

Modélisation des propriétés thermodynamique et de transport de l'eau aux états liquide et vapeur

B. Mohammedi¹, S. Hanini², N.Mellel¹ et M. Boumaza¹

¹Centre de Recherche Nucléaire de Birine B.P. 180, Aïn Oussera 17200, Algérie

²LBMPT Université de Médéa, C.P. 26000, Algérie

*Corresponding author: mohammedi_brahim@hotmail.com; Tel.: +213555294294; Fax: + 21327809813

ARTICLE INFO

Article History :

Received : 13/06/2019

Accepted : 24/05/2020

Key Words:

Modeling; Thermodynamics;
Neural networks; Delphi.

Mots clés:

Modélisation ;
Thermodynamique ; Réseaux
de neurones ; Delphi.

ABSTRACT/RESUME

Abstract: In this work, we are interested in the modeling of thermodynamic and transport properties of the water and steam with a wide range of pressure, temperature, enthalpy and entropy using artificial neural networks (ANN). These networks enable us to reproduce, as faithfully as possible, the properties concerned by the study, namely 21 properties in the saturation state, 17 properties for the superheated steam and for the subcooled liquid. These properties are expressed according to pressure and enthalpy or pressure and temperature, a formulation linking otherwise the temperature and enthalpy. The interest of these functions is to allow cover a wide area of use, single and two phase, thermodynamic properties with a single formulation.

Several networks are developed; the average relative error for the least estimated property does not exceed 2%. We then compiled all the networks in a visual application developed under Borland Delphi with an intuitive graphical user interface for greatest ease of use for calculation of water properties.

Résumé: Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la modélisation des propriétés thermodynamique et de transport de l'eau aux états liquide et vapeur avec une large gamme de pression, de température, d'enthalpie et d'entropie au moyen des réseaux de neurones artificiels ANN (Artificial Neural Network). Ces réseaux permettent de reproduire, le plus fidèlement possible, les propriétés concernées par l'étude, à savoir 21 propriétés à l'état de saturation, 17 propriétés pour la vapeur surchauffée et pour le liquide sous-refroidi. Ces propriétés sont exprimées en fonction de la pression et de l'enthalpie ou de la pression et de la température, une formulation reliant par ailleurs la température et l'enthalpie. L'intérêt de ces fonctions est de permettre de couvrir un large domaine d'utilisation, simple et double phase, des propriétés thermodynamiques avec une seule formulation.

Plusieurs réseaux sont développés, dont l'erreur relative moyenne pour la propriété la moins estimée n'excède pas 2 %. Nous avons, ensuite, compilé tous les réseaux dans une application visuelle élaborée sous Borland Delphi avec une interface graphique utilisateur intuitive pour une plus grande facilité d'utilisation pour le calcul des propriétés de l'eau.

I. Introduction

Au début du XX^{ème} siècle, 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".

A l'avènement du nucléaire, vers les années 50 du XX^{ème} siècle, surgi le problème de la limitation de la gamme de la température et de la pression, de ce fait ASME (American Society of Mechanical Engineers), a mener 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 nucléaire 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 90 du même siècle, 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 (International Association for the Properties of Water and Steam) a commencé à développer de nouvelles normes, tirant profit de nouvelles données et des avancées technologique pour développer des formulations nouvelles des propriétés thermodynamique. Les propriétés thermodynamique et de transport, bien quelles sont nécessaires pour l'étude des phénomènes physique, mais les démarches de leur

détermination demeurent une opération très délicate tant sur le plan théorique que sur le plan expérimental. Apporter une amélioration à la façon de leur estimation est plus que nécessaire, d'où l'utilisation de la nouvelle technique basée sur les réseaux de neurones artificiels est de grande importance. L'approche basée sur les réseaux de neurones est inspirée du traitement de l'information effectué par le cerveau, semble offrir un nouvel espace de modélisation.

II. Formulation industrielle d'IAPWS 1997

La formulation industrielle d'IAPWS de 1997, abrégée en IAPWS-IF97 (IAPWS Industrial Formulation 1997), pour les propriétés thermodynamiques et de transport de l'eau et de la vapeur, se compose d'un ensemble d'équations pour différentes régions qui couvrent le domaine de validité suivante [1]:

$$273.15 \text{ K} \leq T \leq 1073.15 \text{ K} \text{ et } 0 < p \leq 100 \text{ MPa}$$

$$1073.15 \text{ K} < T \leq 2273.15 \text{ K} \text{ et } 0 < p \leq 50 \text{ MPa}$$

La figure 1-a montre les cinq régions qui 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 de base, sont indiquées à l'intérieur de la figure 1-a.

La figure 1-b montre l'attribution des cinq équations de base aux régions correspondantes. Les frontières des régions peuvent être prises directement de la figure 1-b excepté la frontière entre les régions 2 et 3; cette frontière est définie par équation.

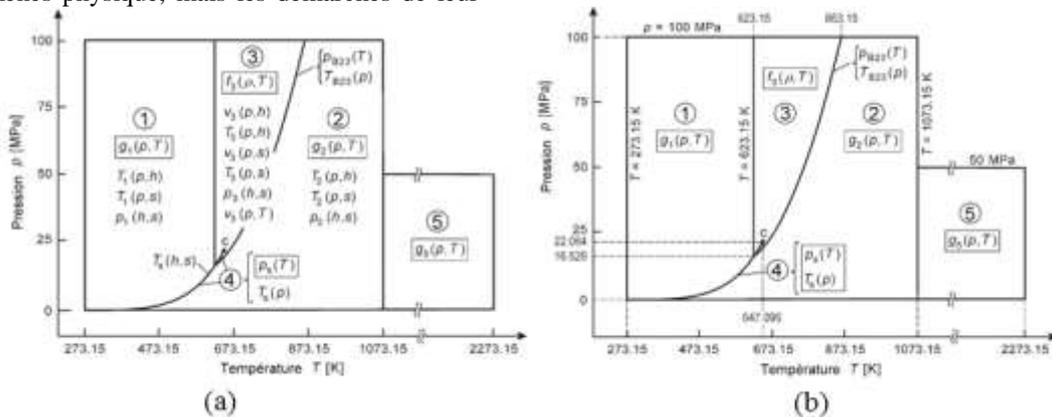


Figure 1. Régions et équations (a) et attribution des équations de base aux cinq régions (b) de la formulation IAPWS-IF97 [1].

III. Méthodologie de calcul

La méthodologie adoptée pour le calcul des propriétés thermodynamique et de transport de l'eau légère par la technique neuronale, est illustré par l'organigramme de la figure 2.

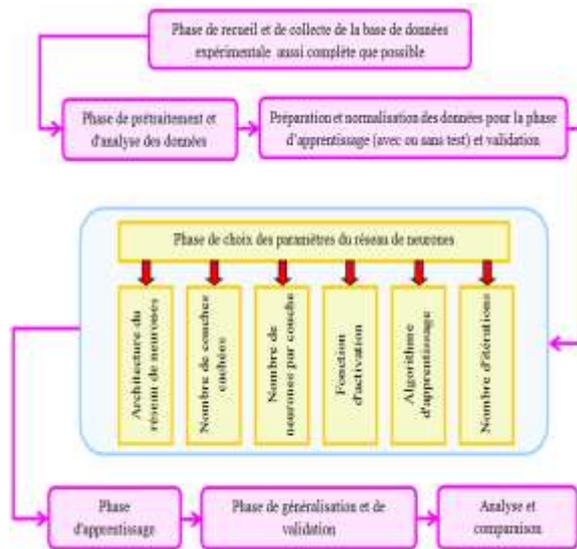


Figure 2 . Procédure de modélisation par les réseaux de neurones [2]

La variance d'un système thermodynamique donné peut être déterminée grâce à la règle des phases de Gibbs [3,4]:

$$v = c + n - \varphi \quad (1)$$

Avec :

v : est la variance du système, c'est-à-dire les degrés de liberté thermodynamiques à l'équilibre, c : est le nombre de constituants indépendants, n : est le nombre de facteurs physiques de l'équilibre, le plus souvent la température et la pression, donc $n \leq 2$ et enfin φ : 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, donc $c = 1$. 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 seule variable 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.

L'élaboration d'une base de données est une phase décisive dans la conception d'un modèle neuronal. La sélection des entrées consiste à déterminer les variables pertinentes par rapport à la grandeur à modéliser. Elle vise deux points essentiels [5] la réduction de la dimension de l'espace de représentation des variables du modèle et l'élimination des entrées qui n'ont pas ou peu d'influence sur la sortie.

Avant tout apprentissage, il est indispensable de normaliser et de centrer toutes les variables d'entrées. Il faut aussi, qu'au lancement de l'apprentissage, les valeurs initiales des poids doivent être différentes de zéro pour que l'algorithme de rétro-propagation puisse fonctionner. D'autre part, l'utilisation de valeurs élevées peut provoquer un phénomène de saturation prématurée qui contribue à diminuer la vitesse de convergence de l'apprentissage [5,6].

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 [7].

$$y = \frac{(y_{\max} - y_{\min})(x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min})} + y_{\min} \quad (2)$$

IV. 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. Dans notre cas, il s'agit d'approximer les propriétés thermodynamique 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 [5,8-15], ne peut être en général qu'un réseau non bouclé type MLP (Multi Layer Perceptron).

Pour l'étude statistique et afin d'évaluer la performance du réseau, on a utilisé les paramètres suivants [16,17]:

- Squared correlation coefficient R (Coefficient de corrélation) :

$$R = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y_i^t)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - y_0)^2} \quad (3)$$

Avec :

$$y_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - y_i^t) \quad (4)$$

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

$$RMSE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - y_i^t)^2 \right]^{1/2} \quad (5)$$

- Absolute error AE (Erreur absolue) :

$$AE_i = \left(\frac{|y_i^t| - |y_i|}{|y_i^t|} \right) 100 \quad (6)$$

- Average absolute error AAE (Erreur absolue moyenne) :

$$AAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n AE_i \quad (7)$$

- Standard deviation STDEV (Déviation standard) :

$$STDEV = \left[\frac{n \sum_{i=1}^n AE_i^2 - (\sum_{i=1}^n AE_i)^2}{n(n-1)} \right]^{1/2} \quad (8)$$

Ayant la base de données expérimentale [1,18-24] de tout l'intervalle depuis l'état liquide à l'état vapeur en passant par la phase de saturation, nous avons entraîné nos réseaux pour prédire les propriétés de l'eau. Une dizaine de modélisations, selon l'état de l'eau, saturation F(T) et F(p) et les couples F(p,T), F(p,h) et F(p,s) pour la région monophasée. Un soft sous Delphi est réalisé enfin du travail pour le calcul de plus de 20 propriétés thermodynamique et de transport de l'eau et de la vapeur basés sur les modèles des réseaux de neurones. pas seulement pour les variables d'entrées F(p,T), mais également pour F(T), F(p), F(p,h) et F(p,s) [25,26]. La base de données expérimentale est subdivisée en trois parties,

chaque partie concerne une région, la région diphasique, la région monophasique et la région à très haute température. Chaque base de données des trois régions est à son tour divisée en deux ou plus, selon la disponibilité des données.

V. Résultats

V.1. Région diphasique

Dans la région diphasique, on à 30 paramètres à déterminer et suite à la non disponibilité d'assez de données, le réseau est subdivisé en deux réseaux, le premier réseau comporte 17 paramètres de sorties et le second 13 paramètres de sorties. Pour les deux réseaux, la température de saturation est prise comme étant le paramètre d'entrée, les 17 paramètres de sorties du premier réseau sont : la pression de saturation, pour le volume, l'enthalpie, l'entropie, la capacité thermique isobare, la célérité du son, le coefficient de compression isentropique, la viscosité dynamique et enfin la conductivité thermique sont pour les deux phases liquide et vapeur. Les 13 paramètres de sorties, pour le deuxième réseau, sont : la capacité thermique isochore, le coefficient de dilatation isobare, la compressibilité isothermique, la viscosité cinématique, la constante diélectrique, le coefficient de Joule-Thomson pour les deux phases liquide et vapeur et enfin la tension de surface.

Le troisième réseau de la région diphasique, afin d'éviter l'apprentissage de toute la base de données on inverse l'entrée avec la sortie (en retenant que P_s), de cette manière on réalise une base de données pour l'ANN3 avec une entrée, soit P_s et une sortie, soit T_s . Une fois le modèle validé, c'est-à-dire l'ANN3, afin de prédire les 30 paramètres, la sortie T_s est utilisée comme entrée des réseaux déjà réalisés à savoir ANN1 et ANN2.

Le tableau 1 récapitule les propriétés des réseaux de neurone artificiel 1, 2 et 3 (ANN1, ANN2 et ANN3).

Tableau 1. Structure des réseaux neuronaux de la région diphasique

Réseau	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
ANN1	MLP à 2 Couches	20	Sigmoïde tangentielle	Fonction identité	Levenberg-Marquardt	24546
ANN2	MLP à 2 Couches	20	Sigmoïde tangentielle	Fonction identité	Levenberg-Marquardt	2851
ANN3	MLP à 2 Couches	10	Sigmoïde tangentielle	Fonction identité	Levenberg-Marquardt	10501

La figure 3, montre la structure typique d'un réseau de neurones artificiels pour le premier réseau neuronal ANN1.

En application de l'équation (3) à l'équation (8), le tableau 2 résume quelques performances statiques de quelques paramètres du réseau ANN1 de la phase de conception du modèle neuronal, c'est-à-

dire la phase d'apprentissage, de généralisation et de validation. Nous remarquons, par exemple pour la pression de saturation P_s , que la valeur moyenne de l'erreur relative par rapport aux données utilisées est inférieure à 0.017%. Le coefficient de corrélation R de la courbe de linéarisation (P_s estimée en fonction de P_s de la base de données) est

égal à 1. Il est important de rappeler, que la taille des matrices utilisées, du premier réseau de la région diphasique, pour effectuer l'apprentissage est de 275, la validation de 53 et pour la généralisation de 43 colonnes.

L'erreur relative moyenne sur l'ensemble de validation est inférieure à 0.0037% et inférieure 0.086% pour la phase de généralisation. Ces résultats montrent bien que le réseau de neurones arrive à suivre l'évolution de la pression de saturation, Il est clair que la distribution des résultats du modèle neuronal autour des valeurs expérimentales est tout à fait acceptable.

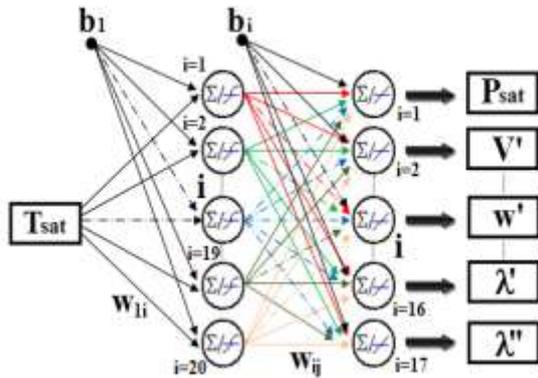


Figure 3. Schéma simplifié de l'architecture du 1er réseau neuronal (ANN1)

Tableau 2. Performance statistique du 1er réseau (ANN1)

Propriété	Performance	Apprentissage	Généralisation	Validation
Pression de saturation P_s	R	1	1	1
	RMSE	1.13647e-010	4.90679e-007	3.22341e-009
	AAE (%)	1.68548e-002	8.62042e-002	3.67058e-003
	STDEV (%)	2.76920e-002	5.55755e-002	1.37088e-002
	AE(Max) (%)	2.16298e-001	1.83746e-001	1.06508e-001
Volume phase liquide v'	R	1	1	1
	RMSE	1.97271e-009	6.82556e-008	1.62089e-009
	AAE (%)	9.40516e-003	1.00734e-002	1.77366e-003
	STDEV (%)	6.81542e-003	6.59581e-003	4.70792e-003
	AE(Max) (%)	3.03501e-002	2.91767e-002	2.91767e-002
Enthalpie phase vapeur h''	R	1	1	1
	RMSE	4.01815e-010	7.92611e-008	2.15558e-008
	AAE (%)	5.88765e-003	6.66399e-003	1.16382e-003
	STDEV (%)	5.21278e-003	5.69569e-003	3.51912e-003
	AE(Max) (%)	3.11782e-002	2.98823e-002	3.11276e-002

La figure 4 présente les résultats obtenus lors la phase d'apprentissage et de généralisation du deuxième réseau ANN2, le coefficient de corrélation R de la courbe de linéarisation est égal à

1 pour la capacité thermique isochore phase liquide C_v' et la capacité thermique isochore phase vapeur C_v'' .

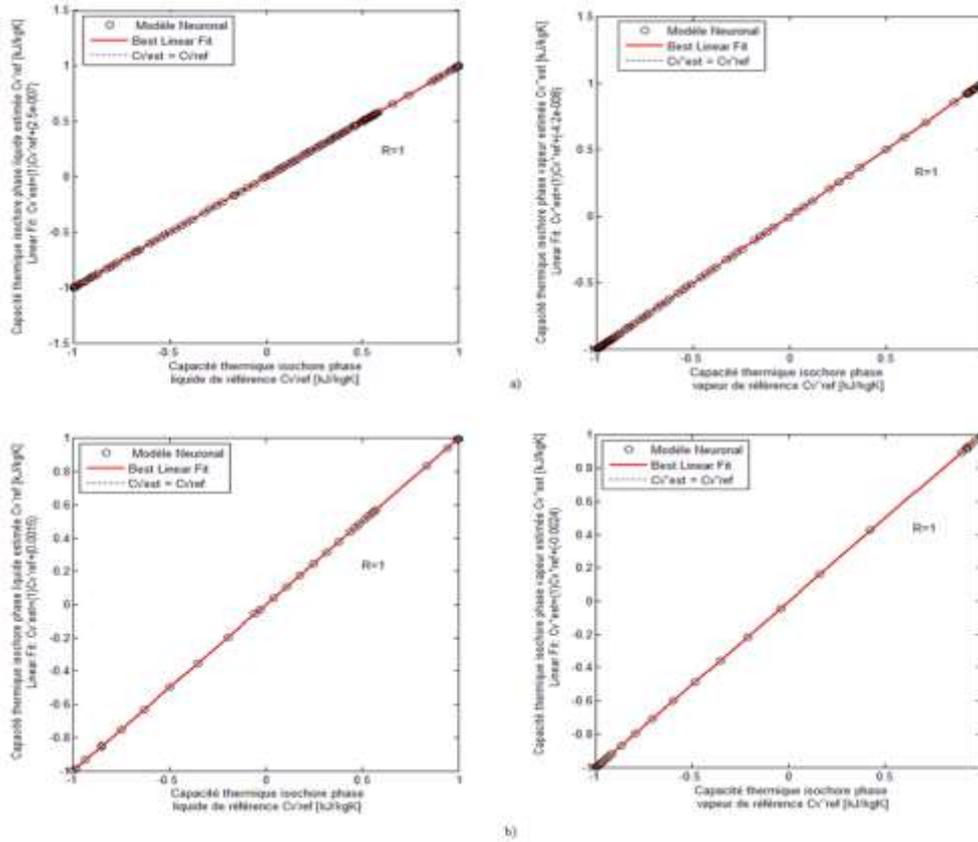


Figure 4. Capacité thermique isochore phase liquide C_v' et phase vapeur C_v'' , a) Apprentissage, b) Généralisation

Pour le troisième réseau ANN3, la pression de saturation est prise comme paramètre d'entrée, dans ce cas et afin d'éviter l'apprentissage de toute la base de données on inverse l'entrée avec la sortie (en retenant que P_s), de cette manière on réalise une base de données pour l'ANN3 avec une entrée, soit P_s et une sortie, soit T_s . Une fois le modèle validé, c'est-à-dire l'ANN3, et afin de prédire les 30 paramètres, la sortie T_s est utilisée comme entrée des réseaux déjà réalisés à savoir ANN1 et ANN2.

Le tableau 3 présente les résultats obtenus lors de la phase d'apprentissage, de validation et de généralisation, la valeur moyenne de l'erreur relative de température de saturation T_s par rapport aux données utilisées est inférieure à 0.01%. Le coefficient de corrélation R de la courbe de linéarisation est égal à 1.

Tableau 3. Performance statistique du 3^{ème} réseau (ANN3)

Propriété	Performance	Apprentissage	Généralisation	Validation
	R	1	1	1
Température de saturation T_s	RMSE	9.12197e-015	4.11776e-010	1.62277e-011
	AAE (%)	1.05263e-002	8.32493e-003	2.04121e-003
	STDEV (%)	4.64945e-002	1.82742e-002	1.35188e-002
	AE(Max) (%)	5.52163e-001	1.08186e-001	1.96797e-001

Dans le but de mesurer les performances des modèles neuronaux conçus, nous les avons confrontés aux modèles proposés dans la référence bibliographique et aussi à un échantillon de données expérimentales repérées dans la référence [18,19]. Le tableau 4 présente cette étude évaluative entre le modèle neuronal et le modèle WASP (Water and Steam Properties - Katmar Software) et ce pour quelques paramètres. Les résultats obtenus,

comme on peut le remarquer, sont en parfaite concordance avec les autres modèles. 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 4. Etude comparative entre le modèle neuronal et le modèle WASP [27] par rapport aux valeurs expérimentales [18]

Propriété	T [K]	Valeur expérimentale	Erreur relative en valeur absolue en [%]			
			WASP		Modèle neuronal	
			Valeur	ER	Valeur	ER
P _s [bar]	273.1600	0.00611657	0.00600	1.906	0.0061155	0.017
	383.1287	1.43364740	1.43100	0.185	1.4343100	0.046
	498.1096	25.4750000	25.4900	0.059	25.481800	0.027
	548.1101	59.4130000	59.4460	0.056	59.437300	0.015
	645.6067	216.705000	216.760	0.025	216.67200	0.015
ERM [%]	-	-	-	0.446	-	0.024
1/V' [kg/m ³]	273.160	999.7890	999.86	0.007	999.773	0.002
	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'' [kg/m ³]	273.1600	0.0048524	0.004850	0.050	0.00485508	0.055
	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 ' [kJ/kgK]	283.144	4.19400	4.1894	0.110	4.19717	0.076
	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 '' [kJ/kgK]	323.127	1.92050	1.8737	2.437	1.93646	0.831
	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' [m/S]	275.779	1414.6	-	-	1414.92	0.023
	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'' [m/s]	273.1800	409.0	-	-	408.970	0.007
	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

V.2. Région monophasée

L'équation 1, de la règle de Gibbs pour la variance d'un système thermodynamique, pour la simple phase (eau liquide et vapeur surchauffée), stipule que l'évolution des propriétés thermodynamiques est fonction de deux variables d'état, on retiendra dans cette étude les couples (p,T), (p,h) et (p,s).

Dans ce cas on a 14 paramètres à déterminer et suite à la non disponibilité d'assez de données, le réseau est subdivisé en deux réseaux, le premier réseau comporte 8 paramètres à savoir : le volume, l'enthalpie, l'entropie, la capacité thermique isobare, la célérité du son, le coefficient de compression isentropique, la viscosité dynamique et la conductivité thermique. Le deuxième réseau de la région monophasique comporte 6 paramètres dont

la capacité thermique isochore, le coefficient de dilatation isobare, la compressibilité isothermique, le nombre de Prandtl, la viscosité cinématique et la constante diélectrique.

En sachant que les réseaux neuronaux ANNs sont, en effet, capables d'approximer toute fonction complexe et non linéaire mais à condition quelle soit continue [5], ce qui n'est pas vérifié dans le cas monophasé, le passage de la phase liquide à la phase vapeur se fait à une température constante (chaleur latente) ce qui présente une discontinuité, raison pour la quelle on a subdivisé la base de donnée en deux c'est-à-dire la phase liquide, pour la pression inférieure à la pression de saturation et la phase vapeur sinon.

La phase liquide est a son tour subdivisée en deux parties, du moment que dans cette phase la fonction n'est pas suffisamment régulière [5]. Après plusieurs essais le point de séparation est à $T=0.8^{\circ}\text{C}$ pour le premier réseau celui du 8 paramètres de sorties et à $T=4^{\circ}\text{C}$ pour le deuxième réseau c'est-à-dire 6 paramètres de sorties [28]. La figure 5 montre le schéma synoptique du quatrième groupe du réseau de neurones ANN4 pour le couple (p,T) avec 8 sorties phase liquide pour la température $T \leq 0.8^{\circ}\text{C}$.

Le type du réseau neuronal ANN4 est un MLP à 2 couches avec 30 neurones dans la couche caché, la fonction de transfert des neurones de la couche caché est une fonction sigmoïde tangentielle, par contre la fonction de transfert des neurones de sortie est une fonction identité et l'algorithme d'apprentissage utilisé est celui de Levenberg-Marquardt. Le tableau 5 résume quelques performances statiques de quelques paramètres du quatrième réseau ANN4 de la phase de conception du modèle neuronal, c'est-à-dire la phase d'apprentissage et de généralisation.

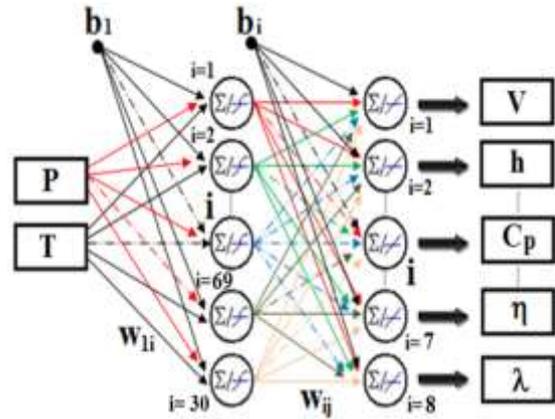


Figure 5 . Schéma simplifié de l'architecture du 1^{er} groupe du réseau de neurones (couple (p,T) avec 8 paramètres de sorties)

Tableau 5. Performance statistique du 1^{er} réseau (ANN4)

Propriété	Performance	Apprentissage	Généralisation
Enthalpie h	R	1	1
	RMSE	5.83118e-014	5.25989e-006
	AAE (%)	0.0014533248	0.0025150077
	STDEV (%)	0.0032318358	0.0056633305
	AE(Max) (%)	0.0432218838	0.0655353487
Entropie s	R	1	1
	RMSE	2.68016e-015	1.18275e-006
	AAE (%)	0.0211447060	0.086573369
	STDEV (%)	0.0496594620	0.3891434927
	AE(Max) (%)	0.4330349593	1.7273939310
Capacité thermique isobare Cp	R	1	1
	RMSE	2.75564e-017	2.20692e-008
	AAE (%)	1.15723e-004	1.26809e-004
	STDEV (%)	2.23461e-004	5.84659e-005
	AE(Max) (%)	0.0025441582	5.66308e-004
Viscosité dynamique η	R	1	1
	RMSE	9.33685e-017	3.59420e-009
	AAE (%)	9.36427e-005	6.05559e-005
	STDEV (%)	7.31432e-005	5.58331e-005
	AE(Max) (%)	4.84025e-004	3.53221e-004
Conductivité thermique phase liquide λ	R	1	1
	RMSE	8.30823e-017	6.53217e-007
	AAE (%)	1.05537e-004	7.37242e-004
	STDEV (%)	8.34753e-005	1.11368e-004
	AE(Max) (%)	4.75032e-004	8.88843e-004

La figure 6 présente les résultats obtenus lors la phase d'apprentissage et de généralisation du réseau

ANN4. Pour le volume, le coefficient de corrélation R de la courbe de linéarisation est égal à 1.

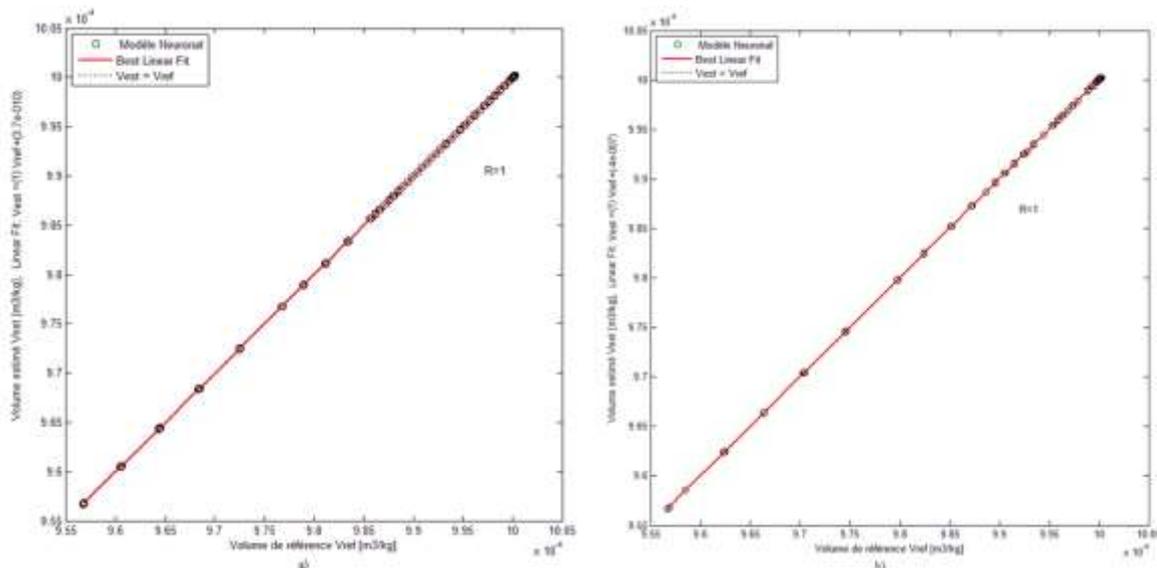


Figure 6. Volume v -a) Apprentissage, -b) Généralisation

V.3. Région très haute température

Le comportement de l'eau légère à très haute température est différent de celui de la région de la surchauffe, ceci dit que pour avoir une meilleur approche, soit le plus fidèlement possible, on est dans l'obligation de réserver un réseau pour cette région du moment qu'il y a une irrégularité entre les deux régions. Ce réseau, a deux paramètres d'entrée, la pression et la température, avec cinq paramètres de sorties à savoir: le volume, l'enthalpie, l'entropie, la capacité thermique isobare et la célérité du son.

Le type du réseau neuronal ANN14 est un MLP à 2 couches avec 50 neurones dans la couche caché, la fonction de transfert des neurones de la couche caché est une fonction sigmoïde tangentielle, par

contre la fonction de transfert des neurones de sortie est une fonction identité et l'algorithme d'apprentissage utilisé est celui de Levenberg-Marquardt.

Le tableau 6 résume quelques performances statiques de quelques paramètres du quatorzième réseau ANN14 de la phase de conception du modèle neuronal, c'est-à-dire la phase d'apprentissage et de généralisation. Pour le volume V, la valeur moyenne de l'erreur relative par rapport aux données utilisées est inférieure à 0.129 %. 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 égale à 1. Il est important de rappeler, que la taille des matrices utilisées pour effectuer l'apprentissage est de 737 et de 87 colonnes pour la généralisation.

Tableau 6. Performance statistique du 9^{ème} réseau (ANN14)

Propriété	Performance	Apprentissage	Généralisation
Volume v	R	0.9999930387	0.9999959919
	RMSE	3.78687e-005	1.29867e-004
	AAE (%)	0.1293264003	0.0080438425
	STDEV (%)	0.3869196019	0.1921306218
	AE(Max) (%)	5.8422053103	0.2608554453
Enthalpie h	R	1	1
	RMSE	2.53271e-008	1.08720e-008
	AAE (%)	4.06079e-004	2.42871e-004
	STDEV (%)	4.09256e-004	2.49449e-004
	AE(Max) (%)	0.0027551602	0.0024818933
Entropie s	R	1	1
	RMSE	1.97047e-007	3.84329e-006
	AAE (%)	0.0275596514	0.0132069422
	STDEV (%)	0.0321225780	0.0263772922
	AE(Max) (%)	0.2514975340	0.2514975340

Capacité thermique isobare C_p	R	1	1
	RMSE	6.58250e-011	4.56491e-009
	AAE (%)	0.0103981098	0.0014463255
	STDEV (%)	0.0103260863	0.0038679688
	AE(Max) (%)	0.0656312363	0.0324377580
Célérité du son w	R	1	1
	RMSE	4.83521e-009	4.57811e-007
	AAE (%)	6.45130e-004	0.0014991370
	STDEV (%)	6.02732e-004	1.66643e-004
	AE(Max) (%)	0.003759252	0.0016589894

Comme la figure 7-b montre le comportement du modèle vis-à-vis d'un échantillon de nouvelles données expérimentale, il est bien clair que la distribution des résultats du modèle neuronal autour des valeurs expérimentales est tout à fait acceptable, l'erreur relative moyenne commise sur

cet échantillon est de 0.0080 %. La figure 7 présente les résultats obtenus, pour le volume, lors la phase d'apprentissage et de généralisation du réseau ANN14, le coefficient de corrélation R de la courbe de linéarisation est égal à 1.

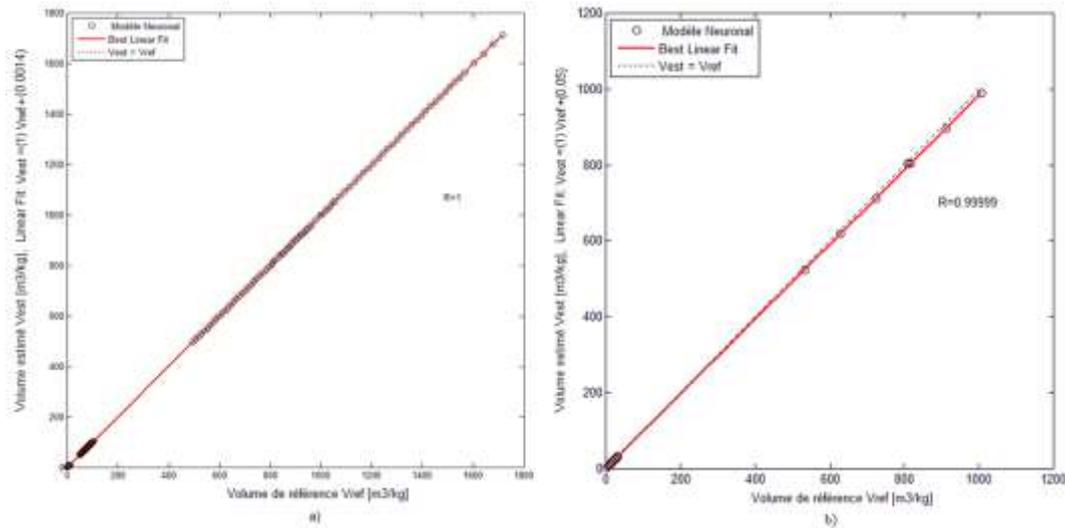


Figure 7. Volume v , a) Apprentissage, b) Généralisation

Pour quelques paramètres, le tableau 7 présente une étude évaluative pour la mesure des performances des modèles neuronaux conçus, par une confrontation aux modèles proposés dans la référence bibliographique et aussi à un échantillon de données expérimentales repérées dans la référence [18,19]. Les résultats obtenus, comme on peut le remarquer, sont en parfaite concordance avec les autres modèles. L'erreur relative commise sur l'ensemble de ce test (par rapport aux valeurs expérimentales) oscille entre 0.089 % pour la

célérité et 1.631 % pour la capacité thermique isobare. Nous signalons que les réseaux ANN10 et ANN11 respectivement pour la phase liquide et la phase vapeur pour le couple pression et enthalpie $f(p,h)$, ainsi que les deux réseaux ANN12 et ANN13 respectivement pour la phase liquide et la phase vapeur pour le couple pression et entropie $f(p,s)$, n'est qu'une traçabilité de celui du couple pression et température $f(p,T)$.

Tableau 7. Etude comparative entre le modèle neuronal et le modèle WASP [27] par rapport aux valeurs expérimentales [18]

Propriété	P [bar]	T [K]	Valeur expérimentale	Erreur relative en valeur absolue en [%]			
				WASP		Modèle neuronal	
				Valeur	ER	Valeur	ER
dh [bar]	15.0300	356.0375-297.8928	243.44000000	242.63	0.333	241.334	0.865
	200.003	475.1186-471.0719	17.848484848	17.930	0.457	17.8070	0.232
	260.007	524.9212-521.2621	16.984732824	17.000	0.090	17.0800	0.561
	280.003	654.9565-651.4547	40.852878465	28.900	29.26	39.6000	3.067
	500.004	675.5924-670.7916	32.445378151	33.800	4.175	32.8600	1.278

ERM [%]	-	-	-	-	6.863	-	1.201
C _p	19.61330	626.185839434	2.21480	2.2652	2.276	2.22415	0.422
[kJ/kgK]	98.06650	642.983899397	3.47090	3.5763	3.037	3.46983	0.031
	588.3990	613.246531796	5.01580	5.0755	1.190	4.99260	0.463
	294.1995	652.572185781	10.1321	4.2794	57.76	9.96802	1.619
	294.1995	673.417580810	28.7215	21.694	24.47	27.1075	5.619
ERM [%]	-	-	-	-	17.75	-	1.631
C _v	12.3000	304.5	4.1288	-	-	4.10751	0.516
[kJ/kgK]	44.7500	310.5	4.0889	-	-	4.07172	0.420
	136.700	323.5	3.9954	-	-	3.98577	0.241
	158.610	338.5	3.9062	-	-	3.90791	0.044
	108.188	350.5	3.8858	-	-	3.86168	0.621
ERM [%]	-	-	-	-	-	-	0.368
W	1.01325	273.162	1402.448	-	-	1402.42	0.002
[bar]	1.01325	363.212	1550.430	-	-	1549.46	0.063
	255.650	293.145	1522.000	-	-	1522.75	0.049
	108.720	403.118	1529.000	-	-	1530.20	0.078
	206.710	623.109	676.0000	-	-	677.720	0.254
ERM [%]	-	-	-	-	-	-	0.089

VI. Organigramme du soft

Parmi les applications les plus évidentes des réseaux neuronaux, déjà développés précédemment, est la réalisation d'une application pour le calcul des propriétés thermodynamique et de transport de l'eau légère aux différents états. Ce genre d'application est de grande importance pour les thermiciens qui sont amenés à effectuer des calculs qui, en l'absence de logiciels performants, 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 de la thermodynamique à savoir les processus de transformation de l'énergie. C'est pour répondre à cette attente que nous avons intégré les différents réseaux neuronaux déjà

validés dans un programme pour faire des calculs complexes précis très facilement et en un minimum de temps. Ce programme permet de calculer rigoureusement les propriétés thermodynamiques et de transport (conductivité thermique, viscosité, enthalpie, etc.) de l'eau légère, dans des conditions de température, de pression, d'enthalpie et d'entropie variables.

La figure 8 montre l'organigramme du soft, il est basé sur les poids et les biais de chaque réseau, ANN1, ANN2 et ANN3 pour la région diphasique qui permettent de prédire 30 propriétés plus 9 propriétés par calcul combiné. Du réseau ANN4 jusqu'au réseau ANN14, pour la région monophasée, ces réseaux permettent aussi de prédire 14 propriétés et de calculer 3 autres propriétés avec le paramètre de détermination de la phase.

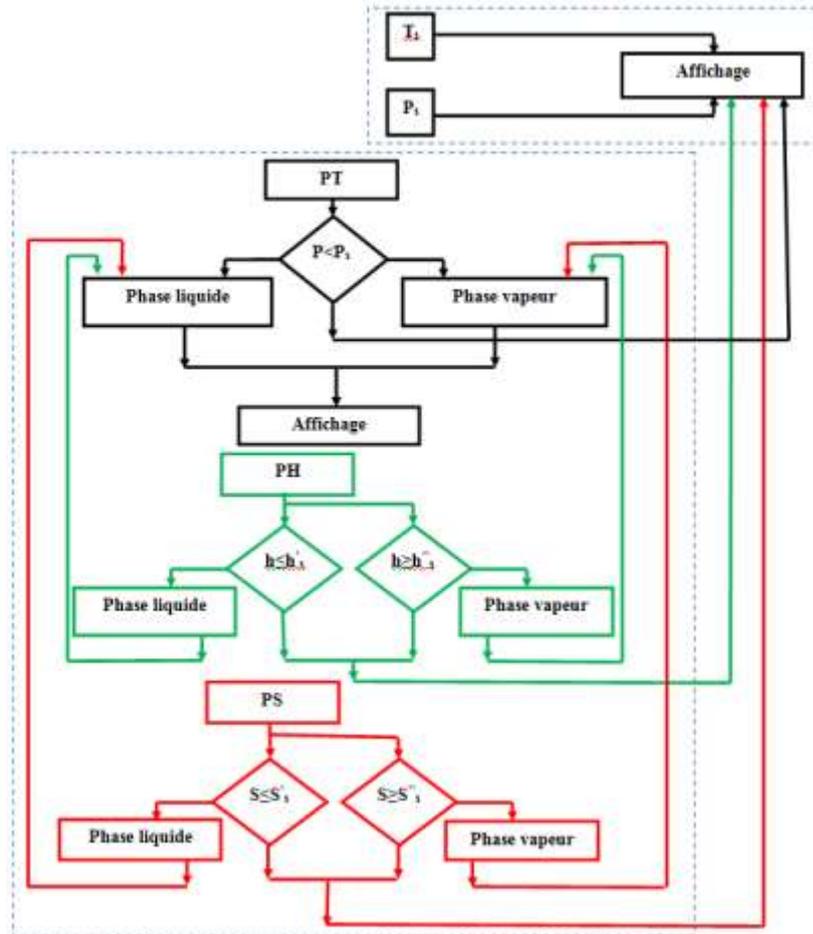


Figure 8 . Organigramme du soft

La figure 9 présente l'interface du programme conçue d'une façon conviviale, la partie "Input Parameters", les paramètres d'entrés, comporte les différents couples, à savoir, pour la région monophasée $f(p,T)$, $f(p,H)$ et $f(p,S)$, pour la région diphasique $f(T_{sat})$, $f(p_{sat})$, $f(T_{sat},X)$ et $f(p_{sat},X)$ ainsi que $f(p,T)$ pour la région de haute température, avec bien entendu l'apparition, lors de l'introduction des données pour l'ensemble des couples, de l'intervalle de validité du paramètre. Dans la partie inférieure de la fenêtre et après exécution du programme, les résultats sont affichés avec toutes les indications nécessaires qui sont : le nom de la propriété, la valeur prédite et l'unité correspondante. Une autre fenêtre affiche les propriétés ou caractéristiques fixent de l'eau [27,29,30]. Le domaine de validité est comme suit :

- Pour la région de saturation

La température $T = 0.01 \div 373.946 \text{ } ^\circ\text{C}$;
 La pression $P = 0.00611657 \div 220.64 \text{ bar}$;
 Le Titre $X = 0 \div 100 \%$.

- Pour la région monophasée

Le couple $f(p,T)$, $P = 0.006112127 \div 1000 \text{ bar}$
 et $T = 0.01 \div 800 \text{ } ^\circ\text{C}$;
 Le couple $f(p,h)$, $P = 0.006112127 \div 1000 \text{ bar}$
 et $h = 0.00100741 \div 4160.60 \text{ kJ/kg}$;
 Le couple $f(p,s)$, $P = 0.006112127 \div 1000 \text{ bar}$
 et $s = -0.0084393 \div 11.921 \text{ kJ/kgK}$;

- Pour la haute température

Le couple $f(p,T)$, $P = 0.006112127 \div 500 \text{ bar}$ et
 $T = 800.1 \div 2000 \text{ } ^\circ\text{C}$;

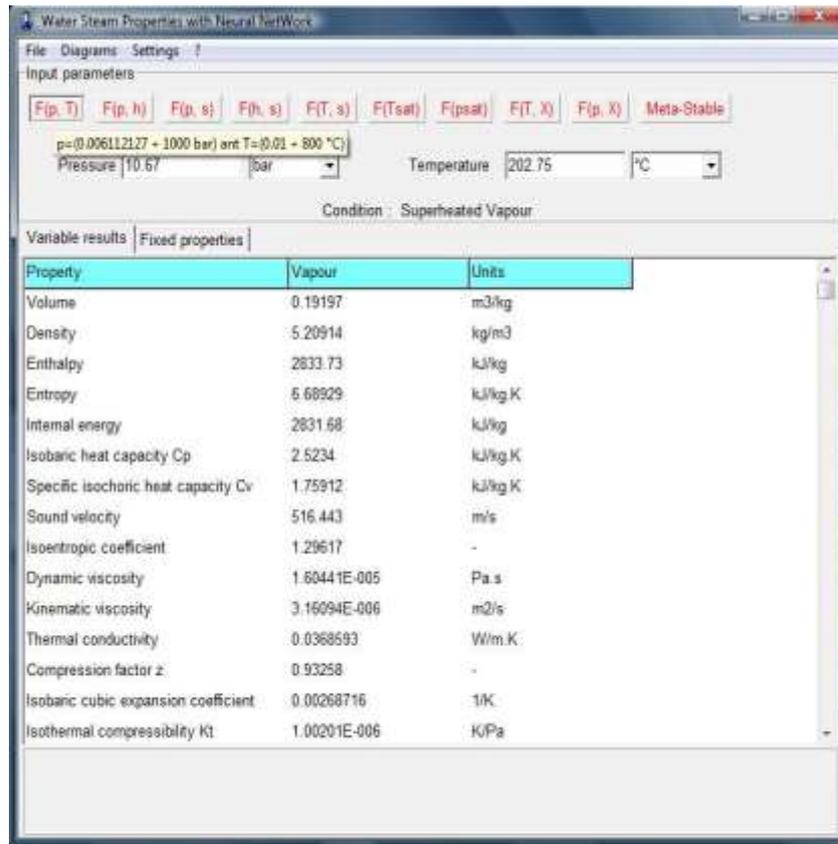


Figure 9 . Interface du programme de calcul des propriétés de l'eau au moyen des réseaux de neurones artificiels.

VII. Conclusion

L'application de la méthode des réseaux de neurones dans les calculs et la prédiction des propriétés thermodynamique 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 référence bibliographique 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 manque souvent des données ou parfois la non concordance de la base de données (le pas d'avancement différent) ou encore la présence d'une discontinuité (passage d'une phase à l'autre) et enfin lorsque la fonction n'est pas suffisamment régulière est surmonté par la subdivision en sous groupe, ce qui explique le nombre assez élevé de réseaux qui sont en nombre de 14.

Suite à ces résultats, nous pouvons présenter ces modèles neuronaux comme des outils fiables et

performants pour le calcul des propriétés thermodynamique et de transport de l'eau pour un intervalle des paramètres d'entrées assez large. L'intégration de ces modèles dans un programme informatique en langage Delphi, permettra aux utilisateurs, pour des calculs complexes, leur application avec simplicité et rapidité en un minimum de temps.

VIII. Références

1. Wagner, W.; Kretschmar H.J. International Steam Tables. *Second edition; Springer-Verlag Berlin Heidelberg* (2008).
2. Si-Moussa, C.; Hanini, S.; Derriche, R.; Bouhedda, M.; Bouzidi A. 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* 25:01(2008) 183-199.
3. Yaws C.L. Chemical properties handbook. *McGRAW-HILL* (2006).
4. Stowe K. An introduction to thermodynamics and statistical mechanics. *Cambridge University Press* second edition (2007).
5. Dreyfus, G.; Martinez, J.M.; Samuelides, M.; Gordon, M. B.; Badran F.; Thiria S. Réseaux de Neurones Méthodologie et Applications. *Editions Eyrolles*. Paris (2002).

6. Lee, Y.; Oh, S.H.; Kim M.W. The Effect of Initial Weights on Premature Saturation in Back-Propagation Learning. *International Joint Conference on Neural Networks*. 1(1991) 765-770.
7. Demuth, H.; Beale, M.; Hagan M. Matlab, Neural Network Toolbox 6. *User's Guide MathWorks Inc.* (2009).
8. Lu, M.L.; McGreavy, C.; Kam E.K.T. Prediction of Thermal Conductivity of Pure Liquids and Mixtures Using Neural Network. *Journal of Chemical Engineering of Japan* 30:3(1997).
9. Lee, M.J.; Hwang, S.M.; Chen J.T. Density and Viscosity Calculations for Polar Solutions via Neural Networks. *Journal of Chemical Engineering of Japan* 27:6(1994).
10. Homer, J.; Generalis, S.; Robson J.H. Artificial Neural Networks for Prediction of Liquids Viscosity; Density; Heat of Vaporization; Boiling Point and Pitzer's Acentric Factor Part I: Hydrocarbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 1:17(1999) 4075-4081. DOI: 10.1039/a904096j.
11. Rai, P.; Majumdar ,G.C.; DasGupta, S.; De S. Prediction of Viscosity of Clarified Fruit Juice Using Artificial Neural Network: A Combined Effect of Concentration and Temperature. *Journal of Food Engineering* 68(2005) 527-533. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2004.07.003.
12. Scalabrin, G.; Critofoli G. The Viscosity Surface of Propane in the Form of Multilayer Feed Forward Neural networks. *International Journal of Thermophysics* 24:5(2003).
13. Scalabrin, G.; Corbetti, C.; Cristofoli G. A. Viscosity Equation of State for R123 in the Form of Multilayer Feed Forward Neural networks. *International Journal of Thermophysics* 22:5(2001).
14. Scalabrin, G.; Piazza, L.; Scalabrin G. The Viscosity Surfaces of R152a in the Form a Multilayer Feed Forward Neural Networks. *International Journal of Refrigeration* 26(2003) 302-314.
15. Cristofoli, G.; Piazza, L.; Scalabrin G. A. Viscosity Equation of State For R134a Through a Multilayer Feed Forward Neural Networks. *Fluid Phase Equilibria* 199(2002) 223-236.
16. Beladel, B.; Mohammedi, B.; Guesmia, A.; Benamar M.E.A. Neural network prediction of K and L-shell X-ray production cross sections. *Radiochimica Acta* 106:12(2018); DOI: 10.1515/ract-2018-2990.
17. Gheziel, A.; Hanini, S.; Mohammedi, B.; Ararem, A.; Mellel N. Particle dispersion modeling in ventilated room using artificial neural network. *Nuclear Science and Techniques* 28:5(2017). DOI: 10.1007/s41365-016-0159-6.
18. Wagner, W.; Prub A. The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. *Journal of Physical Chemistry* 31(2002) 387-535.
19. Harvey A.H. Thermodynamic Properties of Water: Tabulation from the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. *NISTIR 5078, National Institute of Standards and Technology* (1998).
20. Washburn E.W. International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology. *National Academies Press Washington DC* (1930). DOI: 10.17226/20230.
21. Chase M.W. JANAF Thermochemical Tables. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 14:1(1985).
22. Yaws C.L. Yaws Handbook of thermodynamic and physical properties of chemical compounds. *Norwich New York, Knovel* (2004).
23. Goodwin, A.R.H.; Marsh, K.N.; Wakeham W.A. Measurement of the thermodynamic properties of single phases (Experimental thermodynamics) volume vi. *International Union of Pure and Applied Chemistry; Elsevier Science B.V.*(2003).
24. Rogers, G.F.C.; Mayhew Y.R. Thermodynamic and Transport Properties of Fluids: SI Units. *Blackwell Publishing Ltd* (2004).
25. Gicquel R. Diagrammes interactifs des vapeurs, Manuel d'utilisation. *Thermoptim Version VI.3* (2000).
26. Alberty R.A. Biochemical Thermodynamics: Applications of Mathematica. *John Wiley & Sons* (2006).
27. Andyc Creation and Katmar Software; *WASP for Windows*; Version 2.0.36 (2004).
28. Ciftcioglu, Ö.; Türkcan E. SMORN-VII : Report neural network benchmark; analysis results & follow-up'96. *A symposium on Nuclear Reactor Surveillance and Diagnostics* (1996) Avignon (FRANCE) revised (1998).
29. Wu C. Thermodynamic Cycles: Computer-aided design and optimization. *Marcel Dekker Inc.* (2004).
30. Barrachin, M.; Cheynet, B.; Fischer E. NUCLEA : Une base de données thermodynamiques pour les applications nucléaires. *Journée sur la coopération scientifique CNRS/IRSN* (2008).

Please cite this Article as:

Mohammedi B., Hanini S., Mellel N., Boumaza M., Modélisation des propriétés thermodynamique et de transport de l'eau aux états liquide et vapeur, **Algerian J. Env. Sc. Technology**, 7:2 (2021) 1930-1943