

DESCRIPTION THERMODYNAMIQUE DES ECOULEMENTS DIPHASIQUES

HERVE LEMONNIER

CEA/Grenoble, *herve.lemonnier@cea.fr*

Tél. : 04 38 78 45 40, Fax : 04 38 78 50 36, GSM : 06 74 26 00 50

Saclay, Réunion Neptune-EOS du 25 juin 2003

SOMMAIRE

- Cadre monodimensionnel
- Description thermodynamique par l'équation d'état (ASHRAE)
- Description thermodynamique par l'énergie libre (NBS)
- Exemple 1 : Modèle homogène à l'équilibre thermodynamique (HEM)
- Exemple 2 : Modèle homogène avec relaxation du déséquilibre thermodynamique (HRM)
- Exemple 3 : Modèle à deux fluides
- Exemple 4 : Traitement approché des incondensables
- Exemple 5 : Lac de Nyos
- Conclusions

CADRE MONODIMENSIONNEL (1/3)

- Modèle à deux fluides moyenné sur la section et en temps
- Equations de bilan de :
 - Masse
 - Quantité de mouvement
 - Energie totale

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{A_k \langle \rho_k \psi_k \rangle_2} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{A_k \langle \rho_k \psi_k w_k \rangle_2} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{A_k \langle \mathbf{e}_z \cdot \mathbb{J}_k \rangle_2} - \overline{A_k \langle \rho_k \phi_k \rangle_2} \\ = - \overline{\int_{C(z,t)} (\dot{m}_k \psi_k + \mathbf{n}_k \cdot \mathbb{J}_k) \frac{dl}{\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{n}_{kC}}} - \overline{\int_{C_k(z,t)} (\mathbf{n}_k \cdot \mathbb{J}_k) \frac{dl}{\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{n}_{kC}}} \end{aligned} \quad (1)$$

CADRE MONODIMENSIONNEL (2/3)

Bilan	ψ_k	\mathbb{J}_k	ϕ_k	ϕ_i
Masse	1			
Q. de M. linéaire	\mathbf{v}_k	$-\mathbb{T}_k$	\mathbf{F}_k	
Q. de M. angulaire	$\mathbf{r} \times \mathbf{v}_k$	$-\mathbb{T}_k \cdot \mathbb{R}$	$\mathbf{r} \times \mathbf{F}_k$	
Energie totale	$u_k + \frac{1}{2}v_k^2$	$\mathbf{q}_k - \mathbb{T}_k \cdot \mathbf{v}_k$	$\mathbf{F}_k \cdot \mathbf{v}_k$	
Entropie	s_k	$\frac{\mathbf{q}_k}{T_k}$	$\frac{\Delta_k}{\rho_k}$	Δ_i

ψ : quantité transportée

\mathbb{J} : Flux associé

ϕ : Source

ϕ_i : Source interfaciale

CADRE MONODIMENSIONNEL (3/3)

Fermeture thermodynamique

6 variables indépendantes : α, p, w_k, T_k , un choix possible

Variables secondaires : ρ_k, h_k ou s_k fonctions de p et T_k .

Fermeture thermodynamique : $\rho(p_k, T_k), h(p_k, T_k)$ ou $s(p_k, T_k)$

Elimination des variables secondaires : $\left(\frac{\partial \rho_k}{\partial p_k}\right)_{T_k}, \left(\frac{\partial \rho_k}{\partial T_k}\right)_{p_k}, \left(\frac{\partial h_k}{\partial p_k}\right)_{T_k}, \left(\frac{\partial h_k}{\partial T_k}\right)_{p_k}$

Modèle du gaz parfait

$$\rho(p, T) = \frac{p}{RT} \quad (2)$$

$$h(p, T) = h_0 + C_p(T - T_0) \quad (3)$$

$$s(p, T) = s_0 + C_p \ln \frac{T}{T_0} - R \ln \frac{p}{p_0} \quad (4)$$

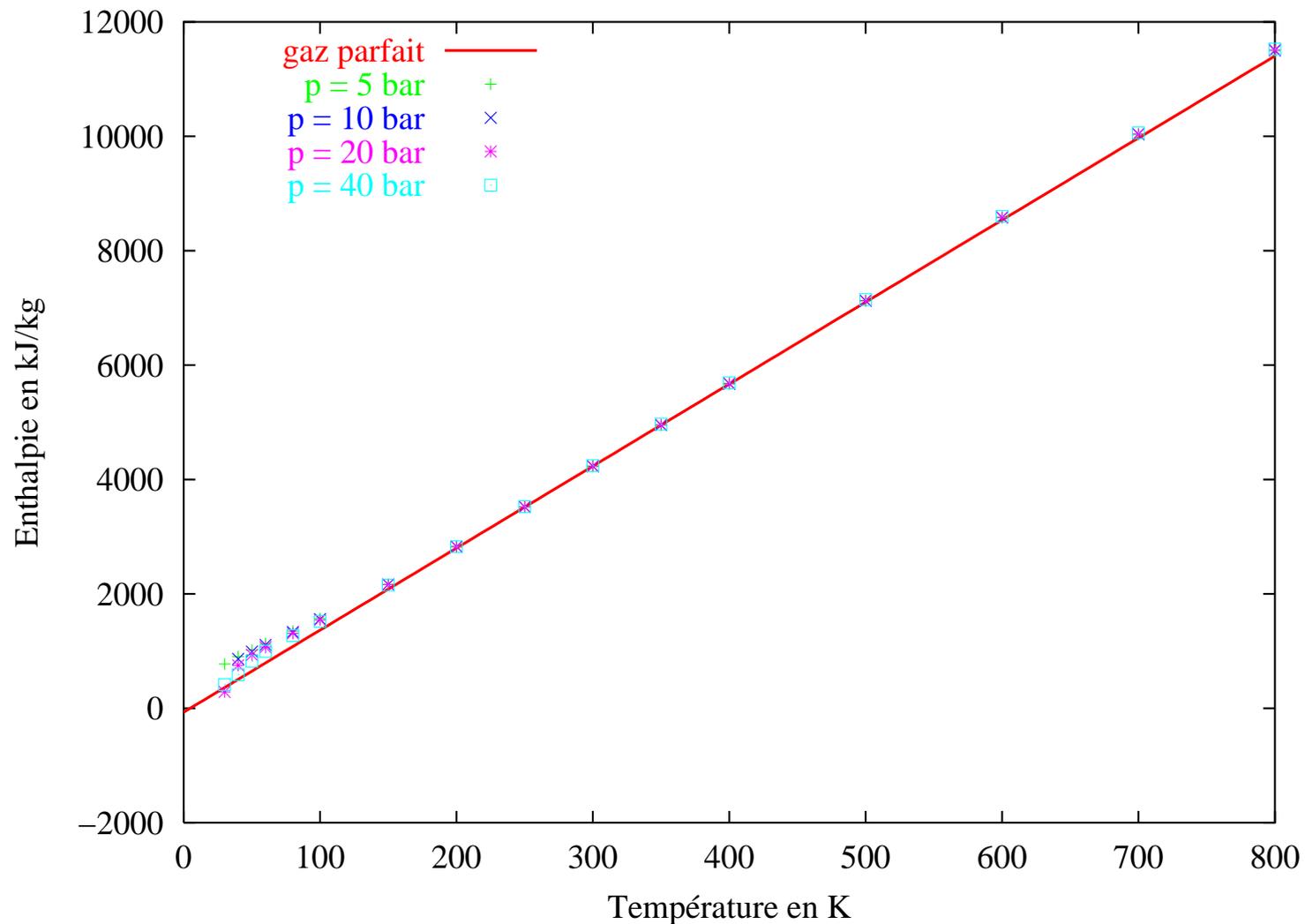
R : Constante des gaz parfaits. $R=8,31434$ J/mol/K

C_p : Capacité thermique massique à pression constante, $C_p = R\gamma/(\gamma - 1)$,

γ : Rapport des chaleurs spécifiques, pour une gaz diatomique, $\gamma=1,4$

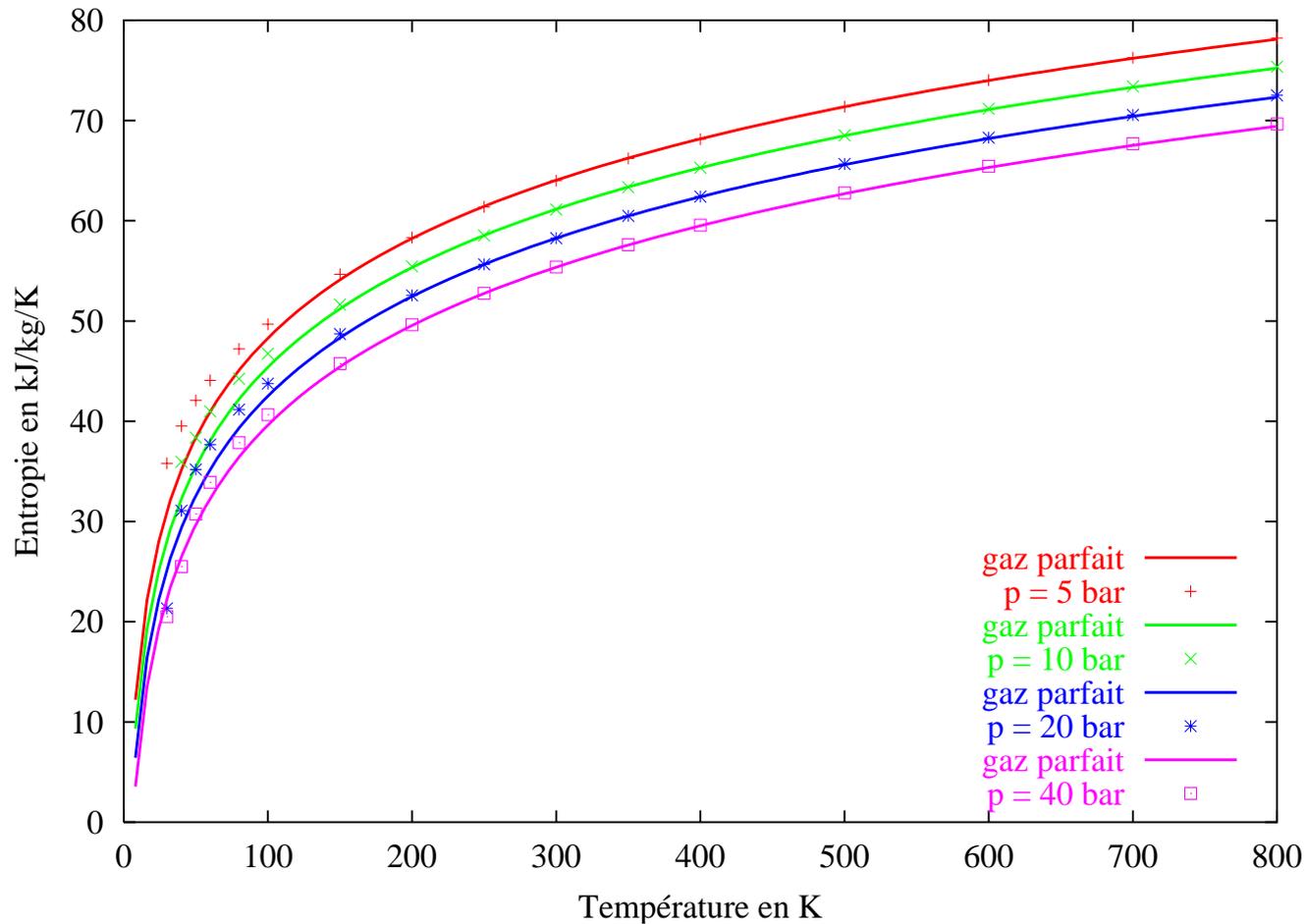
Un exemple le para-hydrogène (Lemonnier, 2003a)

HYDROGENE A BASSE PRESSION



Etat de référence : $p_0=20$ bar, $T_0=300$ K

HYDROGENE A BASSE PRESSION



Etat de référence : $p_0=20$ bar, $T_0=300$ K

Formulation par l'équation d'état (ASHRAE)

Tables du p-hydrogène (fréons divers, *etc.*) (Stewart *et al.* , 1987)

$$p(\rho, T) = p^0(\rho, T) + p^1(\rho, T) \quad (5)$$

Comportement gaz parfait

$$p^0(\rho, T) = \rho RT, \quad (6)$$

Correction comportement gaz réels

$$p^1(\rho, T) = \sum_{i=1}^{32} N_i(X)_i. \quad (7)$$

$X_i(\rho, T)$: monômes, $\rho^n T^m$, et $\rho^n T^m \exp(-\frac{\rho^2}{\rho_c^2})$ n et $m \in \mathbb{Q}$

N_i : Coefficients numériques ajustés sur des données thermodynamiques

ENTROPIE

$$s(\rho, T) = s^0(T) - R \ln \frac{\rho RT}{p_0} + s^1, \quad (8)$$

$s^0(T)$: Entropie du gaz idéal (p et $\rho \rightarrow 0$)

$C_p^0(T)$: Capacité thermique massique du gaz idéal

$s^1(\rho, T)$: Correction

$$s^0(T) = s^0(T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_p^0(T)}{T} dT, \quad (9)$$

$$s_1(\rho, T) = \int_0^\rho \left(\frac{R}{\rho} - \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right) d\rho = \left[\sum_{i=1}^{32} N_i (S)_i \right]_0^\rho, \quad (10)$$

$(S)_i$: fonctions élémentaires, $S_i = \int -\frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial X_i}{\partial T} \right)_\rho d\rho$

ENERGIE INTERNE ET ENTHALPIE

$$u(\rho, T) = u^0(T) + u^1(\rho, T) \quad (11)$$

$u^0(T)$: Energie interne du gaz idéal (p et $\rho \rightarrow 0$)

$C_p^0(T)$: Capacité thermique massique du gaz idéal

$u^1(\rho, T)$: Correction

$$u^0(T) = u^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_p^0(T) dT - R(T - T_0). \quad (12)$$

$$u_1(\rho, T) = \int_0^\rho \left(\frac{p}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right) d\rho = \left[\sum_{i=1}^{32} N_i (U)_i + T \sum_{i=1}^{32} N_i (S)_i \right]_0^\rho, \quad (13)$$

$(U)_i$: fonctions élémentaires, $U_i = \int \frac{(X)_i}{\rho^2} d\rho$

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (14)$$

CONDITIONS D'EQUILIBRE D'UNE PHASE

Analyse de l'évolution spontanée d'un système thermodynamique, critère de Gibbs-Duheim (Jamet, 2003) :

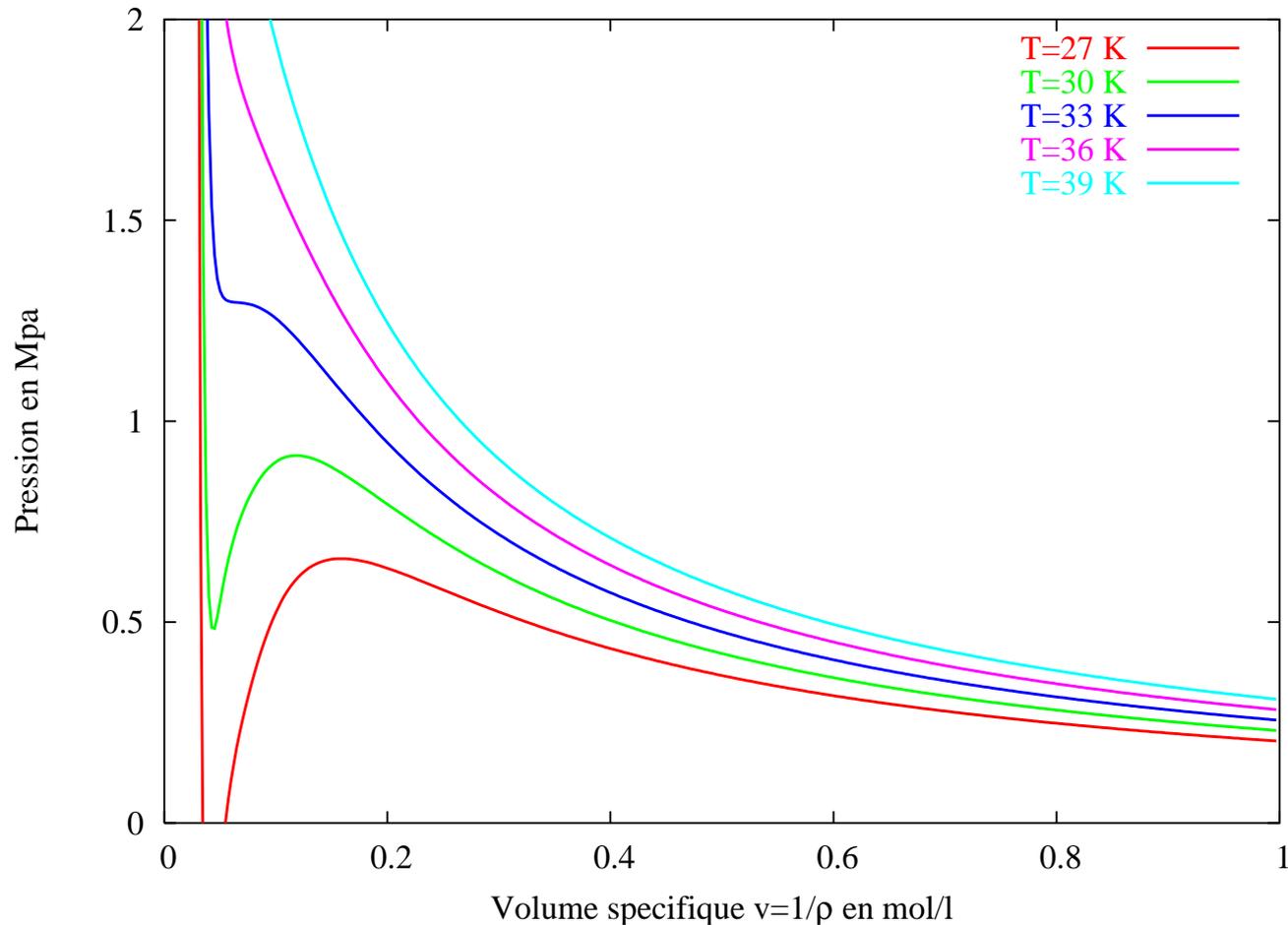
$$C_v \geq 0, \quad (15)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \leq 0. \quad (16)$$

En dessous de la température critique : 2 états stables entourant un état instable.

Au dessus de la température critique : 1 seul état stable.

HYDROGENE A BASSE TEMPERATURE : Pression



Pour une pression 3 ou 1 états possibles ($T = 30$ K)

Etat critique : $T_c \approx 33$ K, $P_c \approx 1,3$ MPa

CONDITIONS D'EQUILIBRE D'UNE PHASE

Energie libre

Analyse de l'évolution spontanée d'un système thermodynamique, critère de Gibbs-Duheim (Jamet, 2003) :

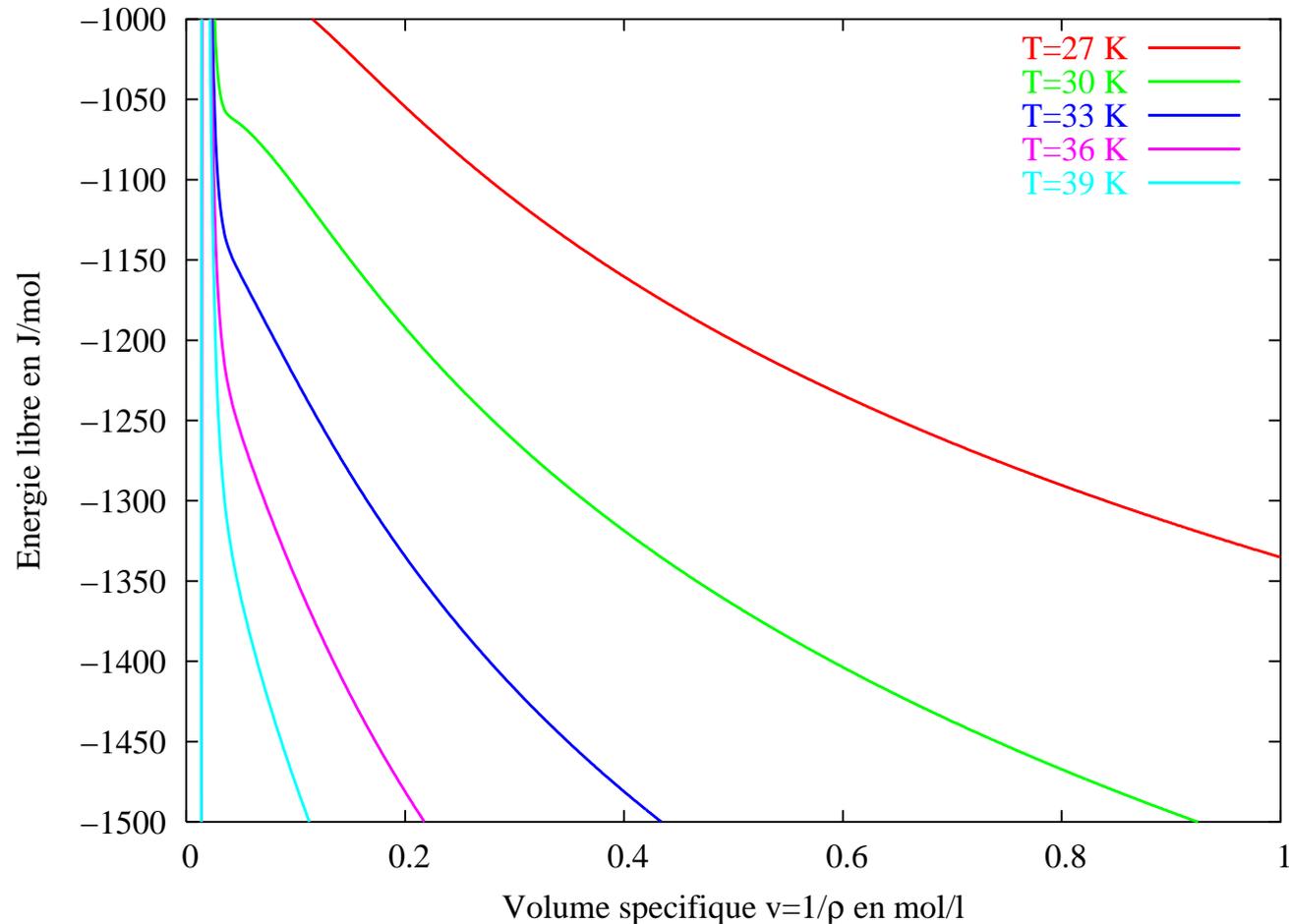
$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)_T \geq 0 \quad (17)$$

En dessous de la température critique : 2 états stables entourant un état instable.

Au dessus de la température critique : 1 seul état stable.

HYDROGENE A BASSE TEMPERATURE :

Energie libre



Pour une pression 3 ou 1 états possibles ($T = 30$ K)

Etat critique : $T_c \approx 33$ K, $P_c \approx 1,3$ MPa

CONDITIONS D'EQUILIBRE DE 2 PHASES (1/2)

Stabilité d'un système constitué de deux phases : 1 et 2.

$$f = \frac{f_1(v - v_1) - f_2(v - v_2)}{v_1 - v_2} \quad (18)$$

Critère de stabilité

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right)_T \geq 0 \quad (19)$$

Masse constante, v identique pour 1 phase et deux phases

Énergie du système diphasique voisin (sécante) supérieure à l'énergie du système monophasique de même volume massique.

(19) \Leftrightarrow courbe sous la sécante

CONDITIONS D'EQUILIBRE DE 2 PHASES (2/2)

$$T_1 = T_2 \quad (20)$$

$$p_1 = p_2 \quad (21)$$

$$g_1 = g_2 \quad (22)$$

Le point représentatif du système diphasique est sur la bitangente de $f(v)$,

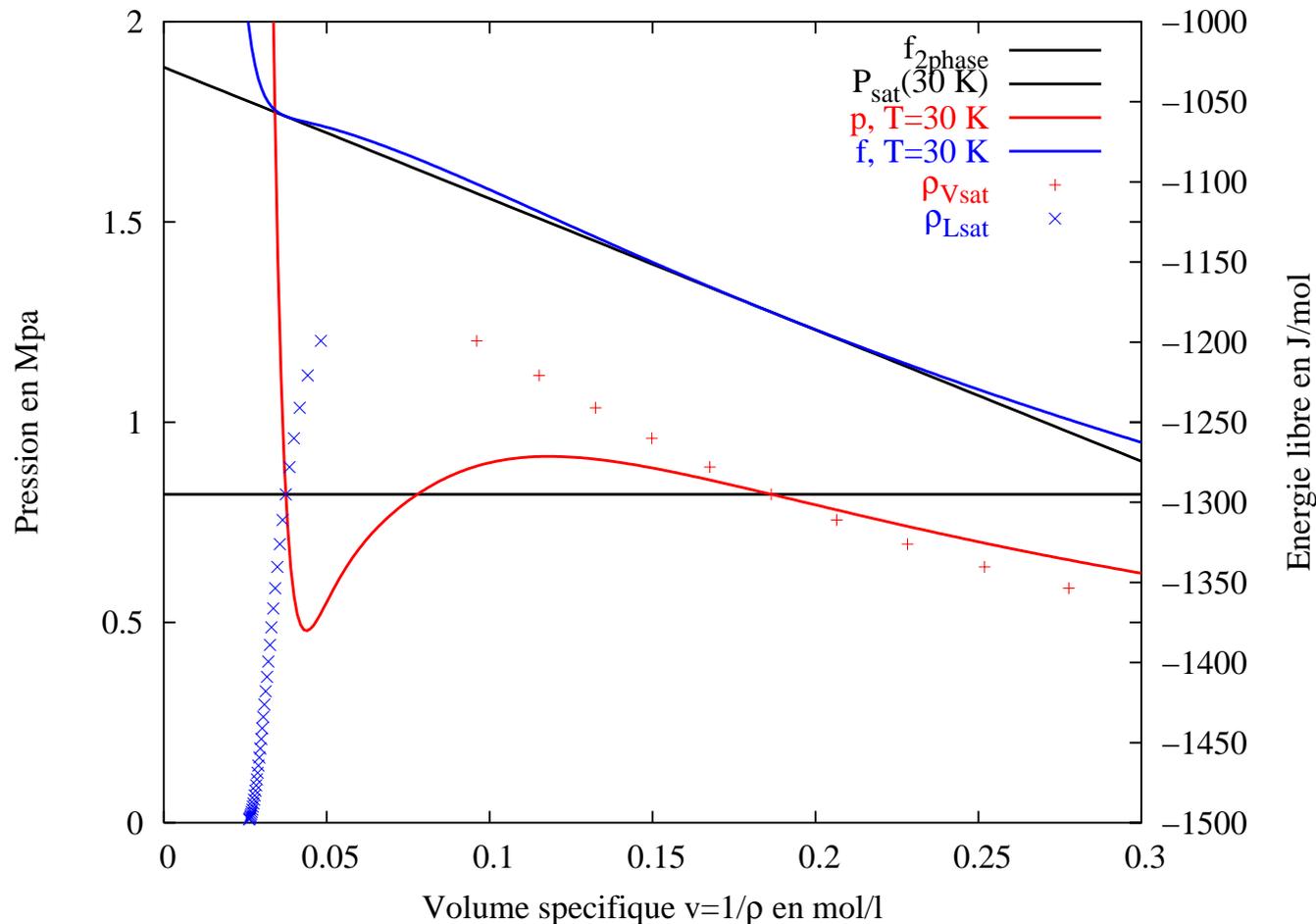
Relation de Maxwell (en pression).

Conditions d'équilibre thermodynamique local.

Dans une approche moyennée : équilibre thermodynamique

HYDROGENE A BASSE TEMPERATURE :

Energie libre et pression à 30 K



$$\text{Etats stables : } \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_T \leq 0 \text{ ou } \left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right)_T \geq 0$$

Etats métastables : stables seuls mais $f_{2phases} < f_{1phase}$

Coexistence des phases : $p_{sat}, \rho_{Lsat}, \rho_{Vsat}$

CALCUL PRATIQUE DES ETATS DE COEXISTENCE

Pour une température donnée,

$$p = p(\rho_L, T) \quad (23)$$

$$p = p(\rho_V, T) \quad (24)$$

$$g(\rho_L, T) = g(\rho_V, T) \quad (25)$$

Résoudre en p , ρ_L et ρ_V (Newton par ex.).

Etats thermodynamiquement cohérents (Maxwell et Clapeyron)

FORMULATION EN ENERGIE LIBRE (1/2)

Tables de l'eau NBS (Haar *et al.* , 1984)

$$f(\rho, T) = F_{base}(\rho, T) + F_{residual}(\rho, T) + F_{ideal\ gas}(T) \quad (26)$$

$F_{base}(\rho, T)$: Comportement Van der Waals

$F_{ideal\ gas}(T)$: Comportement à basse pression de la vapeur

$F_{residual}(\rho, T)$: Ajustée sur une base de données (0-1000°C, 0-10 kbar).

Reproduit correctement les états métastables.

FORMULATION EN ENERGIE LIBRE (2/2)

$$df = -pdv - sdT = \frac{p}{\rho^2}d\rho - sdT \quad (27)$$

Par définitions de l'énergie libre

$$p(\rho, T) = \rho^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \right)_T \quad (28)$$

$$s(\rho, T) = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\rho \quad (29)$$

Energie interne et enthalpies

$$u(\rho, T) = f + TS \quad (30)$$

$$h(\rho, T) = u + \frac{p}{\rho} = f + TS + \frac{p}{\rho} \quad (31)$$

$$g(\rho, T) = f + \frac{p}{\rho} \quad (32)$$

On se ramène à la formulation ASHRAE, mise en oeuvre voir, Lemonnier (2003b)

MODELE HOMOGENE A L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE (1/3)

Hypothèses du Modèle 1D : $\langle f \rangle_2 \approx f$ **et** $\langle f(\rho, T) \rangle_2 = f(\langle \rho \rangle_2, \langle T \rangle_2)$

Forces de volume, contraintes normales visqueuses et conduction axiale négligées :

$$\frac{\partial}{\partial t} A\rho + \frac{\partial}{\partial z} A\rho w = 0, \quad (33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} A\rho + \frac{\partial}{\partial z} A\rho w^2 = -A \frac{\partial p}{\partial z} - P\tau_w, \quad (34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} A\rho(h + \frac{1}{2}w^2) + A \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} A\rho w(h + \frac{1}{2}w^2) = P_c q, \quad (35)$$

$v = \frac{1}{\rho} = xv_V + (1-x)v_L$: masse volumique du mélange,

$h = xh_V + (1-x)h_L$: enthalpie du mélange,

$w = \frac{\alpha\rho_V w_V + (1-\alpha)\rho_L w_L}{\rho}$: vitesse moyenne des phases

MODELE HOMOGENE A L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE (2/3)

Equations manquantes (3)

Equilibre mécanique (homogène)

$$w_L = w_V \Rightarrow w_L = w_V = w, \quad (36)$$

Equilibre thermodynamique global (équilibré)

$$T_L = T_V = T_{sat}(p) \quad (37)$$

qui a pour conséquence,

$$v(x, p) = xv_V(p, T_{sat}(p)) + (1 - x)v_L(p, T_{sat}(p)) = xv_{Vsat}(p) + (1 - x)v_{Lsat}(p) \quad (38)$$

$$h(x, p) = xh_V(p, T_{sat}(p)) + (1 - x)h_L(p, T_{sat}(p)) = xh_{Vsat}(p) + (1 - x)h_{Lsat}(p) \quad (39)$$

MODELE HOMOGENE A L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE (3/3)

Variables indépendantes : x, w, p .

Eliminer $h(x, p)$ et $v(x, p)$:

$$\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)_p = h_{Vsat}(p) - h_{Lsat}(p) \triangleq \mathcal{L}(p) \quad (40)$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_x = x \frac{dh_{Vsat}}{dp} + (1 - x) \frac{dh_{Lsat}}{dp} \quad (41)$$

$$(42)$$

Attention (dérivées et changement de plan thermo):

$$\frac{dh_{Vsat}}{dp} = \frac{dh_V(p, T_{sat}(p))}{dp} = \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T + \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p \frac{dT_{sat}}{dp} \quad (43)$$

MODELE HOMOGENE AVEC RELAXATION DU DESEQUILIBRE THERMODYNAMIQUE (1/3)

$$\frac{\partial}{\partial t} A\rho + \frac{\partial}{\partial z} A\rho w = 0, \quad (44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} A\rho + \frac{\partial}{\partial z} A\rho w^2 = -A \frac{\partial p}{\partial z} - P\tau_w, \quad (45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} A\rho \left(h + \frac{1}{2} w^2 \right) + A \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} A\rho w \left(h + \frac{1}{2} w^2 \right) = P_c q, \quad (46)$$

$$\frac{\partial x}{\partial t} + w \frac{\partial x}{\partial z} = - \frac{x - x_{eq}}{\theta(\alpha, p)} \quad (47)$$

$x_{eq} = \frac{h - h_{Lsat}(p)}{h_{Vsat}(p) - h_{Lsat}(p)}$: Titre thermodynamique à l'équilibre

$\theta(\alpha, p)$: Temps de relaxation phénoménologique (super Moby Dick)

$$\begin{aligned} P \leq 10 \text{ bar} & \quad \theta = 6.51 \cdot 10^{-4} \alpha^{-0.257} \left| \frac{P_{sat} - P}{P_{sat}} \right|^{-2.24} \\ P > 10 \text{ bar} & \quad \theta = 3.84 \cdot 10^{-7} \alpha^{-0.540} \left| \frac{P_{sat} - P}{P_c - P_{sat}} \right|^{-1.76} \end{aligned} \quad (48)$$

MODELE HOMOGENE AVEC RELAXATION DU DESEQUILIBRE THERMODYNAMIQUE (2/3)

Equations manquantes (2)

Equilibre mécanique (homogène)

$$w_L = w_V \Rightarrow w_L = w_V = w, \quad (49)$$

Vapeur à l'équilibre thermodynamique global

$$T_V = T_{sat}(p) \quad (50)$$

Liquide éventuellement surchauffé (métastable)

$$h_L = h(p, T_L), \quad v_L = v(p, T_L) \quad (51)$$

MODELE HOMOGENE AVEC RELAXATION DU DESEQUILIBRE THERMODYNAMIQUE (3/3)

Variables indépendantes : x, w, p, T_L .

Eliminer $h(x, p, T_L)$ et $v(x, p, T_L)$:

$$\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)_{p, T_L} = h_{V sat}(p) - h_L(p, T_L) \neq L(p) \quad (52)$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_{x, T_L} = x \frac{dh_{V sat}}{dp} + (1 - x) \left(\frac{\partial h_L(p, T_L)}{\partial p}\right)_T \quad (53)$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial T_L}\right)_{x, p} = (1 - x) \left(\frac{\partial h_L(p, T_L)}{\partial T}\right)_p \quad (54)$$

$$(55)$$

MODELE A DEUX FLUIDES ET UN CONSTITUTANT

Les deux phases sont en déséquilibre :

$$h_L = h(p, T_L), \quad v_L = v(p, T_L) \quad (56)$$

$$h_V = h(p, T_V), \quad v_V = v(p, T_V) \quad (57)$$

$$(58)$$

Elimination : toutes les dérivées doivent être calculées

MODELE A DEUX FLUIDES AVEC INCONDENSABLES

Ecoulement d'eau et de vapeur en présence d'air (refroidissement de gaz chauds par injection d'eau liquide).

Voir l'annexe E de Lemonnier (2002)

MODELE D'ÉCOULEMENT AVEC GAZ DISSOUS

Écoulement d'eau contenant du gaz carbonique en solution.

Voir les problème résolu 2003 de Lemonnier (2002).

REFERENCES

- Haar, L., Gallagher, J. S., & Kell, G. S. 1984. *NBS/NRC Steam tables: Thermodynamic and transport properties and computer programs for vapor and liquid state of water in SI units*. Hemisphere and McGraw-Hill.
- Jamet, D. 2003. *Thermodynamique et transition de phase*. Cours INSTN, Thermohydraulique pour les réacteurs nucléaires, Grenoble mars 2003.
- Lemonnier, H. 2002. *Une introduction aux écoulements diphasiques*. Notes de cours à l'ENSHMG et ECP, HL-2003-007.
- Lemonnier, H. 2003a. *Écoulements compressibles d'hydrogène avec transferts de chaleur, réflexions préliminaires*. Notes personnelles HL-2003-007.
- Lemonnier, H. 2003b. *Mise en oeuvre de la formulation en énergie libre pour le calcul des propriétés thermodynamiques de l'eau dans le plan pression, température*. Tech. rept. SMTH/LDTA-2002-022. CEA/Grenoble.

Stewart, R. B., Jacobsen, R. T., & Penoncello, S. G. 1987. *ASHRAE Thermodynamic properties of refrigerants*. American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers, Inc.