

Logiciels de calcul des propriétés thermodynamiques de l'eau et du réfrigérant HFC-134a pour les calculatrices TI-89, TI-92+ et Voyage 200.

André Bordeleau,

SEG, École de technologie supérieure, Montréal, Canada.

Introduction

L'établissement des propriétés thermodynamiques de la substance d'intérêt (eau, ammoniac ou autre) est une étape obligée de tout problème de thermodynamique. L'emploi des tables thermodynamiques a longtemps été le lot des étudiants, ingénieurs et chercheurs en ce domaine. Attendu que depuis 1999, les étudiants de l'ÉTS sont tenus de se procurer et de faire usage des calculateurs symboliques Texas Instruments (TI-89, TI-92+, Voyage 200), il a été jugé intéressant de produire des logiciels pour ces appareils qui remplaceraient les tables. Des logiciels de calcul des propriétés de l'eau ^(1,2) et du réfrigérant HFC-134a ont été écrits et implémentés. Ils sont utilisés depuis un an dans les cours de thermodynamique qui relèvent du Service des enseignements généraux. Suite à quelques remarques relatives à la programmation sur les calculateurs symboliques TI, l'auteur présentera l'un des logiciels produits et discutera d'une méthode de résolution de systèmes d'équations non-linéaires qu'il a utilisé.

La programmation sur les calculateurs symboliques TI.

Caractéristiques matérielles de la calculatrice

La question des limites matérielles de l'appareil se pose d'emblée pour quiconque veut développer des programmes un tant soit peu élaborés sur un outil tel que la calculatrice TI-92+. Cette dernière est équipée d'un CPU Motorola 68000 fonctionnant à environ 12 MHz. Elle comporte une ROM inscriptible (Flash ROM) d'environ 4 Mo segmentée en deux zones principales. La première zone est réservée au système d'exploitation; l'utilisateur n'y a accès que lors des mises à jour du système d'exploitation. Dans la seconde zone résident les applications Flash et les variables archivées. Finalement, l'appareil dispose de 256 ko de mémoire vive (RAM) dont 180 ko sont accessibles à l'utilisateur, le reste étant utilisé par le système d'exploitation.

Types de programmes

Trois options se présentent au programmeur qui veut écrire une application sur cet outil. Il peut, premièrement, programmer dans le langage BASIC de TI (TI-BASIC) et faire usage de la fonctionnalité à cet effet qui est offerte par la calculatrice. Les avantages principaux de cette approche sont la simplicité inhérente au langage et l'accès aux commandes usuelles de la calculatrice (commandes de calcul, d'affichage de résultats et de graphes, etc). Cette option est parfaitement satisfaisante pour l'écriture d'applications ou procédures relativement simples et qui nécessitent relativement peu de calculs mais,

s'agissant d'un langage interprété, le TI-BASIC peut être particulièrement lent si des calculs complexes sont nécessaires.

Le programmeur peut d'autre part choisir d'écrire une application Flash, ce qui constitue de son point de vue l'option la plus alléchante puisque l'application réside et s'exécute dans la ROM inscriptible (libérant la RAM). De ce fait, le programmeur dispose donc de presque 4 Mo pour son application. Une licence doit toutefois être obtenue auprès de TI pour l'utilisation de celle-ci. Des licences "freeware/shareware" peuvent être octroyées sur demande. Écrite en langage C, l'application est compilée à l'aide du compilateur intégré au SDK de TI (Software Developer's Kit).

La dernière option qui s'offre au programmeur (celle retenue par l'auteur) est de produire un programme de type ASM (l'extension qui est assignée à tous les programmes de ce type sur la calculatrice). Les programmes de cette sorte peuvent être écrits en Assembleur ou en C et s'exécutent dans la RAM. Toutefois, TI impose depuis l'implantation du système d'exploitation AMS 2.04 une limite de 24 ko aux programmes de ce type. On verra par la suite que cette difficulté peut être contournée étendant la limite effective pour la taille de ces applications à 64 ko. L'utilisateur doit être conscient que même si pour sauver de la mémoire RAM le programme a été archivé (résidant dans la Flash ROM), le système d'exploitation en fait d'abord une copie dans la RAM lors de son appel avant de l'exécuter.

S'agissant de programmes compilés dans les deux derniers cas, il est manifeste que leur exécution sera beaucoup plus rapide que le programme équivalent écrit en TI-BASIC. L'auteur a pu établir que certains calculs s'effectuaient au moins 100 fois plus rapidement lorsqu'ils étaient codés en C (type ASM).

Le compilateur TIGCC

L'auteur a utilisé le compilateur TIGCC (<http://tigcc.ticalc.org>) pour la compilation de code source écrit en C. TIGCC vient avec un environnement de développement intégré qui permet l'écriture, la compilation et l'exécution du code (conjointement avec l'émulateur de calculatrice VTI) et offre aussi l'option de compression des programmes. La documentation (sous la forme d'une aide intégrée au logiciel) est extensive et particulièrement utile car le compilateur reconnaît un grand nombre de fonctions propres au système d'exploitation (TIOS). Les développeurs de TIGCC ont cherché à rendre le compilateur conforme aux normes ANSI C permettant de ce fait à tout programmeur familier avec le langage C à produire du code sans qu'un apprentissage supplémentaire important ne soit nécessaire. Par opposition, le programmeur codant pour le compilateur C proposé par TI (le compilateur intégré au SDK de TI), doit faire un usage important de commandes TIOS. Cet aspect a été jugé suffisamment intéressant par l'auteur pour qu'il oriente son choix en direction de TIGCC. De fait plus de 90% du code écrit par l'auteur fait usage de fonctions ANSI C ce qui a permis de développer sur micro-ordinateur avant de tester les logiciels sur la calculatrice.

La taille des programmes de type ASM

Il a été mentionné que depuis l'AMS 2.04, les programmes de type ASM sont limités à une taille de 24 ko (pour l'AMS 2.03, la taille admissible était de 8 ko). La communauté de programmeurs sur TI a rapidement trouvé des façons de contourner cette limite. Entre autres solutions proposées, la méthode la plus simple passe par l'emploi d'un programme de lancement (« launcher »). Sans entrer dans les considérations techniques particulières à cette méthode (le lecteur intéressé peut, par exemple, se référer à la documentation accompagnant TIGCC), il suffit de savoir que lorsque programme de lancement est exécuté, il appelle pour exécution l'application proprement dite, le tout s'effectuant de façon transparente à l'utilisateur. TIGCC produit automatiquement deux fichiers quand l'option de compression est activée : un programme de lancement et le fichier appelé.

Le logiciel de calcul des propriétés thermodynamiques du réfrigérant HFC-134a.

Pour caractériser complètement un état thermodynamique, on doit établir six variables thermodynamiques: la température (T), la pression (P), le volume massique (v), l'énergie interne massique (u), l'enthalpie massique (h) et l'entropie massique (s). En fait, seules deux variables sont indépendantes et suffisent ainsi à spécifier l'état thermodynamique; les autres s'obtiennent par calcul. Si on choisit le couple (T, v) , alors on a :

$$P = P(T, v) ; \quad u = u(T, v) ; \quad h = h(T, v) ; \quad s = s(T, v)$$

Le logiciel s'appuie sur la formulation mathématique de Tillner-Roth et Baehr ⁽³⁾ (formulation standard internationale) qui donne l'énergie massique libre d'Helmholtz étant données les température et volume

$$\Phi = \Phi(T, v)$$

massique :

Les variables thermodynamiques elles-mêmes sont obtenues par combinaisons linéaires des dérivées partielles de Φ par rapport à T et v .

N'importe quel couple de deux variables (à l'exception du couple (T, h)) permet en principe de spécifier de façon univoque l'état thermodynamique. Pour des raisons pratiques, les couples admissibles pour le logiciel ont été regroupés en deux familles : les couples faisant intervenir la température et une autre variable et ceux comprenant la pression et une autre variable. Bien que la formulation mathématique prenne les température et volume massique (T et v) comme paramètres, le logiciel permet, par exemple, la spécification de la pression et du volume massique et établit les grandeurs des autres variables thermodynamiques par calcul (contrairement à d'autres logiciels qui ont en fait mémorisé les tables thermodynamiques). La figure 1 montre la fenêtre de sélection du couple (P, v) et les figures 2 et 3 montrent les fenêtres de saisie de données et de résultats pour l'utilisateur qui veut caractériser les états thermodynamiques spécifiés par : $(P = 250 \text{ kPa} , v = 0.1 \text{ m}^3/\text{kg})$ et $(P = 250 \text{ kPa} , v = 0.05 \text{ m}^3/\text{kg})$ respectivement.

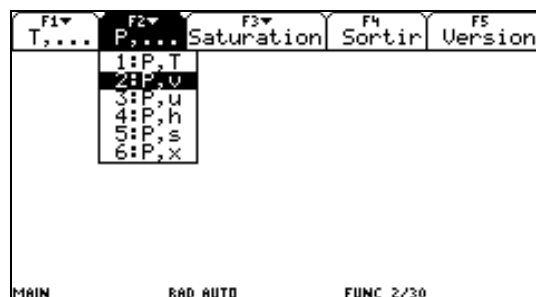


Figure 1 : Fenêtre d'accueil montrant la sélection du couple P - v .

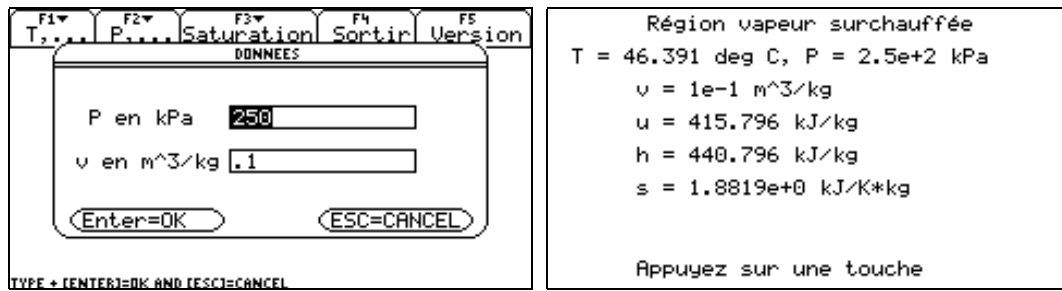


Figure 2 : Fenêtres de saisie de données et de résultats pour $P = 250 \text{ kPa}$ et $v = 0.1 \text{ m}^3/\text{kg}$

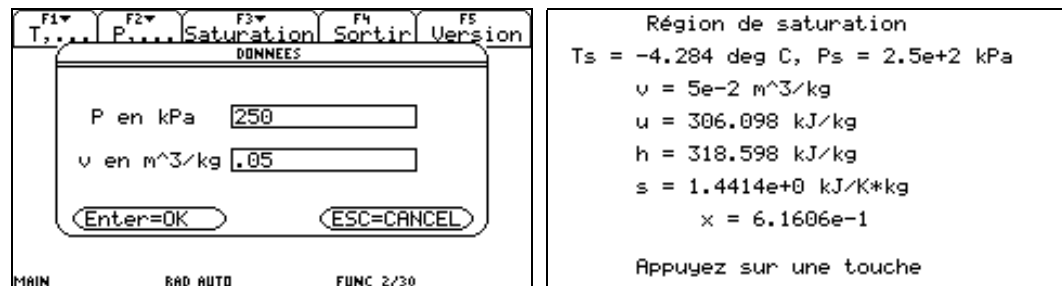


Figure 3 : Fenêtres de saisie de données et de résultats pour $P = 250 \text{ kPa}$ et $v = 0.05 \text{ m}^3/\text{kg}$.

La fonctionnalité « Saturation » retourne les conditions de saturation étant données la température ou la pression.

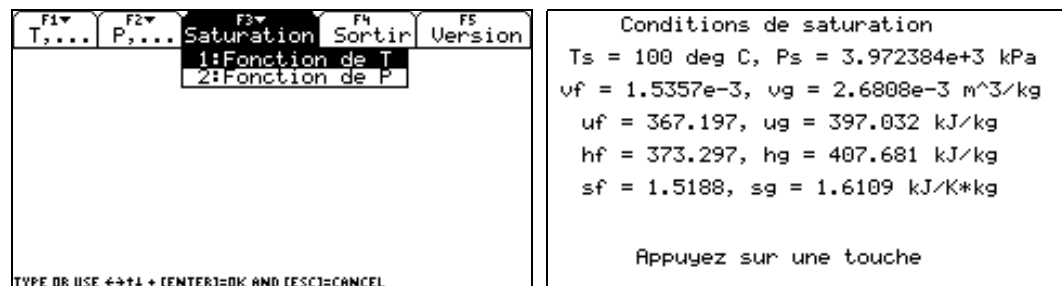


Figure 4 : Fenêtres de sélection et de résultats des conditions de saturation à $T = 100^\circ\text{C}$.

Le logiciel a la capacité de rejeter les données irréalistes ou qui sortent du domaine de validité des formulations mathématiques utilisées. Ainsi, si l'utilisateur entre les données $P = 250 \text{ kPa}$, $v = 0.2 \text{ m}^3/\text{kg}$:

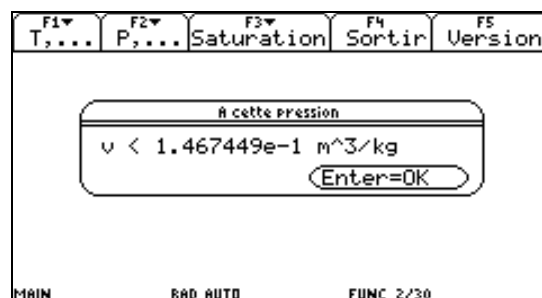


Figure 5 : Message d'erreur indiquant que les données spécifiées sont irréalistes.

Méthode employée pour résoudre des systèmes équations non-linéaires

Puisque les expressions pour les différentes variables prennent T et v comme arguments et qu'elles sont trop complexes pour être inversibles, on est souvent amené à résoudre des équations ou des systèmes d'équations par des méthodes numériques.

Si, par exemple, l'utilisateur entre: $P = 1000 \text{ kPa}$ et $s = 1.8 \text{ kJ/K*kg}$, alors le système d'équations non-linéaires à deux variables:

$$\begin{cases} P(T, v) = 1000 \\ s(T, v) = 1.8 \end{cases}$$

doit être résolu pour T et v permettant de procéder à l'évaluation des variables manquantes (u et h). En 3 ou 4 itérations, le programme établit les solutions du système d'équations de sorte que les critères suivants soient satisfaits :

$$\frac{\Delta P}{P} \text{ et } \frac{\Delta s}{s} < 10^{-6} \%$$

Cette rapidité à établir les solutions est le fait d'un traitement préliminaire efficace et de l'emploi d'une méthode de résolution qui s'est avérée robuste dans le contexte.

Les méthodes les plus souvent citées dans la littérature ne semblaient pas convenir. La méthode du point fixe, pour qu'elle converge, impose des conditions sur la norme des dérivées partielles des expressions; elle se prête donc mal à une utilisation dans le cadre d'une procédure automatisée. La méthode de Newton nécessite l'évaluation des dérivées partielles des expressions à chaque pas d'itération. Les expressions manipulées par le logiciel étant particulièrement complexes, le coût en temps de calcul de l'évaluation des dérivées de celles-ci aurait été prohibitif. La méthode auquel l'auteur a eu recours reprend la méthode de Newton mais remplace l'évaluation des dérivées partielles par celles des différences finies des fonctions selon les deux axes.

Soit le système d'équations :

$$\begin{cases} f(x, y) = 0 \\ g(x, y) = 0 \end{cases}$$

Au début de chaque pas d'itération, on dispose des points 1 et 2 ; les coordonnées du point 2 ont été établies au pas précédent et celles du point 1 au pas antérieur. On cherche les coordonnées du point 3 qui constituera une meilleure approximation de la solution cherchée. On écrit alors:

$$\begin{cases} f(x_3, y_3) = f(x_2, y_2) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_2, y_2) * (x_3 - x_2) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_2, y_2) * (y_3 - y_2) = 0 \\ g(x_3, y_3) = g(x_2, y_2) + \frac{\partial g}{\partial x}(x_2, y_2) * (x_3 - x_2) + \frac{\partial g}{\partial y}(x_2, y_2) * (y_3 - y_2) = 0 \end{cases}$$

Les dérivées partielles de la fonction f en 2 sont évaluées approximativement par :

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_2, y_2) \approx \frac{f(x_2, y_2) - f(x_1, y_2)}{(x_2 - x_1)} = \partial f_x$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x_2, y_2) \approx \frac{f(x_2, y_2) - f(x_2, y_1)}{(y_2 - y_1)} = \partial f_y$$

et de même pour la fonction g . On retrouve alors l'équation matricielle suivante que l'on résout pour x_3 et y_3 :

$$\begin{bmatrix} \partial f_x & \partial f_y \\ \partial g_x & \partial g_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (x_3 - x_2) \\ (y_3 - y_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -f(x_2, y_2) \\ -g(x_2, y_2) \end{bmatrix}$$

Chaque pas d'itération requiert alors quatre évaluations pour les éléments de la matrice 2×2 et suite à la détermination de x_3 et y_3 , l'évaluation de f et g au point 3. Ainsi, six évaluations des fonctions au total sont requises par pas d'itération.

Références

- (1) W. Wagner et al., The IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam, Trans. of the ASME, vol. 122, pp150-182 (2000).
- (2) A. Bordeleau, E. David, Développement d'outils et de simulations thermodynamiques pour le web et la TI-92 Plus, in Journée d'échanges sur les réalisations pédagogiques (École de technologie supérieure), pp.31-35, 2002.
- (3) R. Tillner-Roth, H.D. Baehr, An International Standard Formulation for the Thermodynamic Properties of 1,1,1,2-Tetrafluoroethane (HFC-134a) for Temperatures From 170 K to 455 K and Pressures up to 70 MPa, J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 23, No. 5, 1994.