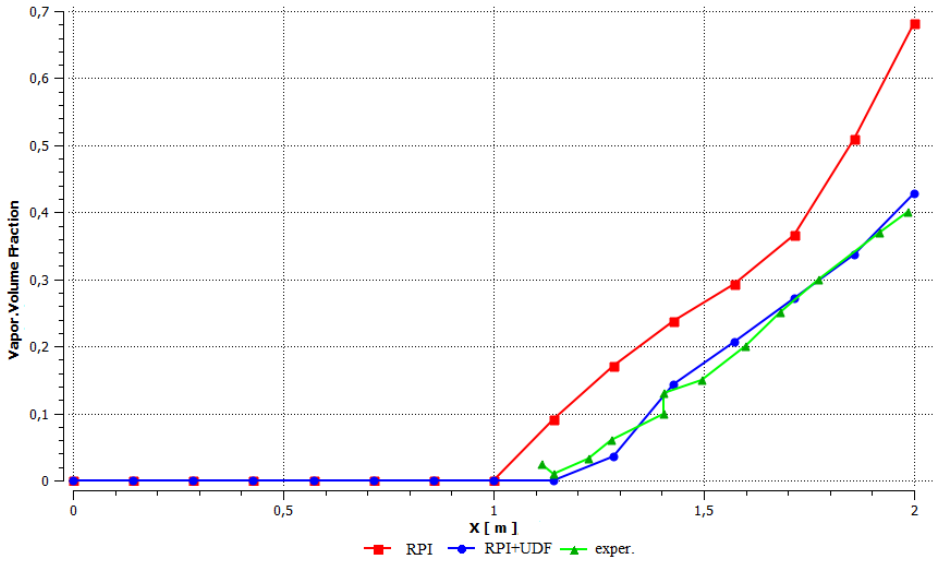


Fig.V.18 : Comparaison du profil axial de la fraction de la vapeur

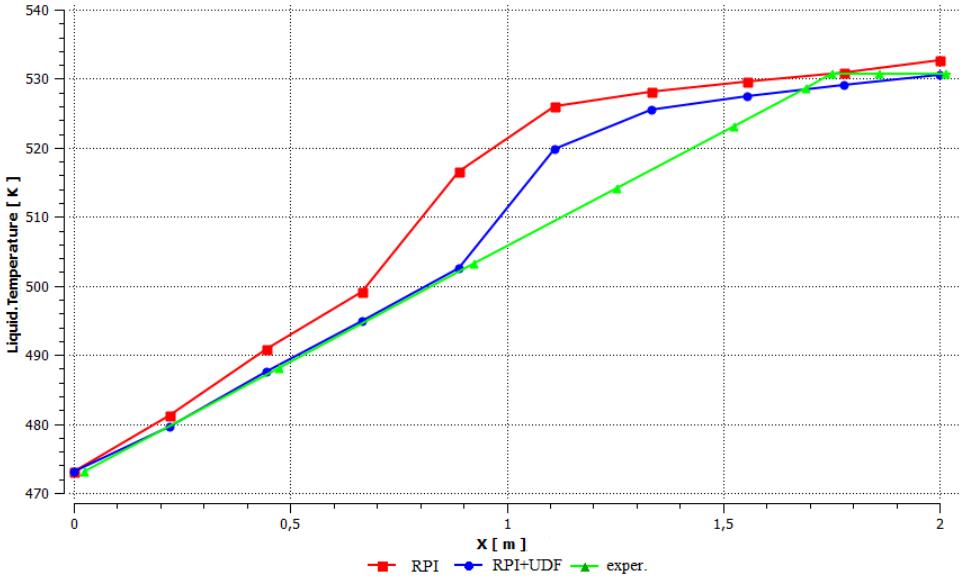


Fig.V.19 : Comparaison du profil axial de la température du liquide

La figure V.20 montre les profils radiaux de la fraction de la vapeur et de la température du liquide à six endroits axiaux le long du tube [139]. Comme indiqué sur la figure V.20, l'ébullition est concentrée près de la paroi chauffée pour le régime d'écoulement considéré. On voit que la fraction de la vapeur est sensiblement plus élevée près de la paroi et diminue en allant vers le centre.

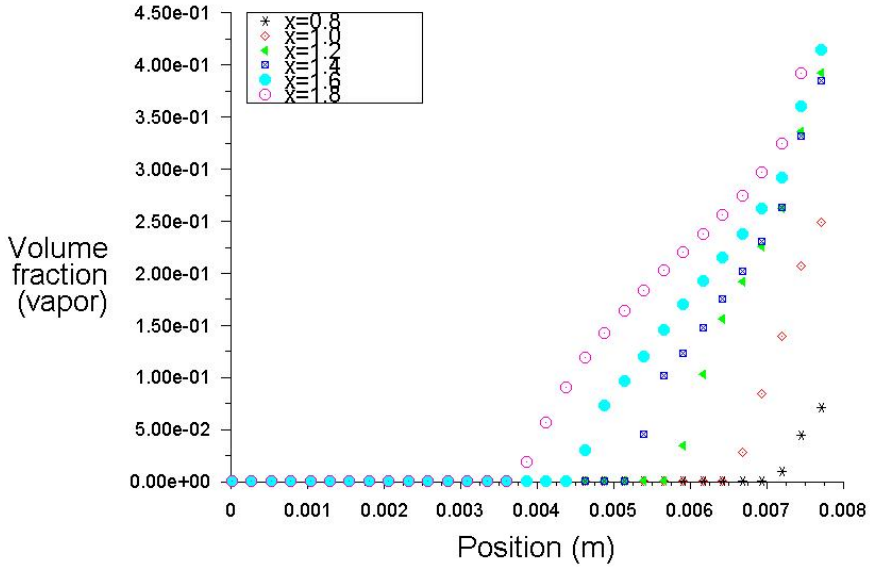


Fig.V.20 : profils radiaux de la fraction de la vapeur a six endroits le long du canal

La figure V.21 montre l'évolution du diamètre des bulles au niveau de la paroi le long du tube, l'UDF proposée combinée avec le modèle d'ébullition pariétale RPI, utilise le diamètre de Sauter-Mean pour la taille des bulles initiales. Le diamètre des bulles est proportionnel aux augmentations de température dans le tube en raison du chauffage de la paroi du tube et reste constant après que la température de saturation est atteinte. Le diamètre de la bulle dépend fortement de la température du liquide dans la masse locale par conséquent, il augmente de manière significative vers la sortie du tube où l'évaporation se produit.

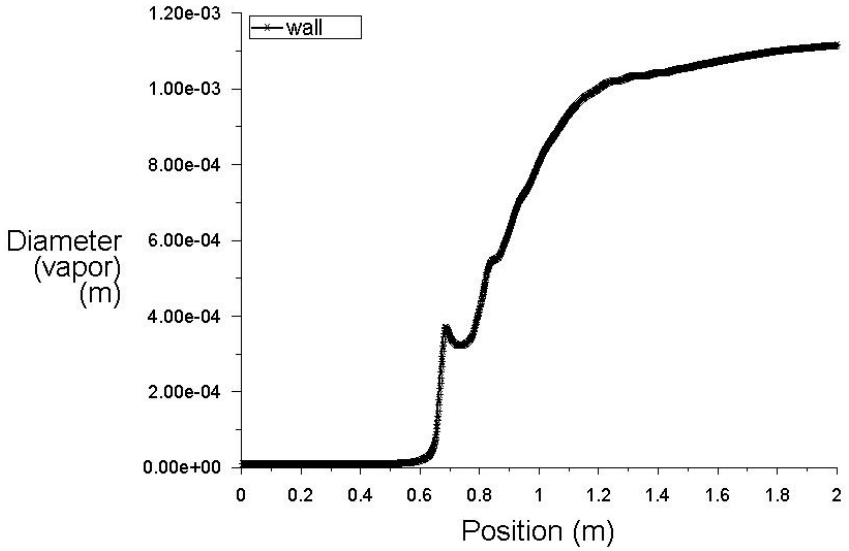


Fig.V.21: diamètre des bulles le long du canal

En conséquence de la comparaison de la présente étude, il est clair que l'UDF développée couplée avec le modèle pariétal RPI, basé sur le formalisme de l'IAPWS est raisonnable. Ceci démontre la forte non-linéarité de la forme des propriétés thermophysiques de l'eau et de la vapeur entre les deux points de température 473,15 K et 543,15 K qui nécessitent souvent des interpolations polynomiales pour définir la solution dépendante des propriétés des matériaux, ce qui fait la différence entre les deux modèles par rapport aux données expérimentales de Bartolomei et Chanturiya comme illustrer dans les figures V.18 et V.19.

V.4. Modélisation en 3D de l'ébullition nucléée sous-saturée (Benchmark3)
V.4.1. Boucle FRIGG pour la simulation d'un BWR

Au milieu des années 60, ABB Atom en Suède a mené des essais à grande échelle sur des assemblages combustibles de type BWR dans la boucle d'essai FRIGG pour la qualification du combustible 8X8. En 1995 une mise à niveau de la boucle d'essai a été réalisée en augmentant sa puissance thermique de 4 MW à 15 MW et apportant, ainsi, des améliorations qui comprennent un nouveau système de contrôle de la boucle, un nouveau système puissant de collecte de données et une nouvelle salle de contrôle. La boucle FRIGG a été modernisée pour répondre aux besoins actuels et futurs de la mesure de la distribution du vide, de la perte de pression, des mesures statiques et des transitoires, de la stabilité hydraulique des assemblages combustibles et du flux de chaleur critique d'assèchement (dryout) [141] [142].

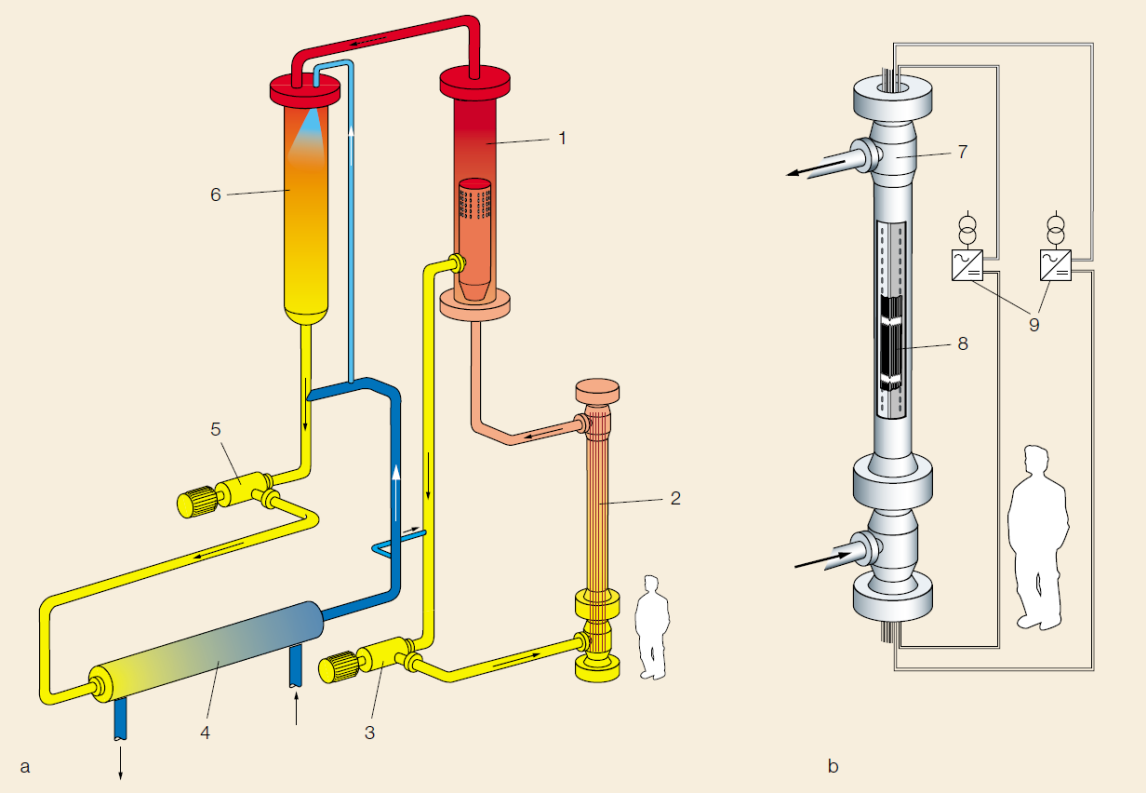


Fig.V. 22 : Arrangement basique de la boucle d'essai FRIGG-BWR (a)
et détails de la section d'essai avec comparaison de taille (b) [142]

Nomenclature :

1. Séparateur de vapeur,
2. Section de test,
3. Pompe de circulation principale,
4. Echangeur de chaleur,
5. Pompe de recirculation pour le circuit de refroidissement,
6. Condenseur,
7. Cuve de pression,
8. Assemblage de test,
9. Redresseur (max 14).

La mission assignée à la boucle d'essai FRIGG est de consolider le développement de combustible nucléaire en validant la performance thermohydraulique de nouvelles conceptions de combustible type BWR et de fournir des données pour la conception des assemblages et de la supervision du cœur.

Le principal champ d'application de la boucle est la vérification thermohydraulique des assemblages combustibles type BWR. La boucle a été mise en opération depuis le milieu des années 60 et une grande variété de conceptions de combustible ont été développées et validées. La boucle a été continuellement modifiée et mise à niveau pour répondre aux besoins réels. Une mise à niveau complète de l'installation a été lancée en 1995. La puissance a été augmentée de 4 MW à 15 MW pour permettre des essais des assemblages en géométrie entière. De nouveaux systèmes de contrôle et d'acquisition de données, une nouvelle salle de contrôle, un système de mesure de vide et de meilleures capacités transitoires ont également été introduites [141]. Les caractéristiques principales de la boucle d'essai FRIGG sont résumées dans le tableau V.7.

Tableau V. 7 : Données principales

Paramètre*	**Unité**	**Valeur**
Pression	MPa	10.0
Température	°C	311
Puissance thermique du crayon	MW	15
Débit	Kg/s	25
Nombre de redresseur	-	14

* Matériaux en Acier au carbone et le système de mesure comporte 830 points de mesures, 25 fois/s.

V.4.2. Description de la boucle FRIGG

Le collecteur de la vapeur est utilisé pour séparer la vapeur de l'eau saturée. La vapeur d'eau est transportée vers le condenseur et l'eau saturée vers la pompe de circulation principale. Le circuit de refroidissement est constitué d'un condenseur et d'un échangeur de chaleur avec une pompe de circulation. Les échangeurs de chaleur agissent comme un dissipateur de chaleur dans la boucle qui refroidit l'eau du condenseur avant d'être renvoyé au circuit de refroidissement, la figure V.23 montre le schéma synoptique de la boucle FRIGG.

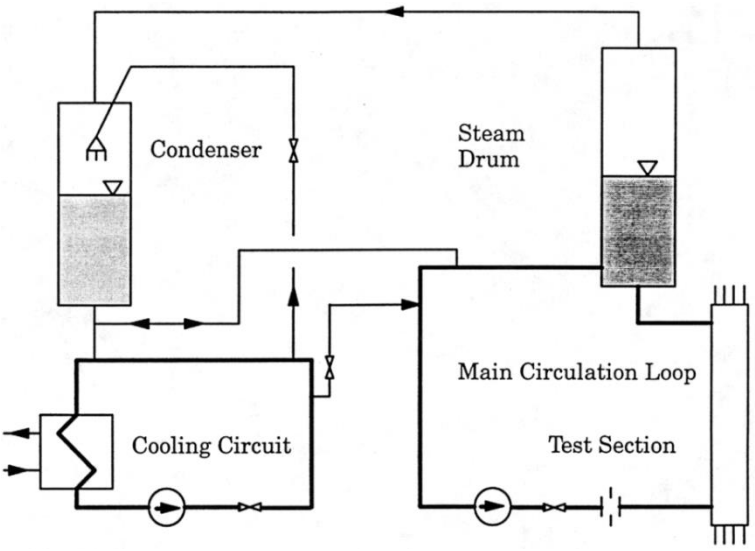


Fig.V. 23 : Schéma synoptique de la boucle FRIGG [141]

La section d'essai est composée d'un récipient sous pression, d'un canal d'écoulement en Zircaloy et d'un sous-assemblage ou d'un assemblage de grandeur réelle, avec des cannes chauffantes représentant les conceptions de combustible SVEA. Des capteurs de pression sont reliés au canal d'écoulement en différents points d'élévation.

Les canaux d'écoulement sont utilisés de la production normale et sont aussi réalistes car ils peuvent être en dehors des prises de pression. Il en va de même pour les entretoises (espaceurs), qui sont entièrement sans renforts à des fins de test. L'utilisation de composants standards est possible grâce à l'utilisation de cannes chauffantes "indirectes" sans avoir besoin de simulations de canaux d'écoulement à l'aide de céramique. Chaque canne de dispositif de chauffage comprend un élément de chauffage, un isolateur électrique, une gaine en Inconel et les thermocouples utilisés comme détecteurs du flux de chaleur critique d'assèchement. Les cannes chauffantes sont de trois longueurs ; cannes de pleine longueur, de 2/3 de la longueur et de 1/3 de la longueur. Les cannes de longueur totale et une partie de la longueur de chauffage ont jusqu'à 8 et 2 thermocouples dans chaque canne respectivement.

Les cannes chauffantes sont alimentées électriquement par un certain nombre de redresseurs à thyristors. En changeant la combinaison de barres, relié à chaque unité pour le réglage de la tension aux bornes de chaque appareil, différentes combinaisons de distributions de puissance locales peuvent être simulées. Le système d'acquisition de données comprend un ordinateur principal et un certain nombre de scanners.

La figure V.24 schématise un assemblage de six cannes chauffantes (FT-6a) de la section d'essai de la boucle FRIGG, pour la simulation d'un assemblage de 6 crayons combustibles, c'est un benchmark de référence pour la mesure de la distribution du taux de vide.

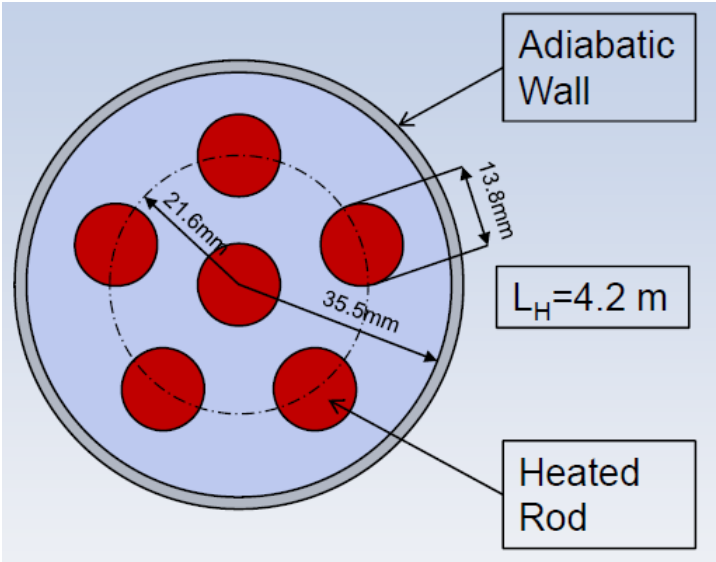


Fig.V. 24 : Schéma de six cannes chauffantes de la section d'essai de la boucle FRIGG (FT-6a)

V.4.3. Description du benchmark

Le benchmark de référence proposée, comme indiqué dans la figure V.24 et expérimentalement étudiée dans la boucle d'essai de FRIGG [142], pour simuler un écoulement diphasique à ébullition sous saturé dans un cœur de réacteur pour la prédiction de la distribution de la fraction

de vapeur dans les sous canaux d'un assemblage combustible [143] [144]. Il s'agit de l'évolution d'un écoulement liquide vapeur avec apport de chaleur de six cannes chauffantes placées dans une conduite verticale adiabatique. Le liquide entre du bas de la conduite cylindrique verticale adiabatique à travers les sous canaux avec un flux massique constant de G_{in} = 1163 kg/m^{2}s sous une pression de P = 5 MPa (T_{sat} = 537 K) et une température de sous refroidissement de T_{sub} = 4.5 K. On impose un flux de chaleur uniformément réparti à la paroi de la canne de Q_{canne} = 0.522 MW/m^2 sur toute la longueur de la conduite. Comme indiqué dans la figure V.24, le diamètre de la canne chauffante de la section d'essai FT-6a est de ϕ = 13.8 mm et de longueur de Z = 4.2 m.

Les mesures ont été prises aux différents endroits, trois zones radiales, le long de la section d'essai, comme indiqué sur la figure V.25. Le tableau V.8 résume les limitations des trois zones.

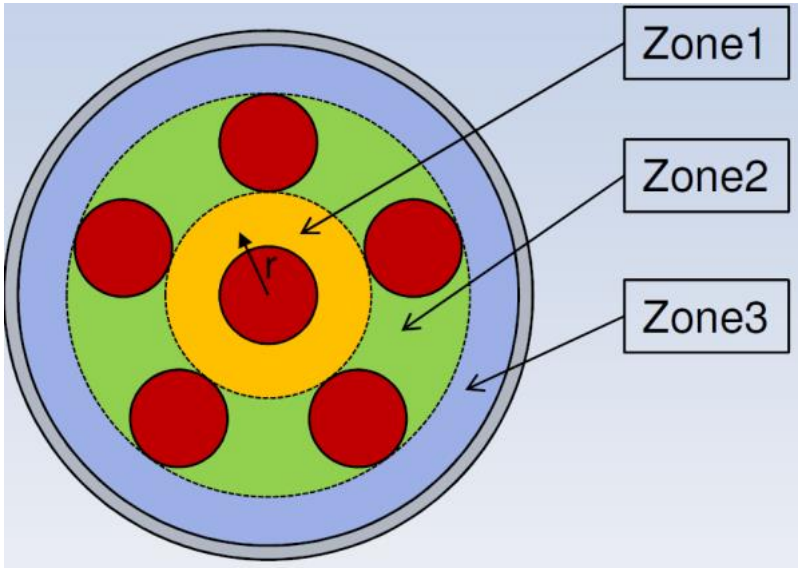


Fig.V. 25 : Zones de mesures de la boucle FRIGG (FT-6a)

Tableau V. 8 : zonage de la section FT-6a

Zone	Unité	Rayon
1	mm	R < 14.6
2	mm	14.6 < r < 28.6
3	mm	r > 28.6

Les données expérimentales disponibles comprennent les fractions moyennes de la vapeur de la section axiale et radiale des trois zones [143] [144] [68] [24] [145] [144].

V.4.4. Procédure de résolution avec l'UDF (ANN)

Pour valider l'UDF développée avec les réseaux de neurones en 3D et implémentée dans le code ANSYS-Fluent, on doit réaliser une étude comparative. Pour cela, le modèle Eulérien à répartition du flux pariétal (RPI) a été adopté, d'où le couplage de l'UDF(ANN) avec le modèle Eulérien-RPI d'une part et d'autre part le modèle Eulérien-RPI avec définition des propriétés de l'eau et de la vapeur par une interpolation linéaire en fonction de la température en deux points. A cet effet, on résume dans le tableau V.9 les valeurs des paramètres thermohydrauliques à savoir la pression de fonctionnement, le débit massique de l'écoulement, le flux de chaleur pariétal uniformément réparti le long de la paroi de la canne chauffante et la température de l'écoulement monophasique en entrée. Ces paramètres sont nécessaires pour le lancement du code *CFD*.

Tableau V. 9 : Conditions thermohydrauliques

Paramètre*	**Valeur**
Diamètre ϕ de la canne	13.8 mm
Diamètre ϕ de l'assemblage	35.5 mm
Pression **P**	5 MPa
Débit massique $\mathbf{G_{in}}$	1163 kg/m^{2}s
Flux de chaleur $\mathbf{Q_{canne}}$	0.522 MW/m^2
Température à l'entrée $\mathbf{T_{in}}$	532.5 K
Sous saturation $\mathbf{T_{sub}}$	4.5 K

* Canal en Zircaloy, gaine en Inconel et H2O comme fluide caloporteur

Les propriétés thermophysiques de l'eau liquide sont résumées dans le tableau V.10 et celles de la vapeur à la température de saturation de 537 K qui correspond à la pression de fonction de 5 MPa sont résumées dans le tableau V.11. Les propriétés de l'eau sont déterminées par un profil linéaire de température en deux points à T = 532.5 K et à T = 602.5 K obtenues à partir des tables thermodynamiques basées sur la formulation industrielle IAPWS-IF97. Dans le tableau V.4 on présente les propriétés du Zircaloy.

Tableau V. 10 : Propriétés thermophysiques de l'eau liquide

		532.5 K	**602.5 K**
Propriété*	**Unité**	**Valeur**	**Valeur**
Densité	kg/m^3	785.634	642.312
Chaleur spécifique Cp	J/kg.K	4998	7007
Conductivité thermique λ	W/m.K	0.608309	0.484408
Viscosité η	kg/m.s	1.02e^{-04}	7.47428e^{-05}

* Eenthalpie à l'état standard de l'eau liquide est nulle, c'est à dire 0 J/kg.mol.

Tableau V. 11 : Propriétés thermophysiques de la vapeur à 537 K

Propriété	**Unité**	**Valeur**
Densité	kg/m^3	25.35
Chaleur spécifique Cp	J/kg.K	4425
Conductivité thermique λ	W/m.K	0.0554
Viscosité η	kg/m.s	1.8e^{-05}
Masse moléculaire M	kg/kg.mol	18.0152
Tension interfaciale σ	N/m	0.02278
Enthalpie à l'état standard H	j/kg.mol	2.959897e^{+7}
Température de référence T_{ref}	K	298.15

Tableau V. 12 : Propriétés thermophysiques de Zircaloy

Propriété	**Unité**	**Valeur**
Densité	kg/m^3	6520
Chaleur spécifique Cp	J/kg.K	281
Conductivité thermique λ	W/m.K	22.7

V.4.5. Maillage

La section d'essai caractérisée par une géométrie cylindrique, ce qui permet de réaliser un maillage tridimensionnel périodique au niveau de la ligne médiane de la section, c'est un axe de rotation utilisé pour simplifier la géométrie, donc en utilisant la propriété de la symétrie, on procède seulement à la modélisation d'une division de 72 degrés de la géométrie soit 1/5 de la

géométrie totale. Cette division est subdivisée en 3 blocs. Le 1er bloc c'est la canne entière, le 2ème bloc c'est le 1/5 d'une autre canne chauffante et le 3ème bloc sont les sous-canaux pour le passage du caloporteur, figure V.26 (b). Seuls les deux premiers mètres de la section ont étés modélisés, figure V.27.

La figure V.26 illustre la procédure adoptée pour la simulation de l'assemblage d'essai avec la discrétisation spatiale finale adoptée pour la division du domaine de calcul. Pour le maillage, le choix s'est arrêté sur un maillage hybride, structuré le long de la conduite avec 600 éléments et hexaèdre radialement avec une longueur minimale de l'arête de 6.9 mm soit un total de 2409760 nœuds et 2252700 éléments, figure V.26 (c).

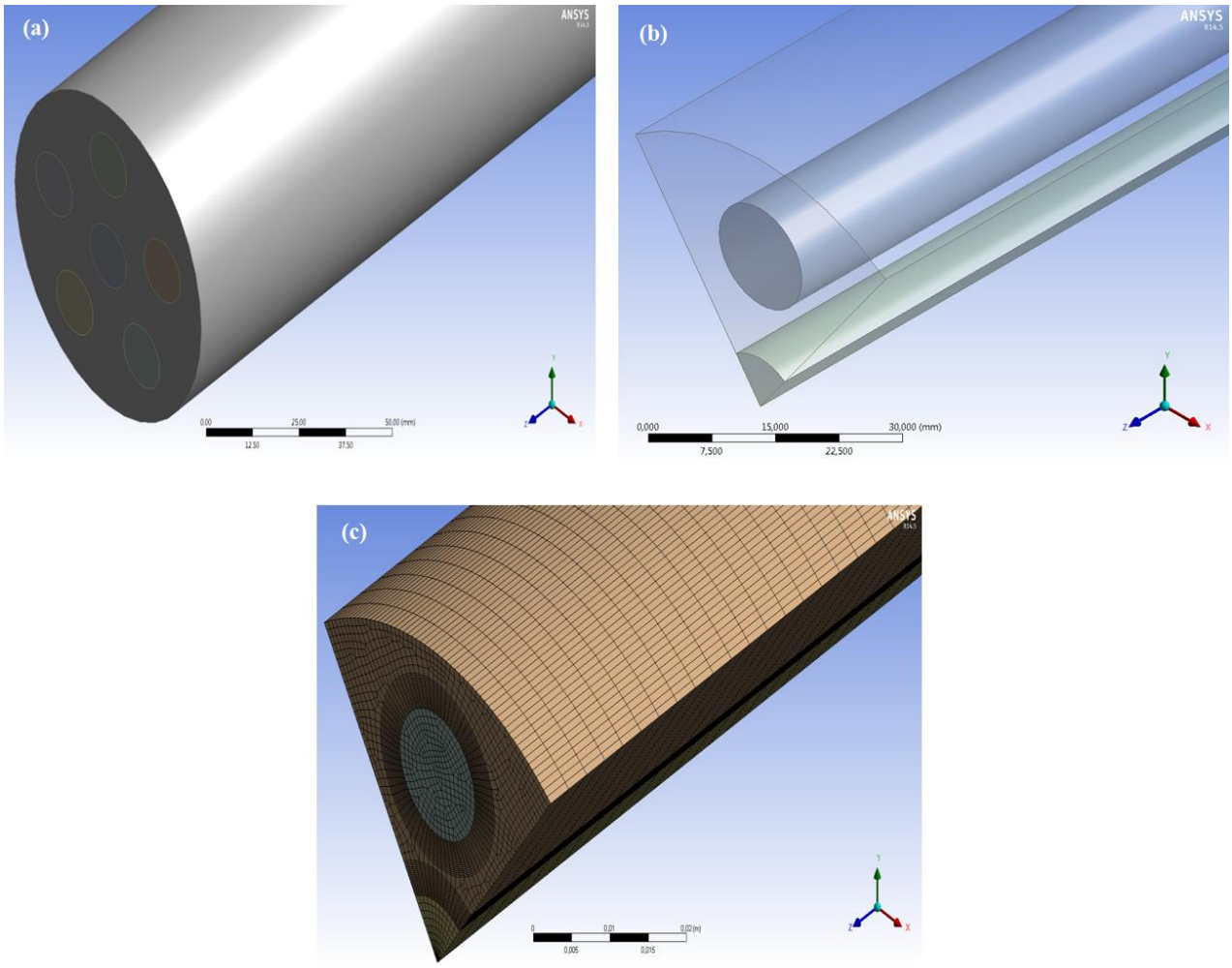


Fig.V. 26 : Géométrie totale de la section d'essai (a), Division de 72 degrés de la géométrie (b), Maillage adopté de la division (c)

Une fois on définit la géométrie et le maillage afin d'affecter les conditions aux limites de la division du domaine de calcul, les plus importantes, utilisées pour un modèle d'écoulement à ébullition turbulent à l'intérieur d'une conduite, on crée les sélections nommées pour chaque arrête de la conduite.

Toujours, comme les deux premiers benchmarks, on génère tout d'abord une solution pour un écoulement monophasique pour assurer le profil de la vitesse et les paramètres de la turbulence,

entièrement développé à la sortie du canal, comme une entrée pour la simulation en diphasique. La figure V.27 ci-dessous schématise l'architecture arrêtée pour la simulation de l'ébullition nucléée pour la prédiction du taux de vide. Il s'agit de la modélisation d'une division d'un angle de 72° des deux premiers mètres de la section.

Comme indiquer dans les paragraphes précédents, pour les écoulements diphasiques, le tracé du résiduel de la simulation ne suffit pas pour la confirmation de la convergence de la solution, donc on doit suivre la convergence avec d'autres indicateurs comme le bilan de masse entre l'entrée et sortie de la conduite et la fraction moyenne de la vapeur à la sortie de la conduite.

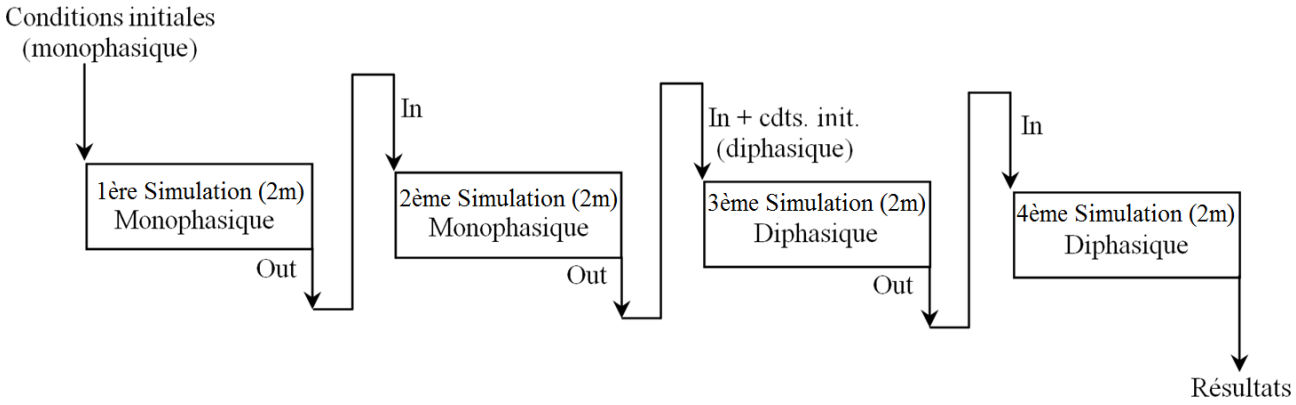


Fig.V. 27 : Architecture adoptée pour la simulation de la section FT-6a

V.4.6. Résultats

Le modèle numérique adopté est à trois dimensions 3D périodique i.e. une division de 72 degrés. Le problème est traité comme étant un écoulement turbulent diphasique eau-vapeur dans une section verticale (sous-canaux) à l'état stationnaire avec occurrence d'ébullition sur la surface chaude. Les propriétés thermophysiques de l'eau, phase liquide, qui variées avec la température selon la loi linéaire entre deux points 532.5 K et 602 K comme indiqué dans le tableau V.10. Cependant, les propriétés thermophysiques de la phase vapeur sont celle de la saturation. La température de saturation est aux alentours de 537 K qui varie avec la pression du caloporteur, tableau V.11.

Dans cette étude, nous avons utilisé le "RPI Boiling Model" du modèle multiphasique Eulérien couplé avec le modèle RNG k-ε pour la turbulence, utilisés généralement pour les écoulements diphasiques bouillants à bulles. Ce choix est dicté par leur vaste utilisation dans la littérature et après plusieurs essais de convergence par combinaison de divers modèles multiphasiques et ceux de la turbulence à savoir, en plus des deux premiers, le modèle VOF et MIXTURE pour le multiphasique et SST k-ω pour la turbulence. Pour les paramètres d'entrée (Inputs) du modèle arrêté dans le code ANSYS-Fluent pour l'étude du benchmark sont identiques à ceux tu tableau V.5 sauf ceux qui corresponds à la géométrie.

Une étude comparative est réalisée pour la validation de l'UDF développée avec les réseaux de neurones conjuguée avec le modèle RPI et le modèle RPI avec la fonction linéaire du solveur ANSYS Fluent pour la détermination des propriétés thermophysiques de l'eau entre deux points 532.5 K et 602 K confrontées aux données expérimentales [143] [144] [68] [24] [145] [144]. La figure V.28 montre que la distribution axiale, de chaque zone, de la fraction de la vapeur du modèle UDF-RPI proposé est en bon accord avec les données expérimentales.

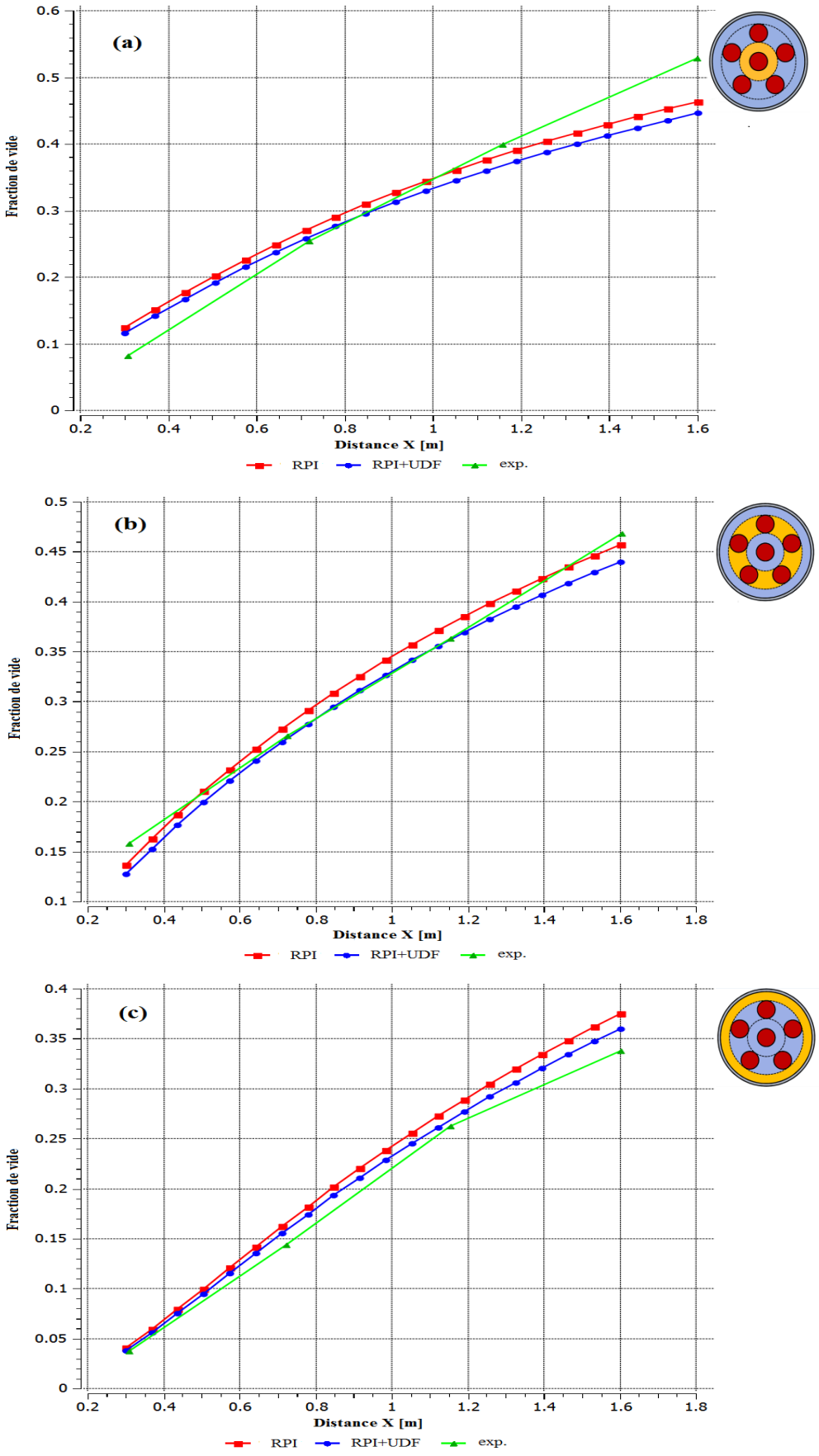


Fig.V. 28 : Distribution axiale de la fraction de vide de la section FT-6a
Zone1 (a), Zone2 (b), Zone3 (c)

La figure V.29 montre que la distribution radiale, de chaque zone, de la fraction de vapeur du modèle UDF-RPI est en bon accord avec celles mesurées expérimentalement.

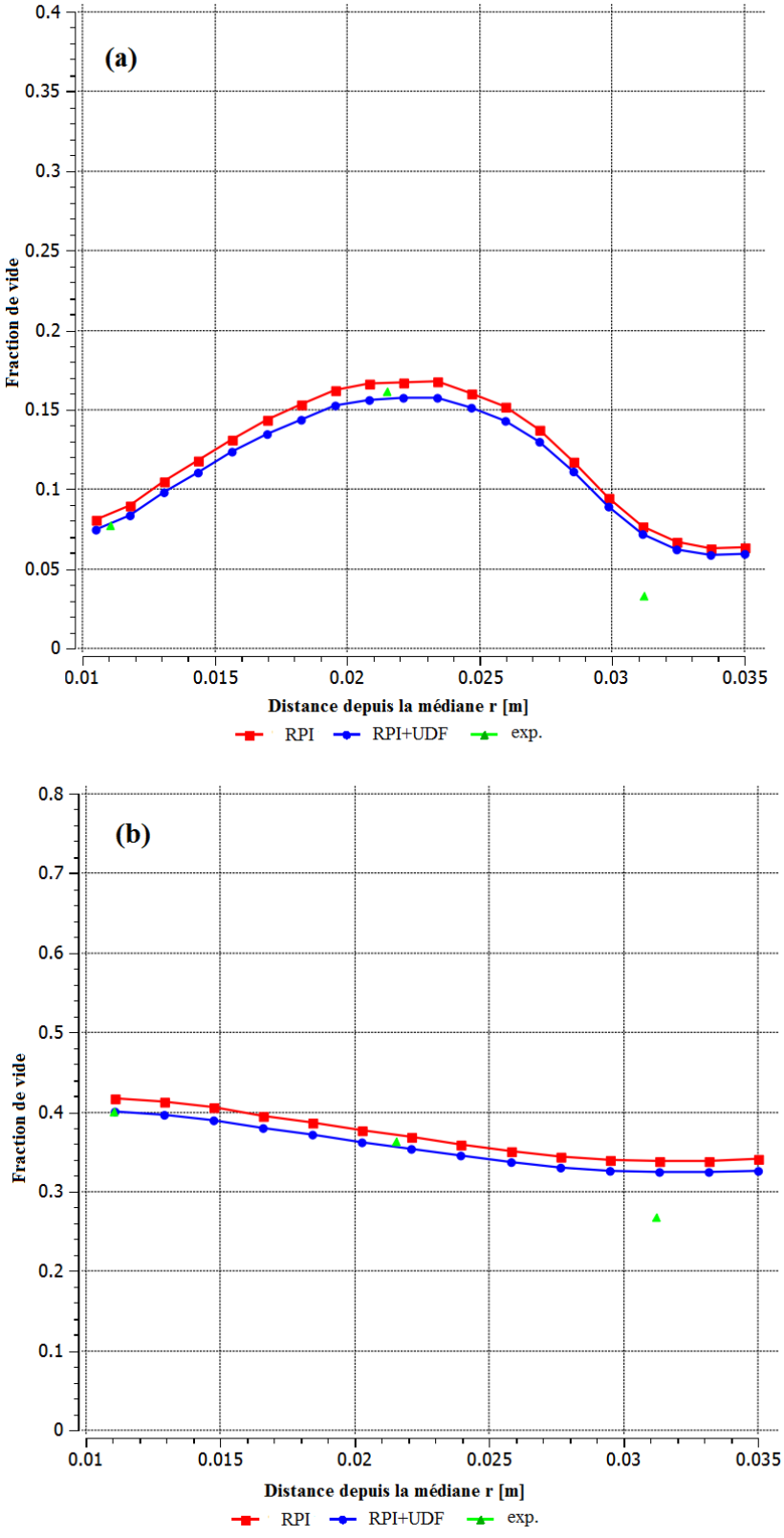


Fig.V. 29 : Distribution radiale de la température de la section FT-6a
x=304 mm (a), x=1148 mm (b),

La figure V.30 illustre les différents contours et sections radiales de la fraction de la vapeur et de la température le long de la section d'essai de la FT-6a. La figure V.31 montre la fraction de la vapeur (a) et la température du liquide à la sortie de la section d'essai FT-6a.

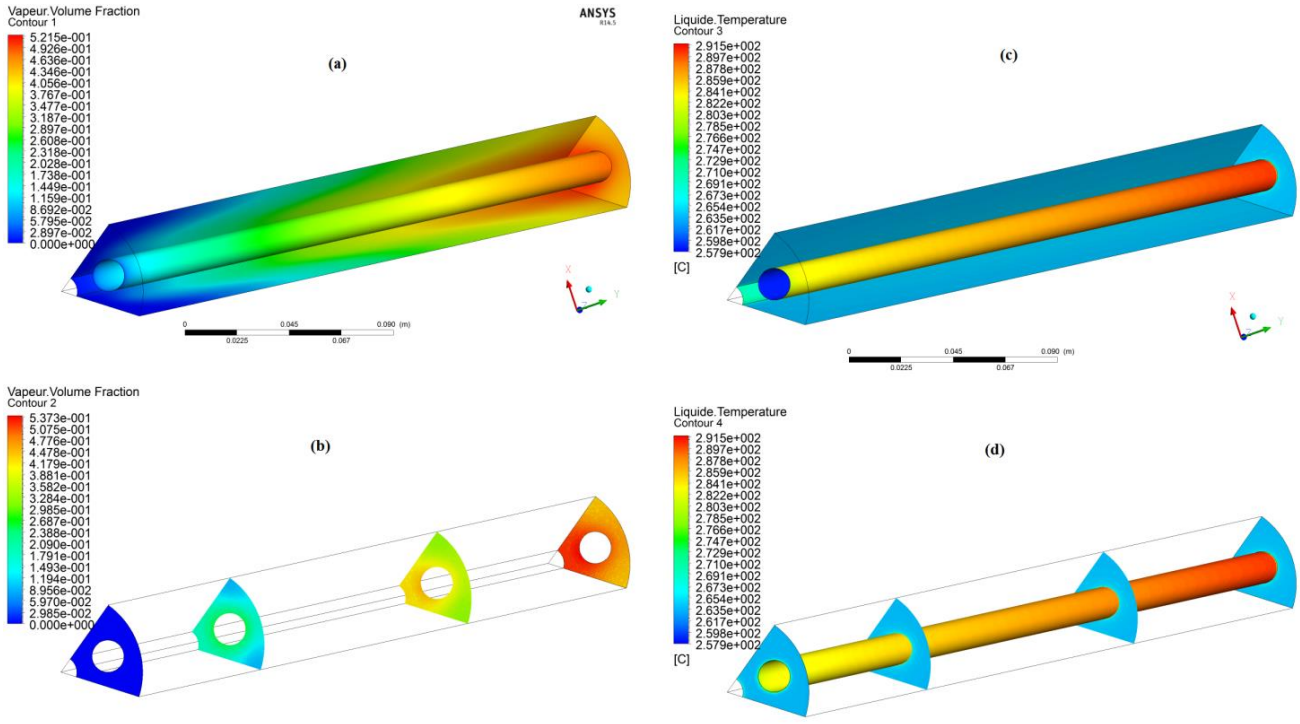


Fig.V. 30 : Contours le long de la section FT-6a fraction de vapeur (a), distribution de la fraction de la vapeur en 4 endroits (b), température du liquide (c), distribution de la température en 4 endroits (d)

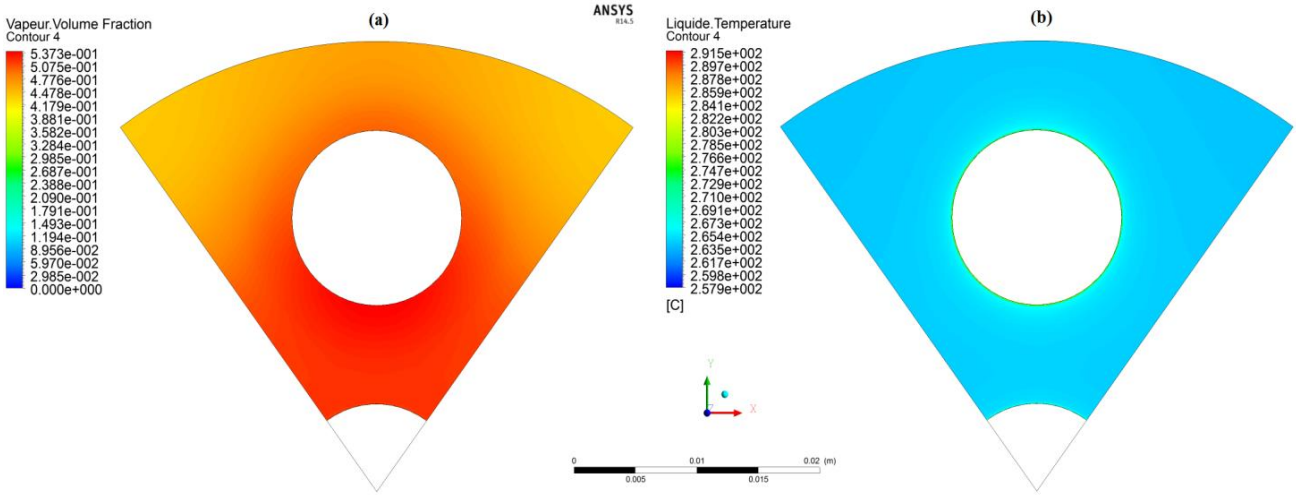


Fig.V. 31 : Contour à la sortie de la section FT-6a fraction de la vapeur (a), température du liquide (b)

V.5. Conclusion

A travers cette étude, nous nous sommes intéressés, via une simulation en 2D et 3D, à la prédiction de la nucléation pariétal de l'ébullition sous-saturée respectivement dans une conduite circulaire verticale avec un apport de chaleur uniformément réparti le long de la conduite et dans les sous-canaux de la section d'essai FT-6a de la boucle FRIGG, en utilisant un code CFD avec transfert de chaleur conjugué dans un cas. Ce travail nous a permet d'évaluer, l'application du modèle multiphasique Eulérien à répartition du flux pariétal (RPI), modèle le plus complexe et le plus onéreux en ressources de calculs fourni par ANSYS dans son code Fluent version 14.5.0 en conjonction avec les UDF développées (ANN et IAPWS) sur la base du formalisme IAPWS qui calcule les propriétés thermodynamiques et de transport de l'eau et de la vapeur saturée supposées varier avec la température. La validation des résultats a été faite avec les données expérimentales.

Les résultats démontrent que le couplage du modèle RPI avec les UDF développées est capable de prédire raisonnablement bien les distributions de la fraction de vapeur et le profil de température du liquide dans le tube vertical chauffé et les sous-canaux de la boucle FRIGG. Les profils calculés de la fraction de vapeur et de la température du liquide sont en bon accord avec les expériences disponibles.

Conclusion Générale

La modélisation des transferts thermiques en écoulements diphasiques est l'une des pierres angulaires de l'étude de la sûreté des réacteurs nucléaires. A l'échelle d'un réacteur nucléaire, cette modélisation repose essentiellement sur l'utilisation de corrélations expérimentales valables à l'échelle du cœur du réacteur. Cependant, dans une approche CFD, l'étude de l'écoulement dans un sous-canal d'assemblage de combustible nucléaire requiert des simulations tridimensionnelles locales basées sur des modèles diphasiques moyennés sur des échelles de temps et d'espace plus petites. Ces modèles nécessitent d'être fermés via des relations de fermeture locales plus difficiles à déterminer expérimentalement. C'est pourquoi la simulation numérique peut être un excellent outil de développement de tels modèles.

Notre travail a consisté à améliorer la simulation d'un écoulement en ébullition nucléée sous saturée convective rencontrée dans les réacteurs de puissances par une approche CFD sous le code ANSYS-Fluent version 14.5.0. Ainsi, nous avons mené une série d'études visant :

1. à établir une simulation qui tient compte des mécanismes locaux de la couche limite adjacente à la paroi chauffée,
2. à proposer un modèle approprié pour la simulation de ces phénomènes dans les conditions d'opération d'une centrale nucléaire en tenant compte des phénomènes physiques de l'ébullition nucléée,
3. et comme conséquence, à développer des compétences pour le développement des modèles en utilisant un logiciel de simulation CFD.

Au début de cette thèse, nous avons présenté une synthèse bibliographique des travaux qui traitent l'utilisation de la mécanique des fluides numérique pour la modélisation de l'ébullition nucléée sous-saturée convective afin d'améliorer la prédiction des grandeurs locales dans les écoulements diphasiques bouillants principalement dans le domaine nucléaire. Une analyse bibliographique de modèles mécanistes d'ébullition nucléée qui sont les seuls pouvant fournir les conditions limites à la paroi nécessaires aux codes de calcul de type CFD a été présenté, avec la description des équations de conservation moyennées dans le temps et dans l'espace du modèle RPI, modèle à répartition du flux pariétal, ainsi que les modèles de fermeture que nous avons sélectionné afin de simuler les écoulements diphasiques bouillants dans le code ANSYS-Fluent.

En facilitant la manipulation, à l'utilisateur, à travers la simplicité de son interface graphique, Fluent qui n'est pas limité uniquement à ces propres fonctions, mais il offre à l'utilisateur la possibilité d'y injecter ses propres fonctions selon les particularités du problème. A partir de cela, nous avons développé deux UDF, l'une est basée sur les réseaux de neurones multicouches, qui a amplement montrée ses performances et l'autre en implémentant le formalisme IAPWS pour la prédiction des propriétés des matériaux, qui est une phase essentielle d'analyse de la mécanique des fluides numérique, ce sont des coefficients des équations. Il s'agit en général de valeurs dépendant des conditions de pression et de température.

Compte tenu des résultats satisfaisants obtenus, nous pouvons dire que le couplage du modèle RPI, modèle à répartition du flux pariétal et les UDF développées pour le calcul des propriétés de l'eau et de la vapeur s'est révélé être utile pour la prédiction de la fraction volumique de la vapeur dans un écoulement en ébullition sous-saturée. De manière globale, la confrontation des résultats

numériques, à savoir les distributions de fraction de volume de la vapeur et le profil de température, montre une bonne concordance avec les expériences.

Aussi d'autres recherches de base doivent être effectuées pour quantifier les effets physiques, en particulier en ce qui concerne la modélisation numérique en trois dimensions à partir de l'eau en tant que fluide porteur avec des bulles de vapeur dispersées à l'entrée à la vapeur en tant que fluide porteur avec des gouttelettes d'eau dispersées à la sortie. L'utilisation de cartes de régime d'écoulement offre un certain potentiel prometteur pour une modélisation plus générale.

Les mesures locales fiables de la fraction de vide, de la température et de la vitesse d'un écoulement diphasique à haute pression aideraient au développement de la CFD comme un outil fiable pour les applications diphasiques des réacteurs nucléaires.

Tout en estimant avoir atteint notre objectif tracé pour cette étude, nous envisageons d'améliorer notre connaissance des mécanismes physiques de base à l'origine de la crise d'ébullition. La crise d'ébullition est une instabilité du régime d'ébullition nucléée conduisant à une très importante et très brutale augmentation de la température de la paroi chauffée. Cette augmentation peut conduire à la destruction de la paroi, ce qui constitue un problème potentiel de la sûreté des installations industrielles qui requiert une bonne connaissance des mécanismes de base des phénomènes mis en jeu.

Le modèle RPI a montré des résultats prometteurs en matière de la prédiction de l'ébullition nucléée. Il convient en outre d'appliquer ce modèle pour la prédiction du flux de chaleur critique (CHF pour Critical Heat Flux en Anglais) avec diverses conditions d'entrée. Comme un modèle physique théorique rigoureux sans corrélations empiriques décrivant en détail le phénomène DNB n'existe pas, le développement de modèles mécanistes fiables avec une large applicabilité basée sur l'approche théorique, mais toujours en utilisant certaines équations empiriques est recommandé. Dans l'avenir, ce modèle devrait tenir compte des phénomènes de fragmentation et de coalescence ainsi que les phénomènes pariétaux (nucléation, détachement) est une tâche très ardue pour laquelle très peu de pistes de réflexions existent à notre connaissance. Elle n'en demeure pas moins une étape clé vers l'étude de la crise d'ébullition.

D'autre part, les écoulements liquide-vapeur en milieux poreux occupent une grande place dans les études de sûreté des installations nucléaires, le contrôle et la prédiction des phénomènes d'assèchement sont fondamentaux pour la maîtrise du refroidissement du combustible et des éléments de structure d'un réacteur.

Les bulles sous toutes leurs formes sont loin d'avoir dévoilé tous leurs secrets.

Références bibliographiques

1. **B. BERTRAND,** *Histoire naturelle des réacteurs nucléaires,* Palais de découverte, France, 2004, Journées de l'énergie.

2. **C. AURELIA,** *Single and Two-Phase Flow Modeling for Coupled Neutronics, Thermal-Hydraulics Transient Analysis of Advanced Sodium-Cooled Fast Reactors,* Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse 2011. Thèse de doctorat.

3. **P. SAPIN,** *Etude expérimentale de l'ébullition en masse dans un milieu poreux modèle,* Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 2014, Thèse de doctorat.

4. **P. COPPOLLANI et al.,** *La chaudière des réacteurs à eau sous pression,* EDP Sciences, France, 2004.

5. **J.M. DELHAYE,** *Thermohydraulique des réacteurs,* Collection génie atomique, EDP Sciences, France, 2008.

6. **L.S. TONG and J. WEISMAN,** *Thermal analysis of pressurized water reactors,* American Nuclear Society, USA, 1979.

7. **E. THIBAULT and J.P. GONCALVES,** *Cycles thermodynamiques des machines thermiques,* Institut National Polytechnique de Grenoble, France, 2006.

8. **Y. ZHU,** *Numerical Investigation of the Flow and Heat Transfer within the Core Cooling Channel of a Supercritical Water Reactor,* IKE, Université de Stuttgart, Allemagne, 2010.

9. **G. FACCANONI,** *Etude d'un modèle fin de changement de phase liquide-vapeur : Contribution à l'étude de la crise d'ébullition,* Ecole Polytechnique, Univeristé de Trento et CEA, France, 2008. Thèse de Doctorat.

10. **W.W. CHAO, J.F. KUNZE, W. DA and S.K. LOYALKA,** *The effect of dissolved gas bubble nucleation on natural convection heat transfer in narrow channels,* Nuclear Technology, 1993, Vol. 105, pp. 261-270.

11. **A. HAINOUN and A. SCHAFFRATH,** *Simulation of subcooled flow instability for high flux research reactors using the extended code ATHLET,* Nuclear Engineering and Design, 2001, Vol. 207, p. 207.

12. **S. HARI and Y.A. HASSAN,** *Improvement of the subcooled boiling model for low-pressure conditions in thermal-hydraulic codes,* Nuclear Engineering and Design , 2002, Vol. 216, pp. 139-152.

13. **J.Y. TU and G.H. YEOH,** *On numerical modeling of low-pressure subcooled boiling flows,* Int. J. Heat Mass Transfer, 2002, Vol. 45, pp. 1197-1209.

14. **B. KONCAR and B. MAVKO,** *Modelling of low-pressure subcooled flow boiling using the RELAP5 code,* Nuclear Engineering and Design, 2003, Vol. 220, pp. 255-273.

15. **Y.A. CENGEL and R.H. TURNER,** *Fundamentals of Thermal-Fluid Sciences,* McGraw Hill, 2005.

16. **ANSYS Inc,** *Fluent User's Guide Version 14.5.0,* Fluent, Inc, 2012.

17. **W. K. IN and al.,** *Numerical Analysis of the Turbulent Flow and Heat Transfer in a Heated Rod Bundle,* J. of the KNS, 2004, Vol. 36, pp. 153-164.

18. **W. K. IN and al.,** *Assessment of the RANS Turbulence Models for a Turbulent Flow and Heat Transfer in a Rod Bundle,* Nuclear Technology, 2005, Vol. 150, pp. 231-250.

19. **W. K. IN,** *Numerical Study of Coolant Mixing caused by the Flow Deflectors in a Nuclear Fuel Bundle,* Nuclear Technology, 2001, Vol. 134, pp. 187-195.

20. **T. IKENO and T. KAJISHIMA,** *Analysis of Dynamical Flow Structure in a Square Rod Bundle,* Pittsburgh, USA : NURETH-12, du 30 Septembre au 4 Octobre, 2007.

21. **W. K. IN and al.,** *Numerical Computation of Heat Transfer Enhancement of a PWR Rod Bundle with Mixing Vane Spacers,* Nuclear Technology, 2008, Vol. 161, pp. 69-79.

22. **H. ANGLART and al,** *CFD Prediction of Flow and Phase Distribution in Fuel Assemblies with Spacers,* Nuclear Eng. and Des., 1997, Vol. 177, pp. 215-228.

23. **T. IKENO and al.,** *Numerical Prediction of Void Distribution in Two-Phase Turbulent Flow in a Subchannel,* Brussels, Belgium : ICONE-17, 12-16 Juillet, 2009.

24. **W. K. IN and al.,** *CFD Evaluation of the Two-Phase Flow Models for the Subcooled Boiling Flow in a Rod Bundle,* Avignon, France : NURETH-11, 2-6 Octobre, 2005.

25. **W. K. IN and al.,** *Flow Analysis for Optimum Design of Mixing Vane in a PWR Fuel Assembly,* J. of the KNS, 2001, Vol. 33, pp. 327-338.

26. **W. K. IN and al.,** *Empirical and Computational Pressure DropCorrelations for PWR Fuel Spacer Grids,* Nuclear Technology, 2002, Vol. 139, pp. 72-79.

27. **M. E. CONNER and al.,** *Understanding and Predicting the Flow Field in a Reactor Core,* Top Fuel 2003, Wurzburg, Germany, 16-19 Mars, 2003.

28. **E. KREPPER and al.,** *CFD of Subcooled Boiling –Concept, Validation and Application to Fuel Assembly Design,* Nuclear Eng. and Des., 2007, Vol. 237, pp. 716-731.

29. **S. MIMOUNI and al.,** *Modelling and Computation of Cavitation and Boiling Bubbly Flow with the NEPTUNE-CFD Code,* Nuclear Eng. and Des., 2008, Vol. 238, pp. 680-692.

30. **E. MERZARI, H. NINOKATA and E. BAGLIETTO,** *Numerical Simulation of Flows in Tight-Lattice Fuel Bundle,* Nuclear Eng. and Des., 2008, Vol. 238, pp. 1703-1719.

31. **H. NINOKATA, E. MERZARI and A. KHAKIM,** *Analysis of Low Reynolds Turbulent Flow Phenomena in Nuclear Fuel Pin Subassemblies, of Tight Lattice Configuration,* Nuclear Eng. and Des., 2009, Vol. 239, pp. 855-866.

32. **D. Chang and S. Tavoularis,** *Numerical Simulation of Turbulent Flow in a 37-Rod Bundle,* Nuclear Eng. and Des., 2007, Vol. 237, pp. 575-590.

33. **X. CHENG and al.,** *Numerical Analysis of Heat Transfer in Supercritical Water Cooled Flow Channels,* Nuclear Eng. and Des., 2007, Vol. 237, pp. 240-252.

34. **W. POINTER and al.,** *RANS-based CFD Simulations of Wire-Wrapped Fast Reactor Fuel Assemblies,* ICAPP2008, Anaheim, CA USA, 8-12 Juin, 2008.

35. **B. L. SMITH,** *Assessment of CFD for NRS,* Grenoble, France , 10-12 Septembre, 2008, XCFD4RNS.

36. **D. BESTION and al.,** *Extension of CFD Codes to Two-Phase Flow Safety Problems,* Grenoble, France, OECD-WGAMA, 10-12 Septembre, 2008, XCFD4RNS.

37. **J. MAHAFFY.** *Synthesis of Results for the Tee-Junction Benchmark.* Bethesda, MD, USA, 14-16 Septembre, 2010, CFD4RNS.

38. **M. Z. PODOWSKI,** *On the Consistency of Mechanistic Multidimensional Modeling of Gas/Liquid Two-Phase Flow,* Nuclear Eng. and Des., 2009, Vol. 239, pp. 933-940.

39. **R.T. LAHEY JR,** *On the Direct Numerical Simulation of Two-Phase Flows,* Nuclear Eng. and Des., 2009, Vol. 239, pp. 867-879.

40. **J. S. LEE and al.,** *Hot Spot Analysis around the Contact Zone between Fuel Rod and Spacer Grid,* Jeju, Korea, 22 Mai, 2009, Trans. KNS.

41. **Y. BOUAICHAOUI, R. KIBBOUA and M. MATKOVIC,** *Experimental measurements and CFD simulation of convective boiling during subcooled developing flow of R-11 within vertical annulus,* Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heat Mass Transfer, 2014.

42. **D. BESTION,** *Extension of CFD Codes to Two-Phase Flow Safety Problems,* Grenoble, France, XCFD4NRS, 10-12 septembre, 2008.

43. **J. G. COLLIER and J.R. THOME,** *Convective boiling and condensation,* Oxford Science Publications, 1994.

44. **M. MONTOUT,** *Contribution au développement d'une Approche Prédictive Locale de la crise d'ébullition,* Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 2009. Thèse Doctorat.

45. **Z. STOSIC,** *Study on thermal performance and margins of BWR fuel elements,* Tokyo, 7th International Conference on Nuclear Engineering, 1999.

46. **N. SHIRAKAWA, Y. YAMAMOTO, H. HORIE and S. TSUNOYAMA,** *Analysis of subcooled boiling with the two-fluid particle interaction method,* Journal of Nuclear Science and Technology, 2003, Vol. 40:3, pp. 125-135.

47. **V. PRODANOVIC, D. FRASER and M. SALCUDEAN,** *On the transition from partial to fully developed subcooled flow boiling,* Int. J. of Heat and Mass Transfer, 2002, Vol. 45, pp. 4727-4738.

48. **W. K. IN and al.,** *CFD Evaluation of the Two-Phase Flow Models for the Subcooled Boiling Flow in a rod bundle,* France : NURETH-11, 2005.

49. **H. ANGLART and al.,** *CFD prediction of flow and phase distribution in fuel assemblies with spacers,* Nuclear Eng. and Des., 1997, Vol. 177, pp. 215-228.

50. **T. IKENO and al.,** *Numerical Prediction of Void Distribution in Two-Phase Turbulent Flow in a subchannel,* Belgique : ICONE-17, 2009.

51. **ML. CORRADINI,** Fundamentals of Multiphase Flow, *http://wins.engr.wisc.edu/teaching/mpfBook/main.html.* Department of Engineering Physics, University of Wisconsin, Madison WI 53706, 2006.

52. **E.M. DILLA,** *Numerical and Experimental Study of Subcooled Boiling Flows at Low Pressures,* School of Aerospace, Mechanical and Manufacturing Engineering RMIT University, 2007, Thèse de Doctorat.

53. **RT. LAHEY,** *A mechanistic subcooled boiling model.* Toronto, Canada, 6th Int. Heat Transfer Conference, 1978,Vol. 1, pp. 293-297.

54. **SG. BANKOFF,** *On the mechanism of subcooled nucleate boiling, Part I: Preliminary considerations,* 1960, 4th National Heat Transfer Conference.

55. **V. PRODANOVIC,** *Bubble Behaviour in Subcooled Flow Boiling at Low Pressures and Flow Rates,* Vancouver, Canada, University of British Columbia, 2001, Thèse Ph.D.

56. **HC. UNAL,** *Void fraction and incipient point of boiling during subcooled nucleate flow boiling of water,* Int. J. Heat Mass Transfer, 1977, Vol. 20, 409-419.

57. **P. SAHA and N. ZUBER,** *Point of net vapor generation and vapor void fraction in subcooled boiling,* 1974, 5th Int. Heat Transfer Conference 4, B4.7 Proc.

58. **M. FERROUK,** *Contribution à l'étude de la crise d'ébullition à faible titre : Caléfaction,* Université M'hamed BOUGARA, Boumerdès, 2009, Thèse de Doctorat.

59. **J. BOSCARY,** *Transfert thermique et flux critique dans un écoulement hélicoïdal en tube chauffé asymétriquement,* Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, France, 1995. Thèse de Doctorat.

60. **M.Z. PODOWSKI,** *Toward mechanistic modeling of boilining heat transfer,* Nuclear Engineering and Technology, 2012, Vol. 44.

61. **P.M.V. SUBBARAO,** *Nucleate Boiling Heat Transfer,* Indian Institute of Technology Delhi, 2011.

62. **K.E. GUNGOR and R.H.S. WINTERTON,** *A general correlation for flow boiling in tubes and annuli,* International Journal of Heat and Mass Transfer, 1986, Vol. 3, pp. 351–358.

63. **N.B. CHIEN, P.Q. VU, K.I. CHOI and J.T. OH,** *A general correlation to predict the flow boiling heat transfer of R410a in macro/mini-channels,* Purdue University, 2014, International Refrigeration and Air Conditioning.

64. **W. QU and I. MUDAWAR,** *Flow boiling heat transfer in two-phase micro-channel heat sinks - I. Experimental investigation and assessment of correlation methods,* International Journal of Heat and Mass Transfer, 2003, Vol. 46, pp. 2755–2771.

65. **N. KURUL and M. PODOWSKI,** *Multidimensional effects in forced convection subcooled boiling,* In Proceedings of the 9th Heat Transfer Conference, 1990, pp. 21–26.

66. **N. BASU, G.R. WARRIER and V.K. DHIR,** *Wall heat flux partitioning during subcooled flow boiling : Part 1 - model development,* Journal of Heat Transfer, 2005, Vol. 127, pp. 131–140.

67. **N. BASU, G.R. WARRIER and V.K. DHIR,** *Wall heat flux partitioning during subcooled flow boiling : Part 2 - model validation,* Journal of Heat Transfer, 2005,Vol. 127, pp. 141–148.

68. **G.H. YEOH and J.Y. TU,** *A unified model considering force balances for departing vapour bubbles and population balance in subcooled boiling flow,* Nuclear Engineering and Design, 2005, Vol. 235, pp. 1251–1265.

69. **G. H. YEOH and J. Y. TU,** *MODELLING SUBCOOLED BOILING FLOWS,* New York : Nova Science Publishers, Inc., 2009.

70. **T. SALNIKOVA,** *Two phase CFD analyses in fuel assembly sub-channels of pressurized water reaxtors under swirl conditions,* Université Technique de Dresde, Allemagne, 2008. Thèse Ph.D.

71. **R. A. HART,** *Numerical Modelling Of Tunnel Fires And Water Mist Suppression,* University of Nottinngham, December 2005. Thèse de doctorat.

72. **D. VIDAL and F. BERTRAND,** *Modélisation numérique en génie chimique,* Polytechnique, Montréal, 2015.

73. **M.A. HABIB, M.A. NEMITALLAH and M. EL-NAKLA,** *Current status of CHF predictions using CFD modeling technique and review of other techniques especially for non-uniform axial and circumferential heating profiles,* Annals of Nuclear Energy, 2014, Vol. 70, pp. 188–207.

74. **H. LI, S. A. VASQUEZ, H. PUNEKAR and R. MURALIKRISHNAN,** *Prediction of boiling and critical heat flux using an Eulerian multiphase boiling model*, Proceedings of the ASME 2011 International Mechanical Engineering Congress & Exposition (IMECE2011), 11-17 November 2011.

75. **G. N. PATEL,** *CFD Simulation of Two-phase and Three-phase Flows in Internal-loop Airlift Reactors,* Lappeenranta University of Tecchnology, 2010, Thèse de Doctorat.

76. **R. RAGAB and T. WANG,** *Investigation of applicability of using water mist for cooling high pressure turbine components via rotor cavity feed channels*, Proceeding of HT2013 ASME Summer Heat Transfer Conference (HT2013-17150), 14-19 July 2013.

77. **M.L. DE BERTODANO and D. PRABHUDHARWADKAR,** *CFD two fluid model for adiabatic and boiling bubbly flows in ducts*, School of Nuclear Engineering, Purdue University, USA, 2010.

78. **S. ANTAL and al.,** *Analysis of phase distribution in fully developed laminar bubbly two-phase flow,* Int. J. Multiphase Flow, 1991, Vol. 7, pp. 635-652.

79. **L.F. MOGUEL,** *Modélisation par CFD de la précipitation du carbonate de baryum en réacteur à lit fluidisé*, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2009, Thèse de Doctorat.

80. **P. LONGMIRE,** *Computational fluid dynamics (cfd) simulations of aerosol in a u-shaped steam generator tube*, Texas A&M University, 2007, Thèse de Doctorat.

81. **M. OUCHERFI,** *Contribution à l'étude de la ventilation transversale lors d'un incendie en tunnel routier*, Université Claude Bernard, Lyon, France, 2009, Thèse de Doctorat.

82. **A. QUARTERONI, R. SACCO and F. SALERI,** *Méthodes Numériques: Algorithmes, analyse et applications,* Italia, Springer Science & Business Media, 2007.

83. **A. CHATELAIN,** *Simulation des Grandes Echelles d'écoulements turbulents avec transferts de chaleur*, Institut National Polytechnique de Grenoble, France, 2004. Thèse de Doctorat.

84. **ANSYS Inc.,** Fluent User's Guide Version 14.5.0, Fluent, Inc, 2012.

85. **A. BELLIVIER,** *Modélisation numérique de la thermo-aéraulique du bâtiment : des modèles CFD à une approche hybride volumes finis/zonale*, Université de la Rochelle, France, 2004. Thèse de Doctorat.

86. **Q. ARAUD,** *Simulations des écoulements en milieu urbain lors d'un évènement pluvieux extrême*, Universite de Strasbourg, France, 2012. Thèse de Doctorat.

87. **D. RUELLE,** *Thermodynamic Formalism: The Mathematical Structures of Equilibrium Statistical Mechanics,* Cambridge University Press, 2004.

88. **K. KNOBLOCH, H.J. KRETZSCHMAR and A. DITTMANN,** *Equations T(p,h), v(p,h) and T(p,s), v(p,s) for the Critical and Supercritical Regions of Water*, Boulder, 15th Symposium on Thermophysical Properties, 2003.

89. **V. KULINSKII and N. MALOMUZH,** *Properties of water near its critical point, Soft Matter under Exogenic Impacts,* Springer, 2007, pp. 287–304.

90. **W. WAGNER and H.J. KRETZSCHMAR,** *International Steam Tables,* Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.

91. **W. WAGNER and A. PRUB,** *The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use*, J. Phys. Chem., 2002, Vol. 31, pp. 387-535.

92. **A. H. HARVEY,** *Thermodynamic Properties of Water: Tabulation from the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use,* 1998, NISTIR 5078.

93. **D. EISENBERG and W. KAUZMANN,** *The structure and properties of water*, Oxford University Press, 2006.

94. **A. B. KAPLUN and A. B. MESHALKIN,** *Thermodynamic Validation of the Form of Unified Equation of State for Liquid and Gas,* High Temperature, 2003, Vol. 41, pp. 319–326.

95. **I. VINCENT.** *Eléments de mathématiques appliquée,* Sciences.ch, 2005.

96. **W. GERSTNER and W.M. KISTLER,** *Spiking Neuron Models Single Neurons, Populations, Plasticity,* Cambridge University Press, 2002.

97. **S. GUANGHUI and al.,** *Application of an artificial neural network in reactor thermohydraulique problem: Prediction of critical heat flux,* Journal of Nuclear Science and Technology, 2002, Vol. 39, pp. 564-571.

98. **B. VIROLE,** *Réseau de neurones et psychométrie, Etude prospective des applications possibles des réseaux de neurones formels dans le traitement des données psychométriques,* Editions du Centre de Psychologie Appliquée - ECPA, 2001.

99. **P.D. McNELIS,** *Neural Networks in Finance: Gaining Predictive Edge in the Market,* Elsevier Academic Press, 2005.

100. **I. RIVALS,** *Les réseaux de neurones formels pour le pilotage de robots mobiles FLUX,* Revue de l'Association Amicale Les Ingénieurs SUPÉLEC, 1996.

101. **L. DRICOT and P. LISON,** *Conception d'un classifieur homme/femme pour la reconnaissance de visages,* Université Catholique de Louvain, 2005.

102. **T.L. FINE,** *Feedforward neural network methodology, Statistics for engineering and information science,* New York : Springer-verlag, 1999.

103. **W.S. McCULLOCH and W.H. PITTS,** *A logical calculus of the ideas imminent in nervous activity,* Bulletin of Mathematical Biophysics, 1943, Vol. 5, pp. 115-133.

104. **E. DAVALO and P. NAÏM,** *Réseaux de neurones,* Eyrolles, 1993.

105. **B. MOHAMEDI.** *Modélisation et estimation numérique des propriétés thermodynamique et de transport de l'eau aux états liquide et vapeur,* Université de Médéa, 2010. Mémoire de Magister.

106. **A. BOUZIDI,** *Méthode des réseaux de neurones pour le calcul des coefficients pertinents des phénomènes de transport : Viscosité, Conductivité et Diffusion Moléculaire des Gaz*, Université de Médéa, 2006. Mémoire de Magister.

107. **M. PARIZEAU,** *Réseaux de neurones*, Université LAVAL, 2004.

108. **A.K. JAIN and J. MAO,** *Artificial neural networks : A tutorial*, Cybernetics IEEE, 1996.

109. **G. HINTON,** *Connectionnist Learning Procedures*, Artificial Intelligence, 1989.

110. **D.W. MARQUARDT,** *An Algorithm for Least-Squares Estimation of Non-linear Parameters*, Journal of the Society of Industrial and Applied Mathematics, 1963, Vol. 11, pp. 431-441.

111. **S. THIRIA, Y. LECHEVALLIER, O. GASCUEL and S. CANU,** *Statistiques et Méthodes Neuronales*, Dunod, 1997.

112. **G. DREYFUS and al,** *Réseaux de Neurones Méthodologie et Applications*, Eyrolles, 2002.

113. **C. SI-MOUSSA S. HANINI, R. DERRICHE, M. BOUHEDDA and A. BOUZIDI,** *Prediction of high-pressure vapor liquid equilibrium of six binary systems, carbon dioxide with six esters, using an artificial neural network model*, Brazilian Journal of Chemical Engineering, 2008, Vol. 25, pp. 183 - 199.

114. **E.W. WASHBURN,** *International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology*, Knovel, 2003.

115. **M.W. CHASE and al.,** *JANAF Thermochemical Tables*, Suppl., J. Phys. Chem. Ref. Data, 1985, Vol. 14.

116. **C.L. YAWS,** *Yaws Handbook of thermodynamic and physical properties of chemical compounds*, knovel, Norwich, 2004.

117. **A.R.H. GOODWIN, K.N. MARSH and W.A. WAKEHAM,** *Measurement of the thermodynamic properties of single phases : Experimental thermodynamics*, ELSEVIER SCIENCE B.V, International Union of Pure and Applied Chemistry, 2003, Vol. VI. IUPAC Chemical Data Series No.40.

118. **G.F.C. ROGERS and Y.R. MAYHEW,** *Thermodynamic and Transport Properties of Fluids: SI Units*, Blackwell Publishing Ltd, 2004.

119. **K. ANNAMALAI and I.K. PURI,** *Advanced thermodynamics engineering*, CRC press LLC, 2002.

120. **C.L. YAWS,** *Chemical properties handbook*, McGRAW-HILL, 2006.

121. **K. STOWE,** *An introduction to thermodynamics and statistical mechanics*, Cambridge University Press, 2007, Vol. second edition.

122. **H. DEMUTH, M. BEALE and M. HAGAN,** *Neural Network Toolbox 6, User's Guide.* Matlab, MathWorks, Inc., 2009.

123. **A. ARAREM, A. BOUZIDI B. MOHAMEDI and O. BOURAS,** *Modeling of fixed-bed adsorption of Cs^{+} and Sr^{2+} onto clay-iron oxide composite using artificial neural network and constant-pattern wave approach,* Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 2014, Vol. 301, pp. 881-887.

124. **A. BOUZIDI, S. HANINI, F. SOUAHI, B. MOHAMMEDI and M. TOUIZA,** *Viscosity calculation at moderate pressure for nonpolar gases via neural network,* Journal of Applied Sciences, 2007, Vol. 17, pp. 2550-2455.

125. **A. BOUZIDI, D. KHELFI and F. REBHI,** *Thermal Conductivity Calculation at Moderate Pressure for Polyatomic Gases Using a Neural Network Approach,* International Journal of Engineering and Advanced Technology (IJEAT), 2013, Vol. 2.

126. **M.L. LU, C. MCGREAVY and E.K.T. KAM,** *Prediction of Thermal Conductivity of Pure Liquids and Mixtures Using Neural Network,* Journal of Chemical Engineering of Japan, 1997, Vol. 30.

127. **M.J. LEE, S.M. HWANG and J.T. CHEN,** *Density and Viscosity Calculations for Polar Solutions via Neural Networks,* Journal of Chemical Engineering of Japan, 1994, Vol. 27.

128. **J. HOMER and al.,** *Artificial Neural Networks for Prediction of Liquids Viscosity, Density, Heat of Vaporization, Boiling Point and Pitzer's Acentric Factor,* Phys. Chem. Chem. Phys, 1999, Vol. 1, pp. 4075-4081.

129. **P. RAI and al.,** *Prediction of Viscosity of Clarified Fruit Juice Using Artificial Neural Network: A Combined Effect of Concentration and Temperature,* Journal of Food Engineering, 2005, Vol. 68, pp. 527-533.

130. **G. SCALABRIN, L. BETTIO, P. MARCHI, L. PIAZZA and D. RICHON,** *An Extended Equation of State Modeling Method : I. Pure Fluids,* International Journal of Thermophysics, 2003, Vol. 27.

131. **G. SCALABRIN, C. CORBETTI and G. CRISTOFOLI,** *A Viscosity Equation of State for R123 in the Form of Multilayer Feed Forward Neural networks,* International Journal of Thermophysics, 2001, Vol. 22.

132. **B. MOHAMEDI, S. HANINI, A. ARAREM and N. MELLEL,** *Simulation of nucleate boiling under ANSYS Fluent code by using RPI model coupling with artificial neural networks,* Nuclear Science and Techniques, 2015, Vol. 26.

133. **ANDYC CREATION AND KATMAR SOFTWARE,** WASP for Windows, 2004. Version 2.0.36.

134. **B. MOHAMEDI, S. HANINI and N. MELLEL,** *Etude de l'ébullition nucléée dans un canal vertical avec transfert de chaleur conjugué par une approche CFD,* Ouargla, 21-22 Avril 2015, Journées d'Études Nationales de Mécanique, JENM'2015.

135. **G.G. BARTOLOMEI and V.M. CHANTURIYA,** *Experimental study of true void fraction when boiling subcooled water in vertical tubes,* Thermal Engineering, 1963, Vol. 14, pp. 123–128.

136. **G.G. BARTOLOMEI and V.I. GORBUROV,** *Experimental study of vapour phase condensation in liquid subcooled below saturation temperature*, Heat Prod, 1969, Vol. 12, pp. 58–62.

137. **H. LI, H. PUNEKAR, S.A. VASQUEZ and al.,** *Prediction of boiling and critical heat flux using an Eulerian multiphase boiling model*, Colorado, USA, 2011. IMECE.

138. **Y. YIZHOU and U. RIZWAN,** *CFD Simulation of research reactor, Mathematics and Computation*, Palais des Papes, Avignon, France, 12-15 Septembre, 2005, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications.

139. **M.D. MAT, K. ALDAS and Y. KAPLAN,** *Numerical investigation of subcooled boiling in a vertical pipe using a bubble-induced turbulence model*, Turkish J Eng Env Sci, 2002, Vol. 26, pp. 275–284.

140. **J.C. PASSOS,** *Transfert de chaleur en ébullition libre*, Lyon, France, 20-24 Octobre, 2008, INSA.

141. **S. ANDERSSON, A. MINGO and M. MAJED,** *Westinghouse BWR and PWR Fuel Thermal Hydraulic Test Facility in Sweden*, Portorož, Slovenia, 8-11 Septembre, 2008, Proceedings of the International Conference Nuclear Energy for New Europe.

142. **O. NYLUND,** *Upgrade of the FRIGG test loop for BWR fuel assemblies*, Sweden, 1997, ABB Review.

143. **H. ANGLART and O. NYLUND,** *CFD application to prediction of void distribution in two-phase bubbly flows in rod bundles*, Nuc. Sci. Eng, 1996, Vol. 163, pp. 81-98.

144. **TH. FRANK,** *Multiphase Flow Modeling with Application to Flows through Fuel Rod Bundles of Nuclear Reactors*, KTH, Stockholm, 10-11 Octobre, 2006, Workshop on Flow & Heat Transfer in Nuclear Fuel Assemblies.

145. **M. KIMA, Y.S. CHOIA, H.K. KIMAand S. H. CHOIB,** *CFD Prediction of Two-phase Fluid Flow Characteristics Inside a Fuel Channel of a CANDU-6 Reactor*, 27-28 Octobre, 2005. Transactions of the Korean Nuclear Society Autumn Meeting. pp. Busan, Korea.