

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY

MINES ParisTech

École doctorale n° 432 : Science des Métiers de l'Ingénieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité " Energétique et Procédés "

présentée et soutenue publiquement par

Bo LIU

le 18 avril 2014

Modélisation d'un cycle de production d'électricité bi-étagé à aéroréfrigérant sec

Directeur de thèse : **Christophe COQUELET**
Co-encadrement de la thèse : **Philippe RIVIERE, Renaud GICQUEL, Franck DAVID (EDF)**

Jury

M. Jocelyn BONJOUR, Professeur, CETHIL, Insa-Lyon	Président
M. Christophe COQUELET, Professeur, CTP, Mines-Paristech	Examinateur
M. Franck DAVID, Ingénieur de Recherche, MFEE, EDF R&D	Examinateur
M. Renaud GICQUEL, Professeur, PERSEE, Mines-Paristech	Examinateur
M. François MARECHAL, Professeur, EPFL, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne	Examinateur
M. Christophe MARVILLET, Professeur, IFFI, CNAM	Examinateur
M. Philippe RIVIERE, Docteur, CES, Mines-Paristech	Examinateur
M. Nicolas TAUVERON, HDR, Direction de la Recherche Technologique, CEA	Rapporteur
M. Pascal TOBALY, HDR, LGP2ES, CNAM	Rapporteur

T H È S E

MINES ParisTech
Centre Efficacité énergétique des Systèmes
60 bd Saint-Michel 75272 PARIS Cedex 06

A mes parents

A ma famille

A ma grand-mère

Remerciement

Je voudrais tout d'abord remercier mon directeur de thèse Professeur Christophe COQUELET, mes maîtres de thèse Messieurs Philippe RIVIERE, Renaud GICQUEL ainsi que mon encadrant EDF Monsieur Franck DAVID, pour avoir suivi sans relâche l'avancée de mes travaux, pour leurs disponibilités et pour tout ce qu'ils m'ont appris. Sans eux, je n'aurais pas pu aboutir ce travail de longue haleine.

Mes remerciements vont également vers les collègues d'EDF et les professeurs de Mines Paris Tech qui ont suivi mon travail avec l'intérêt et qui m'ont donné leurs conseils tout au long de la réalisation de cette thèse : Messieurs Yann LE-MOULLEC, Vincent MAUPU, Jean-François COMBES, Enrico DERI, Marc BOUCKER, Oystein BREMNES, Etienne DECOSSIN, Jean-Louis PEUREUX, Alain CAPITAINE, Dominique MARCHIO, Lucien WALD et Maroun NEMER.

Je remercie Monsieur Jean DE BERNARDY (Honeywell) qui m'a permis de démarrer le travail sur le fluide R1233zd(E) et Monsieur Richard BRECKENRIDGE (EPRI) qui m'a aidé lors de la conférence ASME 2013.

J'exprime également toute ma gratitude aux membres de jury à commencer par Messieurs Nicolas TAUVERON et Pascal TOBALY qui ont accepté d'évaluer ce manuscrit. Je remercie également Professeurs Jocelyn BONJOUR, Christophe MARVILLET et François MARECHAL qui ont accepté de fait partie du jury et pour leurs intérêts à mon travail.

Je garde un très bon souvenir de l'équipe « Vibration et Thermohydraulique des échangeurs et des cœurs » qui m'a accueilli durant ces trois années. Merci à Guillaume, Thomas, Julien(s), Mickael, André, Ouardia, Fadila, Clément, Audrey, Elisabeth, Romain, Joël, Franck, Pierre notamment pour les moments partagés aux pauses café et repas. Je n'oublie pas celles et ceux que j'ai côtoyés et qui sont partis pour de nouveaux horizons : Cédric, Samuel, Joann, Jérémy, Annick, Pierre… Je remercie Mounir, Hayato de l'équipe « Nouvelle Filière de Production et Thermochimie » et Jean-Marc de l'équipe « Ecoulements et Turbomachines » pour les discussions constructives.

Je n'oublie pas bien sûre Monsieur Mohamed YAHIA (Valeo) qui m'a introduit au monde de la recherche appliquée.

Merci à mes amis qui m'ont toujours encouragé.

Un grand merci à ma famille, notamment à mes tantes et mes oncles qui m'ont permis d'arriver et d'étudier en France.

Merci à ma mère, à mon père et aux grands parents qui m'ont toujours supporté dans mes choix.

Introduction

Dans le cadre de programmes de recherche de solutions innovantes pour de nouvelles centrales de production d'électricité, l'ensemble des producteurs, et notamment EDF, cherchent à améliorer la performance et la robustesse de leurs installation et étudient différentes options possibles pour les systèmes de conversion d'énergie et leur refroidissement.

Le rendement de la production d'électricité et le refroidissement du réacteur dépendent étroitement de la disponibilité et de la température de la source froide. C'est la raison pour laquelle la plupart des centrales, qu'elles soient thermiques ou nucléaires, sont installées près d'une source d'eau abondante (mer, fleuves à forts débits). Cependant, l'alimentation en eau de la source froide peut se révéler problématique dans certains cas, lors de canicules ou en période de sécheresse notamment. Avec le changement climatique, les règlementations environnementales de plus en plus strictes, les tensions possibles autour du partage de cette ressource, nous devons prévoir des évolutions de moyens de productions correspondants et imaginer des sources alternatives afin de réduire la dépendance des centrales de production en eau à moyen et long termes.

Le refroidissement à l'air sec serait l'une des options possibles. Cependant étant donné la nécessité d'avoir d'une surface d'échange plus importante, le recours à l'air ambiant comme source froide n'est pas, dans la majorité des cas, viable économiquement.

Parallèlement, nous pouvons constater l'encombrement de la salle machine et le gigantisme des turbines du circuit secondaire. Cela est dû à la vapeur d'eau qui devient extrêmement volumineuse à très basse pression. Les derniers étages de la turbine basse pression (BP) sont alors très volumineux. Dans ce cas des considérations de résistance des matériaux conduisent à réduire la vitesse de rotation des turbines. De plus à très basse température, le gain énergétique sur le cycle est compensé par l'augmentation de la perte cinétique liée à l'augmentation de la vitesse de fluide à la sortie de la turbine.

Afin de faciliter l'utilisation d'un système de refroidissement sur l'air et de réduire en même temps la taille de la turbine BP, une des solutions imaginée par EDF dans les années 70 était de changer l'architecture du cycle de production. L'idée était de considérer un cycle de production composé de deux cycles de Rankine en cascade, le premier fonctionnant avec de la vapeur d'eau et le deuxième fonctionnant avec de l'ammoniac dont la vapeur à basse pression est beaucoup plus dense que celle de l'eau. Nous appellerons dans la suite de ce document ce type de cycle « le cycle bi-étagé ».

L'architecture de ce nouveau système est présentée Figure 0.1. Les principales différences de fonctionnement de ce cycle bi-étagé par rapport à un cycle à vapeur classique sont :

Cycle à vapeur d'eau du cycle bi-étagé:

- La vapeur d'eau en sortie de la turbine BP a une pression plus élevée que pour le cycle classique, et par conséquent avec un volume spécifique plus faible. L'énergie restante de la vapeur d'eau est récupérée via un condenseur - bouilleur « eau / ammoniac »

Cycle à ammoniac du cycle bi-étagé :

- L'ammoniac bout dans le condenseur - bouilleur

- La vapeur d'ammoniac, beaucoup plus dense que l'eau, est détendue dans la turbine à ammoniac et la puissance restante est récupérée.
- L'ammoniac se condense sans perte de fluide à travers un échangeur sec (aéro-condenseur).

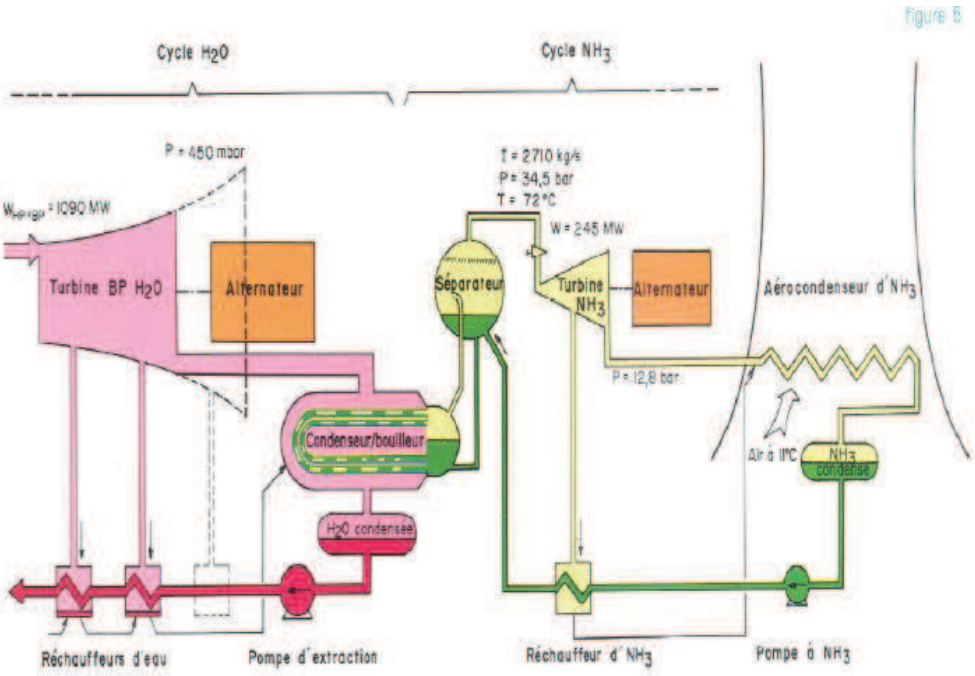


Figure 0.1 Schéma du cycle bi-étagé eau-ammoniac **(Fleury et Bellot 1989)**

Un prototype d'essai de 22 MWe, simulant une tranche de 1300 MW, a été construit et expérimenté par EDF de la fin des années 70 au début des années 90. Les intérêts de ce cycle sont :

- **Du point de vue énergétique** : le cycle bi étagé utilise l'air sec comme source froide. L'amplitude de variation de température de l'air ambiant sur une année est plus importante que celle de l'eau de rivière ou de mer. Cette condition est particulièrement intéressante en hiver car elle peut générer une surpuissance pour le cycle de Rankine en cascade qui n'existe pas dans le cycle à vapeur classique. En effet, la surpuissance est compensée par la perte cinétique en sortie de turbine dans un cycle classique. En été, le refroidissement par l'air sec est sans doute moins performant, mais la température ambiante de l'air dans les zones tempérées (en France) devrait permettre une production de rendement annuel moyen équivalent.

- **Du point de vue économique** : grâce à la réduction de coût de la salle des machines, on peut se permettre d'investir plus dans des aéro-condenseurs qui sont plus chers que les échangeurs classiques à eau. Le coût du nouveau système est globalement équilibré par rapport à un cycle classique. Ainsi il devrait être possible de s'affranchir du problème de la dépendance en eau sans augmenter l'investissement.

L'expérience acquise avec ce prototype a permis de montrer la possibilité d'utiliser un cycle bi-étagé à l'ammoniac en tant que système de production et de refroidissement d'une centrale. Cependant il n'a pas été adopté pour remplacer les systèmes actuels.

Un des principaux freins au déploiement de ce cycle bi-étagé dans la production d'électricité nucléaire était dû aux caractéristiques chimiques de l'ammoniac. Ce dernier avait été choisi comme fluide de travail en raison de sa densité très supérieure à l'eau en phase vapeur et de sa chaleur latente de vaporisation importante. Cependant sa toxicité rend délicate son exploitation à l'échelle d'une production de plusieurs centaines de MWe. Un changement de fluide de travail est donc nécessaire avant la mise en application de ce type de cycle.

Au regard des enjeux sur les sources froides et des progrès réalisés sur les machines de production d'éléctricité et les fluides qui les composent, il est légitime de se poser la question de savoir si d'autres fluides de travail mieux adaptés que l'ammoniac sont disponibles. Comment ces fluides vont-ils influencer sur la performance du cycle bi-étagé ? Comment le changement de fluide va-t-il modifier le dimensionnement des composants du cycle et déplacer l'équilibre technico-économique? En raison du changement d'architecture du cycle par rapport à un système de conversion d'énergie classique, il est judicieux de considérer l'aspect « à long terme » de ce projet prospectif. Il est important de prévoir les changements futurs, particulièrement, la mise au point de nouveaux fluides plus performants et plus respectueux de l'environnement. D'où le besoin de disposer d'un outil de simulation de cycle qui permette d'évaluer performance de ces nouveaux fluides pour lesquels nous ne disposons actuellement que de peu de données expérimentales.

Cette thèse présente la démarche que nous avons adoptée pour réaliser entièrement l'étude du cycle bi-étagé. Le mot « Entièrement » signifie que :

- Nous allons décrire le cycle et les différents composants considérés,
- Notre travail partira du choix des fluides de travail en définissant les différents critères de sélection. Nous allons modéliser les propriétés thermophysiques des fluides sélectionnés en utilisant des modèles prédictifs ou semi prédictifs,
- Nous allons modéliser le cycle bi-étagé, non seulement pour prédire la performance du système correspondante à chacun des fluides choisis, mais également pour étudier leurs influences technico-économiques. Pour cela, nous dimensionnerons les principaux composants spécifiques du cycle bi-étagé,
- Nous allons également étudier la performance du cycle bi-étagé en conditions non nominales et quantifier les gains énergétiques et économiques par rapport à un cycle à vapeur classique.

Un serveur de propriétés de fluides CTPlib a été créé dans le cadre de ces travaux et a été interfacé au progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim^{TM} dont nous maîtrisons le code source. Cette démarche nous permet de développer un outil prédictif, flexible et évolutif tout au long de notre projet et par la suite.

Sommaire

Introduction 1
1 Chapitre 1 Elaboration de l'architecture du cycle bi-étagé 8
1.1 Source froide : un enjeu du futur 9
1.1.1 Refroidissement en boucle ouverte 10
1.1.2 Refroidissement à boucle fermée par voie humide 10
1.1.3 Refroidissement à air sec 12
1.1.4 Conclusion 12
1.2 Cycle de Rankine et Cycle Bi-étagé pour la production d'électricité 13
1.2.1 Cycle de Rankine classique 13
1.2.2 Expérience EDF: le cycle bi-étagé Cybiam 15
1.2.3 Cycle de Rankine Organique 18
1.2.4 Conclusion 19
1.3 Architecture et caractéristiques du cycle bi-étagé SPX 20
1.4 Choix des composants du cycle bi-étagé : échangeurs de chaleur 22
1.4.1 Echangeur Liquide (diphasique) – Gaz 22
1.4.2 Echangeur Liquide (diphasique) –Liquide (diphasique) 24
1.4.3 Choix technologique des échangeurs pour l'application cycle de production d'électricité bi-étagé 26
1.4.4 Conclusion 29
1.5 Choix des composants du cycle bi-étagé : les turbines ORC 30
1.6 Conclusion 31
2 Chapitre 2 Sélection des fluides de travail et modélisation de leurs propriétés physiques 33
2.1 Fluides de travail : généralités sur les familles de fluides et règlementations 34
2.1.1 Classification des fluides 34
2.1.2 Règle de nomenclatures 36
2.1.3 Réglementation en vigueur et standard environnemental et de sécurité 37
2.2 Critères de choix des fluides pour le cycle bi-étagé 40
2.2.1 Critères de performance 40
2.2.2 Critères technico-économiques 42
2.2.3 Critères de limite de fonctionnement 43
2.2.4 Critères d'environnement et de sécurité 43
2.2.5 Conclusion 44
2.3 Fluides candidats potentiels 45
2.4 Modélisation des propriétés des Corps Purs 47

2.4.1 Equilibre liquide - vapeur 47
2.4.2 Equations d'état 47
2.4.3 Fonctions α (T) 50
2.4.4 Fonctions d'état 51
2.4.5 Propriétés de transport 53
2.5 Modélisation des propriétés des Mélanges 59
2.5.1 Equilibre liquide vapeur des mélanges 59
2.5.2 Calcul de point de bulle / rosée 60
2.5.3 Calcul Flash 60
2.5.4 Equations d'état et règles de mélange 61
2.5.5 Propriétés de transport des mélanges 61
2.6 Algorithmes de calcul 64
2.6.1 Algorithme de calcul de l'équilibre liquide-vapeur du corps pur 64
2.6.2 Algorithme de calculs de point de bulle et de point de rosée 65
2.6.3 Algorithme de calcul du flash isotherme 66
2.6.4 Correction de propriétés de transport pour fluide connu 66
2.7 Construction d'un serveur de propriétés thermophysiques de fluides 67
2.8 Validation des résultats de modèles implémentés dans CTPlib et évaluation des déviations 68
2.8.1 Validations des calculs de propriétés thermophysiques 68
2.8.2 Validations des calculs de propriétés de transport 80
2.9 Conclusion 88
3 Chapitre 3 Modélisation du cycle bi-étagé 91
3.1 Modèles de cycle bi-étagé au point de fonctionnement nominal 92
3.1.1 Transformation dans un système ouvert 93
3.1.2 Détente dans une turbine 94
3.1.3 Compression liquide dans une pompe 96
3.1.4 Echanges de chaleur 97
3.1.5 Rendement du cycle 98
3.2 Dimensionnement des composants additionnels 99
3.2.1 Dimensionnement de l'aérocondenseur 99
3.2.2 Dimensionnement du condenseur-bouilleur 105
3.2.3 Dimensionnement des turbines 111
3.3 Modèle de cycle en régime non nominal 113
3.3.1 Calcul de turbine en régime non nominal 113
3.3.2 Calcul des échangeurs en régime non nominal 114
3.3.3 Implémentation des modèles et contrôle du cycle en régime non nominal 115

3.4 Résultats des calculs et discussions 115
3.4.1 Calcul de performance au point de fonctionnement nominal 115
3.4.2 Fluides de travail retenus 118
3.4.3 Sensibilité des paramètres des composants 119
3.4.4 Dimensionnement des échangeurs 123
3.4.5 Résultats du dimensionnement de la turbine 128
3.4.6 Performance du cycle en régime non nominal 129
3.5 Conclusion 131
4 Chapitre 4 Etude économique du cycle de production d'électricité bi-étagé 133
4.1 Coût d'investissement et coût de la production du cycle bi-étagé. 134
4.1.1 Calculs des coûts de composants 134
4.1.2 Coût de la production d'électricité du cycle bi-étagé 137
4.2 Estimation du chiffre d'affaire lié à la vente d'électricité 2012-2013 pour un site représentatif du climat français 140
4.2.1 Données météorologiques 140
4.2.2 Données de la bourse d'électricité Européenne 140
4.2.3 Evaluation du revenu de la vente d'électricité 141
4.3 Estimation du bénéfice lié à la vente d'électricité 2011-2012 pour les différents sites de production en France 146
4.4 Estimation du gain de cycle bi-étagé en Europe 150
Conclusion 152
Conclusion Générale 153
5 Bibliographie 156
6 Liste des publications 159
7 Annexes 160
7.1 ASHRAE Standard 34, désignation et classification de sureté des réfrigérants 161
7.1.1 Classification de toxicité : 161
7.1.2 Classification d'inflammabilité: 161
7.2 Procédure de l'ajustement des paramètres de la fonction $\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{T})$ de Mathias-Copeman 162
7.3 Tableaux de résultats de calculs pour la validation des modèles de fluides 163
7.3.1 Butane 163
7.3.2 R134a 164
7.3.3 R245fa 165
7.3.4 R1216 166
7.3.5 Toluene 167
7.3.6 La viscosité et la conductivité thermique de l'isopentane 168
7.3.7 La viscosité et la conductivité du R245fa 170

7.3.8 La viscosité et la conductivité du mélange R245fa+iC5 172
7.4 Equations utilisées dans le modèle non nominal (le cas du R245fa) 174
7.5 Résultats de calcul de revenu de la vente d'électricité 2012-2013 178
7.5.1 Résultats sur la période 12/02/2012-17/04/2012 178
7.5.2 Résultats sur la période 19/04/2012-22/04/2012 179
7.5.3 Résultats sur la période 25/04/2012-18/05/2012 180
7.6 Manuel d'utilisation du CTPlib 182
7.6.1 Utilisation du serveur dans le cas où le fluide est répertorié 182
7.6.2 Ajout d'un corps 186
7.6.3 Structure des classes et fonctions des différentes méthodes 190
7.7 Résumé long 195
7.7.1 Introduction 196
7.7.2 Définition de l'architecture du cycle bi-étagé étudié 198
7.7.3 Choix d'un fluide de travail 201
7.7.4 Modélisation des propriétés des fluides de travail 204
7.7.5 Modélisation des performances du cycle bi-étagé et dimensionnement des composants 206
7.7.6 Evaluation économique des choix de conception 210
7.7.7 Conclusion 212
8 Nomenclatures 214
9 Liste des figures 216
10 Liste des tableaux 219

Chapitre 1 Elaboration de l'architecture du cycle bi-étagé

Ce chapitre présente la démarche de réflexion qui a conduit à l'idée de remplacer un cycle de Rankine classique par un cycle bi-étagé constitué de deux cycles en cascade. La modification de l'architecture du cycle et les choix technologiques des nouveaux composants sont également discutés.

1.1 Source froide : un enjeu du futur

Pour les centrales de grande puissance, qu'elles soient nucléaires ou thermiques à flamme, la source froide joue un rôle très important :

- elle permet d'évacuer la chaleur restante du cycle après la récupération du travail dans la turbine ;
- sa température influence la puissance produite par le cycle et son efficacité. En effet, le rendement maximal d'un cycle moteur à partir de deux sources de chaleur est le rendement de Carnot. Le rendement est exprimé sous la forme :

$$\eta = 1 - \frac{T_f}{T_c} \tag{1.1}$$

T_f est la température de la source froide, en K.
T_c est la température de la source chaude, en K.

Actuellement, les centrales de production d'électricité sont dans la plupart des cas refroidies par de l'eau. Ceci nécessite la disponibilité d'une quantité d'eau très importante: la production de l'électricité est le premier secteur en terme de besoin en eau. Il est important de noter que ce besoin est supérieur à la consommation d'eau (Kröger 1998). La quantité de l'eau demandée est restituée en totalité ou partiellement à la rivière après le refroidissement selon le type système choisi.

La Figure 1.1 représente les trois circuits d'une centrale nucléaire classique. Le circuit primaire transporte la chaleur produite par le cœur de réacteur via de l'eau sous-pression. Cette eau passe par le générateur de vapeur (GV) où elle cède sa chaleur au circuit secondaire. La puissance est récupérée par la turbine dans le circuit secondaire. La chaleur restante est ensuite évacuée vers le milieu extérieur dans le circuit tertiaire.

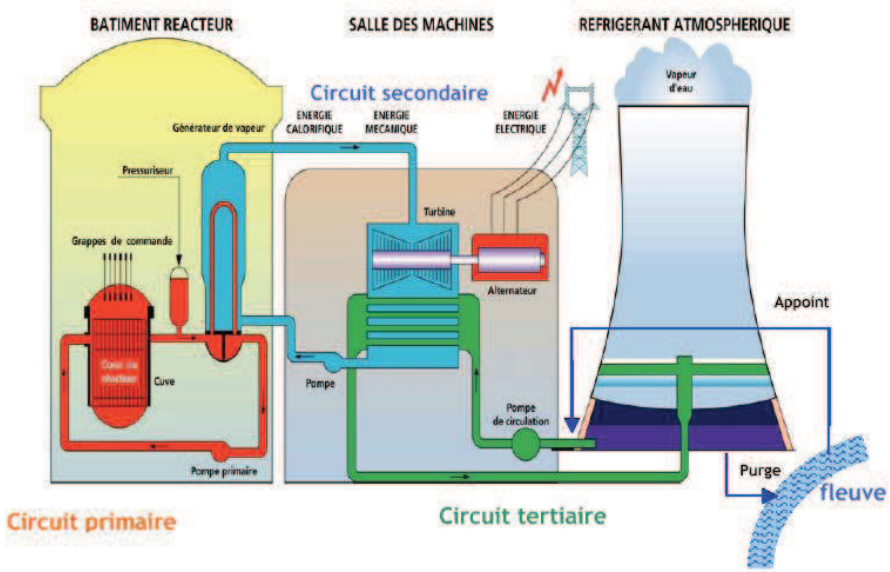


Figure 1.1 Schéma des 3 circuits d'une centrale de production refroidie par une tour humide (source EDF)

Dans cette section, nous nous focalisons sur le circuit tertiaire : le circuit de refroidissement de la centrale.

Différents types de système de refroidissement existent. Les paragraphes suivants présentent les 3 principaux :

- Refroidissement en boucle ouverte
- Refroidissement en boucle fermée
- Refroidissement à air sec

Aujourd'hui toutes les centrales en service en France utilisent les deux premières méthodes pour refroidir la vapeur d'eau provenant du générateur de vapeur. Ceci explique que les centrales sont toujours construites à proximité d'une source d'eau abondante. Les données chiffrées ci-dessous sont pour la plupart issues des sources EDF.

1.1.1 Refroidissement en boucle ouverte

Le refroidissement en boucle ouverte a pour principe de prélever l'eau de rivière ou de mer et de l'amener directement au condenseur. Le débit d'eau nécessaire est directement proportionnel à la puissance à évacuer dans le condenseur. Pour une centrale nucléaire de 900 MWe. Le débit d'eau de refroidissement est de 40 m^3/s en moyenne.

L'eau après le passage dans le condenseur s'élève en température et est restituée intégralement à la source d'eau. Il n'y a donc pas de consommation d'eau liée au refroidissement. Par contre, en respect de l'environnement, la température de l'eau réchauffée et rejetée dans la rivière ou dans la mer est réglementée. En effet, la température maximale de rejet et la valeur limite d'élévation de température de l'eau de refroidissement sont définies au cas pas cas pour les rivières, les fleuves et pour la mer.

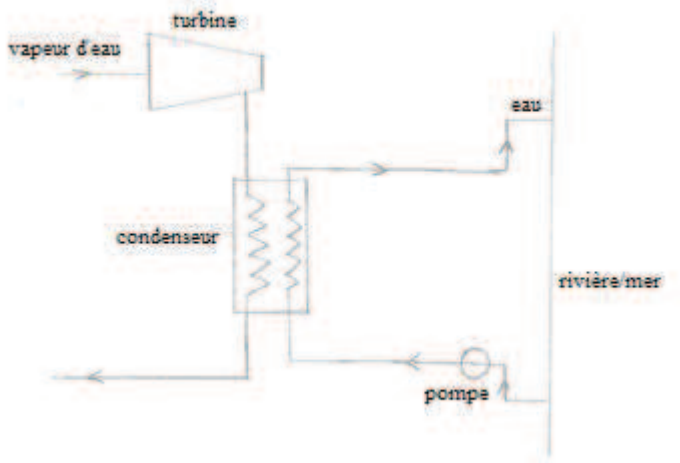


Figure 1.2 Schéma du système de refroidissement à boucle ouverte

1.1.2 Refroidissement à boucle fermée par voie humide

Le refroidissement en boucle fermée ou par voie humide est basé sur le contact entre l'air atmosphérique et l'eau de refroidissement du condenseur. Ce système nécessite la construction d'un aéro-réfrigérant. Deux phénomènes se produisent à l'intérieur de l'aéro-réfrigérant :

- un échange par évaporation : 75 % de la puissance dans le condenseur est alors évacuée par vaporisation de l'eau. L'enthalpie d'évaporation de l'eau à la pression atmosphérique est environ 2200 kJ/kg.
- un échange convectif : environ 25 % de la puissance est échangée par échange de chaleur sensible entre l'air et l'eau. Les ordres de grandeur de la chaleur spécifique de l'eau et celle de l'air à condition ambiante sont respectivement 4.18 kJ/kg/K et 1.06 kJ/kg/K .

Puisque l'échange est assuré majoritairement par vaporisation, on utilise l'air atmosphérique comme source froide principale. Le débit d'eau nécessaire pour le refroidissement est beaucoup plus faible qu'en boucle ouverte et le réchauffement de l'eau prélevée est limité. Par contre, ceci a un coût : environ 0.7 m^3/s d'eau est évaporé dans l'air pour une centrale de 1300 MWe, cette quantité d'eau étant consommée et non restituée à la source.

De plus, lors de l'évaporation de l'eau, des dépôts de sels peuvent s'accumuler. Cela pose également un problème en terme de maintenance. Il est nécessaire de purger ces dépôts de sels pour un système de refroidissement à boucle fermée. Ainsi le débit prélevé à la source d'eau, appelé le débit d'appoint, doit toujours être supérieur au débit évaporé. Le débit rejeté à la source d'eau, contenant les impuretés est appelé le débit de purge.

$$D_{appoint} = D_{evap} + D_{purge} \tag{1.2}$$

Le débit d'appoint est calculé par rapport à la concentration de sels dans la source d'eau et dans le circuit. La concentration de sel dans le circuit $C_{circuit}$ est définie lors de la conception de la machine et en fonction de la quantité d'eau disponible.

$$D_{appoint}C_{source} = D_{purge}C_{circuit} \tag{1.3}$$

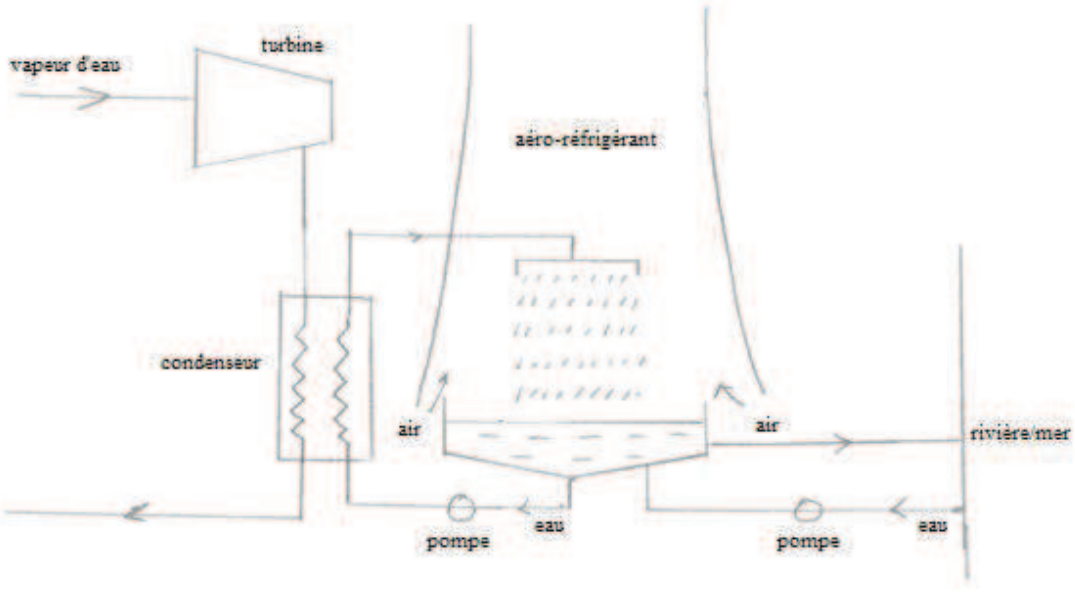


Figure 1.3 Schéma du système de refroidissement à boucle fermée

1.1.3 Refroidissement à air sec

Le refroidissement à air sec fonctionne avec des aéro-condenseurs. La puissance est évacuée dans l'air atmosphérique uniquement par convection. Cette méthode de refroidissement a pour avantage de fonctionner sans apport d'eau. Un système de ce type est très bien adapté pour les zones arides : exemples des centrales au Mexique ou en Afrique du Sud. Par contre, à puissance égale, la surface d'échange nécessaire est beaucoup plus importante : environ 4 fois celle d'un système de refroidissement en boucle fermée. Ceci implique un coût de construction plus élevé.

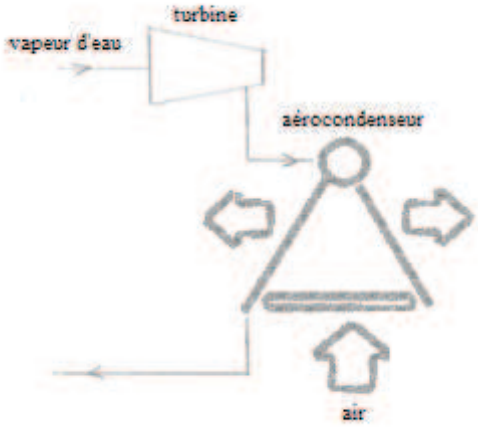


Figure 1.4 Schéma du système de refroidissement à air

Il faut noter de plus qu'en été, la température de la source froide sera plus élevée sur l'air (température sèche) que pour une tour aéroréfrigérante humide (température humide), ce qui implique une perte de puissance. En général, un système sec présente une pénalité sur le rendement.

1.1.4 Conclusion

La brève description des sources froides montre la dépendance vis-à-vis de l'eau des systèmes de refroidissement actuels. Cette situation limite d'une part l'emplacement des sites de centrales de production et d'autre part pose un problème lors des canicules. Avec le changement climatique, le manque de source froide pourrait s'accentuer dans le futur. Il est donc impératif de prévoir des solutions pour faire face à ces possibles évolutions.

L'utilisation d'aéro-condenseurs pourrait être une solution envisageable. Cependant, il faut noter que le coût d'investissement d'une telle technologie est beaucoup plus élevé en raison de la grande surface d'échange demandée. L'étude économique est donc une étape clef dans l'évaluation de la viabilité d'une telle solution, dans laquelle il est nécessaire de considérer l'ensemble du système de conversion d'énergie étant donné l'impact potentiel de la source froide utilisée sur le rendement de production.

1.2 Cycle de Rankine et Cycle Bi-étagé pour la production d'électricité

Ce paragraphe se focalise sur le système de conversion d'énergie, en partant du cas le plus ordinaire, le cycle de Rankine classique, pour aller au cas particulier du cycle bi-étagé qui fait l'objet de cette étude. Les impacts du changement d'architecture en terme de performance et de coût sont présentés.

1.2.1 Cycle de Rankine classique

Le cycle de Rankine est un cycle thermodynamique composé de deux transformations isobares et deux transformations adiabatiques. Il se rapproche du cycle de Carnot. En effet, on remplace les deux transformations isothermes dans le cycle de Carnot par les deux transformations isobares technologiquement plus faciles à réaliser. En général, le cycle de Rankine est constitué de quatre éléments principaux: une pompe, un générateur de vapeur (vaporiseur ou chaudière), une turbine, un condenseur.

La plupart des centrales de production existantes utilisent le cycle de Rankine à vapeur d'eau pour produire de l'électricité. La Figure 1.5 représente un cycle de Rankine simplifié schématisé à l'aide du progiciel Thermoptim^{TM}.

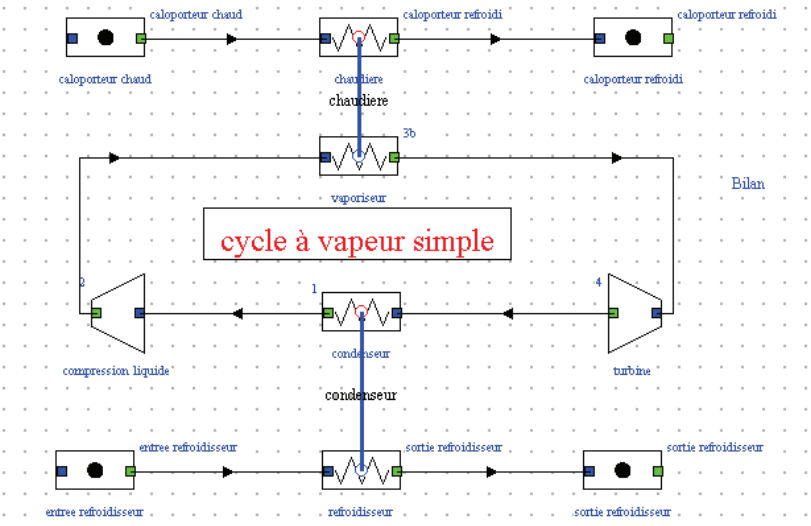


Figure 1.5 Schéma d'un cycle à vapeur simple réalisé sous Thermoptim^{TM}

Nous prenons ici l'exemple d'un cycle à vapeur d'eau. La Figure 1.6 représente le cycle ci-dessous dans le diagramme (T,s) de l'eau.

Le fluide de travail y subit plusieurs transformations :

- 1-2 : l'eau liquide entre dans la pompe où sa pression s'élève de la basse pression (BP) à la haute pression (HP)
- 2-3 : l'eau est chauffée et vaporisée dans le générateur de vapeur au contact d'une source chaude. La vapeur d'eau sort à l'état saturé ou surchauffé (le cycle est aussi appelé le cycle de Hirn dans le cas surchauffé).
- 3-4 : la vapeur d'eau est détendue dans la turbine et cède une puissance mécanique

- 4-1 : le fluide détendu entre dans le condenseur où il est liquéfié et sa chaleur est évacuée vers la source froide

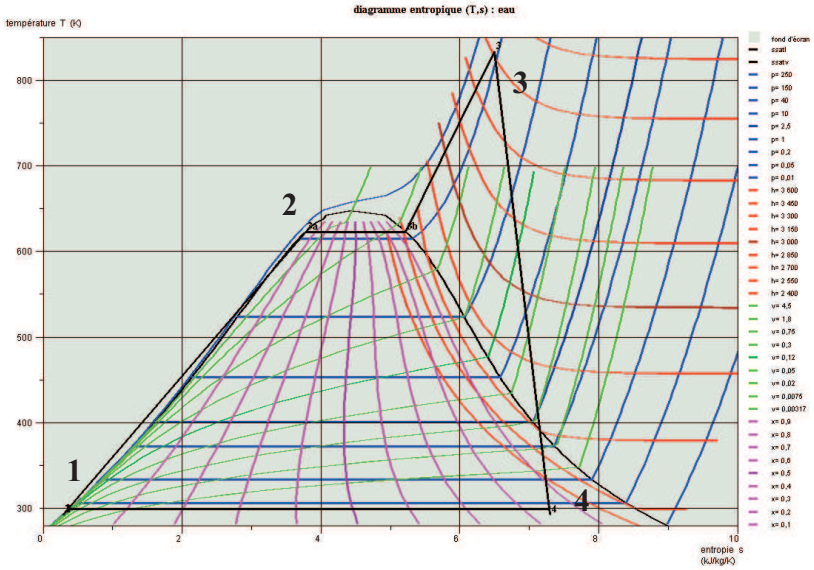


Figure 1.6 Cycle de Rankine à vapeur d'eau avec surchauffe dans un diagramme (T,s)

Dans les centrales de grande puissance fonctionnant avec un cycle de Rankine, nous pouvons observer deux points communs :

- Une très grande puissance à évacuer au condenseur, cela demande une quantité d'eau de refroidissement disponible importante,
- En rapport avec le volume massique de la vapeur d'eau à la sortie de la turbine à basse pression, la taille de turbine est très importante.

Le second point observé est illustré par la Figure 1.7. En effet, le diamètre des derniers étages de la turbine basse pression pour les centrales de très grande puissance atteint une taille très importante, de plus de 4 mètres. Il est donc nécessaire de limiter sa vitesse de rotation en raison de l'atteinte de la limite de résistance des matériaux. De plus, la fabrication de ces turbines géantes est extrêmement coûteuse.



Figure 1.7 Technicien à côté du dernier étage de la turbine vapeur (source EDF)

Ces deux points peuvent apparaître comme des faiblesses du système actuel dans la mesure où le refroidissement d'une part, la performance et la fiabilité de la turbine d'autre part, sont des sujets de préoccupation importants pour un producteur d'électricité.

1.2.2 Expérience EDF: le cycle bi-étagé Cybiam

Afin de diminuer la dépendance en eau des cycles de production et de réduire la taille des turbines à basse pression, EDF a expérimenté une nouvelle architecture de cycle constituée de deux cycles de Rankine fonctionnant respectivement avec de la vapeur d'eau et de la vapeur d'ammoniac.

Le CYcle BInaire à l'AMmoniac (CYBIAM) est le nom du projet démonstrateur conçu par EDF. Le prototype a fonctionné des années 1970 aux années 1990. Notons que l'utilisation du mot « Binaire » est un abus de langage. Il ne s'agit pas d'un cycle de Kalina fonctionnant avec un mélange eau-ammoniac, mais bien de deux cycles de Rankine en cascade.

Le Cycle bi-étagé à l'ammoniac est dérivé du cycle classique de production à vapeur d'eau. Il est constitué de deux cycles de Rankine au lieu d'un. Les derniers étages de la turbine basse pression sont supprimés. La vapeur d'eau, en sortie de la turbine à une pression plus élevée qu'on définit par le terme « pression de coupure » ou « STEP (Steam Turbine Exhaust Pressure) », est ensuite amenée dans un condenseur-bouilleur afin d'évacuer la puissance restante vers l'ammoniac. Notons que la pression de coupure est un paramètre ajustable. Puis la vapeur d'ammoniac est envoyée dans une deuxième turbine pour y subir une détente. On récupère alors cette puissance dans un deuxième alternateur. A la fin de la détente, le fluide passe dans un aérocondenseur afin d'évacuer la chaleur restante. La Figure 1.8 décrit le cycle.

Le ratio de la puissance produite par le prototype Cybiam est répartie à hauteur d'environ 80 % dans le cycle à vapeur et 20 % dans le cycle à ammoniac.

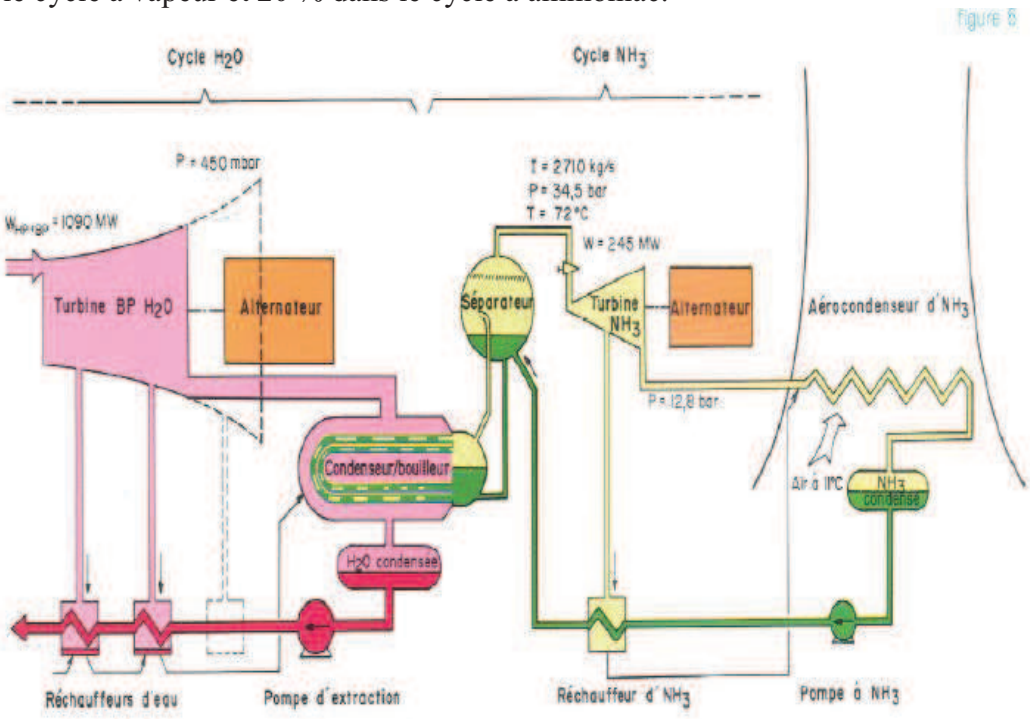


Figure 1.8 Schéma représentant le cycle bi-étagé à l'ammoniac (Fleury et Bellot 1989)

Le choix de l'ammoniac avait été justifié par les raisons suivantes :

- Une masse volumique de vapeur élevée et une chaleur latente importante : moins de débit nécessaire pour échanger la même puissance et une vapeur dense en sortie de turbine, donc une taille de turbine réduite.
- La performance élevée de l'ammoniac dans les applications à basse température
- Une température de fusion faible
- Une pression de condensation dans l'aérocondenseur supérieure à la pression d'air atmosphérique : pas de risque d'entrée d'air
- La température critique du fluide est assez élevée. Le cycle à ammoniac est un cycle sous critique. Cela permet un échange thermique entre deux paliers de changement d'état et donc des irréversibilités limitées dans le condenseur-bouilleur.

A première vue, le cycle bi-étagé à l'ammoniac présente deux avantages principaux :

- la réduction de la taille machine / composant
- l'amélioration de la performance à très basse température de source froide.

La vapeur ammoniac est environ 250 fois plus dense que la vapeur d'eau. Sa chaleur latente est deux fois plus faible que celle de l'eau.

Tableau 1.1 Comparaison du volume massique et de la chaleur latente de l'ammoniac et de l'eau à 30 °C (NIST 2007)

	V vapeur (m3/kg) à la sortie turbine	L (kJ/kg) bouilleur
NH3	0.096	1123
H2O	25.3	2418

Le débit volumique nécessaire pour la turbine est diminué d'un facteur 125. La Figure 1.9 représente la turbine à ammoniac conçue par Alstom pour le projet Cybiam. A grande échelle, cette solution pourrait conduire à une réduction de coût d'investissement non négligeable. Simultanément, le problème posé par la limite de la résistance des matériaux constituant la turbine BP serait résolu.



Figure 1.9 Photo de la turbine à l'ammoniac (source EDF)

De plus, lorsque la température de la source froide diminue, les analyses ont postulé une surpuissance produite par une centrale à cycle bi-étagé à l'ammoniac par rapport à une centrale classique. En effet, si la température de la source froide diminue, la pression de la vapeur à la sortie de la turbine diminue. Il devient alors théoriquement possible de récupérer plus de travail (*W*) lors de la détente. Ceci implique en contrepartie une augmentation de vitesse d'échappement du fluide. De plus, la masse volumique de la vapeur du fluide augmente aussi lors de la diminution de la température de la source froide. Donc les pertes cinétiques par vitesse restante (*PVR*) à la sortie de la turbine BP deviennent plus importantes.

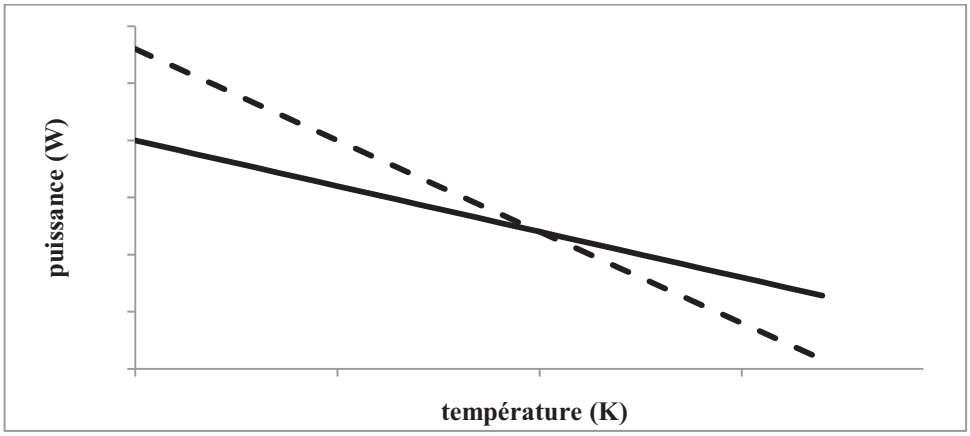


Figure 1.10 Représentation de la surpuissance théorique d'une centrale et de la perte cinétique (en pointillés) en fonction de la température

Dans le cas de l'eau, pour une centrale vapeur classique, le surplus de puissance récupéré est plus que compensé par l'augmentation des pertes cinétiques en dessous de 5 °C de température extérieure (Figure 1.11), ce qui amène à bloquer la basse pression en dessous de ce seuil. Les pertes sont moindres dans le cas du Cybiam étant donnée la plus faible vitesse de l'ammoniac. Pour l'ammoniac, on observe une amélioration de puissance globale lorsque la température de l'air extérieur (et donc la température de condensation du cycle) diminue avec une pente de - 0.46 % / K.

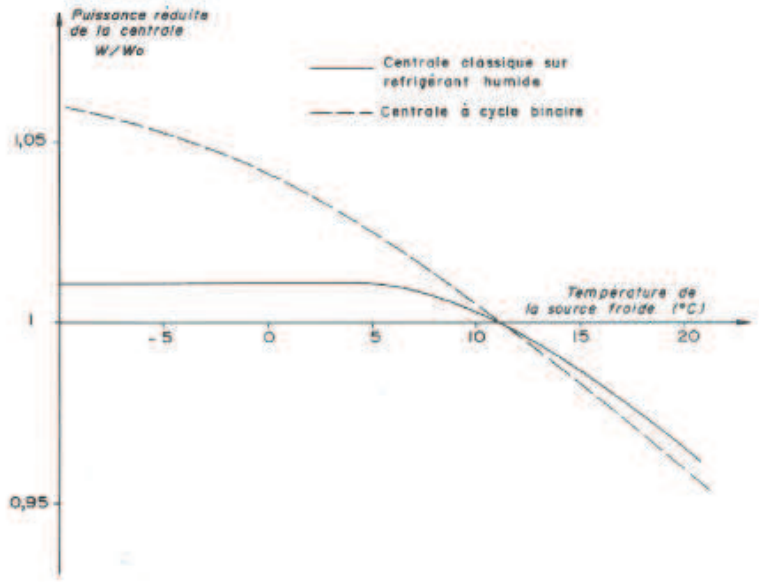


Figure 1.11 La production du cycle bi-étagé à l'ammoniac par rapport à un cycle à vapeur d'eau classique en fonction de la température de l'air ambiant, données des essais Cybiam (Fleury et Bellot 1989)

Sur le plan économique, les études préliminaires d'EDF sur un cycle du type Cybiam produisant 1300MWe ont montré le résultat suivant : l'économie réalisée sur la réduction de taille turbine et de la salle machine suffit à compenser le surcoût de construction des aérocondenseurs (Fleury et Bellot 1989). A priori, il n'y a donc pas de surcoût par rapport à une centrale à vapeur standard.

De plus, il faut remarquer que la température de la source froide doit diminuer sensiblement afin de pouvoir profiter de la surpuissance susceptible d'être produite par le cycle bi-étagé. Le refroidissement à l'air sec correspond donc bien à ce critère (en comparaison par exemple à une centrale à condensation à eau de mer). Ainsi l'architecture du cycle bi-étagé et le refroidissement par air sec peuvent être qualifiés de complémentaires.

Par conséquent, tout en résolvant les problèmes posés par la taille de la turbine BP d'un cycle classique, le projet Cybiam a montré la possibilité de rendre la production d'électricité moins dépendante de l'eau en déployant le cycle bi-étagé. La performance de ce dernier durant les périodes froides est particulièrement intéressante. De plus, cette innovation n'engendre pas de surcoût d'investissement.

Cependant la toxicité de l'ammoniac et des problèmes de corrosion ont remis en cause l'intérêt du Cybiam pour des applications industrielles à grande échelle. On souhaite donc étudier la possibilité d'utiliser un autre fluide de travail plus adapté et éventuellement plus performant afin de remplacer l'ammoniac.

1.2.3 Cycle de Rankine Organique

Notre étude va consister à chercher un fluide de travail pour remplacer l'ammoniac. L'expérience du Cybiam nous a fourni des connaissances sur le niveau de température du

condenseur-bouilleur. Pour l'ammoniac, elle peut varier entre 70 et 150 °C. Cette température dépend de la pression de coupure. Elle correspond à une pression de coupure de 0.2 à 2 bar. Il s'agit donc de trouver un fluide alternatif dans un cycle de récupération de chaleur à basse température.

Or, l'utilisation du Cycle Organique de Rankine (Organic Rankine Cycle, ORC en anglais) s'avère être une solution intéressante dans le domaine de la récupération de chaleur à basse température. Un fluide organique, plus adapté pour faire fonctionner des cycles à basse température que l'eau, est utilisé dans ce type de cycle de Rankine. Des centrales géothermiques et des centrales de biomasse fonctionnant avec le système ORC ont été développées lors de cette dernière décennie (Desideri et Bidini 1997) pour des sites pilotes ou de production de petite puissance. Un des exemples français de ces centrales ORC est la centrale géothermique de Soultz dans la région de Strasbourg. Les niveaux de température de la source chaude de ces centrales ORC correspondent bien à notre application. Les informations disponibles sur ces installations dans la littérature, et notamment le choix des fluides de travail, peuvent donc s'avérer précieuses pour notre travail de thèse.

Différentes architectures d'ORC ont été étudiées par le passé. Liu et al. (Liu, Chien et Wang 2004) ont montré en considérant des ORCs surchauffés et sous-refroidis que la surchauffe et le sous-refroidissement ne permettent pas d'améliorer la performance du système. Roy et al. (Roy, et al. 2010) ont analysé la performance de quatre cycles fonctionnant avec les réfrigérants R12, R123, R134a et R717 avec surchauffe. Un ORC simple (ie constitué de 4 composants principaux, condenseur, pompe, chaudière, turbine, en série sur un seul circuit) peut être amélioré notamment en introduisant des récupérateurs et des prélèvements de turbine (Desai et Bandyopadhyay 2009). Desideri et al. (Desideri et Bidini 1997) ont étudié différents types de cycles pour la production d'électricité à partir de la géothermie et ont conclu que l'ORC avec récupérateur est une solution prometteuse. Dai et al. (Dai, Wang et Lin 2009) ont comparé les efficacités des ORC simples et des ORC avec récupérateur sur une dizaine de fluides (R236ea et R245fa inclus) et ont constaté que le système avec récupérateur est légèrement plus performant.

Cependant, aucun fluide n'a été désigné comme le fluide optimal pour l'application ORC, du fait des interdépendances entre le fluide de travail, les conditions de fonctionnement et l'architecture du cycle.

1.2.4 Conclusion

A partir des observations faites sur les centrales de grande puissance existantes, nous avons identifié deux points d'amélioration simultanément possibles : diminution de la dépendance des centrales en eau et réduction de la taille des turbines à basse pression. Pour aller dans ce sens, EDF a travaillé sur un cycle de Rankine bi-étagé à ammoniac. Le cycle à ammoniac permet d'augmenter la puissance à basse température. Mais les natures toxique et corrosive de l'ammoniac laissent la porte ouverte aux recherches sur d'éventuels autres fluides de travail.

Compte tenu du succès récent des applications ORC dans le domaine de récupération de sources de chaleur à basse température, il est possible de rechercher de nouveaux fluides de travail parmi les fluides organiques. Nous cherchons ainsi à déterminer le fluide le plus adapté pour l'application bi-étagée. Le choix du fluide organique dépend de sa performance énergétique et de la compacité des composants. Pour cela, l'architecture du cycle doit être

définie. Le paragraphe suivant détaille les paramètres et les variables du cycle bi-étagé que nous allons considérer dans nos études.

1.3 Architecture et caractéristiques du cycle bi-étagé SPX

Afin de nous approcher suffisamment des applications existantes à forte puissance et en même temps d'envisager les évolutions attendues dans un futur proche, nous considérons les conditions d'un cycle vapeur du type Super Phénix (SPX) sans les derniers étages de la turbine basse pression. La puissance du cycle considéré est de l'ordre de 650 MWe. L'architecture du cycle à vapeur de Super Phénix est une version simplifiée du cycle réel issue d'une étude antérieure (source EDF). L'écart de performance entre la version simplifiée et l'architecture réelle est de l'ordre de 2 points de rendement.

Le cycle bi-étagé que nous considérons est constitué d'un cycle de Rankine à vapeur d'eau et d'un second cycle fonctionnant avec un autre fluide de travail à déterminer. Nous allons rechercher les fluides candidats essentiellement parmi les fluides organiques. Le cycle est refroidi par l'air sec afin d'éliminer la contrainte de la localisation du site de la centrale de production.

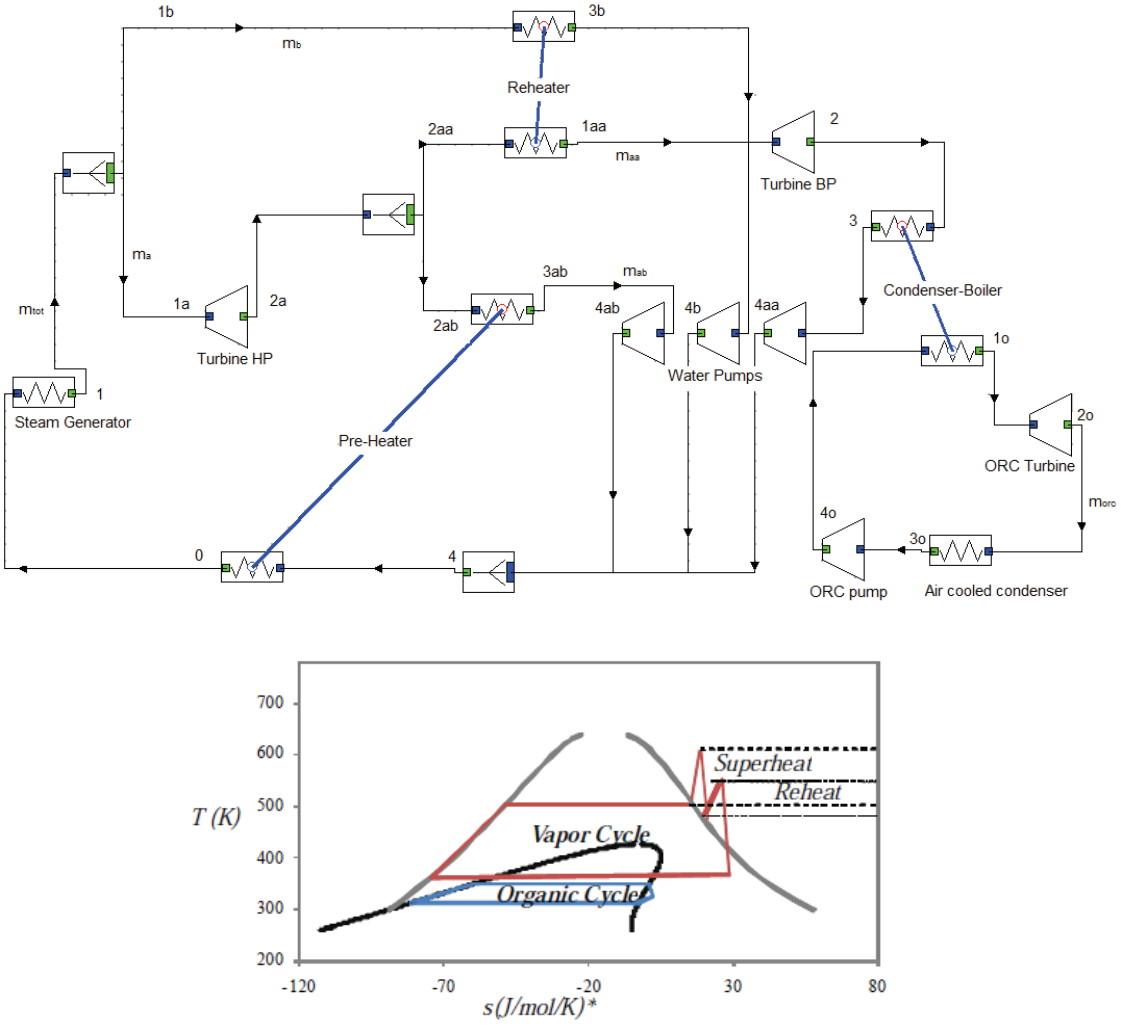


Figure 1.12 Schéma du cycle bi-étagé adapté aux conditions Superphénix sous Thermoptim^{TM} et son diagramme (T,s) représentatif

L'architecture du cycle bi-étagé et les conditions de fonctionnements considérées sont respectivement représentées dans la Figure 1.12 et le Tableau 1.2. En raison de notre recherche de fluides candidats parmi les fluides organiques, nous appellerons « ORC » le cycle basse température du cycle bi-étagé dans la suite de ce document.

Le cycle bi-étagé schématisé contient une resurchauffe et un soutirage pour réchauffer le fluide de travail. La chaleur restante du cycle à vapeur d'eau est transférée à l'ORC par le condenseur-bouilleur.

Tableau 1.2. Conditions de fonctionnement du cycle bi-étagé

Composant	Variable	Valeur
Générateur de vapeur	Température d'entrée (T_0) en °C	208
	Température de sortie (T_1) en °C	490
	Pression d'entrée (P_0) en bar	230
	Pression de sortie (P_1) en bar	180
	Débit massique (m) en kg/s	680
Turbine vapeur HP	Efficacité isentropique (η_{THP})	0.87
	Taux de détente	20
Turbine vapeur BP	Efficacité isentropique (η_{TBP})	0.85
	Taux de détente	Dépendant de la valeur de STEP
Pompe eau	Efficacité isentropique (η_P)	0.7
Préchauffeur	Pincement (ΔT_{PH}) en K	4
Réchauffeur	Surchauffe (ΔT_{SH}) en K	17
	Débit massique (m_b) en kg/s	20
Condenseur-bouilleur	**Pression de coupure (Steam Turbine Exhaust Pressure, $STEP$) en bar**	**Valeur contrôlée, entre 0.2 - 1**
	Pincement (ΔT_{CB}) en K	5
	Température d'évaporation (T_{EVAPO})	Dépendant de la valeur de STEP
Turbine ORC	**Efficacité isentropique (η_{TO})**	**0.85**
Pompe ORC	Efficacité isentropique (η_{PO})	0.7
Aérocondenseur	**Température de l'air (T_{air}) en °C**	**11**
	Approche (ΔT_{ACC}) en K	**29**

L'étude des composants relatifs au second cycle est très importante (ils sont notés en gras dans le Tableau 1.2). En effet, nous nous intéressons non seulement aux performances des cycles comme dans la plupart des études d'ORC identifiées dans la littérature, mais nous souhaitons également réaliser une étude de dimensionnement et prédire l'éventuel gain énergétique et économique de ce système sur sa durée de vie.

En supprimant les derniers étages de la turbine BP et en rajoutant un ORC, la différence de coût entre un cycle bi-étagé et un cycle classique provient principalement des composants additionnels: le condenseur-bouilleur, l'aérocondenseur et la turbine ORC. Le coût de la pompe ORC étant relativement faible, il ne sera pas étudié.

Cependant, avant de se poser la question du dimensionnement, nous devons définir les composants à évaluer. Nous nous posons alors la question suivante : quels types d'échangeurs de chaleur et de turbines faut-il choisir ?

1.4 Choix des composants du cycle bi-étagé : échangeurs de chaleur

Les échangeurs thermiques sont des équipements utilisés dans le transfert d'énergie entre deux ou plusieurs corps de températures différentes. Les échanges peuvent être à contact directs ou indirects. Dans le cadre de notre projet, nous nous intéressons surtout aux échanges entre l'eau et un fluide caloporteur ou entre l'air et ce même fluide. L'étude ne portera que sur les échanges indirects. Pour la même raison, les échangeurs Gaz-Gaz, en dehors du domaine d'application, ne seront pas traités par la suite.

1.4.1 Echangeur Liquide (diphasique) – Gaz

Dans un échange de chaleur la résistance thermique au passage de la chaleur du fluide chaud vers le fluide froid peut être décomposée en trois termes : résistance thermique de convection du fluide chaud, celle du fluide froid et résistance de conduction de la paroi. Dans le cas d'un échange entre un liquide (ou un fluide diphasique) et un gaz sec, ce dernier possède souvent un coefficient d'échange relativement faible. Afin d'améliorer le transfert de chaleur, il est possible d'agir soit sur la surface d'échange soit sur le coefficient d'échange en augmentant la turbulence. Il est, par exemple, possible de réaliser un échange plus intense en employant des tubes ou des plaques ailetés.

1.4.1.1 Echangeur à tubes à ailettes

Les échangeurs à tubes à ailettes sont souvent rencontrés dans les procédés industriels de grande puissance. Parmi les échangeurs à tubes à ailettes, nous distinguons les tubes à ailettes continues et les tubes à ailettes indépendantes. Lors de la fabrication des tubes à ailettes continues, les tubes métalliques (souvent en cuivre) sont sertis dans les plaques d'ailette. Du fait de la simplicité de la fabrication, ils sont généralement moins coûteux par unité de surface d'échange que les tubes à ailettes indépendantes, qui ont le plus souvent besoin de faire appel à des procédés tels que l'extrusion ou le soudage. Cependant, lors de construction d'échangeurs de taille très importante, l'assemblage de tubes à ailettes indépendantes est largement plus pratique.

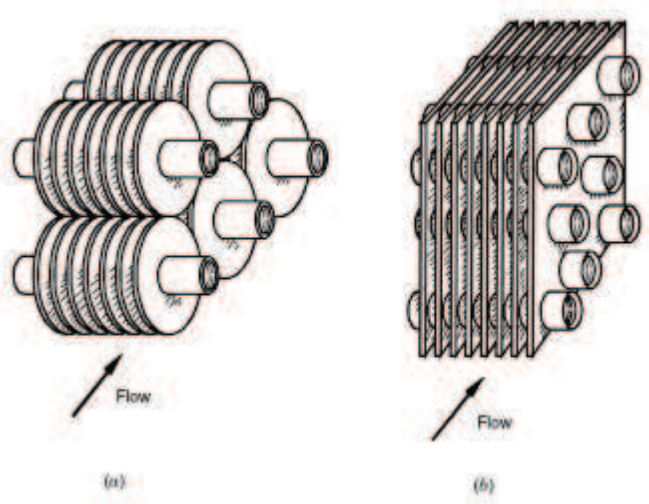


Figure 1.13 Tubes à ailettes continues (b) et tubes à ailettes indépendantes (a) (Shah et Sekulic 1998)

Ces échangeurs sont principalement utilisés pour :

- Refroidir ou réchauffer de l'air/gaz
- Déshumidifier l'air
- Condenser de la vapeur d'eau ou de fluides organiques (aéro-réfrigérant)

Les tubes sont en général fabriqués en cuivre, en aluminium ou en acier. Afin d'augmenter le coefficient d'échange, des traitements spécifiques peuvent également être effectués sur la surface intérieure des tubes et sur les ailettes.

La puissance échangée dans un échangeur à ailettes peut aller de l'ordre du kW jusqu'à plusieurs dizaines de MW (cycle combiné) avec une température qui est généralement inférieure à 500 °C. Les pressions supportables par les échangeurs sont directement liées à la tenue mécanique des matériaux des tubes.

1.4.1.2 Echangeur à micro canaux

Les échangeurs à micro-canaux sont le plus souvent utilisés dans les systèmes de climatisation. Ils permettent d'évaporer ou de condenser le fluide frigorigène en échangeant la chaleur avec l'air extérieur.

Ces échangeurs de taille relativement faible sont souvent fabriqués en aluminium. Ils sont composés de tubes plats extrudés lisses ou rainurés (Figure 1.14 en violet) sur lesquels sont attachées des ailettes persiennées (Figure 1.14 en rouge) afin d'augmenter la surface d'échange.

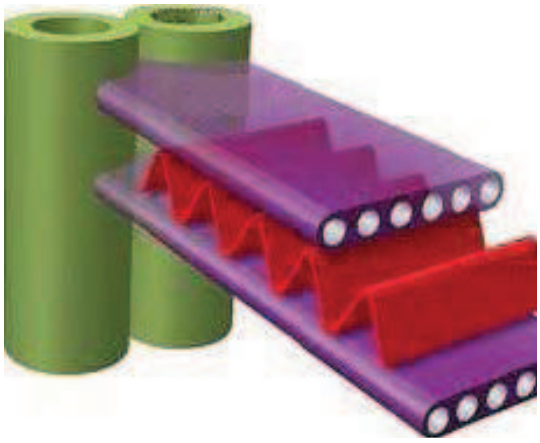


Figure 1.14 Représentation des composants d'un échangeur à micro-canaux (GREThh 2012)

Ce type d'échangeur peut supporter une pression jusqu'à 200 bar et une température généralement inférieure à 150 °C. Les pièces des échangeurs étant brasées dans un four spécifique, les perspectives d'augmentation de la taille unitaire de ces échangeurs semblent limitées. Par conséquent, la puissance totale échangée est généralement inférieure à celle des échangeurs à tubes à ailettes, seulement de l'ordre de quelques dizaines de kW au maximum (groupes de production d'eau glacée à condensation à air).

1.4.2 Echangeur Liquide (diphasique) –Liquide (diphasique)

1.4.2.1 Echangeur à tubes et calandre

Un échangeur à tubes et calandre est composé d'un faisceau de tubes montés dans une boite cylindrique (calandre). Des plaques métalliques perforées (chicanes) sont installées à l'intérieur de la calandre afin de maintenir les tubes en place et de diriger le débit de fluide passant entre les tubes.

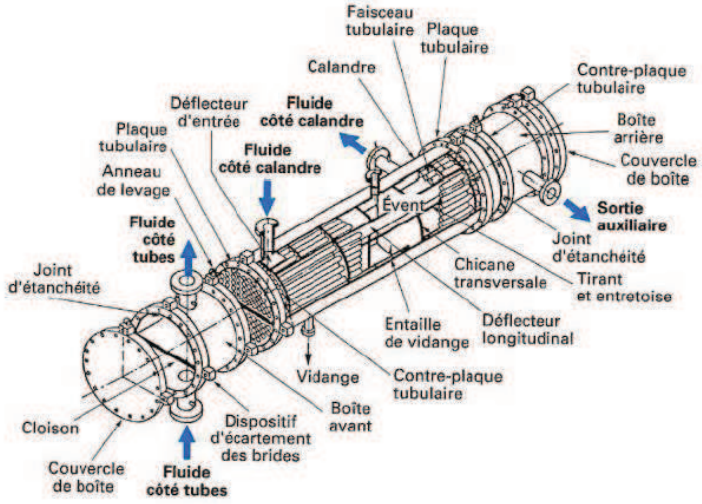


Figure 1.15 Schéma d'un échangeur à tubes et calandres (Bontemps, et al. n.a.)

Les échangeurs à tubes et calandre sont utilisés pour chauffer ou refroidir un liquide. Les avantages de ce type d'échangeur sont :

- Puissance échangée très importante : de l'ordre du kW à l'ordre du GW
- Intervalles de pression et température supportées très large : 20 – 500 bar et jusqu'à 500 °C pour les installations industrielles courantes, 1000 bar et 1100 °C pour des installations spécifiques (Shah et Sekulic 1998).
- Systèmes bien étudiés expérimentalement : de nombreuses données et corrélations sont disponibles : « TEMA (Tubular Exchanger Manufacturers Association) standard » et « ASME (American Society of Mechanical Engineers) boiler and pressure vessel code ».

Les tubes sont souvent fabriqués en cuivre ou aluminium. Les calandres et la boîte sont en acier. L'étanchéité est assurée par brasage ou soudure. Afin d'améliorer l'échange de chaleur, certains échangeurs à tubes et calandre sont composés de tubes rainurés au lieu de tubes lisses.

1.4.2.2 Echangeur à plaques

Un échangeur à plaque et joint est constitué d'un certain nombre de fines plaques métalliques rectangulaires dont l'étanchéité est assurée par des joints en polymères. L'ensemble est fixé sur un cadre métallique. Les plaques, souvent en acier inox ou en titane pour certaines applications spécifiques, sont fabriquées par procédé d'emboutissage. Les surfaces des plaques comportent des formes ondulées qui ont pour but d'augmenter la turbulence (amélioration du coefficient d'échange) et d'augmenter la compacité.

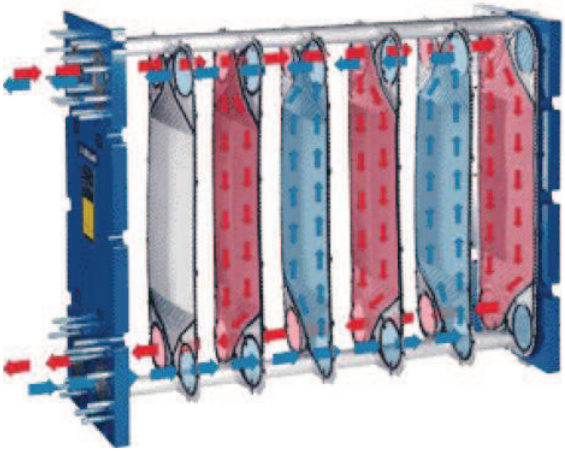


Figure 1.16 Schéma d'un échangeur à plaques et joints (GREThh 2012)

Ce type d'échangeur peut être utilisé en tant qu'évaporateur ou condenseur diphasique/liquide. La puissance échangeable dans un échangeur à plaques et joints conventionnel va du kW au GW.

Les dimensions typiques des échangeurs à plaques et joints est donnée par Shah (Shah 1994) :

Tableau 1.3 Dimension d'un échangeur à plaques et joints typique

Surface maximale par bloc	2500 m^2
Nombre de plaques	3 – 700
Epaisseur / plaque	0.5 – 1.2 mm
Surface / plaque	0.02 – 5 m^2
Espace entre plaques	1.5 – 7.0 mm
Largeur / plaque	70 – 1200 mm
Longueur / plaque	0.4 – 5 m

Les avantages des échangeurs à plaques et joints sont les suivants :

- Facilité de démontage et de nettoyage
- Flexibilité vis-à-vis du montage
- Moins d'encrassement et moins de volume par rapport à l'échangeur à tubes et calandre
- Meilleure efficacité thermique que l'échangeur à tubes et calandre : de l'ordre de 93% avec une approche de 1K possible

Cependant, dû à son assemblage, sa tenue en température et en pression est moindre que celle de l'échangeur à tubes et calandres : température < 200 °C et pression < 20 bar.

Des variantes d'échangeur à plaques sont disponibles, notamment pour assurer l'étanchéité. C'est le cas de l'échangeur à plaques brasées et de l'échangeur à plaques soudées qui présentent une meilleur tenue en pression, de l'ordre de 40 bar. Cependant, en soudant les pièces, le démontage et le nettoyage de l'échangeur sont moins faciles que pour les échangeurs à plaques et joints. Il existe des échangeurs qui permettent de tenir la pression jusqu'à 200 bar et la température jusqu'à 815 °C avec une technologie de type « plaque calandre » comme les Packinox par exemple. Le Tableau 1.4 représente l'ordre de grandeur des surfaces d'échange de ces échangeurs à plaques soudées:

Tableau 1.4 Données sur un échange à plaques soudées Packinox

Longueur de plaque Packinox	20 m
Largeur de plaque Packinox	1.5 m
Surface d'échange maximale / bloc Packinox	> 10000 m^2

A puissance égale, les échangeurs à plaques, plus compacts que les échangeurs à tubes et calandre, pourraient être une option viable pour le condenseur-bouilleur.

1.4.2.3 Echangeur à plaques spirales

L'échangeur à plaques spirales est constitué de deux rubans de tôles enroulés et maintenus parallèles. La distance entre les surfaces d'échange des deux canaux est maintenue constante par des taquets soudés sur les plaques. La circulation des fluides est du type monocanal.

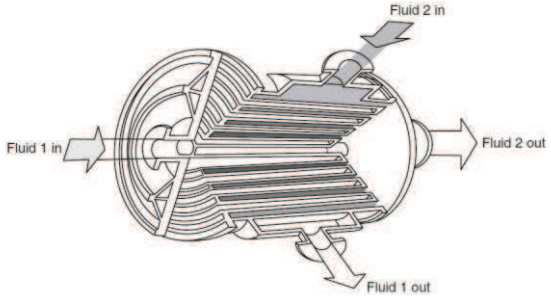


Figure 1.17 Schéma représentative d'un échangeur à plaques spirales (Shah et Sekulic 1998)

Le principal avantage de ce type d'échangeur est sa compacité et sa résistance à l'encrassement. Cependant de par sa structure, la taille de l'échangeur à plaques spirale est limitée. Ses pression et température de travail maximales restent faibles par rapport à celles des autres types d'échangeurs cités dans ce paragraphe : température < 500 °C et pression < 25 bar. La puissance échangeable est inférieure au MW.

1.4.3 Choix technologique des échangeurs pour l'application cycle de production d'électricité bi-étagé

Le choix technologique des échangeurs concerne uniquement les composants additionnels :

- le condenseur-bouilleur pour l'échange thermique entre l'eau du circuit secondaire et le fluide du cycle ORC
- l'aéro-condenseur pour l'échange thermique entre le fluide de travail du cycle ORC et l'air extérieur

Suite à la description précédente, nous remarquons que les principaux critères de choix des échangeurs dans le cadre de notre projet peuvent être classés de la manière suivante:

- Critères fonctionnels :
  - Usages
  - Température limite
  - Pression limite
  - Puissance thermique totale échangée

- Critères technologiques :
  - Matériaux utilisés
  - Surface d'échange et Compacité

Le Tableau 1.5 ci-dessous résume l'ensemble des critères de sélection des différents échangeurs vus dans les paragraphes précédents :

Tableau 1.5 Caractéristiques des échangeurs classés selon les critères de choix

Type d'échangeur	**Usage**	**T limite**	**P limite**	**Puissance totale échangée par bloc**	**Matériaux conventionnellement utilisés**	**Surface et Compacité**	**Commentaire**
Tubes à ailettes	Refroidir ou réchauffer de l'air/gaz, déshumidifier l'air, récupérateur de gaz, condenseur vapeur d'eau ou de fluide organique (aéro-réfrigérant)	< 500 °C	Dépendant directement du matériau	kW-MW	Cu, Al, acier	3300 m^2/m^3 disponible commercialement, Facilement modulable	
Micro-canaux	Evaporateur ou condenseur des groupes de climatisation	< 150 °C	< 200 bar	10 -100 kW limitée par sa taille	Al	Jusqu'à 5900 m^2/m^3 Plus compact que les tubes à ailettes.	
Tubes et calandre	Refroidir ou chauffer liquide, Evaporateur, condenseur	Dépendant directement du matériau < 1100 °C (cas extrême)	Dépendant directement du matériau < 1000 bar (cas extrême)	kW - GW	Cu, Al, acier	< 700 m^2/m^3 pour système à tubes lisses	Technologie la moins contrainte par les conditions d'utilisation. Mais aussi moins compact. Standard TEMA
Plaques	Refroidir ou chauffer liquide, Evaporateur, condenseur	< 200 °C (à joints) < 815 °C (soudé, Packinox)	< 20 bar (à joints) < 200 bar (soudé, Packinox)	kW - GW	Acier inox, titane	2500 m^2 par bloc pour les échangeurs à plaques et joints, jusqu'à 10000 m^2 par bloc pour les Packinox Plus compact (1/2 à 1/3 du volume d'un échangeur à tubes et calandre de même puissance)	
Spiral	Refroidir ou chauffer liquide, Evaporateur, condenseur	< 200 °C	< 30 bar	MW	Acier inox, titane, alliages de nickel	500 m^2 pour un diamètre de 1.8 m Environ 20% moins volumineux qu'un échangeur à tubes et calandre de même puissance	

Afin de sélectionner les échangeurs de chaleur du cycle bi-étagé, les contraintes particulières pour ce cycle sont décrites ci-dessous :

- Température peu élevée :

Le niveau de température de la source chaude est limité pour le cycle ORC. La température du condenseur-bouilleur est généralement inférieure à 200 °C. De plus, cette température est directement liée à la pression de coupure du cycle à vapeur d'eau.

- Pression moyennement élevée :

  - *Condenseur-bouilleur :*

    Du fait du contrôle de la pression de coupure (côté vapeur d'eau), la pression de sortie turbine du cycle de Rankine à vapeur restera inférieure à 2 bar. Or, comme nous avons choisi d'utiliser un cycle ORC sous critique pour récupérer l'énergie restante, la pression maximale du cycle reste en-dessous de la pression critique du fluide. La plupart des fluides testés actuellement pour notre application ont une pression critique comprise entre 25 et 40 bar.

  - *Aéro-condenseur :*

    L'échange s'effectue entre l'air (1 bar) et un fluide de travail à basse température. La basse pression du cycle ORC a été calculée. Les résultats montrent que, pour la plupart des fluides testés, les basses pressions n'excèdent pas les 5 bars (par exemple, autour de 2 bars pour le R245fa et moins de 1 bar pour le R365mfc).

- Puissance thermique à échanger très importante

Le système bi-étagé a pour objectif de remplacer le cycle vapeur classique et de produire de l'électricité pour une centrale de 650 MWe de puissance électrique nominale. La quantité de puissance à évacuer est extrêmement importante aussi bien dans le condenseur bouilleur que dans l'aéro-condenseur. Pour un cycle bi-étagé basique dont l'efficacité est de l'ordre de 30%, en supposant que 80% d'électricité est produite par le cycle à vapeur et 20% par le cycle ORC, nous avons une puissance d'environ 1.7 GW à échanger au niveau du condenseur-bouilleur et un peu plus de 1.5 GW dans l'aéro-condenseur. Il n'est donc pas envisageable d'utiliser des échangeurs de puissance inférieure au MW par bloc d'échange.

Si nous comparons les trois conditions évoquées à la table des caractéristiques des échangeurs, le choix technologique pour les deux échangeurs du cycle ORC est le suivant:

- **Condenseur-bouilleur : Echangeur à tubes et calandres ou de l'échangeur à plaques soudées**
- **Aéro-condenseur : Echangeur à tubes à ailettes**

Concernant la dimension des tubes et les ailettes, nous considérons les composants disponibles dans l'industrie pour éviter le surcoût d'une fabrication sur mesure.

1.4.4 Conclusion

Un choix parmi les technologies d'échangeurs disponibles est nécessaire avant d'effectuer le dimensionnement de nos installations. Il est d'autant plus important qu'il déterminera la différence de coût d'investissement entre une centrale fonctionnant avec un cycle bi-étagé et une centrale classique.

Etant donnés les technologies d'échangeur actuelles et les conditions du cycle étudié, les échangeurs à tubes et calandre et les échangeurs à plaques soudées semblent être adaptés pour remplir la fonction de condenseur-bouilleur. La technologie du premier est mature et très utilisée pour les chaudières de grande puissance. La technologie du second est plus récente et plus compacte.

Concernant l'aéro-condenseur, nous disposons de moins de choix compte tenu de l'importance de la puissance à évacuer. Les tubes à ailettes semblent être la solution la mieux adaptée. Cependant, il faudra mettre de nombreux blocs d'échangeurs en parallèle afin de pouvoir dissiper toute la puissance dans l'air ambiant.

1.5 Choix des composants du cycle bi-étagé : les turbines ORC

Nous pouvons classer les turbines utilisées dans les centrales de production d'électricité en deux catégories principales: turbine radiale et turbine axiale. La turbine radiale est plus souvent utilisée dans le cas où le débit du fluide est faible et le rapport de la détente est important. Dans le cas inverse, la turbine axiale est préférée (Silla 2003).

Si un fluide organique est considéré dans un cycle de récupération d'énergie à basse température, le rapport de détente dans la turbine reste peu élevé. Le Tableau 1.6 représente les rapports de détente de plusieurs fluides utilisés dans des ORCs en considérant une température d'évaporation de 120 °C et une température de condensation de 40 °C :

Tableau 1.6 Exemples de rapports de détente de 3 fluides organiques

Fluide organique	Pression d'entrée (bar)	Pression de sortie (bar)	Rapport de détente
isopentane	10.86	1.51	7.17
Isobutane	28.33	5.31	5.33
R245fa	19.27	2.50	7.69

Pour notre application, le rapport de détente n'est pas a priori un facteur limitant dans le choix du type de turbine. En revanche, la puissance produite par la turbine ORC présente une part importante de la qualité globale d'électricité. En considérant le cycle bi-étagé de 650 MWe décrit au paragraphe 1.3, si 20 % de puissance est produite sur le second cycle (en reprenant la valeur du prototype Cybiam), la détente du fluide organique doit fournir une puissance de 120 MWe.

Compte tenu de cette forte puissance, il est plus judicieux de choisir les turbines du type centrifuge axial dans le cas de notre application.

Cette proposition peut également être vérifiée par les données des constructeurs spécialisés dans la construction des turbines ORC.

Le Tableau 1.7 est une liste récapitulative non-exhaustive de turbines ORC commerciales existantes.

Tableau 1.7 Liste de turbines ORC commerciales centrifuges de différentes marques (Cirincione 2011)

Marque	Type de turbine centrifuge	Puissance
Ormat	Axial	11.3 MW
Turboden	Axial	1-7 MW
Pratt and Whitney	Radial	280 kW
General Electric	Radial	125 kW
Freepower	Radial	6-120 kW
Tri-O-Gen	Radial	60 – 165 kW
Nelson, Cummins	Radial	60 kW

On observe que la turbine axiale devient le choix de technologie prépondérant lorsque la puissance dépasse 1 MWe.

1.6 Conclusion

Devant l'importance de la disponibilité de l'eau comme source froide pour les centrales de production de grande puissance, il est sans doute souhaitable de rendre les systèmes de conversion d'énergie moins dépendants en eau. Cela permet d'anticiper les évolutions des politiques environnementales, de plus en plus strictes, et des situations où l'eau devient moins disponible dans le futur. Cependant l'utilisation directe de refroidissement par l'air sec dans un cycle de Rankine classique se heurte à la question de viabilité économique.

Une seconde constatation peut aussi être faite sur la taille très importante des étages de basse pression des turbines à vapeur d'eau dans les centrales actuelles du fait de la faible masse volumique de la vapeur d'eau à basse pression.

Une solution technique alternative de production d'électricité a été imaginée pour rendre le système de conversion moins dépendant en eau et en même temps avoir une salle machine plus compacte: le cycle de Rankine bi-étagé constitué de deux cycles de Rankine en cascade.

Testé sur le prototype Cybiam par EDF dans les années 70-90, le cycle de Rankine bi-étagé à ammoniac a montré ses avantages. Son architecture permet de :

- Réduire la taille des salles machine et de rendre l'installation et l'utilisation des aérocondenseurs économiquement viable,
- Réduire la dépendance en eau des centrales,
- Produire une surpuissance par temps froid.

Au-delà de cette première expérience, les propriétés de l'ammoniac (toxicité, corrosion), fluide de travail utilisé, n'ont pas permis une industrialisation du système.

Pour dépasser les limites techniques et de sécurité posées par l'utilisation de l'ammoniac, nous proposons de tester d'autres candidats possibles, notamment des fluides organiques utilisés dans les ORC qui permettent de récupérer de l'énergie à basse température. Nous nous sommes intéressés particulièrement au choix des composants additionnels du cycle bi-étagé. Le choix des échangeurs et de la turbine ORC a été fait en tenant compte des conditions de fonctionnement de notre application.

La prochaine étape sera de choisir le fluide de travail. Ce choix doit être fait aussi bien sur le plan énergétique que sur le plan économique. De plus, ce changement de système de conversion d'énergie ne pourra pas être fait sur le parc de centrales existant car l'architecture du cycle est modifiée. On s'intéresse ici à une génération de centrales susceptibles d'être construites à horizon 2030 ou 2040.

Etant donné les incertitudes réglementaires pesant sur les fluides, de nombreux développements sont en cours. Ceci implique qu'en plus de modéliser le cycle bi-étagé, il est nécessaire de développer des modèles de fluide prédictifs ou semi-prédictifs qui permettent de modéliser les fluides les plus récents pour lesquels peu de données sont disponibles et de tester des mélanges de fluides aux propriétés intéressantes.

Pour cette raison, nous avons choisi de construire un serveur de propriétés thermodynamiques de fluides dans le cadre de ce projet de thèse. Ce serveur de propriétés est relié au progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim^{TM} auquel nous pouvons ajouter de

nouveaux modèles de fluides, de composants et de cycles. Cette démarche nous donne un outil prédictif, flexible et évolutif tout au long de notre projet.

Chapitre 2 Sélection des fluides de travail et modélisation de leurs propriétés physiques

Ce chapitre est consacré à l'étude des fluides de travail pour le cycle de récupération de chaleur à basse température. En analysant les besoins de l'application du cycle bi-étagé, les critères de sélection de fluide seront présentés. Nous présenterons les modèles permettant de calculer les propriétés thermophysiques et les propriétés de transport de ces fluides. La connaissance de ces propriétés est primordiale à l'évaluation de performance et au dimensionnement du cycle.

2.1 Fluides de travail : généralités sur les familles de fluides et règlementations

Les fluides frigorigènes sont indispensables au fonctionnement des machines thermodynamiques (pompe à chaleur, réfrigération, cycle de Rankine, etc..). Ils permettent les échanges de chaleur entre les différentes sources et peuvent servir à la récupération d'énergie.

2.1.1 Classification des fluides

Les fluides de travail qui nous intéressent sont dits frigorigènes car ils sont utilisés en premier lieu dans les machines frigorifiques. Il existe plusieurs familles de fluides frigorigènes. Ces dernières peuvent être classifiées selon la composition et la nature des fluides qu'elles contiennent.

Nous pouvons distinguer les fluides organiques et inorganiques en considérant la présence ou non d'atomes de carbone lié à des atomes d'hydrogène. Remarquons que certains composés carbonés comme le dioxyde de carbone sont « inorganiques » car ils ne contiennent pas de liaison carbone-hydrogène (C-H).

Les exemples typiques de fluides frigorigènes inorganiques utilisés dans l'industrie sont l'eau et l'ammoniac.

2.1.1.1 Petit historique des familles de fluides frigorigènes

L'eau est le premier réfrigérant utilisé par l'homme. A partir du 19^{ième} siècle, l'ammoniac est devenu un des premiers fluides frigorigènes utilisés dans l'industrie du froid. Par la suite, des hydrocarbures et l'utilisation du CO_2 se sont développés dans l'industrie du froid à partir du début du 20^{ième} siècle. Cependant, les hydrocarbures sont très souvent inflammables et peuvent être toxiques. Afin de trouver des solutions de remplacement, les Chloro-Fluoro-Carbone (CFC), puis les Hydro-Chloro-Fluoro-Carbone (HCFC) ont été synthétisés et utilisés. Ces derniers ont permis un large développement de l'industrie du froid. Ils ne sont ni toxiques ni inflammables. En revanche, leurs émissions dans l'atmosphère (par exemple lors de fuites des systèmes, ou de l'usage de bombes aérosols) ont contribué à l'appauvrissement de la couche d'ozone. Cela a contraint l'industrie chimique à développer de nouveaux fluides de synthèse sans effet sur la couche d'ozone, les Hydro-Fluoro-Carbone (HFC). Ils ont permis de remplacer dans les années 2000 la plupart les CFC et les HCFC existant. Cependant leurs potentiels de réchauffement global (effet de serre, voir 2.1.3.2), comme celui des CFC et HCFC, restent élevés : pour les HFC, typiquement plus de 1000 fois plus élevé que celui du CO_2. Afin de réduire encore l'impact environnemental des fluides frigorigènes, les fluides de 4^{ième} génération sont en cours de développement et certains sont déjà disponibles commercialement comme les Hydro-Fluoro-Oléfines (HFO) le R1234yf ou le R1234ze visant à remplacer le R134a, avec comme premier secteur d'application la climatisation automobile.

Dans les paragraphes qui suivent, nous allons décrire les différentes familles de fluides frigorigènes.

2.1.1.2 Les HydroCarbures (HC)

Nous pouvons distinguer plusieurs sous-familles de fluides selon leurs structures moléculaires.

Les atomes constituant les **alcanes** sont reliés uniquement par des liaisons covalentes. Leur formule générale est : CnH2n+2. Les exemples notables utilisés dans l'industrie du froid ou dans les applications ORC sont le propane, le butane et le pentane.

Les hydrocarbures contenant une ou plusieurs liaisons doubles entre atomes de carbone sont appelés les **alcènes**. Leur formule chimique générale est : CnH2n-2.

Les **hydrocarbures cycliques** sont les hydrocarbures contenant une chaine de carbone qui se referme sur elle-même. La formule générale est CnH2n. Les exemples sont le cyclopropane (C3H6) et le cyclobutane (C4H8).

Les **aromatiques** sont les hydrocarbures cycliques contenant des liaisons π. Ils possèdent 4n + 2 électrons délocalisables dans un système cyclique. n est l'entier naturel qui correspond au nombre de cycles. Les plus courants sont le benzène et le toluène.

2.1.1.3 Les Chloro-Fluoro-Carbone (CFC) et les Hydro-Chloro-Fluoro-Carbone (HCFC)

Les CFC et HCFC sont des fluides chlorofluorés de synthèse. En raison de la présence du chlore dans le composé, les CFC et HCFC réagissent avec l'ozone (United Nations Environment Programme 2009).

La réaction chimique détruisant la couche d'ozone est la suivante :

$$Cl + O_3 \rightarrow ClO + O_2 \qquad (2.1)$$

Les exemples les plus connus sont sans doute le R11 (CFC) et le R22 (HCFC).

2.1.1.4 Les Hydro-Fluoro-Carbone (HFC)

Les HFC sont des fluides fluorés de synthèse, mis sur le marché depuis les années 90, visant à remplacer les CFC et les HCFC. Cependant les HFC ont un impact sur l'effet de serre non négligeable. En effet, en absence de chlore, la molécule a une meilleure stabilité chimique et sa dégradation dans l'atmosphère est plus lente. Ce point a été mis en évidence par le protocole de Kyoto (United Nations 1998).

L'exemple très connu est le R134a utilisé dans le système de climatisation automobile ou le mélange de HFC nommé R410A, constitué de R125 et de R32, utilisé principalement en climatisation stationnaire.

2.1.1.5 Les Hydro-Fluoro-Oléfine (HFO)

Les HFO sont des fluides fluorés contenant au moins une double liaison carbone - carbone. Le principal avantage des HFO est leur faible impact sur l'effet de serre. En effet, sa stabilité est moindre par rapport aux HFC en raison de la présence de la liaison double. Ces fluides de synthèse ont été redécouverts depuis la première décennie du 21^{ième} siècle et connaissent de nouveaux développements visant à leur permettre de remplacer totalement ou partiellement les HFC. Les chimistes proposent aujourd'hui des mélanges de HFO et de HFC.

Certains de ces nouveaux fluides sont déjà disponibles sur le marché comme le R1234yf ou le R1234ze.

2.1.2 Règle de nomenclatures

Pour caractériser un réfrigérant, une règle de nomenclature a été établie (Ashrae 2010). On utilise la notation suivante pour définir un réfrigérant : R-WXYZ.

Les significations des lettres sont :

- R : signifie Réfrigérant ou fluide frigorigène, on trouve parfois HFC, HFO etc…
- W : représente le nombre de doubles liaisons
- X : représente le nombre d'atomes de carbone – 1
- Y : représente le nombre d'atomes d'hydrogène +1
- Z : représente le nombre d'atomes de fluor

Le nombre d'atomes de chlore peut être déduit des informations fournies par la nomenclature du fluide :

$$\text{Nombre de [Cl]} = 2(X+1) - (Y-1) - Z + 2 \qquad (2.2)$$

Tableau 2.1 : Quelques exemples de fluides frigorigènes courants

Nomenclature du réfrigérant	Composition chimique
R22	CHClF2
R134a	CF3CH2F
R1234yf	CF3CF=CH2

Parmi les exemples montrés dans le Tableau 2.1, nous remarquons l'ajout des suffixes « a » ou « yf » pour certains fluides. Ces lettres représentent les isomères du fluide organique. Les isomères ont des propriétés physiques et chimiques différentes. Ainsi la nomenclature différentie les isomères selon l'importance de leur asymétrie, par l'adjonction successive de lettres en suffixe comme pour le R134a.

De manière similaire, afin de spécifier un hydrocarbure cyclique, la réglementation impose d'insérer la lettre « C » devant le numéro d'identification du fluide frigorigène.

Néanmoins des cas particuliers existent, notamment pour représenter les mélanges et les composés non organiques.

Parmi les mélanges, nous distinguons les mélanges zéotropiques et les mélanges azéotropique.

Un mélange zéotrope est un mélange dont les compositions en phase vapeur et en phase liquide diffèrent lorsque les deux phases coexistent. Par conséquent, la température d'ébullition dans l'évaporateur n'est pas constante. Cette différence de températures est appelée le glissement de température.

La série des 400 est attribuée aux mélanges zéotropiques. Les numéros d'identification sont les numéros d'ordre d'enregistrement des mélanges. Les mélanges ayant les mêmes composants ont le même numéro, seule une lettre majuscule en suffixe caractérise la répartition massique des constituants du mélange.

Le R410 A est composé de : R125 (50%), R32 (50%), en fraction massique
Le R410 B est composé de : R125 (55%), R32 (45%), en fraction massique

Un mélange azéotropique est un mélange de fluides qui se comporte comme un corps pur. La série des 500 est attribuée à ces mélanges.

La série 600 est attribuée aux divers hydrocarbures. Par l'exemple, le R600 représente le butane.

La série des 700 est attribuée aux fluides inorganiques. La règle de nomenclature consiste à rajouter la masse molaire du fluide au numéro de la série 700. Par exemple le R717 est l'ammoniac.

2.1.3 Réglementation en vigueur et standard environnemental et de sécurité

Les deux principales réglementations internationales en vigueur sont : les protocoles de Montréal (United Nations Environment Programme 2009) et de Kyoto (United Nations 1998). Les paragraphes qui suivent donnent quelques informations essentielles sur le contenu de ces accords et leurs contextes historiques. Ensuite, nous présentons le standard de sécurité Ashrae 34 (Ashrae 2010) permettant de classifier les fluides frigorigènes en fonction de leur dangerosité.

2.1.3.1 Le protocole de Montréal

Le « Protocole de Montréal relatif à des substances qui appauvrissent la couche d'ozone » a pour objectif de réduire et d'éliminer les substances qui appauvrissent la couche d'ozone suite à la mise en évidence de la responsabilité des fluides frigorigènes de synthèse (CFC, HCFC). Basé sur la Convention de Vienne sur la protection de la couche d'ozone adoptée en 1985, le protocole a été signé par 24 pays et par la Communauté européenne en 1987.

Le protocole impose la suppression de l'utilisation des substances appauvrissant la couche d'ozone : sont concernés les fluides chlorés tels que les CFC et HCFC. Depuis 2001, la production et l'utilisation des CFC sont définitivement interdites. Les appareils HCFC neufs sont interdits depuis le 1er janvier 2010. Aujourd'hui, les HCFC ne peuvent plus être utilisés

qu'en maintenance pour compléter la charge d'installation existante. Leurs productions seront interdites à partir de 2015.

L'Europe, en anticipant l'interdiction de 2010, a contribué au développement des HFC dès les années 90s. (European Evironment Agency 2012)

Afin de mesurer l'impact d'un fluide sur la couche d'ozone, le facteur ODP (Ozone Depleting Potential) est défini comme le ratio de la capacité de destruction de la couche d'ozone d'un fluide donné comparée à celle du R11.

2.1.3.2 Le protocole de Kyoto

La signature du protocole de Montréal a conduit à la disparition progressive des fluides à fort impact sur la couche d'ozone. Cependant en raison de la confirmation du réchauffement climatique par les émissions de gaz à effet de serre, l'impact des fluides frigorigènes sur l'effet de serre prend une place de plus en plus importante dans les réglementations. Le protocole de Kyoto est un traité international dont l'objectif est la réduction des émissions de gaz à effet de serre.

Signé en 1997 à Kyoto, ce protocole vise à réduire de 5.2 % les émissions de six gaz à effet de serre. Les gaz comme le dioxyde de carbone, le méthane, le protoxyde d'azote et substituts des CFC sont concernés. Cette diminution des gaz à effet de serre devait s'effectuer entre 2008 et 2012, en ayant comme niveau de référence l'année 1990.

Pour évaluer l'impact d'un gaz sur le réchauffement climatique, le GWP (Global Warming Potential) a été défini. Le GWP est défini comme étant le rapport entre la contribution d'une unité du gaz (x) et la contribution d'une unité du gaz de référence (r), en l'occurrence le CO_2 :

$$GWP = \frac{\int_0^T a_x(t)\, m_x(t)dt}{\int_0^T a_r(t)\, m_r(t)dt} \qquad (2.3)$$

Avec :

- T est l'horizon temporel au cours duquel le calcul est considéré ;
- $a(t)$ est l'efficacité radiative, représentant la puissance supplémentaire reçue du soleil causée par l'augmentation d'une unité du gaz dans l'atmosphère (en W/m^2/kg) ;
- m représente la dégradation de la masse du gaz en fonction du temps suite à son émission instantanée à t=0 (en kg).

Cette grandeur exprime le potentiel de réchauffement d'un gaz à effet de serre comparé à celui du dioxyde de carbone. C'est un indicateur de la masse de CO2 émise donnant un effet de réchauffement équivalent à celui de la masse de fluide frigorigène. Etant donné que la durée de vie dans l'atmosphère des ces gaz varie, et donc que leur impact varie au cours du temps, on définit cet indicateur sur une base de 100 ans, période temporelle correspondant aux objectifs globaux fixés pour limiter l'impact des émissions de gaz à effet de serre sur l'augmentation moyenne de température de la planète.

Le projet de modification du règlement européen 842-2006 (F-gas) paru en 2012 tendrait à imposer des contraintes plus strictes à court terme :

- La recharge d'installations existantes sera interdite pour les fluides dont le GWP est supérieur à 2500.
- Il sera interdit d'utiliser des fluides dont le GWP est supérieur à 150 pour les installations neuves.

Ces restrictions conduiraient à la suppression progressive des HFC et à leur remplacement partiel ou total par les fluides de 4^{ième} génération, les HFO.

2.1.3.3 Classification Ashrae des fluides frigorigènes

ANSI/Ashrae 34 est le standard qui classifie les caractéristiques de sécurité des fluides frigorigènes basés sur les données de toxicité et d'inflammabilité. La notation de groupe de sécurité est composée d'une lettre majuscule et d'un nombre. La lettre et le nombre représentent respectivement le niveau de toxicité et d'inflammabilité du fluide.

Le Tableau 2.2 montre une représentation des groupes de sécurité. Les critères exacts de définition des groupes peuvent être consultés en annexe 7.1.

Tableau 2.2 Les groupes de sécurité Ashrae

Augmentation d'inflammabilité ⇧	A3	B3
	A2	B2
	A1	B1
	⇨ Augmentation de toxicité	

2.2 Critères de choix des fluides pour le cycle bi-étagé

Le ou les fluides de travail choisis doivent garantir la performance du système énergétique, être adaptés aux conditions de fonctionnement du cycle, être viables économiquement et satisfaire les réglementations en vigueur. Filloque (Filloque 2013) a étudié les critères de choix des fluides frigorigènes pour les cycles frigorifiques dans le cadre d'une synthèse technique. Dans notre cas, nous nous intéresserons plutôt à un cycle de Rankine, ce qui implique certaines variations dans les critères. D'une manière générale, on peut distinguer, dans toutes les classifications, quatre catégories principales de critères.

- Catégorie 1 : critères de performance,
- Catégorie 2 : critères technico-économique,
- Catégorie 3 : critères de limite de fonctionnement
- Catégorie 4 : critères d'environnement et de sureté.

Dans ce paragraphe sont présentés les différents critères de choix pour le cycle bi-étagé.

2.2.1 Critères de performance

Les critères de performance comprennent les paramètres physiques du fluide impactant principalement l'efficacité du cycle:

2.2.1.1 Coordonnées critiques

Les valeurs de la température et de la pression critique sont très importantes. Ces données déterminent la limite de la haute pression (HP) du cycle de Rankine. Près de la pression critique, une variation très faible de la température peut entraîner un changement de pression important. Cela peut influencer la stabilité du système. La Figure 2.1 présente un exemple sur le diagramme (T,s) de l'eau. En considérant un ΔT similaire (100 K), la différence de pressions peut varier d'une trentaine de bar à une centaine de bar selon la proximité par rapport au point critique.

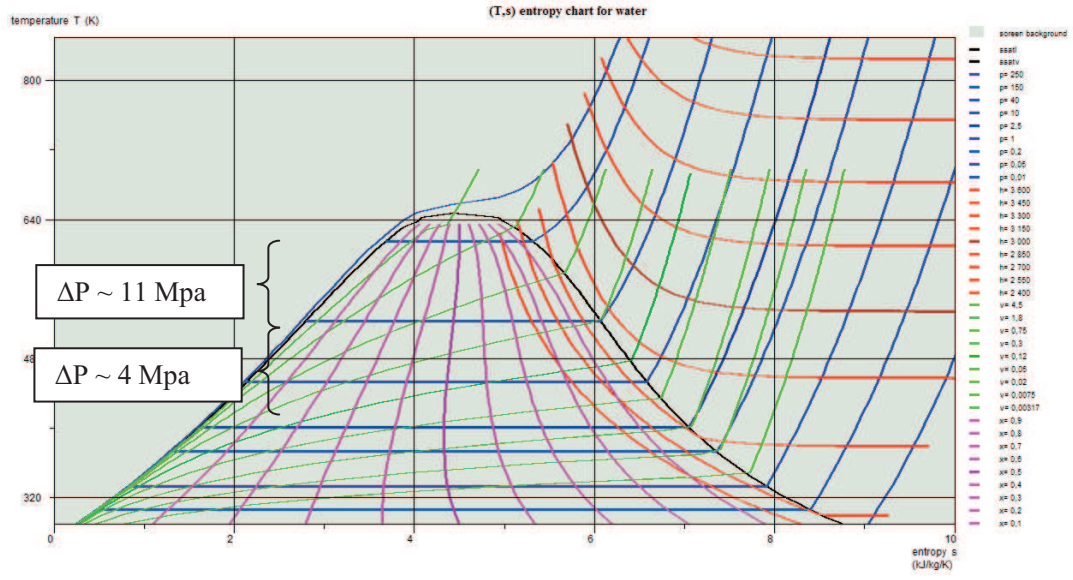


Figure 2.1 Variation de ΔP à 2 niveaux de température différents, figure réalisée avec Thermoptim^{TM}.

Il est donc raisonnable de garder une « distance » suffisante entre le point critique et la ligne HP du cycle. Il n'existe pas de norme pour la définition de cette distance. Cela est évalué au cas par cas dans les études de fonctionnement. Drescher et Brüggemann. (Drescher et Brüggemann 2007) suggèrent de positionner la haute pression au moins 0.1 MPa inférieure à la pression critique. Delgadeo-Torre et Garcia-Rodriguez. (Delgado-Torres et Garcia-Rodriguez 2010) considèrent la température de saturation à la HP 10 - 15 K plus basse que la température critique.

Selon les études menées par Saleh et al. (Saleh, et al. 2007), on peut observer la tendance suivante: les fluides ayant une température critique plus élevée permettent d'obtenir une efficacité du cycle plus importante. L'équation obtenue par Liu et al.. (Liu, Chien et Wang 2004) montre la même tendance : l'efficacité thermique de l'ORC est proportionnelle la température critique Tc.

Par conséquent, un écart minimal entre les coordonnées critiques et ligne HP de notre application doit être assurée. En même temps, afin d'améliorer la performance du cycle, il est intéressant de prendre un fluide ayant un point critique le plus élevé possible.

2.2.1.2 Le glissement de température

Dans notre application, la chaleur source de l'ORC provient de vapeur d'eau en condensation. Afin d'éviter des irréversibilités supplémentaires, il est préférable de maintenir une température d'évaporation du fluide constante lors du transfert d'énergie du cycle vapeur à l'ORC. C'est le cas pour les corps purs. En revanche, si un mélange de plusieurs fluides purs est choisi, il est préférable de regarder si un azéotrope existe, ou, à défaut, de choisir un mélange avec le glissement de température ou de pression le plus faible possible.

2.2.1.3 Types de fluide de travail

On peut distinguer trois types de fluides : les fluides secs, les fluides isentropiques et les fluides humides.

Cette distinction se fait par la valeur de ξ, définie par $\xi=dS/dT$ sur la courbe de saturation vapeur.

- Si $\xi>0$, le fluide est dit « sec » ;
- Si $\xi=0$, le fluide est dit « isentropique » ;
- Si $\xi<0$, le fluide est dit « humide ».

Concrètement, la courbe de saturation vapeur des fluides « secs » possède une pente positive; celle des fluides « isentropiques » présente une pente infinie et les fluides « humides » ont une pente négative. Cela se traduit par la forme des courbes de saturation représentées dans la Figure 2.2.

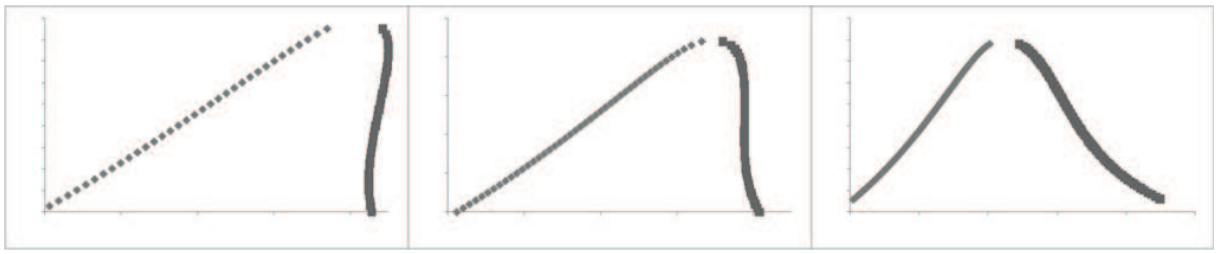


Figure 2.2 Diagrammes (T,s) pour les trois types de fluides : sec, isentropique et humide

Le type de fluide est un facteur important dans notre application :

Il préférable de faire fonctionner les turbines dans le domaine vapeur plutôt que dans la zone d'équilibre liquide-vapeur en raison de la formation des gouttes de liquide. La quantité de liquide formée lors de la détente doit être limitée afin d'éviter l'endommagement des turbines. Si la vapeur est saturée à l'entrée de la turbine, seuls les fluides du type « sec » et « isentropique » peuvent satisfaire à la condition. Dans le cas de l'utilisation d'un fluide « humide », une surchauffe serait alors nécessaire.

De plus, la surchauffe n'est pas recommandée pour tous les types de fluides. Dans certain cas, elle peut être un moyen de gagner en efficacité du système. Mais cela n'est pas toujours le cas. De façon générale, la surchauffe est avantageuse pour un fluide « humide », mais moins efficace pour un fluide « sec » (Chen, Goswami et Stefannakos 2010). Ainsi, le type de fluide choisi a une influence sur l'architecture du système énergétique.

On donnera la priorité au choix des fluides « isentropiques » ou « secs ». En revanche, remarquons qu'un fluide du type « sec » n'est pas forcément le fluide parfait. En effet, il peut rester fortement surchauffé après une détente. On doit alors penser à utiliser un régénérateur pour récupérer cette puissance entre le point surchauffé et le point de la saturation. Cela peut présenter parfois des difficultés technologiques.

2.2.2 Critères technico-économiques

Le choix du fluide de travail influence également la compacité des composants et indirectement leurs coûts. Ainsi les **critères technico-économiques** concernent :

2.2.2.1 Volume spécifique et chaleur latente

Un fluide qui possède un faible volume massique et une chaleur latente importante permettent

- d'absorber plus d'énergie lors de l'évaporation,
- de réduire le débit nécessaire, donc de diminuer la taille de l'installation.
- de réduire le volume de vapeur à la sortie de la turbine ORC, donc de diminuer la taille de la turbine.

Sa masse volumique élevée est la principale raison pour laquelle l'ammoniac avait été choisi dans le projet Cybiam.

L'expression de la variation de l'enthalpie du fluide dans la turbine obtenue par Chen et al. (Chen, Goswami et Stefannakos 2010) montre que le travail extrait de la turbine est plus important lorsque la chaleur latente est grande.

2.2.2.2 Propriétés de transport

Les propriétés de transport à savoir, la conductivité et la viscosité, du fluide conditionnent la capacité de transfert convectif du fluide considéré. Par exemple, le coefficient d'échange convectif du fluide est, notamment, proportionnel à la conductivité thermique du fluide. Ces deux paramètres interviennent dans le dimensionnement des deux échangeurs du cycle basse température : le condenseur-bouilleur et l'aérocondenseur.

2.2.2.3 La vitesse du son du fluide

La turbine ORC choisie est de type axial et subsonique. La vitesse du son du fluide limite le débit de fluide circulant dans un corps de turbine. Ce paramètre influence directement la taille, et le coût de la turbine ORC.

2.2.3 Critères de limite de fonctionnement

Le maintien en condition opérationnelle de la machine impose des limites à certaines caractéristiques physiques des fluides. Ces **critères de limite de fonctionnement** sont la température de fusion et la pression de condensation.

2.2.3.1 Température de fusion

La particularité de notre cycle est l'utilisation de l'air ambiant comme source froide. Nous devons prendre en compte que l'amplitude de variation de température de l'air ambiant est beaucoup plus importante que celle de l'eau. Par conséquent, la température de condensation du fluide peut être relativement basse en hiver. Or le fluide ne doit en aucun cas se solidifier dans le cycle de Rankine. Une température de fusion très basse est fortement recommandée.

2.2.3.2 La pression de condensation du cycle ORC

Idéalement, le fluide doit se condenser à une pression supérieure à 1 bar atmosphérique afin d'éviter toute entrée d'air dans le système.

2.2.4 Critères d'environnement et de sécurité

Les fluides de travail doivent respecter les normes environnementales et la sécurité des opérateurs. Les **critères liés à l'environnement** et à la sureté comprennent les points suivants :

2.2.4.1 Le potentiel de réchauffement global (Global Warming Potential, GWP) et le potentiel d'appauvrissement de la couche d'ozone (Ozone Depletion Potential, ODP)

Les règlementations environnementales se sont durcies durant les deux dernières décennies. Le choix du fluide doit suivre les standards de protection environnementale en vigueur et en cours d'élaboration pour construire un cycle pérenne pour les décennies à venir. Il est ainsi préférable que le fluide ait un ODP nul et un GWP le plus bas possible.

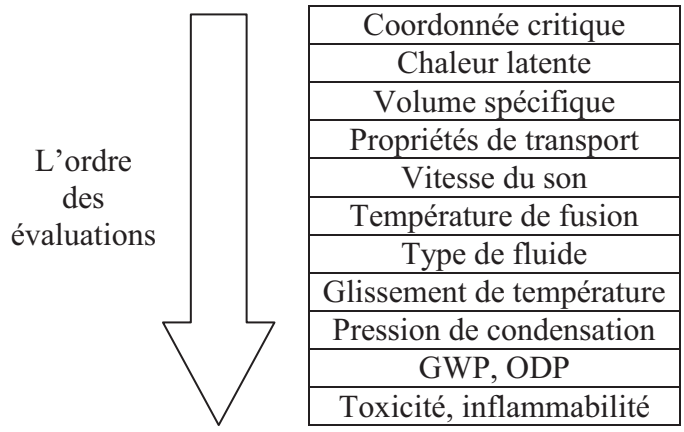
2.2.4.2 Toxicité et inflammabilité du fluide

Afin d'assurer la sécurité des opérateurs, il est préférable d'utiliser un fluide non-toxique et non-inflammable.

2.2.5 Conclusion

Le Tableau 2.3 récapitule les différents critères de fluide à inspecter dans l'ordre. Nous avons mis les critères environnementaux et les critères de sureté en dernier pour plusieurs raisons. En fait, selon la classification de sécurité des fluides frigorigènes Ashrae (Ashrae 2010), les fluides du groupe A1 seront les mieux adaptés pour notre application. Cependant, très peu de fluide de travail sont classés parmi cette catégorie A1. Par conséquent, pour éviter d'éliminer des fluides à haute performance, ces deux critères seront évalués en dernier.

Tableau 2.3 Les Critères de choix de fluides classés dans l'ordre d'inspection



2.3 Fluides candidats potentiels

Les fluides frigorigènes sont souvent choisis comme fluide de travail pour les applications de récupération de chaleur et de conversion d'énergie à basse température. Dans la littérature, les choix des fluides sont souvent basés uniquement sur les critères de performance. Leurs indices de sécurité et leurs impacts environnement doivent être vérifiés.

Ainsi, nous avons sélectionné une liste de fluides appartenant aux familles, HC, HFC, HFO et aromatique. Les fluides correspondants sont :

- Le propane, le n-butane, l'isopentane, le benzène et le toluène : ce sont des HC déjà utilisés dans des ORC de puissance de quelques MWe.
- Le R134a : il est actuellement le fluide le plus utilisé dans la climatisation automobile. Notons que sa température critique n'est pas très élevée.
- Le R245fa et le R365mfc : ce sont des nouveaux HFC qui sont destinés à des applications de température plus élevées comme la pompe à chaleur à haute température (Assaf 2010).
- Le R1234yf et R1216 : ce sont des HFO destinés à remplacer les HFC à GWP élevé. Leur impact sur l'effet de serre est environ 1000 fois plus faible que pour les HFC.
- Le R717 : l'Ammoniac, testé par EDF lors du projet Cybiam, servira de fluide de référence.

Cependant en raison de la forte dépendance entre la performance du fluide de travail et les conditions de fonctionnement du cycle, aucun fluide n'a été identifié comme étant optimal (Quoilin, et al. 2011).

Le Tableau 2.4 récapitule les corps purs mentionnés ci-dessus et leurs caractéristiques respectives:

Tableau 2.4. Liste des fluides sélectionnés pour le test (NIST 2007, ProSim 2001, Subramoney, et al. 2012).

Fluide	Famille	Tc (K)	Pc (MPa)	Facteur Acentrique	Masse Molaire (g/mol)	GWP	Groupe Ashrae
R134a	HFC	374	4.059	0.3267	102	1430	A1
R245fa	HFC	427	3.651	0.3776	134	1030	B1
R365mfc	HFC	460	3.266	0.3800	148	890	A2
R1234yf	HFO	367	3.382	0.2760	114	4	A2
R1216	HFO	358	3.136	0.3529	150	1	-
n-butane	Hydrocarbure	425	3.796	0.2002	58	1	A3
Propane	Hydrocarbure	369	4.247	0.1523	44	3	A3
Isopentane	Hydrocarbure	460	3.378	0.2274	72	11	A3
Benzene	Aromatique	562	4.831	0.2092	78	-	Toxique/Inflammable
Toluene	Aromatique	591	4.126	0.2657	92	-	Toxique/Inflammable
Ammoniac	-	405	11.333	0.2560	17	< 1	B1

Afin d'illustrer l'aspect prédictif de notre démarche, nous proposons également de travailler sur un nouveau fluide qui n'est pas décrit de manière extensive au moment de la réalisation de nos travaux : le R1233zd(E), produit par Honeywell.

Les 12 fluides mentionnés précédemment vont être testés par simulation dans un modèle de cycle bi-étagé.

Nos tests de fluides de travail consistent à :

- Calculer la performance du cycle bi-étagé au point de fonctionnement nominal
- Dimensionner les principaux composants additionnels du cycle bi-étagé
- Evaluer la performance du système lors les conditions de fonctionnement s'éloignent du point nominal

Par conséquent, les besoins de connaissance en terme de propriétés thermophysiques sont les suivants :

- La température, la pression et le volume en incluant la recherche de la courbe de saturation ;
- Les fonctions d'état telles que l'enthalpie, l'entropie et l'énergie interne du fluide considéré ;
- Les propriétés de transport : la viscosité et la conductivité du fluide, principalement utilisées dans le dimensionnement des composants

Si aucun des fluides candidats mentionnés ne se révèlent assez satisfaisant, nous nous intéresserons aux mélanges. Nous pouvons par exemple mélanger un HFC avec un HFO pour réduire le GWP.

En raison de la nature organique des fluides candidats considérés et de l'aspect prédictif de la démarche du projet, on a choisi une approche utilisant des modèles thermodynamiques dont les propriétés sont estimées à partir des équations d'état cubiques du type van der Waals. D'autre part, les propriétés de transport seront évaluées en utilisant la méthode TRAPP (TRAnsport Properties Prediction).

Les paragraphes suivants décrivent les méthodes de calcul des propriétés thermophysiques des fluides. Nous allons commencer par présenter l'équilibre liquide – vapeur pour les corps purs et les modèles qui leur sont associés. Nous verrons les modèles pour les mélanges dans un second temps.

2.4 Modélisation des propriétés des Corps Purs

Ce paragraphe décrit la théorie de l'équilibre liquide vapeur d'un corps pur et les modèles permettant de calculer les propriétés thermodynamique et les propriétés de transport.

2.4.1 Equilibre liquide - vapeur

La condition de l'équilibre liquide-vapeur d'un corps pur est définie par la relation entre les potentiels chimiques des phases liquide et vapeur, soit:

$$g^L(\mathrm{T},\mathrm{P}) = g^V(\mathrm{T},\mathrm{P}) \tag{2.4}$$

L'enthalpie libre est définie par: $g = h - Ts$ d'où $dg = vdP - sdT$. A température constante,

$$dg = vdP \tag{2.5}$$

Si on considère un gaz parfait, $dg = RT\frac{dP}{P}$

$$dg = RT\ dln(P) \tag{2.6}$$

Pour un fluide réel, il faut utiliser la notion de fugacité. L'enthalpie libre s'écrit :

$$dg = RT\ dln(f) \tag{2.7}$$

On définit le coefficient de fugacité $\phi = \frac{f}{P}$, rapport entre la fugacité f du fluide réel et la pression *P* du fluide s'il est considéré parfait.

A l'équilibre thermodynamique, $g^L = g^V$, on en déduit $f^L = f^V$. Pour un corps purs, la condition d'équilibre à température T et à pression de saturation correspondante P_{sat} devient :

$$(\phi^L)_{T,P} = (\phi^V)_{T,P} \tag{2.8}$$

La fugacité traduit l'activité d'un corps pur hors conditions du gaz parfait.

Le coefficient de fugacité est calculé par la relation ci-dessous :

$$Ln\left(\Phi(T,P)\right) = Z - 1 - Ln(Z) + \frac{1}{RT}\int_{\infty}^{v}\left(\frac{RT}{v} - P\right)dv \tag{2.9}$$

2.4.2 Equations d'état

Les modèles de fluides considérés sont du type « équation d'état cubique » : ces équations ont pour avantage d'avoir besoin de peu de données d'entrée et de pouvoir être résolues analytiquement sans devoir utiliser des méthodes numériques très complexes. Cela permet de réduire considérablement le temps de calcul.

Les équations cubiques considérées sont:

2.4.2.1 Modèle de van der Waals (vdW)

L'équation de van der Waals (vdW) (van der Waals 1899) améliore le modèle des gaz parfaits en le rendant plus réaliste. Deux éléments essentiels ont été pris en compte:

- ❖ L'interaction attractive : l'ajout d'un terme en $-\frac{a}{v^2}$
- ❖ L'interaction répulsive : le covolume molaire *b*

L'expression donnée par van der Waals (éq 2.10) est la suivante:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \tag{2.10}$$

A température T constante, les paramètres a (prise en compte des interactions attractives) et b (co-volume molaire : interactions répulsives) sont déterminés par la relation suivante au point critique.

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T_c} = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_{T_c} = 0 \tag{2.11}$$

On peut exprimer les paramètres *a* et *b* en fonction des coordonnées critiques:

$$a = \frac{27}{64}\frac{R^2 {T_c}^2}{P_c} \tag{2.12}$$

$$b = \frac{1}{8}\frac{RT_c}{P_c} \tag{2.13}$$

On définit le coefficient de la compressibilité au point critique $Z_c = \frac{P_c v_c}{RT_c}$. Sa valeur est 0.375 pour le modèle de van der Waals. On note que ce modèle représente moins bien la phase liquide que la phase vapeur. De nombreuses modifications sont proposées par la suite à partir de ce modèle.

Les équations citées dans les paragraphes qui suivent ne sont que des améliorations de l'équation d'état de van der Waals.

2.4.2.2 Modèle de Soave-Redlich-Kwong (SRK)

L'équation de Soave, Redlich et Kwong (SRK) (Redlich et Kwong 1949) (Soave 1972) s'applique pour les composés non-polaires ou légèrement polaires. Elle s'écrit sous la forme suivante:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{(v+b)v} \tag{2.14}$$

$$a = \Omega_a \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \;\; avec\; \Omega_a = 0.42748 \tag{2.15}$$

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \quad avec\ \Omega_b = 0.086640 \tag{2.16}$$

$$Zc = \frac{P_c v_c}{RT_c} = \frac{1}{3} \tag{2.17}$$

2.4.2.3 Modèle de Peng-Robinson (PR)

En 1976, Peng et Robinson (PR) (Peng et Robinson 1976) ont proposé une autre amélioration du terme attractif. Cette équation est adaptée pour la modélisation des composés polaires et des hydrocarbures. On constate qu'elle est généralement plus précise que le modèle SRK en terme de calcul de volume de la phase liquide.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v+2bv-b^2} \tag{2.18}$$

$$a = \Omega_a \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad avec\ \Omega_a = 0.457240 \tag{2.19}$$

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \quad avec\ \Omega_b = 0.07780 \tag{2.20}$$

$$Zc = \frac{P_c v_c}{RT_c} = 0.3074 \tag{2.21}$$

2.4.2.4 Equation d'état cubique généralisée

On remarque que les modèles SRK et PR proposent des modifications uniquement sur le terme attractif de l'équation. Schmidt et Wenzel (Schmidt et Wenzel 1980) ont proposé en 1980 une forme généralisée des équations d'état cubique en u et w:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v+ubv-wb^2} \tag{2.22}$$

Les couples (u, w) pour les différents modèles cités ci-dessus sont donnés dans le tableau :

Tableau 2.5 les différents couples (u, w) selon les modèles

Equation d'état	*u*	*w*
vdW	0	0
SRK	1	0
PR	2	-1

2.4.2.5 Modèle de Patel-Téjà (PT)

On peut noter que dans les modèles SRK et PR le coefficient de compressibilité critique est une constante quel que soit le fluide choisi. De plus, cette valeur ne correspond pas exactement au *Zc* réel dans la majorité des cas. C'est une des raisons qui font que l'on constate toujours un écart assez important entre le volume molaire liquide calculé et les données expérimentales correspondantes. Les seuls coefficients *a* et *b* ne suffisent pas à prédire avec

précision les comportements des fluides : les équations d'état cubique à deux paramètres sont imprécises en ce qui concerne la représentation des propriétés volumétriques.

Le modèle de Patel-Teja (PT) (Patel et Teja 1982) intègre cette dernière remarque dans sa formulation. Un troisième paramètre $c = \Omega_c \frac{RT_c}{P_c}$ qui donne un peu plus de souplesse au modèle est introduit.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a(T)}{v+(b+c)v-cb} \tag{2.23}$$

$$a = \Omega_a \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \tag{2.24}$$

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \tag{2.25}$$

$$c = \Omega_c \frac{RT_c}{P_c} \tag{2.26}$$

Les valeurs de $\Omega_a, \Omega_b, \Omega_c$ sont calculées à partir du système d'équations généralisées suivant en connaissant *Zc*:

$$\begin{cases} u\Omega_b = 1 + \Omega_b - 3Z_c \\ \Omega_b^3 + [(1-3Z_c) + (u+w)]\Omega_b^2 + 3Z_c^2\Omega_b - Z_c^3 = 0 \\ \Omega_a = 1 - 3Z_c(1-Z_c) + 3(1-2Zc)\Omega_b + [2-(u+w)]\Omega_b^2 \end{cases} \tag{2.27}$$

Avec $u = 1 + \frac{c}{b}$ et $w = \frac{c}{b}$.

2.4.3 Fonctions α (T)

La fonction α a été introduite pour prendre en compte la variation de la force attractive entre molécules lorsque la température varie. Si la température tend vers l'infini, la force attractive est nulle car seule l'agitation thermique des molécules prédomine. C'est le contraire lorsque T tend vers zéro. La Figure 2.3 représente l'allure d'une fonction *α(T).* Les fonctions *α(T)* correspondantes aux équations d'état cubiques sont décrites ci-dessous.

$$a(T) = a_c \alpha(T) \tag{2.28}$$

avec

$$a_c = \Omega_a \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \tag{2.29}$$

Il est possible de choisir les fonctions *α* parmi les suivantes :

2.4.3.1 α(T) généralisées (SRK, PR et PT):

$$\alpha(T) = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2 \tag{2.30}$$

$$SRK\ \ m = 0.47830 + 1.6337\omega - 0.3170\omega^2 + 0.760\omega^3 \quad (2.31)$$

$$PR\ \ m = 0.374640 + 1.542260\omega - 0.26992\omega^2 \quad (2.32)$$

$$PT\ \ m = 0.452413 + 1.30982\omega - 0.296937\omega^2 \quad (2.33)$$

ω est le facteur acentrique du fluide, défini par la relation ci-dessous.

$$\omega = -\log\left(\frac{P^{sat}}{P_c}\right)_{Tr=0.7} - 1 \quad (2.34)$$

2.4.3.2 α de Mathias-Copeman (SRK, PR et PT) (Mathias et Copeman 1983) :

$$T_r \leq 1, \alpha(T) = (1 + c_1(1 - T_r^{0.5}) + c_2(1 - T_r^{0.5})^2 + c3(1 - T_r^{0.5})^3)^2 \quad (2.35)$$

$$T_r > 1, \alpha(T) = \left(1 + c_1(1 - T_r^{0.5})\right)^2 \quad (2.36)$$

Les paramètres c_1, c_2, c_3 sont ajustés sur des données expérimentales.

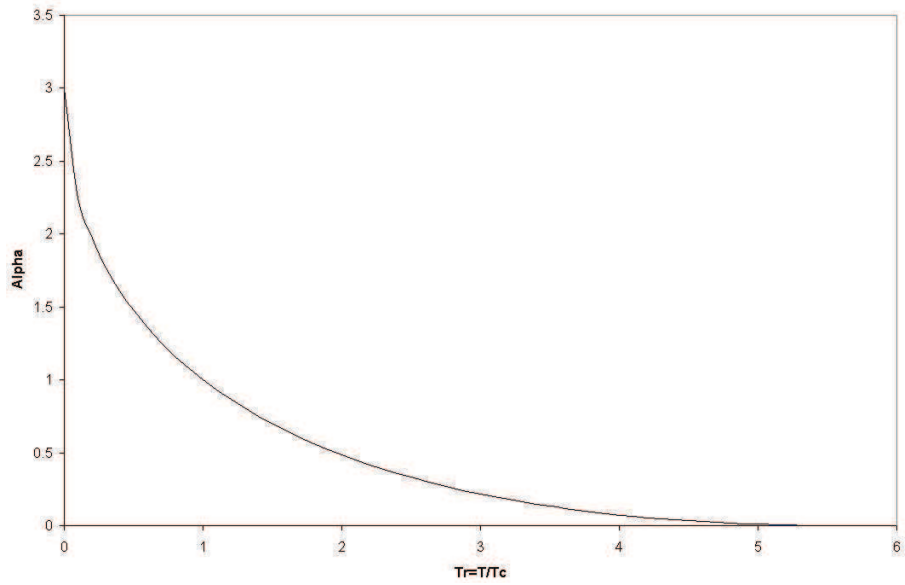


Figure 2.3 Allure de la fonction α(T)

2.4.4 Fonctions d'état

Il est primordial de définir des équations d'état qui permettent de représenter très précisément le diagramme de phases mais aussi de calculer les masses volumiques des différentes phases. En effet, les équations d'état servent à calculer les fonctions d'état enthalpie, entropie, énergies libres d'Helmholtz et de Gibbs. Ces fonctions sont essentielles pour l'étude des systèmes énergétiques.

Dans le cadre de notre approche par équation d'état, les fonctions d'état s'écrivent sous la forme d'une somme de trois termes bien distincts : un terme idéal, un terme résiduel et un terme de référence.

$$h = h^0 + h^{res} + h^{ref} \quad (2.37)$$

$$s = s^0 + s^{res} + s^{ref} \quad (2.38)$$

2.4.4.1 Terme idéal

h^0 et s^0 représentent l'enthalpie et l'entropie du gaz parfait. Ces termes idéaux sont calculés grâce aux corrélations de la chaleur spécifique C_p qui peuvent prendre des formes différentes selon les bases de données.

$$dh^0 = C_p\, dT \quad (2.39)$$

$$ds^0 = \frac{C_p}{T} dT - \frac{R}{P} dP \quad (2.40)$$

Forme polynomiale (utilisée dans les versions antérieures de Thermoptim) (Gicquel 2010):

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + \frac{G}{T^2} + \frac{K}{T} \quad (2.41)$$

Forme selon la base de données DIPPR (Design Institue for Physical PRoperties) (ProSim 2001):

$$C_p = A + B\left(\frac{\frac{C}{T}}{\sinh\left(\frac{C}{T}\right)}\right)^2 + D\left(\frac{\frac{E}{T}}{\cosh\left(\frac{E}{T}\right)}\right)^2 \quad (2.42)$$

D'autres formes de corrélations existent.

2.4.4.2 Terme résiduel

La notion de grandeurs résiduelles est introduite lorsqu'on cherche à calculer les fonctions d'état d'un fluide réel sous pression. En effet, elles représentent l'écart de valeur de la propriété entre le fluide réel et le gaz parfait. Le calcul formel de l'enthalpie résiduelle est détaillé dans la suite selon la méthode utilisée dans l'ouvrage de Vidal (Vidal 1973) ou de Sandler (Sandler 1977).

Formulations en fonction de la pression P :

$$h^{res} = (h - h^0)_{T,P} = \int_0^P \left(v - \frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \, dP \quad (2.43)$$

$$s^{res} = (s - s^0)_{T,P} = \int_0^P -\left[\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P - \frac{R}{P}\right] dP \quad (2.44)$$

Formulations en fonction du volume v :

$$h^{res} = \int_{\infty}^{v} (T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v - P)\, dv + Pv - RT \quad (2.45)$$

$$s^{res} = \int_{\infty}^{v} -\left[\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v - \frac{R}{v}\right] dv \quad (2.46)$$

En prenant en compte les équations cubiques présentées dans les paragraphes précédents, ces expressions peuvent être écrites analytiquement :

$$h^{res} = (h - h^0)_{T,P} = \frac{a(T) - a'(T)T}{b(r_1 - r_2)} \ln\left(\frac{v - br_1}{v - br_2}\right) + Pv - RT \quad (2.47)$$

$$s^{res} = (s - s^0)_{T,P} = R \ln\left(\frac{Pv - Pb}{RT}\right) - \frac{a'(T)}{b(r_1 - r_2)} \ln\left(\frac{v - br_1}{v - br_2}\right) \quad (2.48)$$

$$r_1 = \frac{-u + \sqrt{u^2 - 4w}}{2} \quad et \quad r_2 = \frac{-u - \sqrt{u^2 - 4w}}{2} \quad (2.49)$$

Nous rappelons que les paramètres u et w correspondants aux modèles de van der Waals, SRK et PR sont donnés dans le Tableau 2.5. Les paramètres u et w correspondants au modèle PT sont présentés dans le Tableau 2.6.

Tableau 2.6 les différents couples (u, w) pour le modèle PT

Equation d'état	*u*	*w*
PT	*1+c/b*	*c/b*

2.4.4.3 Terme de référence

En principe, le choix du point de référence est arbitraire et dépend des conventions (Vidal 1973). Il est suggéré de prendre l'entropie de référence s^{ref} à la valeur telle que $s\ (T = 0\ K) = 0$. L'enthalpie de référence est souvent pris égale à l'enthalpie standard de formation à T=298.15 K et P = 1 atm.

2.4.5 Propriétés de transport

La connaissance des propriétés de transport est importante dans le calcul des composants des cycles thermodynamiques. Nombreuses sont les méthodes qui permettent de calculer les propriétés de transport d'un fluide donné. La méthode du NIST (National Institue of Standards and Technology) dite « TRAPP» (TRAnsport Property Prediction) que nous allons présenter dans ce paragraphe a pour caractéristiques :

- d'être applicable aussi bien dans le domaine gaz que dans le domaine liquide
- d'être prédictive et de nécessiter peu de données d'entrée pour les calculs de viscosité et de conductivité

2.4.5.1 Méthode de prédiction de la viscosité : principe de la méthode TRAPP

En considérant un gaz dilué qui est composé de particules rigides de diamètre σ n'interagissant pas entre elles et à partir de la théorie cinétique des gaz, il est possible d'exprimer la viscosité du gaz en fonction de sa température T :

$$\eta^\circ = C\frac{T^{\frac{1}{2}}M^{\frac{1}{2}}}{\sigma^2} \qquad (2.50)$$

T, la température absolue du gaz, en K
M, sa masse molaire, en g/mol
σ, diamètre de la particule rigide, en nm
C, une constante différente selon le gaz considéré

Ce modèle est uniquement applicable au gaz ayant une très faible masse volumique dans lequel les interactions moléculaires sont négligeables en raison des grandes distances intermoléculaires.

Cette expression a été en suite amélioré par Chapman-Enskog (Poling et Prausnitz 2000) qui a introduit l'intégrale de collision Ω, un facteur de correction pour représenter la collision entre les molécules du gaz.

$$\eta^\circ = K\frac{T^{\frac{1}{2}}M^{\frac{1}{2}}}{\sigma^2\Omega} \qquad (2.51)$$

L'intégrale de collision Ω peut être calculée avec la corrélation empirique proposée par Heufeld et al. (Neufeld, Janzen et Aziz 1972), $\Omega = 1.16145\ T^{*-0.14874} + 0.52487\exp\left(-0.77320\ T^*\right) + 2.16178\exp\left(-2.43787\ T^*\right)$. T^* est une grandeur adimensionnelle $T^* = \frac{T}{\varepsilon/k}$. ε/k est lié au potentiel d'interaction moléculaire et à la constante de Boltzmann.

Cependant lorsque la masse volumique du fluide augmente, l'interaction entre les molécules devient plus en plus importante, ce qui nécessite d'introduire une correction pour le calcul de la viscosité. L'expression de la viscosité s'écrit alors sous la forme :

$$\eta = \eta^\circ + \Delta\eta \qquad (2.52)$$

$\Delta\eta$ est la viscosité résiduelle.

La méthode TRAPP (Klein, McLinden et Laesecke 1997) est une méthode obtenue en appliquant le principe des états correspondants aux deux fluides, en considérant que les fluides obéissent à la même équation d'état exprimée avec ses variables réduites (Hirshfelder, Curtiss et Bird 1954).

Cela signifie qu'un fluide, dont la viscosité est bien connue, doit être choisi en tant que fluide de référence. A partir de la viscosité du fluide de référence, les viscosités des autres fluides sont ensuite estimées après correction.

Le R134a a été choisi comme référence pour les fluides frigorigènes (Huber, Laesecke et Perkins, Model for the viscosity and thermal conductivity of refrigerants, including a new correlation for the viscosity of R134a 2003), tandis que pour les hydrocarbures, le propane ou le méthane sont souvent sélectionnés (Poling et Prausnitz 2000). Dans la suite de ce chapitre, nous présentons uniquement la méthodologie TRAPP comme décrite dans Huber 2003.

La viscosité du R134a est obtenue en faisant séparément les calculs de la viscosité du gaz dilué et de la viscosité résiduelle.

- Viscosité du gaz dilué du R134a:

$$\eta^{R\circ} = K\frac{T^{\frac{1}{2}}M^{\frac{1}{2}}}{\sigma^2\Omega} \tag{2.53}$$

avec K= 0.021357, M=102.03 g/mol, σ=0.50647 nm

L'intégrale de collision est calculée par :

$$\ln(\Omega) = \sum_i a_i \left(\ln\left(\frac{T}{\epsilon/k}\right)\right)^i \tag{2.54}$$

Les coefficients a_i sont présentés dans le tableau 6. ϵ/k vaut 288.82 K pour le R134a d'après Wilhelm et Vogel (Wilhelm et Vogel 1996).

- Viscosité résiduelle du R134a :

Le terme résiduel est écrit sous la forme :

$$\Delta\eta^R = \left(c_1 + B_\eta\eta^{R\circ}\right)\rho_r + c_2\rho_r^2 + \frac{c_5+c_6\rho_r}{c_4E-\rho_r} - \frac{c_5}{c_4E} \tag{2.55}$$

ρ_r est la masse volumique réduite. Le terme résiduel dépend de la masse volumique du fluide.

Les deux coefficients B_η et E sont calculés par :

$$B_\eta = 602.2137\ \rho_c\ \sigma^3 \sum_{i=0}^{12} b_i \left(\sqrt{\frac{T}{\epsilon/k}}\right)^i \tag{2.56}$$

$$E = 1 + \frac{c_3T}{T_c} \tag{2.57}$$

Tableau 2.7. Coefficients utilisés pour le calcul de viscosité du R134a

i	a_i	b_i	c_i
0	2.218816 E-01	-1.7999496 E+00	
1	-5.079322 E-01	4.6692621 E+01	-0.331249 E-01
2	1.285776 E-01	-5.3460794 E+02	-0.468509 E-03
3	-8.328165 E-02	3.3604074 E+03	0.156983 E+00
4	-2.713173 E-02	-1.3019164 E+04	3.073830 E+00
5		3.3414230 E+04	-0.36398 E+00

6	-5.8711743 E+04	0.215221 E+00
7	7.1426686 E+04	
8	5.9834012 E+04	
9	3.3652741 E+04	
10	-1.2027350 E+04	
11	2.4348205 E+03	
12	-2.0807957 E+02	

En appliquant le principe des états correspondants, nous pouvons exprimer la viscosité d'un autre réfrigérant en fonction de celle du R134a et de leurs coordonnées critiques. L'indice R signifie « Référence », c'est à dire le R134a dans ce cas.

$$\eta\,(T) = \eta°(T) + \Delta\eta(T,\rho) = \eta°(T) + \Delta\eta^{R}\left(T\,\left(\frac{T_c^R}{T_c}\right), \rho\left(\frac{\rho_c^R}{\rho_c}\right)\right)\left(\frac{\mathrm{M}}{\mathrm{M^R}}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{T_c}{T_c^R}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\rho_c}{\rho_c^R}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (2.58)$$

En posant f et h, les rapports de réduction,

$$f = \frac{T_c}{T_c^R} \quad (2.59)$$

$$h = \frac{\rho_c^R}{\rho_c} \quad (2.60)$$

$$\text{avec } F_\eta = f^{\frac{1}{2}}\, h^{-\frac{2}{3}}\left(\frac{M}{M^R}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.61)$$

Il vient,

$$\eta\,(T) = \eta°(T) + \Delta\eta^{R}\left(\frac{T}{f}, \rho h\right) F_\eta \quad (2.62)$$

Huber et Ely ont amélioré cette approche en rajoutant les facteurs de forme (shape factor) θ et φ fonctions de la température et de la masse volumique du fluide. Ces deux coefficients peuvent être déterminés de différentes manières:

- par des corrélations expérimentales
- par une estimation utilisant l'énergie libre de Hermoltz et le facteur de compressibilité du fluide

Cependant la méthode d'estimation a besoin de données expérimentales très précises concernant la température et la masse volumique du fluide.

Les facteurs de forme permettent de réajuster les rapports de réduction pour diminuer l'incertitude du calcul.

$$f_i = \frac{T_c}{T_c^R}\,\theta \quad (2.63)$$

$$h_i = \frac{\rho_c^R}{\rho_c}\,\varphi \quad (2.64)$$

Ely et al. (Poling et Prausnitz 2000) ont proposé de considérer les rapports de réductions θ et φ en fonction de la température réduite du fluide et du facteur acentrique. Les paramètres a, b, c, d sont généralement ajustés à partir des données expérimentales.

$$\theta = 1 + (\omega - \omega^R)(a - bln(T_r)) \quad (2.65)$$

$$\varphi = 1 - (\omega - \omega^R)(c - dln(T_r)) \quad (2.66)$$

Afin d'améliorer le calcul de viscosité d'un gaz dilué $\eta°$, il est possible d'employer la méthode de Lucas, plus précise que la méthode de Chapman-Enskog.

La méthode de Lucas (Poling et Prausnitz 2000) permet d'obtenir la viscosité du gaz dilué d'un fluide en prenant comme données d'entrée : ses coordonnées critiques et son moment dipolaire.

$$\eta° = \frac{[0.807\, T_r^{0.618} - 0.357\, e^{-0.449\, T_r} + 0.340\, e^{-4.058\, T_r} + 0.018](F_p^\circ\, F_q^\circ)}{\xi} \quad (2.67)$$

avec

$$\xi = 0.176 \left(\frac{T_c}{M^3 P_c^4}\right)^{\frac{1}{6}} \quad (2.68)$$

M : la masse molaire en g/mol

F_p° est fonction du facteur de compressibilité critique Z_c et du moment dipolaire μ

Posons $\mu_r = 52.46 \frac{\mu^2 P_c}{T_c^2}$, P_c en bar

- Si $0 \leq \mu_r < 0.022$, alors $F_p^\circ = 1$
- Si $0.022 \leq \mu_r < 0.075$, alors $F_p^\circ = 1 + 30.55(0.292 - Z_c)^{1.72}$
- Si $0.075 \leq \mu_r$, alors $F_p^\circ = 1 + 30.55(0.292 - Z_c)^{1.72} |0.96 + 0.1\,(T_r - 0.7)$

F_q° est en fonction de la température réduite T_r et de la masse molaire M. Ce coefficient est à prendre en compte uniquement pour les gaz He, H_2 et D_2.

$$F_q^\circ = 1.22\, Q^{0.15}\, \{1 + 0.00385\, [(T_r - 12)^2]^{\frac{1}{M}}.signe\,(T_r - 12)\} \quad (2.69)$$

Avec $Q = 1.38$ pour He, $Q = 0.76$ pour H_2, $Q = 0.52$ pour D_2

Si le moment dipolaire d'un fluide est connu, nous remplaçons la méthode de Chapman-Enskog par la méthode de Lucas.

2.4.5.2 Méthode de calcul de la conductivité thermique

Le principe de la méthode TRAPP (Huber et Ely, Prediction of the thermal conductivity of refrigerants and refrigerant mixtures 1992) expliquée dans la section précédente est également

applicable au calcul de la conductivité thermique. Cette dernière s'exprime de la manière suivante :

$$\lambda = \lambda° + \Delta\lambda \tag{2.70}$$

$\lambda°$ est la contribution du gaz dilué. $\Delta\lambda$ est lié à la conductivité résiduelle.

Le R134a est toujours considéré comme fluide de référence. La conductivité thermique de gaz dilué du R134a est calculée à partir d'une corrélation dont les paramètres sont obtenus à partir de données expérimentales :

$$\lambda^{\circ R} = -2.4177\ 10^{-2} + 1.7664\ 10^{-4}T - 1.6469\ 10^{-7}T^2 \tag{2.71}$$

La contribution de la conductivité thermique résiduelle du R134a est exprimée en fonction de la température réduite $T_r = \frac{T}{T_c}$ et de la densité réduite $\rho_r = \frac{\rho}{\rho_c}$:

$$\Delta\lambda = \rho_r(a_1 + a_2\rho_r^2 + (a_3 + a_4T_r)\rho_r^3 + (a_5 + a_6T_r)\rho_r^4) \tag{2.72}$$

Tableau 2.8 Coefficients utilisés pour le calcul de la conductivité du R134a

i	a_i	i	a_i
1	-1.568403	4	3.371808
2	16.71530	5	2.982238
3	-12.56456	6	-1.180252

Considérons alors un autre fluide, sa conductivité s'exprime alors :

$$\lambda\,(T) = \lambda°(T) + \Delta\lambda^R\left(\frac{T}{f}, \rho h\right) F_\lambda \tag{2.73}$$

Avec

$$f = \frac{T_c}{T_c^R} \tag{2.74}$$

$$h = \frac{\rho_c^R}{\rho_c} \tag{2.75}$$

$$F_\lambda = f^{\frac{1}{2}}\, h^{-\frac{2}{3}} \left(\frac{M^R}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.76}$$

Le terme $\lambda°(T)$ est calculé par la corrélation d'Eucken modifiée (Poling et Prausnitz 2000) ;

$$\lambda° = \frac{\eta°(T)}{M}\,(1.32\,C_p + 3.741) \tag{2.77}$$

2.5 Modélisation des propriétés des Mélanges

Ce paragraphe décrit la théorie de l'équilibre-vapeur appliquée aux mélanges, ainsi que les modèles qui permettent d'obtenir les propriétés thermophysiques et les propriétés de transport.

2.5.1 Equilibre liquide vapeur des mélanges

A l'équilibre thermodynamique, l'enthalpie libre de Gibbs est minimale. Pour chaque composé i, on doit avoir

$$dg_i(T,P) = 0 \tag{2.78}$$

Or nous pouvons relier comme pour les corps purs l'enthalpie libre de Gibbs et la fugacité.

$$dg_i = RT\ dln\ (f_i) \tag{2.79}$$

Ainsi, l'équilibre thermodynamique va se traduire par l'égalité des fugacités. Dans notre cas, pour un équilibre liquide vapeur, nous avons égalité des fugacités liquide et vapeur.

$$f_i^L(T,P,x_i) = f_i^V(T,P,y_i) \tag{2.80}$$

La résolution de l'équilibre nécessite de calculer les fugacités et de choisir un modèle thermodynamique. Il existe deux approches. La première consiste à choisir un modèle pour la phase liquide et un autre pour la phase vapeur. En général nous considérons des équations d'état pour la phase vapeur et un modèle de coefficient d'activité ou de solution pour la phase liquide. La seconde consiste à choisir la même équation d'état pour les deux phases.

On a choisi d'utiliser l'approche symétrique pour exprimer l'équilibre entre phases liquide et vapeur de chaque constituant. Les coefficients de fugacité ϕ^L et ϕ^V sont calculés à partir de l'équation d'état cubique.

$$x_i\phi_i^L(T,P,x_i) = y_i\phi_i^V(T,P,y_i) \tag{2.81}$$

Un diagramme de phase isotherme d'un mélange binaire est composé des courbes de rosée et de bulle. Le point de bulle représente le point où la première bulle de vapeur du mélange apparait lors de sa vaporisation. Le point de rosée représente le point où la dernière goutte de liquide du mélange restante disparait. La Figure 2.4 représente une lentille de vaporisation de mélange R245fa/Isopentane.

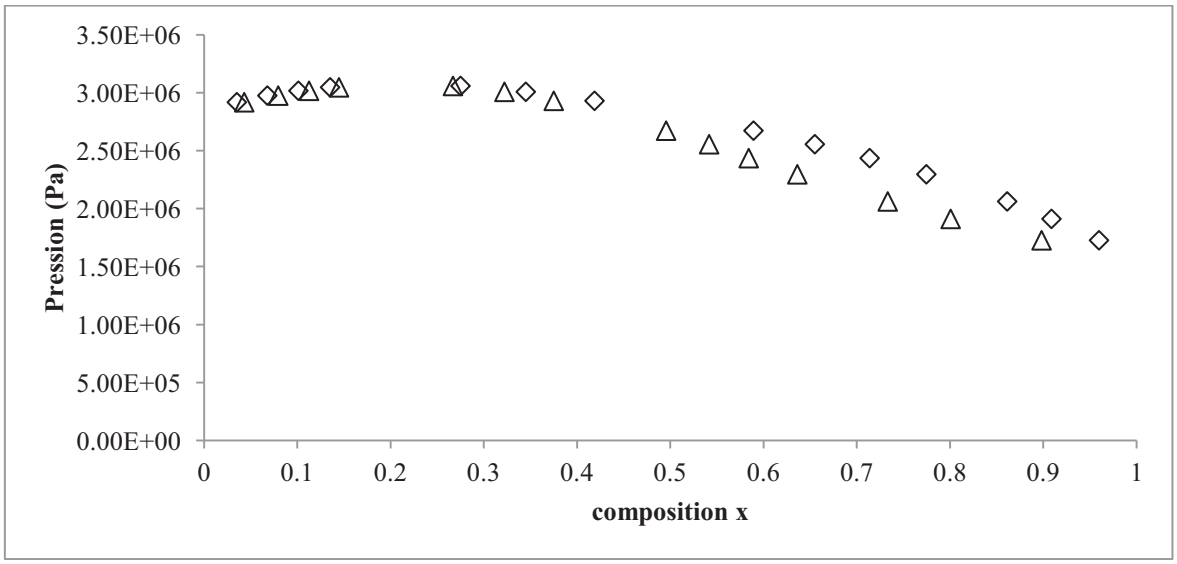


Figure 2.4 Lentille de vaporisation isotherme du mélange R245fa/isopentane, les données d'El-Ahmar et al (El-Ahmar, et al. 2012), T= 421.19 K avec :

◇ Enveloppe de la phase liquide △ Enveloppe de la phase vapeur

2.5.2 Calcul de point de bulle / rosée

Selon la règle des phases de Gibbs, la variance V d'un système est déterminé par la relation *V=nombre de composés + 2 – nombre de phases*. Cela indique le nombre de degrés de liberté du système.

Pour le calcul de l'équilibre entre phases d'un système binaire, il y a 2 phases, 2 composés et la variance est égale à 2. Or il y a 4 variables dans le système : T, P et les compositions liquide et vapeur (x et y). La résolution de l'équilibre nécessite de fixer 2 variables.

- *T, x -> P, y* Pression de bulle
- *T, y -> P, x* Pression de rosée
- *P, x -> T, y* Température de bulle
- *T, y -> P,x* Température de rosée

2.5.3 Calcul Flash

Le calcul de flash permet de réaliser un équilibre thermodynamique à température et pression données, connaissant la composition globale du mélange. Il calcule la fraction molaire de chaque constituant i dans les phases liquide x_i et vapeur y_i et le taux de vaporisation. Il nécessite d'effectuer un bilan de matière.

- *T, P -> x,y* Flash

Le paragraphe 6 présente les algorithmes du calcul concernant la recherche de l'équilibre liquide – vapeur.

2.5.4 Equations d'état et règles de mélange

Si on utilise l'approche symétrique pour modéliser un mélange, il va falloir calculer les paramètres de l'équation d'état pour les mélanges dans chacune des phases. D'où l'introduction des règles de mélange.

Les règles de mélange doivent prendre en compte les caractéristiques non idéales des solutions. En effet, l'objectif est de calculer les paramètres a et b de l'équation d'état cubique pour une composition donnée en considérant les interactions (croisées) entre les différents constituants.

La première règle de mélange est celle de van der Waals, également appelée « la règle de mélange quadratique ». Elle est justifiée par la thermodynamique statistique (Vidal 1973).

Les paramètres a et b sont calculés de la manière suivante :

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j \, a_{ij} \tag{2.82}$$

$$avec \; a_{ij} = (1 - k_{ij})\sqrt{a_i a_j}$$

$$b = \sum_i x_i \, b_i \tag{2.83}$$

kij est le coefficient d'interaction binaire qui corrige, selon la nature des interactions entre les molécules des différents composants du mélange, le terme attractif. Il est déterminé généralement par ajustement sur des données expérimentales.

Sa valeur est négative si les constituants différents s'attirent ($a_{mel} > \sqrt{a_i a_j}$) , elle est positive dans le cas contraire. Ce coefficient peut être ajusté expérimentalement ou évalué par des méthodes du type « contribution de groupes » (Jaubert, et al. 2005, Jaubert; Mutelet 2004).

2.5.5 Propriétés de transport des mélanges

Les calculs des propriétés de transport des mélanges sont similaires à celui des corps purs présentés précédemment. Une règle de mélange est utilisée pour estimer les paramètres de mélanges nécessaires à la méthode de calcul TRAPP :

Les paramètres listés ci-dessous sont communs aux calculs de la viscosité et de la conductivité mélange.

Paramètres pseudo-critique du mélange considéré:

$$T_{cm} = \sum_i y_i T_{ci} \tag{2.84}$$

$$P_{cm} = RT_{cm}\left(\frac{\sum_i y_i Z_{ci}}{\sum_i y_i V_{ci}}\right) \tag{2.85}$$

$$M_m = \sum_i y_i M_i \tag{2.86}$$

2.5.5.1 Méthode de prédiction de la viscosité pour les mélanges

En comparaison aux fluides purs, l'expression de la viscosité d'un mélange comprend en plus un terme correctif d'Enskog (Poling et Prausnitz 2000) qui représente la contribution due aux interactions moléculaires croisées.

$$\eta_m\,(T) = \eta^{\circ}{}_m(T) + \Delta\eta_m(T,\rho) + \Delta\eta_m^{Enskog} \tag{2.87}$$

Paramètres utilisés dans les calculs des termes résiduels de la méthode TRAPP :

$$\mathrm{h_M} = \sum_i \sum_j y_i y_j h_{ij} \tag{2.88}$$

$$\mathrm{f_M\ h_M} = \sum_i \sum_j y_i y_j f_{ij} h_{ij} \tag{2.89}$$

$$h_{ij} = \frac{\left[(h_i)^{\frac{1}{3}} + (h_j)^{\frac{1}{3}}\right]^3}{8} \tag{2.90}$$

$$f_{ij} = \left(f_i\, f_j\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.91}$$

$$F_{\eta M} = (M^R)^{-\frac{1}{2}}\,(h_M)^{-2} \sum_i \sum_j y_i y_j \left(\frac{f_{ij}}{M_{ij}}\right)^{\frac{1}{2}} (h_{ij})^{\frac{4}{3}} \tag{2.92}$$

M_{ij} est une masse molaire moyenne calculée par la règle de mélange suivante :

$$M_{ij} = \left(\frac{1}{2M_i} + \frac{1}{2M_j}\right)^{-1} \tag{2.93}$$

Le terme d'Enskog s'écrit de la manière suivante :

$$\Delta\eta_m^{Enskog} = \eta_m^{Enskog} - \eta_m^{Enskog\,0} \tag{2.94}$$

Avec :

$$\eta_m^{Enskog} = \sum_i \beta_i Y_i + \alpha\rho \sum_i \sum_j y_i y_j \sigma_{ij}^6 \eta_{ij} g_{ij} \tag{2.95}$$

$$\alpha = 9.725 \times 10^{-7} \tag{2.96}$$

$$\sigma_i = 4.771\, h^{\frac{1}{3}} \tag{2.97}$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \tag{2.98}$$

σ_{ij} représente le diamètre de sphère rigide moyen du mélange binaire.

$$\eta_{ij} = K.\frac{(M_{ij}\,T)^{\frac{1}{2}}}{\sigma_{ij}^2} \tag{2.99}$$

η_{ij} représente le terme idéal de viscosité calculé selon la théorie cinétique du gaz du mélange.

$$g_{ij} = (1-\xi)^{-1} + \frac{3\xi}{(1-\xi)^2}\theta_{ij} + \frac{2\xi^2}{(1-\xi)^3}\theta_{ij} \quad (2.100)$$

$$\theta_{ij} = \frac{\sigma_i\sigma_j}{2\sigma_{ij}}\frac{\sum_k y_k\sigma_k^2}{\sum_k y_k\sigma_k^3} \quad (2.101)$$

$$\xi = (6.023e-4)\ \frac{\pi}{6}\ \rho \sum_i y_i\sigma_i^3 \quad (2.102)$$

β_i sont calculés en résolvant le système d'équations :

$$Y_i = y_i\ (1 + \frac{8\pi}{15}\ (6.023e-4)\rho\ \sum_j y_j\ \left(\frac{M_j}{M_i+M_j}\right)\sigma_{ij}^3 g_{ij}\ ) \quad (2.103)$$

$$\sum_j B_{ij}\ \beta_j = Y_i \quad (2.104)$$

$$B_{ij} = 2\ \sum_k y_i y_k\ \frac{g_{ik}}{\eta_{ik}^0}\left(\frac{M_k}{M_i+M_k}\right)^2\ [\left(1 + \frac{5}{3}\frac{M_i}{M_k}\right)\delta_{ij} - \frac{2}{3}\frac{M_i}{M_k}\ \delta_{ik}] \quad (2.105)$$

$\eta_x^{Enskog^0}$ est une quantité liée à un fluide hypothétique ayant la même densité que le mélange considéré.

$$\eta_m^{Enskog^0} = \beta_x Y_x + \alpha\ \rho\ \sigma_x^6\ \eta_x^{enskog^0} g_x \quad (2.106)$$

$$\beta_x = \frac{g_x}{\eta_x^{enskog^0}} \quad (2.107)$$

$$Y_x = \ (1 + \frac{8\pi}{15}\ (6.023e-4)\rho\ \frac{\sigma_x^3 g_x}{2} \quad (2.108)$$

$$\sigma_x = \ \left(\sum_i \sum_j y_i\ y_j\ \sigma_{ij}^3\right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.109)$$

$$g_x = (1-\xi_x)^{-1} + \frac{3\xi_x}{(1-\xi_x)^2}\frac{1}{2} + \frac{2\xi_x^2}{(1-\xi_x)^3}\frac{1}{2} \quad (2.110)$$

$$\xi_x = (6.023\mathrm{e}-4)\frac{\pi}{6}\rho\ \sigma_x^3 \quad (2.111)$$

$$\eta_x^{enskog^0} = \mathrm{K}.\frac{(\mathrm{M_x\ T})^{\frac{1}{2}}}{\sigma_x} \quad (2.112)$$

$$M_x = \left[\sum_i \sum_j y_i\ y_j M_{ij}^{\frac{1}{2}}\ \sigma_{ij}^4\right]^2\ \sigma_x^{-8} \quad (2.113)$$

2.5.5.2 Méthode de prédiction de la conductivité pour les mélanges

L'expression de la conductivité thermique des mélanges est la même que pour les corps purs :

$$\lambda_m\,(T) = \lambda^{\circ}{}_m(T) + \Delta\lambda_m^R\left(\frac{T}{f_m}, \rho h_m\right) F_{\lambda m} \qquad (2.114)$$

Cependant, notons que le calcul du terme idéal est légèrement différent. Wassiljewa (Wassiljewa 1904) a proposé une règle de mélange pour le calcul du terme idéal :

$$\lambda^{\circ}{}_m = \sum_i \frac{y_i\,\lambda^{\circ}{}_i}{\sum_j y_j A_{ij}} \qquad (2.115)$$

Avec $A_{ii} = 1$ et $A_{ij} = \dfrac{\left[1+\left(\frac{\eta_i^0}{\eta_j^0}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2}{\left[8\left(1+\frac{M_i}{M_j}\right)\right]^{\frac{1}{2}}}$ (Mason et Saxena 1958)

Le coefficient du terme résiduel s'écrit :

$$F_{\lambda m} = (M^R)^{\frac{1}{2}}\,(h_m)^{-2}\sum_i\sum_j y_i\,y_j\,\left(\frac{f_{ij}}{M_{ij}}\right)^{\frac{1}{2}} h_{ij}^{\frac{4}{3}} \qquad (2.116)$$

2.6 Algorithmes de calcul

2.6.1 Algorithme de calcul de l'équilibre liquide-vapeur du corps pur

L'initialisation de la pression est faite par la formulation proposé par Lee-Kesler (Lee et Kesler 1975), basée sur le principe des états correspondants :

$$P_0 = P_c \exp(5.92714 - \frac{6.09648}{T_r} - 1.28862\ln(T_r) + 0.169347\,T_r^6 + \omega\,(15.2518 - \frac{15.6875}{T_r} - 13.4721\ln(T_r) + 0.43577\,T_r^6)) \qquad (2.117)$$

Avec ω le facteur acentrique du fluide et T_r est la température réduite.

L'initialisation de la température de saturation est faite par la corrélation logarithmique (Gicquel 2010) ci-dessous :

$$T_0 = A + B\,ln(P)\; + C\left(ln(P)\right)^2 + D\left(ln(P)\right)^3 + E\left(ln(P)\right)^4 \qquad (2.118)$$

Avec A, B, C, D et E les coefficients ajustés

La Figure 2.5 illustre le mécanisme de résolution :

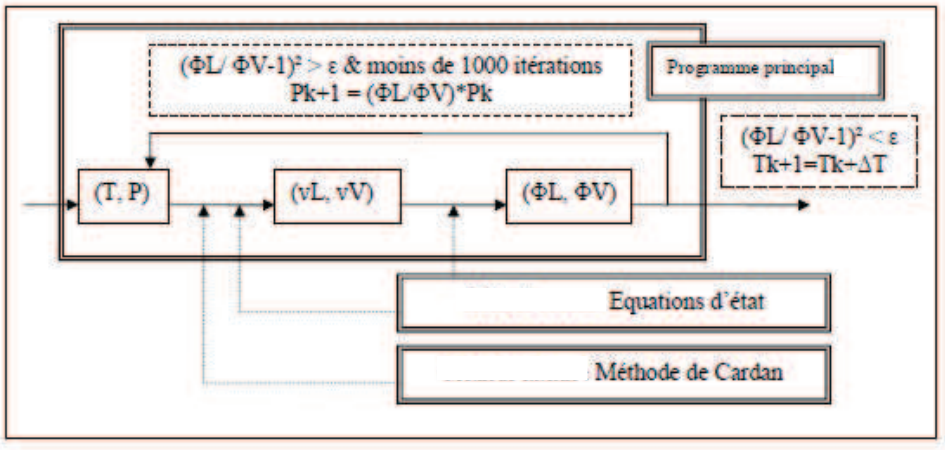


Figure 2.5 Algorithme de calcul de la pression de saturation

2.6.2 Algorithme de calculs de point de bulle et de point de rosée

Le calcul du point de bulle se fait selon l'algorithme représenté dans la Figure 2.6. Les algorithmes doivent vérifier deux conditions de convergence pour chaque constituant i : la conservation de matière et le critère d'équilibre sur la fugacité. Le calcul de point de rosée se fait de manière identique.

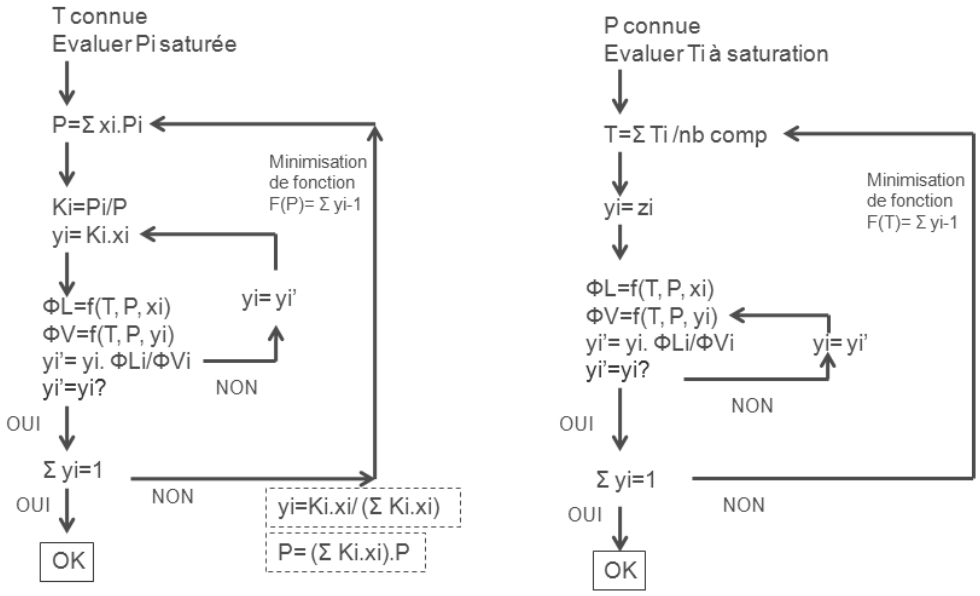


Figure 2.6 Algorithme de calcul de point de bulle

2.6.3 Algorithme de calcul du flash isotherme

Le calcul itératif se fait en 2 boucles : la conservation de la masse et l'égalité des fugacités.

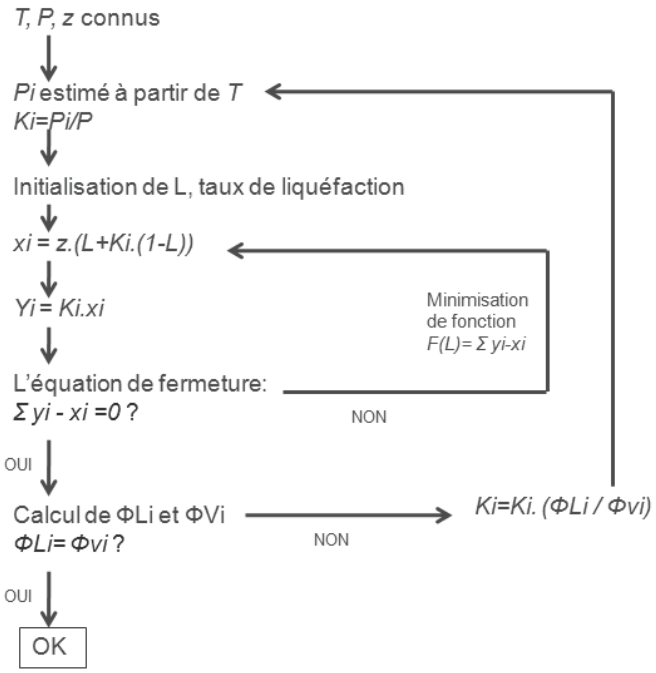


Figure 2.7 Algorithme de résolution d'un flash isotherme proposé par Sandler (Sandler 1977)

2.6.4 Correction de propriétés de transport pour fluide connu

Les méthodes de calculs de propriétés de transport présentées précédemment sont prédictives. Mais les résultats calculés peuvent dans certains cas s'écarter de manière assez importante de la réalité. Cette observation sera présentée plus loin au paragraphe 2.8. Dans le cas où nous possédons des données expérimentales du fluide, nous souhaitons avoir la possibilité de corriger ces résultats, notamment aux points de saturation où les propriétés de transport ont un impact non négligeable sur le dimensionnement des échangeurs.

Pour un fluide connu, nous avons introduit un coefficient de correction k qui est égal au rapport entre la valeur expérimentale et la valeur calculée par la méthode TRAPP. Ce coefficient est exprimé par une corrélation en fonction de la température réduite sous la forme :

$$k = A + B\,T_r + C\,T_r^2 + \frac{D}{1-T_r} \qquad (2.119)$$

A, B, C, D sont des paramètres ajustés à partir des données expérimentales.

Notons que ces paramètres de corrélations correctives doivent être ajustés séparément pour la viscosité liquide, la viscosité vapeur, la conductivité thermique liquide et la conductivité thermique vapeur. De plus, leurs valeurs sont différentes pour chaque modèles de fluides choisis.

2.7 Construction d'un serveur de propriétés thermophysiques de fluides

Un outil de prédiction des propriétés thermodynamiques des fluides a été créé sous Java, portant le nom de CTPlib. Il a été couplé avec le progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim. Ce progiciel, composé 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 & conductivité)

Pour les mélanges:

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

La version actuelle du logiciel utilise comme données d'entrée un fichier de fluide contenant les principales propriétés intrinsèques au fluide, comme suit :

- Le point critique du fluide ;
- Sa masse molaire ;
- Son facteur acentrique ;
- Son moment dipolaire (facultatif) ;
- La corrélation du Cp gaz parfait;
- L'information sur les corrélations utilisées pour initialiser la pression de saturation ou la température de saturation

Un modèle d'équation cubique et une fonction $\alpha(T)$ doivent être choisis avant de démarrer la simulation de propriétés du fluide. Dans le cas purement prédictif, nous pouvons travailler avec le modèle PR ou SRK couplé à la fonction $\alpha(T)$ généralisée. En revanche, si nous disposons de quelques points expérimentaux, nous pouvons alors travailler avec les modèles PR, SRK ou PT couplés à la fonction $\alpha(T)$ de Mathias-Copeman dont les paramètres sont ajustés pour une meilleure précision de calcul. La procédure d'ajustement et son algorithme sont décrits dans l'annexe 7.2.

Le manuel d'utilisation du CTPlib est également consultable dans l'annexe 7.6.

2.8 Validation des résultats de modèles implémentés dans CTPlib et évaluation des déviations

La validation de modèles implémentés a été faite en comparant les résultats des calculs de la bibliothèque développée, nommée CTPlib, avec les données du NIST (National Institute of Standards and Technology) (NIST 2007) ou avec les données expérimentales du Centre de Thermodynamique des Procédés de Mines Paristech. La plage de températures de validation considérée est comprise entre 280 K et 390 K représentative des conditions limites de travail du cycle de conversion d'énergie à basse température.

2.8.1 Validations des calculs de propriétés thermophysiques

Les sous-paragraphes suivants présentent quelques résultats de calculs de pression de saturation, de température et de volume de différents fluides. Chaque famille de fluides sélectionnés sera représentée au moins par un des fluides du Tableau 2.4:

- HC : le butane;
- HFC : le R134a, le R245fa;
- HFO : le R1216, le R1233zd ;
- Aromatique: le toluène.

Pour illustrer les calculs de mélange, nous présenterons les résultats de calcul du mélange R245fa/Isopentane à 392 K. Les tableaux de données utilisés pour le tracé des courbes d'équilibre sont consultables en annexe 7.3.

2.8.1.1 Le butane

Plus connu pour son usage de combustible domestique, le butane peut aussi être utilisé dans des systèmes de réfrigération et des ORC. Cependant son inflammabilité nécessite une sécurité renforcée.

La formule chimique est : CH3-2(CH2)-CH3.

Les paramètres du fluide sont :

Tableau 2.9 Paramètres du butane

T_c (K)	P_c(MPa)	ω
425.16	3.80	0.2002

Le calcul a été réalisé avec le modèle PR et la fonction α(T) de Mathias-Copeman ajustée sur la pression de saturation. L'écart moyen est inférieur à 0.5 %. Les calculs de pression sont en bon accord avec les données du NIST. (Figure 2.9)

Tableau 2.10 Paramètres de Mathias-Copeman du butane

C_1	0.732
C_2	-0.850
C_3	2.867

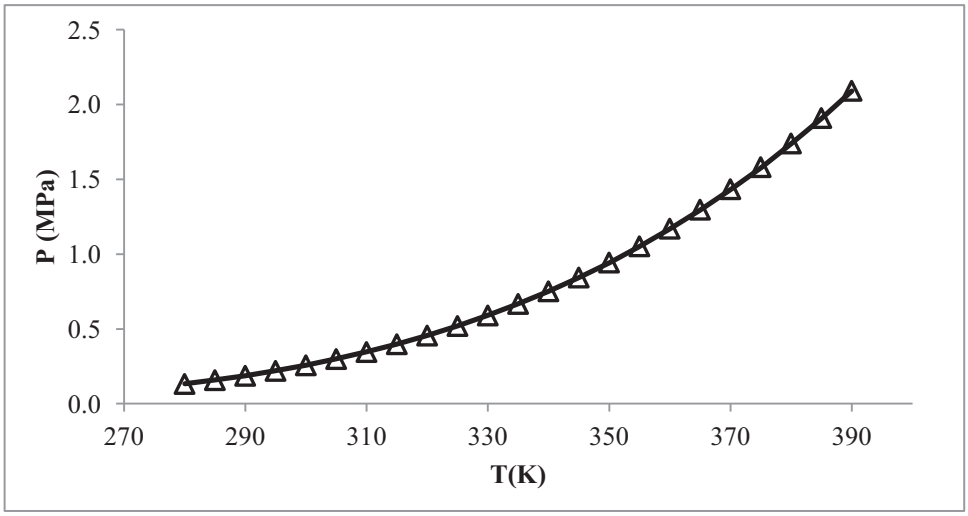


Figure 2.8 Résultats de calculs de pressions de saturation de butane

Δ données expérimentales ——résultats des calculs

Le volume spécifique vapeur du butane est également bien évalué. L'écart observé est inférieur à 1 % (Figure 2.9). En revanche, en raison de la difficulté générale des modèles cubiques à représenter le volume liquide du fluide, nous observons un écart de l'ordre 5 % entre 280 et 390 K (Figure 2.10).

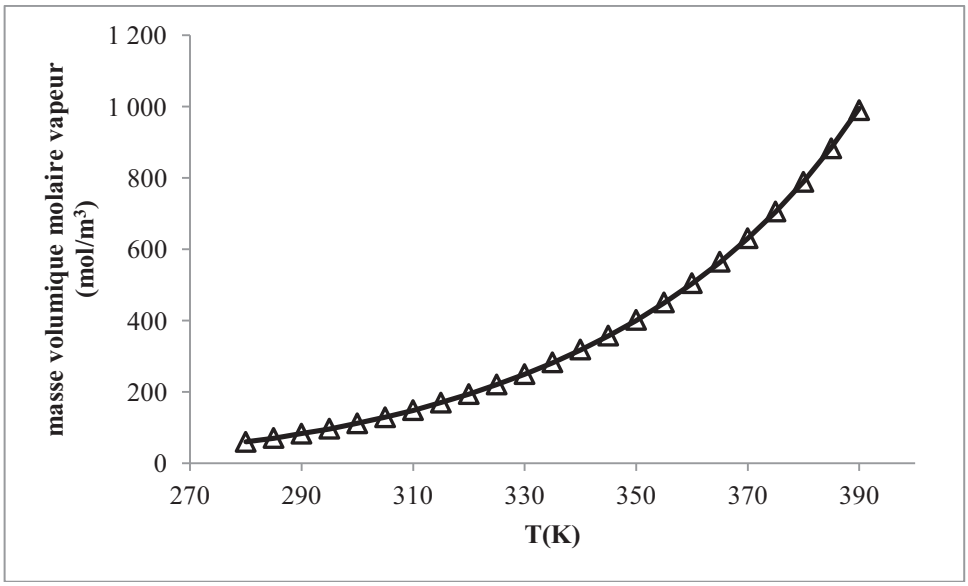


Figure 2.9 Résultats de calculs de masse volumique vapeur du butane

Δ données expérimentales ——résultats des calculs

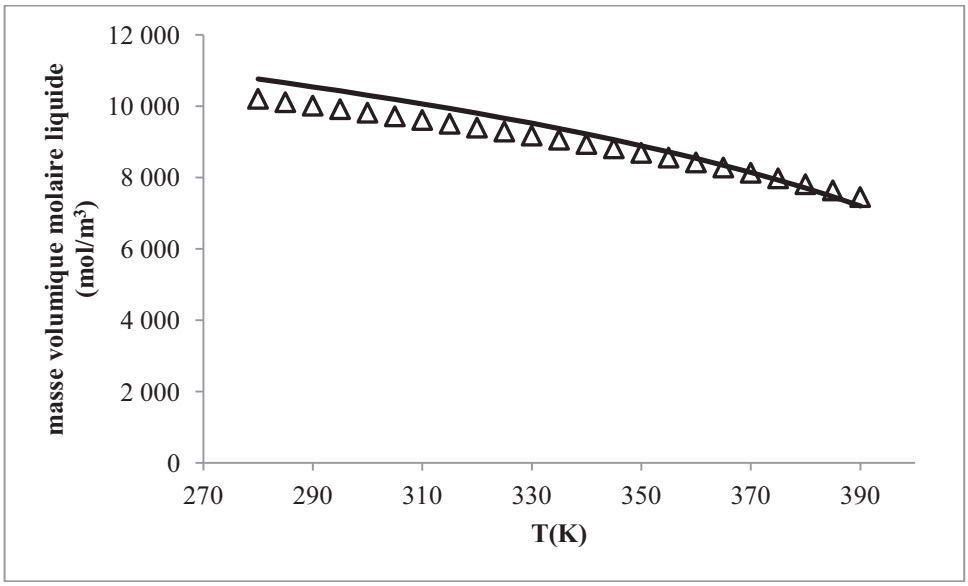


Figure 2.10 Résultats de calculs de masse volumique liquide du butane

2.8.1.2 Le R134a

Le R134a est actuellement le fluide le plus utilisé dans la climatisation automobile. Il n'est ni inflammable ni toxique. Cependant, son GWP de 1430 contraint à son retrait progressif probable du marché des fluides frigorigènes

La formule chimique est : CF3CHF2.

Les paramètres du fluide pris à l'entrée du progiciel sont :

Tableau 2.11 Paramètres du R134a

T_c (K)	P_c(MPa)	ω
374.3	4.01	0.32669

Le calcul a été réalisé avec le modèle PR et la fonction α(T) de Mathias-Copeman ajustée sur la pression de saturation (NIST). L'écart moyen est inférieur à 0.5 % (Figure 2.11).

Tableau 2.12 Paramètres de Mathias-Copeman du R134a

C_1	0.808
C_2	0.165
C_3	0.458

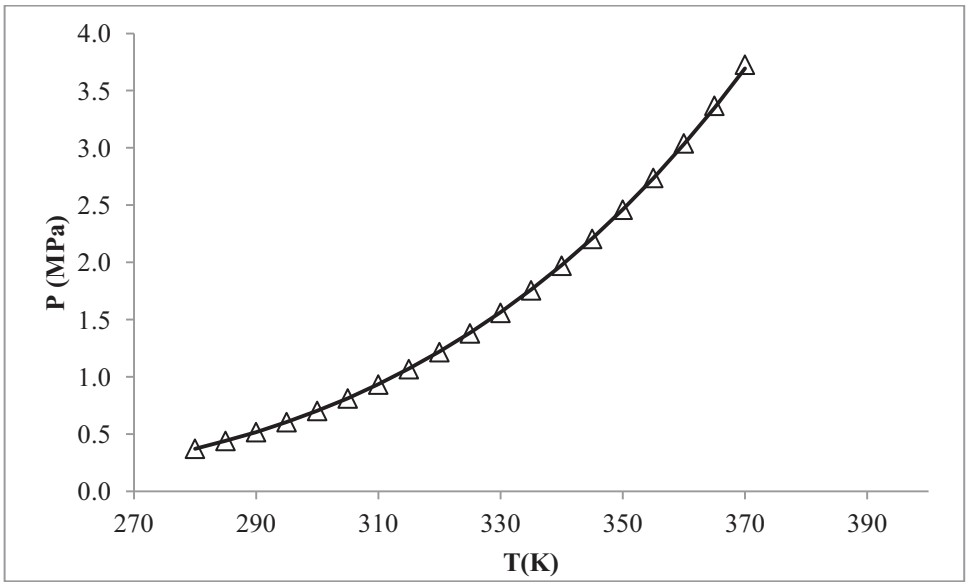


Figure 2.11 Résultats de calculs de pressions de saturation du R134a

△ données expérimentales ——résultats des calculs

La masse volumique vapeur du R134a est bien estimée. L'écart observé est de l'ordre de 1-2 % (Figure 2.12). En revanche, nous observons un écart sur la masse volumique liquide de l'ordre de 5 % lorsqu'on s'éloigne du point critique. A l'approche du point critique, l'écart augmente pour atteindre plus de 15 % (Figure 2.13). Cette déviation est due à la difficulté du modèle cubique à représenter les forces interactives, notamment près du point critique.

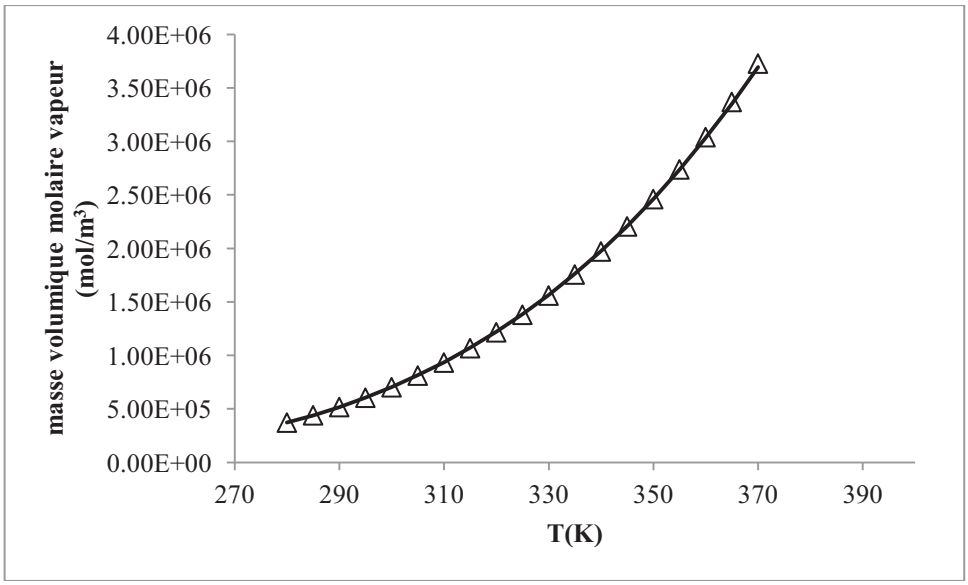


Figure 2.12 Résultats de calculs de masse volumique vapeur du R134a

△ données expérimentales ——résultats des calculs

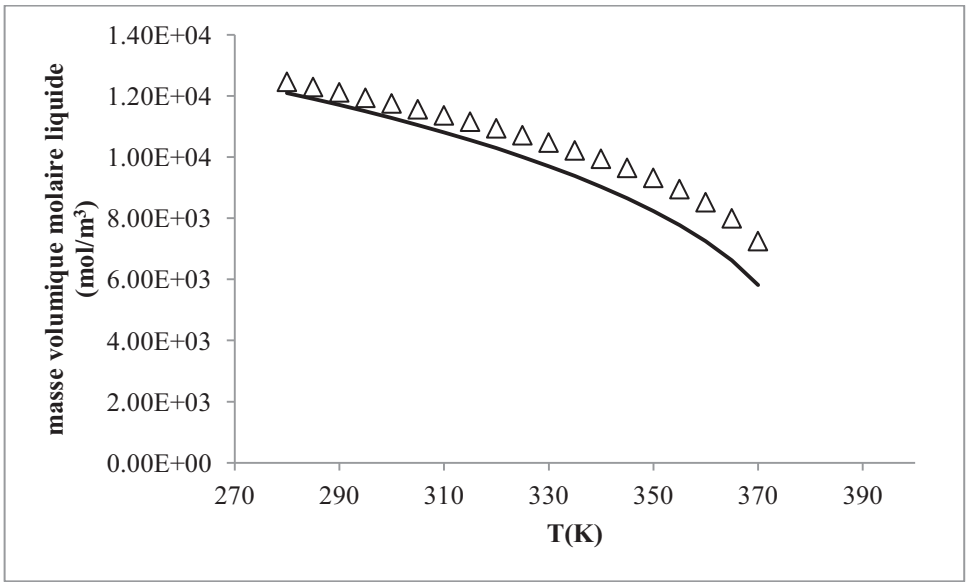


Figure 2.13 Résultats de calculs de masse volumique liquide du R134a

△ données expérimentales ——résultats des calculs

2.8.1.3 Le R245fa

Le R245fa est un des fluides à haute température critique utilisé pour les applications à température « élevée » (exemple : les pompes à chaleur travaillant à plus de 373 K). Il n'est pas inflammable mais légèrement toxique. Comme pour le R134a, son GWP de 1030 contraindra probablement ce HFC à un retrait progressif du marché ; il pourrait éventuellement être remplacé par des HFO du type R1233zd(E).

La formule chimique est : CF3CH2CHF2.

Les paramètres du fluide pris à l'entrée du progiciel sont :

Tableau 2.13 Paramètres du R245fa

T_c (K)	P_c(MPa)	ω
427.16	3.65	0.3776

Le calcul a été réalisé avec le modèle PR et la fonction α(T) de Mathias-Copeman ajustée sur la pression de saturation. L'écart moyen est très faible de l'ordre de 0.5 % (Figure 2.14).

Tableau 2.14 Paramètres de Mathias-Copeman du R245fa

C_1	0.957
C_2	-0.932
C_3	4.185

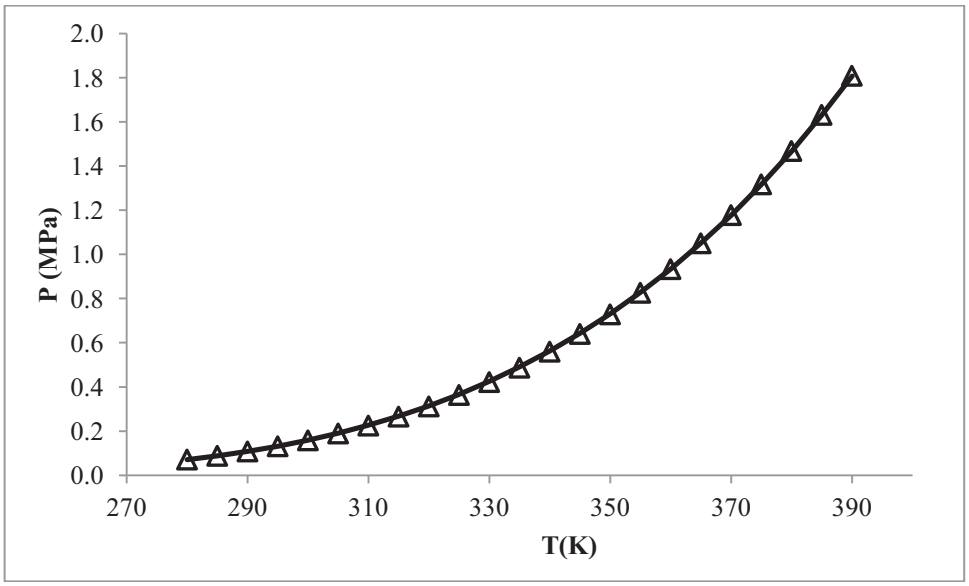


Figure 2.14 Résultats de calculs de pressions de saturation du R245fa

△ données expérimentales ——résultats des calculs

Le volume de vapeur saturée de R245fa est également bien évalué. L'écart moyen observé est de l'ordre de 1 à 2 % (Figure 2.15). Nous observons un écart sur la masse volumique liquide de l'ordre de 3 à 5 % (Figure 2.16). Ces résultats, qui semblent plus précis que les calculs précédents pour le R134a, sont notamment dus à l'éloignement des points de calcul par rapport au point critique.

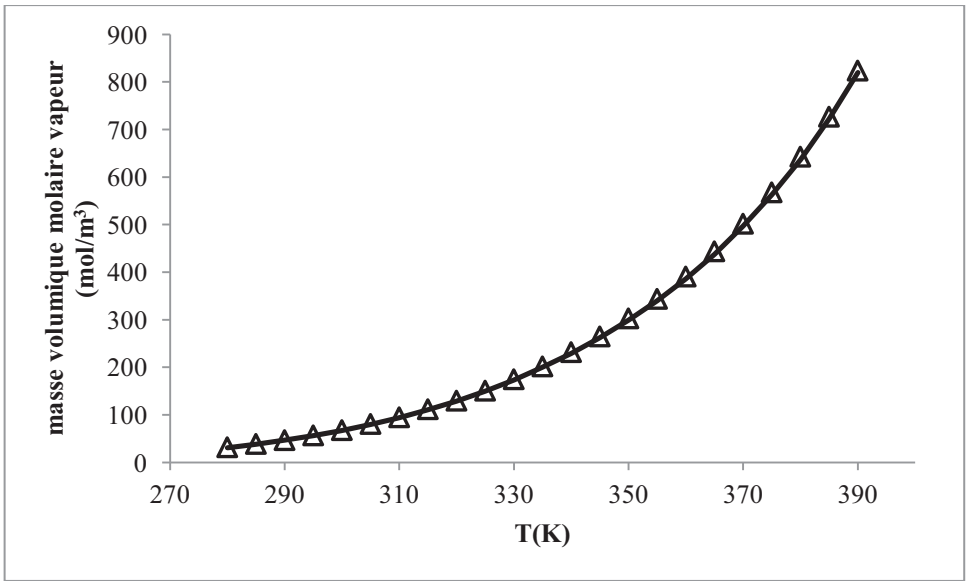


Figure 2.15 Résultats de calculs de masse volumique vapeur du R245fa

△ données expérimentales ——résultats des calculs

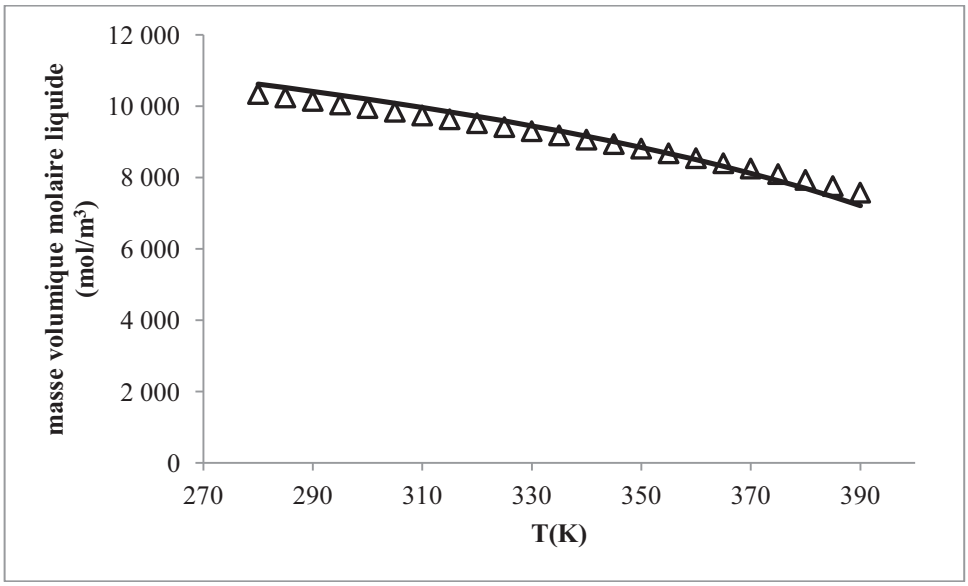


Figure 2.16 Résultats de calculs de masse volumique liquide du R245fa

2.8.1.4 Le R1216

Le R1216 est un HFO. Son GWP est très faible, de l'ordre de 1. Cependant son point critique reste relativement bas. Ce corps pur peut être utilisé dans des mélanges pour baisser l'impact environnemental du fluide. Le CTP Mines Paristech a réalisé des mesures expérimentales de ce fluide (Subramoney, et al. 2012).

La formule chimique est : CF3CF = CF2.

Les paramètres du fluide pris à l'entrée du progiciel :

Tableau 2.15 Paramètres du R1216

T_c (K)	P_c(MPa)	ω
358.9	3.14	0.3529

Le calcul a été réalisé avec le modèle PR et la fonction α(T) de Mathias-Copeman ajustée sur la pression de saturation. L'écart est inférieur à 0.8 % (Figure 2.17).

Tableau 2.16 Paramètres de Mathias-Copeman du R1216

C_1	0.915
C_2	-0.743
C_3	3.581

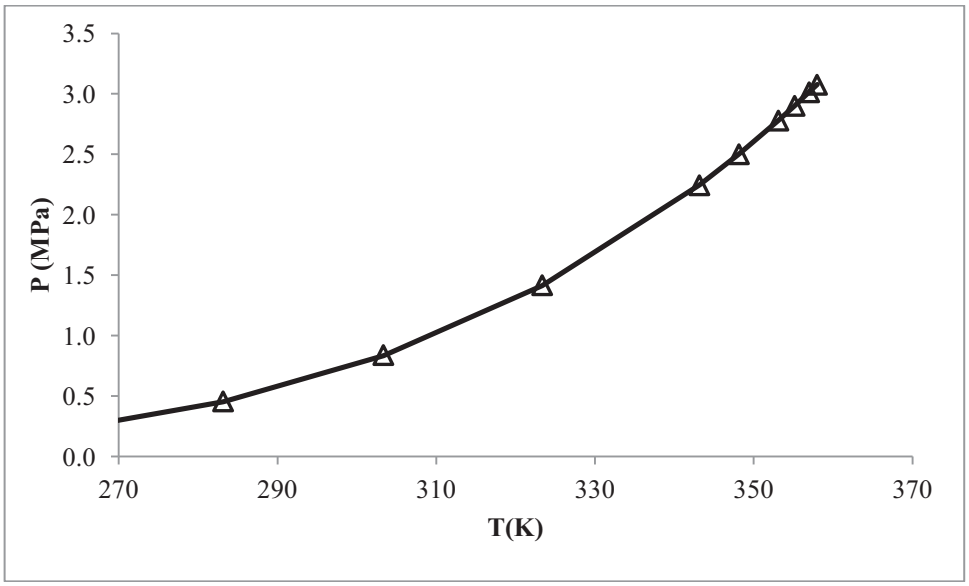


Figure 2.17 Résultats de calculs de pressions de saturation du R1216

△ données expérimentales —— résultats des calculs

Les calculs de la masse volumique liquide à saturation du R1216 donnent des déviations similaires au R134a : plus le point calculé est proche du point critique plus l'écart devient important. L'écart est de l'ordre de 15 % au près du point critique (Figure 2.18).

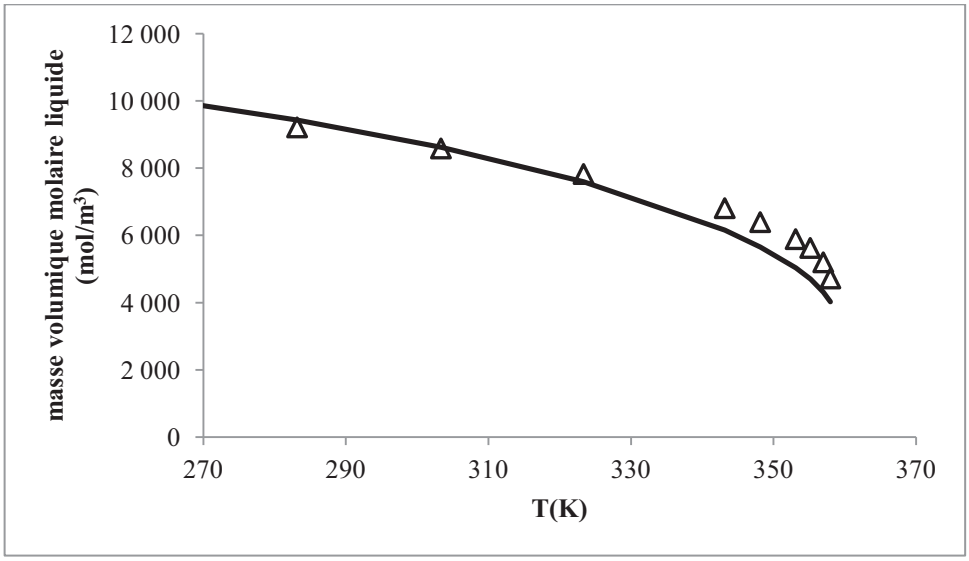


Figure 2.18 Résultats de calculs de masse volumique du R1216

△ données expérimentales —— résultats des calculs

2.8.1.5 Le R1233zd(E)

Le R1233zd(E) est un HFO ou plus exactement un HCFO (Hydro- Chloro- Fluoro -Olefine) encore en cours de test. Très peu de données existent sur ce fluide. Durant nos travaux de thèse, nous utilisons les données de Hulse et al. et des données confidentielles fournies par Honeywell. Son avantage par rapport au R1216 est d'avoir un point critique élevé et un GWP très faible (GWP = 5). Ce corps va pouvoir éventuellement remplacer le R245fa dans le futur.

Cependant l'atome de chlore dans le composé engendre un ODP non nul mais très très faible (Environmental Protection Agency 2013). Le point critique du fluide pris à l'entrée du logiciel est issu de la publication de Hulse (Hulse, et al. 2012). Le facteur acentrique est recalculé à partir des points de données.

Tableau 2.17 Paramètres d'entrée du R1233zd

T_c (K)	P_c(MPa)	ω
438.75	3.77	0.3412

Le calcul a été réalisé avec le modèle PR et la fonction $\alpha(T)$ généralisée. Les comparaisons ont été faites par rapport aux données fournies par Honeywell. Pour des raisons de confidentialité, nous présentons uniquement les déviations relatives absolues pour la pression de saturation et le volume liquide.

Les calculs de pression sont en accord avec les données fournis par Honeywell. L'écart est en moyenne de l'ordre de 1 %. La masse volumique du liquide saturé R1233zd est également relativement bien calculée. La déviation n'excède pas 7.5 %.

Tableau 2.18 Déviations des résultats de pression de saturation et de masse volumique du R1233zd

T (K)	Ecart Relatif Absolu sur la pression de saturation P^{sat} (%)	Ecart Relatif Absolu sur le volume spécifique liquide v^L (%)
280	4.10	7.25
285	3.12	7.30
290	2.27	7.34
295	1.55	7.36
300	0.94	7.37
305	0.43	7.35
310	0.02	7.32
315	0.31	7.26
320	0.56	7.18
325	0.75	7.07
330	0.88	6.94
335	0.96	6.77
340	1.00	6.57
345	1.00	6.34
350	0.98	6.06
355	0.92	5.75
360	0.85	5.38
365	0.76	4.97
370	0.67	4.49
375	0.56	3.95
380	0.45	3.34
385	0.35	2.64
390	0.25	1.85

2.8.1.6 Le toluène

Le toluène est un aromatique. En raison de sa performance énergétique, il existe quelques installations ORC qui l'utilisent comme fluide de travail. Cependant ce fluide est inflammable et toxique. Il nécessite une sécurité renforcée pour sa manipulation.

La formule chimique est : CH3-C6H5.

Les paramètres du fluide pris à l'entrée du progiciel sont :

Tableau 2.19 Paramètres du toluène

T_c (K)	P_c(MPa)	ω
591.75	4.13	0.2657

Le calcul a été réalisé avec le modèle PR et la fonction $\alpha(T)$ de Mathias-Copeman ajustée sur la pression de saturation. L'écart moyen est de l'ordre de 0.5 % lorsque T > 330 K.

Tableau 2.20 Paramètres de Mathias-Copeman du toluène

C_1	0.854
C_2	-0.959
C_3	2.508

Les calculs de pression sont en accord avec les données du NIST (Figure 2.19). Cependant, en raison de la valeur absolue très faible de la pression lorsque la température diminue (notamment lorque T < 300 K), la déviation relative devient plus importante.

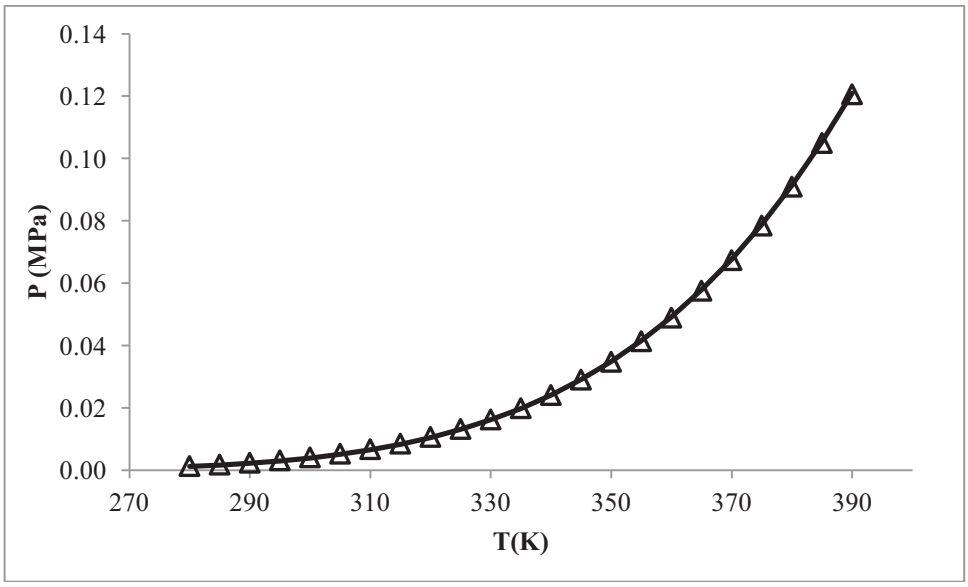


Figure 2.19 Résultats de calculs de pressions de saturation du toluène

Les masses volumiques vapeur et liquide du toluène sont relativement bien estimées sur la plage de température considérée (Figure 2.20 et Figure 2.21).

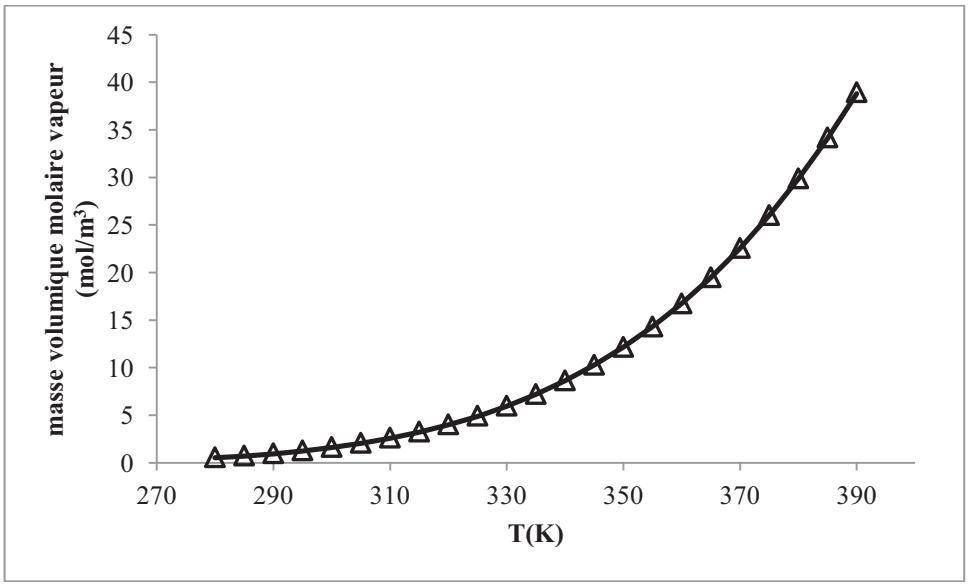


Figure 2.20 Résultats des calculs de masses volumiques vapeur du toluène

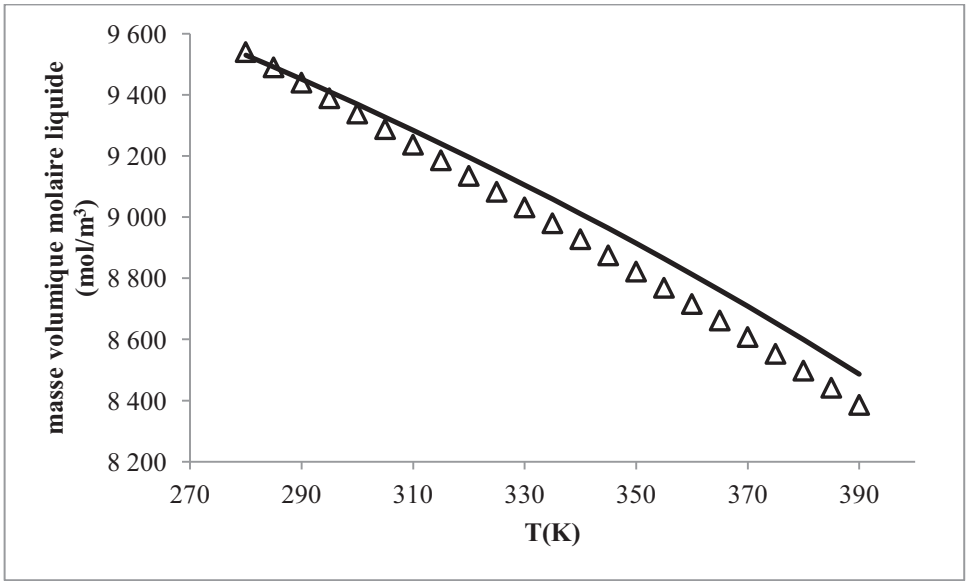


Figure 2.21 Résultats des calculs de masses volumiques liquide du toluène

2.8.1.7 Le mélange R245fa/Isopentane

Le mélange R245fa/Isopentane a été testé par le CTP Mines-Paristech (El-Ahmar, et al. 2012). Ce mélange de deux fluides à haute température critique peut être utilisé dans les applications de pompe à chaleur à haute température (Assaf 2010).

Les paramètres d'entrées sont :

Tableau 2.21 Paramètres du R245fa et de l'isopentane

	T_c (K)	P_c(MPa)	ω
R245fa	427.16	3.65	0.3776
Isopentane	460	3.378	0.2274

Les calculs ont été réalisés avec le modèle PR et la fonction $\alpha(T)$ généralisée. La règle de mélange est celle de van der Waals. A T = 392.87 K, k_{ij} = 0.148.

Les enveloppes des pressions saturantes ont été calculées et comparées aux données de CTP. Les calculs sont en accord avec les résultats expérimentaux (Figure 2.22, Tableau 2.22 et Tableau 2.23).

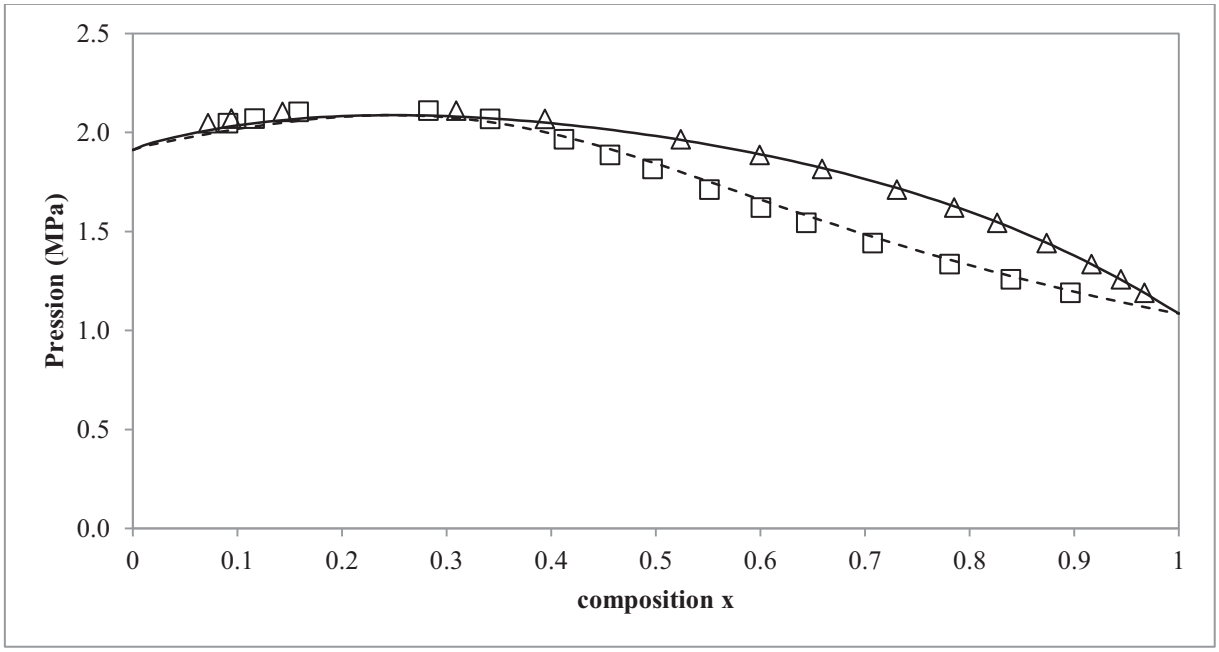


Figure 2.22 Lentille de vaporisation isotherme du mélange R245fa/Isopentane, modèle ajusté à partir des données d'El-Ahmar et al, T=392.87 K, $\mathbf{k_{ij}}$=0.148

Tableau 2.22 Résultats de calculs de l'enveloppe de phase liquide

x_{iC5}	P_{exp}^{L} (Pa)	P_{cal}^{L} (Pa)	Ecart Relatif Absolu (%)
0.9672	1189400	1188728	0.06
0.9447	1257400	1255764	0.13
0.9166	1334300	1333733	0.04
0.8737	1440400	1441343	0.07
0.8264	1542900	1545542	0.17
0.7853	1619900	1625190	0.33
0.7305	1710500	1717698	0.42
0.659	1815000	1818498	0.19
0.5993	1885600	1888256	0.14
0.5239	1964700	1960515	0.21

0.394	2067700	2047724	0.97
0.3092	2109400	2078353	1.47
0.1431	2103300	2061188	2.00
0.0942	2069100	2029798	1.90
0.0719	2046000	2050189	0.20

Tableau 2.23 Résultats de calculs de l'enveloppe de phase vapeur

y_{iC5}	P_{exp}^{V} (Pa)	P_{cal}^{V} (Pa)	Ecart Relatif Absolu (%)
0.8964	1189400	1200379	0.9
0.8395	1257400	1273720	1.3
0.7809	1334300	1356656	1.7
0.7073	1440400	1471935	2.2
0.6439	1542900	1580609	2.4
0.6005	1619900	1658838	2.4
0.5513	1710500	1749082	2.3
0.4969	1815000	1846443	1.7
0.4562	1885600	1913694	1.5
0.4122	1964700	1977009	0.6
0.3416	2067700	2050358	0.8
0.2826	2109400	2080760	1.4
0.1585	2103300	2058348	2.1
0.1164	2069100	2029838	1.9
0.091	2046000	2049472	0.2

2.8.2 Validations des calculs de propriétés de transport

Les paragraphes suivants présentent les résultats des calculs de viscosité et de conductivité de quelques fluides. Les comparaisons sont faites par rapport aux données du NIST.

Pour illustrer les deux variantes de la méthode TRAPP, nous présenterons les résultats pour l'isopentane et le R245fa.

Nous nous intéresserons également à un exemple de mélange R245fa/Isopentane.

2.8.2.1 L'isopentane

Les calculs réalisés pour l'isopentane sont faits en utilisant comme fluide de référence le propane. Les termes en phase vapeur sont relativement précis. La Figure 2.23 et la Figure 2.24 présentent les écarts de la viscosité et de la conductivité thermique de la phase vapeur. Les déviations de viscosité sont faibles, de l'ordre de 1 % à 2 % (Figure 2.23). La conductivité thermique vapeur présente un écart de l'ordre 5 % (Figure 2.24). Dans les calculs de propriétés de transport de la phase vapeur, nous remarquons que le terme idéal représentant un gaz dilué est prépondérant devant le terme résiduel.

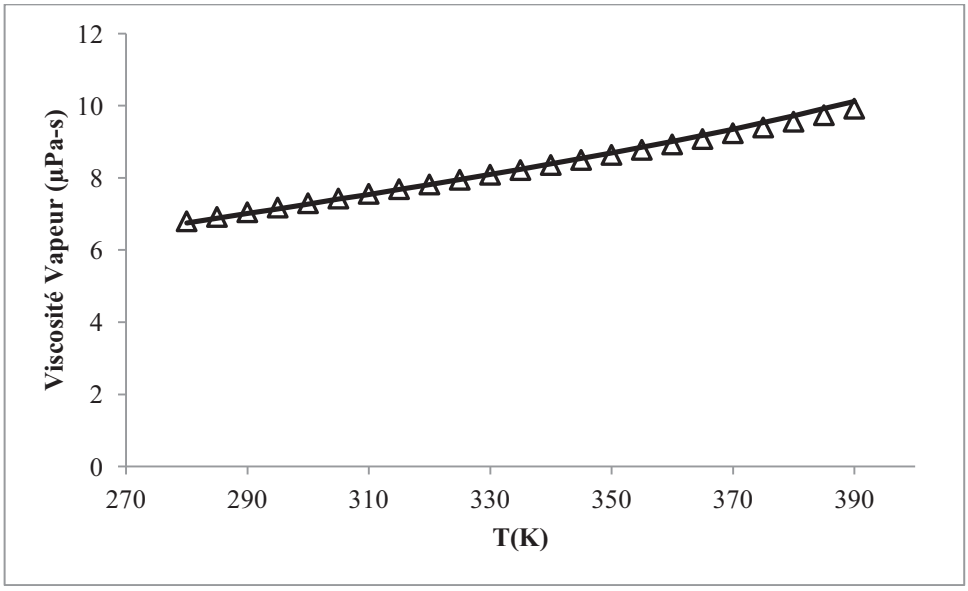


Figure 2.23 Résultats de calculs de la viscosité en phase vapeur pour l'isopentane

△ données expérimentales —— résultats des calculs

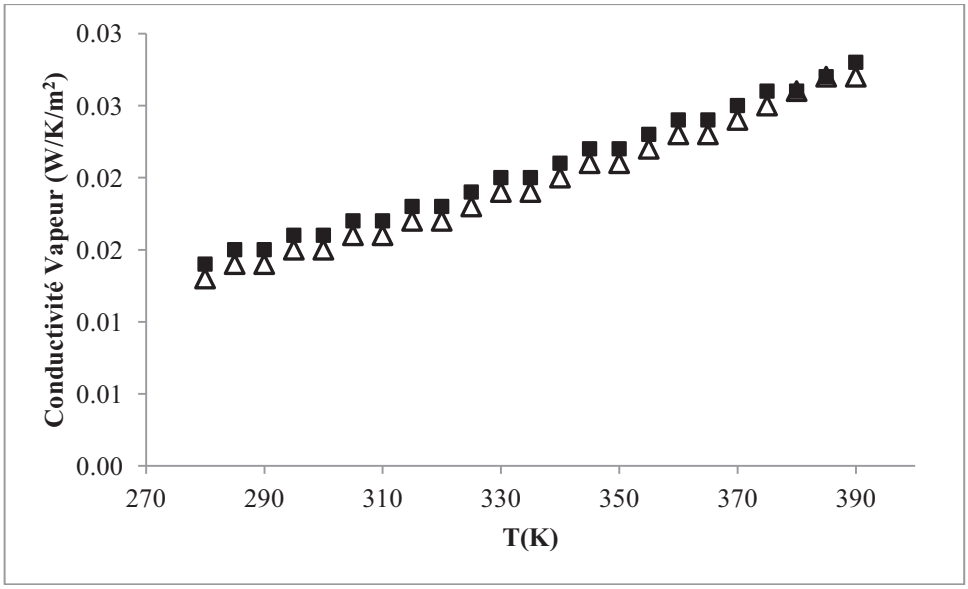


Figure 2.24 Résultats de calculs de la conductivité thermique en phase vapeur pour l'isopentane

△ Données expérimentales ■ Résultats calculés

En revanche, nous observons que les propriétés de transport de la phase liquide sont moins bien estimées. La Figure 2.25 et la Figure 2.26 présentent les résultats de calculs pour la phase liquide. En effet, le terme résiduel, qui représente les interactions moléculaires et qui dépend de la température et du volume spécifique du fluide, a un poids plus important dans ces calculs. Par conséquent, ces incertitudes observées viennent notamment de la propagation de la déviation du volume spécifique liquide calculé.

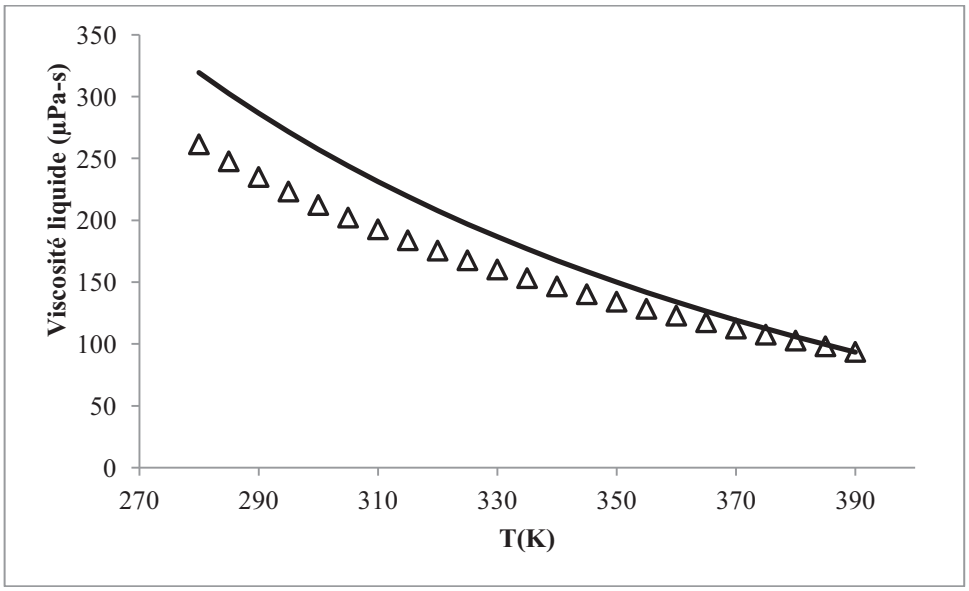


Figure 2.25 Résultats de calculs de la viscosité en phase liquide pour l'isopentane

△ données expérimentales —— résultats des calculs

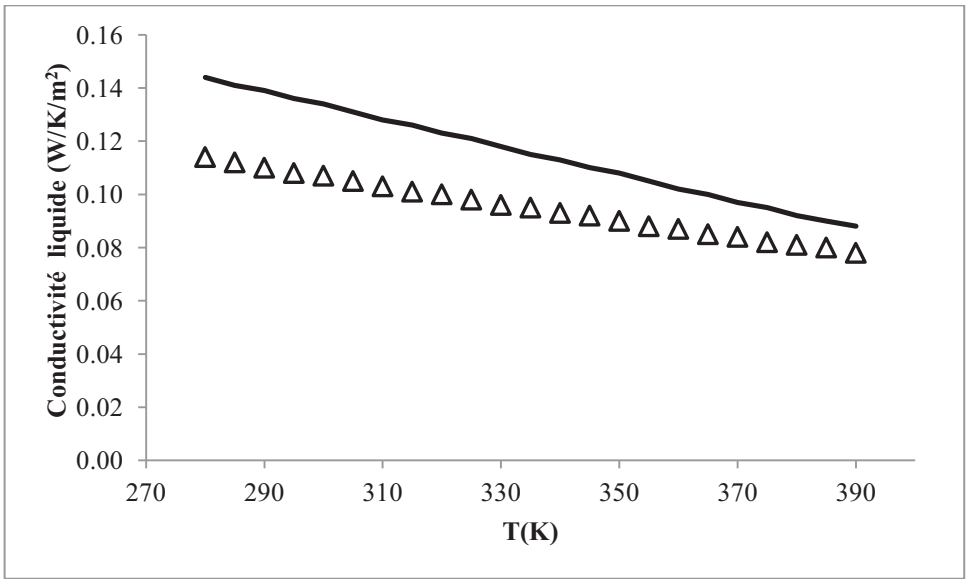


Figure 2.26 Résultats de calculs de la conductivité thermique en phase liquide pour l'isopentane

△ données expérimentales —— résultats des calculs

Nous avons évalué cette propagation d'erreurs. La Figure 2.27 présente le rapport des incertitudes de la viscosité par rapport à celles du volume spécifique.

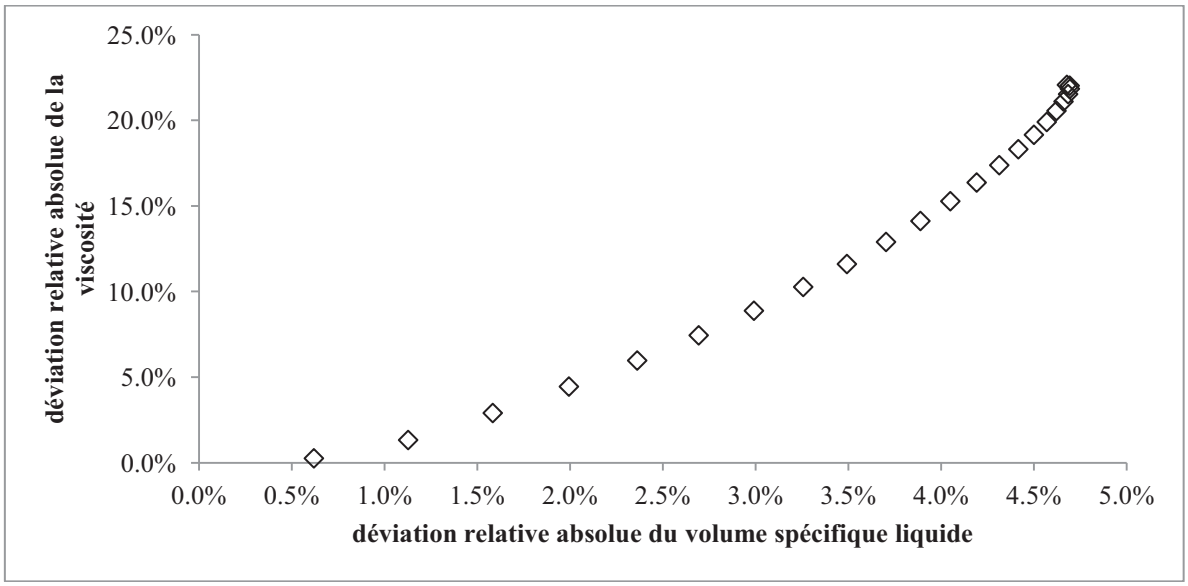


Figure 2.27 Rapport de la déviation de la viscosité liquide sur la déviation volume spécifique

L'isopentane est un fluide bien connu. Pour améliorer la représentation des propriétés de transport en phase liquide, nous pouvons introduire les coefficients de correction ajustés pour le modèle PR :

$$k_L^{visco} = 1.99 - 3.86\,T_r + 3.21\,T_r^2 - \frac{0.0029}{1-T_r} \qquad (2.120)$$

$$k_L^{condT} = 1.28 - 1.67\,T_r + 1.41\,T_r^2 + \frac{0.0024}{1-T_r} \qquad (2.121)$$

Les écarts sont inférieurs à 1 % après les corrections. (Figure 2.28 et Figure 2.29)

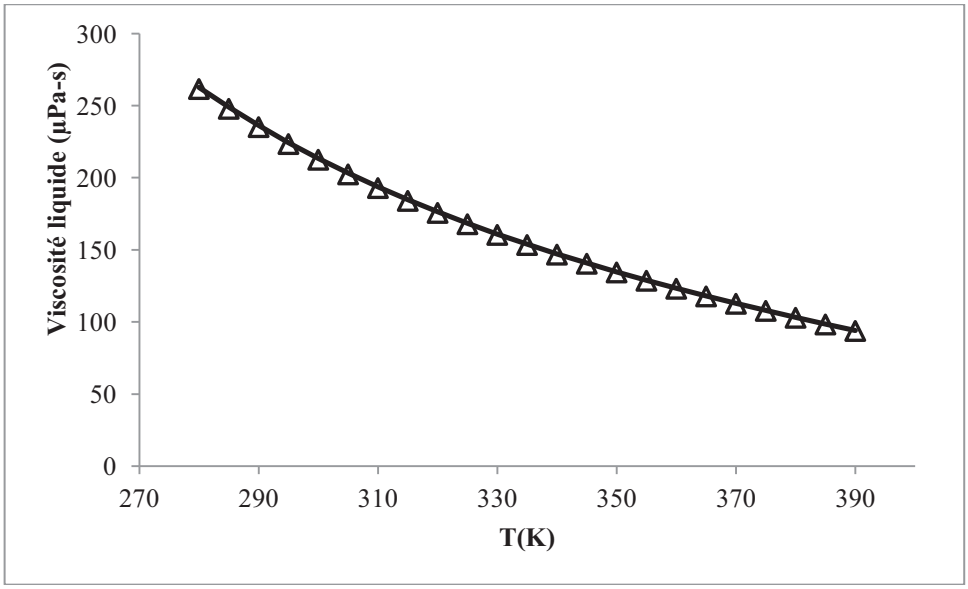


Figure 2.28 Résultats de calculs de la viscosité en phase liquide pour l'isopentane après les corrections

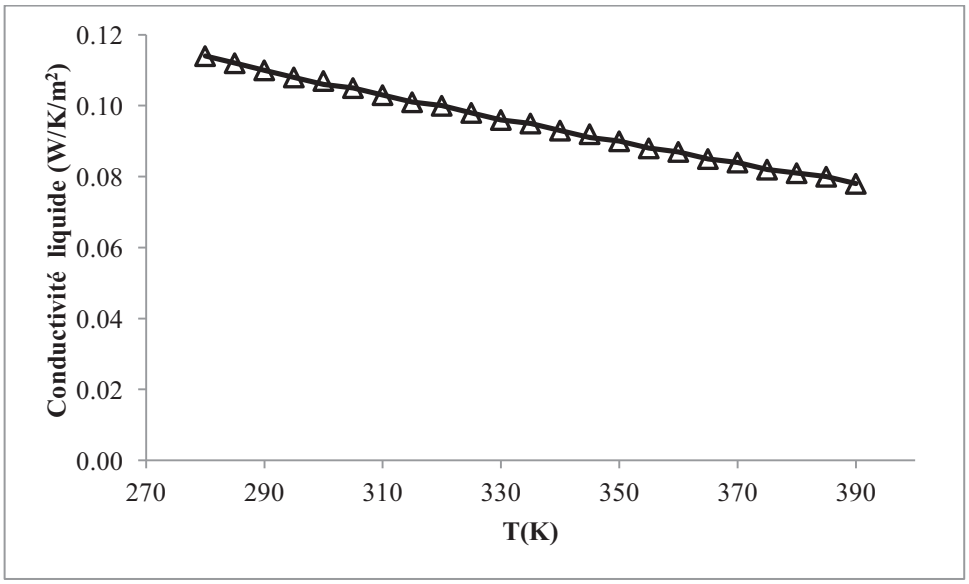


Figure 2.29 Résultats de calculs de la conductivité thermique en phase liquide pour l'isopentane après les corrections

Δ données expérimentales —— résultats des calculs

2.8.2.2 Le R245fa

Les calculs pour le R245fa sont réalisés en utilisant comme fluide de référence le R134a. La Figure 2.30 et Figure 2.31 présentent les déviations de la viscosité et de la conductivité thermique de la phase vapeur. La Figure 2.32 et Figure 2.33 présentent la déviation des propriétés de la phase liquide. Nous observons la même tendance générale que pour l'isopentane : les calculs de la phase liquide sont moins précis. Globalement, nous obtenons des déviations plus élevées que celle de l'isopentane : de l'ordre de 10 - 15 % pour la phase vapeur (Figure 2.30 et Figure 2.31) et de l'ordre de 15 – 20 % pour la phase liquide (Figure 2.32 et Figure 2.33).

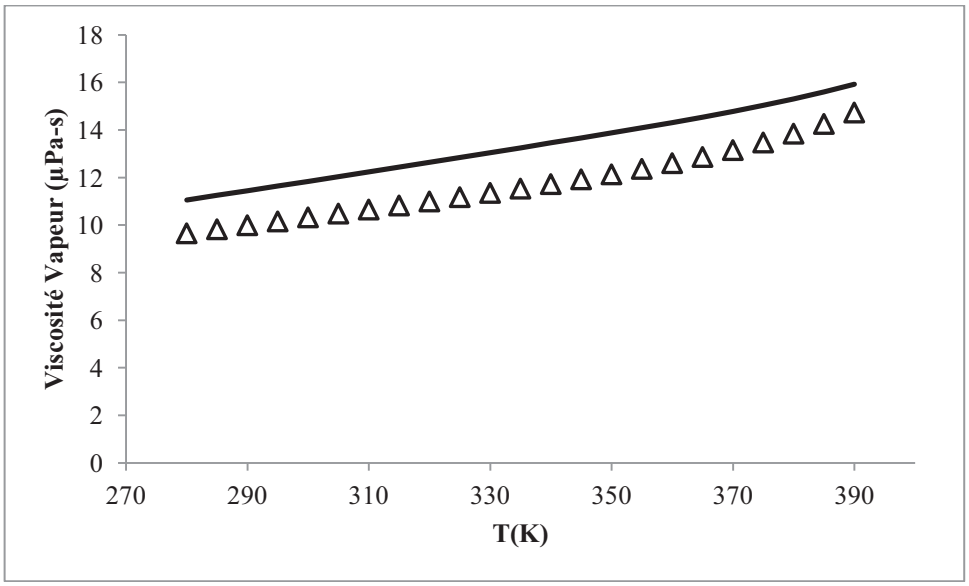


Figure 2.30 Résultats de calculs de la viscosité en phase vapeur pour le R245fa

Δ données expérimentales —— résultats des calculs

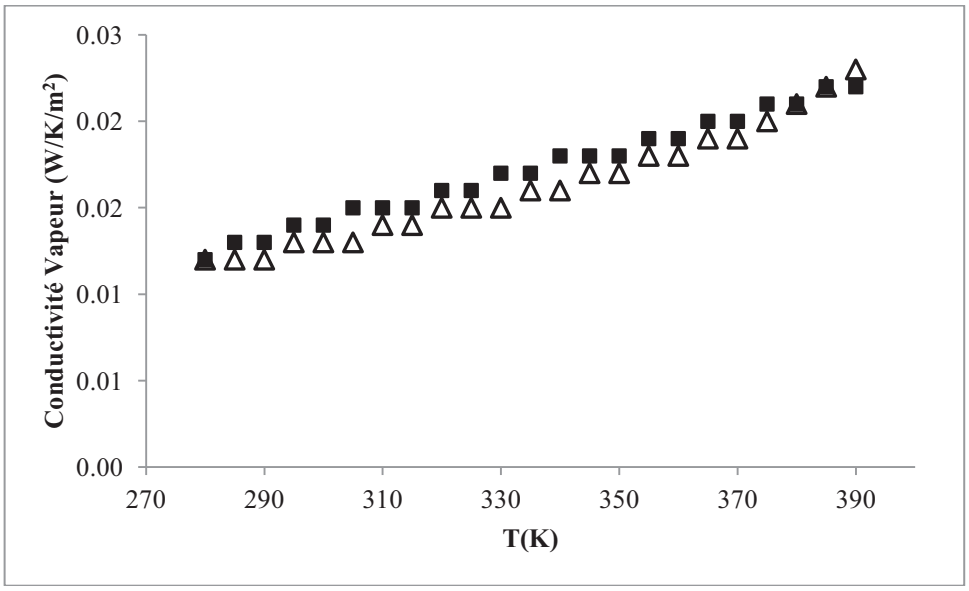


Figure 2.31 Résultats de calculs de la conductivité thermique en phase vapeur pour le R245fa

△Données expérimentales ■Résultats calculés

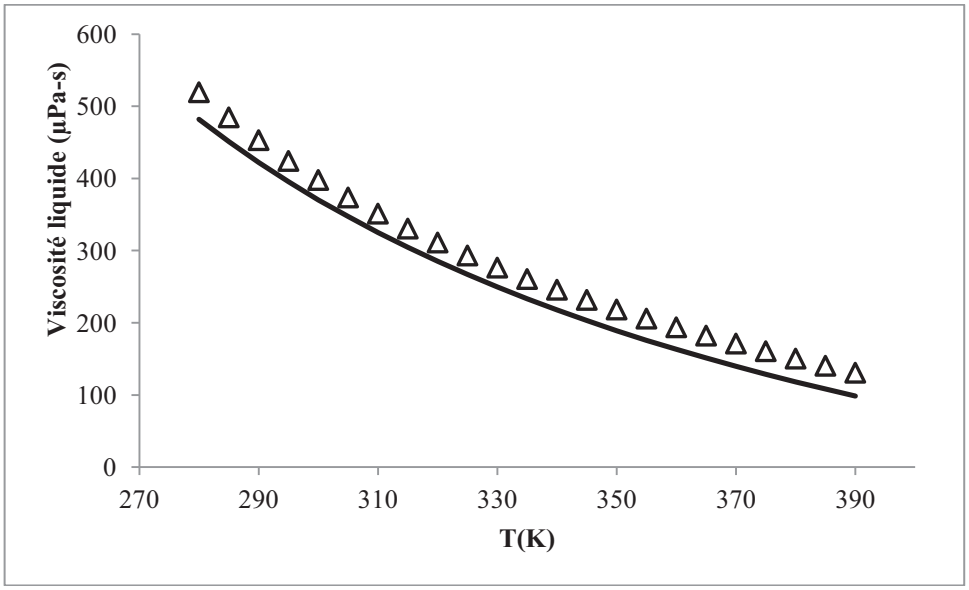


Figure 2.32 Résultats de calculs de la viscosité en phase liquide pour le R245fa

△ données expérimentales ——résultats des calculs

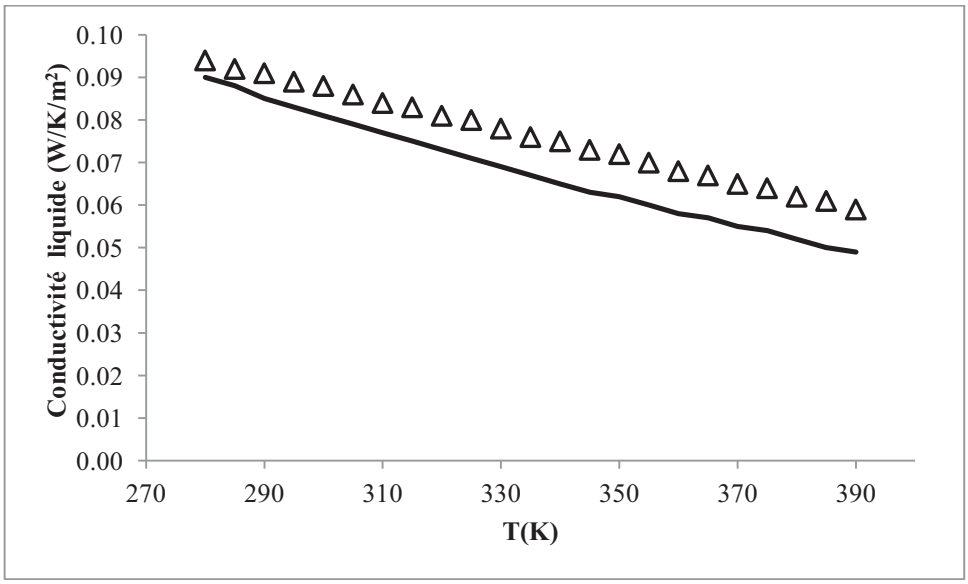


Figure 2.33 Résultats de calculs de la conductivité thermique en phase liquide pour le R245fa

De la même manière que pour l'isopentane, nous pouvons améliorer ces résultats en introduisant les corrélations de correction dont les paramètres sont présentés dans le Tableau 2.24. Les écarts entre les résultats calculés et les données sont inférieurs à 1 %.

Tableau 2.24 Paramètres des corrélations de correction pour les propriétés de transport du R245fa (Modèle PR)

Paramètres de correction	A	B	C	D
viscosité liquide	3.09	-5.87	4.24	0.0057
viscosité vapeur	1.06	-0.45	0.19	0.0104
conductivité thermique liquide	-0.51	3.72	-2.14	0.0102
conductivité thermique vapeur	2.07	-3.04	1.92	0.0114

2.8.2.3 Le mélange R245fa/Isopentane

Pour illustrer la prédiction des propriétés de transport d'un mélange, nous avons choisi de faire un test avec le mélange R245fa/Isopentane de fraction molaire 0.9/0.1. Le fluide de référence dans ces calculs est le R134a.

Les résultats calculés sont comparés aux données du NIST. Sans correction, nous retrouvons des incertitudes similaires à celles obtenues pour le R245fa. Les écarts des propriétés de transport sont inférieurs à 15 % pour la phase vapeur (Figure 2.34 et Figure 2.35) et de l'ordre 20 - 25 % pour la phase liquide (Figure 2.36 et Figure 2.37).

Nous pouvons également améliorer ces résultats en introduisant les corrélations de correction dont les paramètres sont présentés dans le Tableau 2.25. Les écarts entre les résultats calculés et les données sont inférieurs à 1 %.

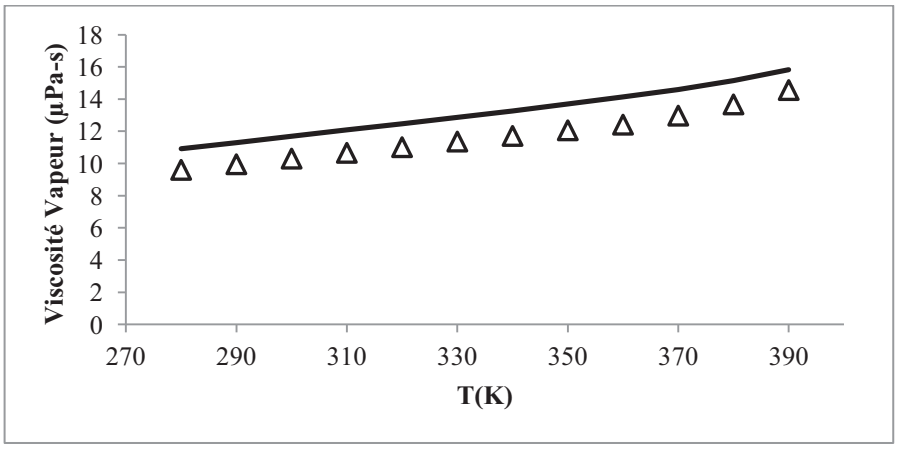


Figure 2.34 Résultats de calculs de la viscosité en phase vapeur pour le mélange R245fa/isopentane △ données expérimentales —— résultats des calculs

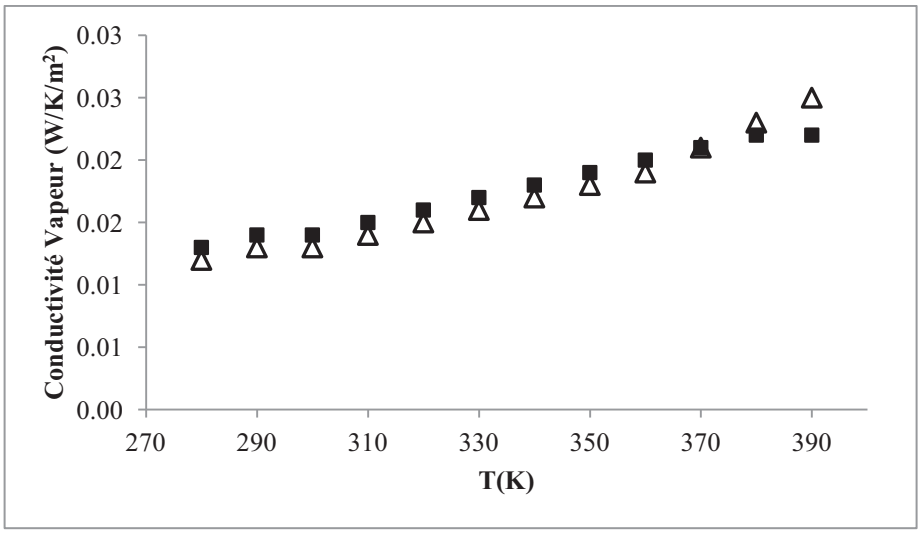


Figure 2.35 Résultats de calculs de la conductivité thermique en phase vapeur pour le mélange R245fa/isopentane △Données expérimentales ■Résultats calculés

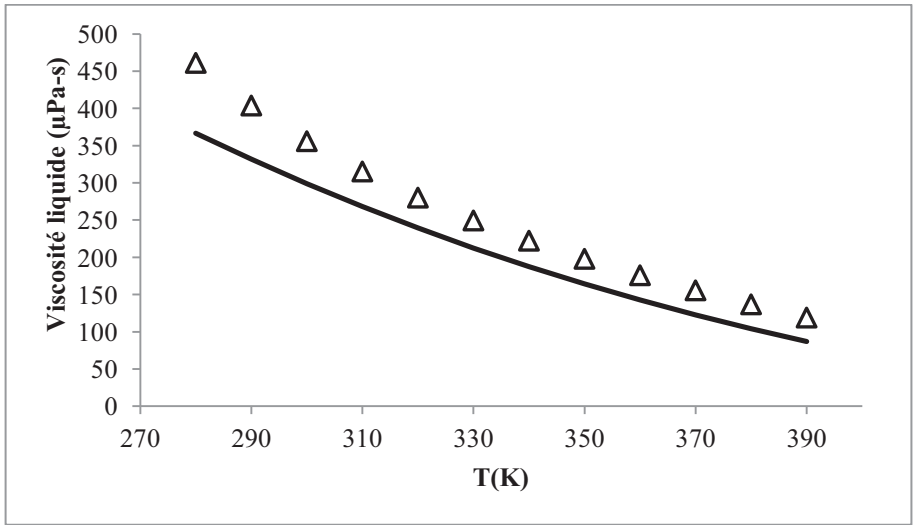


Figure 2.36 Résultats de calculs de la viscosité en phase liquide pour le R245fa avec : △ données expérimentales —— résultats des calculs

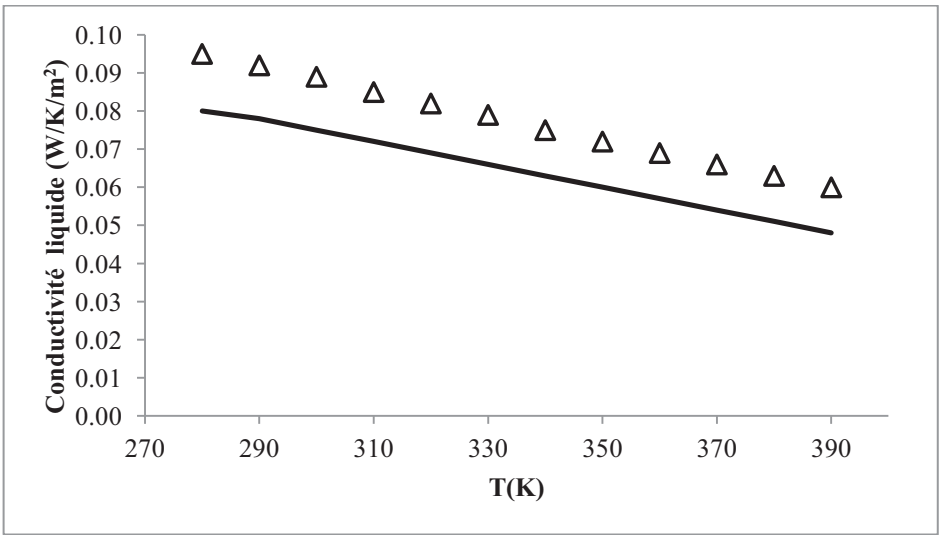


Figure 2.37 Résultats de calculs de la conductivité thermique en phase liquide pour le R245fa

Tableau 2.25 Paramètres des corrélations de correction pour les propriétés de transport du mélange R245fa/isopentane (Modèle PR)

Paramètres de correction	A	B	C	D
viscosité liquide	1.38	-0.69	0.24	0.0046
viscosité vapeur	6.99	-13.91	7.95	-0.0043
conductivité thermique liquide	-12.40	19.11	-7.04	-0.0937
conductivité thermique vapeur	1.21	-0.66	0.32	0.0000

2.9 Conclusion

Afin d'assurer la bonne performance énergétique et la compacité des composants du cycle bi-étagé, il est indispensable de bien choisir les fluides de travail. Nous avons établi un nombre de critères de choix adaptés à l'application du cycle bi-étagée et suivant ces critères et à partir des études bibliographiques sur les ORC, nous avons choisi un ensemble de candidats à tester. Les fluides sélectionnés appartiennent aux différentes familles : les HC, les HFC, les HFO.

La connaissance des propriétés thermophysiques et des propriétés de transport des fluides sélectionnés sont indispensables aux calculs de performances du cycle et aux calculs de dimensionnement. Pour cela, nous avons implémenté des modèles prédictifs et semi-prédictifs et créé un serveur de propriétés de fluides (nommé CTPlib) basé sur les équations d'état du type cubique et la méthode TRAPP pour les propriétés de transport.

Nous avons validé les résultats des calculs du serveur de propriétés en comparant nos résultats avec les données du NIST et des données mesurées au CTP de Mines Paristech.

Nous avons choisi ces modèles pour leurs simplicités et pour le fait qu'ils peuvent représenter tout type de mélange. Cependant les équations d'état cubiques sont moins précises pour l'estimation des masses volumiques, particulièrement pour la phase liquide. En effet, les équations d'état cubiques ne permettent pas de simuler les propriétés des fluides fortement associatifs ou polaires comme l'eau ou l'ammoniac.

Les incertitudes sur les volumes spécifiques liquides induisent également une propagation d'erreur sur les propriétés de transport qui peut être assez conséquente. Cela introduit donc une incertitude supplémentaire lors du dimensionnement des échangeurs, que nous traiterons dans le chapitre 3. Pour y remédier, nous avons introduit une correction numérique applicable uniquement pour les fluides connus pour lesquels nous disposons de données expérimentales. Les paramètres de la fonction de correction dépendent du modèle de fluide choisi. Cependant nous devons nous rappeler que notre objectif est de construire un outil prédictif afin de tester de nouveaux fluides (corps purs, mélanges) pour lesquels peu de données expérimentales sont disponibles. C'est l'exemple du R1233zd(E) que nous avons testé. En effet, nous ne travaillons pas avec les mêmes objectifs : nous ne sommes pas positionnés pour comparer la précision de notre outil aux logiciels existants avec des équations dédiées tels que RefProp. Si un fluide est bien connu et que son équation dédiée existe, il est bien sûr judicieux de travailler avec ces équations. En revanche, si un fluide est nouveau ou qu'il n'est pas encore répertorié dans les bibliothèques existantes, les méthodes implémentées dans CTPlib fournissent une solution alternative assez précise, rapide et suffisamment fiable pour une première évaluation.

La Figure 2.38 résume les démarches à adopter selon la connaissance sur le fluide à tester

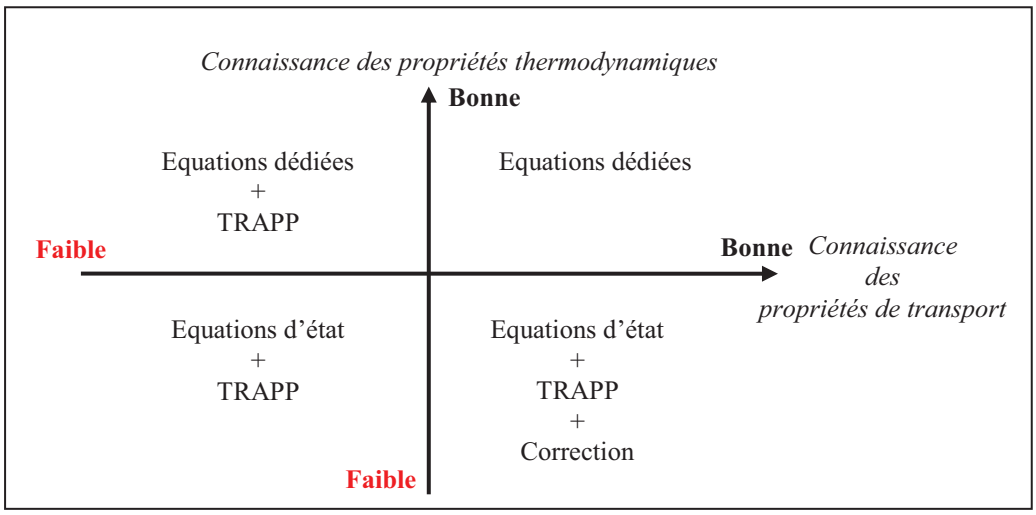


Figure 2.38 Connaissance des fluides et les démarches correspondantes

Pour rendre CTPlib encore plus prédictif, les méthodes de contribution de groupes pourront être par la suite implémentées dans CTPlib afin d'estimer les données d'entrée des équations d'état : le point critique et le facteur acentrique pourraient alors être calculés à partir de leur formulation chimique.

Afin de rendre l'application du CTPlib encore plus large, notamment capable de réaliser les calculs pour les fluides fortement associatifs, il est possible d'implémenter des modèles qui prennent en compte la nature des interactions moléculaires comme le modèle CPA (Cubic Plus Association) (Kontogeorgis, et al. 1996) ou le PC-Saft (Chapman, et al. 1989) avec terme polaire par exemple. Cela permet pour certains types de fluides associatifs et en mélange d'améliorer le caractère prédictif des équations d'état ($kij = 0$) et de mieux calculer les masses volumiques. Nous avons déjà démarré des travaux dans cette direction.

Ceci étant dit, la version actuelle de CTPlib nous permet d'obtenir les propriétés thermophysiques des fluides voulues. Pour réaliser les simulations de cycles, comparer les

performances des fluides et effectuer le dimensionnement des composants, la bibliothèque CTPlib a été raccordée au progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim.

Chapitre 3 Modélisation du cycle bi-étagé

Ce chapitre a pour objectif de présenter les modèles utilisés pour la simulation du cycle bi-étagé et le dimensionnement de ses composants. Nous allons définir d'abord le point de fonctionnement nominal du cycle via un modèle de cycle sous Thermoptim. Ce point de « design » dépend principalement du climat du site de production considéré. Ceci permettra de comparer les performances des différents fluides de travail. Les plus performants parmi ces derniers seront choisis pour les études de dimensionnement de composants. Au final, nous étudierons la performance du cycle en régime non nominal.

En pratique, nous décrirons d'abord l'ensemble des méthodes appliquées aux différentes étapes de modélisations du cycle bi-étagé pour évaluer la performance des différents fluides. Les résultats obtenus seront présentés dans un second temps.

3.1 Modèles de cycle bi-étagé au point de fonctionnement nominal

Les paramètres du cycle bi-étagé ont été présentés dans le chapitre 1. Nous reprenons le schéma du cycle dans la Figure 3.1. Le cycle simplifié est constitué de :

- Deux turbines à vapeur
  - Une turbine HP
  - Une turbine BP
- Une turbine ORC
- Trois pompes à eau
- Une pompe ORC
- Cinq échangeurs de chaleur
  - Un générateur de vapeur
  - Un réchauffeur
  - Un économiseur
  - Un condenseur-bouilleur
  - Un aérocondenseur

Pour évaluer la performance des fluides de travail dans le cycle, il est nécessaire de modéliser les différentes transformations. Ce sous-chapitre explicite les équations mises en jeu.

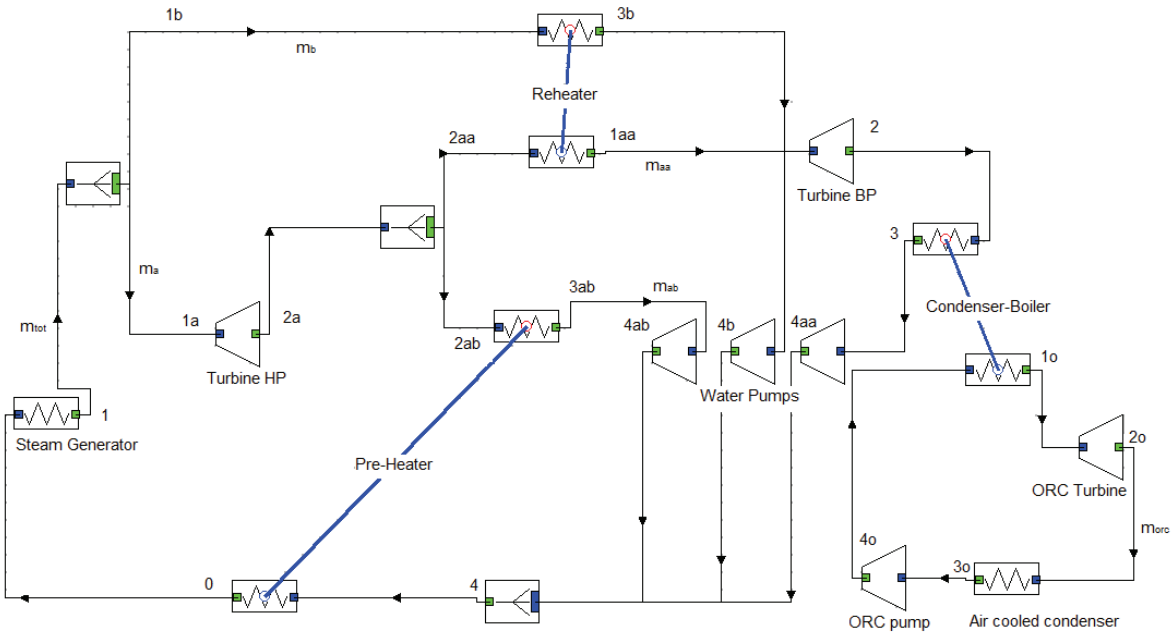


Figure 3.1 Schéma du cycle bi-étagé adapté aux conditions Superphénix sous Thermoptim™

3.1.1 Transformation dans un système ouvert

Les différents composants du cycle sont des systèmes ouverts qui échangent de la matière en permanence. Nous schématisons un système ouvert dans la Figure 3.2. L'échange entre le système et le milieu extérieur est caractérisé par la puissance mécanique τ et de la puissance thermique Q. Pour appliquer le premier principe, il faut d'abord définir un système fermé F à partir du système ouvert S. Entre les instants t et t+Δt, le système fermé F est défini par :

- A l'instant t, le contenu du système S et la quantité de matière qui va entrer dans le système S jusqu'à l'instant t+Δt
- A l'instant t+Δt, le contenu du système S et la quantité de matière sortie depuis l'instant t

La variation de l'énergie interne du système F entre t et t+Δt est :

$$\boldsymbol{\Delta U_F = \Delta U_S + U_{sortie} - U_{entrée}} \quad (3.1)$$

La variation de l'énergie cinétique du système F entre t et t+Δt est :

$$\Delta K_F = \Delta K_S + K_{sortie} - K_{entrée} \quad (3.2)$$

La pression en entrée exerce un travail $P_{entrée}V_{entrée}$ sur le système F. La pression en sortie exerce un travail $-P_{sortie}V_{sortie}$. Si l'entrée et la sortie n'ont pas la même altitude, la force de pesanteur exerce un travail supplémentaire.

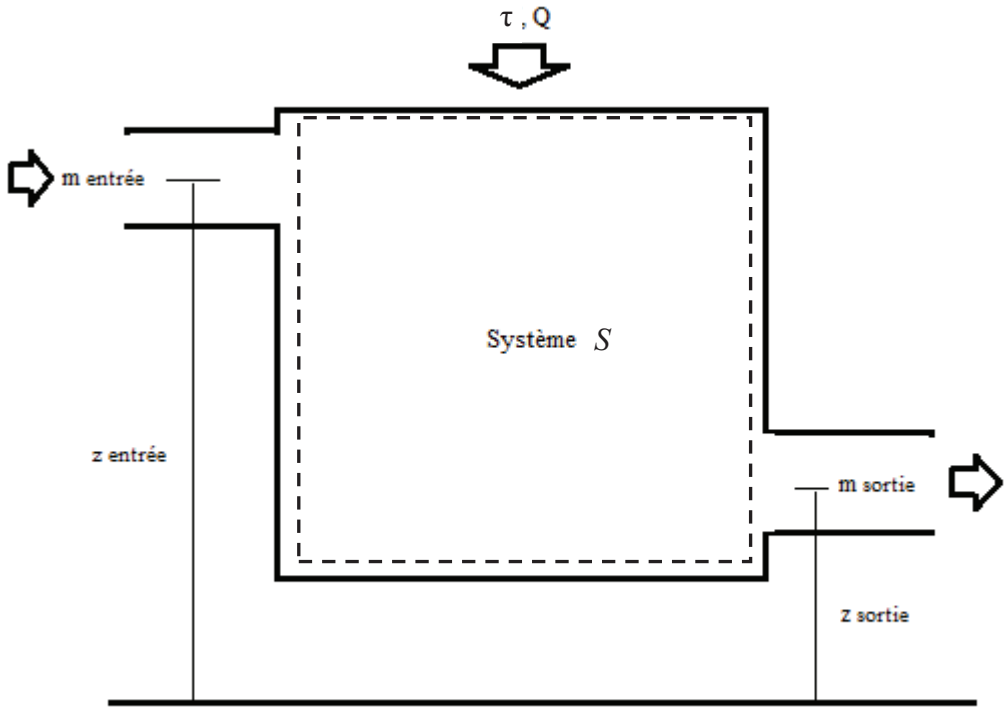


Figure 3.2 Schéma d'un système ouvert

Pour le système F, le premier principe de la thermodynamique s'écrit :

$$\Delta U_S + U_{sortie} - U_{entrée} + \Delta K_S + K_{sortie} - K_{entrée} = \tau\,\Delta t + Q\,\Delta t + P_{entrée}V_{entrée} - P_{sortie}V_{sortie} + (m_{entrée}z_{entrée} - m_{sortie}\,z_{sortie})g\Delta t \quad (3.3)$$

m est le débit massique en kg/s. z est l'altitude en m.

Comme $H = U + PV$, nous pouvons mettre l'équation sous la forme enthalpique :

$$\Delta U_S + \Delta K_S = H_{entrée} - H_{sortie} + K_{entrée} - K_{sortie} + (\tau + Q + m_{entrée}gz_{entrée} - m_{sortie}gz_{sortie})\Delta t \quad (3.4)$$

En faisant tendre Δt vers 0, nous obtenons la forme différentielle de l'équation :

$$\frac{dU_S}{dt} + \frac{dK_S}{dt} = m_{entrée}h_{entrée} - m_{sortie}h_{sortie} + m_{sortie}\frac{v_{sortie}^2}{2} - m_{entrée}\frac{v_{entrée}^2}{2} + \tau + Q + m_{entrée}gz_{entrée} - m_{sortie}gz_{sortie} \quad (3.5)$$

h est l'enthalpie massique en kJ/kg, v est la vitesse en m/s.

En régime permanent, les débits massiques en entrée et en sortie sont égaux. Soit m le débit massique du système, nous avons alors :

$$m\left(h_{sortie} - h_{entrée}\right) + m\left(\frac{v_{sortie}^2}{2} - \frac{v_{entrée}^2}{2}\right) + m\,g\,(z_{sortie} - z_{entrée}) = \tau + Q \quad (3.6)$$

En posant $\Delta h = h_{sortie} - h_{entrée}$, $\Delta k = \frac{v_{sortie}^2}{2} - \frac{v_{entrée}^2}{2}$ et $\Delta z = z_{sortie} - z_{entrée}$

$$\boldsymbol{m\,\Delta h + m\,\Delta k + m\,g\,\Delta z = \tau + Q} \quad (3.7)$$

m : le débit massique du système, en kg/s
Δh : la différence d'enthalpie massique en entrée et en sortie, en kJ/kg
Δk : la différence d'énergie cinétique massique en entrée et en sortie, en kJ/kg
$g\Delta z$: différence d'énergie potentielle massique, en kJ/kg
τ : puissance mécanique reçu par le système, en kW
Q : puissance thermique reçue par le système, en kW

Pour la plupart des machines thermiques, le terme $m\,g\Delta z$ est négligeable. La variation d'énergie cinétique reste généralement faible, sauf dans certains cas spécifiques tels les derniers étages d'une turbine où le volume du gaz devient très grand ainsi que la vitesse d'échappement.

Dans ces conditions particulières, la relation se simplifie. La variation de l'enthalpie est égale à la somme de la chaleur et du travail reçus.

$$m\,\Delta h = \tau + Q \quad (3.8)$$

3.1.2 Détente dans une turbine

Détendre la vapeur de fluide dans une turbine, c'est transformer l'énergie cinétique du fluide en énergie mécanique en faisant tourner le rotor. Durant cette opération, la pression du gaz

diminue. La pression d'aspiration (point a) de la vapeur P_a à l'entrée de la machine est réduite à la pression de refoulement (point r) P_r à la sortie.

L'état initial du fluide à l'entrée de la machine est connu. En fin de détente, seule la pression de refoulement est connue. Toutes les autres variables thermodynamiques relatives à l'état final du fluide à la sortie dépendent des échanges thermiques et des caractéristiques de la machine.

La transformation mécanique dans la turbine est une opération irréversible : en effet, les frottements et les chocs entrainent une génération d'entropie. Pour prendre en compte cette irréversibilité, nous introduisons le rendement isentropique de la machine, défini comme le rapport de la variation d'enthalpie de la transformation réelle sur celle de la transformation réversible.

$$\eta_{is} = \frac{h_r - h_a}{h_{is} - h_a} \tag{3.9}$$

La transformation réversible est représentée dans un diagramme (T,s) (Figure 3.3) par le segment en pointillé (a-is) et la transformation réelle est représentée par le segment (a-r). La valeur du rendement isentropique de la machine est très souvent déterminée expérimentalement. Les turbines à vapeur modernes ont un rendement typique de l'ordre de 0.9.

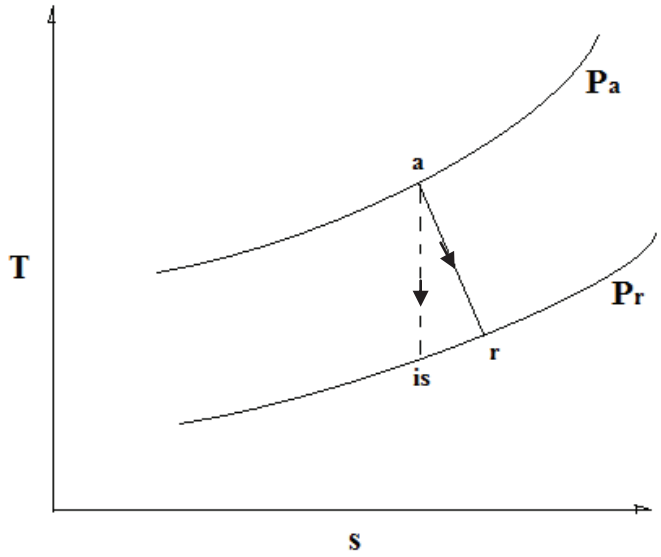


Figure 3.3 Représentation d'une détente réelle et idéale dans un diagramme (T,s)

Etant donné que le fluide transite dans la turbine pendant une durée relativement faible, l'échange thermique Q vers le milieu extérieur reste négligeable devant le travail récupéré. Par conséquent, le travail récupéré dans la turbine est égal à la variation d'enthalpie entre l'entrée et la sortie.

$$\tau = m\,\Delta h \tag{3.10}$$

Cette formulation est valable sauf pour les détentes à très basse pression où la perte cinétique doit être prise en compte. En effet, le changement de volume spécifique de la vapeur peut être très conséquent à faible niveau de pression. Nous pouvons prendre l'exemple de la variation

du volume de la vapeur d'eau à saturation entre 20 et 0.04 bar. Cette dernière valeur est représentative de la pression de sortie d'une turbine BP dans un cycle secondaire classique. Le volume spécifique de la vapeur passe de 0.10 m^3/kg à 34.79 m^3/kg, soit une multiplication par un facteur d'environ 350. Nous observons une augmentation très conséquente de la vitesse du fluide à la sortie de la turbine par rapport à l'entrée. Nous prenons en compte cette perte cinétique par $\Delta k = \frac{C_r^2}{2} - \frac{C_a^2}{2}$. C_r, C_a sont respectivement la vitesse du fluide à la sortie et à l'entrée de la turbine. Si la vitesse de refoulement est grande devant la vitesse d'aspiration, nous pouvons écrire $\Delta k = \frac{C_r^2}{2}$. La perte de puissance cinétique s'écrit $\Delta K = m\, \Delta k$.

Dans le cadre des simulations pour le cycle bi-étagé, les équations mises en jeu pour les trois turbines considérées sont :

Turbine HP :

$$\tau_{THP} = m\, \eta_{THP} \left(h_{2a}^{isentropic} - h_{1a}\right) \quad (3.11)$$

Turbine BP :

$$\tau_{TBP} = m\, \eta_{TBP} \left(h_{2}^{isentropic} - h_{1aa}\right) \quad (3.12)$$

Turbine ORC:

$$\tau_{TO} = m_O\, \eta_{TO} \left(h_{2o}^{isentropic} - h_{1o}\right) - \Delta K \quad (3.13)$$

Remarque : Lorsque nous effectuerons les comparaisons de performance par rapport à un cycle classique à vapeur d'eau dans le paragraphe 3.4.6, la perte cinétique du cycle classique sera prise en compte à la sortie de la turbine BP.

3.1.3 Compression liquide dans une pompe

La pompe permet de réaliser l'opération de compression de liquide dans un cycle de Rankine. De manière similaire à la détente dans une turbine, nous pouvons écrire la consommation d'énergie dans une pompe en fonction de la variation d'enthalpie. En effet, l'échange de chaleur est négligeable en raison de la faible surface d'échange et du court séjour du fluide de travail. La variation d'énergie cinétique reste également faible.

Nous introduisons le rendement isentropique de la pompe pour représenter les irréversibilités induites par la transformation mécanique (Figure 3.4).

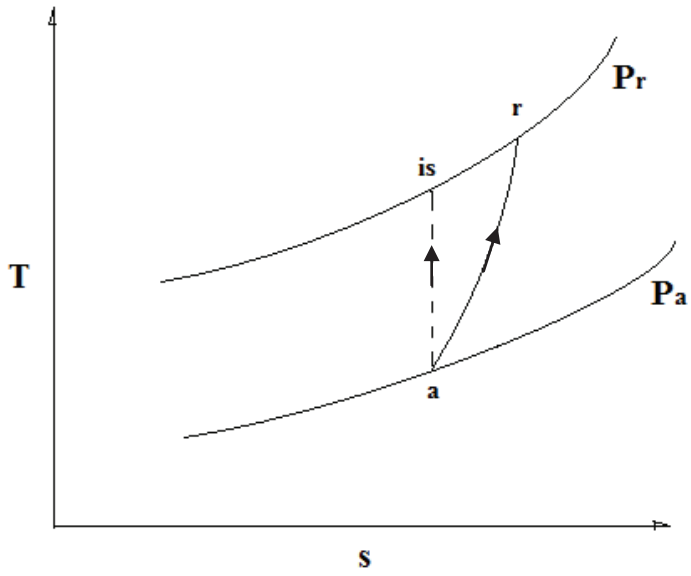


Figure 3.4 Représentation d'une compression réelle et idéale dans un diagramme (T,s)

Le rendement isentropique de la machine est défini comme le rapport de la variation de l'enthalpie de la transformation réversible sur la variation de la transformation réelle.

$$\eta_{is} = \frac{h_{is} - h_a}{h_r - h_a} \tag{3.14}$$

Dans le cadre des simulations pour le cycle bi-étagé et tenant compte des différentes hypothèses, les équations bilans applicables pour les pompes sont :

Pour les pompes du cycle de Rankine à vapeur

$$\tau_{P1} = \frac{m_{aa}}{\eta_P}(h_{4aa}^{isentropic} - h_3) \tag{3.15}$$

$$\tau_{P2} = \frac{m_{ab}}{\eta_P}(h_{4ab}^{isentropic} - h_{3ab}) \tag{3.16}$$

$$\tau_{P3} = \frac{m_b}{\eta_P}(h_{4b}^{isentropic} - h_{3b}) \tag{3.17}$$

Pour la pompe de l'ORC à basse température

$$\tau_{PO} = \frac{m_O}{\eta_{PO}}(h_{4o}^{isentropic} - h_{3o}) \tag{3.18}$$

3.1.4 Echanges de chaleur

L'échange de chaleur entre deux fluides nécessite une surface d'échange proportionnelle à la puissance à transférer. En absence de paroi mobile, le travail reçu dans un échangeur de chaleur est nul. La puissance échangée est donc égale à la variation d'enthalpie.

$$Q = m\,\Delta h \tag{3.19}$$

Dans le cadre des simulations pour le cycle bi-étagé, les équations appliquées pour les échangeurs sont :

Pour le condenseur bouilleur

$$Q_{CB} = m(h_3 - h_2) \ = m_O(h_{1o} - h_{4o}) \quad (3.20)$$

Pour l'aérocondenseur

$$Q_{ACC} = m_O(h_{3o} - h_{2o}) \quad (3.21)$$

Pour l'économiseur

$$Q_{preheater} = m_{tot}(h_0 - h_4) = m_{ab}(h_{2ab} - h_{3ab}) \quad (3.22)$$

Pour le resurchauffeur

$$Q_{reheater} = m_{aa}(h_{1aa} - h_{2aa}) = m_b(h_{1b} - h_{3b}) \quad (3.23)$$

Pour le générateur de vapeur / la chaudière

$$\mathrm{Q_{SG}} = \mathrm{m_{tot}}\,(\mathrm{h_1} - \mathrm{h_0}) \quad (3.24)$$

3.1.5 Rendement du cycle

Les équations 3.11-3.24 permettent de réaliser le bilan énergétique du système bi-étagé considéré. Connaissant les caractéristiques du cycle Super Phénix et les propriétés thermophysiques du fluide, nous pouvons évaluer la performance du cycle fonctionnant avec différents fluides de travail. Le rendement du cycle est calculé par la relation 3.25 :

$$\eta_{TH} = \frac{\tau_{P1}+\tau_{P2}+\tau_{P3}+\tau_{THP}+\tau_{TBP}+\tau_{PO}+\tau_{TO}}{Q_{SG}} \quad (3.25)$$

Les calculs de performance du cycle permettent de comparer les différents fluides et de choisir ceux qui sont les plus intéressants pour l'application du cycle de production d'électricité bi-étagé. Notons que durant cette première étape, nous ne réalisons pas encore le dimensionnement des composants. Nous ne pouvons pas déterminer la vitesse de la vapeur à la sortie de la turbine et la perte cinétique à la sortie de la turbine à basse pression. Elles interviendront ultérieurement lors de l'évaluation des performances en régime non nominal dans le paragraphe 3.3.

3.2 Dimensionnement des composants additionnels

Mise à part la performance énergétique du système bi-étagé, d'autres paramètres doivent être pris en considération pour l'évaluation de la viabilité du projet. En effet, la taille des divers composants additionnels et leurs coûts respectifs sont d'une importance majeure.

Dans ce paragraphe, nous traiterons le dimensionnement des échangeurs de chaleur du second cycle à basse température :

- l'aéro-condenseur
- le condenseur-bouilleur

Le dimensionnement de la turbine sera expliqué assez brièvement. En effet, contrairement au dimensionnement des échangeurs où les modèles ont été entièrement redéfinis, le dimensionnement des turbines a été réalisé avec un outil existant chez EDF et fourni par le VNIAM (source EDF).

3.2.1 Dimensionnement de l'aérocondenseur

Suite à notre étude sur le choix des échangeurs dans le chapitre 1, nous avons choisi les échangeurs à tubes et ailettes.

3.2.1.1 Spécification de l'échangeur

Du point de vue économique, il est plus intéressant de pouvoir utiliser des tubes standards. Les architectures des modules existants ont été prises en considération. En utilisant des données de configurations existantes, nous faisons l'hypothèse que l'aérocondenseur de notre cycle est composé de modules d'échangeurs à géométrie identique. Cette démarche permet de faciliter la validation de notre modèle d'aérocondenseur par rapport aux données existantes.

Le Tableau 3.1 présente les caractéristiques des échangeurs de type dièdres à tubes et ailettes de la centrale de production de Saltillo au Mexique considérés dans notre étude. En raison de confidentialité, les valeurs ont été retirées. La Figure 3.5 schématise un module sous forme de dièdre, constitué de tubes plats ailetés (tube en acier zingué et ailettes en aluminium).

Tableau 3.1 Caractéristiques géométriques d'un échangeur à tubes et ailettes de la centrale de Saltillo de type dièdre pris en compte dans notre étude (données chiffrées retirées)

longueur d'un module (m)
largeur d'un module (m)
Epaisseur de l'échangeur (m)
nombre de nappes
angle du dièdre (°)
rapport surface ailettée / surface sans ailette (Facteur ailette, F)
dimensions d'une plaque (mm^2)
épaisseur de paroi (mm)

écartement des plaques ailettes (mm)
Nombre de tubes par module
section de passage d'une plaque ($mm^{2)}$
Longueur * hauteur d'ailette (mm)
Nombre d'ailettes au mètre
Epaisseur d'ailette (mm)

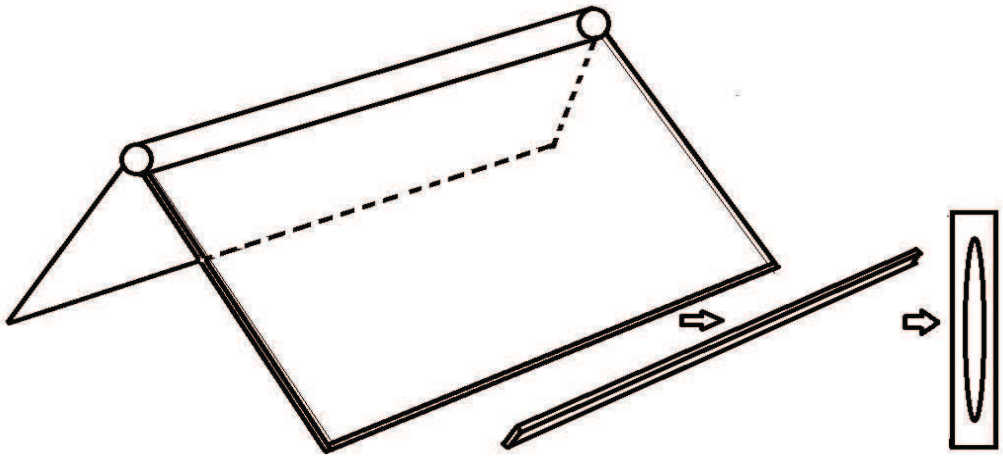


Figure 3.5 Schéma d'un dièdre et des tubes ailetés le composant.

3.2.1.2 Modèle de l'aérocondenseur

Nous distinguons deux cas de figure lors de la conception de l'aérocondenseur en fonction de la nature du fluide de travail choisi :

- Un fluide du type sec présente une désurchauffe puis un palier de condensation ;
- Un fluide du type humide ou isentropique présente uniquement le palier de condensation.

Le dimensionnement de l'aérocondenseur est réalisé en découpant l'échangeur en zones d'échange pour un fluide sec : une zone de désurchauffe et une zone de condensation. En revanche, nous considérerons uniquement la zone de condensation pour un fluide du type humide ou isentropique.

Dans le cadre du cycle bi-étagé, la plupart des fluides de travail choisis sont de type sec. L'ammoniac est le seul fluide sans zone de désurchauffe.

Par conséquent, nous pouvons distinguer deux zones d'échange :

- Un échange gaz-gaz (fluide chaud à la sortie de la turbine – air extérieur)
- Un échange diphasique-gaz (fluide en condensation – air extérieur)

La zone d'échange gaz-gaz est découpée en plusieurs parties pour mieux prendre en compte les variations des propriétés thermophysiques du fluide de travail. La zone d'échange diphasique-gaz est découpée en 4 morceaux dont chacun représente un échange d'énergie

correspondant à une fraction de 25% de la chaleur latente du fluide à la pression de condensation.

La Figure 3.6 représente l'allure de l'évolution des températures du fluide et de l'air le long d'un tube.

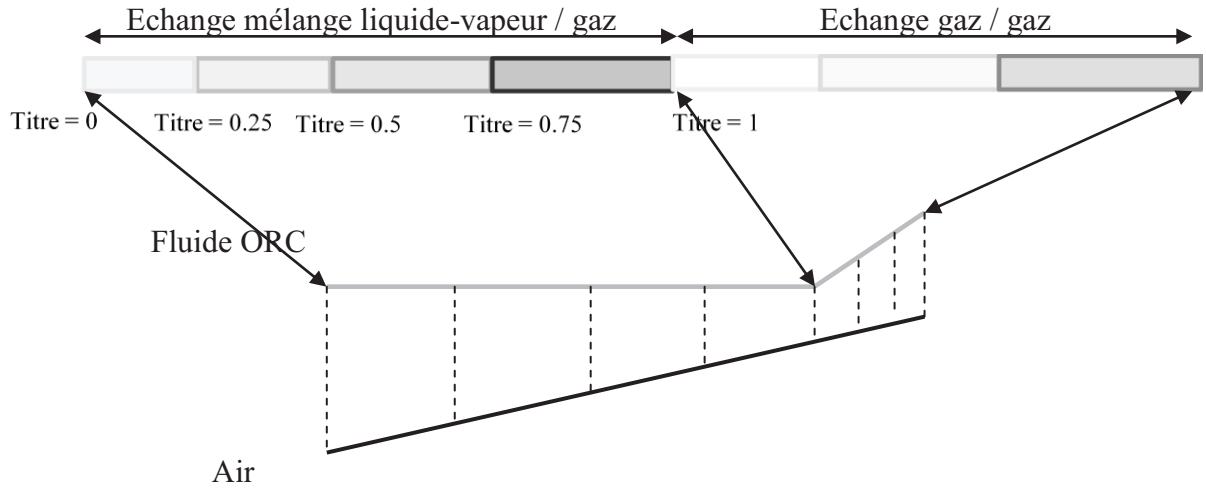


Figure 3.6 Représentation de l'allure des températures dans l'aérocondenseur.

Afin d'évaluer la surface d'échange de cet aérocondenseur, nous utilisons la méthode de la différence de température logarithmique moyenne (DTLM, ΔT_{lm}) et le coefficient d'échange global (UA).

La puissance transférée dans une portion de l'échangeur est exprimée en fonction de ces deux variables.

$$\Phi = UA.\Delta T_{lm} \tag{3.26}$$

Connaissant la puissance transférée et les températures des fluides chaud et froid, nous pouvons calculer les coefficients d'échange globaux et en déduire la surface d'échange nécessaire.

3.2.1.3 Calcul des coefficients d'échange thermique

Dans l'aérocondenseur, le fluide de travail chaud circule dans les tubes. La chaleur est transférée vers l'air ambiant à travers la paroi des tubes et des ailettes.

Le coefficient d'échange global U est calculé par :

$$\frac{1}{UA} = \frac{1}{U_f A} + \frac{1}{U_p A} + \frac{1}{U_a F A} \tag{3.27}$$

U_p est le coefficient d'échange de la paroi du tube. F est le facteur d'ailettes. Ces deux variables ne dépendent que de la géométrie et du matériau du tube à ailettes. La conductivité du matériau du tube est égale à 50 W/m/K. Par contre, le coefficient de convection du fluide

de travail (U_f) et le coefficient de convection de l'air extérieur (U_a) dépendent aussi des propriétés du fluide, de l'air et de leurs écoulements.

En effet, le coefficient de convection du fluide est relié par l'équation 3.28 au nombre de Nusselt (Nu) qui représente le rapport entre le transfert thermique total et le transfert par conduction. λ est la conductivité thermique du fluide et D_h est le diamètre hydraulique.

$$Nu = \frac{D_h}{\lambda} U \tag{3.28}$$

Le nombre de Nusselt (Nu) peut ensuite être déterminé en fonction des nombres adimensionnels caractéristiques du fluide et de son écoulement grâce à des corrélations expérimentales.

Dans la zone d'échange gaz-gaz, il est possible de caractériser ce nombre adimensionnel pour chaque fluide avec les corrélations suivantes :

- Corrélation de Colburn (Gicquel 2009) qui permet d'obtenir le nombre de Nusselt du fluide chaud monophasique sous forme gazeuse dans les tubes lisses (avec $\frac{L}{D_h} \geq 60$, $Pr > 0.5, Re > 10^4$):

  $$Nu = 0.023\, Re^{0.8}\, Pr^{\frac{1}{3}} \tag{3.29}$$

- Corrélation de l'écoulement d'air perpendiculaire aux tubes pour l'aérocondenseur de la centrale de Saltillo.

  Le nombre de Nusselt (Nu) dépend souvent du nombre de Reynolds (Re) et du nombre de Prandlt (Pr). Son écriture s'exprime sous la forme :

  $$Nu = k\, Re^{n}\, Pr^{m} \tag{3.30}$$

  Nous disposons de quelques points de mesures expérimentales sur un module de l'aérocondenseur de la centrale de Saltillo qui ont permis l'ajustement des paramètres, k, n et m. L'écart moyenne est de l'ordre de 4 %.

  $$Nu = 0.61\, Re^{0.48}\, Pr^{0.4} \tag{3.31}$$

La zone d'échange diphasique-gaz est caractérisée par les corrélations suivantes :

- Corrélation de Shah-Bivens (Shah 1979) pour rechercher le nombre de Nusselt du fluide chaud qui se condense :

  $$Nu_{Shah} = 0.023\, Re_L^{0.8}\, Pr_L^{0.4}\left((1-x)^{0.8} + \frac{3.8\, x^{0.76}\, (1-x)^{0.04}}{\left(\frac{P}{P_c}\right)^{0.38}}\right) \tag{3.32}$$

  Dans l'équation 3.32, le calcul de Nu_{Shah} doit être fait avec le débit de masse total. x est le titre du fluide en vapeur.

  $$Nu_{Shah-Bivens} = Nu_{shah}\,(0.78739 + 6187.89\, G) \tag{3.33}$$

Avec $G = \rho\, v$ en $kg/m^2/s$

La corrélation utilisée pour caractériser l'écoulement d'air perpendiculaire aux tubes reste identique à celle utilisée pour la zone d'échange gaz-gaz.

3.2.1.4 Calculs des pertes de charge

La loi de calcul des pertes de charges du fluide chaud par frottement dans les tubes se présente sous la forme (Gicquel 2009):

$$\Delta P = k\, L\, \rho \frac{v^2}{2D_h} \tag{3.34}$$

Si $3000 < Re < 10^5$, k est calculé par la loi de Blasius $k = 0.316\, Re^{-0.25}$

Si Re $> 10^5$, $k = 0.0032 + 0.221\, Re^{-0.237}$

Dans la partie diphasique, nous utilisons la corrélation de Martinelli (Lockhart et Martinelli 1949).

$$\Delta P = \Phi_0 \left[\frac{1}{2}\, k\, \frac{L}{D_h}\, (1-x)^2 \frac{G^2}{\rho_l}\right] \tag{3.35}$$

Où $\Phi_0 = 1 + \frac{5}{X_{tt}} + \frac{1}{X_{tt}^2}$ et $X_{tt} = \left(\frac{f_l\, \rho_v}{f_v\, \rho_l}\right)^{0.5} \left(\frac{1-x}{x}\right)$ à Re > 4000 (3.36)

La loi de perte de charge sur l'air est prise en compte par une corrélation expérimentale de la forme suivante :

$$\Delta P = k\, v_f^i \tag{3.37}$$

v_f étant la vitesse frontale de l'air en m/s. k et i sont des paramètres expérimentaux.

3.2.1.5 Validation du modèle d'aérocondenseur

Le modèle d'aérocondenseur a été validé en effectuant un calcul de surface d'échange pour l'aérocondenseur de la centrale de Saltillo. Les conditions nominales de fonctionnement de l'aérocondenseur sont présentées dans le Tableau 3.2. Les caractéristiques des tubes à ailettes du tableau 1 ont été reprises pour les calculs de validation.

Tableau 3.2 Conditions de fonctionnement nominales de l'aérocondenseur de Saltillo

Paramètres	Conditions nominales
Puissance échangée (MW)	144
Température ambiante (°C)	18
Température de condensation (°C)	40
Pression de condensation (Pa)	7300
Débit de vapeur (kg/s)	64

Débit d'air traversant les échangeurs (m^3/s)	8130
Température d'air en sortie de zone d'échange (°C)	35.2
titre de vapeur d'eau à l'entrée de condenseur	0.93

La surface d'échange de l'aérocondenseur a été recalculée et comparée avec la surface d'échange réelle indiquée par le constructeur (source EDF) dans le Tableau 3.3. Le résultat obtenu à partir de notre modèle reste tout à fait satisfaisant par rapport aux données de l'installation existante.

Tableau 3.3 Résultats du calcul de surface d'échange à partir du modèle établi comparé avec la surface d'échange indiquée par le constructeur

Surface d'échange (côté air) recalculée	561 904 m2
Données du constructeur	592 510 m^2
Ecart	5 %

3.2.2 Dimensionnement du condenseur-bouilleur

Au chapitre 1, les échangeurs à tubes et calandre ou les échangeurs à plaques ont été identifiés comme les technologies d'échangeur les plus adaptées pour l'application de condenseur-bouilleur. Un échangeur à tubes et calandre présente moins de contraintes en terme de choix de matériaux, de niveaux de température et de pression. Nous disposons également de quelques données techniques concernant le condenseur-bouilleur à tubes et calandre de l'étude de conception du prototype Cybiam, notamment sur le dimensionnement et les pertes de charges. Nous validerons notre modèle sur ces données. Un condenseur-bouilleur à plaques reste une option tout à fait envisageable, mais qui ne sera pas étudiée dans le cadre de la thèse.

3.2.2.1 Spécification de l'échangeur

La Figure 3.7 schématise le condenseur-bouilleur du Cybiam. Le fluide de travail du second cycle, l'ammoniac, est réchauffé puis vaporisé en échangeant de l'énergie avec la vapeur d'eau. L'évaporation du fluide de travail se fait à l'intérieur de 1371 tubes en acier inox. La condensation de la vapeur d'eau se fait à l'extérieur des tubes horizontaux, en film liquide. A la sortie du bouilleur du Cybiam, l'ammoniac en émulsion a une composition de 1/3 liquide et de 2/3 de vapeur. Puis la phase vapeur et la phase liquide sont séparées dans un séparateur à l'aval du bouilleur.

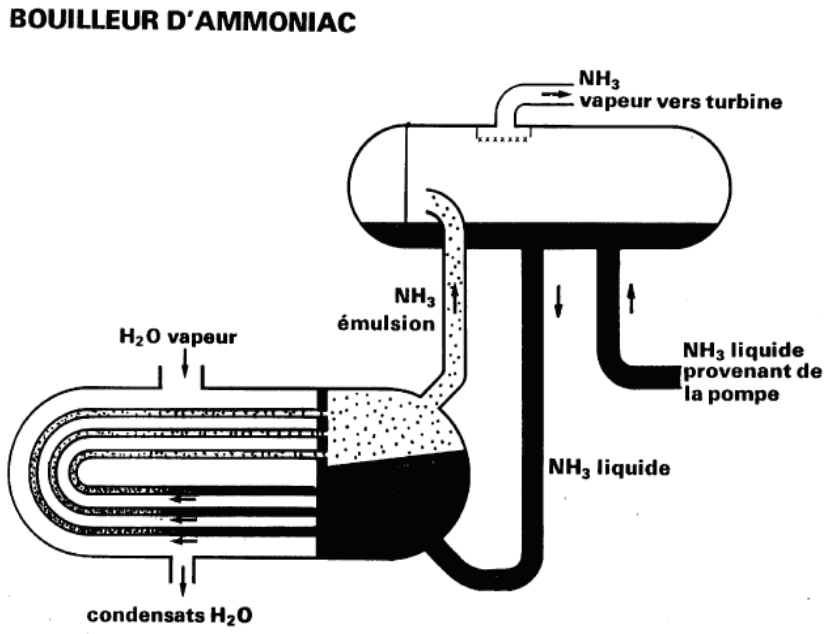


Figure 3.7 Schéma représentant le condenseur-bouilleur du Cybiam (source EDF)

Les données dimensionnelles de ce type de condenseur-bouilleur envisagées pour le projet Cybiam sont disponibles. Les dimensions des conduites tubulaires ont été reprises dans notre étude.

Table 3.4 Caractéristiques des tubes de l'échangeur du Cybiam (tubes horizontaux)

Diamètre intérieur (m)	0.018
Diamètre extérieur (m)	0.02

3.2.2.2 Modèle du condenseur-bouilleur

Le dimensionnement du condenseur-bouilleur se fait de manière similaire à celui de l'aérocondenseur.

L'échange de chaleur a lieu entre la vapeur d'eau qui se condense et le fluide de l'ORC en phase liquide qui s'évapore. Deux zones d'échange peuvent être distinguées :

- Echange diphasique-liquide (eau en condensation – fluide de travail à la sortie de la pompe)
- Echange diphasique-diphasique (eau en condensation – fluide de travail en évaporation)

La zone d'échange de préchauffe est représentée par un économiseur découpé en plusieurs parties tandis que la zone d'évaporation est découpée de la même manière que dans le cas de l'aérocondenseur.

La Figure 3.8 représente l'allure de l'évolution des températures des deux fluides.

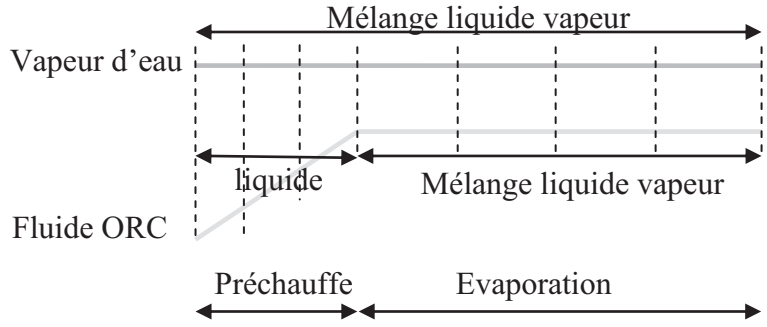


Figure 3.8 Représentation de l'allure des températures dans le condenseur bouilleur.

Afin d'évaluer la surface d'échange de ce condenseur-bouilleur, nous utilisons la méthode de la Différence de Température Logarithmique Moyenne (DTLM, ΔT_{lm}) et le coefficient d'échange global (UA).

La puissance thermique transférée dans une portion de l'échangeur est exprimée en fonction de ces deux variables.

$$\Phi = UA.\Delta T_{lm} \tag{3.38}$$

Connaissant la puissance transférée et les températures des fluides chaud et froid, nous pouvons calculer les coefficients d'échange et en déduire la surface d'échange nécessaire. Le DTLM de la zone d'échange condensation-évaporation est approximé par le pincement de l'échangeur.

3.2.2.3 Calcul des coefficients d'échange thermique

Dans le condenseur-bouilleur, nous distinguons deux fluides mis en jeu:

- le fluide de travail du second cycle (fluide froid) qui circule dans les tubes et qui s'évapore
- la vapeur d'eau à l'extérieur des tubes qui se condense sous forme de film liquide.

De manière similaire à l'aérocondenseur, le coefficient d'échange global U est exprimé par la relation suivante :

$$\frac{1}{UA} = \frac{1}{U_f A} + \frac{1}{U_p A} + \frac{1}{U_{eau} A} \tag{3.39}$$

U_p est le coefficient d'échange de la paroi du tube qui ne dépend que de la géométrie et de la conductivité thermique du matériau de la conduite tubulaire. La conductivité de l'acier inox (en W/m/K) s'exprime en fonction de la température (en °C) : $\lambda = 13.58 + 0.019\ T$ (source EDF).

Les coefficients de convection du fluide de travail (U_f) et de la vapeur d'eau (U_a) sont déterminés à partir de leurs propriétés thermophysiques.

Le coefficient de convection peut être exprimé en fonction de la conductivité du fluide (λ), du nombre de Nusselt (Nu) et du diamètre hydraulique (D_h).

$$Nu = \frac{D_h}{\lambda}\ U \tag{3.40}$$

Pour estimer le nombre de Nusselt dans la zone d'échange diphasique-liquide, des corrélations ont été utilisées :

- Corrélation de Dittus-Boelter (Padet s.d.) pour rechercher le nombre de Nusselt du fluide froid monophasique sous forme liquide qui se réchauffe dans les tubes lisses (avec $\frac{L}{D_h} \geq 60$, $Pr > 0.5$, $Re > 10^4$):

  $$Nu = 0.023\ Re^{0.8}\ Pr^{0.4} \tag{3.41}$$

- Equation de Nusselt adimensionnelle pour les tubes horizontaux (Padet s.d.) afin d'évaluer directement le coefficient d'échange h du film liquide:

  $$\frac{h}{\lambda_L}\left(\frac{\mu_L^2}{\rho_L^2 g}\right)^{\frac{1}{3}} = 1.2\ Re^{-\frac{1}{3}} \tag{3.42}$$

  λ, conductivité du fluide à condenser sous forme liquide, W/m^2/K
  μ_L, viscosité du fluide liquide, Pa.s
  ρ_L, masse volumique du fluide liquide, kg/m^3
  g, constante d'accélération, 9.81 m/s^2
  Re, nombre de Reynolds dans le film liquide

Le nombre de Reynolds Re est évalué par l'équation 3.43 :

$$Re = 2\frac{m}{N\,L\,\mu_L} \tag{3.43}$$

m, débit de vapeur entrant, kg/s
N, nombre de tubes
L, longueur d'un tube, m
μ_L, viscosité liquide du fluide, Pa.s

Les corrélations permettent la détermination du coefficient d'échange diphasique-diphasique :

Corrélation de Martinelli pour rechercher le coefficient d'échange convectif du fluide de travail en évaporation à l'intérieur des tubes.

$$U_{ev} = h_L\,A\,\left(\frac{1}{X_{tt}}\right)^n \tag{3.44}$$

A et n sont les coefficients de Schrock et Grossman, leurs valeurs sont connues pour le condenseur- bouilleur du type Cybiam (source EDF).

X_{tt} est le paramètre de Lockhart-Martinelli, exprimé en fonction du titre x, des masses volumiques ρ et des viscosités μ :

$$X_{tt} = \left(\frac{1-x}{x}\right)^{0.9}\left(\frac{\rho_V}{\rho_L}\right)^{0.5}\left(\frac{\mu_L}{\mu_V}\right)^{0.1} \tag{3.45}$$

U_L est le coefficient d'échange convectif du fluide liquide saturé, obtenu par :

$$U_L = \frac{\lambda_L}{D_h}\,Nu_L = 0.023\,Re_L^{0.8}\,Pr_L^{0.4}\,\frac{\lambda_L}{D_h} \tag{3.46}$$

3.2.2.4 Calcul des pertes de charge

Les pertes de charges internes aux tubes du condenseur-bouilleur sont calculées à partir de l'expression :

$$\Delta P = k\,L\,\rho\,\frac{v^2}{2} \tag{3.47}$$

Dans la partie diphasique, nous utilisons la corrélation de Martinelli (Lockhart et Martinelli 1949)

$$\Delta P = \Phi_0\,[\,\frac{1}{2}\,k\,\frac{L}{D_h}\,(1-x)^2\,\frac{G^2}{\rho_l}\,] \tag{3.48}$$

Où $\Phi_0 = 1 + \frac{5}{X_{tt}} + \frac{1}{X_{tt}^2}$ et $X_{tt} = \left(\frac{f_l\,\rho_v}{f_v\,\rho_l}\right)^{0.5}\left(\frac{1-x}{x}\right)$ à Re >4000 (3.49)

Le facteur de frottement k est calculé par la loi de Blasius.

3.2.2.5 Validation du modèle de condenseur-bouilleur

Notre modèle de condenseur-bouilleur a été validé à partir d'un calcul de surface d'échange et une comparaison avec la valeur du composant du prototype Cybiam. Les conditions nominales de fonctionnement prises en compte dans ce calcul de vérification sont présentées dans le Tableau 3.5.

Tableau 3.5 Conditions de fonctionnement nominales du condenseur-bouilleur du Cybiam considérées

Paramètres	Conditions nominales
Débit de l'ammoniac vapeur (kg/s)	58
Température ambiante de l'air (°C)	10
Pression de coupure (Pa)	50 000
Pincement de l'échangeur (K)	7
Composition de l'ammoniac à la sortie du bouilleur	2/3 Vapeur 1/3 liquide

Les caractéristiques des tubes sont présentées dans le Tableau 3.5. Nous avons repris les coefficients de Schrock et Grossman à A=2.5, n=0.75 selon les études de Cybiam. Nous recalculons la surface d'échange de ce condenseur-bouilleur et la comparons avec la surface indiquée par le constructeur dans le Tableau 3.6. L'écart entre la valeur calculée et la valeur du constructeur est de l'ordre de 6 %. Cela montre l'accord entre notre modèle et les données existantes.

Tableau 3.6 Résultats du calcul de surface d'échange à partir du modèle établi comparé avec la surface d'échange indiquée par le constructeur

Surface d'échange recalculée	2 312 m^2
Données du constructeur	2 450 m^2
Ecart	6 %

3.2.2.6 Validation du modèle de perte de charge par friction

La perte de charge est un facteur limitant lors du dimensionnement du condenseur-bouilleur. Le fait de pouvoir prédire cette perte de charge nous permet de configurer les tubes dans l'échangeur de chaleur à savoir le nombre de tubes nécessaires, la longueur des tubes et surface d'échange totale.

La validation des modèles de pertes de charge par frottement est faite en comparant les résultats avec ceux du rapport EDF du projet Cybiam considéré comme notre référence. Le Tableau 3.7 décrit la configuration des tubes dans l'échangeur.

Tableau 3.7 Configuration des tubes du condenseur-bouilleur du type vertical (source EDF)

diamètre intérieur du tube (m)	0.022
diamètre extérieur du tube (m)	0.025
longueur (m)	19.90
nb tubes pour 16 modules	152 160
Taux de recirculation	10

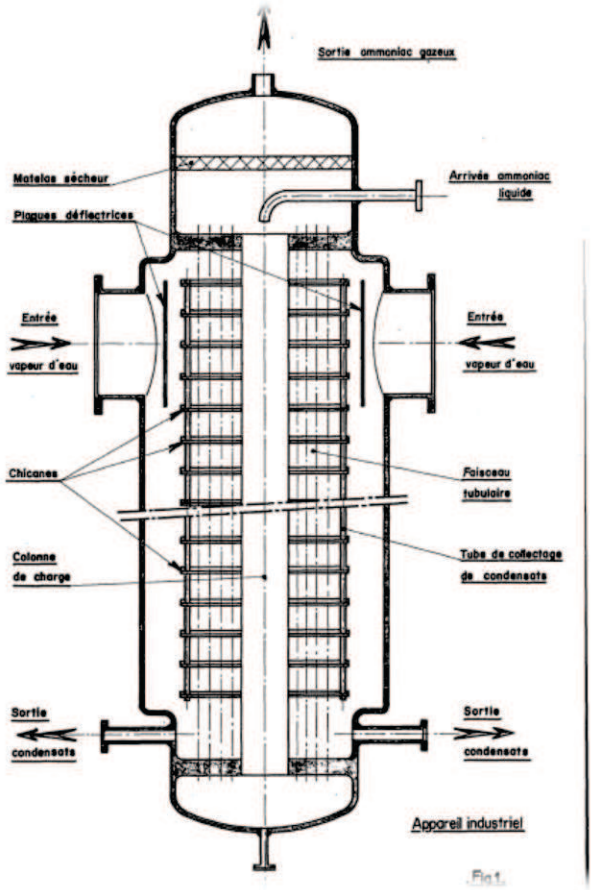


Figure 3.9 Schéma du condenseur bouilleur considéré lors de la validation des modèles de perte de charge par frottement (source EDF)

Le Tableau 3.8 compare le résultat du calcul de perte de charge par rapport aux différentes données existantes.

Tableau 3.8 Comparaison des pertes de charge par frottement du condenseur-bouilleur du type vertical selon différentes sources.

Sources	Perte de charge par frottement (Pa)
Résultat obtenus à partir des modèles	7 090
Données constructeur	3 900
Etude de la convection forcée de l'ammoniac*	8 617

*cette valeur de référence est issue d'un rapport CEA (Perroud, Rebiere et Rowe s.d.)

En raison du peu de données disponibles, il est difficile de conclure de manière précise. Ces modèles choisis nous permettent d'obtenir des valeurs de perte de charge par frottement comprises dans l'intervalle des références (entre 3900 Pa et 8617 Pa). Nous devons garder la

possibilité de modifier ces calculs, si d'autres informations deviennent disponibles dans le futur. Nous notons cependant que ces pertes de charges restent faibles en comparaison de la pression de l'ammoniac dans l'échangeur de l'ordre de 0.2 % de la pression de coupure de dimensionnement (Tableau 3.5).

3.2.3 Dimensionnement des turbines

Les calculs de pré-dimensionnement de la turbine sont réalisés avec le logiciel GTDT (Gas Turbine Design Tool). Ce logiciel a été développé dans le cadre d'un projet antérieur réalisé par le VNIAM pour EDF. Il a été réadapté pour les besoins de notre application du cycle bi-étagé. Les paragraphes suivants décrivent quelques principes de base du logiciel. N'ayant pas de détail de l'implémentation du logiciel, nous l'avons utilisé en « boîte noire ».

3.2.3.1 Quelques explications rapides sur le déroulement des calculs

Dans le cadre du projet de thèse, nous n'avons pas étudié en détail les modèles de turbines et nous ne les avons pas implémentés comme c'était le cas pour les échangeurs. Nous cherchons uniquement à avoir un ordre de grandeur du diamètre maximal de la turbine et du nombre d'unités nécessaires pour nos évaluations technico-économiques. EDF dispose déjà de l'outil de pré-dimensionnement prévu pour ses besoins. Les paragraphes suivants résument très brièvement la méthodologie des calculs de pré-dimensionnement de la turbine à partir du logiciel GTDT.

Pour chaque étage, on calcule les triangles de vitesse au rayon moyen devant le rotor, entre le rotor et le stator et derrière le stator. Un triangle de vitesse est composé de 3 éléments. U est la vitesse d'entrainement, V la vitesse absolue et W la vitesse relative. La relation entre les trois vitesses est représentée dans la Figure 3.10.

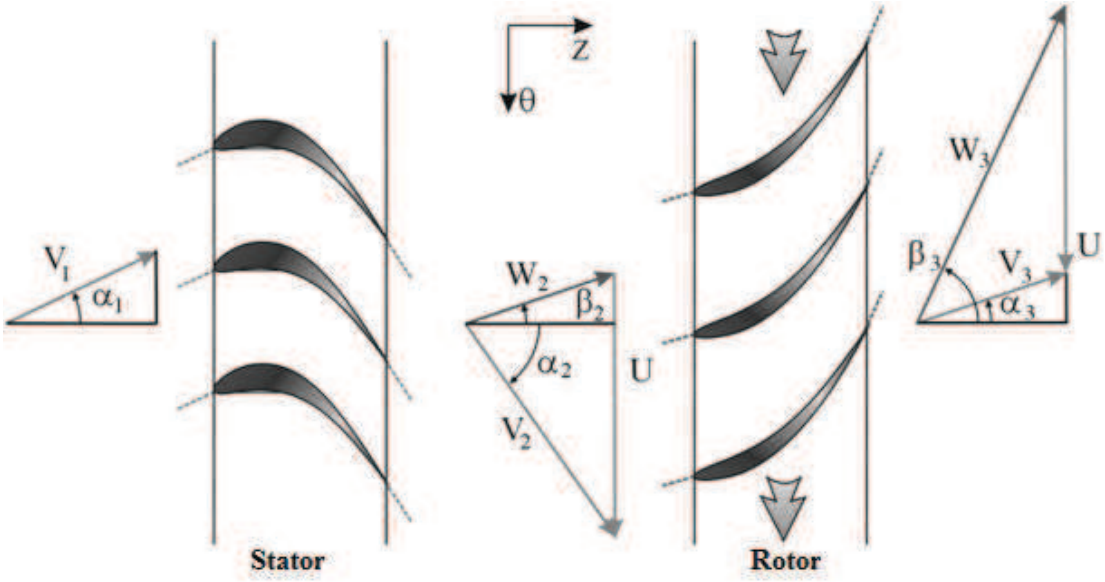


Figure 3.10 Schéma représentant le distributeur et la roue mobile d'un étage de turbine (Combes 2012).

Les conditions d'entrée dans l'étage sont données pour le premier étage, ou correspondent aux conditions de sortie de l'étage précédent. On connaît ou on peut calculer les vitesses U1, V1, W1, la pression P1, la température T1 et les angles $\alpha 1$, $\beta 1$.

Le degré de réaction est le rapport des chutes d'enthalpie dans la roue et l'étage. Lors des calculs de turbine, c'est un paramètre de conception qui permet de calculer la variation d'enthalpie isentropique dans le distributeur et dans la roue. On en déduit toutes les grandeurs thermodynamiques correspondantes à une transformation isentropique (pression, température, enthalpie…) en sortie de distributeur et de roue, ainsi que les vitesses V2 et W2 et les nombres de Mach correspondants.

Les données des coefficients de ralentissement ϕ et ψ permettent de prendre en compte les pertes par frottement et autres irréversibilités dans le distributeur et dans la roue. Ces coefficients sont définis de la manière suivante :

- $V = \phi V_{is}$ dans le distributeur, V_{is} est la vitesse correspondant au cas isentropique.
- $W = \psi W_{is}$ dans la roue, W_{is} est la vitesse correspondant au cas isentropique.

Ces coefficients sont des paramètres qui peuvent être modifiés dans le logiciel. ils sont pris égaux à 0.98 par défaut.

On en déduit les variations d'enthalpie et les grandeurs thermodynamiques correspondant à une transformation réelle, ainsi que le rendement de l'étage.

Pour compléter les triangles de vitesse, on a besoin de trois données complémentaires :

- L'angle de sortie des distributeurs α_2, défini par le profile des aubages,
- Le coefficient de débit $m = V/U$, un paramètre de la machine,
- La différence de hauteur relative des ailettes entre distributeur et roue, défini également par le profile des aubages.

En plus du triangle de vitesses, on obtient la hauteur des ailettes et les diamètres du moyeu et du carter : le diamètre maximal peut être calculé.

Le choix d'un profil de roue dans la bibliothèque permet enfin d'obtenir le nombre d'ailettes du distributeur et de la roue. A la fin des calculs, nous vérifions que le rendement de la turbine ORC est compris entre 0.85 et 0.9.

3.2.3.2 Données d'entrée et résultats de sortie

Dans le logiciel GTDT, nous devons entrer les données correspondant au point de fonctionnement de la turbine :

- Pression d'entrée (en MPa)
- Pression de sortie (en MPa)
- Température d'entrée (en K)
- Débit (en kg/s)
- Vitesse de rotation (en t/min)

L'outil de pré-dimensionnement utilise l'approche du gaz parfait pour simuler le comportement des différents fluides. En toute rigueur, il faut utiliser un modèle de gaz réel.

Pour caractériser les fluides de travail dans le logiciel, nous devons renseigner :

- L'indice adiabatique ($\gamma = \frac{C_p}{C_v}$) du fluide
- La vitesse du son w en m/s:

$$\frac{w^2}{RT} = \frac{C_p}{C_v}\left(1 + 2\,\delta\left(\frac{\partial A^R}{\partial \delta}\right)_T + \delta^2\left(\frac{\partial^2 A^R}{\partial \delta^2}\right)_T\right) \quad (3.50)$$

avec $\delta = \frac{\rho}{\rho_c}$ la masse volumique réduite, A^R énergie libre d'Hermoltz résiduelle

Le logiciel GTDT affiche dans la fenêtre de sortie :

- Le rendement et la puissance de la machine
- La dimension de la machine, notamment son diamètre maximal.

Les résultats de ce logiciel nous permettront de réaliser les études économiques et les modélisations en conditions non nominales.

3.3 Modèle de cycle en régime non nominal

Pour réaliser le calcul en régime non-nominal d'un cycle, il est indispensable d'avoir dimensionné chaque composant. Nous devons ensuite décrire les interactions entre les différents composants qui s'adaptent aux nouvelles conditions de fonctionnement. Ce paragraphe décrit les modèles qui ont été implémentés pour simuler les comportements des turbines et des échangeurs. Les pompes, ayant une influence énergétique limitée, ont été décrites en régime non nominal en considérant uniquement leur bilan enthalpique. Notons également que nous ne nous intéressons pas au régime transitoire rapide du cycle de production d'électricité. Les calculs réalisés concernent uniquement le régime permanent glissant.

3.3.1 Calcul de turbine en régime non nominal

Le modèle de turbine est basé sur la relation du cône de Stodola (Stodola 1927). Nous faisons l'hypothèse que le comportement de la turbine peut être décrit par deux paramètres :

- La constante de Stodola : K
- Le rendement isentropique de la machine : η_{is}

La règle du cône de Stodola est exprimée en fonction des paramètres thermophysiques du fluide en entrée et en sortie de la machine. Cette relation relie le rapport de la détente et le débit du système.

$$m^2\left(\frac{T_{in}}{K^2}\right) = P_{in}^2 - P_{out}^2 \quad (3.51)$$

Le rendement isentropique de la turbine peut être exprimé par une fonction polynomiale du rapport de détente ($\frac{P_{out}}{P_{in}}$). Les paramètres de la fonction sont ajustés à partir des points de mesures de la machine. Cependant, dans le cadre du cycle bi-étagé, nous ne disposons

malheureusement pas de point de mesure. Nous faisons alors l'hypothèse que le rendement isentropique varie peu (Gicquel 2009).

La perte cinétique est calculée grâce à la connaissance de la surface de passage en sortie de la turbine et du nombre d'unités de turbine nécessaire :

$$\Delta K = m\frac{C^2}{2} \tag{3.52}$$

$$C = \frac{m\,V}{S\,n} \tag{3.53}$$

C : vitesse du fluide à la sortie de la turbine, m/s
m : débit massique du fluide, kg/s
V : volume spécifique de la vapeur à la sortie de la turbine, m^3/kg
S : surface de passage à la sortie de la turbine, m^2
n : nombre d'unités de turbine.

3.3.2 Calcul des échangeurs en régime non nominal

Pour un calcul en régime non nominal, nous avons besoin de connaître les débits des fluides, leurs niveaux de températures à l'entrée et la géométrie de l'échangeur. Contrairement à l'étape de dimensionnement des composants, l'approche de calcul est différente:

- Détermination de U par les corrélations expérimentales,
- Calcul de UA,
- Calcul de la puissance échangée et détermination des températures de sortie.

Nous avons fait l'hypothèse que les propriétés thermophysiques du fluide sont constantes dans l'échangeur. Si on considère U comme une variable dépendante des températures d'entrée et de sortie, le système d'équations implicites risque d'être très difficile à résoudre. Ce cas est valable pour tous les échangeurs intervenant dans le cycle bi-étagé SPX.

Il existe une approche simplifiée qui permet d'éviter d'éventuels problèmes numériques. En effet, il est possible de faire l'hypothèse que la valeur de UA reste constante. Une étude de sensibilité de UA est réalisée dans le cas d'un cycle récepteur (Gicquel 2009) sous Thermoptim et montre les résultats suivants :

- L'influence de UA est faible sur la pression de condensation, la pression d'évaporation, le débit de réfrigérant et les puissances échangées dans l'évaporateur et le condenseur.
- L'influence de UA est significative sur les paramètres relatifs à l'échangeur comme le DTML.
- L'influence de UA sur le COP de la machine est quasi-négligeable.

Pour justifier que cette hypothèse est également valable pour notre cycle de production d'électricité, nous avons évalué le U de l'aérocondenseur aux différentes températures d'air (à -20 et à 30 °C) assez éloignées du point nominal. Nous avons comparé les U obtenus au U nominal (à 11 °C). En raison de la forte contribution de la résistance thermique de l'air, la variation de U n'excède pas 3 % pour la zone de l'échange diphasique de l'aérocondenseur. Nous avons en suite recalculé la performance de cycle bi-étagé à 11 °C en faisant varier de 3

% la valeur de UA de l'aérocondenseur. Le rendement du cycle varie très peu. Le changement est de l'ordre de 0.05 %.

Pour le condenseur bouilleur, l'amplitude de variation de température est faible (inférieure à 10 °C) par rapport au point nominal si on considère les mêmes conditions de source froide que pour l'aérocondenseur. Le changement du débit principal correspondant dans le cycle est inférieur à 10 %. Ainsi, la variation de UA est également limitée à environ 3 %. Le rendement du cycle varie donc peu. Le changement est de l'ordre de 0.05 %.

Comme nous nous intéressons principalement à la performance du cycle. Nous avons décidé de faire l'hypothèse que la valeur de UA est constante pour les calculs en non nominal de cycles bi-étagés. Les calculs en non nominal des échangeurs relient la puissance échangée et les niveaux de températures et de pressions.

3.3.3 Implémentation des modèles et contrôle du cycle en régime non nominal

En considérant les cinq échangeurs de chaleur, les quatre pompes et les trois turbines, nous pouvons écrire un système de 130 équations et 130 variables. Les équations sont listées dans l'annexe 7.4.

Le modèle a été implémenté dans les classes externes de Thermoptim, écrit sous Java. La résolution du système est assurée par la bibliothèque minPack qui contient un module de minimisation de fonction utilisant l'algorithme de Newton-Raphson.

Afin de nous approcher le plus possible du fonctionnement réel d'un cycle secondaire dans une centrale de production, deux paramètres d'entrée doivent être renseignés:

- La température de l'air extérieur
- La puissance demandée par le réseau

A partir de ces deux paramètres, les autres variables du cycle secondaire sont déterminées. Le générateur de vapeur, dont la température à l'entrée du circuit primaire et le débit sont considérés constants fournit la puissance thermique nécessaire.

3.4 Résultats des calculs et discussions

3.4.1 Calcul de performance au point de fonctionnement nominal

Les calculs de performance au point nominal sont importants dans le cas d'un cycle bi-étagé. En effet, ils permettent de définir les différents composants du cycle, notamment les échangeurs et la turbine du second cycle. Le Tableau 3.9 rappelle les paramètres pris en compte dans le cycle bi-étagé dérivé du cycle Super Phénix.

Tableau 3.9 Rappel des paramètres pris en compte dans la simulation du cycle sous Thermoptim

Composant	Variable	Valeur
Générateur de vapeur	Température d'entrée (T_0) en °C	208
	Température de sortie (T_1) en °C	490

	Pression d'entrée (P_0) en bar	230
	Pression de sortie (P_1) en bar	180
	Débit massique (m) en kg/s	680
Turbine vapeur HP	Efficacité isentropique (η_{THP})	0.87
	Taux de détente	20
Turbine vapeur BP	Efficacité isentropique (η_{TBP})	0.85
	Taux de détente	Dépendant de la valeur de STEP
Pompe eau	Efficacité isentropique (η_P)	0.7
Préchauffeur	Pincement (ΔT_{PH}) en K	4
Réchauffeur	Surchauffe (ΔT_{SH}) en K	17
	Débit massique (m_b) en kg/s	20
Condenseur-bouilleur	Pression de coupure (Steam Turbine Exhaust Pressure, $STEP$) en bar	Valeur contrôlée, entre 0.2 - 1
	Pincement (ΔT_{CB}) en K	5
	Température d'évaporation (T_{EVAPO})	Dépendant de la valeur de STEP
Turbine ORC	Efficacité isentropique (η_{TO})	0.85
Pompe ORC	Efficacité isentropique (η_{PO})	0.7
Aérocondenseur	Température de l'air (T_{air}) en °C	11
	Approche (ΔT_{ACC}) en K	29

Nous portons une attention spéciale au paramètre « pression de coupure ». Cette dernière doit être contrôlée par rapport à la température de l'air extérieur lors de la définition du point de fonctionnement nominal. Du point de vue énergétique, il existe une pression de coupure optimale pour chacun des fluides choisis à chaque température d'air extérieur donnée. Cela signifie que lors de la définition du point de fonctionnement nominal du cycle, nous devons prendre en compte le climat de la région où se situe la centrale de production.

Les Figure 3.11 - Figure 3.13 représentent les performances des différents fluides dans un cycle bi-étagé à trois niveaux de température d'air extérieur moyenne (respectivement -10 °C, 11 °C et 25 °C). Ces courbes permettent d'une part de comparer les différents fluides et d'autre part de rechercher la pression de coupure optimale.

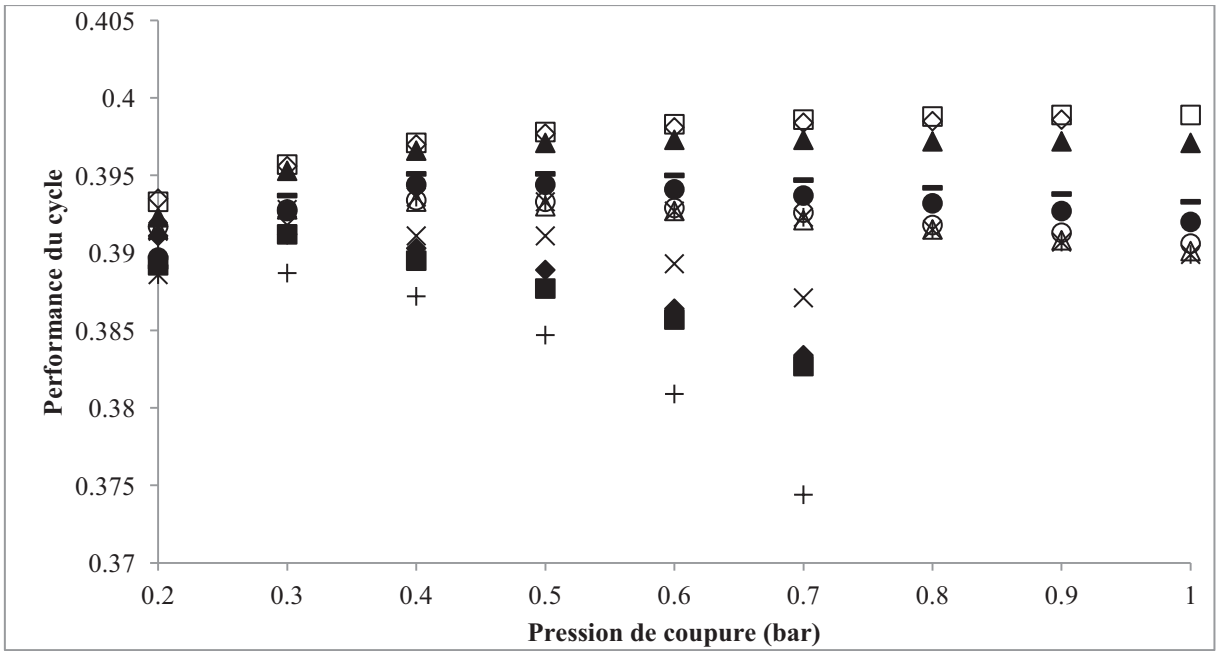


Figure 3.11 Performances des cycles bi-étagé à $T_{ext} = 11\ °C$

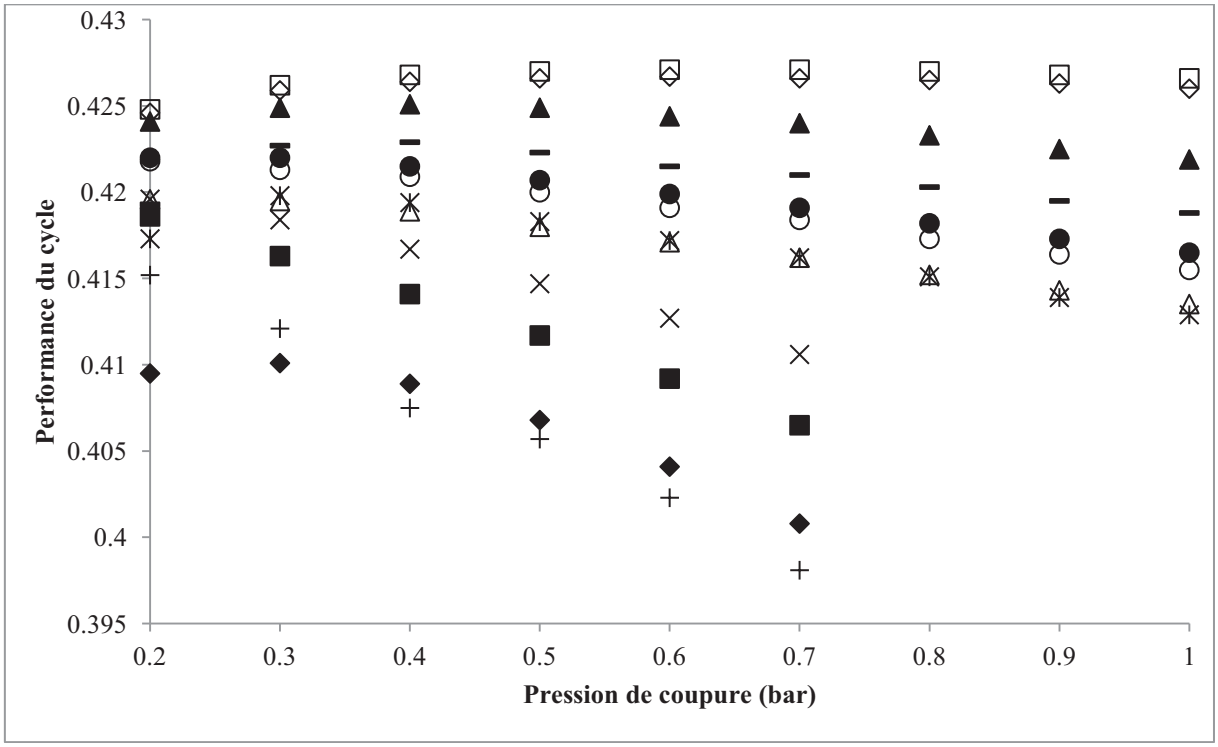
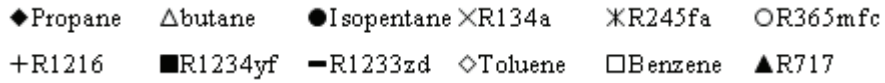


Figure 3.12 Performances des cycles bi-étagé à $T_{ext} = -10\ °C$



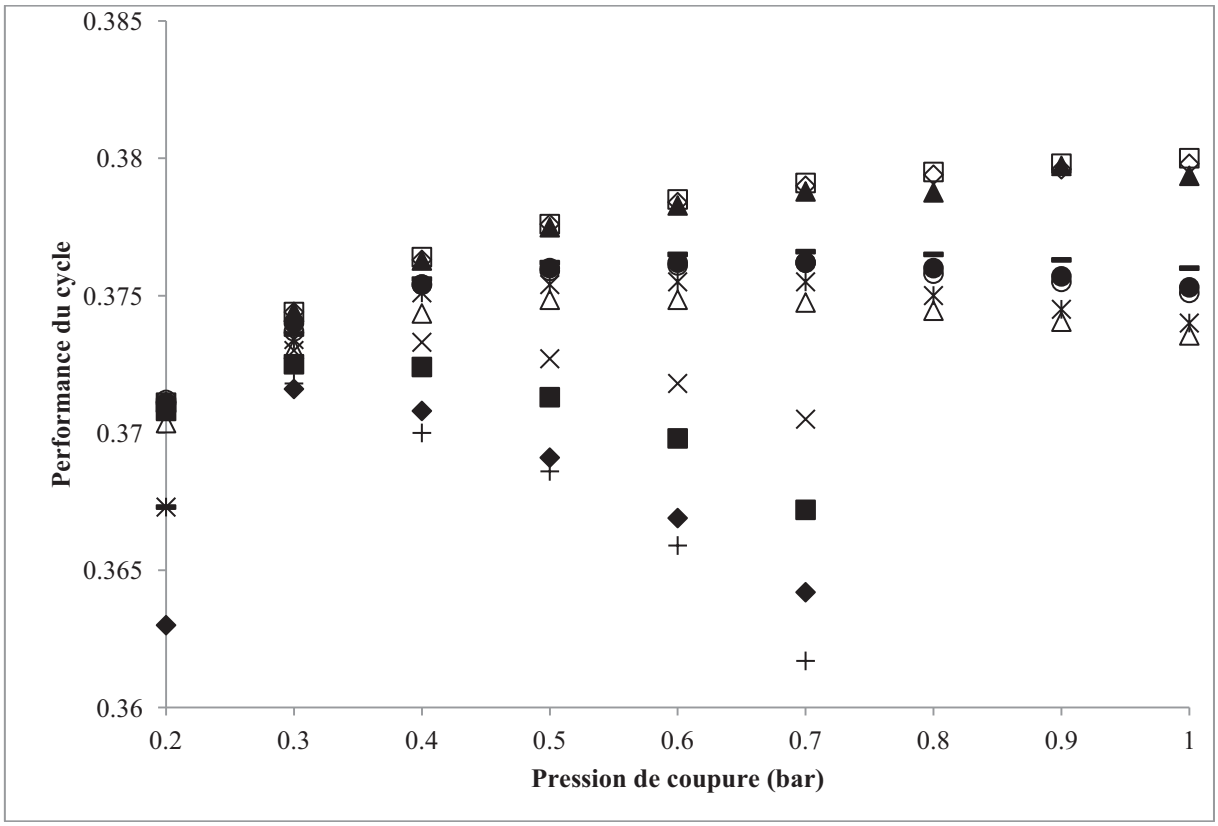
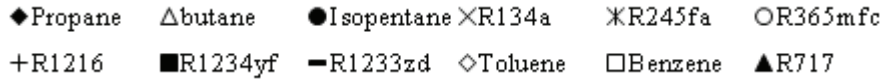


Figure 3.13 Performances des cycles bi-étagé à $T_{ext} = 25\ °C$



Le Tableau 3.10 classe les fluides de travail en fonction de leur performance évaluée dans l'ordre décroissant.

Tableau 3.10 Classement établi suite aux tests réalisés dans le cycle bi-étagé

Fluides	*Tc (K)*	Classement de performance
benzène	562	1
toluène	592	2
R717	406	3
R1233zd	438	4
R365mfc	460	5
isopentane	460	6
R245fa	427	7
R600	425	8
R134a	374	9
R290	370	10
R1234yf	368	11
R1216	358	12

Nous faisons deux observations principales :

- Le classement des fluides ne dépend pas de la température d'application suivant les courbes présentées dans les Figure 3.11 - Figure 3.13.
- Les fluides testés peuvent être classés selon les valeurs de températures critiques. Globalement, nous observons que plus la température critique du fluide est élevée, plus la performance évaluée est grande, sauf pour le benzène et le HFO R1233zd.

Le Tableau 3.11 donne le niveau de pression de coupure optimal pour chacun des fluides. Avec un cycle bi-étagé ainsi défini, 90 % de la puissance est produite par le cycle à vapeur, et 10 % par l'ORC.

Tableau 3.11 Pressions de coupure optimales pour les différents fluides choisis

	Pression de coupure optimale observée (bar)											
T_{ext} (°C)	R290	R600	Isopentane	R134a	R245fa	R365mfc	R1216	R1234yf	R1233zd	Toluene	Benzene	R717
11	0.3	0.4	0.4	0.3	0.4	0.4	0.2	0.3	0.4	1	1	0.6
-10	0.3	0.2	0.2	0.2	0.3	0.2	0.2	0.2	0.4	0.6	0.6	0.3
25	0.3	0.5	0.6	0.4	0.6	0.7	0.3	0.3	0.7	1	1	0.9

3.4.2 Fluides de travail retenus

En analysant les résultats obtenus au paragraphe précédent, nous pouvons faire les remarques suivantes :

Le benzène et le toluène possèdent des rendements énergétiques très élevés, cependant :

- Les volumes spécifiques en phase vapeur de ces deux fluides sont très importants (respectivement 9 et 20 fois plus grands que ceux du R365mfc),
- La pression de condensation est très inférieure à la pression atmosphérique,
- Les deux fluides sont toxiques et inflammables.

Compte tenu de ces trois arguments, les composés aromatiques sont écartés.

Nous nous focalisons alors sur les fluides suivants : le R1233zd, le R365mfc, l'isopentane et le R245fa (classés n° 4, n° 5, n° 6 et n°7). L'ammoniac (classé n° 3) sert de fluide de référence.

Notons cependant que les fluides organiques choisis ne sont pas parfaits, notamment si nous regardons les critères d'environnement et de sureté :

- Le R245fa possède un potentiel de réchauffement global (GWP) de 1030. Il est légèrement toxique (classé A1 dans la version 2001 du standard Ashrae, il est passé à B1 dans les versions ultérieures).
- Le R365mfc possède un potentiel de réchauffement global de 890 et est inflammable.
- L'isopentane, similaire au R365mfc, est également inflammable
- Le R1233zd est performant, avec un potentiel de réchauffement de l'ordre de 4. Mais il n'existe pas encore sur le marché. Il y a encore des incertitudes sur ce fluide.

En France la température moyenne est $T_{ext} = 11\,°C$. A cette température, le point de fonctionnement optimal est défini à STEP = 0.4 bar pour les quatre composés organiques, à STEP=0.6 bar pour l'ammoniac. Nos calculs de dimensionnement sont basés sur la condition optimale de la pression de coupure à ce niveau de température.

Pour respecter les directives Européennes sur les gaz à effet de serre et abaisser le potentiel de réchauffement global des HFCs, nous pouvons mélanger les HFCs avec des hydrocarbures. Par exemple, afin d'obtenir un mélange ayant un GWP < 150, nous pouvons prendre le mélange du R245fa et l'isopentane de composition massique 0.09/0.91. Le calcul de dimensionnement pour ce fluide sera également réalisé à 11 °C et avec une pression de coupure à 0.4 bar.

3.4.3 Sensibilité des paramètres des composants

Nous nous intéressons également à l'influence des composants du second cycle sur la performance du cycle bi-étagé au point de fonctionnement nominal. Les paramètres à regarder sont notamment le rendement de la turbine ORC, le pincement du condenseur-bouilleur et le pincement de l'aérocondenseur. De plus, sachant que les fluides organiques choisis sont des fluides du type sec, nous essayerons également de voir l'influence de l'ajout d'un régénérateur. Les résultats présentés ici sont obtenus pour le fluide R245fa.

3.4.3.1 Influence du rendement de la turbine

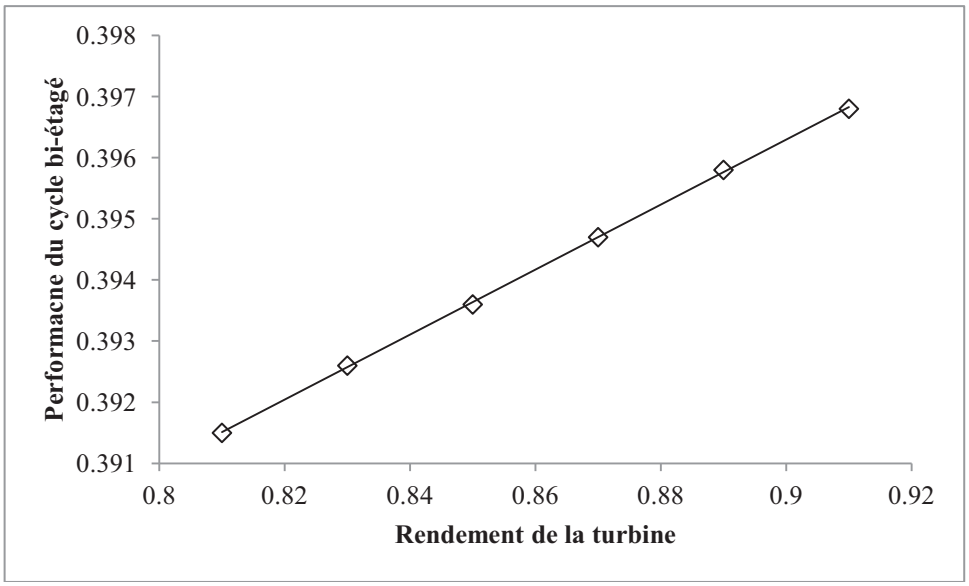


Figure 3.14 Influence du rendement de la turbine ORC sur la performance du cycle bi-étagé

L'influence du rendement de la turbine ORC sur la performance du cycle bi-étagé est assez linéaire comme montré dans la Figure 3.14. Chaque point supplémentaire de rendement de la turbine permet un gain de rendement de 0.05 %.

3.4.3.2 Influence du pincement des échangeurs

Les études de sensibilité sur le pincement du condenseur-bouilleur et sur le pincement de l'aérocondenseur donnent des résultats tout à fait comparables (Figure 3.15 et Figure 3.16). En diminuant le pincement des échangeurs de 1 K, nous avons un gain de performance de 0.1 % sur la performance du cycle.

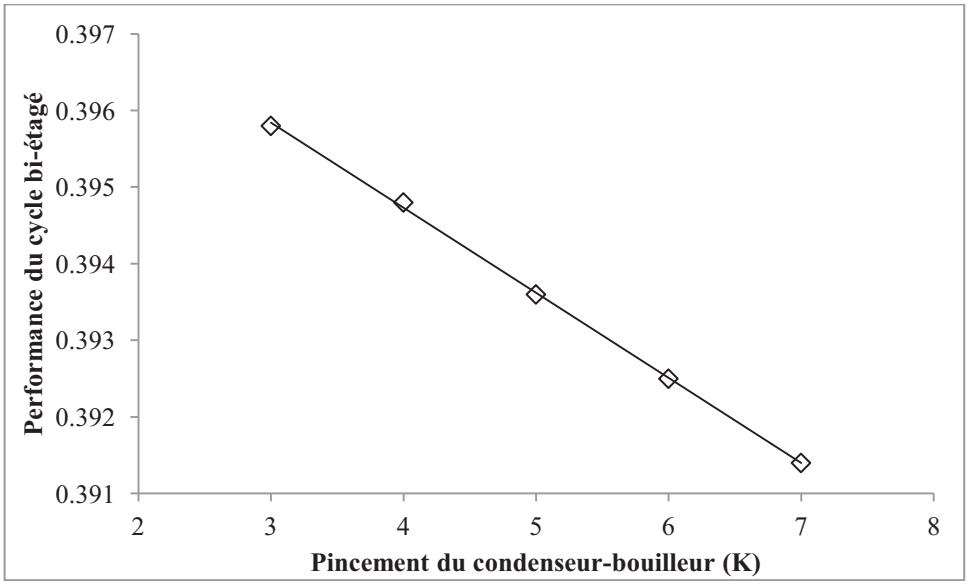


Figure 3.15 Influence du pincement du condenseur-bouilleur sur la performance du cycle bi-étagé

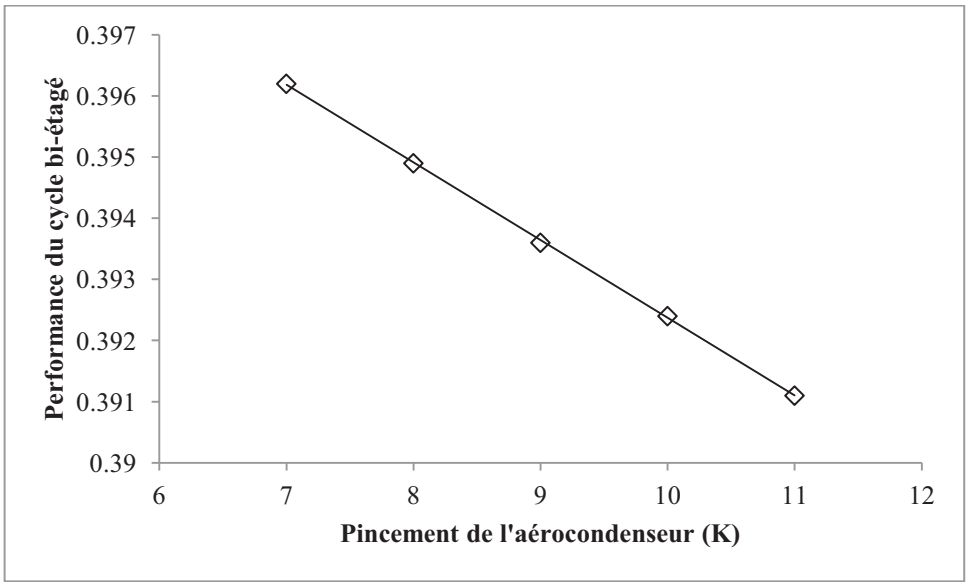


Figure 3.16 Influence du pincement de l'aérocondenseur sur la performance du cycle bi-étagé

3.4.3.3 Influence du récupérateur

Un autre point soulevé est l'intérêt de l'éventuelle installation d'un récupérateur, installé entre la sortie turbine et l'aérocondenseur. Il préchauffe le fluide liquide à la sortie de la pompe. La Figure 3.17 représente le schéma du cycle modifié.

Le Tableau 3.12 montre la comparaison des performances entre un cycle bi-étagé R245fa classique et un cycle avec récupérateur.

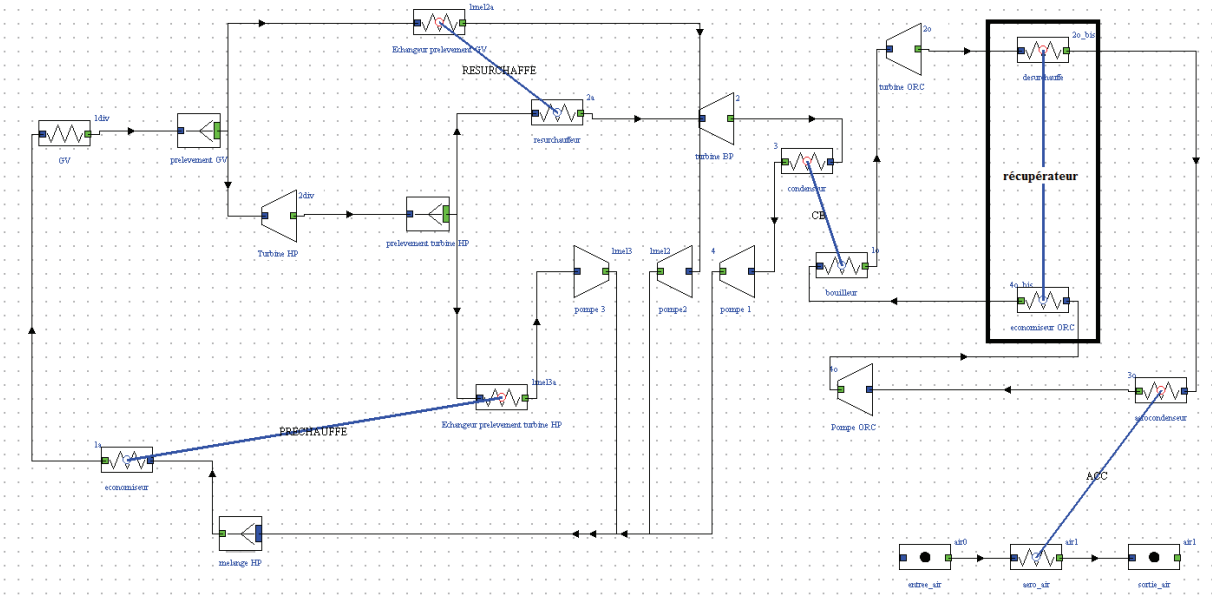


Figure 3.17 Schéma du cycle bi-étagé avec un récupérateur

Tableau 3.12 Comparaison de performance d'un cycle bi-étagé classique et un cycle avec récupérateur à $T_{ext} = 11\ °C$.

STEP (bar)	Rendement du cycle basique	Rendement du cycle avec récupérateur
0.2	0.3886	0.3889
0.3	0.3928	0.3940
0.4	0.3936	0.3951
0.5	0.3933	0.3955
0.6	0.3927	0.3955
0.7	0.3923	0.3955
0.8	0.3915	0.3960
0.9	0.3907	0.3951
1	0.3899	0.3957

Nos études montrent qu'un récupérateur permet éventuellement d'augmenter le rendement du cycle de l'ordre de 0.1% à 0.5% (hors prise en compte des pertes de charge additionnelles liées à l'échangeur supplémentaire). La Figure 3.18 représente le gain énergétique calculé en fonction de la pression de coupure.

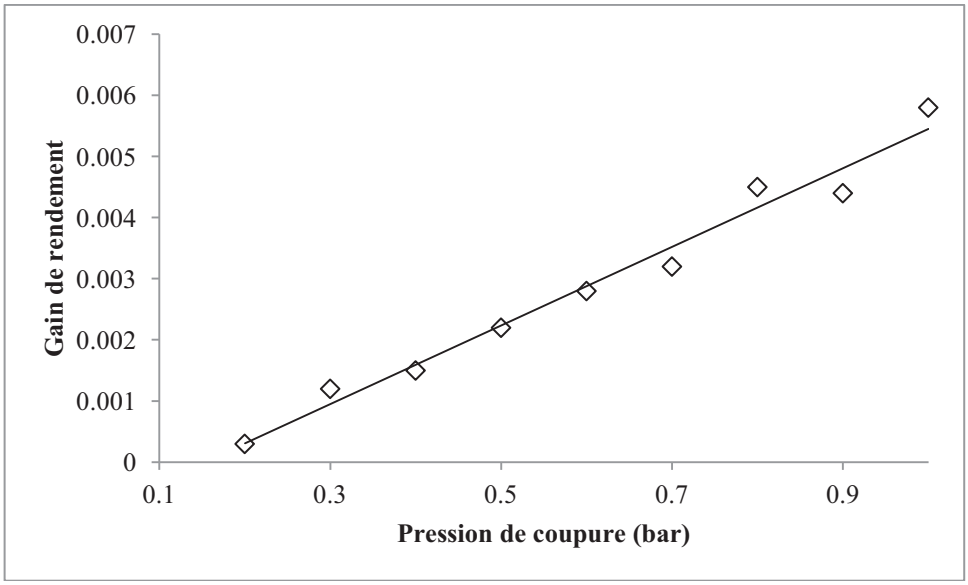


Figure 3.18 Gain de rendement d'un cycle avec récupérateur en fonction de la pression de coupure

En raison du faible gain énergétique en tenant compte tenu de la complexité apportée par un tel échangeur, nous décidons de ne pas rajouter de récupérateur dans le cycle bi-étagé.

3.4.3.4 Conclusion sur les études de sensibilité

Les pincements des échangeurs et le rendement de la turbine influencent l'efficacité du cycle de manière non significative. Ce phénomène résulte de la faible part de la puissance produite dans le cycle ORC, à savoir, de l'ordre de 10 % de la puissance totale. Avec le même raisonnement et en tenant compte de la complexité de la solution à apporter, nous pouvons aussi dire que l'installation d'un récupérateur semble donc peu utile.

3.4.4 Dimensionnement des échangeurs

Suivant les conditions nominales définies au 3.4.1, nous avons réalisé les évaluations de surface d'échange. Les Figure 3.19 et Figure 3.20 présentent les résultats. Nous comparons les surfaces d'échange calculées pour les six fluides.

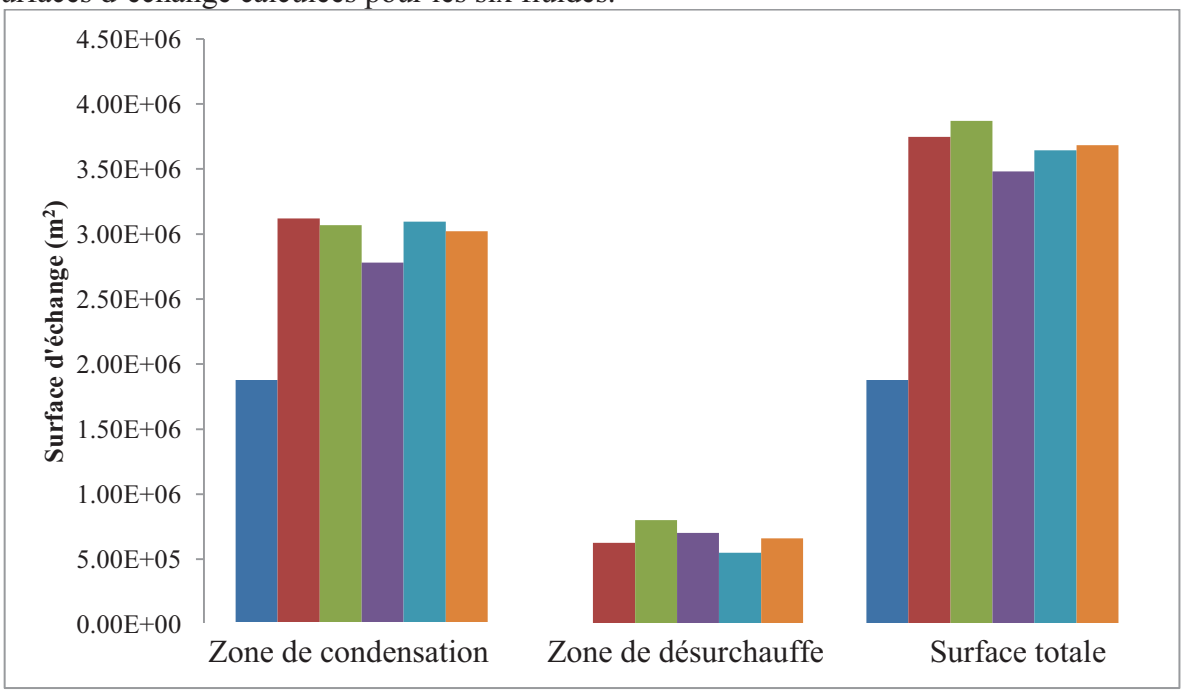


Figure 3.19 Comparaison de surfaces d'échange calculées pour l'aérocondenseur

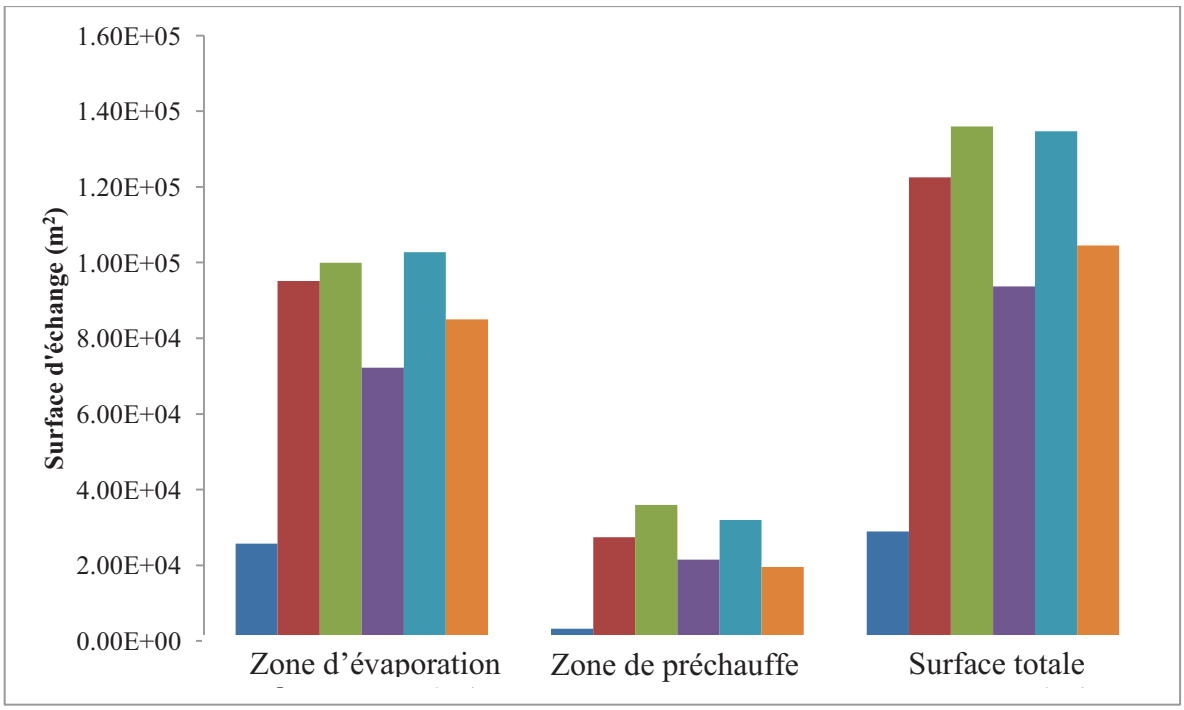


Figure 3.20 Comparaison de surfaces d'échange calculées pour le condenseur-bouilleur

Les surfaces d'échange nécessaires pour les fluides organiques sont beaucoup plus grandes que pour l'ammoniac. Les fluides organiques donnent des résultats tout à fait comparables entre eux.

Pour les aérocondenseurs, la principale résistance aux transferts thermiques provient de la faible capacité de convection de l'air. On observe relativement peu de différence de surfaces d'échange sur ce composant. En revanche, les écarts sont plus prononcés sur le condenseur-bouilleur. En effet, le facteur limitant du transfert thermique dans le condenseur-bouilleur correspond à la capacité convective des fluides organiques, plus faible que celle de l'eau.

3.4.4.1 Discussion sur les résultats obtenus pour l'aérocondenseur

Le Tableau 3.13 présente en détail les résultats des calculs de surface d'échange. L'aérocondenseur de l'ammoniac ne présente pas de zone de désurchauffe. Le titre de l'ammoniac à la sortie de la turbine est 93 %. Le R245fa, le R365mfc, l'isopentane et le R1233zd sortent de la turbine sous forme de vapeur surchauffée. Le coefficient d'échange gaz-gaz étant très faible, la surface d'échange gaz-gaz représente environ 20 % de la surface d'échange totale des fluides organiques.

Tableau 3.13 Calculs de la surface d'échange de l'aérocondenseur

Fluide	Zone de Condensation (m^2)	%	Zone de désurchauffe (m^2)	%	Surface totale caluclée (m^2)
R717	1 876 866	100	0	0	1 876 866
R245fa	3 119 393	83	626 636	17	3 746 029
R365mfc	3 068 367	79	800 276	21	3 868 643
iC5	2 779 869	80	701 861	20	3 481 730
R1233zd	3 095 348	85	548 558	15	3 643 905
R245fa/iC5	3 021 771	82	661 257	18	3 683 028

La surface d'échange pour l'ammoniac est deux fois plus faible que pour les fluides organiques. Pour expliquer cet écart, nous avons analysé les relations entre les propriétés du fluide considéré et le coefficient convectif du fluide.

En effet, lors de l'évaluation du coefficient d'échange, le nombre de Reynolds, le nombre de Prandtl et le nombre de Nusselt ont été évalués. Nous rappelons la relation :

$$U = \frac{\lambda}{D_h} Nu = C \frac{\lambda}{D_h} Re^n Pr^m f = C \frac{\lambda}{D_h} \left(\frac{\rho v D_h}{\mu}\right)^n \left(\frac{C_p \mu}{\lambda}\right)^m f \quad (3.54)$$

f représente le facteur correctif de Shah-Bivens décrivant la condensation dans les conduites tubulaires. Nous rappelons que ce paramètre dépend de la pression réduite (P_r) du fluide dans le condenseur.

Pour la zone de condensation, le coefficient d'échange convectif est proportionnel au Paramètre Métrique Convectif du Condenseur (PMCC) sous la forme :

$$PMCC = \lambda^{0.6} \mu^{-0.4} \rho^{0.8} C_p^{0.4} P_r^{-0.38} \quad (3.55)$$

Le Tableau 3.14 résume les valeurs calculées de ce paramètre en fonction des propriétés du fluide considéré à la condition de condensation.

Tableau 3.14 Evaluation du paramètre métrique convectif condenseur des fluides de travail, à T=40 °C

Fluide	conductivité (W/K/m)	viscosité (Pa.s)	Cp (kJ/kg/K)	vL (m3/kg)	P condensation (bar)	Pc (bar)	PMCC
ammoniac	0.4440	0.0001142	4.93	0.001725	15.49	113.33	15 186
R245fa	0.0751	0.0003105	1.36	0.000755	2.52	36.51	5 252
R365mfc	0.0775	0.0004020	1.41	0.000782	1.00	32.66	6 486
iC5	0.1267	0.0002236	2.35	0.001593	1.51	33.78	6 638
R1233zd	0.0824	0.0003272	1.19	0.000762	2.09	37.72	5 573
R245fa/iC5	0.1186	0.0002731	2.26	0.001464	1.66	33.92	5 988

Ces résultats montrent que l'ammoniac possède une meilleure capacité de transfert de chaleur que les fluides organiques. Cela se traduit par une surface d'échange beaucoup plus petite.

Pour la comparaison entre les fluides organiques, il est plus difficile de conclure. En effet, les écarts de surfaces calculées sont de l'ordre de 10 %. Or, sans considérer de correction expérimentale, nos modèles de prédiction de propriétés de transport peuvent donner des résultats avec une incertitude variant de 5 % à 20 %. Le modèle d'échangeur introduit également une certaine marge d'erreur. Ceci étant dit, le calcul du PMCC reste néanmoins une approche intéressante et permet de donner une première idée des résultats de dimensionnement directement à partir des propriétés thermophysiques du fluide choisi.

Les pertes de charge par frottement dans les aérocondenseurs calculées sont inférieures à 0.1 bar en raison notamment de la très faible vitesse d'écoulement du fluide dans les échangeurs. Ces pertes conditionnent très peu le dimensionnement de l'échangeur.

3.4.4.2 Discussion sur les résultats obtenus pour le condenseur-Bouilleur

Le Tableau 3.15 présente les résultats des calculs de surface d'échange pour le condenseur bouilleur. En effet, le coefficient d'échange du fluide à l'état liquide est très faible devant celui de l'eau liquide. Par conséquent, sa contribution dans la résistance thermique est très significative, d'où la différence très importante entre l'ammoniac et les fluides organiques. Le rapport des surfaces calculées est de l'ordre de 3 à 4.

Tableau 3.15 Répartition de surfaces d'échange des 2 zones

Fluid	Zone d'évaporation (m^2)	%	Zone de préchauffe (m^2)	%	Surface totale (m^2)
R717	25 686	89	3 256	11	2 8942
R245fa	95 111	78	27 383	22	122 494
R365mfc	99 954	74	35 977	26	135 931
iC5	72198	77	21 513	23	93 711
R1233zd	102 774	76	31 955	24	134 729
R245fa/iC5	84973	81	19 520	19	104 493

Nous pouvons réaliser le même type d'analyse de coefficient d'échange qu'au paragraphe 3.4.4.1.

L'expression du Paramètre Métrique Convectif du Bouilleur en Zone Diphasique (PMCBD) pour le fluide à l'intérieur des tubes est légèrement différente de celle du PMCC. En effet, le facteur de correction de Lockhart-Martinelli qui est utilisé pour corriger le coefficient d'échange liquide, s'écrit en fonction des masses volumiques et des viscosités liquide-vapeur du fluide considéré.

Pour la zone d'évaporation, le coefficient d'échange convectif est proportionnel au PMCBD sous la forme :

$$PMCBD = \lambda_L^{0.6}\, Cp_L^{0.4}\, \rho_L^{1.175}\, \rho_V^{-0.375}\, \mu_L^{-0.475}\, \mu_V^{0.075} \qquad (3.56)$$

Le Tableau 3.16 résume les valeurs calculées du PMCB en fonction des propriétés du fluide considéré aux conditions d'évaporation.

Tableau 3.16 Evaluation du paramètre métrique convectif bouilleur des fluides de travail à T = 70 °C pour les fluides organiques et T = 80 °C pour l'ammoniac

	Conductivité W/m/K	Cp (kJ/kg/K)	vL (m3/kg)	vV (m3/kg)	viscosité L (Pa.s)	viscosité V (Pa.s)	PMCBD
Ammoniac	0.324	5.99	0.00202	0.02608	7.40E-05	1.22E-05	15 243
R245fa	0.064	1.45	0.00082	0.03032	2.08E-04	1.36E-05	6 125
R365mfc	0.067	1.48	0.00083	0.06692	2.79E-04	1.21E-05	7 276
iC5	0.111	2.53	0.00170	0.10036	1.62E-04	8.48E-06	7 747
R1233zd	0.073	1.27	0.00082	0.03802	2.28E-04	1.88E-05	6 682
R245fa/iC5	0.106	2.44	0.00157	0.08939	1.86E-04	8.66E-06	7 310

La lecture du Tableau 3.16 nous permet de remarquer que les coefficients de convection des fluides organiques restent assez proches.

En comparant le Tableau 3.15 et Tableau 3.16, nous constatons un point qui peut sembler contradictoire : la surface d'échange du R365mfc calculée est plus grande que la surface d'échange du R245fa et le PMCBD du R365mfc est plus élevé que celui du R245fa. Cela peut être expliqué par la perte de charge qui intervient dans le calcul du condenseur-bouilleur. Nous avons fixé une limite de perte de charge à partir des données du condenseur-bouilleur du projet Cybiam. La perte correspond à 1.5 bar pour une pression d'évaporation de 36 bar, soit un rapport de 1.5/36. Nous conservons ce rapport par la suite pour le dimensionnement condenseur-bouilleurs.

En raison de la plus faible pression d'évaporation du R365mfc dans le condenseur-bouilleur ($P_{évap} = 4\ bar$), la perte de charge limite est deux fois plus faible que celle du R245fa ($P_{évap} = 8.9\ bar$). Les limites de perte de pression sont de :

- 0.37 bar pour le R245fa,
- 0.16 bar pour le R365mfc.

Le volume massique du R365mfc liquide est comparable à celui du R245fa. Par contre, il est deux fois plus élevé à l'état vapeur. Cela signifie que l'écoulement du R365mfc devient plus important que celui du R245fa après évaporation. Cela induit plus de perte de charge par frottement.

En combinant les éléments évoqués ci-dessus, nous pouvons conclure que le R365mfc a besoin d'un plus grand nombre de tubes afin de limiter sa vitesse d'écoulement et réduire sa perte de pression. La surface d'échange nécessaire devient donc beaucoup plus importante.

Pour quantifier l'influence de l'incertitude des propriétés de transport sur la surface d'échange calculée, notamment la conductivité thermique du fluide qui est directement proportionnelle au coefficient d'échange, nous avons réalisé une étude de sensibilité en considérant le R245fa comme fluide de travail. Nous faisons varier la conductivité thermique du fluide entre -40 et +40%. La Figure 3.21 présente les résultats de calculs. L'influence sur la surface d'échange du condenseur-bouilleur calculée reste limitée, en raison de la contribution du coefficient convectif de l'eau et du coefficient de transfert de paroi qui ne changent pas. Si nous considérons la même étude pour l'aérocondenseur, l'impact est encore plus faible à cause de la forte résistance thermique de l'air.

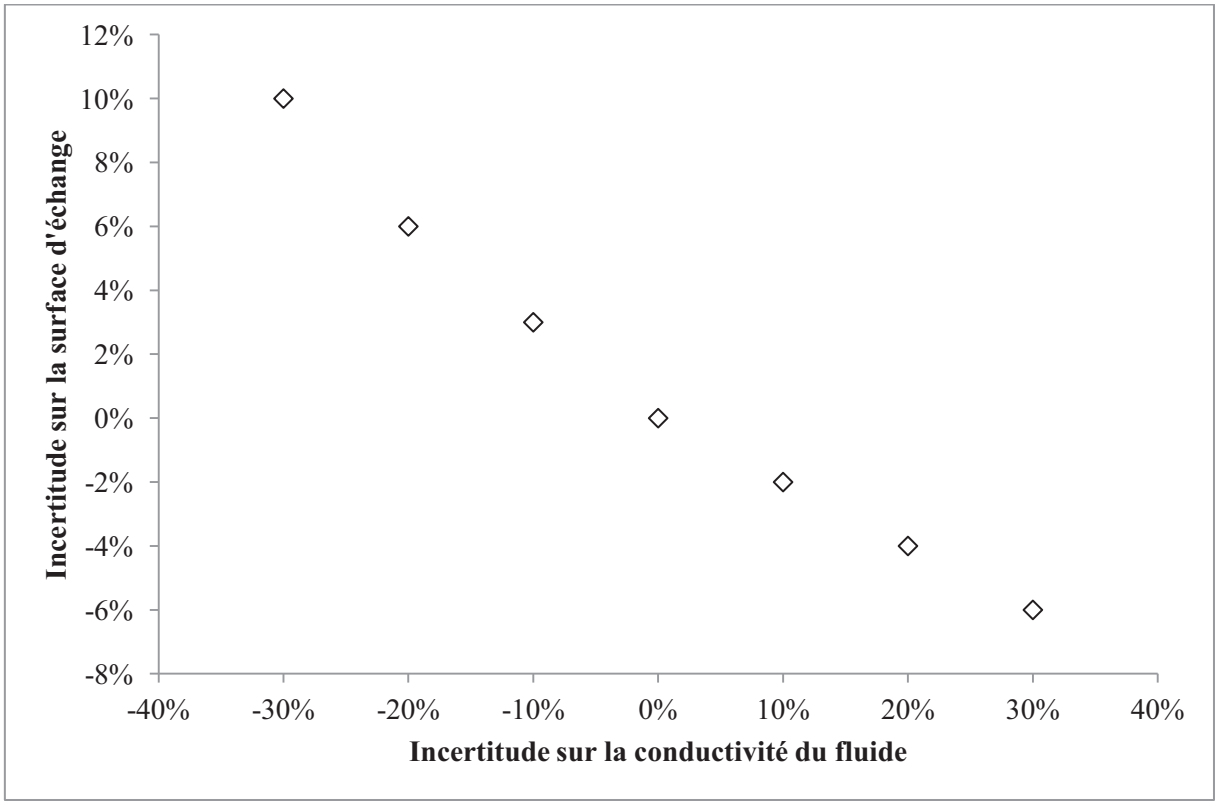


Figure 3.21 Etude de sensibilité de la conductivité du fluide de travail.

3.4.5 Résultats du dimensionnement de la turbine

Le dimensionnement de la turbine ORC est réalisé avec le logiciel GTDT. Le Tableau 3.17 présente les résultats de calculs pour les six fluides.

Tableau 3.17 Résultats des calculs de turbine ORC

	R717	R245fa	R365mfc	iC5	R1233zd	R245fa/iC5
Vitesse de rot. (tr/min)	3000	1500	1000	1500	1500	1500
Nb d'unités	1	6	6	4	6	4
Puissance (MWe)	93.47	11.24	12.06	18.23	12.41	16.04
Diamètre (m)	1.22	1.70	2.78	2.55	1.70	2.09

Les résultats montrent encore une fois l'avantage de l'ammoniac par rapport aux trois fluides organiques :

- la vitesse de rotation de la turbine est plus élevée (3 000 tr/min au lieu de 1 000-1 500 tr/min pour les composés organiques),
- le diamètre de la dernière roue est également deux fois plus faible,
- le nombre d'unités de turbine nécessaire est plus faible.

Ces différences constatées peuvent être expliquées par l'influence combinée de trois propriétés des fluides choisis : **la chaleur latente, la vitesse du son et le volume spécifique**.

En effet, comme montre le Tableau 3.18, la chaleur latente de l'ammoniac est environ 5 fois supérieure à celle des fluides organiques. Un débit plus grand est alors nécessaire dans l'ORC pour produire la même puissance souhaitée. Or la vitesse du son des fluides organiques est 2 fois inférieure à celle de l'ammoniac. Cela limite le débit volumique pouvant traverser une turbine. Ces conditions expliquent l'avantage indiscutable de l'ammoniac.

Tableau 3.18 Propriétés des fluides impactant le dimensionnement de la turbine

	Ammoniac	R245fa	R365mfc	Isopentane	R1233zd
Chaleur latente à l'évaporation (kJ/kg)	938	160	172	307	166
Vitesse du son à la sortie de la turbine (m/s)	404	137	134	191	140
Volume massique (m^3/kg)	0.083*	0.074	0.18	0.23	0.093

* la valeur du volume massique de l'ammoniac est calculée par RefProp.

En comparant les résultats de pré-dimensionnement des turbines fonctionnant avec les fluides organiques, nous constatons que le R365mfc semble le moins intéressant. En effet, en raison de son volume spécifique relativement élevé, le diamètre maximal de la turbine R365mfc est le plus grand. Dans les études à suivre, nous décidons donc de travailler uniquement avec les fluides suivants : le R245fa, l'isopentane, le R1233zd, le mélange R245fa/isopentane et l'ammoniac.

3.4.6 Performance du cycle en régime non nominal

La performance du cycle bi-étagé en régime non nominal a été évaluée pour des températures extérieures comprises entre -17.5 et 40 °C. Les calculs ont été faits avec un pas de 2.5 °C.

La Figure 3.22 présente l'allure de la variation des performances des cycles bi-étagés en fonction de la température de la source froide. Il faut noter que dans le cas d'un cycle vapeur sans ORC, pour une température extérieure inférieure à 2.5 °C, la performance chute rapidement à cause de l'impact croissant des pertes cinétiques de la turbine. Par conséquent on suppose qu'une centrale vapeur à condensation à air bénéficierait d'une gestion du débit d'air qui permettant de maintenir la basse pression lorsque la température extérieure varie. Ceci se traduit donc par une performance constante pour une température extérieure inférieure à 2.5 °C.

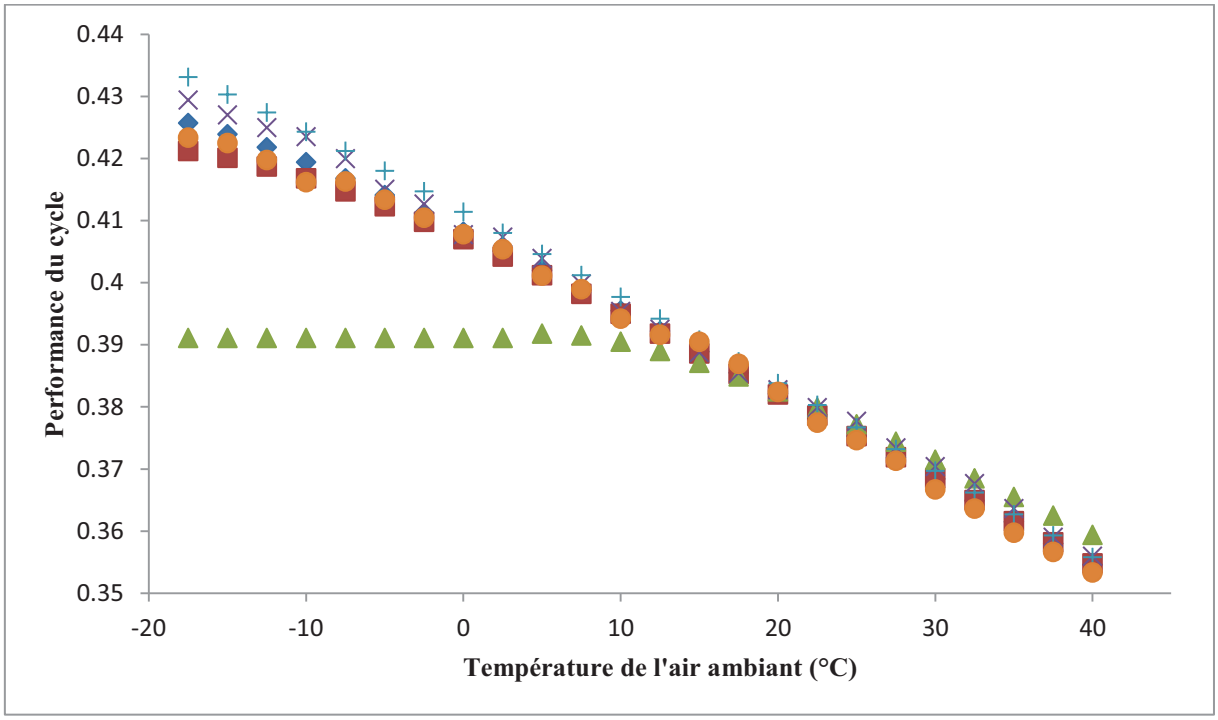


Figure 3.22 Performances du cycle calculées en régime non nominal pour différents fluides de travail ◆R245fa ■iC5 ▲eau ×R1233zd +NH3 ●R245fa+iC5

Nos simulations confirment la constatation principale faite dans le chapitre 1 : en raison de la perte cinétique de l'eau très importante à basse pression, le gain énergétique devient inexistant pour les températures négatives. En revanche, les fluides plus denses que l'eau, comme le R245fa, l'isopentane, le R1233zd et l'ammoniac, permettent d'avoir une surpuissance à très basse température. Cette amélioration commence à se faire sentir à partir d'une température de l'ordre de 5 °C, qui représente environ 1.5 point de performance augmentée par rapport à un cycle classique à vapeur. Pour éviter d'avoir une perte cinétique trop importante, nous maintiendrons artificiellement la basse pression du cycle classique à vapeur à partir de la température négative. Nous observons également que le R245fa et le R1233zd présentent une meilleure performance à très basse température par rapport à l'isopentane. Ceci est principalement du à leur volume spécifique massique en phase vapeur qui est plus petit que celui de l'isopentane. C'est d'ailleurs, la raison pour laquelle nous observons une légère

amélioration de rendement à basse température pour le mélange R245fa/isopentane par rapport à l'isopentane pur.

En revanche, lorsque la température de la source froide devient assez élevée, la tendance s'inverse. Cela signifie que le site de production doit se situer dans une zone climatique assez froide. Dans certaines régions du monde comme les zones près de l'équateur par exemple, le cycle bi-étagé ne présente pas de gain énergétique.

Les performances évaluées précédemment permettent d'obtenir l'énergie produite par le cycle sur une période de temps donnée. Nous avons réalisé l'exercice avec les données météorologiques d'une année type de la région parisienne afin de considérer un cas moyen français. Le Tableau 3.19 présente les données avec lesquelles nous avons réalisé les calculs de gain énergétique annuel.

Tableau 3.19 Données météorologiques de la région parisienne (station Aéroport Charles de Gaulle) (Ashrae 2013)

T (°C)	Fréquence (h/an)
-17.5	0.20
-15.0	0.64
-12.5	3.15
-10.0	9.44
-7.5	20.09
-5.0	65.59
-2.5	157.29
0.0	458.50
2.5	562.38
5.0	908.59
7.5	971.36
10.0	1256.76
12.5	1038.79
15.0	1132.63
17.5	782.71
20.0	626.57
22.5	339.26
25.0	238.40
27.5	105.33
30.0	58.55
32.5	16.96
35.0	5.43
37.5	1.32
40.0	0.04

Tableau 3.20 L'énergie produite sur une année type de la région parisienne

	Cycle à vapeur	Cycle bi-étagé à ammoniac	Cycle bi-étagé R245fa	Cycle bi-étagé iC5	Cycle bi-étagé R1233zd	Cycle bi-étagé R245fa/iC5
Energie produite (GWh/an)	5626	5709	5677	5670	5687	5676
Gain par rapport à un cycle à vapeur	-	1.48%	0.91%	0.78%	1.08%	0.89%

Le Tableau 3.20 présente le gain énergétique du cycle bi-étagé par rapport à une centrale classique. Le cycle bi-étagé permet une amélioration de production d'environ 1 % à 1.5 %. L'ammoniac reste supérieur aux fluides organiques en terme de performance énergétique. Parmi les fluides organiques, le fluide R1233zd présente un gain assez intéressant. A cause de son volume spécifique en phase vapeur plus grand, l'isopentane présente un gain plus faible.

3.5 Conclusion

Le choix des fluides de travail est primordial dans notre étude. Cependant, en comparaison des autres études existantes sur les ORC, l'impact du choix du fluide sur la performance du cycle bi-étagé reste relativement faible. Cela est dû au fait que 90 % de la puissance demandée est toujours produite par le cycle à vapeur, et seulement 10 % par l'ORC.

En revanche, le choix du fluide est déterminant pour la taille des composants. De ce point de vue, les principaux paramètres thermophysiques d'influence sont :

- la chaleur latente qui a un impact sur le débit du cycle
- le volume spécifique qui a un impact sur la taille des échangeurs et la perte cinétique de la turbine
- les propriétés de transport qui ont un impact sur la taille des échangeurs.

Au contraire, les propriétés telles que la température critique ou la pression critique qui influencent principalement le rendement du cycle jouent un rôle secondaire.

Cinq fluides organiques candidats ont été choisis suite à l'évaluation de performance du cycle bi-étagé au point nominal: le R245fa, le R365mfc, l'isopentane, le R1233zd et le mélange R245fa/Isopentane. L'ammoniac a été choisi comme fluide de référence. Ils constituent la base des fluides de test pour le dimensionnement des composants du cycle bi-étagé. Le condenseur-bouilleur et l'aérocondenseur ont été modélisés. Les modèles ont été validés par rapport à des données relatives à des échangeurs existants. Le dimensionnement de la turbine a été fait avec le logiciel GTDT.

Les calculs de dimensionnement montrent un net avantage de l'ammoniac par rapport aux fluides organiques :

- La surface d'échange d'un condenseur-bouilleur à fluide organique est 3-4 fois plus grande qu'un condenseur-bouilleur à l'ammoniac.
- La surface d'échange d'un aérocondenseur à fluide organique est 2 fois plus grande qu'un aérocondenseur à l'ammoniac.

- La turbine à ammoniac est également la plus compacte.

Le R365mfc, le moins performant en terme de compacité, est exclu de la compétition.

En raison, des composants plus grands qu'avec l'ammoniac, les investissements initiaux du cycle bi-étagé organique peuvent éventuellement être plus élevés. Par conséquent, le gain de production annuel devient un facteur important qui permet de justifier l'intérêt de cette technologie. Les cycles bi-étagés précédemment définis ont été modélisés en régime non-nominal. La production d'électricité annuelle a été calculée en considérant un climat français type. Le gain énergétique annuel est de l'ordre de 1 à 1.5 % par rapport à un système classique.

Actuellement, les fluides organiques identifiés pour notre application sont le R245fa, l'isopentane, le R1233zd et le mélange R245fa/Isopentane qui présentent des performances relativement satisfaisantes. En terme de taille des composants, ces fluides sont tous beaucoup moins performants que l'ammoniac. Cependant, nous sommes toutefois optimistes : les résultats des tests du R1233zd, développé très récemment par Honeywell, sont tout à fait encourageants. Si de nouveaux fluides deviennent disponibles dans un futur proche, l'outil et la démarche que nous avons construits dans le cadre de notre projet de thèse permettront de les tester et de choisir le meilleur candidat.

Après avoir dimensionné les composants du cycle et évalué le gain énergétique du cycle bi-étagé, nous allons nous intéresser dans le chapitre 4 aux aspects économiques du système.

Chapitre 4 Etude économique du cycle de production d'électricité bi-étagé

Ce chapitre est consacré à l'étude économique du cycle bi-étagé. Nous nous intéressons d'une part aux coûts des différents composants dimensionnés dans le chapitre précédent. D'autre part, nous quantifions le gain énergétique du système sur des années différentes. A partir de la surpuissance annuelle produite et de l'éventuel surcoût du système, nous évaluons le coût de production d'électricité pour le cycle bi-étagé. Nous étudions également le gain en chiffre d'affaire annuel à partir des données de prix de vente de l'électricité pour différents sites de production en France. Nous en déduisons les bénéfices engendrés par l'utilisation du cycle bi-étagé. Enfin, nous étendons notre étude à l'Europe pour observer l'influence de la zone climatique sur les gains du cycle bi-étagé.

4.1 Coût d'investissement et coût de la production du cycle bi-étagé.

Les calculs de dimensionnement réalisés précédemment nous ont permis de comparer la compacité des différents composants selon le fluide choisi. Pour les calculs de coût d'investissement, les cycles bi-étagés doivent être comparés au cycle à vapeur classique d'architecture comparable. Cependant nous ne disposons pas de toutes les données économiques sur le cycle SPX considéré : notamment certains composants du cycle à vapeur et le coût du génie civil. La comparaison doit donc se faire de manière indirecte.

Dans le cadre du projet Cybiam, un exercice d'évaluation économique a été effectué sur une centrale REP de 1300 MW et une centrale Cybiam de même puissance. Les éléments suivants ont été considérés dans les calculs de coût :

- Coût total des turbo-alternateurs
- Coût du condenseur bouilleur
- Coût de l'aérocondenseur
- Coût de la salle des machines incluant le coût du génie civil et la charpente

Les résultats ont montré que l'investissement total dans un cycle Cybiam est similaire à un cycle classique. La différence est de l'ordre de 2 % (source EDF).

Ainsi, nous faisons l'hypothèse suivante : le coût du cycle SPX bi-étagé à l'ammoniac reste équivalent au cycle SPX classique à vapeur.

4.1.1 Calculs des coûts de composants

Les corrélations de coût du condenseur-bouilleur et de la turbine sont issues des travaux du groupe Nouvelles Filières de Production et Thermochimie, Département Mécaniques des fluides, Energie et Environnement, EDF R&D. Les paramètres de ces corrélations ont été ajustés à partir des données de l'IFP (Institut Français de Pétrole) de 2010.

Les paramètres de la corrélation de coût de l'aérocondenseur ont été ajustés à partir des données de l'EPRI de 2010 (Stalling et Maulbetsch 2012).

Notons que l'évaluation économique de coûts des composants est un calcul assez délicat et comportant de très grandes incertitudes. Typiquement, l'incertitude sur les coûts en phase d'avant projet peut atteindre 30 % (Le-Moullec 2012). C'est la raison pour laquelle lorsque nous présentons les résultats, nous avons choisi de les chiffrer en valeur relative par rapport au coût des composants du cycle à l'ammoniac.

4.1.1.1 Corrélation du coût de la turbine

La corrélation présentée dans l'équation 4.1 est valable pour une puissance électrique comprise entre 2 et 500 MW. L'unité de coût est €.

$$C_{[€]} = 8300\ P^{0.62}\ d^{0.97} \qquad (4.1)$$

P : puissance de la turbine en kW
d : diamètre maximal de la turbine en m

4.1.1.2 Corrélation du coût du condenseur-bouilleur

La corrélation est valable pour un échangeur du type à tubes et calandres. Le coût de cette installation dépend notamment de son niveau de température et de la pression d'application.

$$C_{[€]} = \frac{555}{394} f_m f_T f_P f_{passe} (1655\ A^{0.6057}) \quad (4.2)$$

A : surface d'échange de l'échangeur en m^2,
f_T : coefficient lié à la température*,
f_P : coefficient lié à la pression de service*,
f_m : coefficient lié aux matériaux*,
f_{passe} : coefficient lié au nombre de passes*.
* *Coefficients confidentiels*

4.1.1.3 Corrélation du coût de l'aérocondenseur

La corrélation est valable pour un échangeur à air du type tirage forcé. Le coût calculé inclut le coût des ventilateurs et de leur système de motorisation.

$$C_{[€]} = 24\ A \quad (4.3)$$

A : surface d'échange de l'échangeur en m^2 (côté air)

4.1.1.4 Résultats des évaluations des coûts de composants

Nous considérons les résultats de calculs de dimensionnement présentés dans le chapitre 3. Les Figure 4.1 - Figure 4.3 représentent respectivement les coûts relatifs des turbines, des condenseurs-bouilleurs et des aérocondenseurs.

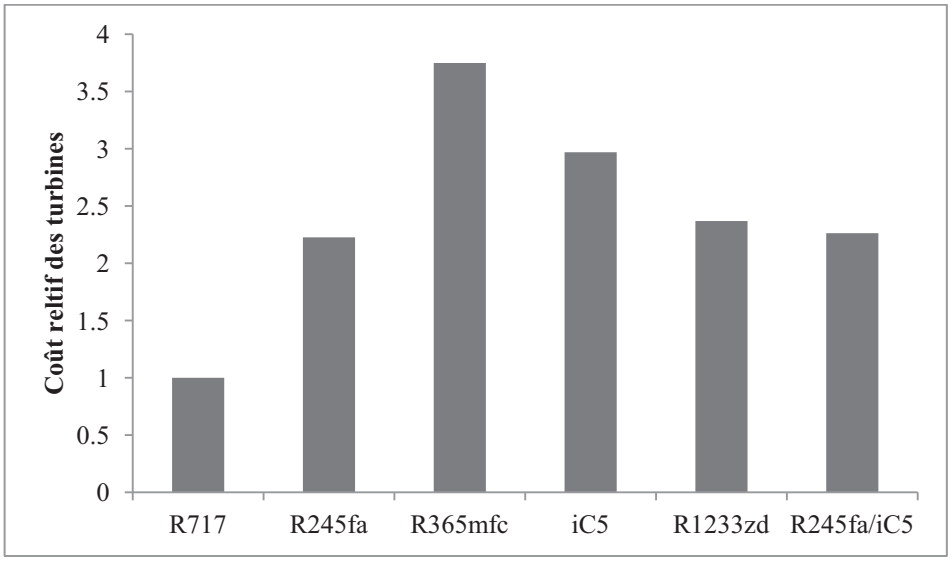


Figure 4.1 Coûts relatifs des turbines par rapport à la turbine à l'ammoniac évalué à 12 M€

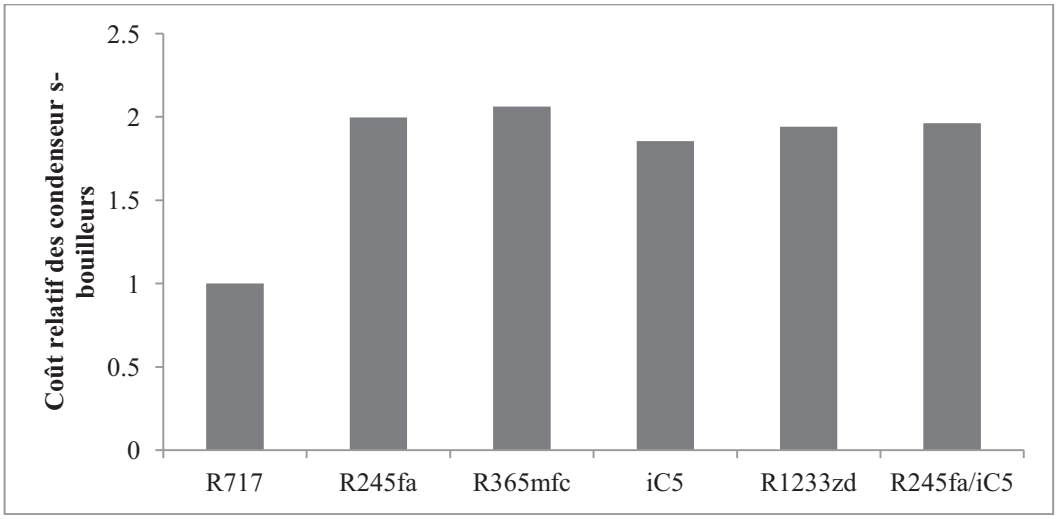


Figure 4.2 Coûts relatifs des condenseurs-bouilleurs par rapport au bouilleur à l'ammoniac évalué à 1.7 M€

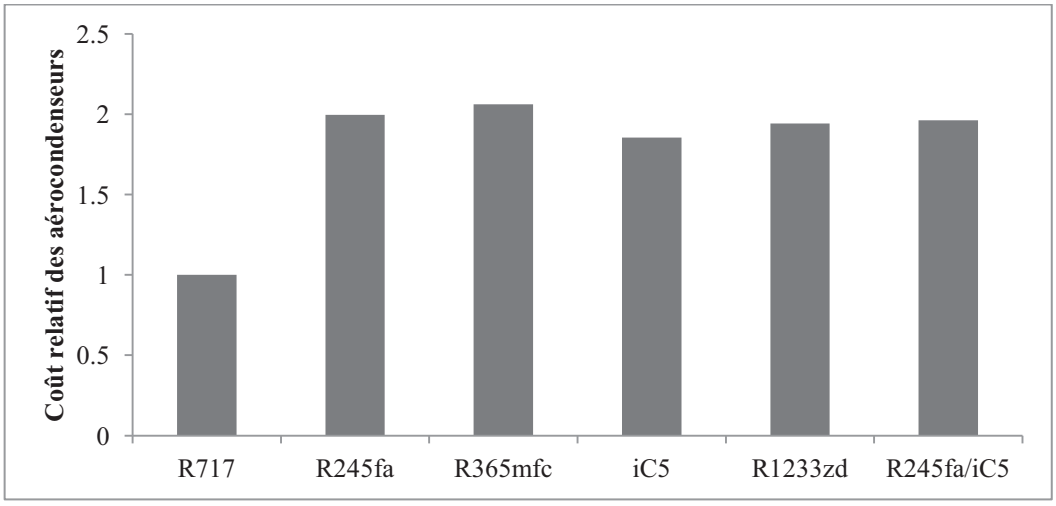


Figure 4.3 Coûts relatifs des aérocondenseurs par rapport à l'aérocondenseur à l'ammoniac évalué à 45 M€

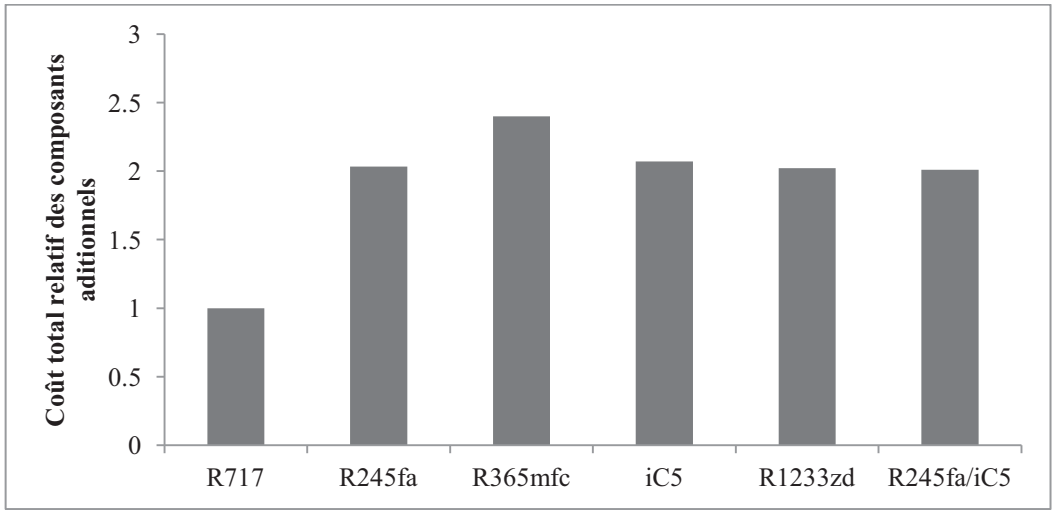


Figure 4.4 Coûts totaux relatifs des trois composants additionnels par rapport au système bi-étagé à l'ammoniac

En terme de coût d'investissement, les fluides organiques sont beaucoup moins compétitifs que l'ammoniac. Le coût total pour les trois composants additionnels a été au minimum multiplié par 2 dans le cas d'un fluide organique. Particulièrement pour le R365mfc, le coût de la turbine ORC est 4 fois plus élevé que pour l'ammoniac. Cela justifie le fait que nous l'avons exclu de la liste des fluides candidats suite au dimensionnement. En revanche, les autres fluides présentent des coûts de composants très similaires entre eux.

4.1.2 Coût de la production d'électricité du cycle bi-étagé

Pour approfondir notre analyse et tenter d'estimer le coût, nous cherchons à raisonner en terme de coût moyen actualisé de production ou Levelised Cost of Energy (LCOE).

$$LCOE = (CAPEX + \sum_{i=1}^{N} \frac{OPEX_i}{(1+r)^i}) / \sum_{i=1}^{N} \frac{E_i}{(1+r)^i} \quad (4.4)$$

LCOE est le coût moyen actualisé de la production, en €/MWh,
CAPEX (Capital Expediture) représente l'investissement initial du système, en €,
OPEX (Operating Expense) représente les dépenses annuelles pour le maintien en fonctionnement du système, en €,
E est la production annuelle d'électricité, en MWh,
N est la durée de vie du système,
r est le taux d'actualisation.

Dans le cadre notre étude, nous ne disposons pas de toutes les données nécessaires pour réaliser une évaluation complète du LCOE.

En effet, les calculs de coût réalisés pour les composants additionnels ne représentent qu'une partie de l'investissement initial. Par exemple, le coût de génie civil et le coût des composants du cycle à vapeur ne sont pas encore connus.

En revanche, nous avons fait l'hypothèse que le coût d'un cycle bi-étagé à ammoniac est équivalent à un cycle à vapeur : ceci est justifié par des études EDF antérieures. Par conséquent, la différence du coût des composants additionnels entre un cycle à fluide organique et un cycle à ammoniac représente le surcoût du cycle bi-étagé par rapport au cycle à vapeur classique. Ce surcoût est dit « minoré ». En effet, le cycle bi-étagé à ammoniac est le plus compact parmi les systèmes bi-étagés testés. Si les coûts de la salle machine et de génie civil viennent compléter l'analyse dans le futur, ce surcoût ne pourra qu'augmenter. Ainsi, le surcoût du cycle bi-étagé à fluide organique par rapport à un cycle vapeur est évalué à environ 60 millions d'euros.

D'autre part, nous ne pouvons pas anticiper le coût de maintenance du système qui doit comprendre notamment le coût de recharge de fluide. Il ne sera pas considéré dans les calculs économiques qui suivent.

Nous avons évalué les surplus de production d'électricité pour les différents fluides de travail par rapport à un cycle classique. Le gain énergétique annuel moyen à Paris a été évalué à 61 GWh pour le R1233zd(E) représentatif des fluides organiques. Nous supposons que la durée de vie est de 40 ans et le taux d'actualisation de 8 %.

Récapitulons les hypothèses et les données dont nous disposons pour le calcul de coût de production :

- Pas de surcoût pour un cycle bi-étagé à ammoniac ;
- Le surcoût d'un cycle bi-étagé à fluide organique est de 60 M€ ;
- Le coût de maintenance est négligé ;
- La surproduction est de 61 GWh /an ;
- La durée de vie du système est 40 ans ;
- Le taux d'actualisation est 8%.

Nous définissons un coût moyen actualisé marginal minoré par :

$$\Delta LCOE = \Delta CAPEX / \sum_{i=1}^{N} \frac{\Delta E}{(1+r)^i} \quad (4.5)$$

ΔLCOE est le coût moyen actualisé marginal minoré en €/MWh. Il représente le coût minimal pour produire le surplus de l'électricité dans le cycle bi-étagé.
ΔCAPEX est le surcoût minimal dû aux rajouts des composants additionnels, en €.
ΔE est le surplus de la production d'électricité pour une année type, en MWh,
N est la durée de vie du système,
r est le taux d'actualisation.

En appliquant les données numériques du corps d'hypothèses, nous obtenons le coût pour le surplus d'électricité produite :

$$\Delta LCOE = 76.62 \text{ €} / MWh$$

Or l'ordre de grandeur du coût de la production d'électricité du nucléaire historique est 49.5 € / MWh (Cours des Comptes 2012).

Le coût moyen du cycle bi-étagé peut s'écrire de la manière suivante :

$$LCOE_{bi\text{-}étagé} = (LCOE_{nucléaire} E_{vapeur} + \Delta LCOE \Delta E) / (E_{vapeur} + \Delta E) \quad (4.6)$$

$LCOE_{bi\text{-}étagé}$ est le coût moyen actualisé de la production pour le cycle bi-étagé, en €/MWh ;
$LCOE_{nucléaire}$ est le coût moyen de production d'électricité du nucléaire, supposé égal à 49.5 € / MWh ;
E_{vapeur} est l'énergie produite par un cycle à vapeur Super Phénix sur une année type, en MWh ;
ΔLCOE est le coût moyen actualisé marginal minoré en €/MWh ;
ΔE est le surplus de la production d'électricité pour une année type, en MWh.

Nous obtenons pour le R1233zd représentatif des fluides organiques :

$$LCOE_{bi-étagé} = 49.79 \text{ €} / MWh$$

Avec la même méthode de calcul, sa valeur est 48.96 € / MWh pour le cycle à ammoniac.

Nous constatons que le coût de production du cycle bi-étagé calculé et le coût de la production d'électricité du nucléaire sont proches (de l'ordre de 50 €/MWh). En revanche, il est très difficile à ce stade d'en tirer une conclusion définitive sur l'intérêt économique du cycle bi-étagé. Cette évaluation n'est que préliminaire et nécessite d'être complétée et approfondie.

4.2 Estimation du chiffre d'affaire lié à la vente d'électricité 2012-2013 pour un site représentatif du climat français

En raison du coût des composants plus élevé, le chiffre d'affaire annuel ou le revenu annuel de la vente d'électricité du cycle bi-étagé joue un rôle plus crucial. Dans ce paragraphe, nous avons réalisé les calculs économiques à partir :

- Des données météorologiques horaires mesurées à Paris entre février 2012 et février 2013.
- Des données du prix d'électricité de la bourse d'électricité Européenne (EPEX Spot) sur la même période avec un pas de temps d'une heure.

4.2.1 Données météorologiques

Les données météorologiques récentes de la station Montsouris sont mises à disposition publique sur le site internet du US DOE (le département de l'énergie des Etats Unis). Elles sont collectées toutes les heures et permettent donc un calcul assez fin. En revanche, il manque quelques données sur certains jours. Ainsi, du 12/02/2012 au 12/02/2013, les données horaires sont disponibles sur les périodes :

- 12/02/2012-17/04/2012
- 19/04/2012-22/04/2012
- 25/04/2012-18/05/2012
- 20/05/2012-06/07/2012
- 09/07/2012-21/12/2012
- 18/01/2013-21/01/2013
- 22/01/2013-12/02/2013

Les évaluations de performance sont donc réalisées sur ces heures disponibles.

Par ailleurs, les données météorologiques de l'année 2012-2013 indiquent que le temps a été relativement doux en comparaison avec les données de l'année type utilisée dans le chapitre 3 :

- La température moyenne journalière est restée au dessus 15 °C jusqu'au mois de novembre (Figure 4.7)
- La température la plus froide considérée ne tombe pas en-dessous de -10 °C

A priori, le gain énergétique doit donc être inférieur aux résultats obtenus précédemment.

4.2.2 Données de la bourse d'électricité Européenne

Les données de la bourse d'électricité sont modélisées par European Electricity Index (ELIX). Ce dernier est calculé sur la base des courbes de l'offre et la demande de tous les secteurs du marché EPEX Spot selon les règles des enchères valides pour les zones de marché considérées. Actuellement, les zones de marché EPEX Spot comprennent l'Allemagne, la France, l'Autriche et la Suisse. Ces zones de marché couvrent 36 % de la consommation

européenne totale d'électricité. La valeur d'ELIX indique le prix horaire de l'électricité dans ces zones de marché. Les prix sont affichés en €/MWh. Ces données correspondent bien à nos besoins de l'évaluation du chiffre d'affaire de la vente d'électricité en France. De plus, il permet également de représenter de manière approchée la situation du marché d'électricité européen. Nous avons collecté les données de prix sur les périodes indiquées dans le paragraphe 4.2.1. Contrairement à la variation de température, la variation de prix peut être brutale. Par exemple, dans la Figure 4.6, entre le 20/05/2012 et le 06/07/2012, le prix a atteint 190 €/MWh avant de retomber à moins de 50 €/MWh.

4.2.3 Evaluation du revenu de la vente d'électricité

En considérant les données météorologiques sur les différentes périodes de l'année 2012-2013, nous avons évalué les performances non nominales des cycles bi-étagés. Cela nous a permis de calculer la production d'électricité en MWh. La connaissance du prix de l'électricité en €/MWh donne au final le chiffre d'affaire de la vente d'électricité sur la période visée. Les paragraphes suivants synthétisent les données d'entrée et les résultats de calculs en terme d'énergie produite et de revenus de vente.

Le cycle classique à vapeur d'eau est le cycle de référence dans ces calculs, représenté par « Eau » dans les tableaux.

Le gain énergétique est défini par :

$$Gain\ énergétique = (E_{bi\text{-}étagé} - E_{vapeur}) / E_{vapeur}$$

$E_{bi\text{-}étagé}$ est la production d'électricité par le cycle bi-étagé, en GWh ;
E_{vapeur} est la production d'électricité par le cycle à vapeur, en GWh .

Le gain économique est défini par :

$$Gain\ économique = (V_{bi\text{-}étagé} - V_{vapeur}) / V_{vapeur}$$

$V_{bi\text{-}étagé}$ est le revenu annuel de la vente de l'électricité produite par le cycle bi-étagé , en M€ ;
V_{vapeur} est le revenu annuel de la vente de l'électricité produite par le cycle à vapeur, en M€.

Par ailleurs, nous présenterons dans la suite les résultats de calcul pour les périodes 20/05/2012-06/07/2012, 09/07/2012-21/12/2012, 22/01/2013-12/02/2013, ainsi que les résultats globaux pour l'année. Les résultats pour les autres périodes sont consultables en annexe 7.5.

4.2.3.1 Résultats sur la période 20/05/2012-06/07/2012

Sur la période 20/05/2012-06/07/2012, la température de la source froide devient de plus en plus élevée. La performance du cycle bi-étagé diminue. Nous observons donc des pertes énergétiques sur certains cycles par rapport au cycle classique. Le Tableau 4.1 présente les résultats obtenus des gains énergétique et économique.

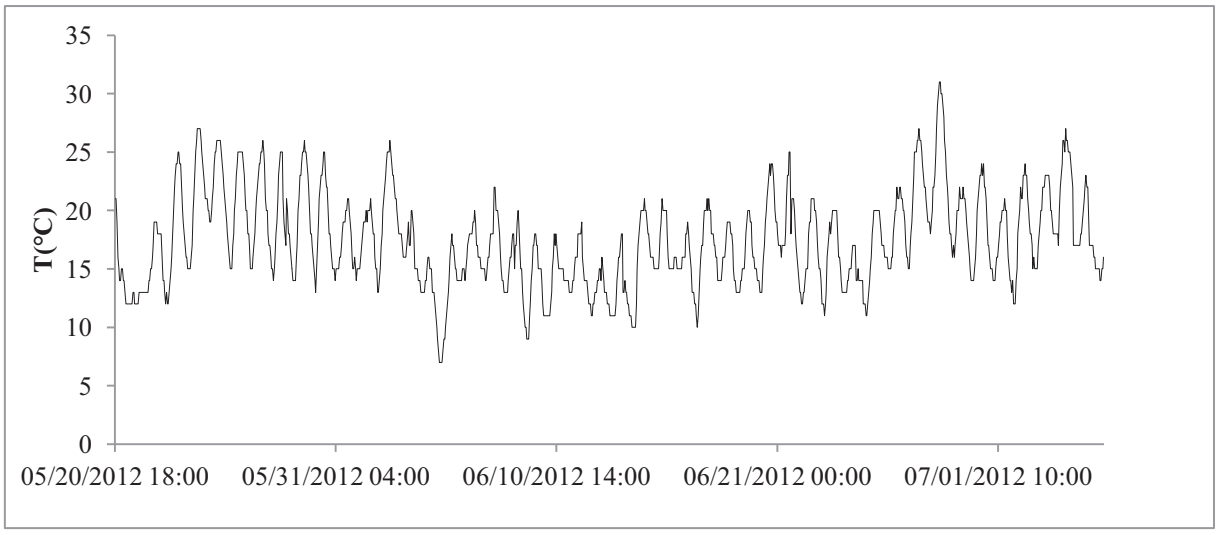


Figure 4.5 Variation de la température de l'air par heure (période 20/05/2012-06/07/2012)

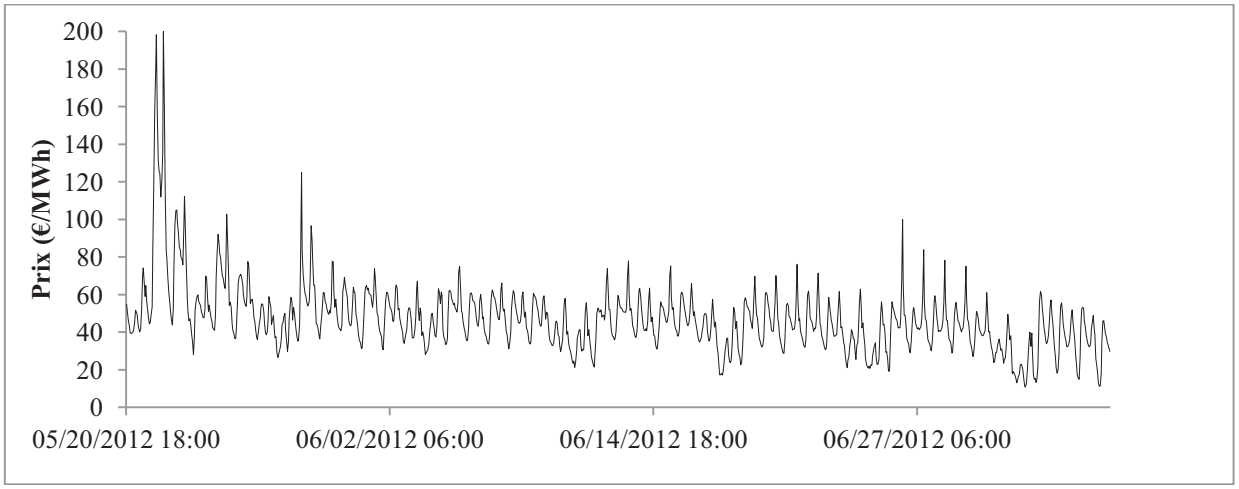


Figure 4.6 Variation de prix (European Electricity Index) (période 20/05/2012-06/07/2012)

Tableau 4.1 Gain énergétique et économique des cycles bi-étagés (période 20/05/2012-06/07/2012) par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (MWh)	Gain énergétique (%)	Vente (M€)	Gain économique (%)
R245fa	698 354	-0.04	32.91	-0.02
iC5	698 087	-0.08	32.90	-0.06
R1233zd	699 421	0.12	32.96	0.13
NH3	701 468	0.41	33.06	0.42
R245fa+iC5	698 175	-0.06	32.90	-0.06
Eau	698 612	-	32.92	-

4.2.3.2 Résultats sur la période 09/07/2012-21/12/2012

Sur la période 09/07/2012-21/12/2012, la température moyenne journalière est restée au dessus de 15 °C jusqu'au mois de novembre. Puis elle est descendue de 5 à 10 °C. Ces jours froids permettent de rattraper la production perdue en été. Le prix de l'électricité a commencé à légèrement augmenter en cette période. Nous observons un pic de demande qui se situe à mi-décembre correspondant au minimum de température mesurée. Le gain économique est légèrement supérieur au gain énergétique.

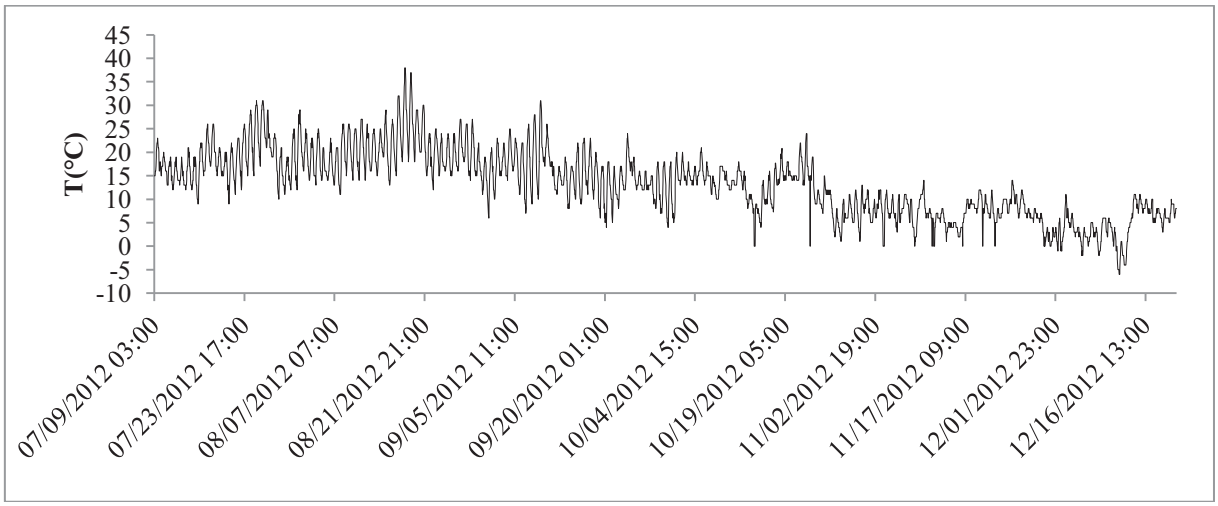


Figure 4.7 Variation de la température de l'air par heure (période 09/07/2012-21/12/2012)

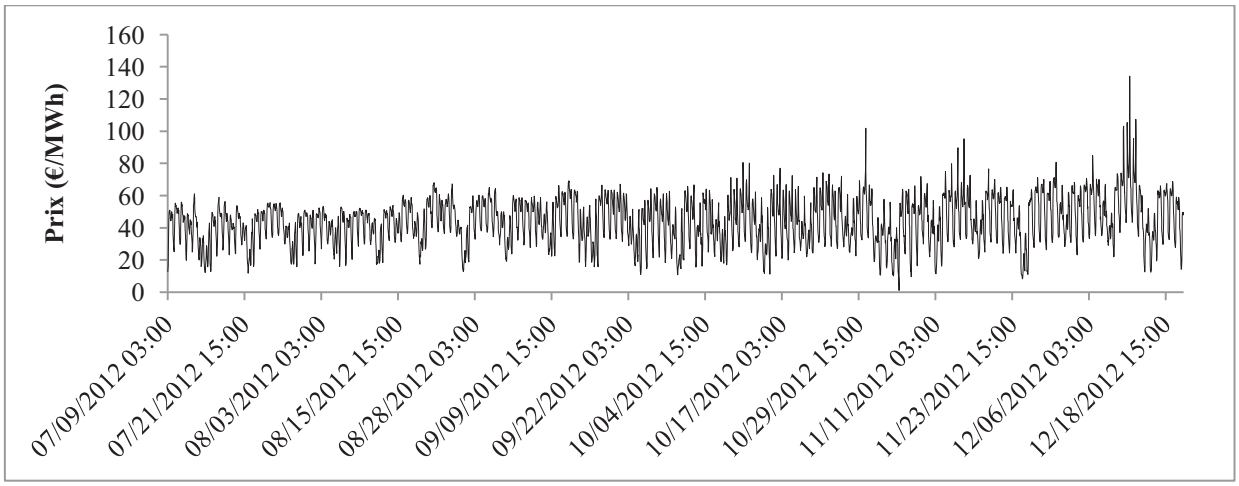


Figure 4.8 Variation de prix (European Electricity Index) (période 09/07/2012-21/12/2012)

Tableau 4.2 Gain énergétique et économique des cycles bi-étagés (période 09/07/2012-21/12/2012) par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (MWh)	Gain énergétique (%)	Vente (M€)	Gain économique (%)
R245fa	2 514 180	0.78	110.92	0.84
iC5	2 512 074	0.70	110.83	0.75
R1233zd	2 519 685	1.00	111.17	1.06
NH3	2 526 928	1.29	111.49	1.35
R245fa+iC5	2 512 501	0.71	110.85	0.77
Eau	2 494 728	-	110.00	-

4.2.3.3 Résultats sur la période 22/01/2013-12/02/2013

Sur la période 22/01/2013-12/02/2013, la température ambiante est restée assez fraiche. Nous observons que le prix d'électricité varie de manière inverse de la température de l'air. Le gain énergétique est de l'ordre de 3 % en moyenne sur la période et le gain économique légèrement supérieur.

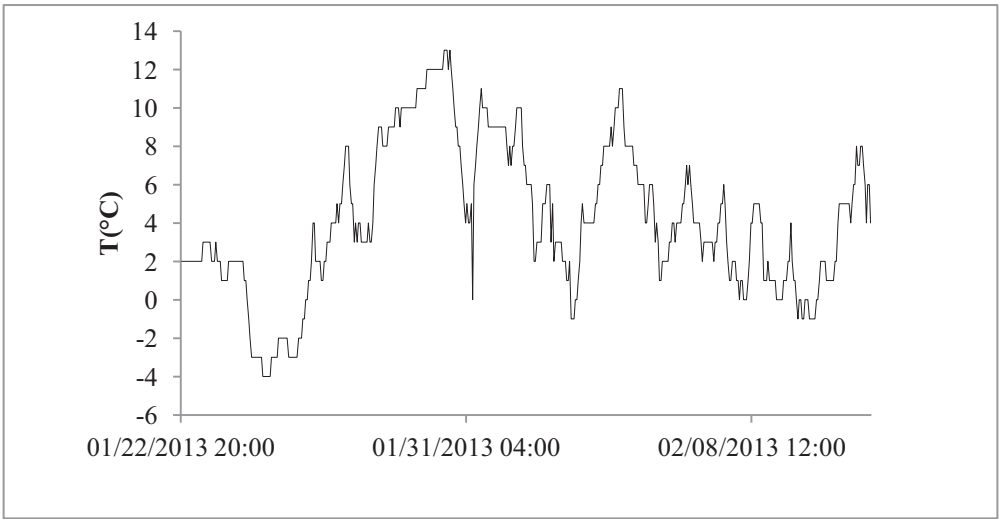


Figure 4.9 Variation de la température de l'air par heure (période 22/01/2013-12/02/2013)

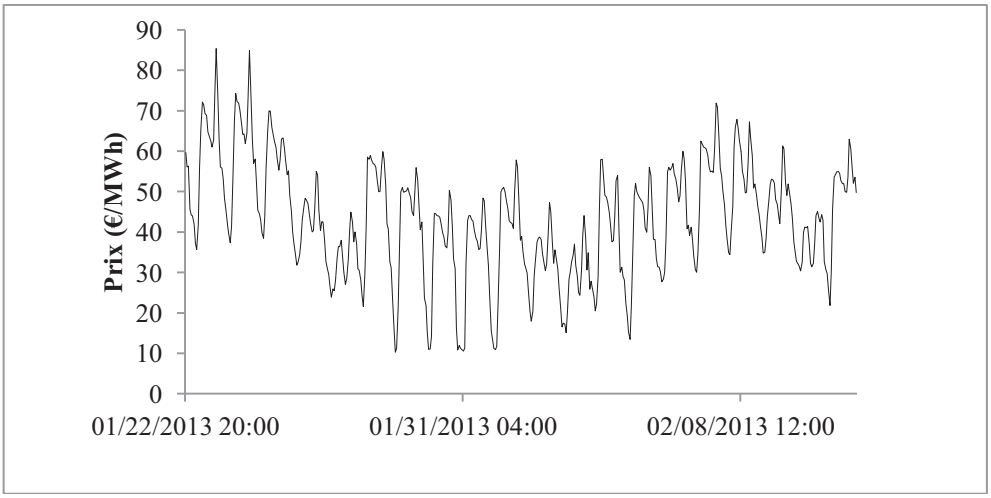


Figure 4.10 Variation de prix (European Electricity Index) (période 22/01/2013-12/02/2013)

Tableau 4.3 Gain énergétique et économique des cycles bi-étagés (période 22/01/2013-12/02/2013) par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (MWh)	Gain énergétique (%)	Vente (M€)	Gain économique (%)
R245fa	315 445	3.05	13.70	3.20
iC5	314 831	2.85	13.67	2.99
R1233zd	316 251	3.31	13.73	3.45
NH3	317 524	3.73	13.79	3.89
R245fa+iC5	315 057	2.92	13.68	3.07
Eau	306 113	-	13.27	-

4.2.3.4 Résultats globaux sur l'année 2012-2013

La météo était relativement douce sur l'année 2012-2013. Par conséquent, le gain global sur l'année est moindre que ce qui peut être espéré sur une année proche de la normale. Le gain de chiffre d'affaire est de l'ordre de 3 million d'euros. Le Tableau 4.4 présente les performances annuelles des 5 cycles bi-étagés et du cycle SPX classique. Si on compare ces résultats avec les calculs d'une année type au chapitre 3, le gain est inférieur de 0.5 point. Nous constatons également que le gain économique et le gain énergétique sont très proches en pourcentage l'un de l'autre.

Tableau 4.4 Gain énergétique et économique total des cycles bi-étagés sur la période 2012-2013 par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (GWh)	Gain énergétique (%)	Vente (M€)	Gain économique (%)
R245fa	5 080	1.04	226	1.11
iC5	5 075	0.94	226	1.01
R1233zd	5 092	1.26	226	1.34
NH3	5 107	1.57	227	1.65
R245fa+iC5	5 076	0.95	226	1.03
Eau	5 028	-	223	-

4.3 Estimation du bénéfice lié à la vente d'électricité 2011-2012 pour les différents sites de production en France

Nous avons présenté la démarche de l'estimation du chiffre d'affaire annuel lié à la vente d'électricité. La méthode a été appliquée à un site fictif avec les données climatiques récentes de Paris.

Dans ce paragraphe, nous allons généraliser cette démarche pour une étude plus large en considérant de différents sites de production en France. Le but de ces calculs est de comparer les différents sites de production possibles et évaluer les écarts de production entre eux.

Nous allons en suite utiliser ces résultats pour évaluer les bénéfices annuels P de l'utilisation du cycle bi-étagé. *P* représente la différence entre le revenu engendré par la production d'électricité et le coût de production calculé selon la méthode au 4.1.

$$P = V - LCOE_{bi\text{-}étagé}\, E \tag{4.7}$$

P, les bénéfices, en € ;
V, le chiffre d'affaire de la vente d'électricité, en € ;
LCOE, le coût moyen actualisé de production, en € / MWh ;
E, l'électricité produite, en MWh.

Nous avons récupéré auprès d'EDF les données de température horaire de 2011-2012 pour les différents sites de production d'électricité français existants. Parmi ces sites, nous en avons choisi trois avec des climats distincts pour réaliser des calculs des estimations de gains. Les sites choisis sont :

- Nogent (Station météorologique de Troyes),
- Fessenheim (Station météorologique de Colmar), climat de l'est de France
- Golfech (Station météorologique d'Agen), climat du sud de France

La Figure 4.11 présente l'évolution du prix d'électricité sur l'année 2011-2012 (8760 heures)

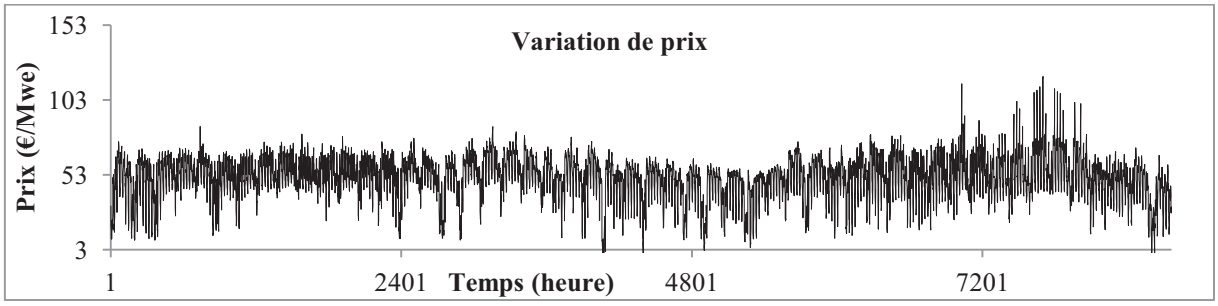


Figure 4.11 Variation du prix d'électricité en 2011-2012 **(Epex Spot 2012)**

La Figure 4.12 – la Figure 4.14 présentent l'évolution de la température des trois sites sur l'année 2011-2012 (8760 heures)

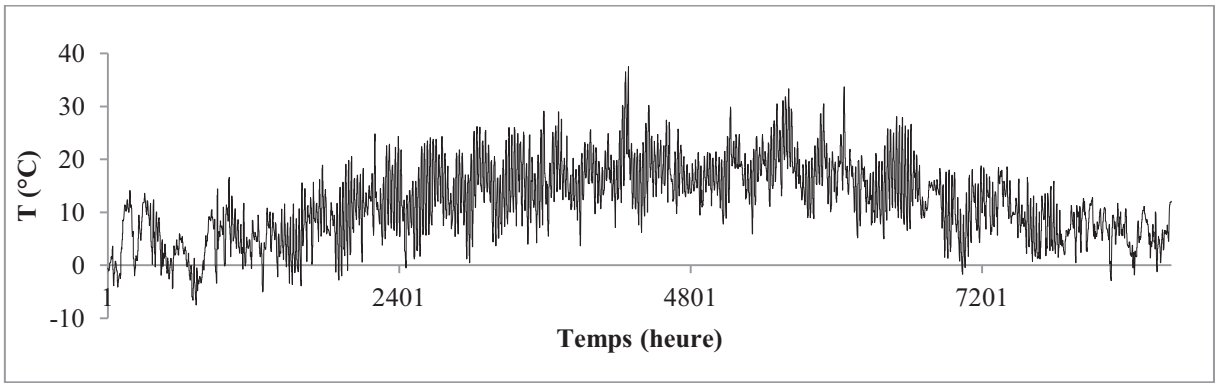


Figure 4.12 Variation de la température de l'air à Troyes en 2011-2012 (source EDF)

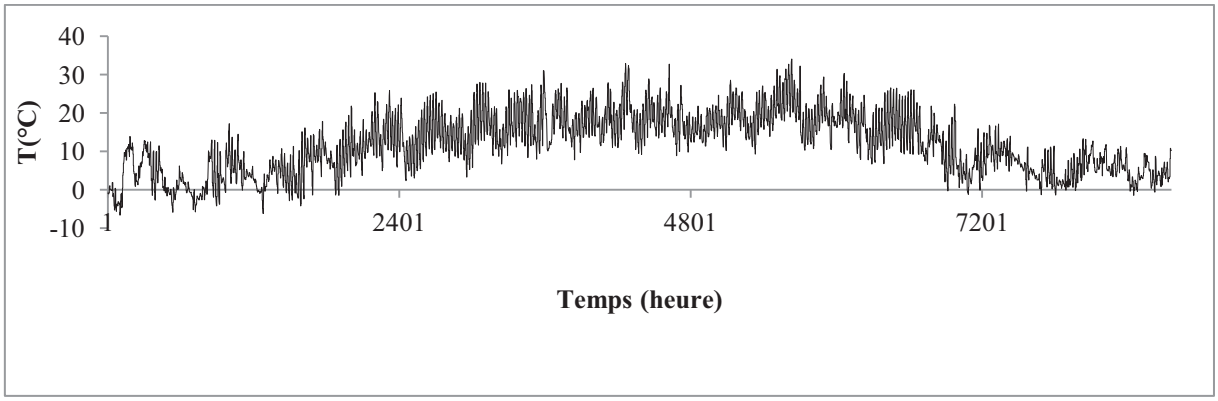


Figure 4.13 Variation de la température de l'air à Colmar en 2011-2012 (source EDF)

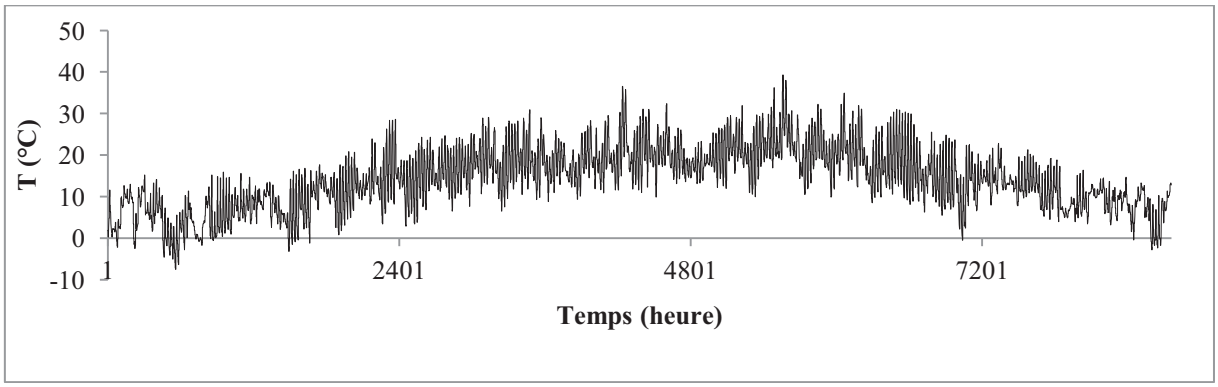


Figure 4.14 Variation de la température de l'air à Agen en 2011-2012 (source EDF)

Les résultats obtenus sur ces trois sites sont présentés dans le Tableau 4.5. En raison du climat plus chaud, on produit environ 0.5 % d'électricité en moins sur le site de Golfech que les sites de Troyes et de Fessenheim. Le climat du sud de France n'est à priori pas très avantageux pour l'installation d'un système bi-étagé.

Tableau 4.5 Gain énergétique et économique total des cycles bi-étagés sur la période 2011-2012 pour les sites de Nogent, Fessenheim et Golfech.

Site	Fluide	Energie (GWh)	Gain en pourcentage (%)	Vente (M€)	Gain en pourcentage (%)
TROYES	R245fa	5 671	1.6	288	1.6
	iC5	5 664	1.5	287	1.5

	R1233zd(E)	5 682	1.8	288	1.8
	NH3	5 703	2.2	289	2.2
	R245fa+iC5	5 670	1.6	288	1.6
	Eau	5 581	-	283	-
COLMAR	R245fa	5 666	1.7	288	1.7
	iC5	5 658	1.6	287	1.6
	R1233zd(E)	5 677	1.9	288	1.9
	NH3	5 698	2.3	289	2.3
	R245fa+iC5	5 664	1.7	288	1.7
	Eau	5 571	-	283	-
AGEN	R245fa	5 623	1.1	285	1.1
	iC5	5 617	1.0	285	1.0
	R1233zd(E)	5 634	1.3	286	1.3
	NH3	5 653	1.7	287	1.6
	R245fa+iC5	5 621	1.1	285	1.0
	Eau	5 562	-	282	-

En revanche, les gains du cycle bi-étagé sur les sites de Troyes et de Fessenheim sont très proches entre eux. L'installation d'un cycle bi-étagé à l'est de la France ne semble pas améliorer de manière significative la performance du système. Selon nos études, le revenu supplémentaire maximal engendré par l'installation du cycle bi-étagé à fluide organique de 650 MWe en France est de l'ordre de 5 millions d'euros par an. Les gains de chiffre d'affaire ne semblent pas varier de manière très significative selon les sites choisis.

A partir de ces résultats de vente et le coût de vente calculé au 4.1.2, nous avons estimé les bénéfices engendrés par les solutions bi-étagées. Le Tableau 4.6 présente les résultats des calculs pour le R1233zd(E) représentatif des fluides organiques et l'ammoniac. En raison de son coût de production plus élevé, les bénéfices engendrés par un cycle bi-étagé à fluide organique sont seulement la moitié de ceux d'un cycle à ammoniac en valeur absolue.

De plus, nous pouvons observer un gain de bénéfices d'un cycle bi-étagé à fluide organique par rapport à un cycle à vapeur sur les trois sites. De légers gains de bénéfices sont constatés sur les sites de Nogent et de Fessenheim. En revanche, on enregistre une perte de bénéfices pour le site de production de Golfech en raison de sa température moyenne annuelle plus élevée.

Tableau 4.6 Bénéfices engendrés par l'utilisation des cycles bi-étagés à R1233zd ou à ammoniac sur la période 2011-2012 pour les sites de Nogent, Fessenheim et Golfech.

Site	Fluide	Bénéfices (M€ /an)	Gain de Bénéfices (%)
TROYES	R1233zd(E)	7.06	5
	NH3	12.74	89*
	Eau	6.74	-
COLMAR	R1233zd(E)	7.56	4
	NH3	13.24	80*
	Eau	7.24	-

AGEN	R1233zd(E)	6.0	-10
	NH3	11.68	78*
	Eau	6.68	-

*les gains de bénéfices du cycle bi-étagé à ammoniac sont élevés, partiellement en raison de l'hypothèse du surcoût nul

Nous remarquons que les sites évalués ci-dessus appartiennent tous à la zone de climat océanique tempéré. Suivant les valeurs de gains de bénéfice présentées dans le Tableau 4.6, la zone de climat océanique tempéré semble être une zone limite de rentabilité pour cycle bi-étagé à fluide organique.

Pour cette raison, nous nous intéresserons à l'influence des différentes zones de climat sur la performance du cycle bi-étagé. Nous décidons d'élargir nos études en incluant diverses villes d'Europe qui se situent dans des zones de climat différentes.

Nous ne disposons pas de toutes les données de prix de vente dans ces différentes régions d'Europe. En revanche, nous avons constaté dans les cas étudiés que la valeur du gain économique est quasiment identique (en pourcentage) à la valeur du gain énergétique. Dans la suite des études, nous allons faire alors l'hypothèse simplificatrice suivante : le pourcentage de gain économique est égal au pourcentage de gain énergétique annuel.

4.4 Estimation du gain de cycle bi-étagé en Europe

Afin d'évaluer le gain économique du cycle bi-étagé en fonction de la zone climatique du site de production choisi, nous avons utilisé les données climatiques de l'année typique (Ashrae 2013) pour obtenir des résultats suffisamment généraux.

La Figure 4.15 représente la carte d'Europe et la classification des zones climatiques associées. Elle décrit le climat de l'Europe par la classification de Köppen-Geigerle (Peel, Finlayson et McMahon 2007). Les villes pour lesquelles nous avons réalisé les évaluations technico-économiques sont identifiées sur la carte. Nous avons choisi ces villes pour avoir une distribution géographique la plus représentative des climats européens que possible.

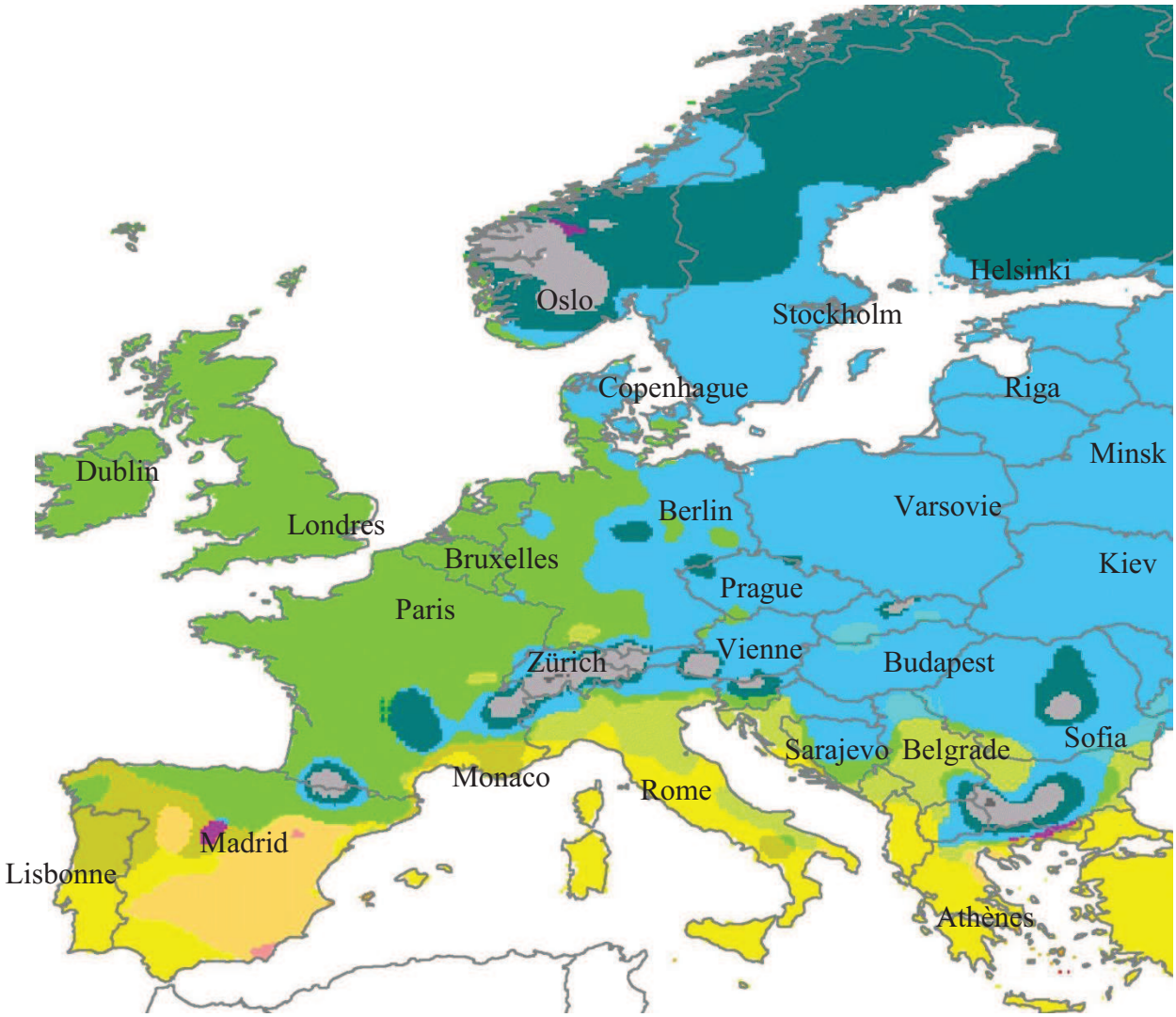


Figure 4.15 Le climat Européen selon la classification de Köppen-Geigerle (Peel, Finlayson et McMahon 2007)

Climat désertique froid | Climat semi-aride froid | Climat méditerranéen subtropical | Climat méditerranéen tempéré | Climat subtropical humide | Climat océanique tempéré | Climat océanique subarctique | Climat continental tempéré avec des étés chauds et secs | Climat continental tempéré avec des étés doux et secs | Climat continental froid avec des étés frais et secs | Climat subarctique avec des étés secs | Climat continental humide avec des étés chauds | Climat continental humide avec des étés doux | Climat subarctique humide avec des étés frais | Climat subarctique humide avec des étés froids | Climat montagnard | Climat polaire

Nous avons choisi de réaliser uniquement les calculs pour le cycle bi-étagé R1233zd(E) et le cycle bi-étagé à ammoniac qui ont précédemment montré les meilleures performances énergétiques et économiques. Le Figure 4.16 présente les résultats de prévision des gains économiques des cycles bi-étagés si ils étaient installés près des villes listées. Nous donnons aussi la zone climatique correspondante à chaque ville.

En fonction des valeurs de gains de revenu calculées, nous pouvons classer les zones climatiques européennes en trois catégories :

- Zone favorable à l'installation du cycle bi-étagé :
  - Zone de climat continental humide avec des étés doux,
  - Zone de climat subarctique humide avec des étés frais,
  - Zone de climat montagnard,
- Zone moyennement favorable à l'installation du cycle bi-étagé :
  - Zone de climat océanique tempéré,
  - Zone de climat semi-aride froid,
  - Zone de climat subtropical humide
- Zone défavorable à l'installation du cycle bi-étagé :
  - Zone de climat méditerranéen tempéré,
  - Zone de climat méditerranéen subtropical.

Dans certaines zones favorables à l'installation du cycle bi-étagé comme les pays de l'est ou les pays nordiques, nous calculons un gain économique deux fois supérieur à celui pour la France.

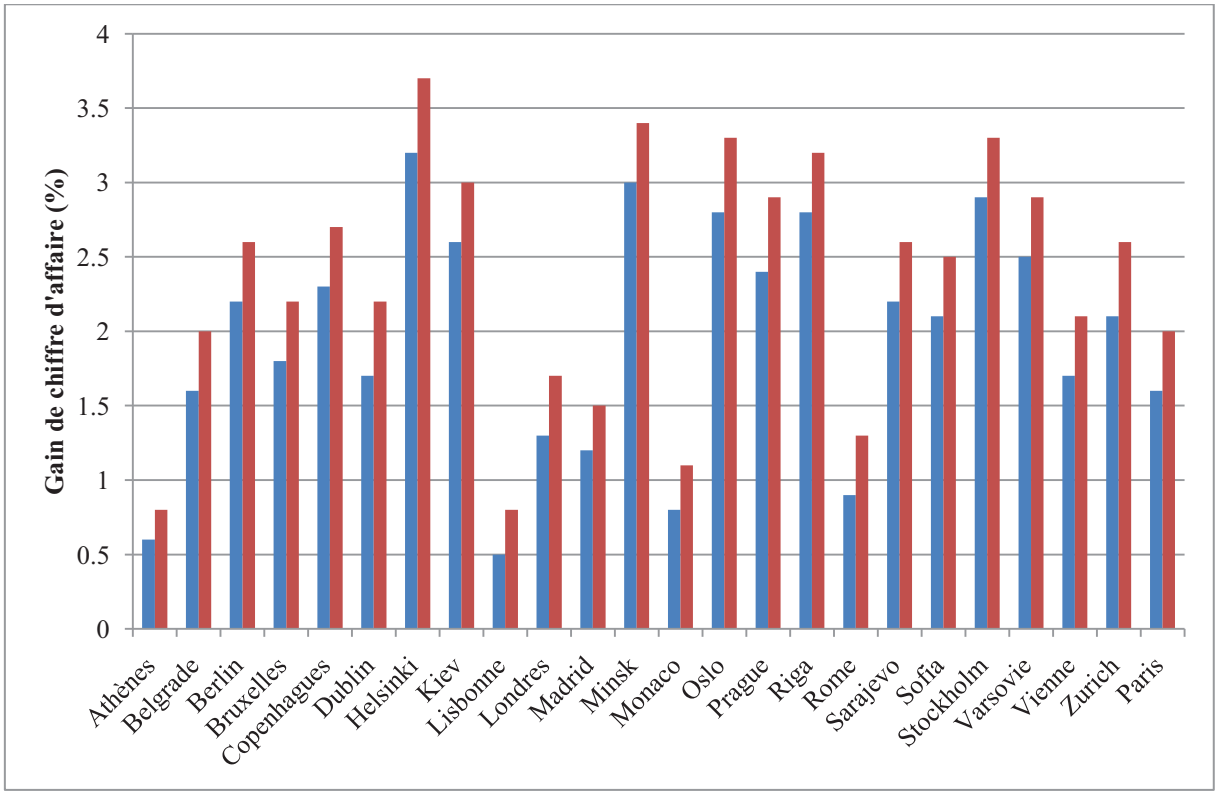


Figure 4.16 Gains de revenus annuels des cycles bi-étagés R1233zd et Ammoniac pour différents types de climats européens.

Conclusion

Le coût des composants des cycles bi-étagés a été calculé par des corrélations économiques. En considérant uniquement les composants additionnels, le surcoût d'un système à fluide organique est environ deux fois plus élevé que celui d'un cycle à ammoniac. Nous obtenons un coût de composants d'environ 60 millions d'euros pour le cycle à ammoniac et 120 millions d'euros pour un cycle bi-étagé à fluide organique. Par manque de données, nous n'avons pu estimer qu'un coût moyen actualisé de production minoré pour un cycle bi-étagé. Son coût, de l'ordre de 50 € /MWh pour un cycle à fluide organique, est très proche du coût de production d'électricité du nucléaire historique. Il est alors difficile d'en tirer une conclusion définitive et une analyse économique complète semble nécessaire.

En raison d'investissements initiaux plus élevés du cycle bi-étagé à fluide organique, le gain de production annuel devient un facteur important qui permet de rééquilibrer l'investissement supplémentaire sur les composants.

Nous avons d'abord considéré le cas de la production d'électricité annuelle sur un site soumis au climat parisien sur l'année 2012 - 2013. La connaissance du prix de l'électricité a permis d'évaluer un gain de chiffre d'affaire qui s'élève à 5 millions d'euros annuel en comparant un cycle bi-étagé de 650 MWe avec un cycle à vapeur classique de même puissance. Les bénéfices annuels du cycle bi-étagé ont également été estimés. En raison du coût moyen de production légèrement plus faible, les bénéfices sont de l'ordre de 7 millions d'euros pour les fluides organiques (soit 5 % supérieur à un cycle à vapeur) et deux fois plus élevé pour l'ammoniac. Cependant, nous restons prudents vis-à-vis de ces résultats car l'hypothèse forte est que le cycle bi-étagé à ammoniac ne présente pas de surcoût par rapport à un cycle à vapeur classique.

En revanche, le choix de la localité du site de production ne semble pas influencer le résultat de manière très significative en France. Pour cette raison, nous avons élargi notre étude à l'Europe. Nous en avons déduit que les zones de climat continental, de climat subarctique ou de climat montagnard sont les zones les plus favorable à l'installation du système bi-étagé en Europe. Les cycles bi-étagés dans ces zones présentent un gain environ deux fois supérieur que celui obtenu en France.

Nous restons néanmoins prudents sur les résultats des calculs économiques notamment en raison des incertitudes assez fortes. De plus, il manque certains paramètres importants comme le coût des composants du cycle à vapeur et le coût du génie civil pour réaliser une étude économique complète. En perspective, ces données peuvent venir compléter les résultats présentés dans ce chapitre et nous devons calculer le temps de retour sur investissement du système et évaluer sa rentabilité.

A ce stade, nous pouvons conclure que les cycles bi-étagés étudiés présentent des performances énergétiques et économiques de l'ordre de 2 à 3 % supérieures à celles des cycles classiques à tour de condensation. Toutefois, les fluides organiques sont moins compétitifs que l'ammoniac aussi bien sur le plan énergétique que sur le plan économique. Cela laisse donc la voie ouverte à la recherche d'autres fluides plus compétitifs.

Conclusion Générale

Le prototype d'un cycle bi-étagé à l'ammoniac, testé par EDF dans les années 70, a montré qu'il était possible d'utiliser un tel système pour produire de l'électricité. En revanche, le développement d'un tel système est étroitement lié au choix du fluide de travail.

Ainsi, nous avons d'abord défini les différents critères de choix pour sélectionner les fluides de travail. Lors de l'étude des performances théoriques du cycle pour les différents fluides, nous avons pu mettre en évidence qu'il existait une pression de coupure correspondant à la performance optimale du cycle bi-étagé et que cette pression de coupure variait en fonction du fluide retenu. Cependant, en comparaison des autres études existantes sur les cycles de Rankine organiques, nous avons pu constater que l'impact du choix du fluide sur la performance du cycle bi-étagé reste très faible. Cela est dû au fait que 80 % à 90 % de la puissance demandée est toujours produite par le cycle à vapeur, et seulement 10 % à 20 % par le cycle de Rankine organique. En revanche, nous avons noté que le choix du fluide est déterminant pour le dimensionnement des composants et de fait pour le coût d'investissement. De ce point de vue, les principaux paramètres thermophysiques d'influence sont :

- la chaleur latente, qui conditionne le débit du cycle
- le volume spécifique, qui influe sur la taille des échangeurs et la perte cinétique de la turbine
- les propriétés de transport, qui influent sur la taille des échangeurs.

Notre travail a aussi montré que les propriétés telles que la température critique ou la pression critique jouent un rôle moins important que prévu.

Cependant, toutes les propriétés des fluides doivent être considérées avec attention pour bien prédire la performance d'un système énergétique et dimensionner les composants. Pour cette raison, un outil informatique de prédiction des propriétés thermophysiques a été créé et interfacé au progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim. Cette démarche a permis de tester les fluides récents ou les fluides pour lesquels peu de données sont disponibles : c'est le cas notamment du R1233zd(E) testé dans nos travaux.

Plusieurs fluides organiques candidats ont été sélectionnés suite à l'évaluation de performance du cycle bi-étagé : le R365mfc, l'isopentane, le R245fa, le R1233zd(E) et le mélange R245fa/isopentane. De plus, nous avons aussi évalué un cycle bi-étagé à ammoniac. Ces fluides constituent notre base des fluides de test pour le dimensionnement des composants du cycle bi-étagé. Le condenseur-bouilleur et l'aérocondenseur ont été modélisés. Les modèles ont été validés par rapport à des données relatives à des échangeurs existants. Le dimensionnement de la turbine a été évalué avec l'outil GTDT, disponible à EDF. Les calculs de dimensionnement montrent un net avantage de l'ammoniac sur les fluides organiques. Nous retrouvons une tendance similaire en effectuant un calcul de coût des composants. Le R365mfc, le moins performant en terme de compacité et de coût des composants parmi les six fluides, a été rapidement exclus de la compétition.

En raison d'investissements initiaux du cycle bi-étagé organique éventuellement plus élevés, le gain de production annuel devient un facteur important qui permet de rééquilibrer l'investissement supplémentaire sur les composants. Les cycles bi-étagés précédemment définis ont été modélisés en régime non-nominal. La production d'électricité annuelle a été

calculée sur des sites de production situés en Europe. Pour les cycles bi-étagés considérés, nous avons obtenu un gain énergétique et en chiffre d'affaire annuel de l'ordre de 2-3 % comparé avec un cycle à vapeur classique. Le gain de bénéfices est de l'ordre de 5 % pour le nord de France et de -10 % pour le sud de France. En terme de localisation et de climat associé, il semblerait que :

- la zone de climat océanique tempéré soit la zone limite de rentabilité du cycle bi-étagé,
- les zones de climat continental qui présentent un été relativement doux en Europe du Nord et de l'Est soient favorables à l'utilisation d'un cycle bi-étagé.

Actuellement, les fluides organiques identifiés pour notre application sont le R245fa, l'isopentane, R1233zd(E) et le mélange R245fa/isopentane qui présentent des performances relativement satisfaisantes par rapport à un cycle à vapeur classique.

En revanche, notons que le R245fa va probablement disparaitre à terme en raison de son GWP élevé. Il sera éventuellement remplacé par le R1233zd(E) qui n'est pas pour le moment sur le marché, mais qui donne la meilleure performance (gain énergétique ~ 3 % dans les pays nordiques) parmi les fluides organiques retenus. En terme de taille de composants, ces fluides sont tous comparables et beaucoup moins performants que l'ammoniac. Par conséquent, pour qualifier les fluides que nous avons identifiés, nous ne pouvons sans doute parler que de fluides « acceptables ».

Cette thèse a permis de construire et de valider une démarche d'évaluation technico-économique prédictive des systèmes énergétiques. Nous sommes partis des critères de sélection des fluides de travail et de quelques propriétés simples telles que les coordonnées critiques. Nous ne nous sommes pas arrêtés à l'évaluation de la performance des divers fluides dans le cycle comme dans la plupart des publications existantes. Nous avons poussé les études plus loin vers le dimensionnement des composants et vers la vérification de la viabilité économique du nouveau système en considérant le coût d'investissement et le gain économique annuel dans son contexte d'utilisation. La force de cette démarche est de pouvoir prédire la performance énergétique et économique d'un nouveau fluide mal connu dans un système énergétique donné. Un outil de simulation est né de cette démarche. Un article de journal de rang A et trois actes de congrès ont été publiés au cours de la thèse.

En terme de perspectives, nous sommes tout à fait conscients que de nombreux travaux restent à réaliser.

Sur la question du choix de fluide, il serait intéressant de regarder de plus près les différents fluides organiques et l'ammoniac à l'échelle moléculaire. Comme nous l'avons indiqué dans cette thèse, l'avantage de l'ammoniac par rapport aux fluides organiques testés provient principalement de sa chaleur latente importante et de ses propriétés de transport. Nous pourrions, par exemple, nous poser la question suivante : comment peut-on améliorer la chaleur latente ou les propriétés de transport des fluides?

Sur le plan des modèles de fluides et de leurs implémentations, des améliorations sont également possibles. Il serait intéressant de revoir la corrélation de correction des propriétés de transport et essayer de chercher une forme de corrélation plus générale qui ne dépende pas du modèle de fluide choisi. La démarche prédictive peut aussi être approfondie en faisant par exemple intervenir des groupes de molécules de contribution de groupes. L'outil CTPlib que nous avons réalisé dans le cadre de la thèse va être repris et d'autres modèles viendront

compléter le logiciel existant. Un projet de mise en place d'un nouveau serveur de propriétés thermodynamiques est en cours de discussion.

Pour la partie de la modélisation du cycle bi-étagé, les modèles de cycle et de composants peuvent être affinés. Dans nos études centrées sur la comparaison des différents fluides, nous n'avons pas évalué les impacts de tous les aspects architecturaux du cycle sur sa performance énergétique et économique (le débit, la pression de prélèvement, par exemple). Les intégrations énergétiques peuvent aussi être réalisées sur ce système pour améliorer la performance globale.

Les évaluations de coûts peuvent et doivent être approfondies. En effet, les connaissances du coût des composants additionnels et des gains économiques annuels ne sont pas suffisantes pour donner une conclusion définitive sur la rentabilité du système. Le coût du génie civil du cycle bi-étagé, les économies réalisables grâce à la suppression des étages BP, le coût de rechargement du fluide de travail mais aussi les coûts potentiellement évités si l'on renonce à une source froide sur l'eau, sont par exemple des éléments à rassembler et prendre en considération pour obtenir un schéma plus complet et plus net sur le coût d'investissement. De plus, nous devons également rester prudents sur la conclusion en raison des incertitudes sur les corrélations employées.

La prochaine étape pour confirmer la possibilité de travailler avec les fluides retenus sera la construction éventuelle d'un prototype.

En terme de débouchés, les développements des Small Module Reactors (SMR) aux Etats-Unis pourraient donner des pistes d'application au cycle bi-étagé. Le fait de pouvoir installer un système de production sans contrainte de disponibilité de la source d'eau pourrait se révéler intéressant pour ces réacteurs de petites puissances (150 -200 MW).

Dans ce dernier paragraphe, nous voudrions rappeler un élément très important : certes nous avons étudié le cycle bi-étagé appliqué aux conditions d'un réacteur rapide au sodium, mais le principe du cycle est adaptable aussi bien avec une source chaude nucléaire qu'avec une source chaude thermique. Il est tout à fait pertinent d'associer le cycle bi-étagé à une centrale à charbon ou à gaz si les contraintes liées à l'accès à une source froide sur l'eau sont fortes.

Bibliographie

Ashrae. *American standard ANSI/ASHRAE 34 - Designation and Safety Classification of Refrigerants.* Ashrae, 2010.

—. "Ashrae Climate Data ." 2013.

Assaf. *Intégration d'une pompe à chaleur dans un procédé agroalimentaire-Simulation, expérimentation et intégration.* Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2010.

Bontemps, et al. "Echangeurs de chaleur – description des échangeurs." *Traité génie énergétique, Technique de l'Ingénieur*, n.a.

Chapman, Gubbins, Jackson, and Radosz. "SAFT: Equation-of-State Solution Model for Associating Fluids." *Fluid Phase Equilibria*, 1989: 31-38.

Chen, Yogi Goswami, and Stefannakos. "A review of thermodynamic cycles and working fluids for the conversion of low-grade heat." *Renewable and Sustainable Energy Reviews (14)*, 2010: 3059-3067.

Cirincione. *Design, construction and commissioning of an organic Rankine cycle waste heat recovery system with a tesla-hybrid turbine expander.* Colorado State University, 2011.

Combes. "Manuel d'utilisation de GTDT." 2012.

Cours des Comptes. "Les coûts de la filière électronucléaire." Rapport public, 2012.

Dai, Wang, and Lin. "Parametric optimization and comparative study of organic Rankine cycle (ORC) for low grade waste heat recovery." *Energy Conversion and Management (50)*, 2009: 576-582.

Delgado-Torres, and Garcia-Rodriguez. "Analysis and optimization of the low-temperature solar organic Rankine cycle (ORC)." *Energy Conversion and Management (51)*, 2010: 2848-2856.

Desai, and Bandyopadhyay. "Process integration of organic Rankine cycle." *Energy (34)*, 2009: 1674–1686.

Desideri, and Bidini. "Study of Possible Optimisation Criteria for Geothermal Power Plants." *Journal of Energy Conversion and Management (38)*, 1997: 1681-1691.

Drescher, and Brüggemann. "Fluid selection for the organiac Rankine cycle (ORC) in biomasse power and heat plants." *Applied Thermal Enginnering (27)*, 2007: 223-229.

El-Ahmar, Valtz, Paricaud, Coquelet, Abbas, Rached. "Vapor-liquid equilibrium of binary systems containing pentafluorochemicals from 363 to 413 : measurement and modeling with Peng-Robinson and three SAFT-like equations of states." *Int. J. of Refrigeration (35)*, 2012: 2297–2310.

Environmental Protection Agency. "Revision to Definition of Volatile Organic Compounds Exclusion of trans 1-chloro-3,3,3-trifluoroprop-1-ene [SolsticeTM 1233zd(E)]." *Federal Register (Vol. 78, No. 32).* February 15, 2013.

Epex Spot. "Données de la bourse européenne de l'électricité ." 2012.

European Evironment Agency. "Fluorinated greenhouse gases 2011." 2012.

Filloque. *Quel fluide frigorigène choisir?* ISUPFERE, 2013.

Fleury, and Bellot. "EDF is testing a 22MWe pilot plant operating with an ammonia bottoming cycle." *Proceedings of ASME Winter Congress.* San Francisco, 1989.

Gicquel. *Manuel de référence Thermoptim.* 2010.

—. *Systèmes énergétiques.* Paris: Presse des Mines, 2009.

GRETh. "Technologies des échangeurs thermiques." *GREThTraining Session.* Aix-les-bains: GRETh, 2012.

Hirshfelder, Curtiss, and Bird. *Molecular Theory of Gas and Liquids.* New York: Wiley, 1954.

Huber, and Ely. "Prediction of the thermal conductivity of refrigerants and refrigerant mixtures." *Fluid Phase Equilibria (80)*, 1992: 249-261.

Huber, Laesecke, and Perkins. "Model for the viscosity and thermal conductivity of refrigerants, including a new correlation for the viscosity of R134a." *Industrial & Engineering Chemistry Research (42)*, 2003: 3163-3178.
Hulse, Basu, Singh, and Thomas. "Physical Properties of HCFO-1233zd(E)." *J. Chem. Eng. Data 57 (12)*, 2012: 3581–3586.
Jaubert, and Mutelet. "VLE predictions with the Peng-Robinson equation of state and temperature dependant kij calculated through a groupe contribution method." *Fluide Phase Equilibria (224)*, 2004: 285-304.
Jaubert, Vitu, Mutelet, and Corriou. "Extension of the PPR78 model (predictive 1978, Peng-Robinson EOS with temperature dependent kij calculated through a group contribution methode) to systems containing aromatic compounds." *Fluid Phase equilibria (237)*, 2005: 193-211.
Klein, McLinden, and Laesecke. "An improved extended corresponding stats method for estimation of viscosity of pure refrigerants and mixtures." *International Journal of Refrigeration (20)*, 1997: 208-217.
Kontogeorgis, Voutsas, Yakoumis, and Tassios. "An Equation of State for Associating Fluids." *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1996: 4310-4318.
Kröger. *Air-cooled heat exchangers and cooling towers.* New York: Begell House, Inc, 1998.
Lee, and Kesler. "A generalized thermodynamic correlation based on three parameter corresponding states." *AIChE Journal*, 1975.
Le-Moullec. "Evaluation technico-économique de procédés innovants: application aux technologies de captage de CO2." 2012.
Liu, Chien, and Wang. "Effect of working fluids on organic Rankine cycle for waste heat recovery." *Energy (29)*, 2004: 1207-1217.
Lockhart, and Martinelli. "Proposed Correlation of Data for Isothermal Two-Phase Two-Component Flow in Pipes." *Chemical Engineering Progress*, 1949: 39-48.
Mason, and Saxena. "Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures." *Physics of Fluids*, 1958: 361-369.
Mathias, and Copeman. "Extension of the Peng-Robinson Equation of State to Complex Mixtures: Evaluation of the Various Forms of the Local Composition Concept." *Fluid Phase Equilibria (13)*, 1983: 91–108.
Neufeld, Janzen, and Aziz. "Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals for the Lennard-Jones potential." *J. Chem. Phys.*, 1972: 1100-1102.
NIST. *Refprop 8.0. NIST Standard Reference Database 23, version 8.0.* NIST, 2007.
Padet. *Convection thermique et massique – nombre de Nusselt.* Techique de l'ingénieur.
Patel, and Teja. "A new Cubic Equation of State for Fluids and Fluid mixtures." *Chem. Eng. Sci. (37)*, 1982: 463-473.
Peel, Finlayson, and McMahon. "Updated world map of the Köppen-Geiger climate classification." *HESSD*, 2007: 439–473.
Peng, and Robinson. "A new two parameters Equation of State." *Ind. Eng. Chem. Fundam. (15)*, 1976: 59-64.
Perroud, Rebiere, and Rowe. "Convection forcée de l'ammoniac." Rapport C . E . A . - R 3088.
Poling, and Prausnitz. *The properties of gases and liquids.* McGraw-Hill Professional, 2000.
ProSim. *Component Plus, DIPPR database.* AICHE, 2001.
Quoilin, Orsz, Hemond, and Lemort. "Performance and design optimization of a low cost solar organic Rankine cycle for remote power regeneration." *Solar Energy (85)*, 2011: 955-966.
Redlich, and Kwong. "On the Thermodynamics of solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions." *Chem. Rev (44)*, 1949: 233-244.

Roy, Désilets, Galanis, Nescreddine, and Cayer. "Thermdynamic analysis of a power cycle using a low-temperature source and a binary Nh3-H2O mixture as working fluid." *International journal of thermal sciences (49)*, 2010: 48-58.
Saleh, Kogalbauer, Wendland, and Fischer. "Working fluids for low-temperature organic Rankine cycles." *Energy (32)*, 2007: 1210-1221.
Sandler. *Chemical and Engineering Thermodynamics.* Wiley, 1977.
Schmidt, and Wenzel. "A modified van der Waals Type Equation of state." *Chem. Eng. Sci. (35)*, 1980: 1503–1512.
Shah. "A general correlation for heat transfer during film condensation inside pipes." *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1979: 547-55.
—. *Encyclopedia of Energy Technology and the Environment.* New York: Wiley, 1994.
Shah, and Sekulic. *Heat Exchangers, Handbook of Heat Transfer.* McGraw Hill, 3rd Edition, 1998.
Silla. *Chemical Process Engineering: Design And Economics.* New York: Marcel Dekker, Inc, 2003.
Soave. "Equilibrium constants for modified Redlich-Kwong equation of state." *Chem. Eng. Sci. (4)*, 1972: 1197-1203.
Stalling, and Maulbetsch. "Economic Evaluation of alternative cooling technologies ." EPRI Report 102480, 2012.
Stodola. *Steam and Gas Turbines.* New York: McGraw-Hill, 1927.
Subramoney, Valtz, Coquelet, Richon, Naidoo, and Ramjugernath. "Vapor-liquid equilibrium measurements and modeling for the ethane (R-170) + 1,1,2,3,3,3-hexafluoro-1-propene (R-1216) binary system." *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2012: 2947-2955.
United Nations Environment Programme. *Handbook for the Montreal Protocol on substances that deplete the ozone layer.* Eighth ed. UNEP, 2009.
United Nations. *Kyoto Protocol to the United Nations Framework Convention on Climate Change.* 1998.
van der Waals. *Over de Continuiteit van den Gas- en Vloestoftoestand (Über die Kontinuittät des Gas- und Flüssigkeitszustands).* Leipzig: Universität Leiden, Niederlande, 1899.
Vidal. *Thermodynamiques, Méthodes appliquées au raffinage et au génie chimique.* Technip, 1973.
Wassiljewa. "Wärmeleitung in Gasgemischen." *Physik. Z.*, 1904: 737–742.
Wilhelm, and Vogel. "Gas-phase viscosity of the alternative refrigerant R134a at low densities." *Fluid Phase Equilibria (125)*, 1996: 257–266.

Liste des publications

B. Liu, P. Rivière, C.Coquelet, R.Gicquel and F.David, “Investigation of a two stage Rankine cycle for electric power plants”, Applied Energy 100 (2012) 285–294.

B. Liu, P. Rivière, C.Coquelet, R.Gicquel and F.David, “Potential interest and fluid selection for bottoming cycles applied to nuclear plants”, in Proceedings of ICAPP 2013, Jeju Island, Korea, April 14-18, 2013.

B. Liu, P. Rivière, C.Coquelet, R.Gicquel and F.David, “Air cooled two-stage Rankine Cycles for large power plants operating with different working fluids: performance, size and cost”, in Proceedings of the ASME 2013 Power Conference, Boston, Massachusetts, USA, July 29 – August 1, 2013.

B. Liu, P. Rivière, C.Coquelet, R.Gicquel and F.David, “Investigation of Air Cooled Two-Stage Rankine Cycles for Power Plants Operating with Different Working Fluids”, in Proceedings of SFGP 2013, Lyon, France, October 8 -10, 2013.

Annexes

Les annexes complètent les éléments présentés dans les chapitres 1-4 du manuscrit. Des informations supplémentaires sont apportées aux différents points suivants :

- *la description du standard Ashrae,*
- *la procédure de l'ajustement de la fonction α (T) de Mathias-Copeman,*
- *les tableaux contenant les résultats de validation des modèles de fluides,*
- *les équations utilisées dans la modélisation du cycle bi-étagé en régime non nominal*
- *les résultats des évaluations de chiffre d'affaire de la vente d'électricité 2012-2013*
- *le manuel d'utilisation de CTPlib*
- *le résumé long*

7.1 ASHRAE Standard 34, désignation et classification de sureté des réfrigérants

Le standard ASHRAE 34 décrit la nomenclature des réfrigérants et la classification de sureté selon les données de toxicité et d'inflammabilité.

La première version du standard a été publiée sous le nom du Standard ASRE en 1957. Les règles de la nomenclature des réfrigérants a été donnée dans le chapitre 2 du manuscrit. Nous nous intéressons ici uniquement aux classifications de groupes de sureté.

7.1.1 Classification de toxicité :

La toxicité du fluide réfrigérant décrit l'influence du fluide sur la santé de son utilisateur lors des expositions par contact, inhalation ou ingestion.

La notion de PEL (Permissible Exposure Level) doit être introduite avant de classer un fluide selon la norme ASHRAE. PEL est la concentration du fluide à laquelle les ouvriers peuvent être exposés sur une semaine de travail de 40 heures sans effet néfaste sur la santé. La grandeur est exprimée en ppm.

Les réfrigérants sont classés suivant deux catégories : la catégorie A pour les fluide moins toxique et la catégorie B pour les plus toxique.

Classe A : si PEL > 400 ppm par semaine
Classe B : si PEL < 400 ppm par semaine

7.1.2 Classification d'inflammabilité:

La classification d'inflammabilité est basée sur les tests de limite basse d'inflammabilité (LFL, lower flammability limit), la chaleur de combustion (HOC, heat of combustion) et optionnellement la vitesse de propagation de flamme.

La limite basse d'inflammabilité (LFL) est la concentration minimale du fluide mélangé de manière homogène dans l'air, capable de permettre la propagation de la flamme dans des conditions spécifiques. La grandeur est exprimée en kg/m^3.

La chaleur de combustion (HOC) est la chaleur libérée par la combustion de la substance concernée. La grandeur est exprimée en kJ/kg.

Un fluide est classée Catégorie 1 s'il ne présente aucune propagation de flamme à 60 °C et à 1 bar atmosphérique

Une fluide est classé Catégorie 2 s'il présente une limite basse d'inflammabilité supérieure à 0.10 kg/m^3 (à 23 °C et à 1 bar atmosphérique) et une chaleur de combustion inférieure à 19 000 kJ/kg (à 25 °C et 1 bar atmosphérique). Il est classé 2L si, en plus, la vitesse de propagation de la flamme est inférieure à 10 cm/s (à 23 °C et à 1 bar atmosphérique).

Une fluide est classé Catégorie 3 s'il présente une limite basse d'inflammabilité inférieure ou égale à 0.10 kg/m^3 (à 23 °C et à 1 bar atmosphérique) et une chaleur de combustion supérieure à 19 000 kJ/kg (à 25 °C et 1 bar atmosphérique).

7.2 Procédure de l'ajustement des paramètres de la fonction $\alpha(T)$ de Mathias-Copeman

La fonction de Mathias et Copeman (MC) α (T) prennent en compte des paramètres d'ajustement expérimentaux. Elle s'écrit sous 2 formes différentes selon le niveau de la température considéré.

$$\text{Si } T_r \leq 1, \alpha(T) = (1 + c_1(1 - T_r^{0.5}) + c_2(1 - T_r^{0.5})^2 + c3(1 - T_r^{0.5})^3)^2$$
$$\text{Si } T_r > 1, \alpha(T) = \left(1 + c_1(1 - T_r^{0.5})\right)^2 \quad (7.1)$$

Les paramètres *c1, c2, c3* sont déterminés à partir des données de tension de vapeur. En prenant des valeurs initiales adaptées pour les paramètres *c1, c2, c3*, on peut effectuer les premiers calculs de la pression de saturation. On est capable ainsi d'estimer la différence entre les valeurs expérimentales et calculées. Cette estimation est alors représentée par une fonction d'objectif. Notre but est donc de trouver les paramètres *c1, c2, c3* qui minimisent la fonction d'objectif.

La Figure 7.1 représente l'algorithme d'ajustement des paramètres de la fonction α de Mathias-Copeman.

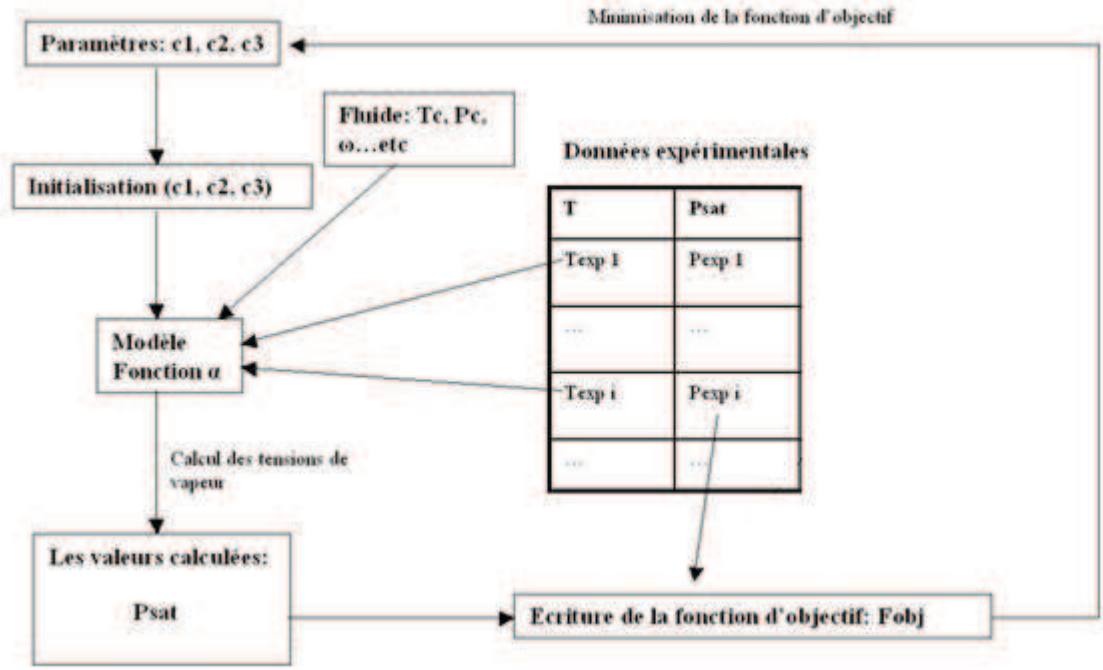


Figure 7.1 Algorithme d'ajustement des paramètres de la fonction α de Mathias-Copeman

7.3 Tableaux de résultats de calculs pour la validation des modèles de fluides

7.3.1 Butane

Tableau 7.1 Résultats de calculs de pressions de saturation de butane

T (K)	P_{exp}^{sat} (Pa)	P_{cal}^{sat} (Pa)	Déviation Relative Absolue (%)
280	132820	132429	0.29
285	158280	158192	0.06
290	187340	187552	0.11
295	220340	220814	0.22
300	257600	258294	0.27
305	299460	300315	0.29
310	346280	347214	0.27
315	398420	399335	0.23
320	456240	457036	0.17
325	520120	520687	0.11
330	590450	590672	0.04
335	667610	667388	0.03
340	752010	751250	0.10
345	844060	842688	0.16
350	944180	942154	0.21
355	1052800	1050116	0.25
360	1170400	1167070	0.28
365	1297400	1293532	0.30
370	1434300	1430047	0.30
375	1581600	1577190	0.28
380	1739900	1735562	0.25
385	1909800	1905807	0.21
390	2091800	2088605	0.15

Tableau 7.2 Résultats de calculs de masse volumique du butane

ρ_{exp}^{L} (mol/m3)	ρ_{cal}^{L} (mol/m3)	Déviation Relative Absolue (%)	ρ_{exp}^{V} (mol/m3)	ρ_{cal}^{V} (mol/m3)	Déviation Relative Absolue (%)
10208	10757	5.38	60	60	0.88
10113	10649	5.30	71	70	0.66
10016	10538	5.21	83	83	0.50
9918	10424	5.10	97	96	0.40
9819	10306	4.97	112	112	0.35
9717	10185	4.82	129	129	0.33
9614	10060	4.65	149	148	0.34
9508	9931	4.45	170	170	0.36

9400	9798	4.23	194	193	0.39
9290	9660	3.99	221	220	0.43
9177	9518	3.71	250	249	0.46
9061	9370	3.41	283	281	0.50
8941	9216	3.07	319	317	0.51
8819	9056	2.69	358	357	0.52
8692	8889	2.27	402	400	0.50
8560	8714	1.80	451	449	0.47
8424	8531	1.27	505	503	0.42
8282	8339	0.69	565	563	0.34
8134	8137	0.04	631	630	0.25
7978	7924	0.68	706	705	0.13
7814	7697	1.50	789	789	0.02
7640	7455	2.42	883	885	0.18
7453	7196	3.45	990	994	0.36

7.3.2 R134a

Tableau 7.3 Résultats de calculs de pressions de saturation du R134a

T (K)	P_{exp}^{sat} (Pa)	P_{cal}^{sat} (Pa)	Déviation Relative Absolue (%)
280	372710	371266	0.39
285	440830	439884	0.21
290	518050	517674	0.07
295	605120	605388	0.04
300	702820	703800	0.14
305	811970	813703	0.21
310	933400	935913	0.27
315	1068000	1071271	0.31
320	1216600	1220639	0.33
325	1380300	1384904	0.33
330	1559900	1564981	0.33
335	1756600	1761808	0.30
340	1971500	1976364	0.25
345	2205900	2209650	0.17
350	2461100	2462712	0.07
355	2738600	2736626	0.07
360	3040500	3032525	0.26
365	3369000	3351576	0.52
370	3727800	3695008	0.88

Tableau 7.4 Résultats de calculs de masse volumique du R134a

ρ_{exp}^{L}	ρ_{cal}^{L}	Déviation	ρ_{exp}^{V}	ρ_{cal}^{V}	Déviation

(mol/m3)	(mol/m3)	Relative Absolue (%)	(mol/m3)	(mol/m3)	Relative Absolue (%)
12465	12091	3.00	178.65	175	1.88
12295	11901	3.21	210.51	207	1.74
12121	11703	3.45	246.85	243	1.63
11942	11495	3.74	288.18	284	1.52
11758	11278	4.09	335.12	330	1.43
11567	11049	4.48	388.36	383	1.33
11368	10809	4.92	448.74	443	1.24
11161	10556	5.42	517.24	511	1.15
10945	10288	6.00	595.05	589	1.06
10718	10004	6.66	683.68	677	0.97
10478	9701	7.41	784.98	778	0.88
10222	9377	8.26	901.43	894	0.80
9948.3	9029	9.24	1036.3	1029	0.72
9651	8651	10.37	1194.2	1186	0.67
9323.7	8236	11.67	1381.8	1373	0.64
8955.7	7775	13.19	1610	1599	0.69
8527.9	7249	15.00	1897.3	1881	0.86
8000.3	6625	17.19	2282.6	2253	1.29
7255.8	5810	19.93	2880.5	2807	2.54

7.3.3 R245fa

Tableau 7.5 Résultats de calculs de pressions de saturation du R245fa

T (K)	P_{exp}^{sat} (Pa)	P_{cal}^{sat} (Pa)	Déviation Relative Absolue (%)
280	71755	70509	1.74
285	88615	87730	1.00
290	108480	108020	0.42
295	131720	131721	0.00
300	158690	159190	0.32
305	189800	190800	0.53
310	225470	226936	0.65
315	266110	268001	0.71
320	312170	314409	0.72
325	364100	366594	0.69
330	422390	425007	0.62
335	487510	490115	0.53
340	559960	562406	0.44
345	640250	642391	0.33
350	728910	730605	0.23
355	826490	827607	0.14

360	933530	933988	0.05
365	1050600	1050367	0.02
370	1178300	1177400	0.08
375	1317400	1315785	0.12
380	1468300	1466255	0.14
385	1631800	1629595	0.14
390	1808800	1806640	0.12

Tableau 7.6 Résultats de calculs de masse volumique du R245fa

ρ_{exp}^{L} (mol/m3)	ρ_{cal}^{L} (mol/m3)	Déviation Relative Absolue (%)	ρ_{exp}^{V} (mol/m3)	ρ_{cal}^{V} (mol/m3)	Déviation Relative Absolue (%)
10343	10620	2.68	32	31	3.07
10247	10519	2.65	39	38	2.41
10149	10414	2.61	47	47	1.90
10049	10306	2.56	57	56	1.53
9948	10195	2.48	68	67	1.27
9845	10080	2.39	81	80	1.10
9741	9962	2.27	95	94	1.00
9634	9839	2.14	112	111	0.95
9525	9713	1.97	130	129	0.95
9414	9581	1.78	151	150	0.97
9300	9445	1.56	175	173	1.02
9183	9303	1.31	202	200	1.07
9063	9156	1.03	232	229	1.13
8939	9002	0.71	265	262	1.17
8812	8842	0.34	303	299	1.21
8680	8674	0.07	344	340	1.22
8543	8497	0.53	391	386	1.21
8401	8312	1.06	444	438	1.17
8253	8117	1.65	502	497	1.10
8098	7910	2.32	568	563	1.00
7934	7690	3.07	643	637	0.86
7761	7456	3.94	727	722	0.69
7577	7204	4.92	824	820	0.49

7.3.4 R1216

Tableau 7.7 Résultats de calculs de pressions de saturation du R1216

T (K)	P_{exp}^{sat} (Pa)	P_{cal}^{sat} (Pa)	Déviation Relative Absolue (%)
263.49	228400	227280	0.49
283.17	457600	454045	0.78
303.36	840800	835315	0.65

323.37	1418600	1414634	0.28
343.18	2245100	2246399	0.06
348.16	2501600	2504021	0.10
353.13	2780000	2782981	0.11
355.18	2901800	2904710	0.10
357.01	3014100	3016782	0.09
358	3076300	3078767	0.08

Tableau 7.8 Résultats de calculs de masse volumique du R1216

ρ_{exp}^{L} (mol/m3)	ρ_{cal}^{L} (mol/m3)	Déviation Relative Absolue (%)
9749	10066	3.26
9212	9427	2.33
8585	8620	0.41
7826	7592	2.99
6809	6153	9.64
6394	5654	11.57
5889	5028	14.62
5626	4695	16.54
5199	4314	17.02
4719	4028	14.65

7.3.5 Toluene

Tableau 7.9 Résultats de calculs de pressions de saturation du toluène

T (K)	P_{exp}^{sat} (Pa)	P_{cal}^{sat} (Pa)	Déviation Relative Absolue (%)
280	1383	1230	11.05
285	1855	1682	9.34
290	2459	2266	7.82
295	3222	3014	6.47
300	4177	3957	5.28
305	5362	5134	4.24
310	6817	6589	3.34
315	8588	8368	2.56
320	10727	10523	1.90
325	13290	13112	1.34
330	16340	16197	0.88
335	19942	19844	0.49
340	24170	24126	0.18
345	29102	29119	0.06
350	34821	34904	0.24
355	41416	41568	0.37

360	48980	49201	0.45
365	57612	57899	0.50
370	67418	67761	0.51
375	78505	78892	0.49
380	90988	91400	0.45
385	104990	105397	0.39
390	120620	121002	0.32

Tableau 7.10 Résultats des calculs de masses volumiques liquide et vapeur du toluène

ρ_{exp}^{L} (mol/m3)	ρ_{cal}^{L} (mol/m3)	Déviation Relative Absolue (%)	ρ_{exp}^{V} (mol/m3)	ρ_{cal}^{V} (mol/m3)	Déviation Relative Absolue (%)
9540	9530	0.11	0.60	0.53	11.12
9490	9491	0.01	0.78	0.71	9.43
9440	9451	0.12	1.02	0.94	7.93
9389	9410	0.22	1.32	1.23	6.59
9339	9369	0.32	1.68	1.59	5.43
9288	9327	0.42	2.12	2.03	4.42
9237	9284	0.51	2.66	2.57	3.54
9186	9240	0.59	3.30	3.21	2.79
9135	9196	0.67	4.06	3.98	2.16
9083	9151	0.75	4.97	4.88	1.63
9032	9105	0.82	6.02	5.95	1.20
8980	9059	0.88	7.25	7.19	0.85
8928	9011	0.94	8.68	8.63	0.58
8875	8963	0.99	10.32	10.28	0.38
8822	8914	1.04	12.20	12.17	0.23
8769	8864	1.08	14.34	14.32	0.14
8716	8813	1.12	16.77	16.75	0.10
8662	8761	1.15	19.52	19.50	0.09
8608	8708	1.17	22.60	22.57	0.12
8553	8654	1.18	26.06	26.01	0.18
8498	8599	1.19	29.92	29.84	0.27
8442	8543	1.20	34.22	34.09	0.37
8386	8486	1.19	38.98	38.79	0.49

7.3.6 La viscosité et la conductivité thermique de l'isopentane

Tableau 7.11 Résultats de calculs de propriétés de transport en phase vapeur pour l'isopentane

T^{sat} (K)	Viscosité Vapeur NIST (µPa-s)	Viscosité Vapeur calculée (µPa-s)	Déviation relative absolue (%)	Conductivité Vapeur NIST (W/m/K)	Conductivité Vapeur calculée (W/m/K)	Déviation relative absolue (%)

280	6.80	6.75	0.62	0.013	0.014	7.4
285	6.92	6.88	0.59	0.014	0.015	7.3
290	7.05	7.01	0.54	0.014	0.015	7.1
295	7.18	7.14	0.49	0.015	0.016	7.0
300	7.30	7.27	0.43	0.015	0.016	6.8
305	7.43	7.41	0.36	0.016	0.017	6.6
310	7.56	7.54	0.28	0.016	0.017	6.5
315	7.69	7.68	0.19	0.017	0.018	6.3
320	7.82	7.81	0.10	0.017	0.018	6.1
325	7.95	7.95	0.01	0.018	0.019	5.9
330	8.09	8.10	0.12	0.019	0.020	5.6
335	8.22	8.24	0.24	0.019	0.020	5.4
340	8.36	8.39	0.37	0.020	0.021	5.2
345	8.50	8.54	0.50	0.021	0.022	4.9
350	8.64	8.69	0.64	0.021	0.022	4.6
355	8.78	8.85	0.79	0.022	0.023	4.3
360	8.93	9.01	0.95	0.023	0.024	4.0
365	9.08	9.18	1.12	0.023	0.024	3.7
370	9.24	9.35	1.29	0.024	0.025	3.4
375	9.40	9.53	1.47	0.025	0.026	3.0
380	9.56	9.72	1.66	0.026	0.026	2.7
385	9.74	9.92	1.85	0.027	0.027	2.3
390	9.92	10.12	2.06	0.027	0.028	1.9

Tableau 7.12 Résultats de calculs de propriétés de transport en phase liquide pour l'isopentane

T^{sat} (K)	Viscosité liquide NIST (µPa-s)	Viscosité liquide calculée (µPa-s)	Déviation relative absolue (%)	Conductivité liquide NIST (W/m/K)	Conductivité liquide calculée (W/m/K)	Déviation relative absolue (%)
280	261.53	319.27	22.08	0.114	0.144	26.02
285	247.79	302.38	22.03	0.112	0.141	25.89
290	235.11	286.48	21.85	0.110	0.139	25.71
295	223.37	271.48	21.54	0.108	0.136	25.47
300	212.47	257.32	21.11	0.107	0.134	25.18
305	202.32	243.92	20.56	0.105	0.131	24.85
310	192.84	231.24	19.91	0.103	0.128	24.47
315	183.96	219.21	19.16	0.101	0.126	24.03
320	175.62	207.79	18.32	0.100	0.123	23.54
325	167.77	196.94	17.39	0.098	0.121	23.00
330	160.36	186.62	16.38	0.096	0.118	22.42
335	153.35	176.79	15.28	0.095	0.115	21.78
340	146.69	167.42	14.13	0.093	0.113	21.10
345	140.36	158.47	12.90	0.092	0.110	20.38
350	134.33	149.93	11.62	0.090	0.108	19.61

355	128.56	141.77	10.28	0.088	0.105	18.79
360	123.03	133.96	8.89	0.087	0.102	17.93
365	117.72	126.49	7.45	0.085	0.100	17.04
370	112.6	119.33	5.98	0.084	0.097	16.10
375	107.67	112.47	4.46	0.082	0.095	15.12
380	102.89	105.89	2.91	0.081	0.092	14.11
385	98.258	99.57	1.34	0.080	0.090	13.07
390	93.751	93.50	0.27	0.078	0.088	11.98

Tableau 7.13 Résultats de calculs de propriétés de transport en phase liquide pour l'isopentane après correction

T^{sat} (K)	Viscosité liquide NIST (µPa-s)	Viscosité liquide calculée (µPa-s)	Déviation relative absolue (%)	Conductivité liquide NIST (W/m/K)	Conductivité liquide calculée (W/m/K)	Déviation relative absolue (%)
280	261.53	262.55	0.39	0.114	0.114	0.19
285	247.79	248.86	0.43	0.112	0.112	0.19
290	235.11	236.17	0.45	0.110	0.110	0.19
295	223.37	224.39	0.45	0.108	0.108	0.19
300	212.47	213.43	0.45	0.107	0.106	0.18
305	202.32	203.20	0.43	0.105	0.105	0.17
310	192.84	193.64	0.42	0.103	0.103	0.16
315	183.96	184.69	0.40	0.101	0.101	0.15
320	175.62	176.29	0.38	0.100	0.100	0.14
325	167.77	168.38	0.36	0.098	0.098	0.13
330	160.36	160.91	0.34	0.096	0.096	0.12
335	153.35	153.85	0.33	0.095	0.095	0.11
340	146.69	147.16	0.32	0.093	0.093	0.10
345	140.36	140.80	0.32	0.092	0.091	0.09
350	134.33	134.74	0.31	0.090	0.090	0.09
355	128.56	128.95	0.30	0.088	0.088	0.08
360	123.03	123.41	0.30	0.087	0.087	0.07
365	117.72	118.08	0.30	0.085	0.085	0.07
370	112.6	112.94	0.30	0.084	0.084	0.06
375	107.67	107.98	0.29	0.082	0.082	0.05
380	102.89	103.17	0.27	0.081	0.081	0.04
385	98.258	98.50	0.25	0.080	0.080	0.03
390	93.751	93.95	0.21	0.078	0.078	0.01

7.3.7 La viscosité et la conductivité du R245fa

Tableau 7.14 Résultats de calculs de propriétés de transport en phase vapeur pour le R245fa

T^{sat}	Viscosité	Viscosité	Déviation	Conductivité	Conductivité	Déviation

(K)	Vapeur NIST (µPa-s)	Vapeur calculée (µPa-s)	relative absolue (%)	Vapeur NIST (W/m/K)	Vapeur calculée (W/m/K)	relative absolue (%)
280	9.65	11.05	14.45	0.012	0.012	6.57
285	9.82	11.25	14.53	0.012	0.013	7.29
290	9.99	11.45	14.62	0.012	0.013	7.87
295	10.15	11.64	14.71	0.013	0.014	8.33
300	10.32	11.84	14.79	0.013	0.014	8.68
305	10.48	12.04	14.86	0.013	0.015	8.92
310	10.65	12.24	14.94	0.014	0.015	9.06
315	10.82	12.44	14.98	0.014	0.015	9.11
320	10.99	12.64	15.02	0.015	0.016	9.07
325	11.17	12.84	15.02	0.015	0.016	8.95
330	11.35	13.05	14.99	0.015	0.017	8.75
335	11.53	13.25	14.92	0.016	0.017	8.46
340	11.72	13.46	14.80	0.016	0.018	8.10
345	11.92	13.67	14.61	0.017	0.018	7.66
350	12.13	13.88	14.36	0.017	0.018	7.12
355	12.36	14.09	14.03	0.018	0.019	6.48
360	12.60	14.31	13.60	0.018	0.019	5.73
365	12.86	14.54	13.06	0.019	0.020	4.85
370	13.15	14.78	12.39	0.019	0.020	3.80
375	13.47	15.04	11.59	0.020	0.021	2.56
380	13.84	15.30	10.62	0.021	0.021	1.09
385	14.25	15.60	9.47	0.022	0.022	0.68
390	14.73	15.92	8.11	0.023	0.022	2.81

Tableau 7.15 Résultats de calculs de propriétés de transport en phase liquide pour le R245fa

T^{sat} (K)	Viscosité liquide NIST (µPa-s)	Viscosité liquide calculée (µPa-s)	Déviation relative absolue (%)	Conductivité liquide NIST (W/m/K)	Conductivité liquide calculée (W/m/K)	Déviation relative absolue (%)
280	519.33	481.72	7.24	0.094	0.090	3.98
285	484.51	450.83	6.95	0.092	0.088	4.94
290	452.93	422.13	6.80	0.091	0.085	5.86
295	424.13	395.38	6.78	0.089	0.083	6.75
300	397.76	370.41	6.88	0.088	0.081	7.60
305	373.52	347.03	7.09	0.086	0.079	8.40
310	351.14	325.11	7.41	0.084	0.077	9.16
315	330.40	304.50	7.84	0.083	0.075	9.88
320	311.13	285.11	8.36	0.081	0.073	10.55
325	293.14	266.81	8.98	0.080	0.071	11.18
330	276.32	249.53	9.69	0.078	0.069	11.76
335	260.52	233.19	10.49	0.076	0.067	12.31
340	245.64	217.70	11.37	0.075	0.065	12.81

345	231.59	203.01	12.34	0.073	0.063	13.29
350	218.28	189.06	13.39	0.072	0.062	13.74
355	205.64	175.80	14.51	0.070	0.060	14.17
360	193.60	163.17	15.72	0.068	0.058	14.60
365	182.09	151.13	17.00	0.067	0.057	15.03
370	171.06	139.65	18.36	0.065	0.055	15.49
375	160.46	128.68	19.80	0.064	0.054	16.00
380	150.23	118.19	21.33	0.062	0.052	16.57
385	140.31	108.15	22.92	0.061	0.050	17.26
390	130.66	98.51	24.61	0.059	0.049	18.08

7.3.8 La viscosité et la conductivité du mélange R245fa+iC5

Tableau 7.16 Résultats de calculs de propriétés de transport en phase vapeur pour le mélange R245fa/Isopentane

T^{sat} (K)	Viscosité Vapeur NIST (µPa-s)	Viscosité Vapeur calculée (µPa-s)	Déviation relative absolue (%)	Conductivité Vapeur NIST (W/m/K)	Conductivité Vapeur calculée (W/m/K)	Déviation relative absolue (%)
280	9.61	10.92	13.63	0.012	0.013	6.48
290	9.96	11.30	13.48	0.013	0.014	7.40
300	10.31	11.69	13.35	0.013	0.014	7.84
310	10.67	12.08	13.25	0.014	0.015	7.82
320	11.02	12.47	13.19	0.015	0.016	7.39
330	11.37	12.87	13.17	0.016	0.017	6.58
340	11.72	13.27	13.23	0.017	0.018	5.37
350	12.07	13.69	13.42	0.018	0.019	3.72
360	12.42	14.13	13.78	0.019	0.020	1.59
370	12.98	14.60	12.49	0.021	0.021	1.08
380	13.68	15.15	10.78	0.023	0.022	4.45
390	14.57	15.82	8.60	0.025	0.022	8.74

Tableau 7.17 Résultats de calculs de propriétés de transport en phase liquide pour le mélange R245fa/Isopentane

T^{sat} (K)	Viscosité liquide NIST (µPa-s)	Viscosité liquide calculée (µPa-s)	Déviation relative absolue (%)	Conductivité liquide NIST (W/m/K)	Conductivité liquide calculée (W/m/K)	Déviation relative absolue (%)
280	461.24	366.81	20.47	0.095	0.080	15.67
290	403.98	331.82	17.86	0.092	0.078	15.65
300	356.09	298.92	16.05	0.089	0.075	15.77
310	315.39	268.10	14.99	0.085	0.072	15.99
320	280.28	239.31	14.62	0.082	0.069	16.26

330	249.59	212.47	14.87	0.079	0.066	16.56
340	222.41	187.51	15.69	0.075	0.063	16.88
350	198.07	164.31	17.04	0.072	0.060	17.23
360	176	142.77	18.88	0.069	0.057	17.67
370	155.75	122.75	21.19	0.066	0.054	18.27
380	136.93	104.14	23.95	0.063	0.051	19.21
390	119.16	86.75	27.20	0.060	0.048	20.72

7.4 Equations utilisées dans le modèle non nominal (le cas du R245fa)

//Température de la source froide

$$T0_{air} = variable \quad (7.2)$$

//débits

$$m = variable \quad (7.3)$$

$$m_{air} = cste \quad (7.4)$$

//Turbine

$$KTORC = cste \quad (7.5)$$

$$//Turbine\ BP$$

$$KTBP = cste \quad (7.6)$$

$$//Turbine\ HP$$

$$KTHP = cste \quad (7.7)$$

$$//ACC$$

$$UAv_{ACC} = cste \quad (7.8)$$

$$UAlv_{ACC} = cste \quad (7.9)$$

$$//CB$$

$$UAlv_{CB} = cste \quad (7.10)$$

$$UAl_{CB} = cste \quad (7.11)$$

$$//Resurchauffeur$$

$$UA_{Resurch} = cste \quad (7.12)$$

$$//Rechauffeur$$

$$UA_{Prech} = cste \quad (7.13)$$

$$//Modele\ Turbine\ ORC$$

$$mORC^2(T1o + 273.15)/KTORC^2 = HP_{ORC}^2 - BP_{ORC}^2 \quad (7.14)$$

$$T1o = T_{sat}(R245fa, P = HP_{ORC}) \quad (7.15)$$

$$h1o = enthalpy(R245fa, P = HP_{ORC}, x = 1) \quad (7.16)$$

$$eta_{TORC} = cste \quad (7.17)$$

$$s1o = entropy(R245fa, P = HP_{ORC}, x = 1) \quad (7.18)$$

$$h2o_is = enthalpy(R245fa, P = BP_{ORC}, s = s1o) \quad (7.19)$$

$$h2o = (h2o_{is} - h1o) * (eta)_{TORC} + h1o \quad (7.20)$$

$$T2o = temperature(R245fa, P = BP_{ORC}, h = h2o) \quad (7.21)$$

$$TauTORC = mORC\ (h2o - h1o) \quad (7.22)$$

$$//Modele\ Aerocondenseur$$

$$BP_{ORC} = P_{sat}(R245fa, T = T3o) \quad (7.23)$$

$$h3o = enthalpy(R245fa, P = BP_{ORC}, x = 0) \quad (7.24)$$

$$h0_{air} = enthalpy(air, T = T0_{air}) \quad (7.25)$$

$$h1_{air} = enthalpy(air, T = T1_{air}) \quad (7.26)$$

$$Qlv_{ACC} = -mORC(h3o - h_ACC_x1) \quad (7.27)$$

$$Qv_{ACC} = -mORC(h_ACC_{x1} - h2o) \quad (7.28)$$

$$Qv_{ACC} = m_{air}(h1_{air} - hint_{air}) \quad (7.29)$$

$$Qlv_{ACC} = -m_{air} * (h0_{air} - hint_{air}) \quad (7.30)$$

$$hint_air = enthalpy(air, T = Tint_air) \quad (7.31)$$

$$arg1 = ln((T3o - T0_{air})/(T3o - Tint_{air})) \quad (7.32)$$

$$DTLMlv_{ACC} = ((T3o - T0_{air}) - (T3o - Tint_{air}))/arg1 \quad (7.33)$$

$$arg2 = ln((T2o - T1_{air})/(T3o - Tint_{air})) \quad (7.34)$$

$$DTLMv_{ACC} = ((T2o - T1_{air}) - (T3o - Tint_{air}))/arg2 \quad (7.35)$$

$$Qlv_{ACC} = UAlv_{ACC} * DTLMlv_{ACC} \quad (7.36)$$

$$Qv_{ACC} = UAv_{ACC} * DTLMv_{ACC} \quad (7.37)$$

$$//Modele\ Pompe\ ORC$$
$$s3o = entropy(R245fa, P = BP_{ORC}, x = 0) \quad (7.38)$$
$$eta_pompeORC = cste \quad (7.39)$$
$$h4o_is = enthalpy(R245fa, P = HP_{ORC}, s = s3o) \quad (7.40)$$
$$h4o = (h4o_is - h3o)/eta_{pompeORC} + h3o \quad (7.41)$$
$$T4o = temperature(R245fa, P = HP_{ORC}, h = h4o) \quad (7.42)$$
$$TauPompeORC = mORC(h4o - h3o) \quad (7.43)$$

$$//Modele\ Condenseur - Bouilleur$$
$$h3 = enthalpy(Steam, x = 0, P = BP) \quad (7.44)$$
$$T3 = T_sat(Steam, P = BP) \quad (7.45)$$

$$Qlv_{CB} = mORC(h1o - h_{CB}_x0) \quad (7.46)$$
$$Qlv_{CB} = mTBP(h2 - h_{CB}_int) \quad (7.47)$$
$$Ql_{CB} = mORC(hCB_x0 - h4o) \quad (7.48)$$

$$Ql_{CB} = mTBP(hCB_int - h3) \quad (7.49)$$

$$arg3 = ln((T3 - T4o)/(T3 - T1o)) \quad (7.50)$$
$$DTLMl_{CB} = ((T3 - T4o) - (T3 - T1o))/arg3 \quad (7.51)$$
$$DTLMlv_CB = T3 - T1o \quad (7.52)$$
$$Qlv_{CB} = UAlv_{CB}\ DTLMlv_{CB} \quad (7.53)$$
$$Ql_{CB} = UAl_{CB}\ DTLMl_{CB} \quad (7.54)$$

$$//modele\ Turbine\ BP$$
$$mTBP^2 * (T2a + 273.15)/(KTBP^2) = MP^2 - BP^2 \quad (7.55)$$
$$eta_TBP = cste \quad (7.56)$$
$$s2a = entropy(steam, T = T2a, P = MP) \quad (7.57)$$
$$h2a = enthalpy(steam, T = T2a, P = MP) \quad (7.58)$$
$$h2_is = enthalpy(steam, P = BP, s = s2a) \quad (7.59)$$
$$h2 = (h2_{is} - h2a)\ (eta)_{TBP} + h2a \quad (7.60)$$
$$T2 = T_{sat}(steam, P = BP) \quad (7.61)$$
$$TauTBP = mTBP(h2 - h2a) \quad (7.62)$$

$$//Modele\ Pompe\ TBP$$
$$eta_pompeTBP = 0.70 \quad (7.63)$$
$$s3 = entropy(steam, P = BP, x = 0) \quad (7.64)$$
$$h4_is = enthalpy(steam, P = HP, s = s3) \quad (7.65)$$
$$h4 = (h4_is - h3)/eta_pompeTBP + h3 \quad (7.66)$$
$$TauPompe1 = mTBP(h4 - h3) \quad (7.67)$$

$$//modele\ Resurchauffeur$$
$$h1mel2a = enthalpy(steam, x = 0, P = HP_{outGV}) \quad (7.68)$$
$$s1mel2a = entropy(steam, x = 0, P = HP_{outGV}) \quad (7.69)$$
$$T1mel2a = T_{sat}(steam, P = HP_{outGV}) \quad (7.70)$$

$$Q_{Resurch} = m1(h1div - h1mel2a) \quad (7.71)$$
$$Q_{Resurch} = mTBP(h2a - h2div) \quad (7.72)$$

$$arg6 = ln((T1div - T2a)/(T1mel2a - T2div)) \quad (7.73)$$
$$DTLM_{Resurch} = ((T1div - T2a) - (T1mel2a - T2div))/arg6 \quad (7.74)$$
$$Q_{Resurch} = UA_{Resurch} DTLM_{Resurch} \quad (7.75)$$

$$//modele\ Turbine\ HP$$
$$mTHP^2\ (T1div + 273.15)/KTHP^2 = HP_{outGV}^2 - MP^2 \quad (7.76)$$
$$s1div = entropy(steam, T = T1div, P = HP_{outGV}) \quad (7.77)$$
$$h2div_{is} = enthalpy(steam, P = MP, s = s1div) \quad (7.78)$$
$$(eta)_{THP} = cste \quad (7.79)$$
$$h2div = (h2div_{is} - h1div)\ eta_THP + h1div \quad (7.80)$$

$T2div = temperature(steam, h = h2div, P = MP)$ (7.81)
$h1div = enthalpy(steam, P = HP_{outGV}, T = T1div)$ (7.82)
$TauTHP = mTHP(h2div - h1div)$ (7.83)

$//modele\ Prechauffeur$
$h1mel3a = enthalpy(steam, P = MP, x = 0)$ (7.84)
$T1mel3a = T_{sat}(steam, P = MP)$ (7.85)

$m2 = mTHP - mTBP$ (7.86)
$m = mTHP + m1$ (7.87)
$Q_{Prech} = m2(h2div - h1mel3a)$ (7.88)
$Q_{Prech} = m(h1a - h1mel)$ (7.89)
$h1a = enthalpy(steam, T = T1a, P = HP)$ (7.90)

$arg7 = ln((T1mel3a - T1mel)/(T2div - T1a))$ (7.91)
$DTLM_{Prech} = ((T1mel3a - T1mel) - (T2div - T1a))/arg7$ (7.92)
$Q_{Prech} = UA_{Prech} DTLM_{Prech}$ (7.93)

$//Modele\ Pompe\ Prelevement\ Branche\ Prechauffeur$
$eta_pompe3 = cste$ (7.94)
$s1mel3a = entropy(steam, P = MP, x = 0)$ (7.95)
$h1mel3_is = enthalpy(steam, s = s1mel3a, P = HP)$ (7.96)
$h1mel3 = (h1mel3_is - h1mel3a)/eta_pompe3 + h1mel3a$ (7.97)
$TauPompe3 = m2 * (h1mel3 - h1mel3a)$ (7.98)

$//Modele\ Pompe\ Prelevement\ Branche\ Resurchauffeur$
$eta_pompe2 = cste$ (7.99)
$h1mel2_is = enthalpy(steam, s = s1mel2a, P = HP)$ (7.100)
$h1mel2 = (h1mel2_is - h1mel2a)/eta_pompe2 + h1mel2a$ (7.101)
$TauPompe2 = m1(h1mel2 - h1mel2a)$ (7.102)

$//Melangeur$
$h1mel * m = h1mel2\ \ m1 + h1mel3\ m2 + h4\ \ mTBP$ (7.103)
$h1mel = enthalpy(steam, T = T1mel, P = HP)$ (7.104)

$//GV$
$HP_outGV = HP * cste$ (7.105)
$Q_GV = m * (h1div - h1a)$ (7.106)

$//Ex\ Sodium\ water\ secondaire$
$UA_water_Na_s = cste$ (7.107)
$Q_GV = m_Na\ \ (h_Na_out - h_Na_in)$ (7.108)
$P_Na = cste$ (7.109)
$T_Na_out = cste$ (7.110)
$h_Na_out = enthalpy(sodium, T = T_Na_out, P = P_Na)$ (7.111)
$h_Na_in = enthalpy(sodium, T = T_Na_in, P = P_Na)$ (7.112)
$arg8 = ln((T_Na_out - T1div)/(T_Na_in - T1a))$ (7.113)
$DTLM_Na_s = ((T_Na_out - T1div) - (T_Na_in - T1a))/arg8$ (7.114)
$Q_GV = UA_water_Na_s * DTLM_Na_s$ (7.115)

$//Sodium\ water\ primaire$
$UA_water_Na_p = cste$ (7.116)
$m_GV_primaire = cste$ (7.117)
$T_GV_primaire_entree = cste$ (7.118)
$h_GV_primaire_entree = enthalpy(steam, T = T_GV_primaire_entree, P = cste)$ (7.119)

$h_GV_primaire_sortie = enthalpy(steam, T = T_GV_primaire_sortie, P = cste)$ (7.120)
$Q_GV = m_GV_primaire * (h_GV_primaire_entree - h_GV_primaire_sortie)$ (7.121)
$arg9 = ln((T_GV_primaire_sortie - T_Na_in)/(T_GV_primaire_entree - T_Na_out))$ (7.122)

$$DTLM_Na_p = ((T_GV_primaire_sortie - T_Na_in) - (T_GV_primaire_entree - T_Na_out))/arg9 \quad (7.123)$$

$$Q_GV = UA_water_Na_p * DTLM_Na_p \quad (7.124)$$

$$//Performance$$

$$RendementCycle = -(TauTHP + TauTBP + TauTORC + TauPompeORC + TauPompe1 + TauPompe2 + TauPompe3 + PVR)/Q_GV \quad (7.125)$$

$$PuissanceCycle = -(TauTHP + TauTBP + TauTORC + TauPompeORC + TauPompe1 + TauPompe2 + TauPompe3 + PVR) * 1e - 3 \quad (7.126)$$

$$//PVR$$

$$SectionTurbine = cste \quad (7.127)$$

$$nbUnit = cste \quad (7.128)$$

$$vTurbine = Volume(R245fa, T = T2o, P = BP_{ORC}) \quad (7.129)$$

$$vitesseEchappement = mORC\ vTurbine/SectionTurbine/nbUnit \quad (7.130)$$

$$PVR = mORC\ \ vitesseEchappement^2/2 \quad (7.131)$$

7.5 Résultats de calcul de revenu de la vente d'électricité 2012-2013

7.5.1 Résultats sur la période 12/02/2012-17/04/2012

Les données d'entrée de la température et du prix de l'électricité sont présentées dans la Figure 7.2 et la Figure 7.3. Le prix d'électricité baisse légèrement lorsque la température remonte. Nous observons également un pic de demande au début du mois de février correspondant à des jours très froids. Ce scénario est favorable aux cycles bi-étagés. Exprimé en pourcentage, le gain économique est légèrement supérieur au gain énergétique. Le Tableau 7.18 précise les gains énergétique et économique des cycles bi-étagés.

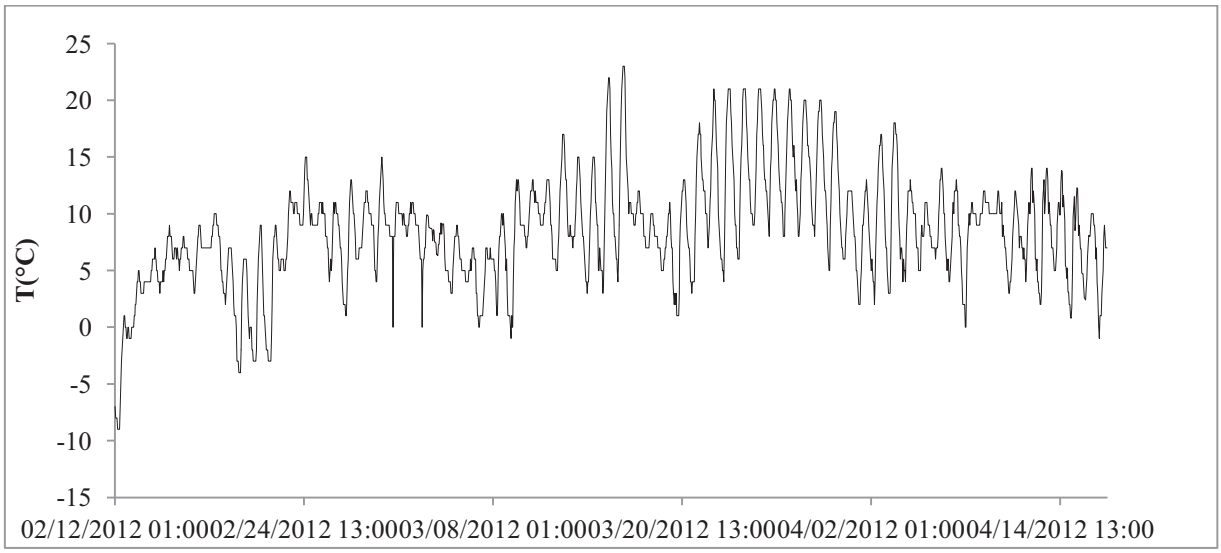


Figure 7.2 Variation de la température de l'air par heure (période 12/02/2012 - 17/04/2012)

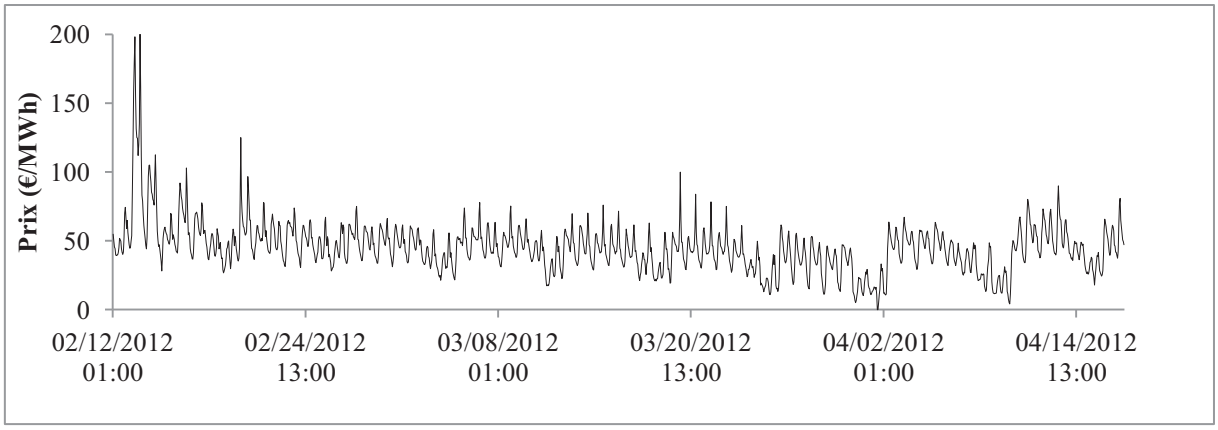


Figure 7.3 Variation de prix (European Electricity Index) (période 12/02/2012-17/04/2012)

Tableau 7.18 Gain énergétique et économique entre des cycles bi-étagés (période 12/02/2012-17/04/2012) par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (GWh)	Gain énergétique (%)	Vente (M€)	Gain économique (%)
R245fa	1 009	1.59	45.42	1.69
iC5	1 008	1.46	45.36	1.55
R1233zd	1 012	1.87	45.54	1.97
NH3	1 015	2.16	45.68	2.27

R245fa+iC5	1 008	1.44	45.35	1.55
Eau*	994	-	44.66	-

7.5.2 Résultats sur la période 19/04/2012-22/04/2012

Sur la période 19/04/2012-22/04/2012, le prix de l'électricité et la température de l'air ne varient pas de manière très importante. Le gain en chiffre d'affaire de la vente d'électricité en pourcentage est quasi-équivalent au gain énergétique. Le Tableau 7.19 présente ces valeurs qui restent très proches.

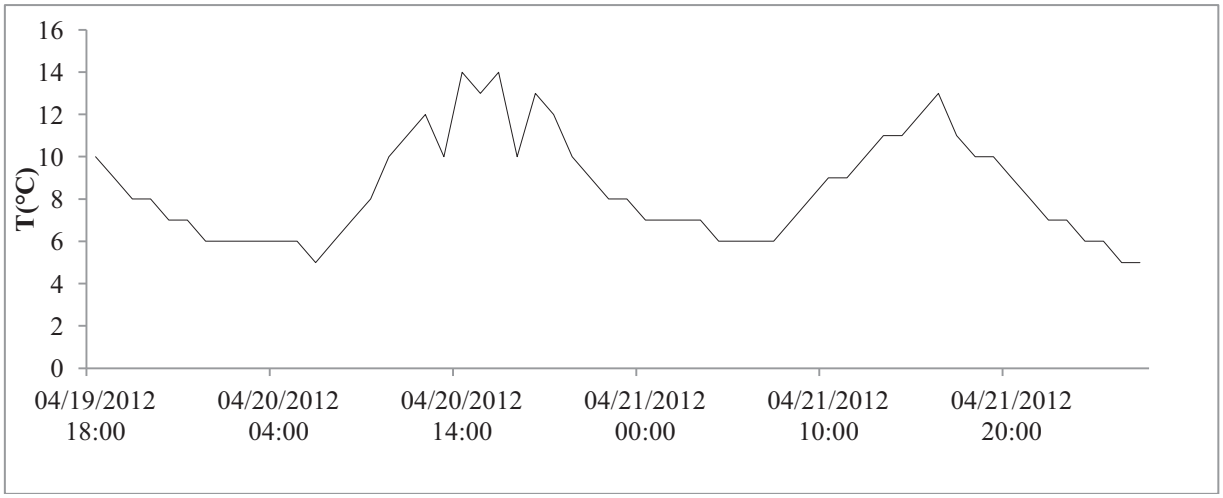


Figure 7.4 Variation de température de l'air par heure (période 19/04/2012-22/04/2012)

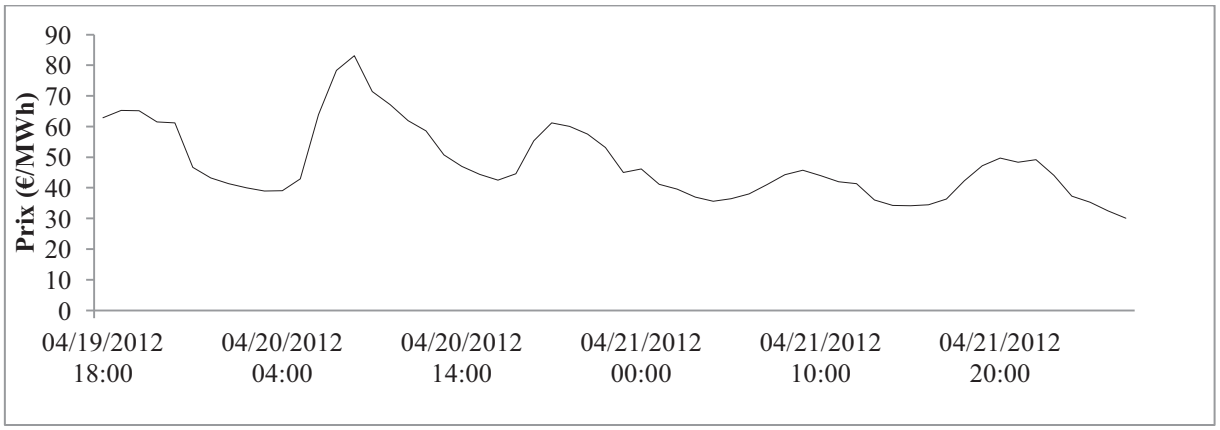


Figure 7.5 Variation de prix (European Electricity Index) (période 19/04/2012-22/04/2012)

Tableau 7.19 Gain énergétique et économique des cycles bi-étagés (période 19/04/2012-22/04/2012) par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (MWh)	Gain énergétique (%)	Vente (M€)	Gain économique (%)
R245fa	37 324	1.43	1.79	1.41
iC5	37 276	1.30	1.78	1.28
R1233zd	37 442	1.75	1.79	1.73
NH3	37 533	2.00	1.80	1.98
R245fa+iC5	37 252	1.24	1.78	1.22

Eau*	36 796	-	1.76	-

7.5.3 Résultats sur la période 25/04/2012-18/05/2012

Sur la période 25/04/2012-18/05/2012, nous faisons les mêmes observations que sur la période précédente. Le Tableau 7.20 présente les résultats des gains énergétique et économique qui sont quasiment identique sur la période.

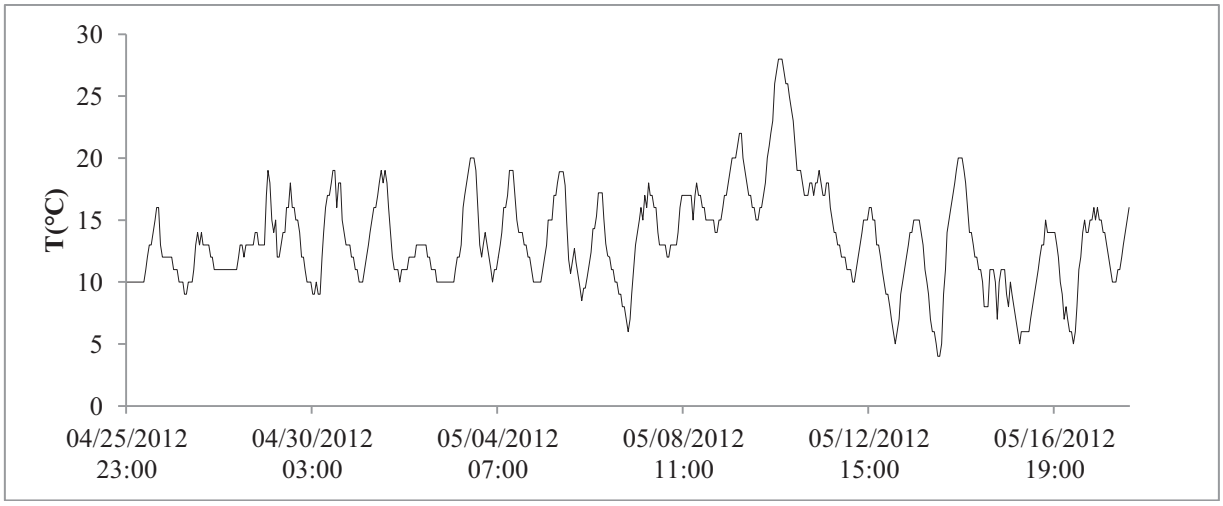


Figure 7.6 Variation de la température de l'air par heure (période 25/04/2012-18/05/2012)

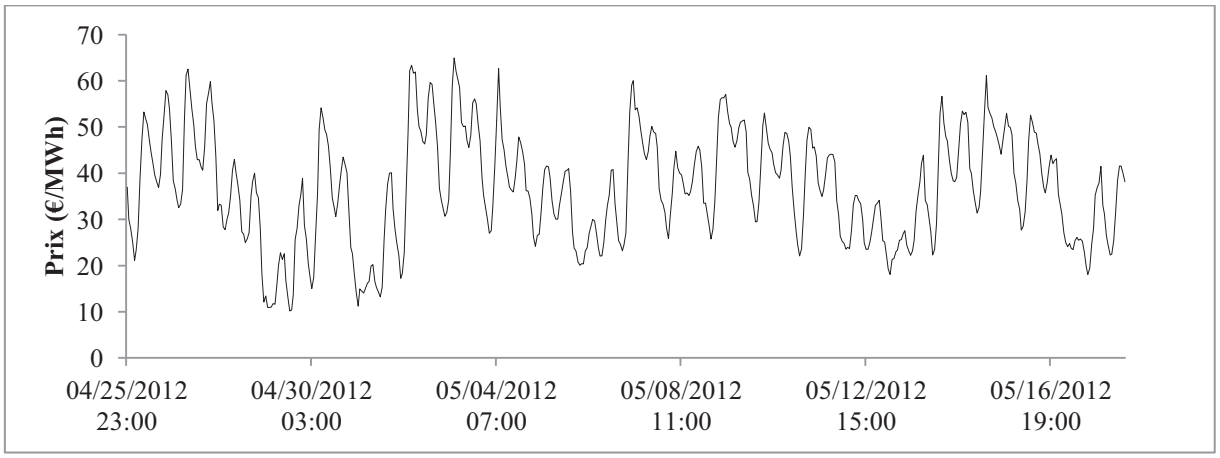


Figure 7.7 Variation de prix (European Electricity Index) (période 25/04/2012-18/05/2012)

Tableau 7.20 Gain énergétique et économique des cycles bi-étagés (période 25/04/2012-18/05/2012) par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (MWh)	Gain énergétique	Vente (M€)	Gain économique
R245fa	342 464	0.51%	12.59	0.51%
iC5	342 210	0.43%	12.58	0.44%
R1233zd	342 907	0.64%	12.61	0.63%
NH3	344 142	1.00%	12.65	1.00%
R245fa+iC5	342 129	0.41%	12.58	0.41%
Eau*	340 731	-	12.53	-

7.5.3.1 Résultats sur la période 18/01/2013-21/01/2013

Sur la période 18/01/2013-21/01/2013, la température ambiante est restée basse. La situation est avantageuse pour le cycle bi-étagé et permet de produire un surplus d'électricité. Nous observons une augmentation de performance de 4 % en énergie produite et en revenus. Les données manquantes entre le 22/12/2012 et le 17/01/2013, si elles existaient, pourraient éventuellement améliorer la surpuissance produite.

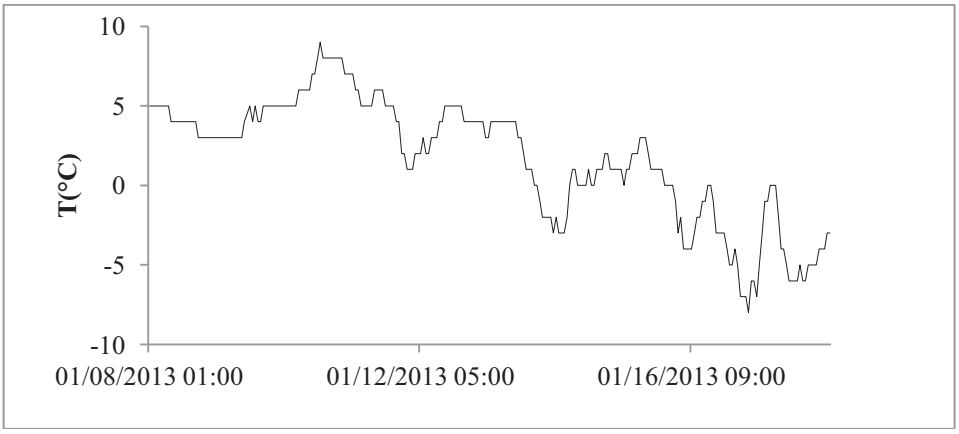


Figure 7.8 Variation de la température de l'air par heure (période 18/01/2013-21/01/2013)

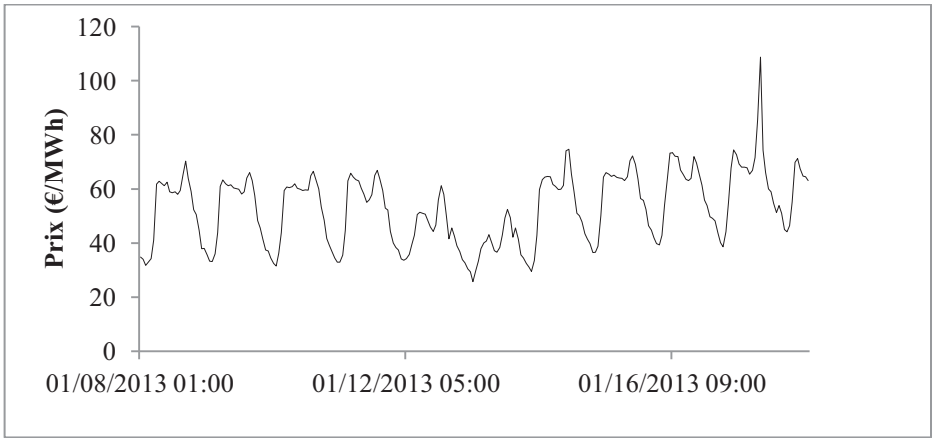


Figure 7.9 Variation de prix (European Electricity Index) (période 18/01/2013-21/01/2013)

Tableau 7.21 Gain énergétique et économique des cycles bi-étagés (période 18/01/2013-21/01/2013) par rapport à un cycle SPX classique à vapeur d'eau

Fluide	Energie (MWh)	Gain énergétique (%)	Vente (M€)	Gain économique (%)
R245fa	163 263	3.62	8.64	3.75
iC5	162 926	3.40	8.62	3.53
R1233zd	163 842	3.99	8.67	4.11
NH3	164 368	4.32	8.70	4.46
R245fa+iC5	163 040	3.48	8.63	3.60
Eau*	157 563	-	8.33	-

7.6 Manuel d'utilisation du CTPlib

Dans le cadre de la thèse « Modélisation d'un cycle de production d'électricité bi-étagé à aéro-réfrigérant sec », nous cherchons déterminer le(s) fluide(s) le(s) plus adapté(s) pour un cycle de Rankine bi-étagé et notamment à pouvoir tester les fluides très récents pour lesquels nous avons peu de données expérimentales (non disponible dans les bases de données telles que RefProp ou DIPPR).

Ainsi un outil de prédiction des propriétés thermodynamiques des fluides a été créé sous Java. Il a été couplé avec le progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim. Ce logiciel, composé 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 & conductivité)

Pour les mélanges:

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

Construit dans le cadre de l'étude des fluides pour la thèse, il est également facile de le faire évoluer. Ce guide d'utilisation a pour but de documenter le programme et expliquer le fonctionnement du programme sous Thermoptim

7.6.1 Utilisation du serveur dans le cas où le fluide est répertorié

L'utilisation du serveur de propriétés thermodynamiques des fluides est relativement simple lorsque les données d'entrée sont déjà classées sous forme d'un fichier .mel. Nous verrons dans la partie comment créer ces fichiers .mel.

Créer d'abord un composant. Dans l'exemple, un point a été choisi pour simplifier. On choisit ici notamment le nom du fluide externe qu'on souhaite d'utiliser.

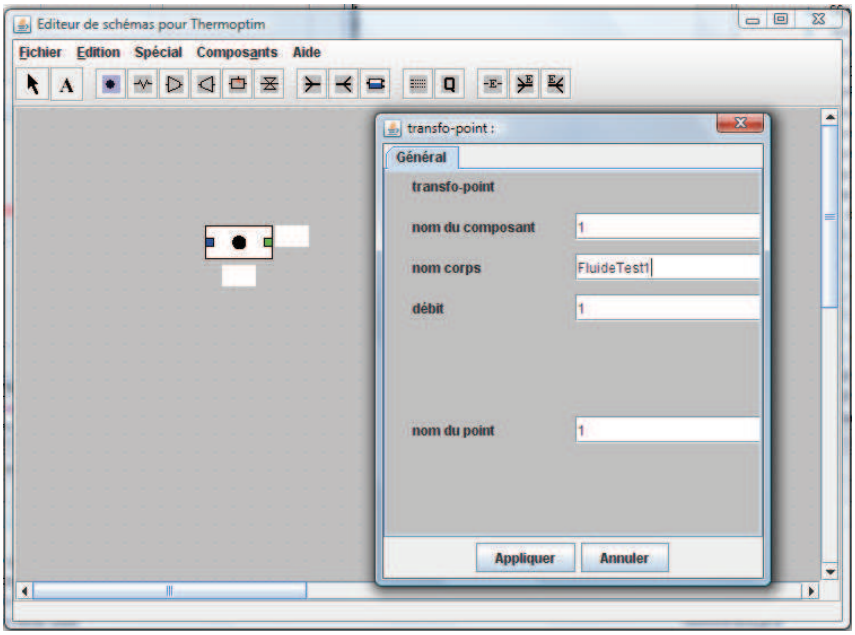


Figure 7.10 Chargement d'un fluide externe : étape 1.

Choix de fluide externe :

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

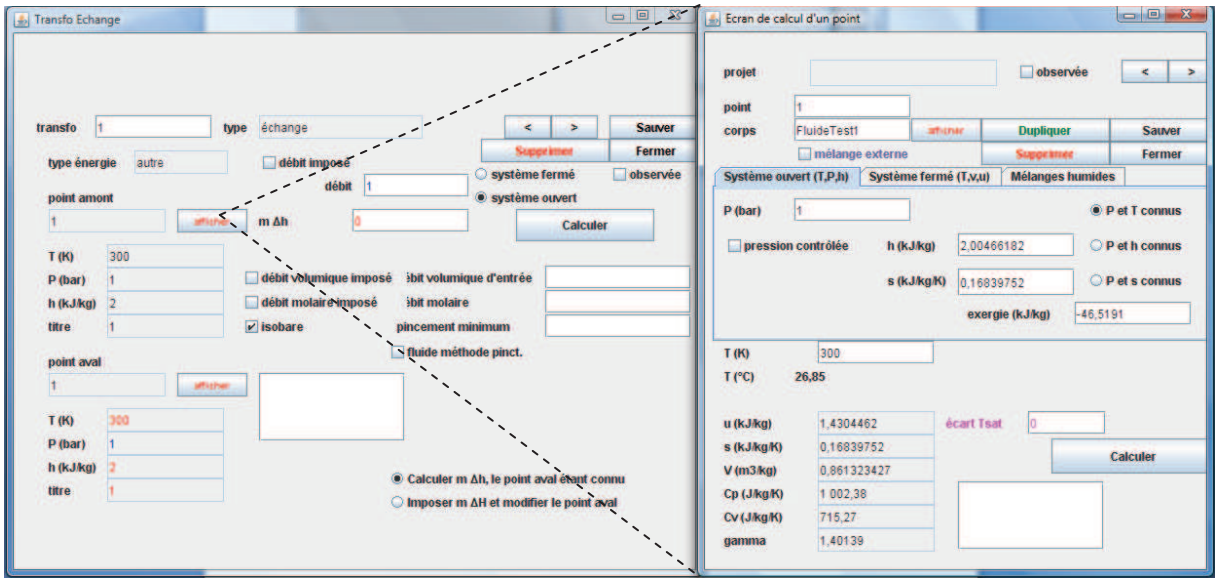


Figure 7.11 Chargement d'un fluide externe : étape 2.

Cocher la case « mélange externe » sous le nom du corps choisi, ici « FluideTest1 », puis appuyer sur la touche Entrée du clavier.

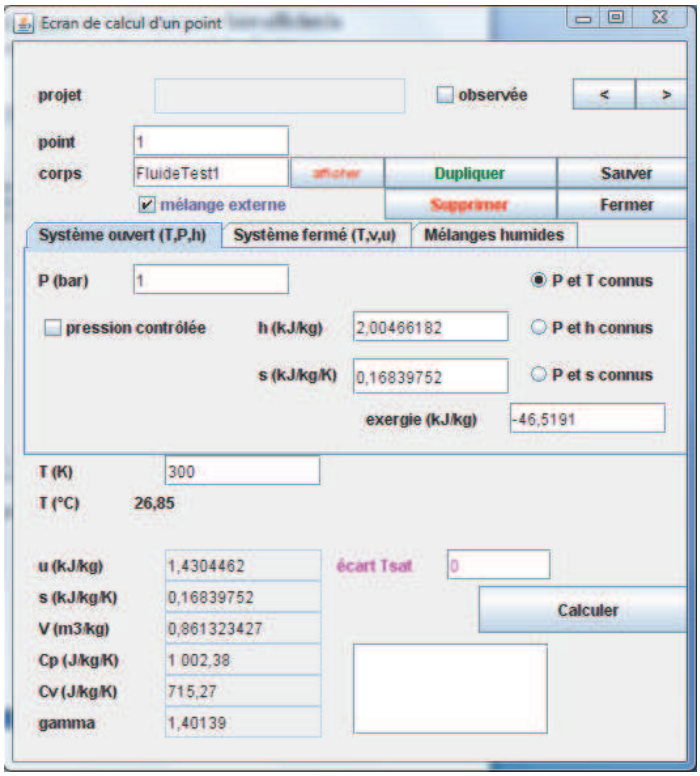


Figure 7.12 Chargement d'un fluide externe : étape 3.

La fenêtre de chargement de fluide apparait. Choisir le fluide dans le menu déroulant. Puis cliquer 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 cela nécessitera un redémarrage de Thermoptim pour prendre en compte le nouveau nom du corps. Les données sur le fluide sélectionné sont ainsi chargées. La figure ci-dessous montre l'exemple du chargement du fluide R365mfc.

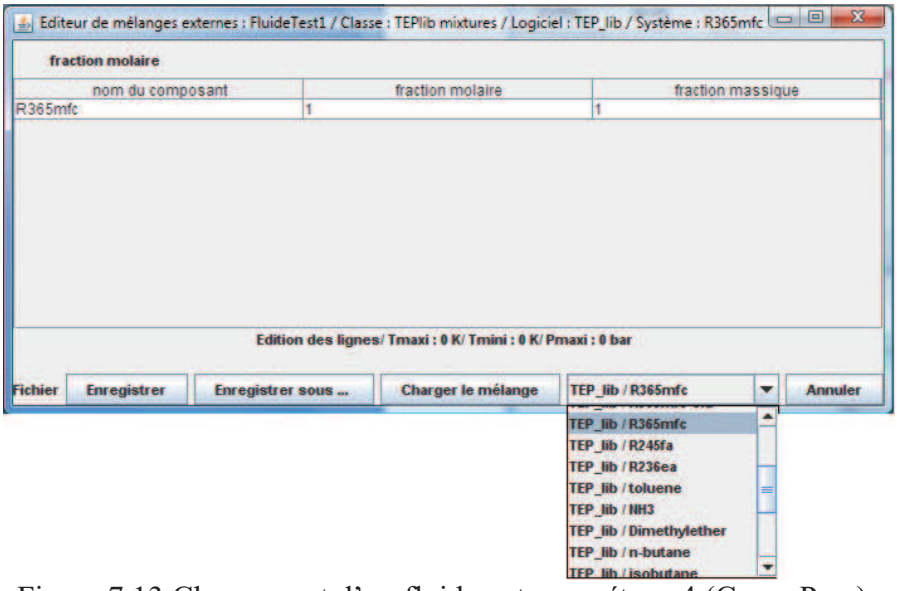


Figure 7.13 Chargement d'un fluide externe : étape 4 (Corps Purs).

Si un mélange est choisi, il est nécessaire d'indiquer la fraction molaire ou massique des différents composants. La figure ci-dessous montre l'exemple du chargement du R410A.

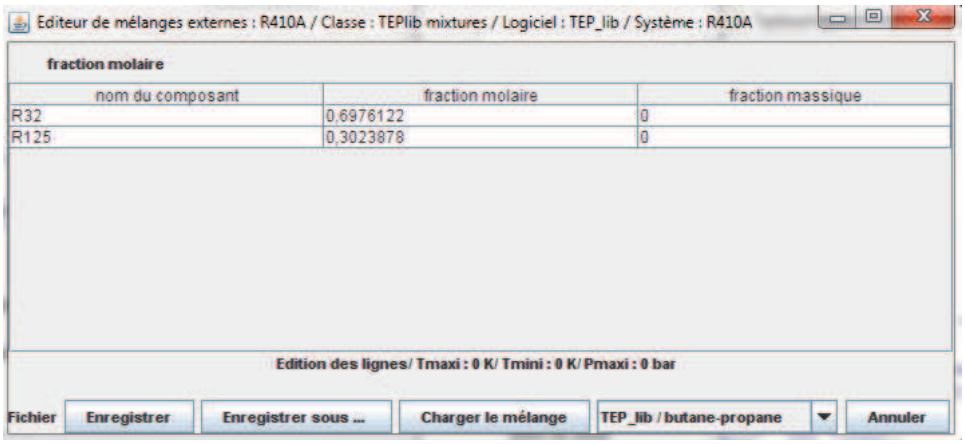
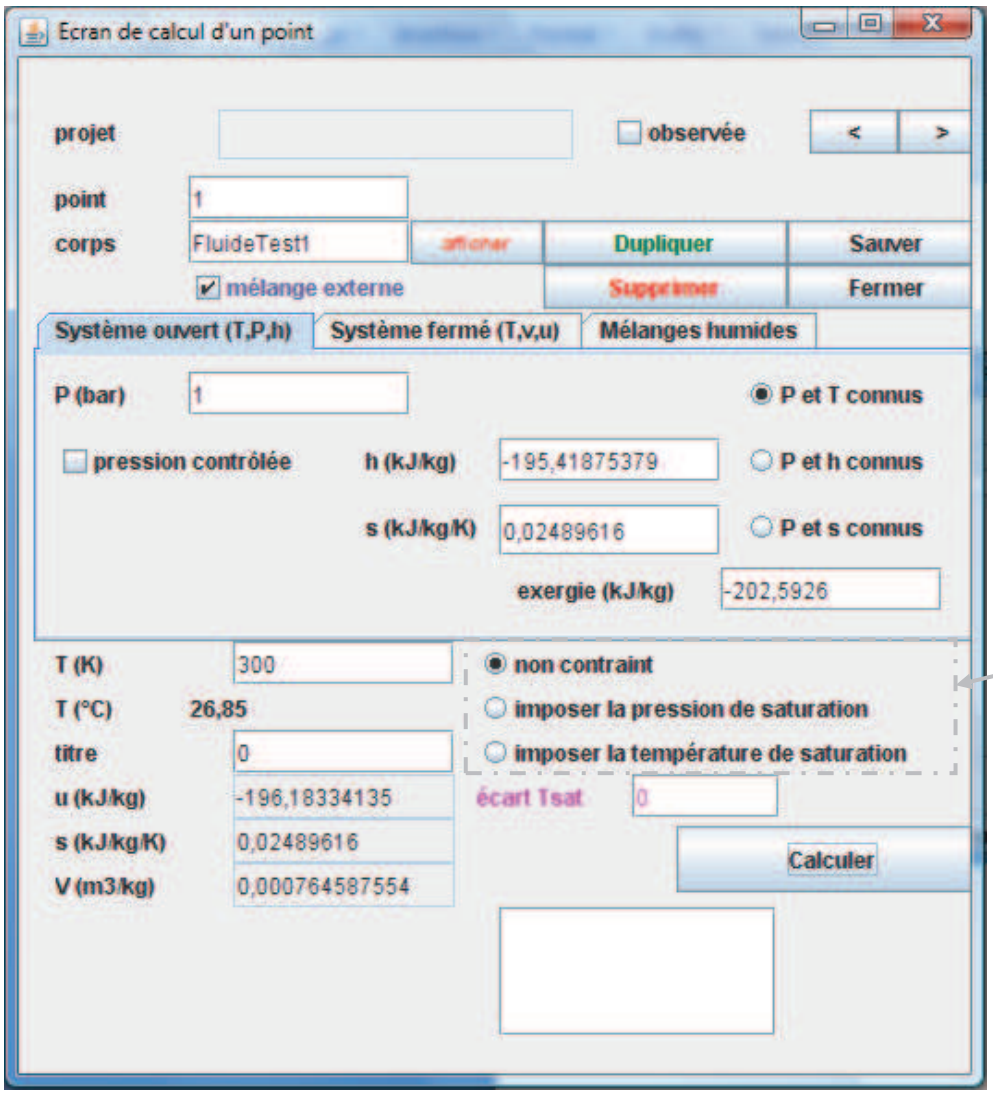


Figure 7.14 Chargement d'un fluide externe : étape 4 (Mélanges).

Suite aux manipulations précédentes, les options de calcul doivent apparaître dans la fenêtre de calcul de point.



Options de calcul apparues après avoir correctement chargé le fluide

Figure 7.15 Chargement d'un fluide externe : étape 5.

Pour calculer des propriétés thermodynamiques des fluides, il suffit de définir les 2 grandeurs connues : (P,T), (P,h) ou (P,s). Puis entrer les valeurs correspondantes. Pour la pression et la température de saturation, cocher « imposer la pression de saturation » ou « imposer la température de saturation » au lieu de « non contraint ».

7.6.2 Ajout d'un corps

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 beaucoup plus longue et complexe.

Chaque corps pur possède un fichier .mel enregistré dans le répertoire \mixtures\TEPlib_MEL. L'exemple suivant illustre la structure du fichier .mel (Mélange R32+R125) :

```
TEP Library mixture data file
[Components] 2
[Models] 0:Van der Waals, 1:RSK, 2:PR, 3: Patel & Teja 4: Harmens & Knapp, 5 SRK controle
EoS     2
[Alpha]0:Soave(1972); 1:generalisee SRK; 2:generalisee PR; 3:Daridon & al. 4:Twu & al. SRK 5: Twu & al. Peng-Robinson 6: Stryjeck & Vera 7: Mathias & Copeman 8:generalisee avec P&T
Alpha   2
[TransportProperties]; 0: Huber 2003, 1:Huber 1996
Huber   0
[component 1]
R32
Tc      351.26
Pc      57.82e5
Vc      0.000122698
M       52.024
omega   0.2769
dipole  1.978
Tref    298.15
Pref    100000
Tb      221.5
Tmini   136.34
Tmaxi   435.00
Pmaxi   5.e6
c1      0
c2      0
c3      0
Cp      1       -4.9572993951       161.9010514031      -98.2908469939
        24.0709909279       -1.0302692021       0.0917908675 2.0246246223
Psat    0       25.11880209  -11.70037444 -8.546353426 1.984377898   2
Tsat    1       221.3787192  19.55768083  2.065270081  0.216925775   0.013194268
CoefVL          0       0       0       0       0
CoefVV          0       0       0       0       0
CoefCL          0       0       0       0       0
```

```
CoefCV      0       0       0       0       0
h0      600
s0      2
u0      0
nbexp   0
[component 2]
R125
Tc      339.17
Pc      3.6177e6
Vc      0.000209247
M       120.02
omega   0.3052
dipole  1.563
Tref    298.15
Pref    100000
Tb      225.06
Tmini   250.
Tmaxi   800.
Pmaxi   1.e8
c1      1
c2      -1
c3      1
Cp      1       86.5631366893       243.7550148869      -258.4102714026
        130.4745177202      -25.8613240666      1.8085468996 -19.5033864954
Psat    0       25.89762677 -12.49477298 -10.56156879 2.409974844  2
Tsat    1       221.3787192  19.55768083  2.065270081  0.216925775  0.013194268
CoefVL      0       0       0       0       0
CoefVV      0       0       0       0       0
CoefCL      0       0       0       0       0
CoefCV      0       0       0       0       0
h0      600
s0      2
u0      0
nbexp   0
[kij]
k12     0       -5.469e-4
k21     -5.469e-4       0
```

21-23

24

25

Ce fichier contient les informations concernant (dans l'ordre de l'apparition) :

1) Nombre de composant : 1 pour les corps purs, plus pour les mélanges
2) Equation d'état choisie
3) Fonction alpha choisie*
4) Modèle de propriétés de transport choisi : Huber 2003 est plus adapté pour les réfrigérants, Huber 1996 est plus adaptés pour les hydrocarbures
5) Nom du fluide
6) Température critique du fluide
7) Pression critique du fluide
8) Volume critique du fluide
9) Masse molaire
10) Le facteur acentrique

11) Moment dipolaire : connaissance facultative qui permet de mieux calculer la viscosité du fluide
12) Température de référence
13) Pression de référence
14) Température d'ébullition
15) Température d'application minimale
16) Température d'application maximale
17) Pression d'application maximale
18) 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 de l'équation d'état donné*
19) La corrélation du Cp, la corrélation utilisée pour initialiser la pression de saturation et la corrélation utilisée pour initialiser la température de saturation*
20) Les paramètres des coefficients correctifs pour les propriétés de transport.
21) Enthalpie de référence
22) Entropie de référence
23) Energie interne de référence
24) Nombre d'expérience, égale à 0 dans cette version (les ajustements des paramètres de modèle sont réalisés par des modules externes)*
25) Coefficients d'interaction binaire pour les mélanges

Si on considère un corps pur uniquement, il suffit de reprendre les éléments listés pour le composant 1.

Cette écriture de fichier fluide doit être strictement respectée !

Lors de la rédaction de ce fichier .mel, on doit apporter un soin particulier aux données étoilées. Les explications sont détaillées ci-dessous:

Pour la fonction alpha choisie, il est nécessaire de prendre celle qui correspondant à l'équation d'état sélectionnée dans la ligne précédente. Si la fonction alpha de Mathias-Copeman est choisie pour la prédiction, on doit disposer soit des valeurs de paramètres C1, C2, C3 fiables, soit des données expérimentales afin d'ajuster les 3 paramètres de Mathias-Copeman.

Pour le calcul de Cp, on a vu qu'il existe plusieurs types de corrélations. Le programme actuel permet d'effectuer des calculs systématiques pour la formulation polynômiale et la formulation DIPPR. Le premier chiffre entier de la ligne, entre 0 et 2, permet le choix de la corrélation :

- 1 pour la corrélation polynômiale
- 2 pour la corrélation DIPPR
- 0 pour les autres formes de corrélation

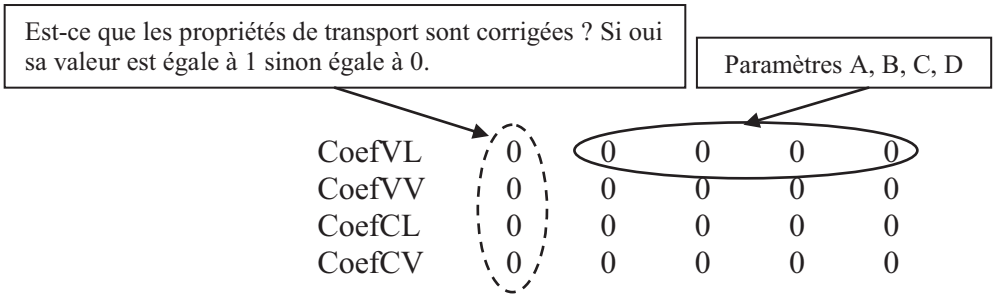
Si on souhaite d'appliquer autres corrélations plus complexes, on est alors obligé d'aller modifier les codes du serveur de propriétés thermodynamiques des fluides. Les classes concernées sont : « fonctionCp(int, double) » et « numeroCas ». Il est conseillé d'appliquer la corrélation polynomiale.

Selon le type de corrélation choisie, les coefficients A, B, C, D, E, F, G, K sont différents. L'unité molaire J/K/mol est utilisée.

Pour l'initialisation de la pression de saturation, on peut choisir également la corrélation utilisée. Le premier chiffre entier de la ligne, entre 0 et 1 permet de choisir respectivement soit la méthode de Lee-Kesler soit la corrélation exponentielle utilisée dans les versions antérieures de Thermoptim.

Pour l'initialisation de la température de saturation, seule la corrélation logarithmique est introduite.

Pour les lignes des paramètres de coefficients correctifs de propriétés de transport, les données sont organisées de la manière suivante :



CoefVL, CoefVV, CoefCL et CoefCV indiquent respectivement les coefficients pour la viscosité liquide, la viscosité vapeur, la conductivité thermique liquide et la conductivité thermique vapeur.

Rappelons que ces corrélations ont été présentées dans la partie théorique.

Après avoir créé le fichier fluide, n'oubliez pas de le mentionner dans le fichier TEPlib.mix sous le répertoire \mixtures\. Une ligne doit être écrite pour présenter chaque nouveau fluide rajouté. Il permet à Thermoptim de prendre en compte l'ajout du fluide. Le format de la ligne est le suivant (l'exemple du R245fa, écrit sur une ligne) :

```
R245fa      R245fa.mel  1     R245fa      MolMass=134PC=36.51     TC=427
      Tmaxi=1100  Tmini=216.7  T0=273.15   P0=36.59027
```

Dans l'ordre, les différents éléments représentent :

- Le nom du fluide affiché dans le menu déroulant lors du chargement du fluide
- Le fichier .mel correspondant*
- Le nombre de composant
- Le nom du fluide
- La masse molaire du fluide
- La pression critique du fluide
- La température critique du fluide
- La température maximale de l'application
- La température minimale de l'application
- La température de référence
- La pression de référence

Ces paramètres permettent une présentation rapide du fluide lors de son chargement et d'indiquer à Thermoptim le fichier fluide .mel utilisé. En revanche, les paramètres utilisés lors des calculs de propriétés du fluide sont bien ceux provenant du fichier .mel.

7.6.3 Structure des classes et fonctions des différentes méthodes

Cette section fournit quelques informations concernant la structure des classes de la bibliothèque CTP et les différentes méthodes implémentées afin de faciliter l'entretien du logiciel.

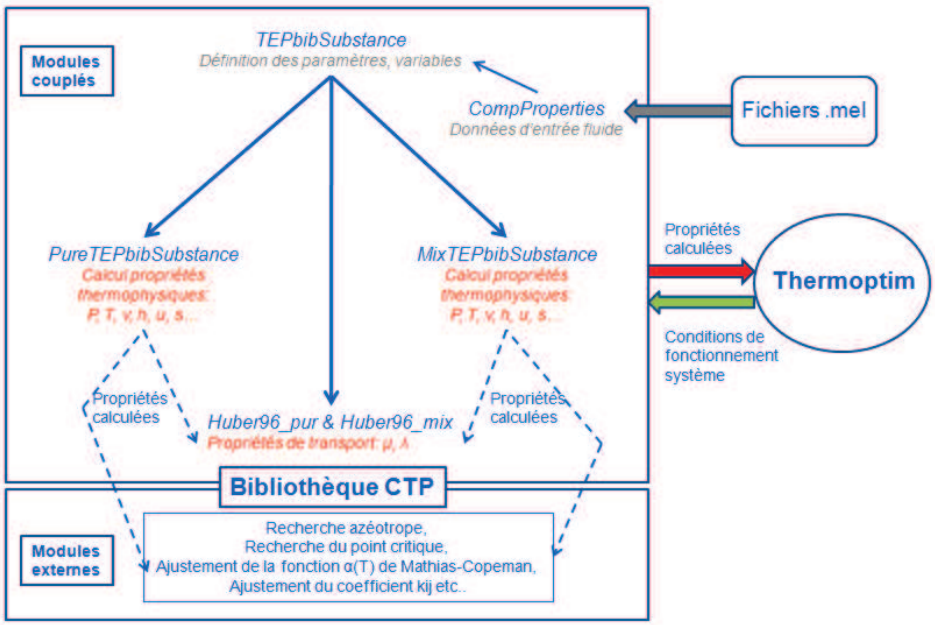


Figure 7.16 Schéma représentant la structure du bibCTP

La liste ci-dessous résume les méthodes java appelées lors des recherches de différentes propriétés thermophysiques du fluide. Ces méthodes renvoient les « sorties finales » c.à.d. les propriétés demandées par Thermoptim.

Corps Purs

Calcul de Pression de saturation :	getSatPressure(double T, double x)
Calcul de Température de saturation :	getSatTemperature(double P, double x)
Calcul des propriétés à T et P données:	calcSubstance(double T, double P, double x)
Calcul des propriétés de transport:	CalcViscosityConductivity(double T, double v)

Mélanges

Calcul de Pression de saturation :	getSatPressure(double T, double x)
Calcul de Température de saturation :	getSatTemperature(double P, double x)
Calcul des propriétés à T et P données:	calcSubstance(double T, double P, double x)
Calcul Flash	flashAdiab(double T, double P)
Calcul des propriétés de transport:	CalcViscosityConductivity(double T, double v)

Cependant notons que les « sorties finales » sont obtenues en faisant intervenir de nombreuses méthodes intermédiaires. La section ci-dessous liste les principales méthodes qui interviennent dans les calculs de propriétés.

Classe concernée : **CompProperties**	
Fonction	Méthode
Evaluation du terme idéal de l'enthalpie, de l'entropie et de l'énergie interne	h_gaz_mol(double) s_gaz_mol(double, double) u_gaz_mol(double)
Fonctions d'initialisation de Psat et Tsat	Tsat_P(double) psat_T(double)

Classe concernée : **PureTEPbibSubstance**	
Fonction	Méthode
Résolution de Tsat ou Psat avec minPack	getFugacityEquality(String, double, int)
Inversions de fonctions	getT_from_hP(double, double) getT_from_sP(double, double) getP_from_sT(double, double) getP_from_hT(double, double)
Résolution des inversions de fonction avec minPack	fcn(int, int, double[], double[], int[])
Calcul des résidus pour les inversions de fonctions	getEnthalpyResidual(double, double, double[]) getEnthalpyResidual2(double, double[], double) getEnthalpyResidual3(double, double[]) getEntropyResidual(double, double, double[]) getEntropyResidual2(double, double[], double) getEntropyResidual3(double, double[]) getFugacityResidual(double, double, double[])
Résolution de l'équation d'état cubique avec la méthode de Cardan	cubique(double, double, double, double)
Calcul des coefficients de l'equation d'etat generalise en Z	equationdEtat(double, double, double, double, double, double)
Calcul de fugacité du fluide	calculFugacite(double, double, double, double, double, double, double)
Détermination des coefficients r1 et r2 selon modèle choisi	r1r2(double, double)
Choix du modèle qui renvoie u,w, Ωa, Ωb	modeleUtilise(int, double, double, double, double)
Choix de la fonction α(T)	alphaUtilise(int, double, double, double, double, double)

Classe concernée : **MixTEPbibSubstance**	
Fonction	Méthode
Calcul de la somme des espèces liquides	sumx(double, double)
Calcul de la somme des espèces vapeur	sumy(double, double)
Calcul de la masse molaire	getMixMolarmass(double[])
Calcul des coefficients a_i et b_i pour chacun des composants du mélange	ai(double) bi(double)
Calcul des coefficients a et b pour le mélange selon la règle de van der Waals	amix(double[], double[], double[][]) bmix(double[], double[])
Calcul de la somme de $\sum_j x_j \left(a_i a_j\right)^{0.5}$	saxi(double[], double[], int, double[][])
Calcul des dérivées de a_i et de a mélange	dai(double) damix(double[], double[], double[], double[][])

Calcul des coefficients cubiques du mélange	$AA(double, double, double) $BB(double, double, double) calcD(double, double, double[], double[][])
Calcul de l'enthalpie, l'entropie et des fugacités	Z(double, double, double[], double[][])
Calcul de Z avec la méthode de Cardan	ZPeng(double, double)
Trie de vecteur (Z)	trie_d(Vector, boolean)
Calcul du point de bulle et du point de rosée	bubblePointP(double[], double, double[][]) dewPointP(double[], double, double[][]) dewPointT(double[], double, double[][]) bubblePointT(double[], double, double[][])
Flash isotherme	flashAdiab(double, double)
Composant du Flash, calcul des fugacités	eLVComp(double, double)
Composant du Flash, vérification de la conservation de masse, calcul avec minPack	liqSplit(double)
Calcul des paramètres pseudo-critiques	CalcTcMix() CalcPcMix() CalcMMix() CalcVcMix()

Classe concernée : **Huber96_pur***	
Fonction	Méthode intermédiaire
Calcul des propriétés de transport, le fluide de est respectivement le R134a (huber2003) et le propane (huber1996)	HUBER2003(double, double) HUBER1996(double, double)
Calcul de la viscosité du gaz dilué (terme idéal). La méthode de Lucas est plus précis, mais nécessite la connaissance du moment dipolaire	Lucas(double, double, double, double) ChapmanEnskog(double, double, double, double)
Calcul du terme idéal de la conductivité	Lamda0(double, double, double, int)
Calcul des paramètres utilisés dans la méthode de Lucas	Fp0(double, double, double, double, double) E(double, double, double)
Calcul du terme $\Delta\eta^R$	VFR(double, double, double) VFR2003(double, double, double)
Calcul du terme $\Delta\lambda^R$	LamdaFR(double, double, double) LamdaFR2003(double, double, double)
Calcul du coefficient de correction F pour le terme résiduel de la viscosité	FVisco(double, double, double) FVisco1996(double, double, double)
Calcul des coefficients de correction pour le terme résiduel de la conductivité	FLamda(double, double, double) FLamda1996(double, double, double) XLamda(double) XLamda1996(double)
Calcul de la viscosité en faisant la somme du terme idéal et du terme résiduel	Huber1996v(double, double, double) Huber2003v(double, double, double)
Calcul de la conductivité en faisant la somme du terme idéal et du terme résiduel	Huber1996c(double, double, double, double) Huber2003c(double, double, double, double)
Calcul de coefficient de réduction	SearchForFH(double, double)

Classe concernée : **Huber96_mix***	
Fonction	Méthode intermédiaire
Calcul des propriétés de transport, le fluide de est respectivement le R134a (huber2003) et le propane (huber1996)	HUBER2003(double, double) HUBER1996(double, double)
Calcul de la viscosité du gaz dilué (terme idéal) selon la méthode de Lucas ou la méthode de Wilke. La méthode de Lucas est généralement plus précise, mais nécessite la connaissance du moment dipolaire	viscosityM0(double) /Lucas WilkeMethode(double)
Calcul du terme idéal de la conductivité	CalcLamdaMixtureZero(double)
Calcul des paramètres utilisés dans la méthode de Lucas	Fp0(double, double, double, double, double) E(double, double, double) CalcFpm0(double) CalcFqm0() CalcEtaMixture()
Calcul du terme $\Delta\eta^R$	VFR(double, double, double) VFR2003(double, double, double)
Calcul du terme $\Delta\lambda^R$	LamdaFR(double, double, double) LamdaFR2003(double, double, double)
Calcul du coefficient de correction F pour le terme résiduel de la viscosité	CalcFViscoM()
Calcul du terme d'Enskog représentant l'écart de volume	CalcDeltaViscoEnskog(double, double)
Calcul des coefficients utilisés dans l'évaluation du terme d'Enskog	CalcSigma_i() CalcEpsilon(double) CalcTheta_ij() CalcG_ij(double) CalcEta_ij(double) CalcBij(double, double) CalcYi(double) CalcBeta_i(double, double) CalcSigmaX() CalcMx() CalcViscoEnskogXZero(double) CalcGx(double) CalcBx(double, double) CalcYx(double)
Calcul des coefficients de réduction mélange	CalcFij() CalcHij() CalcHm() CalcFm()
Calcul de Tc et Pc mélange avec la règle de mélange de Kay	CalcTcm() CalcPcm()
Calcul de la masse molaire mélange	CalcMm() CalcMij()
Calcul des coefficients de correction pour la conductivité mélange	CalcFLamdaM() CalcXLamdaM1996() /huber1996 uniquement
Calcul du pseudo-facteur acentrique du mélange	AcentricFactorM()
Calcul du terme A_{ij} pour le terme idéal de la	CalcAij(double)

conductivité du mélange	

Les classes Alphas.java, CpGeneralisee.java, EdE.java, ELVComposition.java, EnthalpieEntropie.java, Modeles.java, OutputPv.java, ResultatsCardan.java, SolutionR.java ne contiennent pas de méthode de calcul. Elles représentent des vecteurs de grandeurs utilisées ou calculées dans les équations d'état cubiques.

Classes	Variables
Alphas.java	Alpha : valeur de la fonction α m : valeur du paramètre m dans la fonction α dalpha : valeur de la dérivée de la fonction α
CpGeneralisee.java, *cette classe est rarement utilisée suite à la standardisation de forme de Cp dans les fichiers fluide .mel*	Cp: valeur de Cp CpT: valeur de Cp/T h0: enthalpie de référence s0: entropie de référence
EdE.java	A, B, C, D : valeurs des paramètres de l'équation d'état
ELVComposition.java	nbComponents : nombre de composants L : quantité de fluide en phase liquide x : composition de la phase liquide y : composition de la phase vapeur fugLiq : fugacités des composants en phase liquide fugVap : fugacités des composants en phase vapeur
EnthalpieEntropie.java	h : enthalpie s : entropie
Modeles.java	u, w, omegaa, omegab, omegac: paramètres de l'équation d'état cubique généralisés.
OutputPv.java	P : pressio vL : volume liquide vV : volume vapeur critere : critère de convergence de l'égalité de fugacité vI : volume issu de la troisième solution de l'équation cubique
ResultatsCardan.java	ZL : résultat de calcul de l'équation d'état, Z liquide ZV : résultat de calcul de l'équation d'état, Z vapeur ZI : troisième solution du calcul de l'équation d'état.
SolutionR.java	r1, r2 : paramètres issus l'équation d'état cubique, utilisés dans l'expression analytique de enthalpie et entropie résiduelles

7.7 Résumé long

Executive Summary

de la thèse intitulée

« Modélisation d'un cycle de production d'électricité bi-étagé à aéro-réfrigérant sec »

Bo LIU, Doctorant Mines Paristech
Encadré par Christophe COQUELET, Philippe RIVIERE, Renaud GICQUEL, Franck DAVID

7.7.1 Introduction

Dans le cadre de programmes de développement de solutions innovantes pour de nouveaux réacteurs, EDF étudie différentes options possibles pour les systèmes de conversion d'énergie et leur refroidissement.

Le rendement de la production d'électricité et le refroidissement du réacteur dépendent étroitement de la disponibilité et de la température de la source froide. C'est la raison pour laquelle la plupart des centrales dans le monde sont construites près d'une source d'eau. Cependant, l'utilisation d'une source froide alimentée sur l'eau peut se révéler problématique dans certains cas, lors de canicules ou en période de sécheresse notamment. Le refroidissement à l'air sec est une des options possibles. Cependant étant donné le besoin d'une surface d'échange plus importante, le changement de la source froide par l'air ambiant n'est, dans la majorité des cas, pas viable économiquement.

Un autre problème a été constaté dans les centrales de production : l'encombrement de la salle machine et la taille des turbines. En effet, la vapeur d'eau devient extrêmement volumineuse à très basse pression. Les derniers étages de la turbine basse pression (BP) sont alors gigantesques. Dans ce cas des considérations de résistance des matériaux conduisent à réduire la vitesse de rotation des turbines, ainsi que la taille des composants. De plus à très basse température, le gain énergétique sur le cycle est compensé par l'augmentation de la perte cinétique liée à l'augmentation de la vitesse de fluide à la sortie de la turbine.

Une des solutions imaginée à EDF dans les années 70 était de changer l'architecture du cycle de production. L'idée était de considérer un cycle de production composé de deux cycles de Rankine en cascade, le premier fonctionnant avec de la vapeur d'eau et le deuxième fonctionnant avec de l'ammoniac dont la vapeur à basse pression est beaucoup plus dense que celle de l'eau.

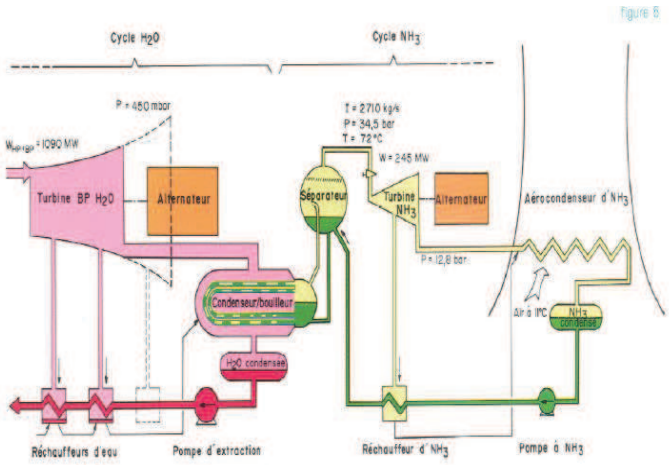


Figure 7.17 Schéma du cycle bi-étagé eau-ammoniac

L'architecture de ce nouveau système est présentée Figure 7.17. Les principales différences de fonctionnement de ce cycle bi-étagé par rapport à un cycle à vapeur classique sont :

Cycle à vapeur d'eau du cycle bi-étagé:

- La vapeur d'eau en sortie de la turbine BP a une pression plus élevée que pour le cycle classique, donc un volume spécifique plus faible. L'énergie restante de la vapeur d'eau est récupérée via un condenseur - bouilleur eau / ammoniac

Cycle à ammoniac du cycle bi-étagé :

- L'ammoniac bout dans le condenseur - bouilleur
- La vapeur d'ammoniac, beaucoup plus dense que l'eau, est détendue dans la turbine à ammoniac et la puissance restante est récupérée.
- L'ammoniac se condense sans perte de fluide à travers un échangeur sec (aéro-condenseur).

Ce procédé permet de réduire considérablement la taille de la turbine basse pression. Globalement, le cycle à vapeur représente 90 % de la puissance produite et le cycle à ammoniac 10 %.

En combinant l'idée du cycle bi-étagé à l'ammoniac et du refroidissement à air sec, on aboutit au projet Cybiam (CYcle BInaire à AMmoniac). Un prototype d'essai de 22 MWe, simulant une tranche de 1300 MW, a été construit et expérimenté à EDF de la fin des années 70 au début des années 90. Le cœur du réacteur a été remplacé par une chaudière à fuel. Les intérêts de ce projet sont :

- **Du point de vue énergétique** : le Cybiam utilise l'air sec comme source froide. L'amplitude de variation de température de l'air ambiant sur une année est plus importante que celle de l'eau de rivière ou de mer. Cette condition est particulièrement intéressante en hiver. On constate une surpuissance de 0.46 % / K pour le cycle Cybiam. Par contre, il n'existe pas de gain pour un cycle à vapeur d'eau classique en raison des pertes cinétiques très importantes qui compensent finalement cette surpuissance. En été, le refroidissement par l'air sec est sans doute moins performant, mais la température ambiante de l'air dans les zones tempérées (en France) devrait permettre une production de rendement annuel moyen équivalent.

- **Du point de vue économique** : grâce à la réduction de coût de la salle des machines, on peut se permettre d'investir plus dans des aéro-condenseurs plus chers que les échangeurs classiques à eau. Le coût du nouveau système est globalement équilibré par rapport à un cycle classique. Ainsi il est devrait être possible de s'affranchir du problème de la dépendance en eau sans augmenter l'investissement.

L'expérience Cybiam a permis de montrer la possibilité d'utiliser un cycle bi-étagé à l'ammoniac en tant que système de production et de refroidissement d'une centrale. Cependant il n'a pas été adopté pour remplacer les systèmes actuels pour diverses raisons.

Un des principaux freins au déploiement de ce cycle bi-étagé dans la production d'électricité nucléaire était dû aux caractéristiques chimiques de l'ammoniac. Ce dernier avait été choisi comme fluide de travail en raison de sa densité très supérieure à l'eau en phase vapeur et d'une chaleur latente de vaporisation importante. Cependant sa toxicité ne permet pas de l'exploiter à l'échelle de production d'électricité nucléaire. Un changement de fluide de travail est donc nécessaire avant la mise en application de ce type de cycle.

Se poser alors la question de savoir si d'autres fluides de travail plus adaptés que l'ammoniac sont disponibles. Comment ces fluides vont-ils influencer la performance du cycle bi-étagé ?

Comment le changement de fluides va-t-il impacter sur les composants du cycle et sur l'équilibre technico-économique ? En raison de du changement d'architecture du cycle par rapport à un système de conversion d'énergie classique, il est judicieux de considérer l'aspect « à long terme » de ce projet prospectif. Il est important de prévoir les changements futurs, particulièrement, la sortie des nouveaux fluides plus performants et plus respectueux de l'environnement. D'où le besoin de disposer d' un outil de simulation de cycle qui permet d'évaluer ces nouveaux fluides pour lesquels nous disposons de peu de données expérimentales.

La démarche de notre travail sera donc la suivante :

- Le choix du / des fluide(s) de travail adéquat(s) est la première problématique à résoudre. Il est nécessaire d'établir des critères de sélection et de balayer l'ensemble des fluides, corps purs et mélanges. En dehors des critères environnementaux et de sûreté, les critères de performance sont mis en avant lors de la sélection des fluides.
- Modéliser les propriétés thermophysiques des fluides en utilisant des modèles prédictifs et semi-prédictifs.
- Modéliser le cycle bi-étagé et ses composants pour prévoir l'influence technico-économique du choix de fluides.
- Vue l'amplitude de variation de la température de l'air ambiant pendant une année, il est également nécessaire d'étudier la performance non nominale du cycle bi-étagé moyennée sur une période représentative du climat du site de production considéré. Connaissant la variation du prix de l'électricité, nous cherchons à quantifier les gains éventuels.

Un serveur de propriétés de fluides a été créé dans le cadre de ces travaux et connecté au progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim^{TM} dont nous maîtrisons le code source. Cette démarche nous donne un outil prédictif, flexible et évolutif tout au long de notre projet.

7.7.2 Définition de l'architecture du cycle bi-étagé étudié

Le cycle de Rankine est constitué de quatre éléments principaux : une pompe, un générateur de vapeur, une turbine, un condenseur. Cette architecture de base peut être complétée par des composants supplémentaires, comme par exemple des régénérateurs.

Le cycle bi-étagé considéré est constitué de deux cycles de Rankine en cascade :

- un cycle de Rankine à vapeur classique légèrement modifié où la vapeur n'est pas complètement détendue,
- un cycle de Rankine de récupération de chaleur à basse température refroidi avec un aérocondenseur.

La vapeur d'eau non entièrement détendue sort de la turbine à une pression plus élevée, qu'on appelle pression de coupure, généralement supérieure à 0.2 bar au lieu de 0.05 bar dans une centrale classique. Ainsi la source chaude du deuxième cycle de Rankine peut varier entre 70 °C et 150 °C environ.

Il se trouve que l'utilisation du Cycle Organique de Rankine (ORC) a été prouvée étant une solution intéressante dans le domaine de récupération de chaleur à basse température. Un fluide organique, plus adapté que l'eau pour faire fonctionner des cycles à basse température, est utilisé dans ce type de cycle. Des centrales géothermiques et des centrales de biomasse fonctionnant avec le système ORC ont été développées lors de cette dernière décennie pour des sites pilotes ou de production de petites puissances. Les niveaux de températures de la source chaude de ces centrales ORC correspondent bien à notre application. Cela constitue la principale raison d'orienter nos travaux dans cette direction. Notons que la performance des cycles ORC dépend étroitement du fluide de travail choisi, ce qui implique que le choix des fluides et l'obtention des propriétés des fluides constituent une partie très importante de notre projet.

Différentes architectures d'ORC ont été étudiées dans le passé. Cependant, aucun fluide n'a été identifié comme étant le fluide optimal pour l'application ORC du fait des interdépendances entre le fluide de travail, les conditions de fonctionnement et l'architecture du cycle.

Le cycle bi-étagé de notre étude sera constitué d'un cycle à vapeur d'eau et d'un ORC dont le fluide de travail est à déterminer.

Concernant le cycle à vapeur d'eau, nous considérons les conditions d'un cycle existant du type Superphénix (SPX) auquel nous enlevons les derniers étages de la turbine basse pression. Les raisons de ce choix sont :

- l'existence et la connaissance des caractéristiques du prototype Superphénix ;
- compte tenu de l'aspect à long terme du projet, il est plus judicieux de travailler sur une architecture de cycle plus récente ;
- nos travaux s'inscrivent dans le cadre du projet Generation IV d'EDF

Néanmoins, l'approche utilisée peut être transposée aux autres systèmes de production comme le REP ou la centrale à charbon. La puissance du cycle SPX considéré est de l'ordre de 650 MWe.

Les conditions de fonctionnements et l'architecture du cycle bi-étagé considérées sont respectivement représentées dans le Tableau 7.22 et la Figure 7.18

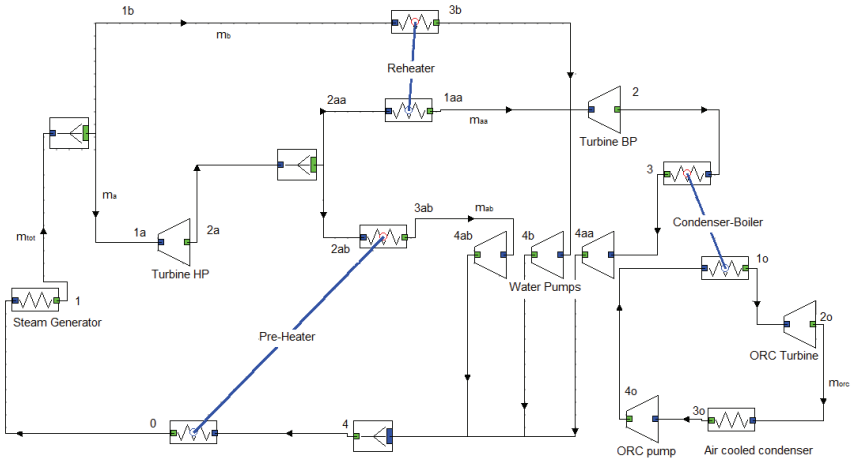


Figure 7.18 Schéma du cycle bi-étagé adapté aux conditions Superphénix sous Thermoptim™

Composant	Variable	Valeur
Générateur de vapeur	Temperature d'entrée (T_0)	208 °C
	Temperature de sortie (T_1)	490 °C
	Pressure d'entrée (P_0)	230 bar
	Pressure de sortie (P_1)	180 bar
	Débit massique (m)	680 kg/s
Turbine vapeur HP	Efficacité isentropique (η_{THP})	0.87
	Taux de détente	20
Turbine vapeur BP	Efficacité isentropique (η_{TBP})	0.85
	Taux de détente	Dépendant de la valeur de STEP
Pompe eau	Efficacité isentropique (η_P)	0.7
Préchauffeur	Pincement (ΔT_{PH})	4 °C
Réchauffeur	Surchauffe (ΔT_{SH})	35 °C
	Débit massique (m_b)	20 kg/s
Condenseur-bouilleur	Pression de coupure (Steam Turbine Exhaust Pressure, $STEP$)	Valeur contrôlée, entre 0.2 - 1 bar
	Pincement (ΔT_{CB})	5 °C
	Température d'évaporation (T_{EVAPO})	Dépendant de la valeur de STEP
Turbine ORC	Efficacité isentropique (η_{TO})	0.85
Pompe ORC	Efficacité isentropique (η_{PO})	0.7
Aérocondenseur	Température de l' air (T_{air})	11 °C
	Approche (ΔT_{ACC})	29 °C

Tableau 7.22. Conditions de fonctionnement du cycle bi-étagé

Les études des composants relatifs au cycle ORC sont fondamentales. En effet, nous nous intéressons non seulement aux performances des cycles comme dans la plupart des études existantes, mais nous souhaitons également réaliser une étude de dimensionnement et prédire l'éventuel gain énergétique et économique de ce système. En supprimant les derniers étages de la turbine BP et en rajoutant un ORC, la différence de coût entre un cycle bi-étagé et un cycle classique provient principalement des composants de l'ORC : le condenseur-bouilleur, l'aérocondenseur et la turbine ORC (le coût de la pompe ORC étant relativement faible, il ne fera pas l'objet d'études particulières). Nous évaluerons le coût supplémentaire associé à ces éléments.

Afin de sélectionner les échangeurs de chaleur du cycle bi-étagé, les contraintes particulières pour ce cycle sont décrites ci-dessous :

- Température peu élevée :

  Le niveau de température de la source chaude est limité pour le cycle ORC. La température du condenseur-bouilleur est généralement inférieure à 200 °C. De plus, cette température est directement liée à la pression de coupure du cycle à vapeur d'eau.

- Pression moyennement élevée :

  Pour le condenseur-bouilleur, du fait du contrôle de la pression de coupure (côté vapeur d'eau), la pression de sortie turbine du cycle de Rankine à vapeur restera inférieure à 2 bars. Or, nous avons choisi d'utiliser un cycle ORC sous critique pour récupérer l'énergie restante, la pression maximale du cycle reste donc en-dessous de la pression critique du fluide. La plupart des fluides testés actuellement pour notre application ont une pression critique comprise entre 25 bars et 40 bars.
  Pour l'aérocondenseur, l'échange s'effectue entre l'air atmosphérique (1 bar) et un fluide de travail à basse température. La basse pression du cycle ORC a été calculée. Les résultats montrent que, pour la plupart des fluides testés, les basses pressions n'excèdent pas les 5 bars (par exemple, autour de 2 bars pour le R245fa et moins de 1 bar pour le R365mfc).

- Puissance thermique à échanger très importante :
  Le système bi-étagé a pour objectif de remplacer le cycle vapeur classique et produire de l'électricité pour une centrale d'une puissance électrique nominale de 650 MWe. La puissance à évacuer est donc extrêmement élevée aussi bien dans le condenseur bouilleur que dans l'aéro-condenseur. Pour un cycle bi-étagé basique dont l'efficacité est de l'ordre de 30%, en supposant que 80% d'électricité est produite par le cycle à vapeur et 20% par le cycle ORC, nous avons une puissance d'environ 1.7 GW à échanger au niveau du condenseur-bouilleur et un peu plus de 1.5 GW dans l'aéro-condenseur. D'où l'impossibilité d'utiliser des échangeurs de puissance inférieure au MW par bloc d'échange.

Ainsi le choix technologique pour les deux échangeurs du cycle ORC est le suivant:

Condenseur-bouilleur : Type échangeur à tubes et calandres ou Type échangeur à plaques soudées. Lors du dimensionnement nous considérerons les échangeurs à tubes et calandres pour lesquels des données sont disponibles pour valider les modèles d'échange thermique.

Aéro-condenseur : Type échangeur à tubes à ailettes. Concernant la dimension des tubes et les ailettes, nous essayerons d'utiliser les composants disponibles dans l'industrie, lors du dimensionnement, pour éviter le surcoût d'une fabrication sur mesure. La configuration de l'aérocondenseur est basée sur les données du condenseur à air de la centrale à cycle combiné de Saltillo.

En raison de la forte puissance électrique à produire, la turbine choisie est du type axial et subsonique. Le prédimensionnement de la turbine ORC est réalisé avec l'outil GTDT fourni par VNIIAM à EDF.

7.7.3 Choix d'un fluide de travail

Le choix du fluide de travail influence directement la performance du cycle et la taille des composants.

Etant donnée la plage de température de la source chaude du cycle aval de l'application bi-étagée, les études de cycles ORC des centrales géothermiques, solaires ou les études des pompes à chaleur à « haute température » constituent de très bonnes références pour notre travail. Très souvent des fluides dits « frigorigènes » sont utilisés dans ces cycles.

Dans ce travail, nous nous interdisons d'employer des fluides dont les propriétés ne correspondent plus aux législations actuelles. Les HCFC (composés chlorofluorés) ne feront donc pas partie des fluides candidats. 4 familles de fluides sont considérées dans notre étude : les HFC, les HFO, les hydrocarbures et les aromatiques.

Les procédures de sélection du fluide de travail proposées dans la littérature et les exemples de fluides utilisés dans les ORC existants représentent une base d'information très riche.

Le ou les fluides choisis doivent garantir la performance du cycle, être adaptés aux conditions de fonctionnement du cycle, être viables économiquement et satisfaire les réglementations en vigueur. De ce fait, nous pouvons classer les critères de choix des fluides selon quatre

catégories principales : les critères de performance, les critères technico-économiques, les critères de limite de fonctionnement et les critères d'environnement et de sûreté.

Les **critères de performance** concernent les paramètres de fluides influençant principalement l'efficacité du cycle:

- **Coordonnées critiques**

  Les conditions sur la température critique et la pression critique sont d'une importance majeure, car ces données détermineront la limite de la haute pression (HP) du cycle de Rankine. Or, selon la littérature, on peut observer la tendance suivante: les fluides ayant une température critique plus élevée permettent d'obtenir une efficacité du cycle plus importante.

  Près de la pression critique, une variation très faible de la température peut entraîner un changement de pression important. Cela peut influencer la stabilité du système.

  Il est donc raisonnable de garder une « distance » appropriée entre le point critique et la HP du cycle. Il n'existe pas de méthode standard pour la définition de cette distance. Cela peut cependant être évalué au cas par cas dans les études de fonctionnement.

  En conclusion, on a tout intérêt à choisir un fluide ayant une température critique la plus élevée possible afin d'améliorer la performance du cycle. On doit également assurer un écart minimal entre les coordonnées critiques et la HP de notre application.

- **Le glissement de température**

  La source chaude de l'ORC est constituée de vapeur d'eau en condensation. Afin d'éviter des pertes exergétiques supplémentaires, il est donc préférable de maintenir une température d'évaporation du fluide constante lors du transfert d'énergie du cycle vapeur à l'ORC. La question ne se pose pas pour les corps purs. Cependant si un mélange de plusieurs fluides purs est choisi, il est judicieux de regarder si un azéotrope existe, ou, à défaut, de choisir un mélange avec le glissement le plus faible possible.

Les **critères technico-économiques** concernent :

- **Volume spécifique et chaleur latente**

  Un fluide avec un faible volume massique et une chaleur latente importante permettent :
  - d'absorber plus d'énergie lors de l'évaporation,
  - de réduire le débit nécessaire, donc de diminuer la taille de l'installation.
  - de réduire le volume de vapeur à la sortie de la turbine ORC, donc de diminuer la taille de la turbine.

  Sa densité élevée est la principale raison pour laquelle l'ammoniac avait été choisi dans le projet Cybiam.

- **Propriétés de transport**

Les propriétés de transport - la conductivité et la viscosité - du fluide conditionnent la capacité de transfert convectif du fluide considéré. Le coefficient d'échange convectif du fluide est, notamment, proportionnel à la conductivité thermique du fluide. Ces deux paramètres définissent la taille des deux échangeurs du cycle basse température : le condenseur-bouilleur et l'aérocondenseur.

- **La vitesse du son du fluide**

La turbine ORC choisie est du type axial et subsonique. La vitesse du son du fluide limite donc le débit de fluide circulant dans un corps de turbine. Ce paramètre influence directement la taille et le coût de la turbine ORC.

Le maintien en condition opérationnelles de la machine impose des limites à certaines caractéristiques physiques des fluides. Ces **critères de limite de fonctionnement** sont :

- **Température de fusion**

La particularité de notre cycle est l'utilisation de l'air ambiant comme source froide. Nous devons prendre en compte que l'amplitude de variation de température de l'air est beaucoup plus importante que celle de l'eau. Par conséquent, la température de condensation peut descendre assez bas en hiver. Or le fluide ne doit en aucun cas se solidifier dans l'ORC. Une température de fusion très basse est donc préférable.

- **La pression de condensation du cycle ORC**

Idéalement, le fluide doit se condenser à une pression supérieure à 1 bar atmosphérique afin d'éviter toute entrée d'air dans le système.

Les **critères liés à l'environnement** et à la sureté comprennent les points suivants :

- **Le pouvoir de réchauffement global (Global Warming Potential, GWP) et le potentiel d'appauvrissement de la couche d'ozone (Ozone Depletion Potential, ODP)**

Les règlementations environnementales se sont durcies durant les deux dernières décennies. Le choix du fluide doit suivre les standards de protection environnementale en vigueur et en cours d'élaboration pour construire un cycle pérenne pour les décennies à venir. Le fluide doit donc avoir un ODP nul et un GWP le plus bas possible.

- **Toxicité et inflammabilité du fluide**

Afin d'assurer la sécurité des opérateurs, il est préférable d'utiliser un fluide non-toxique et non-inflammable. La classification des réfrigérants Ashrae permet de connaître ces deux propriétés du fluide.

Cependant, pour éviter d'éliminer des fluides à haute performance, ces deux critères seront considérés en dernier ressort.

Le Tableau 7.23 récapitule les fluides purs qui ont été sélectionnés pour être testés :

Fluide	Famille	Tc (K)	Pc (MPa)	Facteur Acentrique	Masse Molaire (g/mol)	GWP	Ashrae
R134a	HFC	374	4.059	0.3267	102	1430	A1
R245fa	HFC	427	3.651	0.3776	134	1030	B1
R365mfc	HFC	460	3.266	0.3800	148	890	A2
R1234yf	HFO	367	3.382	0.2760	114	4	A2
R1216	HFO	358	3.136	0.3529	150	1	-
n-butane	hydrocarbon	425	3.796	0.2002	58	1	A3
Propane	hydrocarbon	369	4.247	0.1523	44	3	A3
Isopentane	hydrocarbon	460	3.378	0.2274	72	11	A3
Benzene	aromatic	562	4.831	0.2092	78	-	Toxic/Inflammable
Toluene	aromatic	591	4.126	0.2657	92	-	Toxic/inflammable
Ammoniac	-	405	11.333	0.2560	17	< 1	B1

Tableau 7.23. Liste des fluides sélectionnés pour test et les propriétés caractéristiques

Une fois les tests des fluides terminés, nous pouvons mélanger un fluide de haute performance avec un fluide ayant des bons critères liés à l'environnement parmi les candidats ci-dessus.

7.7.4 Modélisation des propriétés des fluides de travail

La connaissance des propriétés des fluides de travail est nécessaire pour pouvoir procéder aux évaluations énergétiques et économiques des cycles de production d'électricité.

La plupart des fluides sélectionnés et testés dans notre étude sont des composés organiques. De plus, l'approche semi-prédictive adoptée nous dirige vers un modèle du type cubique, bien adapté à notre situation.

Les modèles de van der Waals, de Soave-Redlich-Kwong, de Peng-Robinson et Patel-Teja ont été implémentés pour modéliser les comportements des corps purs. Les fonctions α(T) ajustables ont été introduites pour prendre en compte la variation de la force attractive entre molécules lorsque la température varie, notamment la fonction α de Mathias-Copeman.

Les algorithmes basés sur l'égalité des fugacités liquide et vapeur ont été implémentés pour la recherche de l'équilibre entre la phase liquide et la phase vapeur du fluide. Les fonctions d'état, l'enthalpie et l'entropie du fluide nécessaires à la simulation des cycles, sont calculées à partir des modèles de fluides considérés.

Les mêmes équations d'état sont utilisées pour le calcul des mélanges. Cependant la prédiction des propriétés des mélanges diffère de celle des corps purs par l'existence de « règles de mélanges ». Les règles de mélange doivent prendre en compte les caractéristiques idéales et non idéales des solutions. En effet, l'objectif est de recalculer les paramètres a et b de l'équation d'état cubique en prenant en compte l'influence mutuelle (interactions croisées) entre les molécules des différents constituants. La règle de van der Waals a été implémentée dans cette optique.

Basé sur le principe des états correspondants, la méthode d'Ely-Huber pour le calcul prédictif des propriétés de transport a été programmée afin de compléter l'outil de calcul et de rendre possible l'évaluation des surfaces d'échange du condenseur-bouilleur et de l'aérocondenseur.

Pour rendre applicables les modèles cubiques aux fluides associatifs tels que l'ammoniac et l'eau, le modèle Cubique Plus Associatif (CPA) a été introduit.

Quelques modules indépendants ont également été créés en utilisant un module d'optimisation. Ils permettent d'améliorer les modèles de fluide implémentés. Ces modules concernent notamment :

- L'ajustement des paramètres de la fonction α de Mathias-Copeman,
- L'ajustement du coefficient d'interaction binaire kij,
- La recherche de l'azéotrope binaire selon la méthode de CTP,
- La recherche du point critique du mélange.

Les modèles ont été validés en comparant les résultats de calcul aux données du NIST et du CTP.

Les incertitudes des modèles en terme de calcul de la pression de saturation et des volumes ont été évaluées. Le Tableau 7.24 présente l'évaluation des incertitudes du modèle Peng-Robinson avec la fonction α de Mathias-Copeman ajustée sur la pression de saturation pour divers HFC et HFO.

Fluid	Average saturation pressure difference (%)	Average saturation liquid volume difference (%)	maximal saturation pressure difference (%)	Maximal saturation liquid volume difference (%)
R134a	< 1	< 8	< 1	19
R245fa	< 1	< 5	< 1	5
R365mfc	< 1	< 5	2	4
R1234yf	< 1	< 5	< 1	15
R1216	< 1	< 9	< 1	17
R600	< 1	< 5	< 1	5
R290	< 1	< 5	< 1	9

Tableau 7.24. Evaluation des incertitudes du modèle Peng-Robinson comparé aux données du NIST entre 280 K et 390 K

En effet, la pression de saturation et le volume de la vapeur saturée sont bien représentés par les modèles cubiques. Par contre, le volume du liquide saturé est moins bien calculé et peut présenter jusqu'à 15% d'écart par rapport aux données expérimentales en raison de la difficulté à représenter les forces interactives.

Eau et ammoniac, que les modèles cubiques classiques ont du mal à modéliser, sont beaucoup mieux représentés par le modèle CPA. L'écart moyen sur le volume liquide est réduit de 20 % à moins de 1 %.

Cependant cette incertitude sur le volume liquide affecte peu le résultat final. En effet, le volume liquide influence surtout le bilan énergétique de la pompe. Or l'énergie consommée par ce composant reste très faible devant l'énergie produite par la turbine, d'où un bilan énergétique global du cycle quasi inchangé.

Le volume liquide calculé étant moins précis, cela peut induire des incertitudes importantes sur le calcul de la viscosité liquide et de la conductivité liquide. Elles peuvent parfois excéder 30%, dans des cas extrêmes.

D'autre part, les prédictions de la viscosité et de la conductivité vapeur dépendent principalement du calcul de la viscosité et de la conductivité du gaz dilué. Les écarts constatés sont généralement de l'ordre de 10%, mais ils peuvent monter localement jusqu'à 15%-20%.

7.7.5 Modélisation des performances du cycle bi-étagé et dimensionnement des composants

La performance du cycle est évaluée en connaissant :

- L'architecture et les caractéristiques du cycle,
- Les fluides de travail à tester,
- Les propriétés thermophysiques des fluides,

Chacun des composants du cycle est modélisé et le bilan énergétique calculé.

Les études de performance des fluides ont été réalisées en faisant varier la température de l'air atmosphérique (source froide entre -20 °C et 40 °C). Un classement des fluides a été établi suite à ces études. Nous constatons que, indépendamment de la température de l'air et de la pression de coupure, la performance du cycle est principalement influencée par la nature du fluide, notamment par sa température critique. Un lien entre la température critique du fluide et la performance du cycle bi-étagé est observé (Tableau 7.25).

L'architecture du cycle bi-étagé dont l'ORC est muni d'un récupérateur a également été testée. L'amélioration de performance du cycle est faible (environ 0.2 %), donc peu rentable. Il n'y aura pas de récupérateur installé sur le cycle ORC dans la suite des travaux.

Fluide	*Tc (K)*	Classement de performance
benzène	562	1
toluène	592	2
R717	406	3
R365mfc	460	4
isopentane	460	5
R245fa	427	6
R600	425	7
R134a	374	8
R290	370	9
R1234yf	368	10
R1216	358	11

Tableau 7.25 Classement établi suite aux tests réalisés dans le cycle bi-étagé de base

Benzène et toluène possèdent des rendements énergétiques très élevés, cependant :

- Les volumes spécifiques en phase vapeur de ces deux fluides sont très grands (respectivement 9 et 20 fois plus grands que le R365mfc),
- La pression de condensation est très inférieure à 1 bar atmosphérique,
- Les deux fluides sont toxiques et inflammables.

Compte tenu de ces trois arguments, les aromatiques sont écartés de la compétition.

Nous nous focalisons alors sur les fluides suivants : le R365mfc, l'isopentane et le R245fa (classés n° 4, n° 5, n° 6). L'ammoniac (classé n° 3) servira de fluide de référence.

Par ailleurs, pour chacun des fluides et une température d'air externe donnée, il existe un optimum de pression de coupure. Cela signifie que la définition de la valeur de pression de

coupure doit s'effectuer selon la situation climatique du site d'exploitation. En considérant une centrale de production exploitée en France, nous prenons la température d'air extérieur à 12 °C comme point de fonctionnement nominal de la centrale. Sur la figure 3 est représentée la performance des différents cycles bi-étagés en fonction de la pression de coupure à T_{air} =12 °C. Le point de fonctionnement optimal est défini à STEP = 0.4 bar pour les trois composés organiques, à STEP=0.6 bar pour l'ammoniac.

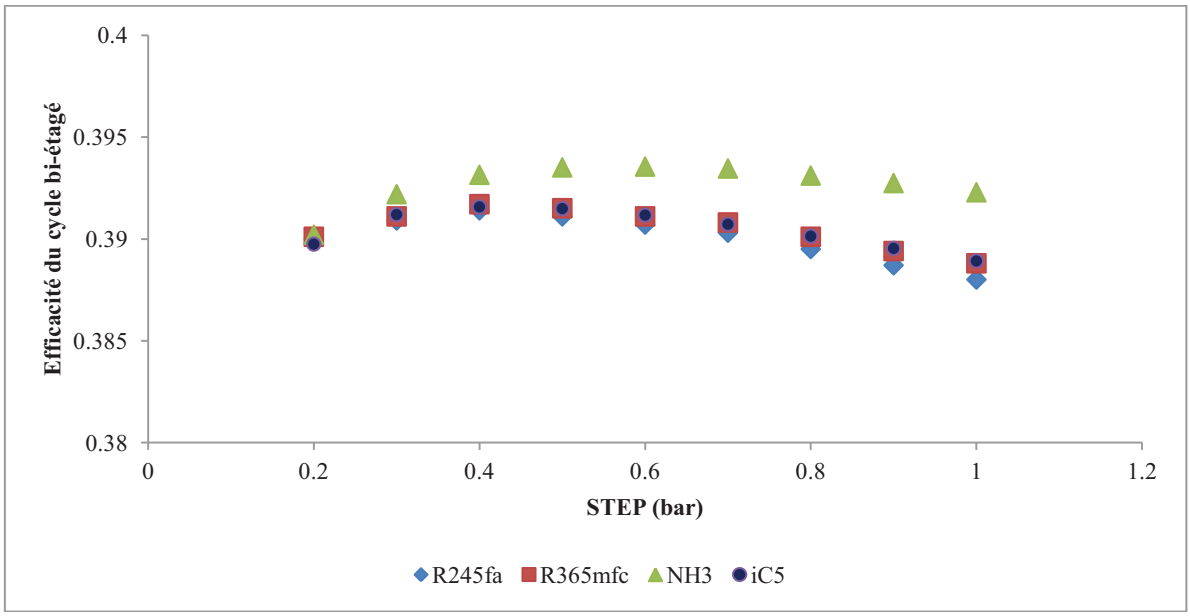


Figure 7.19 Recherche du point de fonctionnement optimal pour les 4 fluides candidats

L'évaluation de la taille des installations se fait sur 3 composants essentiellement : l'aérocondenseur, le condenseur-bouilleur et la turbine ORC. La taille de la pompe n'est pas considérée.

Le dimensionnement des échangeurs est effectué selon la méthode de la Différence de Température Logarithmique Moyenne (DTLM). Le flux de chaleur est écrit en fonction de la DTLM, le coefficient de transfert thermique global U et la surface d'échange A.

Le coefficient U est calculé en fonction des coefficients convectifs du fluide de travail choisi, de l'air ambiant ou de la vapeur d'eau. Le coefficient convectif d'un fluide donné est proportionnel à sa conductivité thermique et son nombre de Nusselt. Des corrélations expérimentales sont utilisées pour les calculs de nombre de Nusselt du fluide de travail de l'ORC.

Les modèles de l'aérocondenseur et du condenseur-bouilleur sont validés en comparant respectivement aux données de constructeur de la centrale de Saltillo et d'un condenseur-bouilleur ammoniac EDF existant. Les écarts de surface sont de l'ordre de 5%.

Les résultats de calcul des surfaces d'échangeur donnent la tendance représentée dans la Figure 7.20 et la Figure 7.21. Les échangeurs à ammoniac sont les plus compacts. Cela est essentiellement dû à une forte différence entre la conductivité thermique de l'ammoniac et celle des composés organiques (sa valeur est 7 fois supérieure). De plus, la détente de l'ammoniac se termine dans la zone diphasique, donc la surface de désurchauffe est égale à zéro. Les fluides organiques donnent des résultats tout à fait comparables. Pour les aérocondenseurs, la principale résistance aux transferts thermiques provient notamment de la

faible capacité de convection de l'air. On observe donc relativement peu de différence de surfaces d'échange sur ce composant. En revanche, les écarts sont plus prononcés sur le condenseur-bouilleur. En effet, le facteur limitant du transfert thermique dans le condenseur-bouilleur correspond à la capacité convective des fluides organiques, plus faible que celle de l'eau.

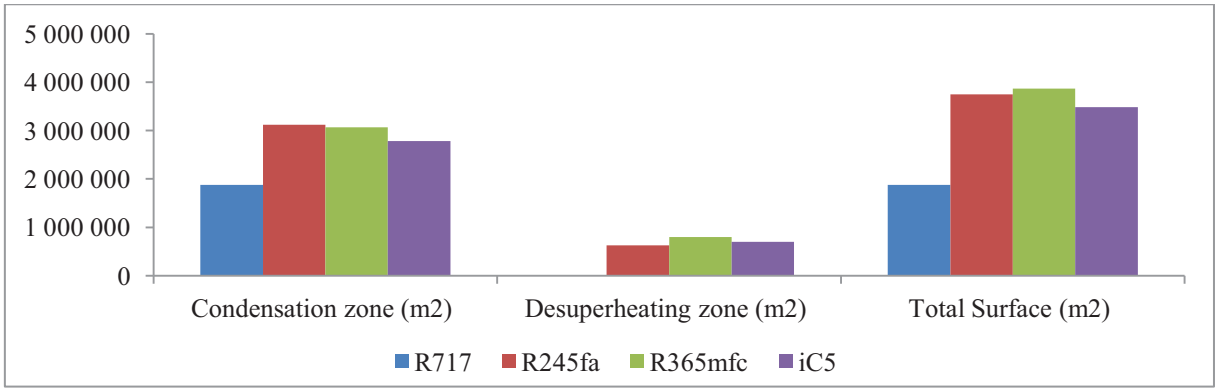


Figure 7.20 Surfaces des aérocondenseurs calculées pour les 4 fluides candidats

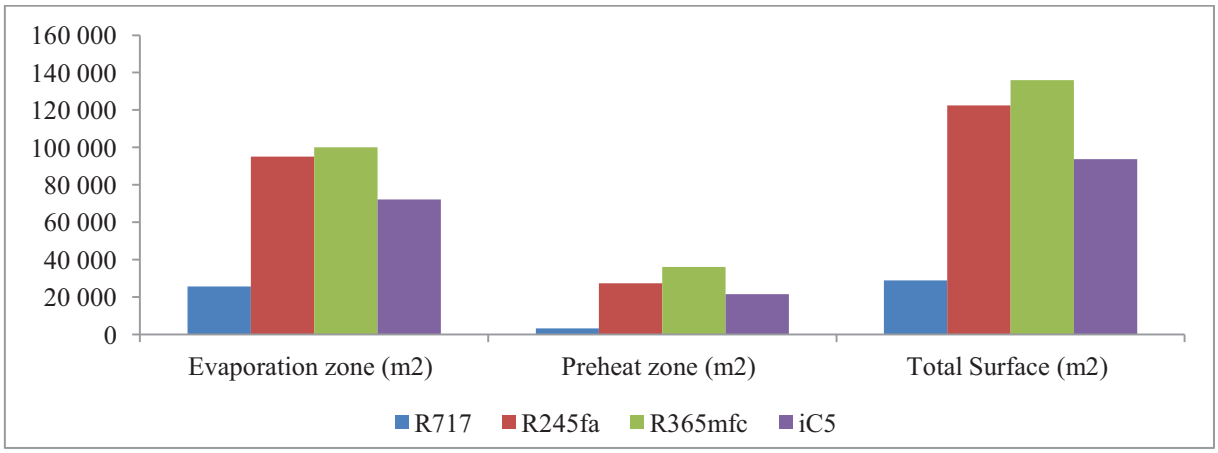


Figure 7.21 Surfaces des condenseurs-bouilleurs calculées pour les 4 fluides candidats

Pour évaluer rapidement les capacités de transfert convectives des fluides et relier la surface d'échange directement aux propriétés des fluides, deux paramètres convectifs ont été établis à partir des corrélations expérimentales. Ils sont proportionnels au coefficient d'échange du fluide, écrit en fonction de la conductivité thermique, de la viscosité, du volume spécifique, de la capacité calorifique et de la pression réduite du fluide considéré.

La turbine ORC a été dimensionnée par l'outil GTDT. Les résultats de calcul montrent encore une fois l'avantage de l'ammoniac par rapport aux trois fluides organiques :

- la vitesse de rotation de la turbine est plus élevée (3000 tr/min au lieu de 1000-1500 tr/min pour les composés organiques),
- le diamètre de la dernière roue est également deux fois plus faible,
- le nombre de corps de turbine nécessaire est plus petit.

Ces différences constatées peuvent être expliquées par l'influence combinée de trois propriétés des fluides choisis : la chaleur latente, la vitesse du son et le volume spécifique. En effet, la chaleur latente de l'ammoniac est environ 5 fois supérieure à celle des fluides organiques. Un débit plus grand est alors nécessaire dans l'ORC pour produire la même

puissance souhaitée. Or la vitesse du son des fluides organiques est 2 fois inférieure à celle de l'ammoniac. Cela limite en plus le débit volumique pouvant traverser une turbine. En comparant les résultats de pré-dimensionnement des turbines fonctionnant avec les 3 fluides organiques, nous constatons que le R365mfc semble le moins intéressant.

Nos travaux précédents ont permis de définir le point de fonctionnement du cycle et d'obtenir les caractéristiques des composants importants. Cependant, un système énergétique, une fois installé, est soumis aux variations des conditions externes. La prédiction du comportement du système sous ces conditions différentes du point de fonctionnement prédéfini (régime non-nominal) est essentielle pour l'étude du cycle bi-étagée. En effet, un des avantages annoncés de l'architecture du cycle bi-étagé était de pouvoir produire plus d'électricité en hiver. Il faut donc prévoir et quantifier le gain économique du système sur la durée.

Les centrales de production sont contrôlées par rapport à la puissance de consigne demandée par le réseau. Lorsque les conditions externes changent, les niveaux de pression et les débits évoluent dans le cycle pour produire la puissance demandée.

Les échangeurs sont calculés en considérant séparément la zone diphasique (condensation/évaporation) et la zone monophasique (désurchauffe/préchauffe) des échangeurs.

Les turbines sont modélisées par la loi de Stodola, dont le coefficient est ajusté à partir de la condition nominale du cycle. En raison de la forte variation de la température et de la possibilité de fonctionnement du cycle avec une source froide à très basse température, la perte cinétique par vitesse restante à la sortie de la turbine est prise en compte.

Les cycles fonctionnant avec le R245fa et l'isopentane sont modélisés. Afin de pouvoir comparer le gain du cycle bi-étagé, un cycle de Rankine classique à vapeur d'eau a également été modélisé. La température de l'air extérieur varie entre -20 °C et 40 °C.

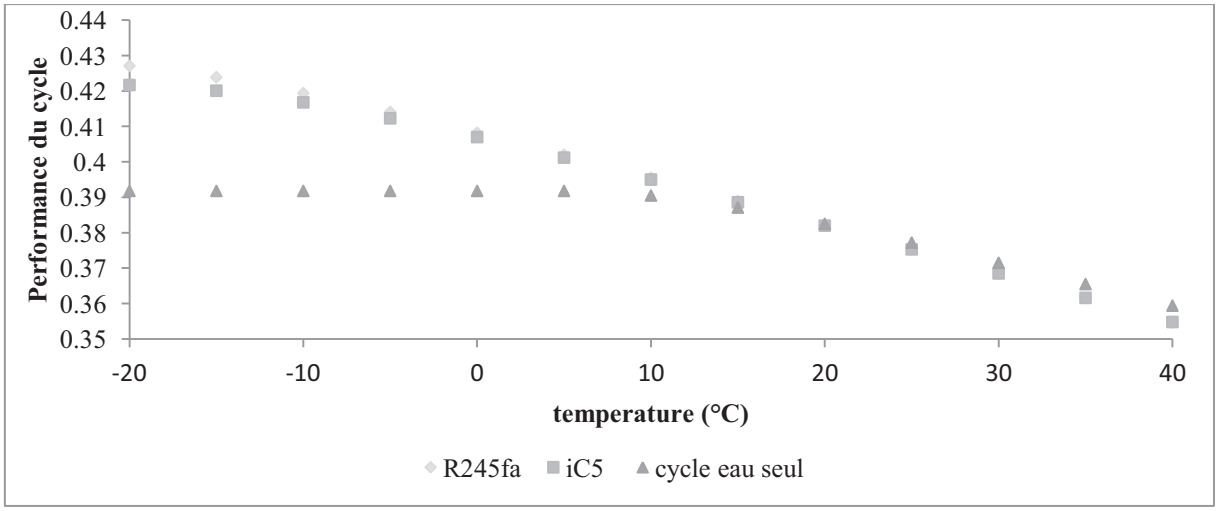


Figure 7.22 Evaluation de performance en fonction de la température d'air, des cycles bi-étagés R245fa et isopentane, comparée au cycle de Rankine classique en régime non-nominal

La Figure 7.22 représente la comparaison de performance du cycle. Autour du point de fonctionnement nominal, les performances des 3 cycles sont très proches. Lorsque la température de la source froide (air) augmente le cycle de Rankine classique est légèrement

avantagé. A 40 °C, l'écart de performance entre le cycle de Rankine classique et les cycles bi-étagés testés est de l'ordre de 0.5 %.

En revanche, lorsque la température de l'air est faible, la situation est inversée. En effet, la diminution de température de la source froide permet d'avoir une détente plus importante à la turbine basse pression, et donc de récupérer théoriquement plus d'énergie mécanique. Or le volume spécifique du fluide quittant la turbine augmente également avec cette baisse de pression. La vitesse de la vapeur quittant la turbine devient plus importante. Par conséquent, la perte cinétique à la sortie de la turbine est plus élevée et vient compenser le gain énergétique de la détente.

Ce phénomène est particulièrement prononcé sur le cycle de Rankine classique où le volume spécifique de l'eau est très grand. Notre étude montre qu'en dessous de 10 °C, le gain de performance du cycle de Rankine classique devient très faible. Le gain énergétique s'efface entièrement pour les températures négatives. Dans la figure 6, nous avons maintenu artificiellement à partir de 0 °C la pression de condensation pour éviter une perte cinétique trop importante.

Par contre, les cycles bi-étagés sont très avantagés par cette situation en raison de la forte densité de vapeur du fluide de travail. La performance du cycle augmente de manière continue. Nous observons également que le R245fa est légèrement plus performant que l'isopentane à basse température (à partir de -5 °C). En effet, le volume spécifique du R245fa est environ la moitié de celui de l'isopentane. La perte par vitesse restante est donc par conséquent divisée par 4.

7.7.6 Evaluation économique des choix de conception

Les coûts d'investissement sur les trois composants de l'installation précédemment dimensionnés sont calculés selon des fonctions de coût ajustées à partir des données existantes.

La corrélation de coût du condenseur-bouilleur, applicable aux échangeurs à tubes et calandre, dépend de la surface d'échange, du matériau de fabrication, de son architecture ainsi que des conditions de fonctionnement en pression et température.

La corrélation de coût de l'aérocondenseur en fonction de la surface d'échange est ajustée à partir des données de l'EPRI, 2012.

La corrélation de coût de la turbine est applicable aux turbines de production de 2MWe à 500MWe. Elle est fonction de la puissance produite et du diamètre de la dernière roue.

La Figure 7.23 représente la comparaison des coûts des composants et du coût global. En raison de la forte incertitude sur les corrélations de coût, nous avons ramené les coûts à leurs valeurs relatives en prenant les résultats des composants du cycle à ammoniac comme référence (composants les plus compacts).

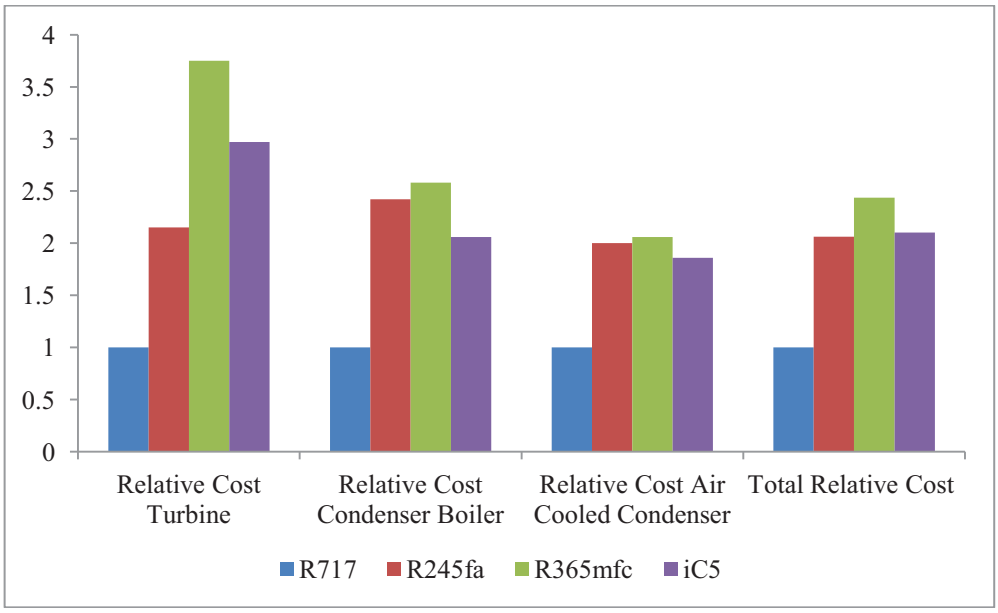


Figure 7.23 Coûts relatifs des composants, calculés par rapport à celui de l'ammoniac

Parmi les trois fluides organiques, le moins performant en terme de compacité et de coût est le R365mfc. Il ne sera donc plus inclus dans les tests du chapitre suivant.

Le GWP du R245fa étant relativement élevé, il est envisageable d'utiliser le mélange R245fa/isopentane au lieu des corps purs. D'autre part, il serait également possible de regarder les éventuels futurs remplaçants du R245fa (comme par exemple le R1233zd, qui a la même, voire une meilleure, performance énergétique et économique que le R245fa ; cependant le fluide est encore en phase de test et non commercialisé.)

A partir de ces résultats de performance calculées, nous pouvons considérer un site de production particulier dont un climat sur l'année est connu afin d'évaluer le gain économique.

Le prix d'électricité varie au cours de l'année. En France, il est plus cher en hiver en raison de la forte demande de chauffage électrique. Selon les périodes de l'année, le prix d'électricité est obtenu en multipliant le prix de base par un coefficient correcteur. Nous disposons pour cela de données fournies par EDF.

La connaissance des données climatiques, économiques et la prévision de performance nous permettent d'évaluer la valeur de la vente annuelle d'électricité d'une centrale de 650 MWe. Nous avons réalisé cette étude pour les cycles bi-étagés R245fa et l'isopentane. Nous avons également calculé le cas d'une centrale classique afin de comparer les gains économiques. Le Tableau 7.26 montre les résultats de cette évaluation économique, les données climatiques parisiennes étant été considérées. Le gain économique est de l'ordre de 4 million d'Euros /an dans cet exemple.

	Vente d'électricité (en Million euros/ an)	Gain par rapport au cycle classique (en Millions d'Euros / an)
cycle R245fa	288	5
cycle iC5	287	4
cycle de Rankine classique	283	-

Tableau 7.26 Ventes d'électricité annuelles selon différentes configurations de la centrale

7.7.7 Conclusion

Le choix des fluides de travail est primordial dans notre étude. Cependant, en comparaison des autres études publiées, l'impact du choix du fluide sur la performance du cycle bi-étagé reste très faible. Cela est dû au fait que 90 % de la puissance demandée est toujours produite par le cycle à vapeur, et seulement 10 % par l'ORC. En revanche, le choix du fluide est déterminant pour la taille des composants et donc pour le coût d'investissement. De ce point de vue, les principaux paramètres thermophysiques d'influence sont :

- la chaleur latente : débit du cycle
- le volume spécifique : taille des échangeurs et perte cinétique de la turbine
- les propriétés de transport : taille des échangeurs.

Au contraire, les propriétés telles que la température critique ou la pression critique jouent un rôle plus secondaire que prévu.

Ceci étant dit, toutes les propriétés de fluides sont importantes pour bien prédire la performance d'un système énergétique et dimensionner les composants. Pour cette raison, un outil informatique de prédiction des propriétés thermophysiques a été créé et relié au progiciel de simulation de systèmes énergétiques Thermoptim. Cette démarche a permis de tester les fluides récents ou les fluides pour lesquels peu de données sont disponibles. En implémentant les différents modèles de fluides, nous observons que les améliorations des modèles ont souvent porté sur les calculs de courbes de saturation et la précision des calculs des propriétés comme les volumes spécifiques. Pour notre projet, nous constatons que d'autres propriétés comme la conductivité thermique et la viscosité sont tout aussi importantes, en permettent notamment d'obtenir de bonnes prévisions de la taille des installations.

Trois fluides organiques candidats ont été déterminés suite à l'évaluation de performance du cycle bi-étagé : le R365mfc, l'isopentane et le R245fa. L'ammoniac a été choisi comme fluide de référence. Ils constituent la base des fluides de test pour le dimensionnement des composants du cycle bi-étagé. Le condenseur-bouilleur et l'aérocondenseur ont été modélisés. Les modèles ont été validés par rapport à des données relatives à des échangeurs existants. Le dimensionnement de la turbine a été fait avec l'outil GTDT. Les calculs de dimensionnement montrent un net avantage de l'ammoniac sur les fluides organiques. Le calcul de coût des installations montre la même tendance. Le R365mfc, le moins performant en terme de compacité et de coût des composants, est exclus de la compétition.

En raison d'investissements initiaux du cycle bi-étagé organique éventuellement plus élevés, le gain de production annuel devient un facteur important qui permet de rééquilibrer l'investissement supplémentaire sur les composants. Les cycles bi-étagés précédemment définis ont été modélisés en régime non-nominal. La production d'électricité annuelle a été calculée sur des sites de production donnés. La connaissance du prix d'électricité a permis d'évaluer un gain qui s'élève à plusieurs Million d'Euros / an en comparant une centrale bi-étagée de 650 MWe avec une centrale classique de même puissance.

Actuellement, les fluides organiques identifiés pour notre application sont le R245fa et l'isopentane qui ont présenté des performances relativement satisfaisantes. En raison du GWP relativement élevé, il est sans doute préférable d'utiliser un mélange de R245fa et d'isopentane. Le R1233zd, éventuel remplaçant futur du R245fa qui n'est pas encore sur le marché, a également fourni des résultats intéressants. En revanche, en terme de taille des composants, ces fluides sont tous beaucoup moins performants que l'ammoniac. Par

conséquent, pour qualifier les fluides que nous avons identifiés, nous ne pouvons sans doute parler que de fluides « acceptables ».

Cette thèse a permis de construire et de valider une démarche d'évaluation technico-économique prédictive du système énergétique en faisant le lien entre le génie des procédés, le système énergétique et l'étude économique. Nous sommes partis des critères de sélection des fluides de travail et de quelques propriétés simples telles que les coordonnées critiques. Nous ne nous sommes pas arrêtés à l'évaluation de la performance des divers fluides dans le cycle comme dans la plupart des publications existantes. Nous avons poussé les études plus loin vers le dimensionnement des composants et vers la vérification de la viabilité économique du nouveau système en considérant le coût d'investissement et le gain économique annuel. La force de cette démarche est de pouvoir prévoir la performance énergétique et économique d'un nouveau fluide mal connu dans un système énergétique donné. Un outil de simulation est né de cette démarche. Un article de journal et trois articles de congrès ont été publiés au cours de la thèse.

Nous sommes également conscients que de nombreux travaux restent à réaliser. Les modèles des fluides implémentés peuvent encore être améliorés si nous disposons de données expérimentales. Cela concerne notamment les propriétés de transport qui présentent encore des incertitudes assez élevées. Les modèles de cycle et de composants peuvent aussi être affinés, et il serait sans doute intéressant d'évaluer les impacts des divers paramètres comme le débit, la pression de prélèvement sur la performance mais aussi sur les résultats économiques du cycle. Les évaluations de coûts peuvent être améliorées, par exemple en incluant le coût du génie civil, pour obtenir un schéma plus net sur le coût d'investissement tout en restant prudent sur les incertitudes des corrélations employées.

La démarche prédictive peut aussi être approfondie. En faisant intervenir des groupes de molécules de contribution (méthode de Joback par exemple), nous pouvons imaginer utiliser la composition moléculaire du fluide comme données d'entrée des équations d'état.

Nomenclatures

Lettres

A	surface, m^2
C	Vitesse du son, m/s
Cp	chaleur spécifique, kJ/kg/K,
D	diamètre, m
F	rapport “surface des ailettes”/ “surface du tube”
G	débit massique surfacique, $kg/s/m^2$
Gr	coefficient de Grossman
GWP	Global Warming Potential (Potentiel de réchauffement global)
g	gravité, 9.81 m/s^2
k_x	constante
h	enthalpie massique, $J.kg^{-1}$
L	chaleur latente, kJ/kg
l	longeur, m
M	masse molaire, g/mol
m	débit massique, $kg.s^{-1}$
N	nombre de tubes
Nu	nombre de Nusselt
n_x	constante
ODP	Ozone depletion potential (Potentiel de deterioration de la zone d’ozone)
P	pression, Pa
Pr	nombre de Prandlt
Sc	coefficient de Schrock
SPX	Super PhéniX
Q	puissance thermique, W
R	constante de gaz, 8.314 $J.K^{-1}.mol^{-1}$
Re	Reynolds number
STEP	steam Turbine Exhaust Pressure, bar
T	temperature, K
U	admittance, $W/K/m^2$
U_x	vitesse d’entrainement, m/s (triangle de vitesse)
V_x	vitesse absolue, m/s (triangle de vitesse)
v	vitesse, m/s
W_x	vitesse relatve, m/s (triangle de vitesse)
X_{tt}	paramètre de Lockhart-Martinelli

Lettres Grèques

ϕ	coefficient de fugacité
η_x	efficacité
λ	conductivité thermique, W/K/m
η	viscosité, Pa.s
ρ	masse volumique, kg/m^3
Φ_0	Lockhart-Martinelli coefficient
σ	diamètre de la particule rigide, nm
Ω	intégrale de collision
τ	puissance mécanique, W

Indices

a	vapeur envoyé à la turbine HP
aa	vapeur envoyé à la turbine BP
ab	vapeur prélevée à la sortie de la turbine HP
ACC	air cooled condenser (aérocondenseur)
Air	Air ambiant
b	vapeur prélevée à la sortie du générateur de vapeur
CB	condenser-bouilleur
CONDO	condensation du fluid organique
c	critical
EVAP	Evaporation de l'eau
EVAPO	Evaporation du fluide organique
H	Source chaude
h	hydraulique
L	liquide
m	material
O	cycle organique
P	pompe du cycle à vapeur d'eau
PH	préchauffe
PO	pompe du cycle au fluide organique
p	pression
pass	pass
ref	référence
res	residuel
r	réduit
SG	générateur de vapeur du cycle à vapeur d'eau
SH	surchauffe
T	Turbine du cycle à vapeur
TBP	Turbine BP du cycle à apeur
TH	thermal
THP	turbine HP du cycle à vapeur d'eau
TO	turbine ORC
tot	total
t	temperature
V	vapeur
[m]	unité: m
[m^2]	unité: m^2
[kW]	unité: kW

Liste des figures

FIGURE 1.1 SCHEMA DES 3 CIRCUITS D'UNE CENTRALE DE PRODUCTION REFROIDIE PAR UNE TOUR HUMIDE (SOURCE EDF) 9
FIGURE 1.2 SCHEMA DU SYSTEME DE REFROIDISSEMENT A BOUCLE OUVERTE 10
FIGURE 1.3 SCHEMA DU SYSTEME DE REFROIDISSEMENT A BOUCLE FERMEE 11
FIGURE 1.4 SCHEMA DU SYSTEME DE REFROIDISSEMENT A AIR 12
FIGURE 1.5 SCHEMA D'UN CYCLE A VAPEUR SIMPLE REALISE SOUS THERMOPTIM™ 13
FIGURE 1.6 CYCLE DE RANKINE A VAPEUR D'EAU AVEC SURCHAUFFE DANS UN DIAGRAMME (T,S) 14
FIGURE 1.7 TECHNICIEN A COTE DU DERNIER ETAGE DE LA TURBINE VAPEUR (SOURCE EDF) 14
FIGURE 1.8 SCHEMA REPRESENTANT LE CYCLE BI-ETAGE A L'AMMONIAC (FLEURY ET BELLOT 1989) 15
FIGURE 1.9 PHOTO DE LA TURBINE A L'AMMONIAC (SOURCE EDF) 16
FIGURE 1.10 REPRESENTATION DE LA SURPUISSANCE THEORIQUE D'UNE CENTRALE ET DE LA PERTE CINETIQUE (EN POINTILLES) EN FONCTION DE LA TEMPERATURE 17
FIGURE 1.11 LA PRODUCTION DU CYCLE BI-ETAGE A L'AMMONIAC PAR RAPPORT A UN CYCLE A VAPEUR D'EAU CLASSIQUE EN FONCTION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR AMBIANT, DONNEES DES ESSAIS CYBIAM (FLEURY ET BELLOT 1989) 18
FIGURE 1.12 SCHEMA DU CYCLE BI-ETAGE ADAPTE AUX CONDITIONS SUPERPHENIX SOUS THERMOPTIM™ 20
FIGURE 1.13 TUBES A AILETTES CONTINUES (B) ET TUBES A AILETTES INDEPENDANTES (A) (SHAH ET SEKULIC 1998) 22
FIGURE 1.14 REPRESENTATION DES COMPOSANTS D'UN ECHANGEUR A MICRO-CANAUX (GRETH 2012) 23
FIGURE 1.15 SCHEMA D'UN ECHANGEUR A TUBES ET CALANDRES (BONTEMPS, ET AL. N.A.) 24
FIGURE 1.16 SCHEMA D'UN ECHANGEUR A PLAQUES ET JOINTS (GRETH 2012) 25
FIGURE 1.17 SCHEMA REPRESENTATIVE D'UN ECHANGEUR A PLAQUES SPIRALES (SHAH ET SEKULIC 1998) 26
FIGURE 2.1 VARIATION DE ΔP A 2 NIVEAUX DE TEMPERATURE DIFFERENTS, FIGURE REALISEE AVEC THERMOPTIM®. 40
FIGURE 2.2 DIAGRAMMES (T,S) POUR LES TROIS TYPES DE FLUIDES : SEC, ISENTROPIQUE ET HUMIDE 42
FIGURE 2.3 ALLURE DE LA FONCTION A(T) 51
FIGURE 2.4 LENTILLE DE VAPORISATION ISOTHERME DU MELANGE R245FA/ISOPENTANE, LES DONNEES D'EL-AHMAR ET AL (EL-AHMAR 2012), T= 421.19 K AVEC : 60
FIGURE 2.5 ALGORITHME DE CALCUL DE LA PRESSION DE SATURATION 65
FIGURE 2.6 ALGORITHME DE CALCUL DE POINT DE BULLE 65
FIGURE 2.7 ALGORITHME DE RESOLUTION D'UN FLASH ISOTHERME PROPOSE PAR SANDLER (SANDLER 1977) 66
FIGURE 2.8 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DE BUTANE 69
FIGURE 2.9 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE VAPEUR DU BUTANE 69
FIGURE 2.10 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE LIQUIDE DU BUTANE 70
FIGURE 2.11 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU R134A 71
FIGURE 2.12 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE VAPEUR DU R134A 71
FIGURE 2.13 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE LIQUIDE DU R134A 72
FIGURE 2.14 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU R245FA 73
FIGURE 2.15 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE VAPEUR DU R245FA 73
FIGURE 2.16 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE LIQUIDE DU R245FA 74
FIGURE 2.17 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU R1216 75
FIGURE 2.18 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE DU R1216 75
FIGURE 2.19 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU TOLUENE 77
FIGURE 2.20 RESULTATS DES CALCULS DE MASSES VOLUMIQUES VAPEUR DU TOLUENE 78
FIGURE 2.21 RESULTATS DES CALCULS DE MASSES VOLUMIQUES LIQUIDE DU TOLUENE 78
FIGURE 2.22 LENTILLE DE VAPORISATION ISOTHERME DU MELANGE R245FA/ISOPENTANE, MODELE AJUSTE A PARTIR DES DONNEES D'EL-AHMAR ET AL, T=392.87 K, **kij**=0.148 79
FIGURE 2.23 RESULTATS DE CALCULS DE LA VISCOSITE EN PHASE VAPEUR POUR L'ISOPENTANE 81
FIGURE 2.24 RESULTATS DE CALCULS DE LA CONDUCTIVITE THERMIQUE EN PHASE VAPEUR POUR L'ISOPENTANE 81
FIGURE 2.25 RESULTATS DE CALCULS DE LA VISCOSITE EN PHASE LIQUIDE POUR L'ISOPENTANE 82
FIGURE 2.26 RESULTATS DE CALCULS DE LA CONDUCTIVITE THERMIQUE EN PHASE LIQUIDE POUR L'ISOPENTANE 82
FIGURE 2.27 RAPPORT DE LA DEVIATION DE LA VISCOSITE LIQUIDE SUR LA DEVIATION VOLUME SPECIFIQUE 83
FIGURE 2.28 RESULTATS DE CALCULS DE LA VISCOSITE EN PHASE LIQUIDE POUR L'ISOPENTANE APRES LES CORRECTIONS 83
FIGURE 2.29 RESULTATS DE CALCULS DE LA CONDUCTIVITE THERMIQUE EN PHASE LIQUIDE POUR L'ISOPENTANE APRES LES CORRECTIONS 84
FIGURE 2.30 RESULTATS DE CALCULS DE LA VISCOSITE EN PHASE VAPEUR POUR LE R245FA 84

FIGURE 2.31 RESULTATS DE CALCULS DE LA CONDUCTIVITE THERMIQUE EN PHASE VAPEUR POUR LE R245FA 85
FIGURE 2.32 RESULTATS DE CALCULS DE LA VISCOSITE EN PHASE LIQUIDE POUR LE R245FA 85
FIGURE 2.33 RESULTATS DE CALCULS DE LA CONDUCTIVITE THERMIQUE EN PHASE LIQUIDE POUR LE R245FA ... 86
FIGURE 2.34 RESULTATS DE CALCULS DE LA VISCOSITE EN PHASE VAPEUR POUR LE MELANGE R245FA/ISOPENTANE 87
FIGURE 2.35 RESULTATS DE CALCULS DE LA CONDUCTIVITE THERMIQUE EN PHASE VAPEUR POUR LE MELANGE R245FA/ISOPENTANE 87
FIGURE 2.36 RESULTATS DE CALCULS DE LA VISCOSITE EN PHASE LIQUIDE POUR LE R245FA AVEC :..... 87
FIGURE 2.37 RESULTATS DE CALCULS DE LA CONDUCTIVITE THERMIQUE EN PHASE LIQUIDE POUR LE R245FA 88
FIGURE 2.38 CONNAISSANCE DES FLUIDES ET LES DEMARCHES CORRESPONDANTES..... 89
FIGURE 3.1 SCHEMA DU CYCLE BI-ETAGE ADAPTE AUX CONDITIONS SUPERPHENIX SOUS THERMOPTIM^{TM} 92
FIGURE 3.2 SCHEMA D'UN SYSTEME OUVERT 93
FIGURE 3.3 REPRESENTATION D'UNE DETENTE REELLE ET IDEALE DANS UN DIAGRAMME (T,S) 95
FIGURE 3.4 REPRESENTATION D'UNE COMPRESSION REELLE ET IDEALE DANS UN DIAGRAMME (T,S) 97
FIGURE 3.5 SCHEMA D'UN DIEDRE ET DES TUBES AILETES LE COMPOSANT. 100
FIGURE 3.6 REPRESENTATION DE L'ALLURE DES TEMPERATURES DANS L'AEROCONDENSEUR. 101
FIGURE 3.7 SCHEMA REPRESENTANT LE CONDENSEUR-BOUILLEUR DU CYBIAM (SOURCE EDF) 105
FIGURE 3.8 REPRESENTATION DE L'ALLURE DES TEMPERATURES DANS LE CONDENSEUR BOUILLEUR..... 106
FIGURE 3.9 SCHEMA DU CONDENSEUR BOUILLEUR CONSIDERE LORS DE LA VALIDATION DES MODELES DE PERTE DE CHARGE PAR FROTTEMENT (SOURCE EDF)..... 110
FIGURE 3.10 SCHEMA REPRESENTANT LE DISTRIBUTEUR ET LA ROUE MOBILE D'UN ETAGE DE TURBINE (COMBES 2012)..... 111
FIGURE 3.11 PERFORMANCES DES CYCLES BI-ETAGE A $Text = 11\,°C$ 116
FIGURE 3.12 PERFORMANCES DES CYCLES BI-ETAGE A $Text = -10\,°C$ 117
FIGURE 3.13 PERFORMANCES DES CYCLES BI-ETAGE A $Text = 25\,°C$ 117
FIGURE 3.14 INFLUENCE DU RENDEMENT DE LA TURBINE ORC SUR LA PERFORMANCE DU CYCLE BI-ETAGE 120
FIGURE 3.15 INFLUENCE DU PINCEMENT DU CONDENSEUR-BOUILLEUR SUR LA PERFORMANCE DU CYCLE BI-ETAGE 120
FIGURE 3.16 INFLUENCE DU PINCEMENT DE L'AEROCONDENSEUR SUR LA PERFORMANCE DU CYCLE BI-ETAGE .. 121
FIGURE 3.17 SCHEMA DU CYCLE BI-ETAGE AVEC UN RECUPERATEUR..... 121
FIGURE 3.18 GAIN DE RENDEMENT D'UN CYCLE AVEC RECUPERATEUR EN FONCTION DE LA PRESSION DE COUPURE 122
FIGURE 3.19 COMPARAISON DE SURFACES D'ECHANGE CALCULEES POUR L'AEROCONDENSEUR..... 123
FIGURE 3.20 COMPARAISON DE SURFACES D'ECHANGE CALCULEES POUR LE CONDENSEUR-BOUILLEUR 123
FIGURE 3.21 ETUDE DE SENSIBILITE DE LA CONDUCTIVITE DU FLUIDE DE TRAVAIL. 127
FIGURE 3.22 PERFORMANCES DU CYCLE CALCULEES EN REGIME NON NOMINAL POUR DIFFERENTS FLUIDES DE TRAVAIL 129
FIGURE 4.1 COUTS RELATIFS DES TURBINES PAR RAPPORT A LA TURBINE A L'AMMONIAC EVALUE A 12 M€..... 135
FIGURE 4.2 COUTS RELATIFS DES CONDENSEURS-BOUILLEURS PAR RAPPORT AU BOUILLEUR A L'AMMONIAC EVALUE A 1.7 M€ 136
FIGURE 4.3 COUTS RELATIFS DES AEROCONDENSEURS PAR RAPPORT A L'AEROCONDENSEUR A L'AMMONIAC EVALUE A 45 M€ 136
FIGURE 4.4 COUTS TOTAUX RELATIFS DES TROIS COMPOSANTS ADDITIONNELS PAR RAPPORT AU SYSTEME BI-ETAGE A L'AMMONIAC 136
FIGURE 4.5 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR PAR HEURE (PERIODE 20/05/2012-06/07/2012)..... 142
FIGURE 4.6 VARIATION DE PRIX (EUROPEAN ELECTRICITY INDEX) (PERIODE 20/05/2012-06/07/2012) 142
FIGURE 4.7 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR PAR HEURE (PERIODE 09/07/2012-21/12/2012)..... 143
FIGURE 4.8 VARIATION DE PRIX (EUROPEAN ELECTRICITY INDEX) (PERIODE 09/07/2012-21/12/2012) 143
FIGURE 4.9 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR PAR HEURE (PERIODE 22/01/2013-12/02/2013)..... 144
FIGURE 4.10 VARIATION DE PRIX (EUROPEAN ELECTRICITY INDEX) (PERIODE 22/01/2013-12/02/2013) 144
FIGURE 4.11 VARIATION DU PRIX D'ELECTRICITE EN 2011-2012 (EPEX SPOT 2012) 146
FIGURE 4.12 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR A TROYES EN 2011-2012 (SOURCE EDF) 147
FIGURE 4.13 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR A COLMAR EN 2011-2012 (SOURCE EDF) 147
FIGURE 4.14 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR A AGEN EN 2011-2012 (SOURCE EDF)..... 147
FIGURE 4.15 LE CLIMAT EUROPEEN SELON LA CLASSIFICATION DE KÖPPEN-GEIGERLE (PEEL, FINLAYSON ET MCMAHON 2007)..... 150
FIGURE 4.16 GAINS DE REVENUS ANNUELS DES CYCLES BI-ETAGES R1233ZD ET AMMONIAC POUR DIFFERENTS TYPES DE CLIMATS EUROPEENS. 151
FIGURE 7.1 ALGORITHME D'AJUSTEMENT DES PARAMETRES DE LA FONCTION A DE MATHIAS-COPEMAN 162
FIGURE 7.2 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR PAR HEURE (PERIODE 12/02/2012 - 17/04/2012) 178

FIGURE 7.3 VARIATION DE PRIX (EUROPEAN ELECTRICITY INDEX) (PERIODE 12/02/2012-17/04/2012) 178
FIGURE 7.4 VARIATION DE TEMPERATURE DE L'AIR PAR HEURE (PERIODE 19/04/2012-22/04/2012)..... 179
FIGURE 7.5 VARIATION DE PRIX (EUROPEAN ELECTRICITY INDEX) (PERIODE 19/04/2012-22/04/2012) 179
FIGURE 7.6 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR PAR HEURE (PERIODE 25/04/2012-18/05/2012)..... 180
FIGURE 7.7 VARIATION DE PRIX (EUROPEAN ELECTRICITY INDEX) (PERIODE 25/04/2012-18/05/2012) 180
FIGURE 7.8 VARIATION DE LA TEMPERATURE DE L'AIR PAR HEURE (PERIODE 18/01/2013-21/01/2013)..... 181
FIGURE 7.9 VARIATION DE PRIX (EUROPEAN ELECTRICITY INDEX) (PERIODE 18/01/2013-21/01/2013) 181
FIGURE 7.10 CHARGEMENT D'UN FLUIDE EXTERNE : ETAPE 1..... 183
FIGURE 7.11 CHARGEMENT D'UN FLUIDE EXTERNE : ETAPE 2..... 183
FIGURE 7.12 CHARGEMENT D'UN FLUIDE EXTERNE : ETAPE 3..... 184
FIGURE 7.13 CHARGEMENT D'UN FLUIDE EXTERNE : ETAPE 4 (CORPS PURS). 184
FIGURE 7.14 CHARGEMENT D'UN FLUIDE EXTERNE : ETAPE 4 (MELANGES). 185
FIGURE 7.15 CHARGEMENT D'UN FLUIDE EXTERNE : ETAPE 5..... 185
FIGURE 7.16 SCHEMA REPRESENTANT LA STRUCTURE DU BIBCTP 190
FIGURE 7.17 SCHEMA DU CYCLE BI-ETAGE EAU-AMMONIAC..... 196
FIGURE 7.18 SCHEMA DU CYCLE BI-ETAGE ADAPTE AUX CONDITIONS SUPERPHENIX SOUS THERMOPTIM™ 199
FIGURE 7.19 RECHERCHE DU POINT DE FONCTIONNEMENT OPTIMAL POUR LES 4 FLUIDES CANDIDATS..... 207
FIGURE 7.20 SURFACES DES AEROCONDENSEURS CALCULEES POUR LES 4 FLUIDES CANDIDATS..... 208
FIGURE 7.21 SURFACES DES CONDENSEURS-BOUILLEURS CALCULEES POUR LES 4 FLUIDES CANDIDATS 208
FIGURE 7.22 EVALUATION DE PERFORMANCE EN FONCTION DE LA TEMPERATURE D'AIR, DES CYCLES BI-ETAGES R245FA ET ISOPENTANE, COMPAREE AU CYCLE DE RANKINE CLASSIQUE EN REGIME NON-NOMINAL..... 209
FIGURE 7.23 COUTS RELATIFS DES COMPOSANTS, CALCULES PAR RAPPORT A CELUI DE L'AMMONIAC 211

Liste des tableaux

TABLEAU 1.1 COMPARAISON DU VOLUME MASSIQUE ET DE LA CHALEUR LATENTE DE L'AMMONIAC ET DE L'EAU A 30 °C (NIST 2007) 16
TABLEAU 1.2. CONDITIONS DE FONCTIONNEMENT DU CYCLE BI-ETAGE 21
TABLEAU 1.3 DIMENSION D'UN ECHANGEUR A PLAQUES ET JOINTS TYPIQUE 25
TABLEAU 1.4 DONNEES SUR UN ECHANGE A PLAQUES SOUDEES PACKINOX 26
TABLEAU 1.5 CARACTERISTIQUES DES ECHANGEURS CLASSES SELON LES CRITERES DE CHOIX 27
TABLEAU 1.6 EXEMPLES DE RAPPORTS DE DETENTE DE 3 FLUIDES ORGANIQUES 30
TABLEAU 1.7 LISTE DE TURBINES ORC COMMERCIALES CENTRIFUGES DE DIFFERENTES MARQUES (CIRINCIONE 2011) 30
TABLEAU 2.1 : QUELQUES EXEMPLES DE FLUIDES FRIGORIGENES COURANTS 36
TABLEAU 2.2 LES GROUPES DE SECURITE ASHRAE 39
TABLEAU 2.3 LES CRITERES DE CHOIX DE FLUIDES CLASSES DANS L'ORDRE D'INSPECTION 44
TABLEAU 2.4. LISTE DES FLUIDES SELECTIONNES POUR LE TEST (NIST 2007, PROSIM 2001, SUBRAMONEY, ET AL. 2012) 45
TABLEAU 2.5 LES DIFFERENTS COUPLES (U, W) SELON LES MODELES 49
TABLEAU 2.6 LES DIFFERENTS COUPLES (U, W) POUR LE MODELE PT 53
TABLEAU 2.7. COEFFICIENTS UTILISES POUR LE CALCUL DE VISCOSITE DU R134A 55
TABLEAU 2.8 COEFFICIENTS UTILISES POUR LE CALCUL DE LA CONDUCTIVITE DU R134A 58
TABLEAU 2.9 PARAMETRES DU BUTANE 68
TABLEAU 2.10 PARAMETRES DE MATHIAS-COPEMAN DU BUTANE 68
TABLEAU 2.11 PARAMETRES DU R134A 70
TABLEAU 2.12 PARAMETRES DE MATHIAS-COPEMAN DU R134A 70
TABLEAU 2.13 PARAMETRES DU R245FA 72
TABLEAU 2.14 PARAMETRES DE MATHIAS-COPEMAN DU R245FA 72
TABLEAU 2.15 PARAMETRES DU R1216 74
TABLEAU 2.16 PARAMETRES DE MATHIAS-COPEMAN DU R1216 74
TABLEAU 2.17 PARAMETRES D'ENTREE DU R1233ZD 76
TABLEAU 2.18 DEVIATIONS DES RESULTATS DE PRESSION DE SATURATION ET DE MASSE VOLUMIQUE DU R1233ZD 76
TABLEAU 2.19 PARAMETRES DU TOLUENE 77
TABLEAU 2.20 PARAMETRES DE MATHIAS-COPEMAN DU TOLUENE 77
TABLEAU 2.21 PARAMETRES DU R245FA ET DE L'ISOPENTANE 79
TABLEAU 2.22 RESULTATS DE CALCULS DE L'ENVELOPPE DE PHASE LIQUIDE 79
TABLEAU 2.23 RESULTATS DE CALCULS DE L'ENVELOPPE DE PHASE VAPEUR 80
TABLEAU 2.24 PARAMETRES DES CORRELATIONS DE CORRECTION POUR LES PROPRIETES DE TRANSPORT DU R245FA (MODELE PR) 86
TABLEAU 2.25 PARAMETRES DES CORRELATIONS DE CORRECTION POUR LES PROPRIETES DE TRANSPORT DU MELANGE R245FA/ISOPENTANE (MODELE PR) 88
TABLEAU 3.1 CARACTERISTIQUES GEOMETRIQUES D'UN ECHANGEUR A TUBES ET AILETTES DE LA CENTRALE DE SALTILLO DE TYPE DIEDRE 99
TABLEAU 3.2 CONDITIONS DE FONCTIONNEMENT NOMINALES DE L'AEROCONDENSEUR DE SALTILLO 103
TABLEAU 3.3 RESULTATS DU CALCUL DE SURFACE D'ECHANGE A PARTIR DU MODELE ETABLI COMPARE AVEC LA SURFACE D'ECHANGE INDIQUEE PAR LE CONSTRUCTEUR 104
TABLE 3.4 CARACTERISTIQUES DES TUBES DE L'ECHANGEUR DU CYBIAM (TUBES HORIZONTAUX) 105
TABLEAU 3.5 CONDITIONS DE FONCTIONNEMENT NOMINALES DU CONDENSEUR-BOUILLEUR DU CYBIAM CONSIDEREES 109
TABLEAU 3.6 RESULTATS DU CALCUL DE SURFACE D'ECHANGE A PARTIR DU MODELE ETABLI COMPARE AVEC LA SURFACE D'ECHANGE INDIQUEE PAR LE CONSTRUCTEUR 109
TABLEAU 3.7 CONFIGURATION DES TUBES DU CONDENSEUR-BOUILLEUR DU TYPE VERTICAL (SOURCE EDF) 110
TABLEAU 3.8 COMPARAISON DES PERTES DE CHARGE PAR FROTTEMENT DU CONDENSEUR-BOUILLEUR DU TYPE VERTICAL SELON DIFFERENTES SOURCES. 110
TABLEAU 3.9 RAPPEL DES PARAMETRES PRIS EN COMPTE DANS LA SIMULATION DU CYCLE SOUS THERMOPTIM. 115
TABLEAU 3.10 CLASSEMENT ETABLI SUITE AUX TESTS REALISES DANS LE CYCLE BI-ETAGE 118
TABLEAU 3.11 PRESSIONS DE COUPURE OPTIMALES POUR LES DIFFERENTS FLUIDES CHOISIS 118
TABLEAU 3.12 COMPARAISON DE PERFORMANCE D'UN CYCLE BI-ETAGE CLASSIQUE ET UN CYCLE AVEC RECUPERATEUR A $Text = 11\,°C$ 122
TABLEAU 3.13 CALCULS DE LA SURFACE D'ECHANGE DE L'AEROCONDENSEUR 124

TABLEAU 3.14 EVALUATION DU PARAMETRE METRIQUE CONVECTIF CONDENSEUR DES FLUIDES DE TRAVAIL, A T=40 °C 125
TABLEAU 3.15 REPARTITION DE SURFACES D'ECHANGE DES 2 ZONES 125
TABLEAU 3.16 EVALUATION DU PARAMETRE METRIQUE CONVECTIF BOUILLEUR DES FLUIDES DE TRAVAIL A T = 70 °C POUR LES FLUIDES ORGANIQUES ET T = 80 °C POUR L'AMMONIAC 126
TABLEAU 3.17 RESULTATS DES CALCULS DE TURBINE ORC 128
TABLEAU 3.18 PROPRIETES DES FLUIDES IMPACTANT LE DIMENSIONNEMENT DE LA TURBINE 128
TABLEAU 3.19 DONNEES METEOROLOGIQUES DE LA REGION PARISIENNE (STATION AEROPORT CHARLES DE GAULLE) (ASHRAE 2013) 130
TABLEAU 3.20 L'ENERGIE PRODUITE SUR UNE ANNEE TYPE DE LA REGION PARISIENNE 131
TABLEAU 4.1 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE DES CYCLES BI-ETAGES (PERIODE 20/05/2012-06/07/2012) PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 142
TABLEAU 4.2 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE DES CYCLES BI-ETAGES (PERIODE 09/07/2012-21/12/2012) PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 143
TABLEAU 4.3 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE DES CYCLES BI-ETAGES (PERIODE 22/01/2013-12/02/2013) PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 144
TABLEAU 4.4 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE TOTAL DES CYCLES BI-ETAGES SUR LA PERIODE 2012-2013 PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 145
TABLEAU 4.5 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE TOTAL DES CYCLES BI-ETAGES SUR LA PERIODE 2011-2012 POUR LES SITES DE NOGENT, FESSENHEIM ET GOLFECH. 147
TABLEAU 4.6 BENEFICE ENGENDRE PAR UTILISATION DES CYCLES BI-ETAGES A R1233ZD OU A AMMONIAC SUR LA PERIODE 2011-2012 POUR LES SITES DE NOGENT, FESSENHEIM ET GOLFECH. 148
TABLEAU 7.1 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DE BUTANE 163
TABLEAU 7.2 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE DU BUTANE 163
TABLEAU 7.3 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU R134A 164
TABLEAU 7.4 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE DU R134A 164
TABLEAU 7.5 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU R245FA 165
TABLEAU 7.6 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE DU R245FA 166
TABLEAU 7.7 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU R1216 166
TABLEAU 7.8 RESULTATS DE CALCULS DE MASSE VOLUMIQUE DU R1216 167
TABLEAU 7.9 RESULTATS DE CALCULS DE PRESSIONS DE SATURATION DU TOLUENE 167
TABLEAU 7.10 RESULTATS DES CALCULS DE MASSES VOLUMIQUES LIQUIDE ET VAPEUR DU TOLUENE 168
TABLEAU 7.11 RESULTATS DE CALCULS DE PROPRIETES DE TRANSPORT EN PHASE VAPEUR POUR L'ISOPENTANE 168
TABLEAU 7.12 RESULTATS DE CALCULS DE PROPRIETES DE TRANSPORT EN PHASE LIQUIDE POUR L'ISOPENTANE 169
TABLEAU 7.13 RESULTATS DE CALCULS DE PROPRIETES DE TRANSPORT EN PHASE LIQUIDE POUR L'ISOPENTANE APRES CORRECTION 170
TABLEAU 7.14 RESULTATS DE CALCULS DE PROPRIETES DE TRANSPORT EN PHASE VAPEUR POUR LE R245FA 170
TABLEAU 7.15 RESULTATS DE CALCULS DE PROPRIETES DE TRANSPORT EN PHASE LIQUIDE POUR LE R245FA 171
TABLEAU 7.16 RESULTATS DE CALCULS DE PROPRIETES DE TRANSPORT EN PHASE VAPEUR POUR LE MELANGE R245FA/ISOPENTANE 172
TABLEAU 7.17 RESULTATS DE CALCULS DE PROPRIETES DE TRANSPORT EN PHASE LIQUIDE POUR LE MELANGE R245FA/ISOPENTANE 172
TABLEAU 7.18 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE ENTRE DES CYCLES BI-ETAGES (PERIODE 12/02/2012-17/04/2012) PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 178
TABLEAU 7.19 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE DES CYCLES BI-ETAGES (PERIODE 19/04/2012-22/04/2012) PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 179
TABLEAU 7.20 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE DES CYCLES BI-ETAGES (PERIODE 25/04/2012-18/05/2012) PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 180
TABLEAU 7.21 GAIN ENERGETIQUE ET ECONOMIQUE DES CYCLES BI-ETAGES (PERIODE 18/01/2013-21/01/2013) PAR RAPPORT A UN CYCLE SPX CLASSIQUE A VAPEUR D'EAU 181
TABLEAU 7.22. CONDITIONS DE FONCTIONNEMENT DU CYCLE BI-ETAGE 200
TABLEAU 7.23. LISTE DES FLUIDES SELECTIONNES POUR TEST ET LES PROPRIETES CARACTERISTIQUES 204
TABLEAU 7.24. EVALUATION DES INCERTITUDES DU MODELE PENG-ROBINSON COMPARE AUX DONNEES DU NIST ENTRE 280 K ET 390 K 205
TABLEAU 7.25 CLASSEMENT ETABLI SUITE AUX TESTS REALISES DANS LE CYCLE BI-ETAGE DE BASE 206
TABLEAU 7.26 VENTES D'ELECTRICITE ANNUELLES SELON DIFFERENTES CONFIGURATIONS DE LA CENTRALE ... 211

Modélisation d'un cycle de production d'électricité bi-étagé à aéroréfrigérant sec

RESUME : La production d'électricité dépend étroitement de la disponibilité d'une source froide. C'est la raison pour laquelle la plupart des centrales de grande puissance dans le monde sont construites près d'une source d'eau. Le problème de la source froide a été soulevé à plusieurs reprises en France, notamment après les canicules de 2003 et de 2006. Le refroidissement à l'air sec est une des options possibles. Cependant, étant donné le besoin de surface d'échange plus important, le changement de la source froide pour l'air ambiant n'est pas, dans la majorité des cas, viable économiquement.

Une des solutions à ce problème imaginées à EDF était de changer l'architecture du cycle de production en considérant un cycle de production composé de deux cycles de Rankine en cascade, le premier fonctionnant avec de la vapeur d'eau et le deuxième fonctionnant avec de l'ammoniac dont la vapeur à basse pression est beaucoup plus dense que celle de l'eau. Cette solution permet de faciliter l'utilisation d'un aérocondenseur et de réduire la taille de la salle machine.

En raison de la nature toxique et corrosive de l'ammoniac, il est intéressant d'étudier la possibilité de remplacer ce dernier par d'autres fluides plus adaptés, notamment en envisageant de nouveaux fluides pour lesquels peu ou pas de données sont disponibles. Nous comparons les fluides sur le plan énergétique et en terme de taille des composants de l'installation.

Cette thèse illustre la démarche des différentes étapes de notre travail : la recherche de nouveaux fluides de travail, l'évaluation de performance du système en régime nominal et non-nominal, le dimensionnement des principaux composants du cycle ainsi que l'évaluation de coût et de gain économique éventuel.

Mots clés : Fluides de travail, Modèles prédictifs, Propriétés thermophysiques et de transport, Cycle de Rankine organique (ORC), Cycle bi-étagé

Modelling of an air-cooled two-stage Rankine cycle for electricity production

ABSTRACT : This work considers a two stage Rankine cycle architecture slightly different from a standard Rankine cycle for electricity generation. Instead of expanding the steam to extremely low pressure, the vapor leaves the turbine at a higher pressure then having a much smaller specific volume. It is thus possible to greatly reduce the size of the steam turbine. The remaining energy is recovered by a bottoming cycle using a working fluid which has a much higher density than the water steam. Thus, the turbines and heat exchangers are more compact; the turbine exhaust velocity loss is lower. This configuration enables to largely reduce the global size of the steam water turbine and facilitate the use of a dry cooling system.

The main advantage of such an air cooled two stage Rankine cycle is the possibility to choose the installation site of a large or medium power plant without the need of a large and constantly available water source; in addition, as compared to water cooled cycles, the risk regarding future operations is reduced (climate conditions may affect water availability or temperature, and imply changes in the water supply regulatory rules).

The concept has been investigated by EDF R&D. A 22 MW prototype was developed in 70s using ammonia as the working fluid of the bottoming cycle for its high density and high latent heat. However, this fluid is toxic. In order to search more suitable working fluids for the two stage Rankine cycle application and to identify the optimal cycle configuration, we have established a working fluid selection methodology. Some potential candidates have been identified. We have evaluated the performances of the two stage Rankine cycles operating with different working fluids in both design and off design conditions. For the most acceptable working fluids, components of the cycle have been sized. The power plant concept can then be evaluated on a life cycle cost basis.

Keywords : Working fluids, Predictive Model, Thermodynamic & transport properties, Organic Rankine Cycle (ORC), Two-stage cycle



MINES ParisTech

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY