

Utilisation du Serveur de Propriétés Thermophysiques CTP Lib

Introduction

La bibliothèque de prédiction des propriétés thermodynamiques des fluides CTP Lib a été développée sous Java et couplée au progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim. Cette bibliothèque, composée d'un ensemble de modules, permet de déterminer :

Pour les corps purs:

- Tensions de vapeur (Psat)
- Températures de saturation (Tsat)
- Fonctions d'état pour les fluides (h, s)
- Propriétés de transport (viscosité et conductivité)

Pour les mélanges:

- Points de bulle et points de rosée
- Flash isotherme
- Fonctions d'état pour les fluides (h, s)
- Propriétés de transport (viscosité et conductivité)

Ce guide a pour but d'expliquer comment utiliser cette bibliothèque couplée avec Thermoptim.

Sommaire

Utilisation du Serveur de Propriétés Thermophysiques CTP Lib	0
Introduction	0
1. Fonctionnement de la bibliothèque sous Thermoptim	1
2. Ajout d'un fluide	4
2.1 Fichier xml des propriétés du fluide.....	4
2.2 Déclaration du système dans le fichier CTPlib.mix	6
2.2 Déclaration du fluide dans le fichier mel_ext.txt	7

1. Fonctionnement de la bibliothèque sous ThermoOptim

L'utilisation de la bibliothèque de propriétés thermodynamiques des fluides est relativement simple.

Créez d'abord un composant. Ici, une transfo-point a été choisie pour simplifier. Entrez notamment le nom sous lequel apparaîtra le fluide externe qu'on souhaite utiliser.

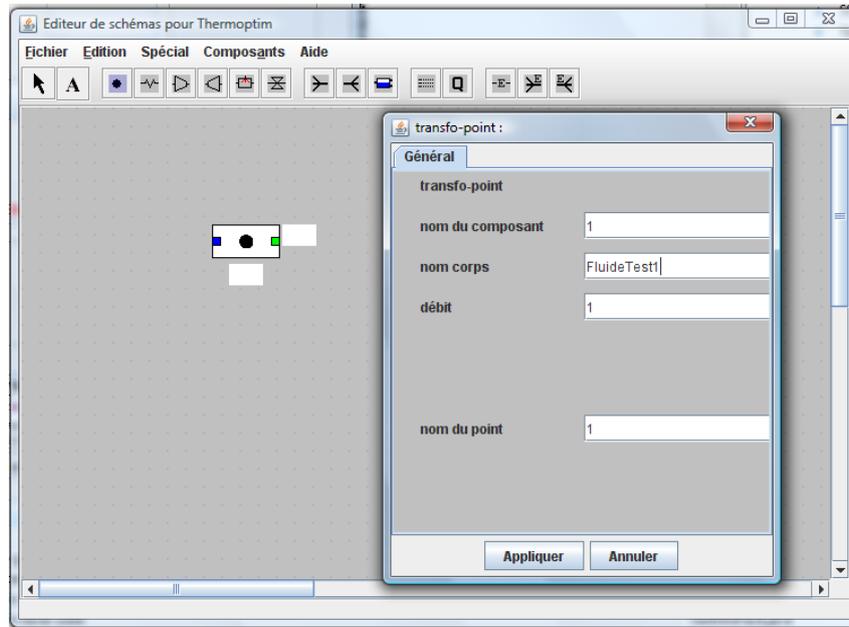


Figure 1 Chargement d'un fluide externe : étape 1.

Choix du fluide externe :

Une fois le composant créé sous ThermoOptim, double-cliquez sur l'élément pour faire afficher la fenêtre de la transfo. Puis cliquez sur « afficher » pour accéder au point amont ou au point aval. La fenêtre correspondant au calcul d'un point s'ouvre alors.

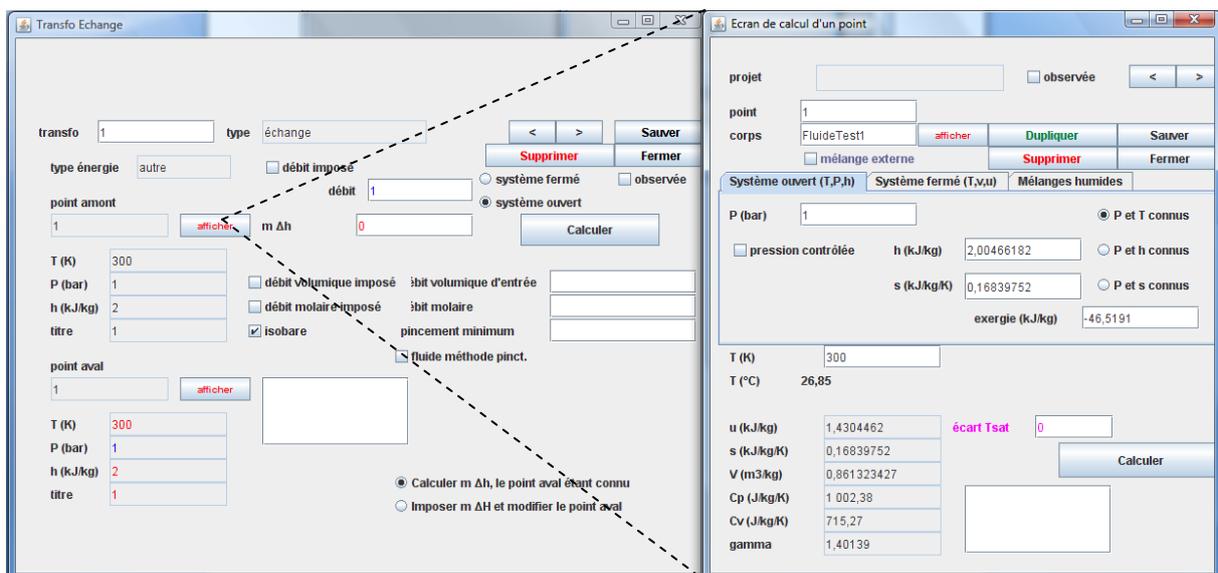


Figure 2 Chargement d'un fluide externe : étape 2.

Cochez la case « mélange externe » sous le nom du corps choisi, saisissez le nom si celui-ci n'apparaît pas, ici « FluideTest1 », puis appuyez sur la touche Entrée du clavier.

Figure 3 Chargement d'un fluide externe : étape 3.

La fenêtre de chargement des fluides apparaît. Choisissez le fluide dans le menu déroulant situé en bas à droite. Cliquez ensuite sur « Charger le mélange ». Il est également possible d'enregistrer le nom du corps choisi pour le réutiliser par la suite en cliquant sur « enregistrer ». Cependant le nouveau nom du corps n'apparaîtra dans les listes de corps qu'après redémarrage de Thermoptim. Les données sur le fluide sélectionné sont ainsi chargées. La figure ci-dessous montre l'exemple du chargement du fluide R365mfc.

Figure 4 Chargement d'un fluide externe : étape 4 (Corps Purs).

Si un mélange est choisi, il est nécessaire d'indiquer la fraction molaire ou massique des différents composants, en renseignant la colonne centrale. Le choix de travailler en variables molaires ou massiques est fait au moment de la conception du modèle de fluide. La figure ci-dessous montre l'exemple du chargement du R410A (variables molaires).

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
R32	0,6993	0,5019978
R125	0,3007	0,4980022

Figure 5 Chargement d'un fluide externe : étape 4 (Mélanges).

Suite aux actions précédentes, les options de calcul apparaissent dans l'écran de calcul de point.

Figure 6 Chargement d'un fluide externe : étape 5.

Pour calculer les propriétés thermodynamiques du fluide, il suffit de définir les 2 grandeurs connues : (P,T), (P,h) ou (P,s), puis d'entrer les valeurs correspondantes. Pour la pression et la température de saturation, cochez « imposer la pression de saturation » ou « imposer la température de saturation » au lieu de « non contraint ».

2. Ajout d'un fluide

Bien que l'utilisation du serveur de propriétés thermodynamiques des fluides soit simple et assez intuitive, la préparation des fichiers contenant les données d'entrée du fluide est plus délicate et doit être faite avec soin.

Il faut auparavant avoir rassemblé un certain nombre de propriétés thermophysiques précisées ci-dessous, qui permettent de caractériser complètement le fluide sur le plan thermodynamique.

2.1 Fichier xml des propriétés du fluide

Dans la bibliothèque CTP Lib, à chaque corps est associé un fichier xml. L'exemple suivant illustre la structure de ce fichier pour une cubique (système R410A, mélange R32+R125) :

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<MIXTURE Name="R410A" Description="CTP Library mixture data file" Model="CubicEOS" TrappRefFluid="R134a" >
  <FLUID_MODEL>
    <CUBIC CubicModel="2" ModelType="PengRobinson" Alpha="2" AlphaFunction="GeneraliseePR" />
  </FLUID_MODEL>
  <MIXRULES k00="0.0" k01="-5.469E-4" k10="-5.469E-4" k11="0.0" />
  <COMPONENT Name="R32" FullName="difluoromethane">
    <GENERAL Tc="351.255" Pc="5782000.0" Vc="1.2269811285149114E-4" M="52.024" omega="0.2769"
dipole="1.978" Tb="221.499" Tmini="136.44" Tref="298.15" Pref="100000.0" Tmaxi="435" Pmaxi="5.0E6">
    <!--T (K), Pc (Pa), Vc (m3/mol), M (kg/kmol)-->
  </GENERAL>
  <MODEL>
    <ALPHA c1="0.0" c2="0.0" c3="0.0" />
  </MODEL>
  <CP Model="1" Cpa="-4.9572993951" Cpb="161.9010514031" Cpc="-98.2908469939" Cpd="24.0709909279" Cpe="-
1.0302692021" Cpg="0.0917908675" Cpk="2.0246246223" />
  <PSAT Model="0" psat_A="25.11880209" psat_B="-11.70037444" psat_C="-8.546353426" psat_D="1.984377898"
psat_E="2.0" />
  <TSAT Model="0" Tsat_A="221.3787192" Tsat_B="19.55768083" Tsat_C="2.065270081" Tsat_D="0.216925775"
Tsat_E="0.013194268" />
  <INIT h0="0.0" s0="0.0" u0="0.0" />
</COMPONENT>
  <COMPONENT Name="R125" FullName="pentafluoroethane">
    <GENERAL Tc="339.173" Pc="3617700.0" Vc="2.092487968194183E-4" M="120.0214" omega="0.3052"
dipole="1.563" Tb="225.06" Tmini="172.62" Tref="298.15" Pref="100000.0" Tmaxi="435" Pmaxi="5.e6">
    <!--T (K), Pc (Pa), Vc (m3/mol), M (kg/kmol)-->
  </GENERAL>
  <MODEL>
    <ALPHA c1="1.0" c2="0.0" c3="0.0" />
  </MODEL>
  <CP Model="1" Cpa="86.5631366893" Cpb="243.7550148869" Cpc="-258.4102714026" Cpd="130.4745177202"
Cpe="-25.8613240666" Cpg="1.8085468996" Cpk="-19.5033864954" />
  <PSAT Model="0" psat_A="25.89762677" psat_B="-12.49477298" psat_C="-10.56156879" psat_D="2.409974844"
psat_E="2.0" />
  <TSAT Model="0" Tsat_A="221.3787192" Tsat_B="19.55768083" Tsat_C="2.065270081" Tsat_D="0.216925775"
Tsat_E="0.013194268" />
  <INIT h0="0.0" s0="0.0" u0="0.0" />
</COMPONENT>
```

<MIXTURE>

Les données sont structurées de la manière suivante :

- les attributs de la balise MIXTURE définissent le système : nom, type de modèle (CubicEOS), type de modèle de transport ;
- la balise FLUID_MODEL définit les propriétés spécifiques au modèle choisi. Comme il s'agit ici d'une cubique, la balise CUBIC définit le type de cubique et le type de fonction alpha, par leur numéro et leur libellé ;
- la balise MIXRULES définit les valeurs des coefficients d'interaction kij.
- à chaque composant du mélange correspond une balise COMPONENT définissant ses propriétés par différentes balises et leurs attributs : GENERAL pour les données de base, MODEL pour les propriétés spécifiques au modèle choisi, ici définies par ALPHA pour celles de la fonction alpha, CP pour la capacité thermique molaire Cp du gaz idéal, INIT pour les valeurs initiales ;

Le grand intérêt de ce mode de représentation est qu'il est très lisible et donc peu sujet à erreur, et surtout qu'il peut évoluer sans difficulté quand de nouveaux modèles sont ajoutés, car il suffit de leur associer de nouvelles balises avec leurs attributs pour compléter ceux qui existent.

Ce fichier contient les informations suivantes :

- Equation d'état choisie
- Nom du fluide
- Modèle de propriétés de transport choisi (attribut TrappRefFluid) : R134a correspond à Huber 2003, mieux adapté pour les réfrigérants, et propane à Huber 1996, mieux adapté pour les hydrocarbures
- Coefficients d'interaction binaire pour les mélanges
- Pour les cubiques, les codes sont : 0:Van der Waals, 1:RSK, 2:PR, 3: Patel & Teja 4: Harmens & Knapp, 5 : SRK controle
- Fonction alpha choisie. Les codes sont les suivants : 1) SRK généralisée, 2) PR généralisée, 3) Daridon & al, 4) SRK Twu & al, 5) Peng-Robinson Twu & al, 6) Stryjeck & Vera, 7) Mathias & Copeman, 8) généralisée avec P&T

Pour chaque composant, il faut connaître les caractéristiques suivantes :

- Nom du composant
- Température critique Tc (K)
- Pression critique Pc (Pa)
- Volume critique Vc (m³/mol)
- Masse molaire M (kg/kmol)
- Facteur acentrique omega
- Moment dipolaire : connaissance facultative qui permet de mieux calculer la viscosité du fluide
- Température de référence (K)
- Pression de référence (Pa)
- Température d'ébullition Tb (K)
- Température de calcul minimale Tmini (K)
- Température de calcul maximale Tmaxi (K)
- Pression de calcul maximale Pmaxi (Pa)

- Trois coefficients C1, C2, C3 pour la fonction alpha de Mathias-Copeman : ces paramètres doivent être ajustés à partir des données expérimentales et par rapport à un type d'équation d'état donné
- Corrélation du Cp (kJ/kmol/K)
- Enthalpie de référence
- Entropie de référence
- Energie interne de référence

Les estimations des pressions (P_{sat}) et températures (T_{sat}) de saturation ne sont plus nécessaires.

Le calcul de Cp est fait en utilisant la formulation polynomiale :

$$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4 + \frac{G}{T^2} + \frac{K}{T}$$

Le tableur « Cpgas_DIPPR_Thopt.xls » permet de faire la correspondance avec les valeurs de la formulation DIPPR :

$$C_p = A + B \left(\frac{\frac{C}{T}}{\sinh\left(\frac{C}{T}\right)} \right)^2 + D \left(\frac{\frac{E}{T}}{\cosh\left(\frac{E}{T}\right)} \right)^2$$

Le tableur « ajustCp.xlsx » permet quant à lui de déterminer les coefficients du Cp à partir d'un ensemble de couples (température (K), Cp (kJ/kg/K), en opérant comme indiqué dans sa feuille de calcul :

- 1) modifiez la valeur de la masse molaire en cellule G1
- 2) recopiez dans les colonnes A et B les valeurs de la température et de Cp
- 3) ajustez dans la zone [N3-T8] les paramètres de la régression en fonction du nombre de valeurs dont vous disposez
- 4) les valeurs de l'ajustement du Cp massique sont alors déterminées dans les cellules N3 à T3 et celles du Cp molaire dans les cellules N1 à T1, d'où elles peuvent être récupérées pour saisie dans le fichier xml du fluide.

La cellule N18 a été préformatée pour permettre de copier-coller directement ces valeurs. Attention simplement à remplacer ',' par '.' si votre ordinateur utilise la virgule comme séparateur décimal.

2.2 Déclaration du système dans le fichier CTPlib.mix

Le fichier xml doit être placé dans le sous-répertoire \mixtures\CTPlib_MEL du répertoire d'installation de Thermoptim.

Il doit ensuite être référencé dans le fichier CTPlib.mix du dossier \mixtures\, qui déclare les systèmes existants et sert à bâtir les listes qui apparaissent dans l'éditeur de corps externes de la figure 4.

Il se présente de la manière suivante :

fichier de mélanges externes				
butane-propane	butanePropane.xml	2	butane	propane
R410A	R410A.xml	2	R32	R125

R410ACPA	R410A_CPA.xml	2	R32	R125
R410ASaft	R410A_PCSaft.xml	2	R32	R125

Chaque système déclaré est défini sur une seule ligne, qui comporte, séparés par des tabulations, le nom du système, celui du fichier xml correspondant, le nombre de composants et leurs noms.

2.2 Déclaration du fluide dans le fichier mel_ext.txt

Le fichier CTPLib.mix déclare le système, c'est-à-dire une infinité de mélanges en fonction des compositions possibles, tandis que le fichier mel_ext.txt définit l'un de ces mélanges en spécifiant sa composition.

Lorsqu'un système est chargé selon la procédure expliquée section 1, une ligne est ajoutée au fichier mel_ext.txt du dossier data, ce qui permet de faire apparaître le nouveau corps dans la liste des corps externes disponibles qui est affichée lorsqu'on double-clique dans le champ du nom du corps de la fenêtre d'un point.

Lorsqu'on ajoute un nouveau corps externe, il est aussi possible d'ajouter soi-même une ligne dans ce fichier. Cette ligne est structurée de la manière suivante :

```
R410A_CPA    CTPLib mixtures R410ACPA    R32;0.6993;0.5019978    R125;0.3007;0.4980022
```

Elle comporte, séparés par des tabulations, le nom du corps externe, celui du type de la bibliothèque utilisée tel que défini dans la classe externe correspondante (ici CTPLib mixtures), le nom du système dans le fichier CTPLib.mix, puis, pour chaque composants, son nom et ses compositions molaire et massique, séparés par le caractère ' ; '.