

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT GENIE CHIMIQUE

BIBLIOTHEQUE - المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

THESE DE MAGISTER

Présentée par: SATOR SALIM

Ingénieur d'Etat

E. N. P.

Sous la direction de: C. E. CHITOUR

Professeur de Raffinage et de Pétrochimie

E. N. P.

THEME

ELABORATION D'EQUATIONS D'ETAT ET
APPLICATION A L'ETUDE DE PETROLES
BRUTS ALGERIENS

Soutenue publiquement devant le jury composé de:

A. AIT KACI
M. H. GUERMOUCHE
R. DERRICHE
A. AIT YOUCEF
F. SOUABI
C. E. CHITOUR

Professeur, U.S.T.H.B.
Professeur, U.S.T.H.B.
Chargée de Cours, E.N.P.
C.R.D. SONATRACH
Maître Assistante, E.N.P.
Professeur, E.N.P.

Président
Examineur
Examinatrice
Examineur
Examinatrice
Rapporteur

Dédicaces



Je dédie ce modeste travail:

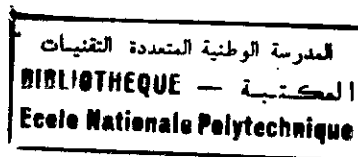
A mes parents, que je ne remercierai jamais assez;

A ma sœur et mes frères pour leurs encouragements;

A tous ceux qui me sont chers.

Salim Sator

Remerciements



Le travail présenté dans cette étude a été réalisé au *Laboratoire de Valorisation des Energies Fossiles* du Département de Génie Chimique de l'Ecole Nationale Polytechnique

Je tiens à remercier particulièrement:

Monsieur le Professeur CHITOUR C. E., Directeur du *Laboratoire de Valorisation des Energies Fossiles* de l'Ecole Nationale Polytechnique, de m'avoir accueilli au sein de son équipe de recherches et de m'avoir apporté, à toutes les étapes de ce travail, une aide et des conseils inestimables. Qu'il soit assuré de ma plus profonde reconnaissance.

Madame SOUABI F., maître assistante à l'Ecole Nationale Polytechnique, dont sa disponibilité à mon égard ne s'est jamais démentie et pour ses encouragements incessants.

Je tiens également à remercier:

Monsieur AIT KACI A., Professeur à l'U.S.T.H.B., qui m'a fait l'honneur de présider le jury de cette thèse;

Monsieur GUERMOUCHE M. H., Professeur à l'U.S.T.H.B.,

Madame DERRICHE R., Chargée de Cours à l'E.N.P.;

Monsieur AIT YUCEF, Centre de Recherche et Développement, SONATRACH, qui ont accepté de m'honorer par leur présence dans le jury.

Je veux exprimer aussi ma gratitude à tous mes camarades du Laboratoire ainsi qu'à ceux du Département de Génie Chimique pour leur aide et leur contact amical. Une attention particulière pour M. M'Raoui A. pour son aide précieuse lors de la mise en forme de ce document.

Mes remerciements vont également à l'ensemble des enseignants du Département de Génie Chimique, pour leur aide précieuse et leurs conseils avisés.

ملخص

هذا العمل يتمثل في إعداد معادلات الحالة قابلة للتطبيق على الهيدروكربونات و تطبيق معادلات الحالة على أنواع البترول الخام الجزائري.

وضع معادلات الحالة تمثّل في استعمال طريقة إسهام مجموعة مع معادلات الحالة مكعبة. الهيدروكربونات المستعملة هي الألكينات، الألكيلسيكلوهيكزانات، و الألكيلبنزينات و التي عدد نواة الكربون فيها متراوح بين 6 و 30. قيم المعادلات يتعلق بعدد نواة الكربون. من جهة أخرى، هذا العمل تضمن إعداد معادلات الحالة جديدة مزدوجة لقانون الحالات المتطابقة و القابلة للتطبيق على الهيدروكربونات ذات الطبيعة الكيميائية المختلفة.

استعمال معادلات الحالة كنماذج ديناميكا حرارية أمكننا من دراسة تصرف خمسة أنواع من بترول خام جزائري إنطلاقا من معلومات أساسية متحصل عليها عن طريق تقطير T.B.P. هذه الخامات. حددت منحنيات القطرات و الندى إلى جانب منحنيات ذات القيمة الثابتة.

Résumé

Ce travail consiste en l'élaboration de nouvelles équations d'état applicables aux hydrocarbures et l'application des équations d'état aux pétroles bruts algériens.

L'élaboration de nouvelles équations d'état a porté sur le couplage de la méthode de contribution de groupe aux équations d'état cubiques. Les hydrocarbures considérés sont les n-paraffines, les alkylcyclohexanes et les alkylbenzènes de nombre d'atomes de carbone compris entre 6 et 30. Les paramètres des équations établies ne sont fonction que du nombre d'atomes de carbones. D'autre part, le présent travail a porté sur l'élaboration de nouvelles équations d'état couplées à la loi des états correspondants applicables aux hydrocarbures de différentes natures chimiques.

L'utilisation des équations d'état comme modèles thermodynamiques a permis d'étudier le comportement de cinq pétroles bruts algériens à partir des données de base obtenues lors de la distillation T.B.P. de ces bruts. Les courbes de bulles et de rosées ont été déterminées, ainsi que les courbes iso-titres.

Abstract

This work consists of the elaboration news equations of state for hydrocarbons, and their application to the algerian crude oils.

The elaboration of the new equations of state has been carried out on the coupling of group contribution method to the cubic equations of state. The hydrocarbons considered are the n-paraffins, the alkylcyclohexanes and the alkylbenzenes having between 6 and 30 carbon atoms. The parameters hich have been developed are only function of the number of carbon atoms. On other hand, this work has looked upon the establishment of new equation of state coupled to the corresponding state laws which can be applied to hydrocarbons of different chemical nature.

The use of equation of state as thermodynamic models has allowed the studies of the behavior of five algerian crude oils from the data obtained from the T.B.P. distillation of these products. The bubble and the dew curves have been determined, as well as the iso-titles curves.

Table des matières



1. Notions élémentaires de thermodynamique	2
1.1 Système macroscopique	2
1.2 Principe zéro	2
1.3 Premier principe	2
1.4 Deuxième principe ou principe de Carnot	3
1.5 Troisième principe	3
1.6 Thermodynamique statistique	3
1.7 Les fonctions thermodynamiques	5
1.8 Les relations de Maxwell	6
1.9 Fonctions thermodynamiques des systèmes homogènes fermés	6
1.10 Fonctions thermodynamiques des systèmes hétérogènes fermés	7
1.10.1 Dépendance des fonctions thermodynamiques vis-à-vis de la composition	7
1.10.2 Mélange de gaz parfaits	8
1.10.3 Fugacité d'un constituant du système	9
1.10.4 Conditions d'équilibre thermodynamique des phases	9
1.10.4.1 Conditions thermodynamiques d'équilibre liquide-vapeur	10
2. Les équations d'état	12
2.1 Equation d'état du gaz parfait	12
2.2 Equations d'état des fluides réels	13
2.3 Les équations d'état cubiques	14
2.3.1 Equation d'état de Redlich-Kwong	15
2.3.2 Equation d'état de Soave-Redlich-Kwong	16
2.3.3 Equation d'état de Peng-Robinson	17
2.3.4 Equation d'état d'Harmens-Knapp	17
2.3.5 Equation d'état de Soave-Van der Waals	19
2.3.6 Equation d'état de Peng-Robinson-Stryjek-Vera	19
2.3.7 Equation d'état de Sheng-Lu	20
2.3.8 Equations d'état SRK et PR généralisées.	21
2.4 Equations d'état non-cubiques	21
2.4.1 Equation d'état du viriel	21
2.4.2 Equation d'état de Benedict-Webb-Rubin	22
2.4.3 Equation d'état de Lee-Kesler	23
2.4.4 Equation d'état Hard-Chain	24
2.4.5 Equations d'état quartique généralisée de Shah-Lin-Bienkowski-Cochran	25
2.5 Méthode d'élaboration d'une équation d'état cubique	27
2.5.1 Détermination des valeurs des paramètres a et b au point critique	27
2.5.2 Détermination de la dépendance en température du paramètre a des équations d'état cubiques	28
3. Les règles de mélanges appliquées aux équations d'état cubiques	30
3.1 Règle de mélange conventionnelle	30

3.2 Règle de mélange de Huron-Vidal	32
3.3 Règle de mélange de Panagiotopoulos-Reid	33
3.4 Estimation des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques	33
4. Méthodes de caractérisation des fractions pétrolières en vue de leur appliquer une équation d'état cubique	35
4.1 Méthode de caractérisation d'Edmister	35
4.2 Méthode de caractérisation de Pedersen, Thomassen et Fredenslund	36
4.3 Méthode de caractérisation de Whitson	37
5. Méthodes de calcul de propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques	38
5.1 Calcul du facteur de compressibilité	38
5.2 Calcul des propriétés thermodynamiques	39
6. Méthodes de calcul des équilibres liquide-vapeur par les équations d'état cubiques	41
6.1 Calcul du coefficient d'équilibre par les équations d'état	41
6.2 Définition des différentes propriétés d'un équilibre liquide-vapeur	42
6.2.1 Point de bulle	42
6.2.2 Point de rosée	42
6.2.3 Flash isotherme	43
6.3 Méthodes numériques de calcul des équilibre liquide-vapeur	43
6.3.1 Calcul du flash isotherme	44
6.3.1.1 Généralités sur le calcul du flash isotherme	44
6.3.1.2 Méthode de Rachford-Rice de calcul du flash isotherme	44
6.3.2 Calcul de la pression de bulle et de la pression de rosée	45
7. Equations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe	48
7.1 Equations d'état cubiques à sept paramètres	48
7.1.1 Elaboration des équations d'état cubiques à sept paramètres	48
7.1.2 Application des équations d'état cubiques à sept paramètres	49
7.2 Equations d'état cubiques à quatre paramètres	50
7.2.1 Elaboration des équations d'état cubiques à quatre paramètres	50
7.2.2 Application des équations d'état à quatre paramètres	55
7.2.2.1 Application des équations d'état SRKCG2 et PRCG2 au calcul de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition	55
7.2.2.2 Application des équations d'état SRKCG2 et PRCG2 au calcul de la tension de vapeur	61
7.3 Equations d'état Soave-Redlich-Kwong-Méthode-de-Contribution-de-groupe	63
7.3.1 Elaboration de l'équation d'état de Redlich-Kwong-Méthode-de-Contribution-de-Groupe	63
7.3.2 Application de l'équation d'état SRKCG3 au calcul de la tension de vapeur	66
7.4 Equation d'état Peng-Robinson-Méthode-de-Contribution-de-groupe	68
7.4.1 Application de l'équation d'état PRCG3 au calcul de la tension de vapeur	70
7.5 Conclusion	72
8. Equations d'état couplées à la loi des états correspondants	73
8.1 Elaboration des équations d'état généralisées	74
8.1.1 Elaboration de l'équation d'état Redlich-Kwong-Généralisée	74

8.1.2	Elaboration de l'équation d'état Peng-Robinson-Généralisée	77
8.1.3	Elaboration de l'équation d'état Van der Waals-Généralisée	79
8.2	Application des équations d'état généralisées au calcul de la tension de vapeur des hydrocarbures	80
8.3	Application des équations d'état généralisées au calcul des propriétés thermodynamiques	83
8.4	Conclusion	85
9.	<i>Application des nouvelles équations d'état cubiques aux mélanges et aux fractions pétrolières</i>	90
9.1	Application des équations d'état cubiques aux mélanges	90
9.1.1	Etude du mélange Méthane-n-Butane	90
9.1.2	Etude du mélange Méthane-n-Décane	99
9.1.3	Etude d'un mélange multicomposant	100
9.2	Application des équations d'état aux fractions pétrolières	102
9.3	Conclusion	104
10.	<i>Application des équations d'état cubiques à des pétroles bruts algériens</i>	105
10.1	Présentation des pétroles bruts étudiés	105
10.2	Caractérisation des pétroles bruts étudiés	108
10.3	Génération de la courbe de phase enveloppe	112
10.4	Conclusion	125
	<i>Conclusion générale.</i>	126
	<i>Bibliographie</i>	128
	<i>Référence par auteur</i>	130
	<i>Annexes</i>	

Table des illustrations

Figures

Figure 6.1 - Courbe de phase enveloppe	42
Figure 7.1 - Paramètre F_1 calculé en fonction du paramètre F_1 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures	53
Figure 7.2 - Paramètre F_2 calculé en fonction du paramètre F_2 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures	53
Figure 7.3 - Paramètre F_3 calculé en fonction du paramètre F_3 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures	54
Figure 7.4 - Paramètre F_4 calculé en fonction du paramètre F_4 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures	54
Figure 7.5 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alcanes. Comparaison entre les équations SRK et SRKCG2.	58
Figure 7.6 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alcanes. Comparaison entre les équations PR et PRCG2.	58
Figure 7.7 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylcyclohexanes. Comparaison entre les équations SRK et SRKCG2.	59
Figure 7.8 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylcyclohexanes. Comparaison entre les équations PR et PRCG2.	59
Figure 7.9 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylbenzènes. Comparaison entre les équations SRK et SRKCG2.	60
Figure 7.10 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylbenzènes. Comparaison entre les équations PR et PRCG2.	60
Figure 7.11 - Variation du paramètre m avec la température réduite pour quelques hydrocarbures.	64
Figure 7.12 - Ecart relatif obtenu pour quelques hydrocarbures lors du calcul de la tension de vapeur par l'équation SRKCG3	68
Figure 7.13 - Ecart relatif obtenu pour quelques hydrocarbures lors du calcul de la tension de vapeur par l'équation SRK	68
Figure 8.1 - Variation de α de l'équation de Redlich-Kwong en fonction du facteur acentrique.	75
Figure 8.2 - Variation de $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ en fonction de la température réduite.	76
Figure 8.3 - Variation de α de l'équation de Peng-Robinson en fonction du facteur acentrique	78
Figure 8.4 - Variation de α de l'équation de Van der Waals en fonction du facteur acentrique.	80
Figure 10.1 - Courbe de distillation TBP du pétrole brut d'Ohanet	106
Figure 10.2 - Courbe TBP du pétrole brut PB 31	106
Figure 10.3 - Courbe TBP du pétrole brut de Guellala	107
Figure 10.4 - Courbe de distillation TBP du pétrole brut HRS 162	107
Figure 10.5 - Courbe de distillation TBP du pétrole brut de Mereksen	107
Figure 10.6 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état SRK	118
Figure 10.7 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état PR	118
Figure 10.8 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état SRKCG2	118
Figure 10.9 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état PRCG2	118
Figure 10.10 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état SRK	119
Figure 10.11 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état PR	119
Figure 10.12 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état SRKCG2	119
Figure 10.13 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état PRCG2	119
Figure 10.14 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Mereksen par l'équation d'état SRK	120
Figure 10.15 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Mereksen par l'équation d'état PR	120
Figure 10.16 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Mereksen par l'équation d'état SRKCG2	120
Figure 10.17 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Mereksen par l'équation d'état PRCG2	120
Figure 10.18 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état SRK	121
Figure 10.19 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état PR	121
Figure 10.20 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état SRKCG2	121
Figure 10.21 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état PRCG2	121
Figure 10.22 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état SRK	122
Figure 10.23 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état PR	122

Figure 10.24 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état SRKCG2	122
Figure 10.25 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état PRCG2	122
Figure 10.26 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut de Guellala	123
Figure 10.27 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut HRS 162	123
Figure 10.28 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut de Mereksen	123
Figure 10.29 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut d'Ohanet	123
Figure 10.30 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut PB31	123
Figure 10.31 - Courbes de bulle des différents pétroles brut par l'équation d'état PR	124
Figure 10.32 - Courbes de rosée des différents pétroles brut par l'équation d'état PR	125

Tableaux

Tableau 2.1 - Paramètres de l'équation de Lee-Kesler	24
Tableau 2.2 - Constantes de l'équation d'état quartique généralisée	26
Tableau 6.1 - Les différents types de calculs d'équilibre.	43
Tableau 7.1 - Paramètres de l'équation (7.8) pour les n-alcane.	49
Tableau 7.2: Paramètres de l'équation (7.8) pour les alkylcyclohexanes.	49
Tableau 7.3: Paramètres de l'équation (7.8) pour les alkylbenzènes.	49
Tableau 7.4 - Comparaison entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales de la chaleur latente de vaporisation à 298 K (kJ/mol).	50
Tableau 7.5 - Influence du degré du polynôme sur la SCE dans le cas du paramètre F_1 des n-alkylcyclohexanes	51
Tableau 7.6 - Paramètres de l'équation (7.13) pour les n-alcane.	52
Tableau 7.7 - Paramètres de l'équation (7.13) pour les n-alkylbenzènes.	52
Tableau 7.8 - Paramètres de l'équation (7.13) pour les n-alkylcyclohexanes.	52
Tableau 7.9 - Ecart absolu en pour-cent obtenus lors du calcul des quatre paramètres pour les trois familles d'hydrocarbures	56
Tableau 7.10 - Calcul de l'enthalpie de vaporisation des corps purs à la température d'ébullition par les équations SRKCG2 et PRCG2	57
Tableau 7.11 - Ecart moyen absolu obtenus lors du calcul de la tension de vapeur pour les équations SRKCG2 et PRCG2	62
Tableau 7.12 - Valeurs des paramètres m_0, m_1, m_2, m_3 et m_4 de l'équation SRKCG3 pour quelques hydrocarbures.	64
Tableau 7.13 - Coefficients des paramètres m_0, m_1, m_2, m_3 et m_4 pour les cinq familles d'hydrocarbures pour l'équation SRKCG3	65
Tableau 7.14 - Ecart absolu moyen en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Redlich-Kwong	67
Tableau 7.15 - Ecart absolu moyen pour des températures réduites supérieures à 0.7 pour quelques hydrocarbures	68
Tableau 7.16 - Valeurs des paramètres m_0, m_1, m_2, m_3 et m_4 de l'équation PRCG3 pour quelques hydrocarbures.	69
Tableau 7.17 - Coefficients des paramètres m_0, m_1, m_2, m_3 et m_4 pour les cinq familles d'hydrocarbures pour l'équation PRCG3	70
Tableau 7.18 - Ecart absolu moyen en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Peng-Robinson	71
Tableau 7.19 - Comparaison entre les différentes équations d'état cubiques lors du calcul de la tension de vapeur par l'équation de Wagner	71
Tableau 8.1 - Variation de la fonction alpha de l'équation d'état de Redlich-Kwong en fonction de la température et du facteur acentrique	75
Tableau 8.2 - Valeurs des fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ dans le cas de l'équation de Redlich-Kwong	76
Tableau 8.3 - Variation de la fonction alpha de l'équation d'état de Peng-Robinson en fonction de la température et du facteur acentrique	77

Tableau 8.4 - Variation de la fonction alpha de l'équation d'état de Van der Waals en fonction de la température et du facteur acentrique	79
Tableau 8.5 - Ecart moyens en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Redlich-Kwong.	81
Tableau 8.6 - Ecart absolus moyens en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Peng-Robinson.	81
Tableau 8.7 - Ecart absolus moyens en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Van der Waals.	81
Tableau 8.8 - Ecart absolus moyens observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition par les équations d'état de type Redlich-Kwong	83
Tableau 8.9 - Ecart absolus moyens observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à 298 K par les équations d'état de type Redlich-Kwong	83
Tableau 8.10 - Ecart absolus moyens observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition par les équations d'état de type Peng-Robinson	84
Tableau 8.11 - Ecart absolus moyens observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à 298 K par les équations d'état de type Peng-Robinson	84
Tableau 8.12 - Ecart absolus moyens observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition par les équations d'état de type Van der Waals	84
Tableau 8.13 - Ecart absolus moyens observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à 298 K par les équations d'état de type Van der Waals	85
Tableau 8.14 - Comparaison entre les équations d'état de type Redlich-Kwong lors du calcul des propriétés thermodynamiques à la saturation	87
Tableau 8.15 - Comparaison entre les équations d'état de type Peng-Robinson lors du calcul des propriétés thermodynamiques à la saturation	88
Tableau 8.16 - Comparaison entre les équations d'état de type Van der Waals lors du calcul des propriétés thermodynamiques à la saturation	89
Tableau 9.1 - Pression de bulle du mélange Méthane-n-Butane	90
Tableau 9.2 - Coefficients d'interactions binaires optimaux du mélange Méthane-n-Butane pour les équations d'état SRK, PR, RKG et PRG.	91
Tableau 9.3 - Ecart absolus en pour-cent par rapport à la pression de bulle du mélange méthane-n-butane des équations d'état SRK, PR, RKG et PRG	93
Tableau 9.4 - Facteur de compressibilité du mélange méthane-n-Butane à la température de 294.26 K	94
Tableau 9.5 - Facteur de compressibilité du mélange méthane-n-Butane à la température de 394.26 K	94
Tableau 9.6 - Ecart absolus en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 294.26 K des équations d'état SRK et RKG	95
Tableau 9.7 - Ecart absolus en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 294.26 K des équations d'état PR et PRG	96
Tableau 9.8 - Ecart absolus en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 394.26 K des équations d'état SRK et RKG	97
Tableau 9.9 - Ecart absolus en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 394.26 K des équations d'état PR et PRG	98
Tableau 9.10 - Pression de bulle du mélange Méthane-n-Décane	99
Tableau 9.11 - Coefficients d'interactions binaires optimaux du mélange Méthane-n-Décane pour les équations d'état SRK, PR, RKG et PRG.	99
Tableau 9.12 - Ecart absolus en pour-cent par rapport à la pression de bulle du mélange méthane-n-décane des équations d'état SRK, PR, RKG et PRG	100
Tableau 9.13 - Composition du mélange en équilibre d'un gaz avec une huile d'absorption	101
Tableau 9.14 - Coefficients d'interactions binaires des composés du mélange étudié	101
Tableau 9.15 - Comparaison entre les constantes d'équilibre liquide-vapeur calculées par les différentes équations d'état	102
Tableau 9.16 - Caractéristiques des pseudocomposés de la fraction pétrolière étudiée	103
Tableau 9.17 - Propriétés physiques des pseudocomposés	103
Tableau 9.18 - Constantes d'équilibre et taux de vaporisation de la fraction pétrolière d'Indonésie	104
Tableau 10.1 - Caractéristiques physico-chimiques du pétrole brut de Mereksen	105
Tableau 10.2 - Caractéristiques physico-chimiques du pétrole brut de Guellala	105

Notations principales

a	paramètre d'attraction des équations d'état cubiques;
A	$=aP/(RT)^2$;
b	covolume des équations d'état cubiques;
B	$=bP/(RT)$;
f	fugacité;
F_1, F_2, \dots, F_7	paramètres des équations d'état cubiques SRKCG1, PRCG1, SRKCG2 et PRCG2;
G	énergie libre de Gibbs;
H	enthalpie;
K	constante d'équilibre;
k	constante de Boltzmann;
k_{ij}	coefficient d'interaction binaire;
m	terme correctif des équations d'état cubiques;
m_i	fraction massique du composé i;
m_1, m_2, \dots, m_4	paramètres des équations d'état cubiques SRKCG3 et PRCG3;
n	nombre de moles;
N	nombre d'atomes de carbone;
N_A	nombre d'Avogadro;
P	pression;
Q	fonction objectif (équation 3.7);
R	constante des gaz parfaits;
S	entropie;
T	température;
u	constante spécifique à chaque équation d'état cubiques;
U	énergie interne;
V	volume molaire;
V/F	taux de vaporisation;
w	constante spécifique à chaque équation d'état cubiques;
W	travail;
x_i	fraction molaire du composé i en phase liquide;
y_i	fraction molaire du composé i en phase vapeur;
\mathbf{x}	vecteur composition en phase liquide;
\mathbf{y}	vecteur composition en phase vapeur;
z_i	fraction molaire du composé i dans l'alimentation;
\mathbf{z}	vecteur composition de l'alimentation;
Z	facteur de compressibilité;

Indice

c	critique;
i	composé i.
ij	binaire i-j;
m	mélange;
r	réduit;
0	référence;

Exposant

*	état de gaz parfait;
v	vapeur;
l	liquide;
(0)	fluide de référence;
(1)	fluide réel;

Symbole grec

α	fonction de réajustement des équations d'état.
ϕ	coefficient de fugacité;
ω	facteur acentrique de PITZER;
μ	potentiel chimique;

Introduction

Dans l'industrie du raffinage, la connaissance des propriétés thermodynamiques des pétroles et des fractions pétrolières est primordiale pour la mise en œuvre des procédés de séparation ou de transformation moléculaire. Les données expérimentales - des propriétés thermodynamiques - propres à chaque procédé sont rarement disponibles. Il existe différentes méthodes d'estimation de ces propriétés telles que la méthode de contribution de groupe ou les corrélations empiriques, toutefois, on peut aussi y parvenir en faisant appel aux équations d'état.

L'utilisation d'une équation d'état pour reproduire les propriétés thermodynamiques des fluides réels (corps purs ou mélanges), fait l'objet de recherches par les thermodynamiciens depuis plus d'un siècle. En effet, depuis que Van der Waals a proposé la première équation d'état applicable aux fluides réels, un nombre important de travaux a été entrepris dans ce domaine. Avec le développement de l'outil informatique, de nouvelles équations d'état ont vu le jour, permettant la prédiction des propriétés thermodynamiques avec une précision acceptable, mais surtout constituant des modèles thermodynamiques utilisés avec succès dans le domaine du génie chimique, de l'ingénierie pétrolière et du raffinage.

Lors de cette étude, nous nous sommes intéressés à une famille d'équation d'état: les équations d'état cubiques. Ce type d'équations découle de l'équation de Van der Waals.

En premier, nous avons associé les équations d'état cubiques à la méthode de contribution de groupe. Nous avons exprimé les paramètres des équations de Soave-Redlich-Kwong et de Peng-Robinson en fonction du nombre d'atomes de carbone. Cette démarche a été établie pour l'application des équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe aux fractions pétrolières.

Par la suite, nous avons établi une nouvelle forme pour le paramètre α des équations de Van der Waals, de Redlich-Kwong et de Peng-Robinson en nous basant sur la loi des états correspondants.

Enfin, nous avons étudié le comportement PVT de pétroles bruts algériens afin de déterminer les équilibres de phases et le calcul des propriétés thermodynamiques. Un programme informatique a été développé pour le calcul des équilibres de phases et des propriétés thermodynamiques des fractions pétrolières.

PARTIE THEORIQUE

1. Notions élémentaires de thermodynamique

La thermodynamique est une science qui s'intéresse aux transformations de la matière et de l'énergie des systèmes macroscopiques. Les concepts de la thermodynamique sont d'une importance fondamentale en physique, en chimie et pour l'industrie. Dans ce contexte, nous allons aborder quelques notions élémentaires de thermodynamique.

1.1 Système macroscopique

Un système macroscopique est une petite portion de l'univers, qui est à l'échelle humaine (par opposition au domaine microscopique) et qui délimite un volume fini. L'état d'un système macroscopique peut être caractérisé par des grandeurs physiques mesurables, telles que la température, la pression ou le volume appelés variables d'état. Ces trois grandeurs ne sont généralement pas suffisantes pour caractériser entièrement un système, et donc, on les associe souvent à d'autres grandeurs physiques telles que la densité, la capacité calorifique, la compressibilité ou encore le coefficient de dilatation thermique.

Un système macroscopique peut être le siège de transformations thermodynamiques, le faisant passer d'un état d'équilibre à un autre. Nous distinguerons, dans ce cas, les transformations réversibles (le système peut évoluer en sens inverse) des transformations irréversibles. Toutes ces transformations sont régies par les quatre principes fondamentaux de la thermodynamique que nous allons aborder.

1.2 Principe zéro

Il s'énonce ainsi: «deux systèmes en équilibre thermique avec un troisième sont en équilibre thermique entre eux». Même si le concept dégagé de ce principe paraît évident, le principe zéro de la thermodynamique permet de dégager la notion d'égalité de la température pour les trois systèmes évoqués. Ainsi, la température est une notion empirique découlant du principe zéro de la thermodynamique (Borel, 1984).

1.3 Premier principe

D'après le premier principe de la thermodynamique, la variation d'énergie d'un système est égale à la somme des quantités de chaleur et de travail - du système - échangées avec le milieu extérieur. Ceci se traduit par l'expression générale suivante:

$$Q = U_2 - U_1 + W \quad (1.1)$$

La quantité $U_2 - U_1$ correspond à l'accroissement d'énergie interne U du système entre l'état initial 1 et l'état final 2. La quantité Q est la chaleur reçue par le système, et W est le travail fourni au milieu extérieur.

Il est souvent commode de disposer de la forme différentielle du premier principe de la thermodynamique en vue de son application aux transformations infinitésimales réversibles. On écrit dans ce cas:

$$dQ = dU + dW \quad (1.2)$$

où dQ désigne la quantité de chaleur élémentaire reçue par le système pendant le temps dt , et dW le travail correspondant fourni au milieu extérieur.

Il faut cependant souligner que, dans cette formulation, seule la quantité dU représente une différentielle exacte des variables décrivant l'état du système.

On constate que ce principe donne une définition précise de la chaleur. Lorsqu'un corps chaud est mis au contact d'un autre plus froid, on assiste à l'égalisation des températures de chaque corps. Pour expliquer ce phénomène, les scientifiques du XVIII^e siècle supposèrent l'existence d'un fluide appelé «calorique», présent en plus grande quantité dans le corps chaud, qui se serait écoulé dans le corps froid. Cette théorie fut abandonnée après 1824. En fait, il s'agit d'un transfert d'une forme d'énergie, appelée chaleur, qui peut être emmagasinée ou convertie en travail mécanique. Mesurée à l'origine en calories (symbole Cal), la chaleur s'exprime aujourd'hui en joules (symbole J), puisque c'est une forme d'énergie. On a : $1 \text{ Cal} = 4,186 \text{ J}$. L'énergie U se présente comme une fonction d'état, et le premier principe de la thermodynamique exprime dans sa généralité une propriété de conservation de cette énergie, car, pour un système isolé du monde extérieur, on a $Q = 0$ et $W = 0$, ce qui entraîne $U_1 = U_2$. Ce premier principe formule donc la conservation de l'énergie.

1.4 Deuxième principe ou principe de Carnot

Le second principe de la thermodynamique trouve son origine dans le célèbre mémoire de Carnot intitulé *Réflexions sur la puissance motrice du feu et sur les machines propres à développer cette puissance*, publié à Paris en 1824. Partant de ces travaux, Clausius en a déduit en 1850, une formulation mathématique du second principe. Il montre que pour l'ensemble des processus réversibles, la température T est un diviseur intégrant de dQ et que, par conséquent, on peut écrire, pour un système fermé à température uniforme, une égalité du type suivant:

$$\frac{dQ}{T} = dS \quad (1.3)$$

où S désigne une fonction d'état appelée entropie (en grec, évolution), qui représente la distance qui sépare un système de son état d'équilibre. On peut aussi considérer l'entropie comme une mesure du désordre à l'échelle moléculaire du système. Le deuxième principe énonce que l'entropie d'un système isolé ne peut que croître. En conséquence, un système a atteint son état d'équilibre lorsque son entropie est maximale. La nature semble donc «préférer» le désordre à l'ordre.

1.5 Troisième principe

Le principe zéro fournit une échelle relative de températures. Grâce au deuxième principe, on démontre l'existence d'une échelle absolue de températures, qui possède par conséquent un zéro absolu. L'entropie n'étant définie qu'à une constante près, il est nécessaire de définir un état thermodynamique où l'entropie possédera une valeur absolue. Le troisième principe stipule que: "l'entropie d'un corps pur cristallin est égale à zéro pour tous les corps au zéro absolu de température". A partir de cet énoncé, on déterminera par un calcul direct l'entropie du solide, du liquide et/ou du gaz à partir des mesures calorimétriques des chaleurs massiques des solides, des liquides et/ou des gaz, ainsi que les chaleurs de changement de phase (fusion et évaporation).

Carnot, Nicolas Léonard Sadi (1796-1832), physicien et ingénieur militaire français, considéré comme le créateur de la thermodynamique. En 1824, il décrit sa conception du moteur à chaleur idéal, appelé par la suite moteur Carnot, dans lequel toute l'énergie disponible est utilisée. Il découvrit que la chaleur ne pouvait passer d'un corps froid à un corps plus chaud, et que le rendement d'un moteur dépendait de la quantité de chaleur qu'il était capable d'utiliser. Cette découverte, ou cycle de Carnot, est à la base de la seconde loi de la thermodynamique.

Clausius, Rudolf Julius Emanuel, l'un des plus grands physiciens du XIX^e siècle, est connu principalement pour sa contribution à l'étude de la thermodynamique. Le premier, ce savant allemand formula ce qu'on a coutume d'appeler le deuxième principe et proposa une définition claire de l'entropie. Il est aussi l'un des principaux créateurs de la théorie cinétique des gaz.

1.6. Thermodynamique statistique

La découverte de la structure moléculaire de la matière a permis d'expliquer la thermodynamique d'un point de vue microscopique. Une mole de substance quelconque peut être considérée comme un assemblage de molécules identiques, de l'ordre de 10^{24} (*nombre d'Avogadro*), chacune ayant un mouvement propre auquel on peut affecter des variables mécaniques, comme la vitesse ou la quantité de mouvement. Il devrait donc être possible, du moins en théorie, de déduire les propriétés générales d'un système en résolvant les équations du mouvement des molécules. Vue sous cet angle, la thermodynamique pourrait être considérée comme une simple application des lois de la mécanique à l'échelle microscopique.

La physique statistique a été développée au XIX^e siècle, spécialement par les physiciens britannique et autrichien *Maxwell* et *Boltzmann*. La matière est composée d'innombrables particules infiniment petites (atomes et molécules) qui sont en mouvement permanent. Une analyse des mouvements des particules fondée sur le fait que chacune d'entre elles obéit aux lois de la mécanique de *Newton* est impossible parce que chaque échantillon de la matière contient un nombre considérable de particules. *Maxwell* et *Boltzmann* introduisirent des procédés statistiques afin d'établir la moyenne des paramètres de la dynamique microscopique des différentes particules et obtenir leurs caractéristiques (sur grande échelle) thermodynamiques et macroscopiques.

La probabilité de présence d'une molécule à une vitesse v résultante des vitesses v_x , v_y et v_z dans les trois directions de l'espace (x , y , z) est égale à $f(v^2)$. La statistique de Maxwell-Boltzmann exprime cette probabilité selon:

$$f(v^2) = f(v_x^2, v_y^2, v_z^2) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\xi}{kT}\right) \quad (1.4)$$

k constante de Boltzmann, $k = 1,380 \cdot 10^{-23}$ J/K;

m masse de la molécule (kg);

n nombre de moles, $n = N_A/V$;

N_A nombre d'Avogadro;

T température (K).

V volume (m^3);

ξ énergie cinétique moyenne, $\xi = mv^2/2$ (J).

Par ces calculs, on retrouve les grandeurs thermodynamiques macroscopiques du système. Le traitement statistique de la mécanique moléculaire est appelé mécanique statistique.

D'un point de vue statistique, la température d'un système représente une mesure de l'énergie cinétique moyenne de ses molécules. L'augmentation de température correspond à l'augmentation de l'activité moléculaire. La somme de l'énergie cinétique des molécules et de l'énergie potentielle issue de l'interaction intermoléculaire représente l'énergie interne du système. Lorsque deux systèmes sont en contact, l'énergie passe d'une molécule à l'autre par collision entre molécules. Le transfert d'énergie se poursuit jusqu'à ce que l'uniformité statistique soit atteinte, ce qui se traduit par l'équilibre thermique (égalité des températures). Dans le premier principe de la thermodynamique, on retrouve la loi bien connue de la mécanique: la conservation de l'énergie. De même, le concept d'entropie se traduit par le désordre à l'échelle

Avogadro, Amedeo Di Quaregna E Ceretto, comte (1776-1856), physicien et chimiste italien qui proposa une hypothèse connue plus tard sous le nom de la loi d'Avogadro.

La loi d'Avogadro affirme que deux volumes identiques de gaz, dans les mêmes conditions de température et de pression, contiennent le même nombre de molécules. Cette loi ne fut reconnue universellement que dans les années 1850.

Maxwell, James Clerk (1831-1879), physicien écossais, grand théoricien, connu entre autres pour avoir établi les équations de l'électromagnétisme. Ces contributions en firent l'un des hommes scientifiques les plus importants du XIX^e siècle. Maxwell développa également la théorie cinétique des gaz, qui explique les propriétés physiques et la nature d'un gaz.

Boltzmann, Ludwig (1844-1906), physicien autrichien qui contribua à établir les bases de la mécanique statistique. Développant la théorie cinétique des gaz, notamment à partir des travaux de Maxwell. Calculant le nombre de particules dotées d'une énergie donnée, il établit la statistique dite de Maxwell-Boltzmann.

Newton, sir Isaac (1642-1727), mathématicien et physicien anglais, considéré comme l'un des plus grands scientifiques de l'Histoire. Il laissa d'importantes contributions à de nombreuses branches de la science (mathématiques, optique mécanique, et astronomie).

moléculaire. En supposant que toutes les combinaisons de mouvement moléculaire sont équiprobables, la thermodynamique montre que plus un système isolé est désordonné, plus il y a de combinaisons susceptibles de parvenir à cet état. L'entropie S d'un système s'exprime en fonction de la probabilité W (de l'allemand *Wahrscheinlichkeit*) de son état: $S = k \times \log W$ (équation de Boltzmann, où k est la constante de Boltzmann). La probabilité de l'état le plus désordonné est donc beaucoup plus importante que celle de n'importe quel autre état. Cette probabilité est la base statistique des définitions de l'état d'équilibre et de l'entropie.

1.7 Les fonctions thermodynamiques

Si le concept d'énergie interne, dérivé d'une propriété essentiellement quantitative de conservation, a été facilement accueilli comme une notion première et rapidement vulgarisée, il n'en a pas été de même pour celui d'entropie jugé souvent obscur en raison de son contenu plus qualitatif, de désordre, de désorganisation et d'irréversibilité. Par conséquent, trois nouvelles fonctions thermodynamiques ont été proposées, afin de décrire le système (Edmister et Lee, 1984). Par définition:

Enthalpie $H = U + PV$ (1.5)

Energie libre de Helmholtz $A = U - TS$ (1.6)

Energie libre de Gibbs $G = H - TS$ (1.7)

L'introduction de ces trois fonctions d'état peut être considérée comme un simple changement de variables. On objectera que cette manière de voir est purement mathématique et formelle. L'enthalpie elle-même peut être considérée comme une grandeur de calcul qui ne soulève aucune difficulté de compréhension (Borel, 1984). L'énergie libre de Gibbs, est une fonction thermodynamique, le plus souvent utilisée pour évaluer l'équilibre physique et/ou chimique du système. L'énergie libre de Helmholtz n'a pas connu une application pratique aussi large que l'énergie libre de Gibbs, mais, permet de lier les fonctions thermodynamiques entre elles.

Il est souvent plus commode d'exprimer les fonctions thermodynamiques sous forme différentielle.

Energie interne $dU = TdS - PdV$ (1.8)

Enthalpie $dH = dU + VdP + PdV$ (1.9)

Energie libre d'Helmholtz $dA = -SdT - PdV$ (1.10)

Energie libre de Gibbs $dG = -SdT + VdP$ (1.11)

Dans ce cas, toute variation des fonctions d'état U, H, A et/ou G , entre deux états, peut être obtenue en intégrant les équations (1.8), (1.9), (1.10) et/ou (1.11).

L'étude des transformations qui s'effectuent à volume V constant, appelées *isochores* ($dV = 0$), permet d'introduire la notion de capacité calorifique à volume constant sous la forme:

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (1.12)$$

Lorsque la quantité de chaleur se rapporte à l'unité de masse ou à la mole, la capacité calorifique correspondante prend respectivement le nom de *chaleur massique* (anciennement *chaleur spécifique*), et de *chaleur molaire*.

On procède de même pour les transformations à pression constante appelées *isobares* ($dP = 0$), d'où notion de capacité thermique à pression constante:

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad (1.13)$$

Helmholtz, Hermann Ludwig Ferdinand von (1821-1894), physicien et physiologiste allemand dont les contributions à la physiologie, à l'optique, à l'acoustique et à l'électrodynamique ont fait grandement progresser la pensée scientifique du XIX^e siècle.

Gibbs, Josiah Willard (1839-1903), physicien et mathématicien américain, fondateur de la chimie physique. Entre 1876 et 1878, Gibbs écrivit une série d'articles, réunis sous le titre de *Sur l'équilibre des substances hétérogènes*, ouvrage considéré comme l'une des plus grandes œuvres de science physique du XIX^e siècle et la base de la chimie physique. Gibbs appliqua les principes de la thermodynamique à l'étude des phénomènes physico-chimiques, énonçant la règle des phases. En 1901, Gibbs reçut la médaille Copley de la Société royale britannique.

Gibbs fit également un travail exceptionnel en mécanique statistique, en analyse vectorielle et en théorie électromagnétique de la lumière.

des conditions de référence.

$$dG = RTd \ln f \quad (1.14)$$

$$\lim_{P \rightarrow 0} f = P \quad (1.15)$$

où R est la constante des gaz parfaits.

L'équation (1.14) représente l'accroissement de la fugacité en fonction de l'énergie libre de Gibbs. L'équation (15), complète cette définition en faisant tendre asymptotiquement la fugacité à la pression au voisinage de la pression zéro. Il faut noter que l'on rencontre souvent dans la littérature, la notion de coefficient de fugacité, qui représente le rapport de la fugacité f à la pression P .

1.8 Les relations de Maxwell

Maxwell a eu recours à des artifices mathématiques afin de relier les variables d'état S , T , P et V entre elles. Ces relations s'expriment par:

$$-\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \quad (1.16)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V \quad (1.17)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P \quad (1.18)$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \quad (1.19)$$

Les équations (1.12) et (1.13), ne sont pas commodes à manipuler. Elles nécessitent des conditions isenthalpiques, qui ne sont pas aisées à reproduire. Par contre, les relations (1.11) et (1.14), sont très pratiques pour exprimer les fonctions thermodynamiques U , H , S , A et G du système en fonction de T , P et/ou V du même système (Edmister et Lee, 1984).

1.9 Fonctions thermodynamiques des systèmes homogènes fermés

Un système homogène fermé est un système comportant une seule phase et où aucun transfert de matière ne se produit avec le milieu extérieur. Nous allons présenter dans ce qui suit les expressions des fonctions thermodynamiques régissant ce type de système.

Dans le domaine de l'ingénierie, les représentations P - V - T les plus répandues sont les équations d'état. Nous verrons par la suite que la majorité des équations d'état sont explicites en pression, d'où l'utilité d'exprimer les fonctions d'état selon leur variation en fonction de la température et du volume. A partir des équations de *Maxwell*, il est possible d'intégrer ces équations afin de déduire les expressions des fonctions d'état. Toutefois, l'intégration des équations précédentes permet d'approcher la fonction d'état à une constante près. D'où la nécessité de considérer un état de référence où la fonction d'état possède une valeur connue ou facilement accessible. L'état de référence le plus souvent rencontré est l'état de gaz parfait (noté par *), sous des conditions de température et de pression de références (notées 0). Les fonctions d'état ainsi calculées sont appelées fonctions d'état résiduelles (departures functions), elles expriment l'écart du système réel par rapport au système considéré comme parfait. Les expressions des fonctions d'état résiduelles sont:

possible d'intégrer ces équations afin de déduire les expressions des fonctions d'état. Toutefois, l'intégration des équations précédentes permet d'approcher la fonction d'état à une constante près. D'où la nécessité de considérer un état de référence où la fonction d'état possède une valeur connue ou facilement accessible. L'état de référence le plus souvent rencontré est l'état de gaz parfait (noté par *), sous des conditions de température et de pression de références (notées 0). Les fonctions d'état ainsi calculées sont appelées fonctions d'état résiduelles (departures functions), elles expriment l'écart du système réel par rapport au système considéré comme parfait. Les expressions des fonctions d'état résiduelles sont:

$$\text{Energie interne} \quad \frac{U - U^*}{RT} = \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad (1.20)$$

$$\text{Enthalpie} \quad \frac{H - H^*}{RT} = Z - 1 + \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad (1.21)$$

$$\text{Entropie} \quad \frac{S - S_0^*}{R} + \ln \frac{P}{P_0} = \ln Z + \frac{1}{R} \int_{\infty}^V \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - \frac{R}{V} \right] dV \quad (1.22)$$

$$\text{Energie libre d'Helmholtz} \quad \frac{A - A_0^*}{RT} - \ln \frac{P}{P_0} = -\ln Z + \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left[\frac{RT}{V} - P \right] dV \quad (1.23)$$

$$\text{Energie libre de Gibbs} \quad \frac{G - G_0^*}{RT} - \ln \frac{P}{P_0} = Z - 1 - \ln Z + \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left[\frac{RT}{V} - P \right] dV \quad (1.24)$$

Le coefficient de fugacité (f/P), peut être déduit à partir de l'expression suivante:

$$\ln \left(\frac{f}{P} \right) = Z - 1 - \ln Z + \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left(\frac{RT}{V} - P \right) dV \quad (1.25)$$

Z: facteur de compressibilité, représente le rapport PV/RT .

1.10 Fonctions thermodynamiques des systèmes hétérogènes fermés

Un système hétérogène fermé est un système contenant plus d'une phase et où aucun transfert de matière ne se produit avec l'extérieur. Il peut être considéré comme un ensemble de systèmes homogènes ouverts. Lors du précédent développement, nous avons exprimé les relations liant la température et le volume aux fonctions d'état dans le cas d'un système homogène fermé. Toutefois, dans le cas des systèmes hétérogènes, il faut tenir compte de l'influence d'un autre facteur prépondérant sur les propriétés du système, à savoir la composition.

1.10.1 Dépendance des fonctions thermodynamiques vis-à-vis de la composition

Considérons un système hétérogène fermé contenant N composés. L'énergie interne est fonction des variables d'état S et V et du nombre de moles n_i de chaque composé.

$$U = U(S, V, n_1, n_2, \dots, n_N) \quad (1.26)$$

La différentielle totale exacte de l'énergie interne s'écrit:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,n} dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,n} dV + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial U}{\partial n_i}\right)_{S,V,n_j} dn_i \quad (1.27)$$

où j représente tous les composés différents de i.

Cette fonction d'état peut s'écrire sous la forme suivante:

$$dU = TdS - PdV + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial U}{\partial n_i}\right)_{S,V,n_j} dn_i \quad (1.28)$$

De manière analogue, les autres fonctions d'état s'expriment par:

$$dH = TdS + VdP + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial n_i}\right)_{S,P,n_j} dn_i \quad (1.29)$$

$$dA = -SdT - PdV + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial n_i}\right)_{T,V,n_j} dn_i \quad (1.30)$$

$$dG = -SdT + VdP + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P,n_j} dn_i \quad (1.31)$$

Il est démontré que les dérivées partielles par rapport à n_i de chaque fonction d'état sont égales (Edmister et Lee, 1984). De ces égalités, on définit une nouvelle grandeur thermodynamique appelée potentiel chimique, noté par μ_i :

$$\mu_i = \left(\frac{\partial U}{\partial n_i}\right)_{S,V,n_j} = \left(\frac{\partial H}{\partial n_i}\right)_{S,P,n_j} = \left(\frac{\partial A}{\partial n_i}\right)_{T,V,n_j} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P,n_j} \quad (1.32)$$

Le potentiel chimique joue un rôle important pour décrire l'état d'équilibre des phases. D'une façon générale, c'est le terme $(\partial G/\partial n_i)_{T,P,n_j}$ qui est le plus utilisé pour définir le potentiel chimique.

1.10.2 Mélange de gaz parfaits

Un mélange de gaz est considéré comme parfait, si l'ensemble des gaz (à l'état pur ou en mélange) le constituant obéissent à la loi des gaz parfaits en mélange ou individuellement. Dans ce cas, les propriétés du mélange à l'état de gaz parfait sont:

$$V^* = \sum_{i=1}^n x_i V_i \quad (1.33)$$

$$U^* = \sum_{i=1}^n x_i U_i \quad (1.34)$$

$$H^* = \sum_{i=1}^n x_i H_i \quad (1.35)$$

$$S_0^* = \sum_{i=1}^n x_i (S_{0,i}^* - R \ln x_i) \quad (1.36)$$

1.10.3 Fugacité d'un constituant du système

La fugacité est un concept principalement utilisé lors du calcul des équilibres de phases. Elle remplace l'énergie libre de Gibbs, qui présente l'inconvénient de nécessiter la connaissance de propriétés à l'état de gaz parfait telle que G_0^* , contrairement à la fugacité qui est une grandeur thermodynamique indépendante des propriétés des substances à l'état de gaz parfait. De la même manière que précédemment (équation 1.14), la fugacité du constituant i du mélange, notée \hat{f}_i , est définie par:

$$d\hat{G}_i = RTd \ln \hat{f}_i \quad (1.39)$$

$$\lim_{P \rightarrow 0} \hat{f}_i = Px_i \quad (1.40)$$

Le "chapeau" est utilisé pour différencier la fugacité du constituant pur de la fugacité du constituant dans un mélange.

Le coefficient de fugacité est souvent utilisé. Il représente le rapport de la fugacité sur la pression. Il est exprimé en fonction de la température, du volume et de la composition selon:

$$\ln \phi_i = \ln \left(\frac{\hat{f}_i}{x_i P} \right) = \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left[\frac{RT}{V} - \left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,V,n_j} \right] dV - \ln Z \quad (1.41)$$

1.10.4 Conditions d'équilibre thermodynamique des phases

Comme nous l'avons souligné précédemment, un système hétérogène fermé peut être considéré comme un ensemble de systèmes homogènes ouverts. En pratique, chaque système ouvert appartenant au système hétérogène fermé peut être considéré comme un système homogène fermé lorsqu'il se trouve à son état d'équilibre. Dans ce cas, il n'y a pas de différence de potentiel entraînant un transfert de matière ou d'énergie à travers les interfaces des phases (Edmister et Lee, 1984). De par ces considérations, toutes les expressions des fonctions d'état et des grandeurs thermodynamiques établies précédemment peuvent être étendues aux systèmes hétérogènes fermés.

Les conditions nécessaires d'équilibre de M phases pour un mélange de N composants, qu'il soit idéal ou non, sont:

- égalité des températures des M phases;
- égalité des pressions des M phases;
- égalité des potentiels chimiques, de chaque constituant, dans les M phases.

Ceci conduit au système suivant:

$$T^{(1)} = T^{(2)} = \dots = T^{(M)} \quad (1.42)$$

$$P^{(1)} = P^{(2)} = \dots = P^{(M)} \quad (1.43)$$

$$\mu_i^{(1)} = \mu_i^{(2)} = \dots = \mu_i^{(M)} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (1.44)$$

La condition d'équilibre portant sur l'égalité des potentiels chimiques (équation 1.44), peut être remplacée par l'équation suivante:

$$\hat{f}_i^{(1)} = \hat{f}_i^{(2)} = \dots = \hat{f}_i^{(M)} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (1.45)$$

Nous allons aborder dans ce qui suit le cas particulier où nous avons deux phases en présence, à savoir la phase liquide et la phase vapeur.

Ceci conduit au système suivant:

$$T^{(1)} = T^{(2)} = \dots = T^{(M)} \quad (1.42)$$

$$P^{(1)} = P^{(2)} = \dots = P^{(M)} \quad (1.43)$$

$$\mu_i^{(1)} = \mu_i^{(2)} = \dots = \mu_i^{(M)} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (1.44)$$

La condition d'équilibre portant sur l'égalité des potentiels chimiques (équation 1.44), peut être remplacée par l'équation suivante:

$$\hat{f}_i^{(1)} = \hat{f}_i^{(2)} = \dots = \hat{f}_i^{(M)} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (1.45)$$

Nous allons aborder dans ce qui suit le cas particulier où nous avons deux phases en présence, à savoir la phase liquide et la phase vapeur.

1.10.4.1 Conditions thermodynamiques d'équilibre liquide-vapeur

Dans le cas d'un équilibre liquide-vapeur, les conditions nécessaires d'équilibre liquide-vapeur pour un mélange de n composants:

- égalité des températures des 2 phases;
- égalité des pressions des 2 phases;
- égalité des potentiels chimiques, de chaque constituant, dans les 2 phases.

Ceci conduit au système suivant:

$$T^L = T^V \quad (1.46)$$

$$P^L = P^V \quad (1.47)$$

$$\mu_i^L = \mu_i^V \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (1.48)$$

La variance du système (degré de liberté) est définie par:

$$\nu = \chi + 2 - \psi \quad (1.49)$$

ν : variance du système;

χ : nombre de constituants du mélange;

ψ : nombre de phases en présence.

Dans ce cas, la règle de phases de Gibbs s'écrit:

$$\nu = n + 2 - 2 = n \quad (1.50)$$

Pour que le système soit totalement défini, il suffit de déterminer n variables indépendantes, qui sont généralement obtenues par la résolution des n relations d'égalité des potentiels chimiques (équation 1.48) ou des relations suivantes obtenues à partir de l'équation (1.45):

$$f_i^L = f_i^V \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (1.51)$$

avec

f_i^V : fugacité du composé i en phase vapeur;

f_i^L : fugacité du composé i en phase liquide.

La fugacité de la phase vapeur peut être exprimée par la relation suivante:

$$f_i^V = \phi_i^V y_i P \quad (1.52)$$

avec

φ_i^V : coefficient de fugacité de la phase vapeur, fonction de la température T , de la pression P et de la composition y ;

y : vecteur composition (y_1, y_2, \dots, y_n) en phase vapeur.

La même équation est établie pour la phase liquide:

$$f_i^L = \varphi_i^L x_i P \quad (1.53)$$

avec

φ_i^L : coefficient de fugacité de la phase liquide, fonction de la température T , de la pression P , de la composition x ;

x : vecteur composition (x_1, x_2, \dots, x_n) en phase liquide.

A partir de ces deux dernières relations, nous aboutissons au système de n relations suivant:

$$\varphi_i^V y_i = \varphi_i^L x_i \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (1.54)$$

La constante d'équilibre de phase est définie par:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\varphi_i^L}{\varphi_i^V} \quad (1.55)$$

2. Les équations d'état

Une équation d'état est une fonction analytique reliant les variables d'état P - V - T (pression, température et volume) et la composition. La majorité de ces équations peuvent s'écrire sous la forme suivante:

$$f(P, V, T, X) = 0$$

- P représente la pression du système;
- V représente le volume;
- T représente la température;
- X représente le vecteur composition.

2.1 Equation d'état du gaz parfait

L'état gazeux est, parmi les états de la matière, celui qui, par sa nature même, est le plus simple à étudier; les propriétés d'un gaz se déduisent en effet directement de celles des molécules qui le constituent. De ce fait, la physique des gaz a joué, surtout entre 1870 et 1930, un rôle fondamental dans le développement de la théorie atomique et des méthodes de la mécanique statistique (Borel, 1984).

La notion de gaz parfait s'est dégagé des travaux de Boyle (1662), Mariotte (1676), Charles (1787), Gay-Lussac (1809), Avogadro (1811).

Loi de Boyle-Mariotte

A température constante, le volume V d'un gaz est inversement proportionnel à sa pression P , soit $PV = \text{constante}$.

Loi de Gay-Lussac

A pression constante, le volume V d'un gaz est proportionnel à sa température absolue T , soit $V/T = \text{constante}$.

Loi de Charles

A volume constant, la pression P d'un gaz est proportionnelle à sa température absolue T , soit $P/T = \text{constante}$.

De l'ensemble de ces travaux, la forme de l'équation des gaz parfaits est la suivante (pour une mole):

$$PV = RT \tag{2.1}$$

L'équation d'état des gaz parfaits est un modèle thermodynamique dans lequel on néglige les interactions moléculaires du gaz, à l'exception des collisions, et dont le volume propre est négligeable devant le volume du récipient. Lorsqu'un gaz est à faible pression, les interactions entre ses molécules sont faibles. Ainsi, les propriétés d'un gaz réel à basse pression se rapprochent de celles d'un gaz parfait (Borel, 1984).

La loi des gaz parfaits peut être démontré à partir d'un raisonnement statistique. La pression P exercée par le gaz contre les paroi n'est pas autre chose que l'effet statistique du choc des molécules contre cette paroi. A partir du théorème de conservation de la quantité de mouvement, il est aisé de démontrer que l'énergie engendrée par les chocs

Mariotte, Edme (1620-1684), physicien français à l'origine de la loi de compressibilité des gaz portant son nom. Edme Mariotte fut l'un des pionniers de la physique expérimentale en France et, avec Newton, l'une des grandes figures de la physique européenne. Ses travaux témoignent d'une grande originalité et d'une grande diversité. En 1676, il établit la loi de compressibilité des gaz qui porte son nom et la formula dans son traité *De la nature de l'air*. Il étudia également l'optique, l'hydrodynamique, la mécanique des fluides. En 1666, il fut nommé membre de l'Académie des sciences.

Boyle, sir Robert (1627-1691), scientifique anglais d'origine irlandaise, qui fut l'un des premiers adeptes de la méthode scientifique et l'un des fondateurs de la chimie moderne. Boyle naquit à Lismore, en Irlande, et fit ses études à Genève. Il s'établit en Angleterre et se consacra à la recherche scientifique. Boyle croyait en la nécessité d'une observation objective et d'expérimentations vérifiables en laboratoire dans le domaine des études scientifiques. Pour cette raison, il est considéré comme l'un des fondateurs de la méthode scientifique moderne. Il fut également l'un des membres fondateurs de la Royal Society. Boyle fut le premier chimiste à isoler et à recueillir un gaz. Il améliora la pompe à air et formula, indépendamment de Mariotte, la loi de physique qui porte aujourd'hui le nom de la loi de Boyle-Mariotte.

des particules (le produit PV) est proportionnelle au carré de la vitesse moyenne. D'autre part, *Maxwell* a montré que la moyenne statistique de l'énergie cinétique de translation est proportionnelle à la température. En combinant ces deux phénomènes, il est aisé d'aboutir à l'équation (2.1). Il faut toutefois noter que l'on considère que les énergies mises en jeu sont exclusivement dues à la translation des particules libres. De ce fait, les énergies de liaison dues à l'interaction entre les particules sont négligeables.

2.2 Equations d'état des fluides réels

L'équation d'état du gaz parfait est approximative. Par exemple, un gaz parfait ne pourrait ni se liquéfier ni se solidifier, quels que soient les refroidissements et la compression auxquels il est soumis. Les gaz réels, surtout dans des conditions de pression et de température proches de la transition à l'état liquide, peuvent présenter des écarts considérables avec la loi des gaz parfaits.

Van der Waals (1873), proposa d'apporter les améliorations suivantes à l'équation du gaz parfait:

- Il convient de tenir compte du volume propre des molécules. En première approximation, nous pouvons admettre que lors d'une compression isotherme, la pression du gaz doit tendre vers l'infini quand son volume tend vers le propre volume des molécules. Cette condition est obtenue en remplaçant dans l'équation d'état (2.1) le volume molaire V par l'expression $(V-b)$ où b est une constante appelée covolume.
- Il convient de tenir compte des forces d'attraction entre les molécules. D'une part, la force d'attraction agissant sur une molécule est proportionnelle au nombre de molécules. D'autre part, l'effet statistique du choc des molécules contre une paroi est aussi proportionnel au nombre des molécules. Il en résulte que l'effet de pression dû aux forces d'interaction est proportionnel au carré du nombre de molécules ou encore inversement proportionnel au carré du volume molaire V . Nous pouvons admettre que cet effet de pression appelé pression interne P_i est donné par la relation $P_i = a/V^2$, dans laquelle a est une constante. La pression interne P_i diminue l'effet statistique du choc des molécules contre la paroi, de sorte qu'il convient de remplacer dans l'équation d'état (2.2) la pression P par l'expression $(P + P_i)$ (Borel, 1984).

A partir de ces considérations, l'équation d'état de Van der Waals (*VDW*) s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(P + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = RT \\ \text{ou} \\ P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2} \end{array} \right. \quad (2.2)$$

Les paramètres a et b de l'équation (2.3) ont pu être déterminés à partir d'une constatation faite par Van der Waals concernant l'allure de l'isotherme critique le long du diagramme $P-V$. Cette isotherme présente une pente horizontale (dérivée première nulle) et un point d'inflexion (dérivée seconde nulle) au point (P_c, V_c) . Ceci se traduit mathématiquement par:

Charles, Jacques Alexandre César (1746-1823), chimiste, physicien et aéronaute français, qui fabriqua, en 1783, le premier ballon à l'hydrogène et monta à une altitude de presque 3 000 m. En 1787, il découvrit la relation entre le volume d'un gaz et sa température, connu à la fois comme la loi de Gay-Lussac et celle de Charles. Il fut élu à l'académie française en 1785.

Gay-Lussac, Louis Joseph (1778-1850), chimiste et physicien français, connu pour ses études sur les propriétés des gaz. Il naquit à Saint-Léonard-de-Noblat et fit ses études à l'École polytechnique et à l'École des ponts et chaussées de Paris. Après avoir occupé plusieurs chaires de professeur, il fut professeur de physique à la Sorbonne de 1808 à 1832.

En 1804, il fit plusieurs ascensions en ballon pour étudier les variations du magnétisme terrestre et pour observer la composition et la température de l'air à différentes altitudes. En 1809, il formula la loi volumétrique sur les combinaisons des gaz, à laquelle son nom fut d'ailleurs attaché. Cette loi stipule que, lorsque l'on mélange des gaz (dans certaines conditions), le rapport du volume obtenu avec celui des gaz mélangés est un entier.

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T=T_c} = 0 \tag{2.3}$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_{T=T_c} = 0 \tag{2.4}$$

Par la résolution des équations (2.3) et (2.4) (contraintes au point critique), nous obtenons les expressions pour les paramètres a et b :

$$a = (27/64)R^2T_c^2/P_c \tag{2.5}$$

$$b = 0.125RT_c/P_c \tag{2.6}$$

Les travaux de Van der Waals ont contribué d'une façon décisive à accréditer l'idée de l'existence de forces intermoléculaires d'attraction et à déterminer le rôle du volume d'encombrement moléculaire dans le comportement des gaz à haute pression, deux concepts encore mal assurés à l'époque. On sait à présent que l'équation de Van der Waals présente des lacunes, elle ne peut donc valablement rendre compte du comportement des gaz réels. En effet, des équations d'état encore mieux appropriées permettent de mieux approcher les gaz réels.

L'équation d'état de Van der Waals a donné naissance à une famille d'équations d'état appelée équations d'état cubiques ou équations d'état de type Van der Waals. Cependant, d'autres familles d'équations d'état se sont - à différents degrés - inspiré des travaux de Van der Waals. Ces nouvelles générations d'équations d'état ont étendu leur domaine de validité à la phase liquide, d'où l'appellation d'équations d'état des fluides réels, englobant ainsi les phases gazeuses et liquides. Nous allons développer ci-dessous, ces différentes familles d'équations d'état des fluides réels en commençant par les équations d'état cubiques.

2.3 Les équations d'état cubiques

Le terme équation d'état cubique sous entend que l'équation peut se mettre sous la forme d'un polynôme en volume de degrés trois. Schmidt et Wenzel (1980) ont constaté que la majorité des équations d'état cubiques peuvent se mettre sous la forme générale suivante:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + uV + wb^2} \tag{2.7}$$

avec

$$a = a_c \alpha = \Omega_a \frac{(RT_c)^2}{P_c} \alpha \tag{2.8}$$

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \tag{2.9}$$

Un nouveau paramètre Z est introduit pour représenter l'écart par rapport à la loi des gaz parfaits. Z est appelé facteur de compressibilité, il est défini par:

Van der Waals, Johannes Diderik, (1837-1923) Physicien hollandais né Leyden et mort Amsterdam. Van der Waals fut tout d'abord instituteur avant de devenir, à la suite d'efforts solitaires, professeur dans l'enseignement moyen (1863). Il fréquenta les cours de l'université de Leyden de 1862 à 1865 et enseigna la physique Deventer et à La Haye (1866). En 1873, il fut reçu docteur par l'université de Leyden après la défense d'une dissertation intitulée: *Over de continuïteit van den gas en vloeïstoofstand*; elle contient la présentation de l'équation d'état qui porte son nom et conduit à des résultats beaucoup plus satisfaisants que l'équation classique des gaz parfaits au voisinage de la zone de liquéfaction. De 1877 à 1907, date de sa retraite, Van der Waals occupa la chaire de physique à l'université d'Amsterdam. C'est pendant cette période qu'il fit connaître sa loi dite des états correspondants (1880). Cette équation d'état unique pour tous les corps purs contribua largement elle aussi, à sa renommée car elle servit par la suite de guide aux essais préalables à la liquéfaction de l'hydrogène (J. Dewar, 1898) et de l'hélium (H. Kamerlingh Onnes, 1908). D'un autre point de vue, cette contribution de Van der Waals est également considérée comme l'une des premières tentatives pour exprimer des lois de la physique en fonction de variables réduites, représentées ici par les rapports P/P_c , V/V_c , T/T_c , à l'aide des coordonnées P_c , V_c , T_c du point critique. Le prix Nobel de physique lui a été décerné en 1910 pour ses travaux concernant l'équation de l'état d'agrégation des gaz.

$$Z = \frac{PV}{RT} \quad (2.10)$$

Dans ce cas, une forme équivalente de l'équation (2.7) est donné par l'équation suivante:

$$Z^3 - (1 + B - uB)Z^2 + (A + wB^2 - uB - uB^2)Z - AB - wB^2 - wB^3 = 0 \quad (2.11)$$

avec

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad (2.12)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (2.13)$$

De nombreux travaux ont tenté d'apporter des améliorations à l'équation de *Van der Waals*. Parmi les nombreuses équations (une centaine), nous pouvons citer les travaux de *Redlich et Kwong* (1949), *Soave* (1972), *Peng et Robinson* (1976), *Hermens et Knapp* (1980), *Soave* (1984), *Stryjek et Vera* (1987), *Sheng et Lu* (1990) et *Twu et coll.* (1995). Ces différentes équations d'état sont développées dans ce qui suit.

2.3.1 Equation d'état de Redlich-Kwong

Redlich et Kwong (1949) ont modifié le terme attractif de l'équation *VDW*. L'expression de l'équation de *Redlich-Kwong* (*RK*) est:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{\sqrt{TV}(V+b)} \quad (2.14)$$

De la même manière que pour l'équation *VDW*, les paramètres a et b sont déterminés par le critère que doit vérifier toute équation d'état au point critique (équations (2.3) et (2.4)).

$$a = 0.42748 \frac{(RT_c)^2}{P_c} \quad (2.15)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (2.16)$$

La forme cubique de l'équation *RK* est la suivante:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \quad (2.17)$$

Les coefficients A et B sont donnés respectivement par les équations (2.12) et (2.13).

L'apparition de l'équation d'état *RK* constitua au début des années cinquante une "révolution" pour le calcul des propriétés thermodynamiques des gaz, car, cette équation prédit le comportement de la phase gazeuse avec de faibles écarts, ce qui la fit adopter pour le calcul des installations de traitement des gaz. Cependant, d'importants écarts sont observés lors de la prédiction des propriétés thermodynamiques de la phase

liquide, ce qui ne lui permet pas de prédire les équilibres liquide-vapeur à la base de la majorité des opérations physiques de séparation (distillation, absorption, etc.).

2.3.2 Equation d'état de Soave-Redlich-Kwong

Le succès de l'équation originelle de Redlich-Kwong a encouragé de nombreux chercheurs; c'est le cas de Soave (1972), qui a amélioré sa précision et son extension à la prédiction des propriétés thermodynamiques de la phase liquide. L'amélioration porte sur l'introduction d'un facteur α permettant le réajustement de la tension de vapeur prédite par l'équation de Redlich-Kwong par rapport aux données expérimentales de la tension de vapeur.

L'équation de Soave-Redlich-Kwong (SRK) peut être considérée comme étant l'une des plus performantes des modifications de l'équation originelle de Redlich-Kwong, son expression est:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)} \quad (2.18)$$

avec

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (2.19)$$

$$a = a(T_c) \alpha(T_r, \omega) = 0.42748 \frac{(RT_c)^2}{P_c} \alpha \quad (2.20)$$

$$\alpha = f(\tau) \Rightarrow$$

$$a = f(\tau)$$

$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (2.21)$$

$$m = 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (2.22)$$

La forme cubique de l'équation SRK est:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \quad (2.23)$$

La différence par rapport à l'équation RK est l'introduction du terme α qui tient compte de l'influence de la température sur le paramètre a . L'influence de la nature du fluide est aussi prise en compte, par l'intermédiaire de m qui est une fonction du facteur acentrique. L'introduction du terme correctif α a donné un grand essor à l'utilisation des équations d'état dans l'industrie des hydrocarbures (Edmister et Lee, 1984).

Soave (1993) reprend son équation modifiée proposée vingt ans plutôt (1972) et propose une nouvelle expression pour la dépendance en température et en facteur acentrique du terme attractif a . Cette nouvelle extension peut être appliquée aux substances polaires et non-polaires.

$$\alpha = 1 + m(1 - T_r) + n(1 - T_r^{0.5})^2 \quad (2.24)$$

avec

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + bcV - (c-1)b^2} \quad (2.32)$$

Cette modification tient compte de la variation du facteur de compressibilité critique des fluides réels, pour cela un quatrième paramètre ξ a été introduit:

$$\xi = \frac{PcVc^*}{RTc} \quad (3.33)$$

où

V_c^* est le volume critique calculé.

Ce nouveau terme a été porté en fonctions du facteur acentrique pour donner:

$$\xi = 0.3211 - 0.08\omega + 0.0384\omega^2 \quad (2.34)$$

Harmens et Knapp définissent un nouveau terme β comme étant:

$$\beta = \frac{b}{Vc^*} = \frac{\Omega_b}{\xi} \quad (2.35)$$

β a été corrélé en fonction de ξ pour donner:

$$\beta = 0.1077 + 0.76405\xi - 1.2428\xi^2 + 0.9621\xi^3 \quad (2.36)$$

A partir des deux coefficients β et ξ , nous avons:

$$a = \Omega_a \frac{(RT_c)^2}{P_c} \alpha \quad (2.8)$$

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \quad (2.9)$$

$$c = 1 + \frac{1 - 3\xi}{\beta\xi} \quad (2.37)$$

$$\Omega_{a_c} = 1 - 3\xi + 3\xi^2 + \beta\xi(3 - 6\xi + \beta\xi) \quad (2.38)$$

$$\Omega_b = \beta\xi \quad (2.39)$$

En suivant l'approche de Soave (1972), Harmens et Knapp ont porté le terme attractif a en fonction de la température.

$$\alpha = \left(1 + A(1 - Tr^{0.5}) - B(1 - Tr^{-1})\right)^2 \quad (2.40)$$

avec

$$-\omega \leq 0.2; \quad A = 0.50 + 0.27767\omega + 2.1722\omega^2 \quad (2.41)$$

$$B = -0.022 + 0.338\omega - 0.845\omega^2 \quad (2.42)$$

$$-\omega > 0.2; \quad A = 0.41311 + 1.14657\omega \quad (2.43)$$

$$B = 0.0118 \quad (2.44)$$

Malgré les perfectionnements de l'équation d'Harmens et Knapp, un gain marginal a été obtenu par rapport aux équations *SRK* et *PR* (Edmister et Lee, 1984).

2.3.5 Equation d'état de Soave-Van der Waals

En suivant la même démarche que pour l'équation *RK*, Soave (1984) propose de modifier l'équation originelle de Van der Waals, en faisant varier a en fonction de la température et de la nature du fluide. L'équation de Soave-Van der Waals (*SVDW*) est de la forme:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2} \quad (2.4)$$

avec

$$b = 0.125 \frac{RT_c}{P_c} \quad (2.4)$$

$$a = 0.42188 \frac{(RT_c)^2}{P_c} \alpha \quad (2.45)$$

$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (2.21)$$

$$m = 0.4998 + 1.5928\omega - 0.19563\omega^2 + 0.025\omega^3 \quad (2.46)$$

L'équation *SVDW* permet de reproduire avec une grande précision la tension de vapeur de composés purs polaires ou non-polaires. Ainsi, une équation de forme aussi simple que celle de *VDW* donne des résultats aussi précis que d'autres équations de formes plus sophistiquées (Soave, 1984).

2.3.6 Equation d'état de Peng-Robinson-Stryjek-Vera

Stryjek et Vera (1987) ont proposé une modification de l'équation *PR*. Cette modification porte sur le facteur m (équation (2.30)) qui n'est pas seulement fonction du facteur acentrique, mais dépend de la température réduite et d'une constante m_1 spécifique à chaque fluide. L'équation de Peng-Robinson-Stryjek-Vera (*PRSV*) est de la forme:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)+b(V-b)} \quad (2.27)$$

avec

$$b = 0.077796 \frac{RT_c}{P_c} \quad (2.28)$$

$$a = 0.457235 \frac{(RT_c)^2}{P_c} \alpha \quad (2.29)$$

$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (2.21)$$

$$m = 0.378893 + 1.4897153\omega - 0.17131848\omega^2 + 0.0196554\omega^3 + m_1(1 + Tr^{0.5})(0.7 - Tr) \quad (2.47)$$

Les valeurs de m_1 pour plus de 90 corps purs d'utilité industrielle sont données par Stryjek et Vera. L'équation PRSV reproduit avec une précision inférieure à 1% les pressions de vapeur saturante (inférieures à 1.5 MPa) des corps purs (Stryjek et Vera, 1987).

2.3.7 Equation d'état de Sheng-Lu

Une équation d'état dérivée de l'équation PR a été proposée par Sheng et Lu (1990) pour l'amélioration de la prédiction de la tension de vapeur et de la densité liquide pour les hydrocarbures lourds et les composés polaires. Une nouvelle forme de la dépendance en température de la fonction α et du paramètre u . L'équation de Sheng-Lu est de la forme:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + (2b-4c)V^2 + (2c^2 - b^2)} \quad (2.48)$$

Les paramètres b et c s'expriment en fonction du paramètre u (Schmidt et Wenzel, 1980).

$$a = 0.457235 \frac{(RT_c)^2}{P_c} \alpha \quad (2.29)$$

$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (2.21)$$

$$m = 0.37646 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad (2.30)$$

$$b = 0.3112 \frac{RT_c}{(2+u)P_c} \quad (2.49)$$

$$c/b = (2-u)/4 \quad (2.50)$$

Sheng et Lu proposent d'exprimer le paramètre u et la fonction α selon les deux équations suivantes:

$$\alpha = 1 + A_1(1 - T_r) + A_2(1 - T_r)^2 + A_3(1 - T_r)^3 \quad (2.51)$$

$$u = u_0 + u_1(1 - T_r)^{0.1} + u_2(1 - T_r) + u_3(1 - T_r)^2 \quad (2.52)$$

Les paramètres $A_1, A_2, A_3, u_0, u_1, u_2$ et u_3 sont déterminés pour plus de cinquante corps purs de différentes natures chimiques. La déviation absolue moyenne obtenue lors du calcul de la tension de vapeur et de la densité liquide est inférieure à 1% (Sheng et Lu, 1990).

2.3.8 Equations d'état SRK et PR généralisées.

Twu et coll. (1995a, 1995b) ont proposé d'exprimer la fonction α des équations d'état SRK et PR en fonction de la température réduite et du facteur acentrique:

$$\alpha = \alpha^{(0)} + \omega(\alpha^{(1)} - \alpha^{(0)}) \tag{2.53}$$

La variation de la fonction α en fonction de la température réduite est donnée par les équations suivantes:

$$\alpha = T_r^L e^{M(1-T_r^N)} \tag{2.54}$$

Dans le cas de l'équation PR, nous avons:

$$\alpha^{(0)} = T_r^{-0.171813} e^{0.125283(1-T_r^{2.72634})} \tag{2.55}$$

$$\alpha^{(1)} = T_r^{-0.607352} e^{0.511614(1-T_r^{2.70517})} \tag{2.56}$$

Pour l'équation SRK, nous avons:

$$\alpha^{(0)} = T_r^{-0.201158} e^{0.141599(1-T_r^{2.79578})} \tag{2.57}$$

$$\alpha^{(1)} = T_r^{-0.660145} e^{0.500315(1-T_r^{2.63165})} \tag{2.58}$$

La fonction α est linéaire en ω ce qui présente l'avantage de pouvoir extrapoler pour les hydrocarbures lourds, les fractions pétrolières ou les condensats. La nouvelle forme de la fonction α permet de reproduire de manière plus précise la tension de vapeur et présente l'avantage de reposer sur la loi des états correspondants.

2.4 Equations d'état non-cubiques

2.4.1 Equation d'état du viriel

Contrairement aux équations d'état cubiques (équations d'état semi-empiriques), L'équation d'état du viriel a une base théorique découlant de la théorie cinétique des gaz. Elle s'exprime par le développement en série infini suivant:

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{RTB}{V^2} + \frac{RTC}{V^3} + \dots \tag{2.59}$$

Les paramètres B, C, etc. sont appelés second, troisième, etc. coefficients du viriel et sont fonctions uniquement de la température dans le cas des fluides purs.

Le théorème du viriel suggéré par Kammerlingh Onnes en 1901, montre que les coefficients du viriel sont liés aux interactions moléculaires. Le second coefficient du

Kammerlingh Onnes Heike, (1853-1926) Physicien néerlandais né à Groningue et mort à Leyde. Professeur à l'université de Leyde, prix Nobel de physique (1913). Kammerlingh Onnes fut l'un des créateurs de la physique des basses températures et le fondateur du célèbre laboratoire du froid de l'université de Leyde. Il a liquéfié pour la première fois l'hélium (1908) ; on lui doit aussi la découverte fondamentale de la supraconductivité de certains métaux dont il a étudié la modification sous l'action d'un champ magnétique constant (1911).

viriel représente les interactions de binaires, le troisième coefficient du viriel représente les interactions de triplets, etc. (Edmister et Lee, 1984).

Cette équation d'état est parfois utilisée pour le calcul des propriétés de la phase vapeur sous une forme tronquée au deuxième ou le troisième terme en fonction de la disponibilité des coefficients du viriel.

Le second coefficient du viriel peut être considéré comme étant la pente de l'isotherme dans le graphe portant la facteur de compressibilité Z en fonction de la pression. Il peut être déterminé à partir des données expérimentales.

$$B = RT \lim_{p \rightarrow 0} \left(\frac{\partial Z}{\partial P} \right)_T \quad (2.60)$$

Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour estimer le second coefficient du viriel, cependant la méthode reposant sur la loi des états correspondants reste la plus utilisée.

$$\frac{BPc}{RTc} = B^{(0)} + \omega B^{(1)} \quad (2.61)$$

avec

$$B^{(0)} = 0.083 - \frac{0.422}{Tr^{1.6}} \quad (2.62)$$

$$B^{(1)} = 0.139 - \frac{0.172}{Tr^{4.2}} \quad (2.63)$$

Les équations (2.61)-(2.63) permettent une bonne reproduction des propriétés thermodynamiques des corps purs non-polaires ou légèrement polaires (Reid et coll., 1988).

2.4.2 Equation d'état de Benedict-Webb-Rubin

L'équation d'état de Benedict-Webb-Rubin (1942) (BWR) fut considérée - pendant longtemps - comme la seule équation d'état applicable aussi bien à la phase vapeur, qu'à la phase liquide. L'équation BWR a connu une large utilisation notamment dans le domaine de la cryogénie. Son expression est:

$$P = \rho RT + \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} \right) \rho^2 + (bRT - a) \rho^3 + \frac{c \rho^3}{T^2} (1 + \gamma \rho^2) \exp(-\gamma \rho^2) \quad (2.64)$$

avec

$$\rho = 1/V \quad (2.65)$$

L'équation BWR est d'un maniement délicat, bien qu'elle donne des résultats corrects pour le traitement des hydrocarbures. Les huit constantes de l'équation BWR dépendent de la nature des composés purs et ont été tabulées en fonction des propriétés volumétriques de chaque composé. Les valeurs de ces paramètres de 33 hydrocarbures d'utilité industrielle sont donnés par Reid et coll. (1977).

2.4.3 Equation d'état de Lee-Kesler

Lee et Kesler (1975) ont développé une équation modifiée de l'équation BWR, en l'exprimant sous forme généralisée selon la loi des états correspondants. Ils définissent deux fluides, le premier est le fluide simple, qui possède un facteur acentrique nul ($\omega = 0$), le second est le fluide de référence qui est le n-octane ($\omega = 0.3978$).

Le facteur de compressibilité Z du fluide réel est exprimé en fonction des propriétés du fluide simple et du fluide de référence.

$$Z = Z^{(0)} + \frac{\omega}{\omega^{(R)}} (Z^{(R)} - Z^{(0)}) \quad (2.66)$$

0 : fluide de référence ($\omega=0$);

R : fluide de référence (n-octane).

$$Z = \frac{P_r V_r}{T_r} = 1 + \frac{B}{V_r} + \frac{C}{V_r^2} + \frac{D}{V_r^3} + \frac{C_4}{T_r^3 V_r^2} \left(\beta + \frac{\gamma}{V_r^2} \right) \exp\left(-\frac{\gamma}{V_r^2} \right) \quad (2.67)$$

avec

$$B = b_1 - \frac{b_2}{T_r} - \frac{b_3}{T_r^2} - \frac{b_4}{T_r^3} \quad (2.68)$$

$$C = C_1 + \frac{C_2}{T_r} + \frac{C_3}{T_r^3} \quad (2.69)$$

$$D = d_1 + \frac{d_2}{T_r} \quad (2.70)$$

$$Z^{(0)} = \frac{P_r V_r^{(0)}}{T_r} \quad (2.71)$$

$$Z^{(R)} = \frac{P_r V_r^{(R)}}{T_r} \quad (2.72)$$

$$Z^{(1)} = \frac{Z^{(R)} - Z^{(0)}}{\omega^{(R)}} \quad (2.73)$$

Les valeurs des différentes constantes de l'équation de Lee-Kesler (LK) sont:

Tableau 2.1 - Paramètres de l'équation de Lee-Kesler

Constante	Fluide simple	Fluide de référence
b_1	0.1181193	0.2026579
b_2	0.265728	0.331511
b_3	0.154790	0.027655
b_4	0.030323	0.203488
c_1	0.0236744	0.0313385
c_2	0.0186984	0.0503618
c_3	0.0	0.016901
c_4	0.042724	0.041577
$d_1 \times 10^4$	0.155488	0.48736
$d_2 \times 10^4$	0.623689	0.0740336
β	0.65392	1.226
γ	0.060167	0.03754
ω	0.0	0.3978

Le domaine de validité de l'équation LK varie de $T_r = 0.3$ à $T_r = 4.0$ et de $P_r = 0$ à $P_r = 10$ avec une erreur moyenne de 2%, aussi bien pour la phase liquide, que pour la phase gazeuse. Elle peut être appliquée aux substances non-polaires ou légèrement polaires et à leur mélange (Lee et Kesler, 1975).

2.4.4 Equation d'état Hard-Chain

La théorie de la chaîne-dure (hard-chain theory) a été suggérée en premier par *Van der Waals*. Les molécules sont considérées comme des sphères dures (ce qui n'est vraiment pas le cas) ce qui entraîne que la microstructure du fluide dépend des forces d'attraction et donc du diamètre des molécules. Les forces d'attractions peuvent être calculées en considérant que les molécules se trouvent dans un champs de force uniforme (champ homogène et isentropique) (Beret et Prausnitz, 1975). Le terme de perturbation est ajouté au terme de la chaîne dure, pour tenir compte de l'écart entre le facteur de compressibilité (du fluide réel) de celui engendré par la théorie de la sphère dure.

$$Z = Z(\text{chaîne dure}) + Z(\text{perturbation}) \quad (2.74)$$

Carnahan et Starling (1969) ont proposé d'exprimer la contribution de la sphère dure selon:

$$Z(\text{chaîne dure}) = \frac{1 + y + y^2 - y^3}{(1 - y)^3} \quad (2.75)$$

avec

$$y = b/4V \quad (2.76)$$

Le terme de perturbation est égal au dernier terme de l'équation d'état de Redlich-Kwong (équation 2.14).

$$Z = \frac{1+y+y^2-y^3}{(1-y)^3} - \frac{a}{RT^{1.5}(V-b)} \quad (2.77)$$

Carnahan et Starling ont utilisé l'équation (2.77) pour le calcul la densité ($1/V$) et l'enthalpie isotherme d'hydrocarbures légers. Les résultats obtenus dans ce cas présentent une précision acceptable (Edmister et Lee, 1984).

2.4.5 Equations d'état quartique généralisée de Shah-Lin-Bienkowski-Cochran

SHAH et coll. (1996) ont proposé une nouvelle équation qui repose sur la théorie de la chaîne dure (hard chain theory). Elle est appelée quartique car elle peut se mettre sous la forme d'un polynôme de degrés quatre en volume. Elle représente de manière plus rigoureuse le terme répulsif par rapport aux équations cubiques (Shah et coll., 1996). L'équation d'état quartique généralisée s'exprime par:

$$P = \frac{RT}{(V - k_0\beta)} + \frac{k_1\beta RT}{(V - k_0\beta)^2} - \frac{aV + k_0\beta c}{V(V+e)(V - k_0\beta)} \quad (2.78)$$

où k_0 et k_1 sont des constantes respectivement égales à 1.2865 et 2.8225. Les quatre paramètres de cette équation d'état sont a , β , c et e . β représente le volume occupé par la sphère dure (hard-sphere).

$$\beta = 0.165V_c \left[\exp\left(-0.03125 \ln(T_r) - 0.0054(\ln(T_r))^2\right) \right]^3 \quad (2.79)$$

Les paramètres a et c sont donnés en fonction du volume critique, de la température critique, du facteur acentrique et du moment dipolaire modifié. Ce dernier est donné par:

$$\bar{\mu}^2 = 0.1581 \frac{\mu^2}{RT_c V_c} \quad (2.80)$$

De plus afin de permettre une bonne représentation des propriétés thermodynamiques, les paramètres a et c dépendent de la température réduite. Le paramètre a est donné par:

$$a = a_r RT_c V_c \alpha(T_r) \quad (2.81)$$

avec

$$a_r = a_{r0} (1 + a_{r1}\omega + a_{r2}\omega^2 + a_{r3}\bar{\mu} + a_{r4}\bar{\mu}^2) \quad (2.82)$$

Le paramètre $\alpha(T_r)$ est donné pour $T_r \leq 1$ par

$$\alpha(T_r) = \left[1 + X_2(1 - T_r^{0.5}) + X_3(1 - T_r^{0.5})^2 + X_4(1 - T_r^{0.5})^3 \right]^2 \quad (2.83)$$

et pour $T_r > 1$

$$\alpha(T_r) = \left[1 + X_2(1 - T_r^{0.5}) + X_5(1 - T_r^{0.5})^2 + X_6(1 - T_r^{0.5})^3 \right]^2 \quad (2.84)$$

Le paramètre c est donné par

$$c = c_r RT_c V_c \xi(T_r) \tag{2.85}$$

avec

$$c_r = c_{r0} (1 + c_{r1} \omega + c_{r2} \omega^2 + c_{r3} \bar{\mu} + c_{r4} \bar{\mu}^2) \tag{2.86}$$

et

$$\xi(T_r) = [1 + X_7 (1 - T_r^{0.5})]^2 \tag{2.87}$$

Le paramètre e est donné par:

$$e = e_r V_c \tag{2.88}$$

$$e_r = e_{r0} (1 + e_{r1} \omega + e_{r2} \omega^2) \tag{2.89}$$

Les constantes X_2 à X_7 sont exprimées en fonction du facteur acentrique et du moment dipolaire réduit selon:

$$X_i = X_{i1} + X_{i2} \omega + X_{i3} \bar{\mu} + X_{i4} \bar{\mu}^2 \quad (i=2, 3..7) \tag{2.90}$$

Les différentes constantes de l'équation d'état quartique généralisée sont données dans le tableau 2.2.

Les équations (2.78)-(2.90) avec les valeurs des constantes données dans le tableau 2.2 constituent l'équation d'état quartique généralisée. L'équation quartique admet quatre racines, dont une toujours négative et n'a aucune signification physique. Les trois autres racines peuvent être déterminées de la même façon que pour les équations d'états cubiques.

Tableau 2.2 - Constantes de l'équation d'état quartique généralisée

Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
a_{r0}	-1.84713	X_{21}	0.14988	X_{52}	0.57743
a_{r1}	-0.05218	X_{22}	0.97848	X_{53}	0.41218
a_{r2}	1.06446	X_{23}	-0.01390	X_{54}	-0.10676
a_{r3}	-0.02730	X_{24}	0.02928	X_{61}	0.02581
a_{r4}	0.02048	X_{31}	-0.32379	X_{62}	-0.02700
c_{r0}	1.78336	X_{32}	1.84591	X_{63}	0.38327
c_{r1}	-1.29690	X_{33}	0.39338	X_{64}	-0.09008
c_{r2}	2.78945	X_{34}	-0.25483	X_{71}	-0.77357
c_{r3}	-0.07000	X_{41}	0.14833	X_{72}	-1.45342
e_{r4}	0.01188	X_{42}	-3.46693	X_{73}	-0.04752
e_{r0}	0.63189	X_{43}	-0.39170	X_{74}	-0.09669
e_{r1}	-0.81660	X_{44}	-0.01597	k_0	1.2865
e_{r2}	3.25246	X_{51}	0.11048	k_1	2.8225

L'équation d'état quartique généralisée a été établie sur une base théorique plus rigoureuse que les équations d'état cubiques, tout en gardant une forme mathématique simple qui était jusqu'à présent la caractéristique principale des équations cubiques. Shah et coll. (1996) ont fait une comparative entre cette nouvelle équation d'état et l'équation d'état cubique de Peng-Robinson (1976). Il en ressort que l'équation d'état quartique représente de manière plus précise la densité, l'enthalpie résiduelle et le

second coefficient du viriel. Par contre, l'équation d'état de Peng-Robinson est supérieure à l'équation d'état quartique dans la prédiction de la tension de vapeur.

2.5 Méthode d'élaboration d'une équation d'état cubique

2.5.1 Détermination des valeurs des paramètres a et b au point critique

Comme nous l'avons souligné précédemment, les équations d'état cubiques peuvent s'écrire sous une forme généralisée (équation 2.7). Dans le cas où u et w sont constants, l'équation (2.7) possède deux inconnus, à savoir le co-volume b et le paramètre d'énergie a . Afin que l'équation (2.7) soit totalement définie, il faudrait connaître la valeur de a et b en un point du diagramme PVT . Ce point est le point critique où nous avons une identité parfaite des deux phases. Les paramètres a_c et b de l'équation (2.7) ont pu être déterminés à partir d'une constatation faite par *Van der Waals* concernant l'allure de l'isotherme critique le long du diagramme $P-V$. Cette isotherme présente une pente horizontale (dérivée première nulle) et un point d'inflexion (dérivée seconde nulle) au point (P_c, V_c) . Ceci se traduit mathématiquement par:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T=T_c} = 0 \quad (2.3)$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_{T=T_c} = 0 \quad (2.4)$$

Les équations (2.3) et (2.4) forment un système d'équation à deux inconnues (a_c et b), les expressions des paramètres a et b peuvent ainsi être déterminées dans le cas de l'équation de Van der Waals et de Redlich-Kwong.

De manière pratique, les équations (2.3) et (2.4) ne sont utilisées pour le calcul de a_c et b . Il existe une méthode plus simple pour imposer les contraintes au point critique. Cette méthode se base sur le fait qu'au point critique le facteur de compressibilité est égal au facteur de compressibilité critique et dans ce cas nous pouvons écrire l'égalité suivante:

$$(Z - Z_c)^3 = 0 \quad (2.91)$$

$$\text{ou} \quad Z^3 - 3Z^2 Z_c - 3ZZ_c^2 - Z_c^3 = 0 \quad (2.92)$$

or nous avons l'équation (2.11) qui donne l'expression de l'équation cubique en Z .

$$Z^3 - (1 + B - uB)Z^2 + (A + wB^2 - uB - uB^2)Z - AB - wB^2 - wB^3 = 0 \quad (2.11)$$

avec

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad (2.12)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (2.13)$$

En identifiant terme à terme les équations (2.92) et (2.11), nous aboutissons au système d'équation suivant:

$$\begin{cases} 3Z_c = 1 + B - uB \\ 3Z_c^2 = A + wB^2 - uB - uB^2 \\ Z_c^3 = AB + wB^2 + wB^3 \end{cases} \quad (2.93)$$

Nous avons abouti à un système à trois équations et à deux inconnues, le système peut être dans ce cas totalement défini. Il existera dans ce cas une seule valeur de Z_c qui satisfait au système (2.93). Ceci entraîne la prédiction par les équations d'état à deux paramètres d'une valeur de Z_c constante pour l'ensemble des composés. Dans le cas de l'équation de Redlich-Kwong, prédit un facteur de compressibilité critique égal à 0.333, par contre, l'équation d'état de Peng-Robinson prédit un facteur de compressibilité égal à 0.307 quelque soit le composé.

2.5.2 Détermination de la dépendance en température du paramètre a des équations d'état cubiques

Les paramètres a et b des équations d'état de Van der Waals et de Redlich-Kwong ont été déterminés grâce à la contrainte imposée au point critique. Toutefois, d'importants écarts sont enregistrés (lors de la prédiction des propriétés) lorsqu'on s'éloigne de cette région. Il a fallu attendre les travaux de *Wilson* (1969), qui a proposé d'introduire un paramètre α (équation (2.8)) permettant le réajustement de la tension de vapeur calculée par l'équation d'état cubiques aux valeurs expérimentales. De cette manière, *Soave* (1972) a calculé les valeurs α pour différentes températures et pour différents hydrocarbures, en se basant sur le fait qu'à l'équilibre, nous avons une égalité des fugacités des deux phases (liquide et vapeur), ce qui se traduit par l'égalité suivante obtenue à partir d'une simplification de l'équation (1.45):

$$f_i^L = f_i^V \quad (2.94)$$

où f_i^L et f_i^V représentent les fugacités des phases liquide et vapeur respectivement.

Cette équation est valable en tout point de la courbe de saturation. Dans le cas de corps purs, l'expression du coefficient de fugacité est obtenue en combinant les équations (1.25) et (2.7).

$$\ln\left(\frac{f}{P}\right) = Z - 1 - \ln(Z - B) - \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \ln\left(\frac{2Z + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})}\right) \quad (2.95)$$

Dès lors, le coefficient de fugacité nécessite la connaissance de T_r , P_r , α , et de la solution de l'équation (2.11), qui dans ce cas, possède deux racines en Z , correspondant aux deux phases. La méthode de résolution de l'équation (2.11) sera donnée par la suite. En exprimant les coefficients de fugacité des deux phases et en les combinant à l'équation (2.95), nous obtenons l'équation suivante:

$$\ln\left(\frac{f^V}{f^L}\right) = Z^V - Z^L - \ln\left(\frac{Z^V - B}{Z^L - B}\right) - \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \ln\left(\frac{2Z^V + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z^V + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})} \cdot \frac{2Z^L + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z^L + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})}\right) = 0 \quad (2.96)$$

L'équation (2.96) est valable pour les fluides purs le long de la courbe de saturation où la phase vapeur et la phase liquide sont en équilibre. Dans ce cas, α un paramètre ajustable satisfaisant l'équation (5.6) pour une valeur donnée de T_r . A partir de données de tension de vapeur, il est alors possible de calculer les valeurs de α et de les modéliser en fonction de paramètres tels que le facteur acentrique, le nombre d'atome de carbone, etc..

3. Les règles de mélanges appliquées aux équations d'état cubiques

Les différentes équations d'état que nous avons donné précédemment ont été développées à partir de la connaissance des propriétés P - V - T des corps purs. Dans le cas des mélanges de composition connue, il est nécessaire de faire appel à une règle dite règle de mélange permettant de calculer les propriétés moyennes du mélange. Dans le cas des équations d'état cubiques, ces règles de mélanges portent sur les paramètres a et b .

3.1 Règle de mélange conventionnelle

Pour le calcul des propriétés des mélanges, la règle de mélange la plus répandue est sans aucun doute la règle de mélange conventionnelle ou règle de mélange de Van der Waals.

Le paramètre b représente le volume de la molécule dans le cas des corps purs. Dans le cas des mélanges, il est constitué des contributions des différents corps purs composant le mélange, les interactions entre les différentes molécules n'influent pas sur le co-volume du mélange et dans ce cas, ce terme s'exprime par:

$$b_m = \sum_{i=1}^n x_i b_i \quad (3.1)$$

avec

$$b_i = \Omega_b \frac{RT_{C_i}}{P_{C_i}} \quad (3.2)$$

b_m : représente le co-volume du mélange;

b_i : représente le co-volume du constituant i du mélange;

x_i : représente la composition molaire du composé i au sein du mélange.

Le paramètre a représente l'énergie due au potentiel d'attraction entre les différentes molécules. Dans le cas du mélange, le potentiel d'attraction n'est pas homogène au sein du fluide. Le potentiel d'attraction entre le composé A et un autre composé B est différent du potentiel d'attraction entre le composé A et un autre composé C. Une approche simple consiste à considérer les interactions au sein du fluide comme étant une somme d'interactions de binaires. Dans ce cas, les fluides sont considérés n'interagir que par paires. Le paramètre a_m du mélange s'exprime dans ce cas par:

$$a_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j a_{ij}^{0.5} \quad (3.3)$$

avec

$$a_{ij} = a_{ii} a_{jj} (1 - k_{ij}) \quad (3.4)$$

$$a_{ii} = \Omega_a \frac{(RT_{C_i})^2}{P_{C_i}} \alpha_i \quad (3.5)$$

$$a_{ij} = \Omega_a \frac{(RT_{Cj})^2}{P_{Cj}} \alpha_j \quad (3.6)$$

a_m : représente l'énergie du mélange;

a_{ij} : représente l'énergie d'interaction du composé i avec le composé j au sein du mélange;

a_{ii} : représente l'énergie d'interaction du constituant i du mélange;

a_{jj} : représente l'énergie d'interaction du constituant j du mélange;

La valeur du coefficient d'interaction binaire k_{ij} - utilisés lors de la prédiction des équilibres de phases - est déterminée à partir des données expérimentales P - T - X - Y du binaire considéré. La valeur du coefficient d'interaction binaire retenue correspondra à la valeur donnant l'écart minimal entre la propriété calculée (pression, fugacité, etc.) et la valeur expérimentale. Idéalement, la valeur optimale de k_{ij} doit minimiser l'ensemble des propriétés thermodynamiques calculées par l'équation d'état. Toutefois, de manière pratique une seule propriété telle que la pression de bulle ou la pression de rosée est utilisée. Elliot et coll. proposent une méthode de recherche du coefficient d'interaction binaire basée sur l'optimisation de la fonction objectif suivante (Edmister, 1988):

$$Q = \sum_{k=1}^N \left(\frac{P_{Cal} - P_{Exp}}{P_{Exp}} \right)^2 \quad (3.7)$$

avec

N : nombre de point expérimentaux;

P_{Cal} : Pression (bulle ou rosée) calculée;

P_{Exp} : Pression (bulle ou rosée) expérimentale;

Reid et coll. (1988) donnent des valeurs des coefficients interactions binaires pour quelques mélanges binaires pour les équations PR et SRK. Pour les mélanges d'hydrocarbures contenant des composés non-hydrocarbonés CO_2 , H_2S , CO et N_2 , l'utilisation de coefficients d'interaction binaire est nécessaire. Pour des hydrocarbures de même nature (mélanges de paraffines ou d'oléfines) le coefficient d'interaction binaire peut être considéré comme nul (Edmister, 1988). Dans ce cas, l'équation (3.3) se simplifie pour donner:

$$a_m = \left(\sum_{i=1}^n x_i a_{ii}^{0.5} \right)^2 \quad (3.8)$$

Il faut cependant noter que le coefficient d'interaction binaire k_{ij} n'a aucune base théorique, il est purement empirique, et son rôle est d'aider à palier à tout écart par rapport à la loi des états correspondants, ou par rapport à tout modèle décrivant un comportement s'apparentant à la loi des états correspondants (Reid et coll., 1988).

A partir de la règle de mélange classique, nous pouvons d'après Reid et coll. (1988) calculer les coordonnées pseudo-critiques du mélange.

$$T_{cm} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (a_{ii} a_{jj})^{0.5} (1 - k_{ij})}{\Omega_a R^2 \sum_{i=1}^n x_i T_{ci} / P_{ci}} \quad (3.9)$$

et

$$\frac{T_{cm}}{P_{cm}} = \sum_{i=1}^n x_i T_{ci} / P_{ci} \quad (3.10)$$

Cette règle de mélange a eu un succès considérable du fait de sa relative simplicité. Cependant, elle n'est valable que pour des systèmes où les interactions sont nulles (mélanges d'hydrocarbures) ou pour les systèmes à faibles interactions (mélange de substances légèrement polaires). Dans le cas des mélanges à composés fortement polaires, cette règle n'est plus applicable et elle laisse la place à des règles plus sophistiquées telles que les règles de Panagiotopoulos-Reid (1984) et de Huron-Vidal (1979).

3.2 Règle de mélange de Huron-Vidal

Huron et Vidal (1979) ont présenté une règle de mélange applicable aux équations d'état cubiques, cette règle porte sur le paramètre a (le paramètre b du mélange est calculé par l'équation 3.1) qui est un terme d'énergie constitué de la contribution à l'énergie libre d'excès de la solution régulière $g^{E(HS)}$ et d'un terme résiduel $g^{E(R)}$.

$$g^E = g^{E(HS)} + g^{E(R)} \quad (3.11)$$

L'énergie libre d'excès est une fonction de la pression, du volume, de la température et de la composition par l'intermédiaire d'une équation d'état. Pour une solution régulière, l'enthalpie et l'entropie d'excès sont nulles. Dans ce cas, la règle de mélange sera:

$$a_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (a_{ii} a_{jj})^{0.5} \quad (3.12)$$

Huron et Vidal ont déterminé la règle de mélange du paramètre d'énergie a dans des conditions de pression infinie ($P \rightarrow \infty, V \rightarrow b$):

$$a_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left[x_i x_j (a_{ii} a_{jj})^{0.5} - c h_m \frac{g_{ij\infty}^{E(R)}}{x_i x_j} \right] \quad (3.13)$$

La différence entre l'équation (3.5) et (3.6) est l'introduction d'un terme tenant compte de l'énergie d'excès du mélange à pression infinie.

La constante c est caractéristique de chaque équation d'état:

$$c_{SRK} = \frac{2}{\ln 2} \quad (3.14)$$

$$c_{PR} = \frac{2\sqrt{2}}{\ln\left(\frac{2+\sqrt{2}}{2-\sqrt{2}}\right)} \quad (3.15)$$

L'énergie libre d'excès à pression infinie $g_{\infty}^{E(R)}$ peut être calculée par l'équation de Renon-Prausnitz (*Non Random Two Liquids, NRTL*), pour donner:

$$\frac{g_{ij\infty}^{E(R)}}{x_i x_j} = \frac{\Delta g_{ij} G_{ij}}{x_i G_{ij} + x_j} + \frac{\Delta g_{ji} G_{ji}}{x_i + x_j G_{ji}} \quad (3.16)$$

avec

$$G_{ij} = \exp\left(-\frac{0.3\Delta g_{ij}}{RT}\right) \quad (3.17)$$

3.3 Règle de mélange de Panagiotopoulos-Reid

La règle de mélange de Panagiotopoulos-Reid (1984) est basée sur le modèle de la composition locale. Ce modèle est basé sur le fait que la composition n'est pas uniforme au sein du mélange. Nous pouvons illustrer cela par le fait que dans un mélange A-B, si les molécules A sont plus attirées par d'autres molécules A que par des molécules B, il s'en suivra que la composition locale en A au voisinage d'une autre molécule A sera supérieure à la composition globale en A au sein du fluide. Panagiotopoulos et Reid proposent d'exprimer ce modèle par:

$$a_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \left[(a_{ii} a_{jj})^{0.5} (1 - k_{ij}) + \frac{b_m}{VRT} (x_i \lambda_{ij} + x_j \lambda_{ji}) \right] \quad (3.18)$$

avec $\lambda_{ij} = -\lambda_{ji}$: coefficient d'interaction binaire tenant compte de l'assymétrie des interactions.

La règle de mélange de Panagiotopoulos-Reid est en accord avec la condition sur le second coefficient du viriel du mélange qui doit être sous forme une quadratique pour de faibles densités.

3.4 Estimation des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques

Les propriétés thermodynamiques des mélanges peuvent être calculées à partir des équations d'état cubiques moyennant l'adoption d'une règles de mélange. Nous présentons dans ce qui suit les expressions des fonctions thermodynamiques obtenues à partir des équations d'état cubiques et en adoptant la règle de mélange conventionnelle.

A partir de de la forme généralisée des équations d'état cubiques (équation (2.7)), des expressions des paramètres a_m et b_m (équations (3.1) et (3.2)) et des expressions des propriétés thermodynamiques résiduelles (équations (1.20), (1.21), (1.22), (1.23), (1.24) et (1.25)), il est possible de déduire les expressions des propriétés thermodynamiques suivantes.

Enthalpie résiduelle

$$\frac{H - H^*}{RT} = Z - 1 - \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \left(1 - \frac{T}{a_m} \frac{\partial a_m}{\partial T} \right) \ln \left(\frac{2Z + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})} \right) \quad (3.19)$$

Entropie résiduelle

$$\frac{S - S_0^*}{R} + \ln \frac{P}{P_0} = \ln(Z - B) + \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \left(\frac{T}{a_m} \frac{\partial a_m}{\partial T} \right) \ln \left(\frac{2Z + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})} \right) \quad (3.20)$$

Energie libre de Helmholtz résiduelle

$$\frac{A - A_0^*}{RT} - \ln \frac{P}{P_0} = -\ln(Z - B) - \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \ln \left(\frac{2Z + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})} \right) \quad (3.21)$$

Energie libre de Gibbs résiduelle

$$\frac{G - G_0^*}{RT} - \ln \frac{P}{P_0} = Z - 1 - \ln(Z - B) - \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \ln \left(\frac{2Z + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})} \right) \quad (3.22)$$

Coefficient de fugacité

$$\ln \phi_i = \frac{b_i}{b_m} (Z - 1) - \ln(Z - B) + \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \left(\frac{b_i}{b_m} - \delta_i \right) \ln \left(\frac{2Z + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})} \right) \quad (3.23)$$

avec

$$T \frac{\partial a_m}{\partial T} = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (a_{ij} a_{C_{ij}} T_{r,j})^{0.5} (1 - k_{ij}) \quad (3.24)$$

$$\frac{b_i}{b_m} = \frac{T_{C_i} / P_{C_i}}{\sum_{j=1}^n T_{C_j} / P_{C_j}} \quad (3.25)$$

$$\delta_i = \frac{2a_{ii}^{0.5}}{a_m} \sum_{j=1}^n x_j a_{ij}^{0.5} (1 - k_{ij}) \quad (3.26)$$

4. Méthodes de caractérisation des fractions pétrolières en vue de leur appliquer une équation d'état cubique

Pour pouvoir appliquer une équation d'état cubique aux mélanges, il faut connaître les valeurs des coordonnées critiques (température et pression) et le facteur acentrique de chaque constituant du mélange. De plus, la valeur du coefficient d'interaction binaire doit être connu pour chaque paire de composés présents dans le mélange.

Une fraction pétrolière étant un mélange complexe, il est nécessaire de la caractériser afin de pouvoir lui appliquer une équation d'état. Les méthodes de caractérisation sont en fait des procédures de modélisation de la fraction en un certain nombre de composés ou pseudo-composés qui représentent globalement les propriétés moyennes de la fraction pétrolière et dont les valeurs des coordonnées critiques et du facteur acentrique peuvent être estimées.

4.1 Méthode de caractérisation d'Edmister

Une méthode de caractérisation de la fraction C_{7+} est donnée par Edmister (1988). Cette méthode repose sur la connaissance de la courbe TBP massique (température d'ébullition et densité) de la fraction considérée. Les différentes étapes de cette procédure sont les suivantes:

- La fraction pétrolière est décomposée en pseudo-composés selon la méthode de Simpson qui consiste à affecter à chaque fraction une fraction massique selon la répartition suivante:

$$m_1 = m_n = h/3 \quad (4.1)$$

$$m_i = (h/3)(3 + (-1)^i) \quad i = 2..n-1 \quad (4.2)$$

avec

m_i : fraction massique du pseudo-composé i .

$h = 1/n$: la largeur de la fraction modèle;

n : nombre de pseudo-composés.

- Les données de la T.B.P. permettent d'obtenir des valeurs de température d'ébullition et de densité discontinues. La méthode de Simpson ne peut pas être dans ce cas mise en œuvre. Un lissage de ces données est alors nécessaire. A partir des valeurs de la température et de la densité en fonction du pourcentage massique distillé, une interpolation de ces deux courbes est effectuée permettant de lisser les données expérimentales. Différentes formes mathématiques peuvent être envisagées, cependant, Pedersen et coll. (1989) recommandent d'utiliser pour le lissage de la T.B.P. un polynôme de degrés 5.
- A partir de l'équation polynomiale, une interpolation est mise en œuvre au point milieu de chaque fraction afin d'obtenir la température moyenne et la densité moyenne de la fraction étroite. Ces deux propriétés sont utilisées pour calculer la masse molaire, le facteur acentrique et les propriétés critiques par des corrélations telles que celles de Lee et Kesler (1975, 1976), Riazi (1980) ou Riazi et Al Sahhaf (1995).

- A partir de la masse molaire et de la densité de chaque fraction, la T.B.P. massique est convertie en T.B.P. molaire selon les étapes suivantes: chaque fraction massique générée par la méthode de Simpson est multipliée par la densité et divisée par la masse molaire. Les fractions molaires ainsi obtenues seront par la suite normalisées. Les fractions massiques ainsi obtenues seront:

$$x_i = \frac{\left(\frac{m_i}{M_i}\right)}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{m_i}{M_i}\right)} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.3)$$

avec

M_i : masse molaire du composé i du mélange;

m_i : fraction massique du composé i du mélange;

x_i : fraction molaire du composé i du mélange;

Cette méthode de caractérisation est assez facile à mettre en oeuvre du fait qu'elle ne nécessite que les données de la T.B.P. qui sont généralement disponibles.

4.2 Méthode de caractérisation de Pedersen, Thomassen et Fredenslund

Une autre approche est proposée par Pedersen et coll. (1989). Elle consiste à distinguer trois cas de figure:

1. Les composés définis: Cette classe contient les composés analysables par des méthodes physiques d'analyse telle que la chromatographie en phase gazeuse (N_2 , CO_2 , C_1 , C_2 , C_3 , iC_4 , nC_4 , iC_5 , nC_5 et C_6).
2. Les fractions distillables: Ces fractions sont issues de la distillation T.B.P. Les intervalles de distillations sont choisis de façon à ce que la majorité des hydrocarbures de même nombre d'atomes de carbone se retrouvent au sein d'une même fraction. Les fractions ainsi obtenues sont appelées fractions à nombre d'atomes de carbone défini.
3. Le résidu: Cette fraction pétrolière lourde ne peut pas être distillée (même sous-vide poussé). Toutefois, sa masse moléculaire et sa densité peuvent être mesurées.

La méthode de caractérisation consiste en:

- Les composés définis possèdent des valeurs de température critique, de pression critique et de facteur acentrique connues, et donc aucune caractérisation n'est nécessaire.
- Dans le cas des composés distillables, il est possible de calculer les propriétés critiques et le facteur acentrique, à partir de la connaissance de la masse molaire et de la densité.
- Dans le cas du résidu, la méthode de caractérisation proposée est la suivante:
 1. Estimation de la distribution molaire, c'est à dire exprimer la fraction molaire en fonction du nombre d'atomes de carbone, en considérant que le logarithme de la fraction molaire est linéaire en fonction du nombre d'atomes de carbone;
 2. Estimation de la distribution de densité, c'est à dire exprimer la densité en fonction du nombre d'atome de carbone, en considérant que la densité est linéaire en fonction du logarithme du nombre d'atomes de carbone;

3. Estimation de la distribution molaire, c'est à dire exprimer la masse molaire en fonction du nombre d'atomes de carbone, en considérant que $M = 14 C - 4$;
 4. A partir de la fraction molaire, de la densité et de la masse molaire, il est possible de calculer de T_c , P_c et ω des fractions lourdes par les équations proposées appliquées auparavant.
- Les coefficients d'interaction binaire sont considérés comme nuls dans le cas d'interactions d'hydrocarbures. Dans le cas des interactions d'hydrocarbures avec des non-hydrocarbures, les valeurs de coefficients d'interaction binaire sont données par Pedersen et coll.. Dans le cas des fractions C_{7+} , les coefficients d'interactions binaire sont égaux au coefficient d'interaction binaire du C_6 avec les non-hydrocarbures.

Par cette méthode, le pétrole brut est décrit par un nombre de pseudo-composés qui peut excéder 90. Une procédure de réduction du nombre de pseudo-composés est envisagée permettant d'obtenir à la fin les pseudo-composés suivants: (N_2 , CO_2 , CH_4 , C_2-C_3 (éthane, propane), C_4-C_6 (iC_4 , nC_4 , iC_5 , nC_5 , C_6), C_7-C_{15} (C_7 , $C_8 \dots C_{15}$), $C_{16}-C_{26}$ (C_{16} , $C_{17} \dots C_{26}$) et C_{27+} (C_{27} , C_{28} , $\dots C_{80}$)). Les notations C_2-C_3 , C_4-C_6 , C_7-C_{15} , $C_{16}-C_{26}$, C_{27+} représentent les pseudo-composés regroupant les composés décrits auparavant.

La méthode de caractérisation de Pedersen et coll. permet dans l'ensemble une caractérisation plus exhaustive des fractions pétrolière par rapport à la méthode d'Edmister. Cependant, cette méthode nécessite l'utilisation d'une variante de la T.B.P. permettant de grouper les fractions par nombre d'atomes de carbone, d'une méthode d'estimation de la masse molaire du résidu et d'un choix judicieux des pseudo-composés représentatifs qui n'est souvent pas aisé à mettre en œuvre.

4.3 Méthode de caractérisation de Whitson

Whitson (1983) a proposé d'exprimer la distribution de la composition des fractions C_{7+} en fonction de la loi gamma de distribution statistique. La fraction molaire x_i du composé i est exprimé en fonction de la masse molaire M_i , selon:

$$x_i = P(M_i) - P(M_{i-1}) \quad (4.4)$$

avec
$$P(M_i) = \frac{(M_i - \eta)^{\alpha-1} \exp(-(M_i - \eta)/\beta)}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \quad (4.5)$$

Γ : représente la fonction de distribution gamma;

M_i : représente la masse moléculaire du composé i ;

$P(M_i)$: représente la fraction molaire des composés de masse moléculaire inférieures ou égales à M_i ;

α , β , η : sont des paramètres qui varient en fonction de la nature de la fraction pétrolière.

La procédure de Whitson permet un choix approprié des pseudo-composés, mais dépend des paramètres α , β , η qui ne sont pas facilement accessibles et qui dépendent en fait de chaque fraction pétrolière.

5. Méthodes de calcul de propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques

5.1 Calcul du facteur de compressibilité

Comme nous l'avons souligné précédemment, une équation d'état cubique peut s'écrire sous une forme généralisée (équation 2.11). Cette équation est un polynôme du troisième degré en Z . Du point de vue mathématique, l'équation 2.11 admet au plus trois racines réelles distinctes, Toutefois, l'existence de racines triples ou doubles n'est cependant pas exclu.

Une des méthodes de résolution des équations cubiques a été proposée en 1545 par Cardan. Le principe de la méthode est le suivant:

En considérant l'équation cubique suivante:

$$Z^3 - kZ^2 + mZ - n = 0 \tag{5.1}$$

Si nous remplaçons Z par $(X+k/3)$, alors, nous aurons

$$X^3 + 3pX + 2q = 0 \tag{5.2}$$

avec

$$p = \frac{m}{3} - \left(\frac{k}{3}\right)^2 \tag{5.3}$$

$$q = \left(\frac{k}{3}\right)\left(p + \frac{m}{6}\right) - \frac{n}{2} \tag{5.4}$$

posons

$$h = p^3 + q^2 \tag{5.5}$$

En fonction des valeurs de h , l'équation (5.1) admet les racines suivantes:

- $h > 0$; (une racine réelle triple)

$$Z = \frac{k}{3} + (h^{0.5} - p)^{1/3} + (-h^{0.5} - p)^{1/3} \tag{5.6}$$

- $h = 0$; (deux racines réelles)

$$Z_1 = \frac{k}{3} + 2(-p)^{0.5} \tag{5.7}$$

$$Z_2 = Z_3 = \frac{k}{3} - (-p)^{0.5} \tag{5.8}$$

- $h < 0$; (trois racines réelles)

$$Z_j = \frac{k}{3} + 2(-p)^{0.5} \cos\left(\frac{\phi}{3} + 120(j-1)\right) \quad j = 1, 2, 3. \tag{5.9}$$

$$\phi = \text{Arc cos}\left(\frac{q}{p^{1.5}}\right) \tag{5.10}$$

Pour $h > 0$, l'équation d'état n'admet qu'une seule racine qui correspond soit à la phase vapeur, soit à la phase liquide.

Cardan, Jérôme (1501-1576), médecin, mathématicien, astronome et philosophe italien de la Renaissance. Cardan est connu des mathématiciens notamment pour la formule de résolution des équations du troisième degré, dite «formule de Cardan!», et des navigateurs pour l'invention du mécanisme destiné à rendre les boussoles indépendantes des mouvements du navire. Il écrivit plus de 200 traités. Son traité d'algèbre de 1545, *Arts Magna sive de regulis algebraicis*, contient les premières solutions publiées des équations cubiques et quartiques (dont la découverte est attribuée à Niccolò Fontana Tartaglia et Scipione da Ferro).

Pour $h = 0$, ce cas est fort improbable dans le cas des fluides réels.

Pour $h < 0$, l'équation d'état admet trois racines, la plus petite correspond à la phase liquide, la plus grande correspond à la phase gazeuse.

Il existe d'autres méthodes de résolution des équations cubiques, nous pouvons citer la méthode de Newton-Raphson, la méthode de Regula-Falsi, ou la méthode de la sécante. Toutes ces méthodes sont numériques et nécessitent des conditions pour la convergence, contrairement à la méthode de Cardan qui présente l'avantage d'être analytique.

5.2 Calcul des propriétés thermodynamiques des systèmes homogènes fermés

Dans le cas des systèmes homogènes fermés (vapeur surchauffée ou liquide refroidi), le calcul des propriétés thermodynamiques est simple à mettre en œuvre. A partir de la température et de la pression du système, nous calculons les paramètres A et B des équations d'état cubiques à partir des expressions des paramètres a et b donnés pour chaque équation d'état. Ces deux paramètres seront utilisés pour calculer les coefficients de l'équation cubique généralisée (équation 2.11). La résolution de cette équation par la méthode de Cardan donnera une seule solution correspondant à la phase liquide (liquide refroidi) ou à la phase vapeur (vapeur surchauffée). Les autres propriétés thermodynamiques (enthalpie résiduelle, entropie résiduelle, énergie libre de Gibbs résiduelle, énergie libre d'Helmholtz résiduelle, fugacité) sont obtenus par l'intermédiaire par exemple des équations 3.19, 3.20, 3.21, 3.22, 3.23.

5.3 Calcul des propriétés thermodynamiques des systèmes hétérogènes fermés

Dans le cas des systèmes hétérogènes fermés (équilibre liquide-vapeur), le calcul des propriétés thermodynamiques est plus complexe à mettre en œuvre. Dans le cas des corps purs, la règle de Gibbs (équation 1.49) donne un degré de liberté pour le système, et donc par exemple, si la température est fixée, la pression est déterminée de façon à ce que l'on ait égalité des fugacités des deux phases. Dans le cas des corps purs, la pression d'équilibre est la tension de vapeur. Nous allons présenter dans ce qui suit la méthode de détermination de la tension de vapeur des corps purs. Dans le cas des mélanges, la méthode de détermination de la pression d'équilibre des mélanges sera explicitée par la suite dans le chapitre *Méthodes de calcul des équilibres liquide-vapeur par les équations d'état cubiques*.

5.3.1 La tension de vapeur

La tension de vapeur est une pression d'équilibre entre un liquide et une vapeur. De par les considérations développées précédemment, l'équilibre thermodynamique ne peut avoir lieu que si le système hétérogène est à la même température et à la même pression, mais surtout que les fugacités des deux phases sont parfaitement égales. C'est cette dernière condition que nous allons exploiter pour déterminer la tension de vapeur. Comme nous l'avons vu précédemment, cette condition s'exprime par l'égalité suivante:

$$\ln\left(\frac{f^V}{f^L}\right) = Z^V - Z^L - \ln\left(\frac{Z^V - B}{Z^L - B}\right) - \frac{A}{B\sqrt{u^2 - 4w}} \ln\left(\frac{2Z^V + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z^L + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})} \cdot \frac{2Z^V + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z^L + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})}\right) = 0 \quad (2.96)$$

L'équation (2.96) est valable pour les fluides purs le long de la courbe de saturation où la phase vapeur et la phase liquide sont en équilibre. La résolution de cette équation par rapport à la pression donnera la pression de saturation. La résolution de cette équation se fait par les étapes suivantes:

1. Initialisation de la pression (équation d'Antoine par exemple, $P = P^{Antoine}$);
2. Calculer les paramètres A et B des équations d'état cubiques;
3. Résoudre l'équation 2.11 par rapport à Z par la méthode de Cardan. La résolution donne deux racines distinctes Z^L et Z^V ;
4. Calculer les fugacités en phase liquide et en phase vapeur, f^L et f^V .
5. Si $\ln\left(\frac{f^V}{f^L}\right) \geq \text{tolérance}$;

alors $P = P \cdot (f^L / f^V)$, aller à l'étape 2.

Si non P est la pression de saturation (tension de vapeur)

5.3.2 Propriétés thermodynamiques résiduelles à la saturation

Le calcul des propriétés résiduelles à la saturation ne peut se faire que si le système est totalement défini, et dans ce cas, la détermination de la pression de saturation est nécessaire. A partir de la valeur de la pression de saturation et de la température, les paramètres A et B seront calculés. Par la suite, l'équation 2.11 est résolu par rapport à Z . La résolution de cette équation donne deux racines distinctes Z^L et Z^V . Ces deux facteurs de compressibilité serviront à calculer les propriétés thermodynamiques résiduelles des deux phases à partir des équations 3.19, 3.20, 3.21, 3.22, 3.23 données précédemment.

Il faut noter que les propriétés thermodynamiques de vaporisation sont égales à la différence entre les propriétés résiduelles de la phase vapeur et les propriétés résiduelles de la phase liquide. Nous aurons dans ce cas:

Enthalpie de vaporisation

$$\Delta H = \left(\frac{H - H^*}{RT}\right)^V - \left(\frac{H - H^*}{RT}\right)^L \quad (5.11)$$

Entropie de vaporisation

$$\Delta S = \left(\frac{S - S_0^*}{RT}\right)^V - \left(\frac{S - S_0^*}{RT}\right)^L \quad (5.12)$$

6. Méthodes de calcul des équilibres liquide-vapeur par les équations d'état cubiques

Les équilibres liquide-vapeur jouent un rôle essentiel en Génie Chimique. Ce phénomène étant à la base d'une des opérations unitaires les plus importantes, à savoir la distillation. La conception de ces méthodes repose sur l'estimation des propriétés d'équilibre de phases de ces mélanges. Ceci est basé sur les résultats expérimentaux propres à chaque mélange, aux conditions de température et de pression du procédé. Ces données expérimentales sont rarement disponibles et dans la majorité des cas, nous ne pouvons y accéder que partiellement. Aussi, il faut donc nécessairement faire des prédictions qui doivent reproduire le plus fidèlement possible le phénomène d'équilibre entre phases.

Une des applications les plus répandues des équations d'état est la prédiction des équilibres de phase. Il faut toutefois noter que ce sont les équations d'état les plus récentes qui furent les premières à être utilisées pour le calcul d'équilibres liquide-vapeur. Les équations de Van der Waals et de Redlich-Kwong n'ont été utilisées - dans le cadre du calcul des équilibres liquide-vapeur - que pour calculer la fugacité en phase vapeur et ceci est dû au fait qu'elle ne permettent pas une bonne représentation des propriétés de la phase liquide. Par contre, les équations d'état récentes telles que les équations de Soave (1972), Peng et Robinson (1976) ont été appliquées avec succès au calcul des équilibres liquide-vapeur constituant de ce fait des modèles thermodynamiques applicables aux fluides au sens large du terme.

6.1 Calcul du coefficient d'équilibre par les équations d'état

Le coefficient d'équilibre K_i est une grandeur qui représente l'aptitude d'un composé à se partager entre la phase liquide et la phase vapeur. La relation (1.54) permet de définir le coefficient de partage:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\varphi_i^L}{\varphi_i^V} \quad i=1, 2 \dots n \quad (1.55)$$

Dans le cas des équations d'état cubiques et de la règle de mélange classique, le coefficient de fugacité s'exprime par l'équation (3.23):

$$\ln \varphi_i = \frac{b_i}{b_m} (Z-1) - \ln(Z-B) + \frac{A}{B\sqrt{u^2-4w}} \left(\frac{b_i}{b_m} - \delta_i \right) \ln \left(\frac{2Z + B(u + \sqrt{u^2 - 4w})}{2Z + B(u - \sqrt{u^2 - 4w})} \right) \quad (3.23)$$

Nous constatons que le coefficient de fugacité (de la phase considérée) dépend du facteur de compressibilité Z (de la phase considérée) et de la composition (de la phase considérée). Dans ce cas, le coefficient de partage dépend des facteurs de compressibilité des deux phases et de la composition des deux phases. Les deux facteurs de compressibilité sont obtenus par la résolution de l'équation (2.11). Dans le cas d'un équilibre liquide-vapeur, l'équation (2.11) admet trois racines, la plus grande correspond à la phase vapeur et la plus petite à la phase liquide. La connaissance des facteurs de compressibilité des phases permet de définir complètement le coefficient d'équilibre.

6.2 Définition des différentes propriétés d'un équilibre liquide-vapeur

Dans le cas d'un équilibre liquide-vapeur, le système est situé dans une région du diagramme $P-T-x-y$ où coexistent les deux phases. Les frontières de ce domaine sont appelées courbes de saturation, nous distinguerons dans ce cas la courbe de bulle, et la courbe de rosée. Les deux courbes précédentes convergent vers un point, appelé point critique où nous avons une identité parfaite des deux phases. L'ensemble de ces deux courbes et du point critique constituent la courbe de phase enveloppe du mélange (voir figure 6.1).

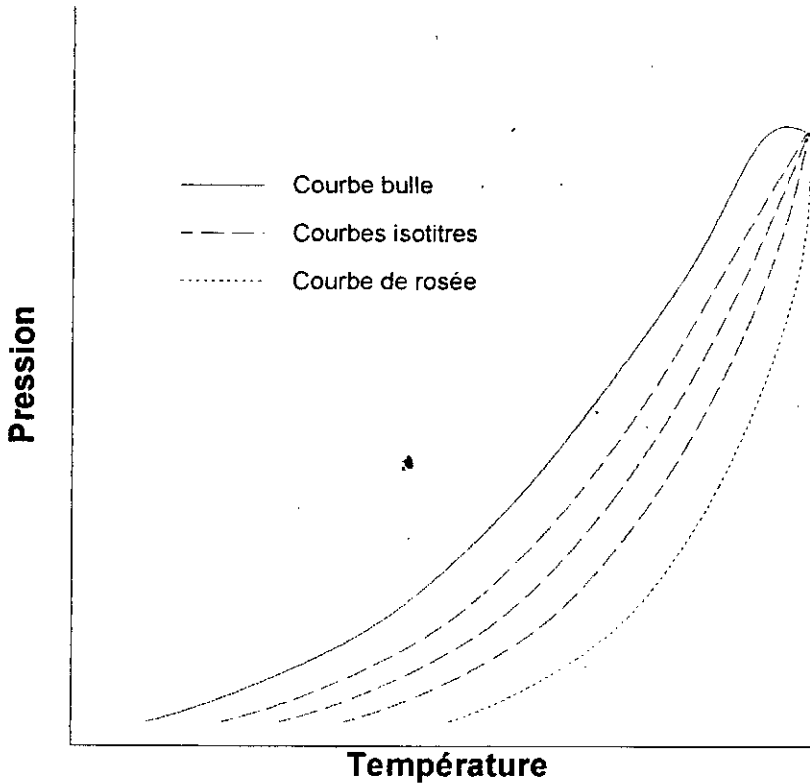


Figure 6.1 - Courbe de phase enveloppe

6.2.1 Point de bulle

Le point de bulle correspond à l'apparition de la première bulle de vapeur quand le système passe de l'état de liquide refroidi à l'état d'équilibre liquide-vapeur. Pour un liquide saturé de composition $z = x$ (vecteur composition), la première bulle de vapeur possède une composition y . La relation entre ces différentes grandeurs est la suivante:

$$\sum_{i=1}^n y_i = \sum_{i=1}^n K_i x_i = 1 \quad (6.1)$$

Le calcul du point de bulle consiste en la détermination de la pression (ou de la température) et le vecteur composition y connaissant la composition x et la température (ou la pression) données.

6.2.2 Point de rosée

Le point de rosée correspond à l'apparition de première gouttes de liquide quand le système passe de l'état de vapeur surchauffée à l'état d'équilibre liquide-vapeur. Pour une vapeur

saturée de composition $z = y$ (vecteur composition), la première goutte de liquide possède une composition x . La relation entre ces différentes grandeurs est la suivante:

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i / K_i = 1 \quad (6.2)$$

Le point de bulle correspond à un taux de vaporisation égal à zéro, tandis que le point de rosée correspond à un taux de vaporisation égal à l'unité. Entre ces deux coexistent les deux phases et le taux de vaporisation est compris entre zéro et un.

6.2.3 Flash isotherme

Le flash isotherme correspond à une vaporisation partielle du mélange initial. La vapeur ainsi générée est en équilibre avec le liquide correspondant. Le point de bulle est en fait un cas particulier de flash isotherme puisqu'il correspond à un taux de vaporisation égal à zéro, de même que pour le point de rosée qui correspond à un taux de vaporisation égal à un.

6.3 Méthodes numériques de calcul des équilibre liquide-vapeur

Durant les deux dernières décennies, il a été constaté le développement spectaculaire des possibilités d'utilisation des ordinateurs pour le calcul des procédés chimiques. Il en résulte la parution de nombreux articles et de quelques livres qui décrivent les techniques numériques pour le calcul des procédés de séparation comme la distillation, l'absorption et l'extraction. Cependant, ces publications traitent surtout des bilans thermiques et des bilans matières; les équilibres de phase nécessaires sont généralement supposés connus. Ce n'est qu'en 1967, que Prausnitz et coll. (1967) ont publié des méthodes de calcul sur ordinateur fondées sur des modèles thermodynamiques pour le calcul d'équilibre. Ce premier ouvrage a permis la multiplication des monographies traitant des équilibres liquide-vapeur, avec Renon et coll. (1971) et Prausnitz et coll. (1980).

Chaque type de calcul possède des variables définies et des variables inconnues (à déterminer):

Tableau 6.1 - Les différents types de calculs d'équilibre.

Cas	Equilibre	Variables spécifiées	Variables inconnues
1	Flash isotherme	P, T	V/F, y, x
2	Température de bulle	P, x = z	T, y
3	Pression de bulle	T, x = z	P, y
4	Température de rosée	P, y = z	T, x
5	Pression de rosée	T, y = z	P, x

T : température;

P : pression;

x : composition de la phase liquide;

y : composition de la phase vapeur;

z : composition de l'alimentation.

6.3.1 Calcul du flash isotherme

6.3.1.1 Généralités sur le calcul du flash isotherme

Le calcul du flash isotherme consiste à trouver la composition des deux phases, liquide et vapeur, en équilibre à une température et une pression donnée. Les expressions des équations de calcul de flash isotherme sont obtenues en combinant les bilans de matière et les relations d'équilibre. Pour chaque constituant, il faut calculer deux fugacités - une pour la phase vapeur et l'autre pour la phase liquide. Etant donné que la fugacité d'un constituant dans la phase liquide (ou vapeur) est fonction de la température, de la pression, et de la composition (P - T - x) de la phase, il est nécessaire de connaître, ou de supposer les valeurs P , T et x avant d'estimer la fugacité nécessaire pour calculer la propriété inconnue du système. Par conséquent, les relations d'équilibre et de bilan de matière sont obligatoirement couplées.

Le bilan de matière pour chaque constituant et le bilan de matière global d'un étage d'équilibre s'écrivent:

$$\text{Bilan de matière sur } i \quad v_i + l_i = f_i \quad (6.3)$$

$$\text{Bilan de matière global} \quad V + L = F \quad (6.4)$$

où

v_i : nombre de moles du constituant i en phase vapeur;

l_i : nombre de moles du constituant i en phase liquide;

f_i : nombre de moles du constituant i dans l'alimentation;

$V = \sum v_i$: nombre de moles total de vapeur;

$L = \sum l_i$: nombre de moles total de liquide;

$F = \sum f_i$: nombre de moles total dans l'alimentation.

Il existe plusieurs méthodes de calcul du flash isotherme, parmi ces méthodes nous avons:

6.3.1.2 Méthode de Rachford-Rice de calcul du flash isotherme

La méthode de calcul du flash isotherme par ordinateur la plus largement utilisée est la méthode donnée par Rachford et Rice (1952). La méthode consiste à la résolution de l'équation suivante:

$$\sum_{i=1}^n \frac{f_i(1-K_i)}{1+(V/F)(K_i-1)} = 0 \quad (6.5)$$

Il est souvent plus pratique d'exprimer l'équation (6.5) en terme de fractions molaire de l'alimentation z_i :

$$\sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n \frac{z_i(1-K_i)}{1+(V/F)(K_i-1)} = 0 \quad (6.6)$$

Les équation (6.5) et (6.6) ont une importante caractéristique du fait que leurs dérivées par rapport à V/F est toujours positives, ce qui assure la convergence de méthodes numériques de type Newton-Raphson pour la résolution de l'équation par rapport à V/F , à l'exception du cas où tous les coefficients d'équilibre sont égaux à un.

La méthode de Rachford-Rice couplée à la méthode de Newton-Raphson est utilisée par Edmister (1988) pour le développement d'un programme informatique de calcul du flash isotherme. L'algorithme de résolution du calcul flash par la méthode de Rachford-Rice est le suivant:

Algorithme de Rachford-Rice:

1. - Initialisation des K_i (corrélation empirique):

$$K_i = \frac{P_{Ci}}{P} \exp\left(5.37(1 + \omega_i)\left(1 - \frac{T_{Ci}}{T}\right)\right) \quad (6.7)$$

2. - Résolution de l'équation (6.5) ou (6.6) par rapport à V/F par une méthode numérique telle que:

- Méthode de Newton-Raphson;
- Méthode de Wegstein (Edmister, 1988);

3. - Calcul des x_i et y_i ($i=1, \dots, n$):

$$x_i = \frac{z_i}{1 + (V/F)(K_i - 1)} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (6.8)$$

$$y_i = \frac{z_i K_i}{1 + (V/F)(K_i - 1)} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (6.9)$$

4 - Critère d'arrêt:

$$\sum_{i=1}^n (y_i - K_i x_i)^2 \leq \text{Tolérance} \quad (6.10)$$

- Si le test de convergence est vérifié aller à l'étape 6;
- Sinon, aller à l'étape 5.

5 - Calcul $K_i(T, P, x, y)$ par une équation d'état (SRK, PR, VDWS, etc.); aller à l'étape 2.

6 - fin.

6.3.2 Calcul de la pression de bulle et de la pression de rosée

Dans le cas du calcul de la pression de bulle ou de la pression de rosée, le système possède $n+1$ degrés de liberté, qui correspondent à la pression (un degré de liberté) et à la composition (n degrés de liberté) de la phase liquide ou de la phase vapeur. La méthode idéale pour le calcul de la pression de bulle ou de rosée consiste à faire converger l'ensemble des $n+1$ variables simultanément. Cependant, la majorité des méthodes utilisent une boucle interne pour faire converger la composition et une boucle externe pour faire converger la pression. Le principe de cette est le suivant:

Algorithme de calcul de la pression de bulle

1. Initialisation de la pression;
2. Initialisation des coefficients d'équilibre K_i (équation 6.7);

3. Calcul de la composition de la phase vapeur à partir des coefficient d'équilibre initiaux,
 $y = K \cdot x$;
4. Normalisation de la composition en phase vapeur,

$$S_1 = \sum_{i=1}^n y_i$$

$$y = y / S_1$$
;
5. Calcul du coefficient d'équilibre par l'équation d'état cubique

$$K_i = \varphi_i^L(T, P, x) / \varphi_i^V(T, P, y)$$
;
6. Calcul de la composition de la phase vapeur à partir des coefficients d'équilibre calculés par l'équation d'état cubique

$$y = K \cdot x$$
;

$$S_2 = \sum_{i=1}^n y_i$$
;
7. Si $|S_1 - S_2| \geq \xi$, alors aller à l'étape 4;
8. Calcul de la nouvelle estimation de la pression, $P = P \cdot S_2$;
9. Si $|S_2 - 1| \geq \theta$, alors aller à l'étape 2;
10. Imprimer P, y ;
11. Fin.

Algorithme de calcul de la pression de rosée

1. Initialisation de la pression;
2. Initialisation des coefficients d'équilibre K_i (équation 6.7);
3. Calcul de la composition de la phase liquide à partir des coefficient d'équilibre initiaux,
 $x = y / K$;
4. Normalisation de la composition en phase liquide,

$$S_1 = \sum_{i=1}^n x_i$$

$$x = x / S_1$$
;
5. Calcul du coefficient d'équilibre par l'équation d'état cubique

$$K_i = \varphi_i^L(T, P, x) / \varphi_i^V(T, P, y)$$
;
6. Calcul de la composition de la phase liquide à partir des coefficients d'équilibre calculés par l'équation d'état cubique

$$x = y / K$$
;

$$S_2 = \sum_{i=1}^n x_i$$
;
7. Si $|S_1 - S_2| \geq \xi$, alors aller à l'étape 4;
8. Calcul de la nouvelle estimation de la pression, $P = P / S_2$;

9. Si $|S_2 - 1| \geq \theta$, alors aller à l'étape 2;
10. Imprimer P, x ;
11. Fin.

PARTIE CALCUL

7. Equations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe

La méthode de contribution de groupe est une méthode de calcul des propriétés physiques ou thermodynamiques des corps purs à partir de la contribution des groupements chimiques élémentaires constituant les molécules. Les premiers travaux ont porté sur le calcul des propriétés critiques (T_C , P_C et V_C) et ont été menés par Lydersen (1955). Rapidement, ce concept a connu un large succès, et depuis de nombreux chercheurs ont adopté cette méthode pour l'estimation d'autres propriétés telles que la chaleur spécifique liquide (Missenard, 1965), le facteur acentrique (Constantinou et coll., 1995), le coefficient d'activité (Fredenslund et coll., 1975) etc.

Dans le cadre de notre étude, nous allons utiliser cette méthode pour établir les paramètres de quelques équations d'état cubiques en fonction de contributions de groupe. Dans notre cas, nous nous sommes intéressés plus particulièrement au groupement $-CH_2-$ qui constitue l'incrément de base de l'ensemble des structures hydrocarbonées linéaires, particulièrement les n-alcanes, les n-alkylcyclohexanes, les n-cyclopentanes et les n-alkylbenzènes. L'estimation des paramètres a et b par la méthode de contribution de groupe présente l'avantage de ne nécessiter que la connaissance du nombre d'atomes de carbone et de la famille à laquelle appartient l'hydrocarbure. Le recours à une telle méthode est motivé par le fait que les propriétés critiques (paramètres de base des équations d'état cubiques), ne sont mesurables expérimentalement que pour des hydrocarbures de nombre d'atomes de carbone inférieur à douze, car au-delà, la majorité de ces hydrocarbures se décomposent avant d'atteindre leur point critique (Soave et coll., 1995). Aussi, leurs propriétés critiques sont estimées par des méthodes de calcul. Nous nous proposons d'exprimer les paramètres des équations d'état cubiques en fonction du nombre d'atomes de carbone. L'établissement d'une telle méthode de calcul permet de s'affranchir de ces propriétés, surtout dans le cas des hydrocarbures lourds.

7.1 Equations d'état cubiques à sept paramètres

7.1.1 Elaboration des équations d'état cubiques à sept paramètres

Nous avons considéré les quatre équations d'état cubiques suivantes: Van der Waals (1873), Redlich-Kwong (1949), Soave (1972) et Peng-Robinson (1976). Nous nous proposons d'exprimer les grandeurs a et b en fonction de sept paramètres (F_1 , F_2 , F_3 , F_4 , F_5 , F_6 et F_7) que nous définissons de la façon suivante:

Equation	b	a
VDW	$0.125 F_1$	$27/64 F_2$
RK	$0.08664 F_1$	$0.42748 F_2/\sqrt{T}$
SRK	$0.08664 F_1$	$0.42748 F_2(\sqrt{F_4}-\sqrt{F_5T})^2$
PR	$0.07780 F_1$	$0.45724 F_2(\sqrt{F_6}-\sqrt{F_7T})^2$

$$F_1 = RT_C/P_C \quad (7.1)$$

$$F_2 = RT_C^2/P_C \quad (7.2)$$

$$F_3 = \sqrt{T_C} \quad (7.3)$$

$$F_4 = (1 + 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)^2 \quad (7.4)$$

$$F_5 = (0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2) / Tc \quad (7.5)$$

$$F_6 = (1 + 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)^2 \quad (7.6)$$

$$F_7 = (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)^2 / Tc \quad (7.7)$$

A partir des données de l'API projet 44 (1972) et du DIPPR (1995), nous avons corrélé les paramètres $F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6, F_7$ en fonction du nombre d'atomes de carbone de 6 à 30 et ce pour les différentes familles chimiques étudiées. La forme générale de ces équations donnant un faible écart par rapport aux points expérimentaux est la suivante:

$$F_i = a_i + b_i / \left(1 + \left(\frac{N - c_i}{d_i} \right)^{e_i} \right) \quad (i=1,2,\dots,7) \quad (7.8)$$

Les constantes a_i, b_i, c_i, d_i, e_i dépendent du paramètre F_i et de la famille chimique des hydrocarbures étudiés. Les valeurs sont données dans les tableaux 7.1, 7.2 et 7.3.

Tableau 7.1 - Paramètres de l'équation (7.8) pour les n-alcane.

	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>R</i> ²
F_1	-4186.6974	25742.851	47.016086	21.698381	2	0.9996
F_2	-2.5562152 10 ⁸	1.4303278 10 ⁹	41.11304	18.639736	2	0.9997
F_3	17.643474	13.347626	0	8.9144694	-1.3716441	0.9998
F_4	-16.078133	31.68001	64.632722	76.051079	2	0.9997
F_5	-0.00350999	0.014576936	51.192257	34.258335	2	0.9997
F_6	-21.000902	32.356754	59.930528	93.828803	2	0.9995
F_7	-0.0066662679	0.013237344	60.585543	67.378151	2	0.9996

Tableau 7.2: Paramètres de l'équation (7.8) pour les alkylcyclohexanes.

	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>R</i> ²
F_1	-1581.9597	16855.462	32.499091	11.84785	2	0.997
F_2	-1.3700032 10 ⁸	1.2213231 10 ⁹	32.467698	11.365322	2	0.998
F_3	12.59146	20.842816	0	5.4268047	-0.83523592	0.998
F_4	-11.07098	23.754419	53.435078	56.691694	2	0.996
F_5	-0.003968	0.008587	33.01034	29.123128	2	0.997
F_6	-3.092901	11.487384	38.314882	32.462497	2	0.996
F_7	-0.003999	0.007587	32.442563	30.484809	2	0.997

Tableau 7.3: Paramètres de l'équation (7.8) pour les alkylbenzènes.

	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>R</i> ²
F_1	-11710.231	26396.738	62.293424	54.031513	2	0.9997
F_2	-4.560991 10 ⁸	1.2413812 10 ⁹	46.365537	33.029453	2	0.9997
F_3	18.907894	12.3504	0	8.5384424	-1.2781032	0.99997
F_4	-10.079041	22.803731	51.038698	53.453795	2	0.99999
F_5	-0.0039193857	0.010654115	45.24489	37.383487	2	0.99997
F_6	-10.958088	20.710525	47.936807	59.319429	2	0.99990
F_7	-0.0040069013	0.0087996982	43.756244	41.820847	2	0.99997

7.1.2 Application des équations d'état cubiques à sept paramètres

A partir des données des équations obtenues pour les corps purs, nous avons appliqué les équations à sept paramètres au calcul de l'enthalpie de vaporisation d'hydrocarbures à 298 K. La méthode de calcul consiste à déterminer à cette température la tension de vapeur du système et les facteurs de compressibilité liquide et vapeur, afin de déterminer l'enthalpie

résiduelle liquide et vapeur. La différence de ces deux dernières grandeurs, permet de calculer l'enthalpie de vaporisation à 298 K. Le tableau 6 donne les résultats obtenus à titre d'exemple lors calcul de la chaleur latente de vaporisation à 298 K de quelques hydrocarbures par les équations d'état classiques (*SRK* et *PR*) et les équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe (*SRKCG1* et *PRCG1*). Les valeurs expérimentales de la chaleur latente de vaporisation à 298 K sont données par Basarova et Svoboda (1995).

Tableau 7.4 - Comparaison entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales de la chaleur latente de vaporisation à 298 K (kJ/mol).

Composé	$H^{vap}(Exp)$	$H^{vap}(SRK)$	$H^{vap}(SRKCG1)$	$H^{vap}(PR)$	$H^{vap}(PRCG1)$
n-Hexane	32.28	31.32	30.74	30.70	30.42
n-Heptane	36.97	36.24	35.57	35.41	35.21
n-Octane	41.57	40.81	40.13	39.77	39.72
n-Nonane	46.10	45.33	44.49	44.07	44.03
Cyclohexane	32.77	31.85	30.58	31.12	33.31
Methylcyclohexane	36.31	34.13	34.87	33.32	36.79
Ethylcyclohexane	41.09	37.83	39.02	36.87	40.16
Benzène	33.24	33.11	31.54	32.34	30.80
Toluène	37.42	37.30	36.82	36.38	35.92
Ethylbenzène	41.92	41.41	41.54	40.33	40.46
Butylbenzène	50.80	49.80	50.15	48.34	48.69
Ecart absolu moyen (%)		2.64	3.57	5.55	3.97

Nous constatons que les écarts moyens obtenus par les équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe sont du même ordre que ceux des équations d'état classiques. L'équation d'état *SRK* donnant dans tous les cas de meilleures valeurs. Nous constatons de même que la connaissance d'un seul paramètre (nombre d'atomes de carbone) permet d'obtenir des résultats intéressants. Les écarts moyens obtenus se comparent favorablement aux écarts obtenus par les équations d'état classiques (Sator et coll., 1996a).

L'utilité de cette méthode réside dans le fait qu'elle ne nécessite que la connaissance du nombre d'atomes de carbone et de la nature de l'hydrocarbure. Nous pouvons constater dans les équations précédentes, que nous disposons de grandeurs communes aux sept paramètres. C'est le cas par exemple du paramètre F_3 qui est égal à la racine carrée du rapport F_2 sur F_1 , $F_3 = \sqrt{F_2/F_1}$. Dans le but d'améliorer l'accord entre les valeurs théoriques et expérimentales, une réduction de ces paramètres à quatre a été envisagée.

7.2 Equations d'état cubiques à quatre paramètres

7.2.1 Elaboration des équations d'état cubiques à quatre paramètres

Nous avons considéré lors de cette étude deux équations d'état cubiques, qui nous ont semblé les plus pertinentes et les plus connues, à savoir la modification de Soave (1972) de l'équation de Redlich-Kwong (1949) et enfin l'équation d'état de Peng-Robinson (1976). Dans le cas de ces deux équations d'état cubiques, nous avons constaté que deux grandeurs sont communes, les rapports T_C/P_C et T_C^2/P_C . Ces deux grandeurs sont donc considérées comme étant les deux premiers paramètres. Les grandeurs non communes sont les deux fonctions m de ces équations d'état. Dans ce cas, ces deux fonctions constituent les deux seconds paramètres que nous choisissons. Ces quatre grandeurs, ainsi définies, sont suffisantes pour calculer les paramètres a et b des équations d'état de Soave-Redlich-Kwong (*SRK*) et de Peng-Robinson (*PR*).

Les quatre grandeurs proposées sont donc les suivantes:

$$F_1 = T_c / P_c \quad (7.9)$$

$$F_2 = T_c^2 / P_c \quad (7.10)$$

$$F_3 = 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (7.11)$$

$$F_4 = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad (7.12)$$

L'étape suivante consiste à corrélérer ces quatre paramètres en fonction du nombre d'atomes de carbone. Pour cela, nous avons choisi de considérer tous les hydrocarbures appartenant aux trois familles chimiques suivantes: les n-alcane, les n-alkylcyclohexanes et les n-alkylbenzènes. Le choix de ces trois familles d'hydrocarbures est motivé par le fait que ces sont des familles constituantes des fractions pétrolières. Nous avons considéré, dans ce cas, tous les hydrocarbures de ces trois familles de nombre d'atomes de carbone compris entre six (6) et trente (30).

Les valeurs des paramètres critiques ont été tirées de l'API projet 44 (1972) et du DIPPR (1995). Cependant, quand elles ne sont pas disponibles, nous les avons estimées par la méthode de contribution de groupe de Joback et Reid (1984). Les valeurs du facteur acentrique ont été prises de l'API projet 44 (1972). Dans le cas des hydrocarbures pour lesquelles elles ne sont pas disponibles, nous les avons estimées par la méthode de contribution de groupe de Constantinou et coll. (1995).

L'étape suivante consistera à exprimer chacun de ces quatre paramètres en fonction du nombre d'atomes de carbone et cela pour chaque famille étudiée. Il est évident qu'un choix de modèle mathématique se pose à nous. La forme de la fonction mathématique que nous devons adopter, doit allier précision et simplicité. Il est communément établi que les polynômes possèdent ces deux qualités, mais présentent, l'inconvénient de ne pas permettre une extrapolation fiable en dehors du domaine d'étude. Dans notre cas, une extrapolation à des hydrocarbures de nombre d'atomes de carbone supérieur à trente n'est pas notre objectif et donc nous adoptons la forme polynomiale pour modéliser ces quatre paramètres. Le choix du degré du polynôme est important, car, si le degré du polynôme est élevé (le degré proche du nombre de points expérimentaux), la courbe engendrée aura tendance à interpoler les points expérimentaux, aux détriment d'un comportement régulier. Il est généralement admis que le degré du polynôme est compris entre trois et cinq. Dans notre cas, nous avons calculé la somme des carrés des écarts (SCE) entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées dans le cas du paramètre F_1 des n-alkylcyclohexanes. Les résultats obtenues sont données dans le tableau suivant:

Tableau 7.5 - Influence du degré du polynôme sur la SCE dans le cas du paramètre F_1 des n-alkylcyclohexanes

Degré du polynôme	SCE
1	722.321
2	11.4922
3	8.79066
4	5.78364
5	5.78103
6	5.54754
7	5.05017
8	5.02266

Au vu des résultats obtenus, nous constatons qu'à partir du degré quatre la SCE ne varie pas de manière significative. Dès lors, le choix d'un degré de polynôme plus élevé ne semble pas nécessaire. Le degré quatre est donc un compromis entre la précision et la simplicité du polynôme. Il est évident que ces conclusions ne sont applicables que pour le paramètre F_i des *n*-alkylcyclohexanes. Toutefois, les mêmes remarques peuvent être dressées dans le cas des autres paramètres. Dans ce cas la forme générale des paramètres en fonction du nombre d'atomes de carbone (N) est la suivante:

$$F_i = F_{i0} + F_{i1}N + F_{i2}N^2 + F_{i3}N^3 + F_{i4}N^4 \quad i = 1, 2, 3 \text{ et } 4 \quad (7.13)$$

Il est à noter que nous désignerons, au cours de ce travail, par données de référence, les valeurs expérimentales et les valeurs calculées par d'autres auteurs des propriétés physiques.

A partir des valeurs de référence des quatre propriétés, nous les avons corrélé en fonction du nombre d'atomes de carbone, en faisant la régression des données de référence selon un polynôme de degré quatre. Les coefficients des polynômes ainsi obtenus et les coefficients de détermination (R^2) sont données dans les tableaux suivants:

Tableau 7.6 - Paramètres de l'équation (7.13) pour les *n*-alcane.

<i>i</i>	F_i			
	1	2	3	4
F_{i0}	-8.80714	-8489.79	0.373194	0.280168
F_{i1}	6.10768	3789.98	0.119197	0.113341
F_{i2}	-0.426888	-232.34	-0.00520597	-0.00499275
F_{i3}	0.0224728	13.2398	0.000180441	0.000165818
F_{i4}	$-3.06309 \cdot 10^{-4}$	-0.1491	$-2.41315 \cdot 10^{-6}$	$-2.1945 \cdot 10^{-6}$
R^2	0.999680	0.999801	0.999783	0.999758

Tableau 7.7 - Paramètres de l'équation (7.13) pour les *n*-alkylbenzènes.

<i>i</i>	F_i			
	1	2	3	4
F_{i0}	-4.00996	-3499.67	0.39202	0.287359
F_{i1}	2.7642	1491.22	0.0714901	0.0707671
F_{i2}	-0.0537113	17.9355	-0.00037794	-0.00059062
F_{i3}	0.00511109	1.88805	$-4.52195 \cdot 10^{-6}$	$-3.30125 \cdot 10^{-6}$
F_{i4}	$-5.19876 \cdot 10^{-5}$	$5.392 \cdot 10^{-3}$	$4.347 \cdot 10^{-8}$	$5.25915 \cdot 10^{-8}$
R^2	0.999950	0.999955	0.99999	0.999989

Tableau 7.8 - Paramètres de l'équation (7.13) pour les *n*-alkylcyclohexanes.

<i>i</i>	F_i			
	1	2	3	4
F_{i0}	-0.781951	-1804.65	0.9378	0.802971
F_{i1}	2.134	1046.87	-0.082883	-0.0755348
F_{i2}	0.0433182	90.5996	0.012557	0.0117133
F_{i3}	$9.70995 \cdot 10^{-4}$	-1.17131	$-4.573 \cdot 10^{-4}$	$-4.33741 \cdot 10^{-4}$
F_{i4}	$9.23067 \cdot 10^{-6}$	0.0520966	$5.732 \cdot 10^{-6}$	$5.45493 \cdot 10^{-6}$
R^2	0.999826	0.999884	0.999694	0.999645

Nous constatons que pour l'ensemble des paramètres, le coefficient de détermination R^2 est supérieur à 0.999, ce qui semble a priori, donner un bon accord entre les valeurs de référence et les valeurs calculées par l'équation (7.13). Nous avons représenté les valeurs des paramètres calculées en fonction des valeurs de référence (figures 7.1, 7.2, 7.3 et 7.4).

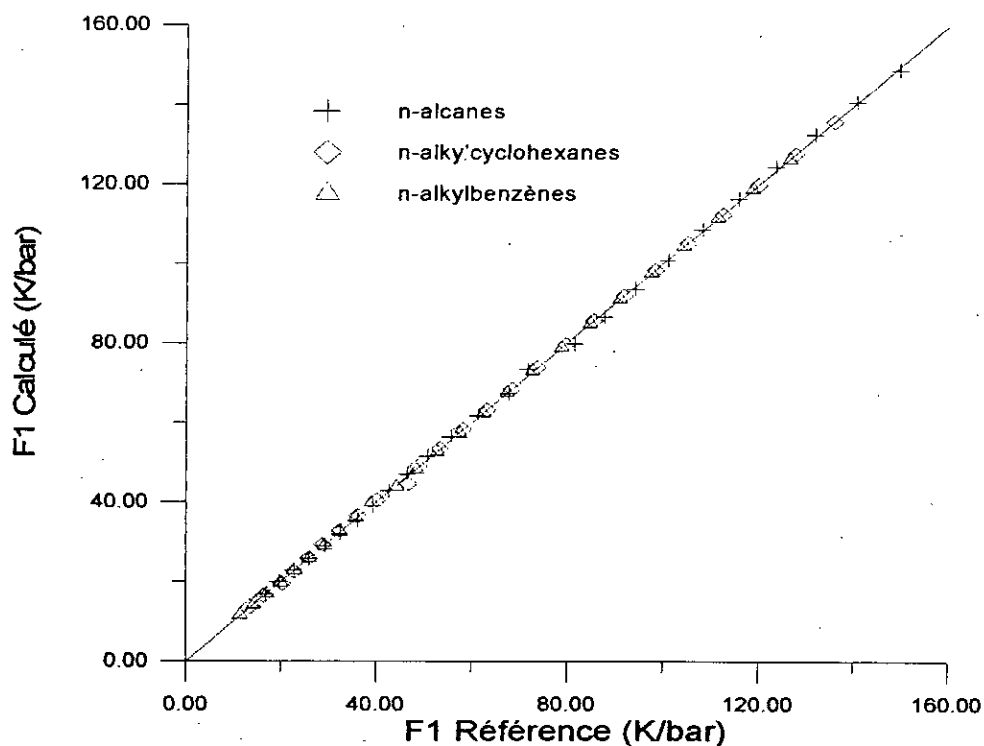


Figure 7.1 - Paramètre F_1 calculé en fonction du paramètre F_1 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures

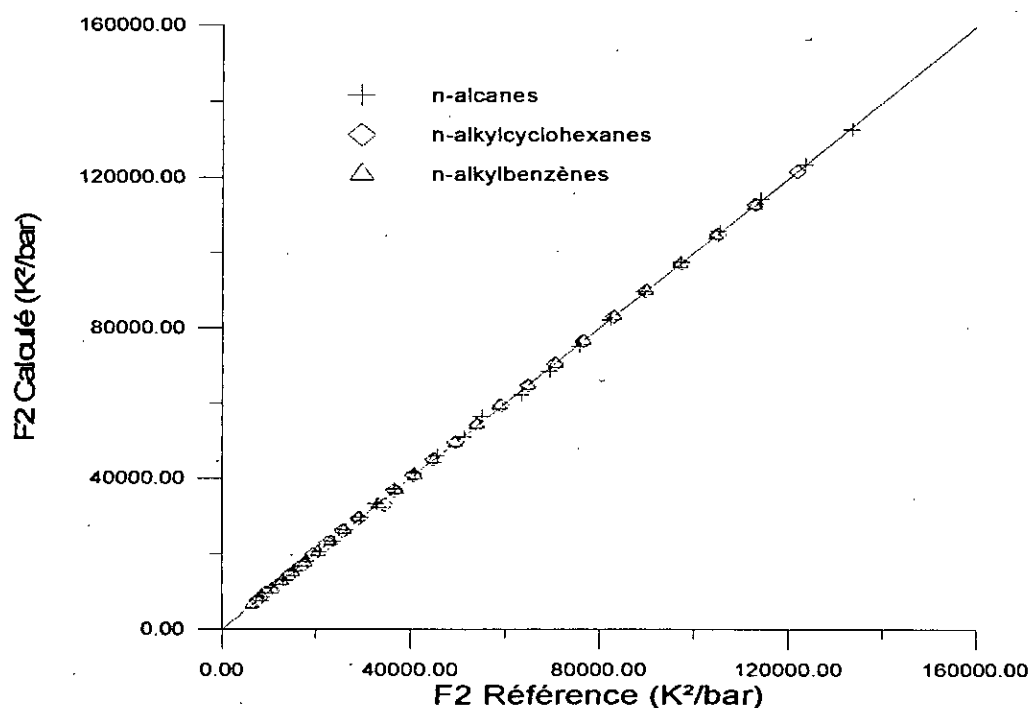


Figure 7.2 - Paramètre F_2 calculé en fonction du paramètre F_2 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures

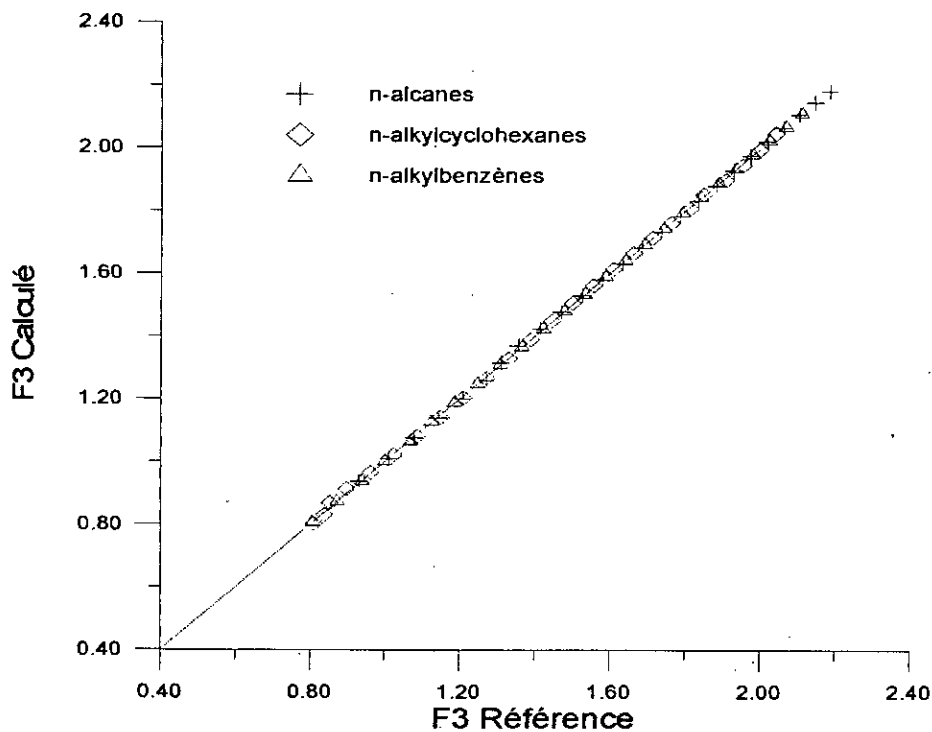


Figure 7.3 - Paramètre F_3 calculé en fonction du paramètre F_3 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures

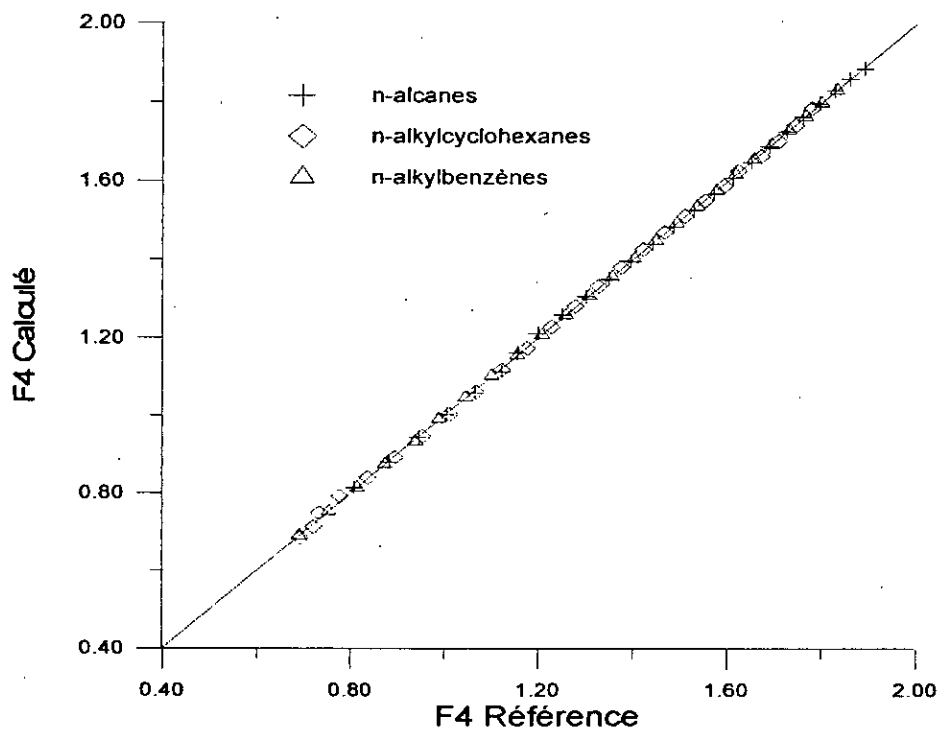


Figure 7.4 - Paramètre F_4 calculé en fonction du paramètre F_4 de référence pour les trois familles d'hydrocarbures

Nous pouvons noter - pour les quatre paramètres - la cohérence entre les valeurs calculées et les valeurs de référence. La majorité des points sont alignés par rapport à la première

bissectrice. Toutefois, en toute rigueur, nous donnons dans le tableau 7.9, les écarts absolus en pour-cent par rapport aux données de référence. Nous constatons que les erreurs moyennes sont relativement faibles (inférieures à 1 %). Toutefois, nous notons des écarts maximums assez élevés dans le cas des paramètres F_1 et F_2 (respectivement 4.34 % et 4.42 % dans le cas des n-alkylcyclohexanes).

7.2.2 Application des équations d'état à quatre paramètres

Les quatre paramètres déterminés auparavant permettent de déterminer les deux paramètres (a et b) des équations d'état cubiques couplées à la méthode de contribution que nous noterons par *SRKCG2* et *PRCG2*. Nous allons appliquer les deux équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe au calcul de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition et au calcul de la tension de vapeur dans un large domaine de température.

7.2.2.1 Application des équations d'état *SRKCG2* et *PRCG2* au calcul de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition

Cette méthode qui met donc en évidence la contribution du groupement $-CH_2-$ est appliquée à titre d'exemple au calcul de la chaleur latente de vaporisation à la température d'ébullition. Les données de l'enthalpie de vaporisation sont prises de l'API projet 44 (1972). Le tableau 7.10 regroupe les résultats obtenus par les équations d'état couplées à la contribution de groupe (*SRKCG2* et *PRCG2*). De plus, nous les comparons à ceux trouvés par les équations d'état classiques basées sur la connaissance des propriétés critiques et du facteur acentrique (*SRK* et *PR*).

Exemple de calcul

Nous allons calculer l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition du n-Décane par les équations *PRCG2* et *PR*.

La température du système est égale à la température d'ébullition. La pression étant par définition égale à 1.01325 bar.

PR

Les propriétés critiques et le facteur acentrique sont:

$$T_C = 617.5 \text{ K},$$

$$P_C = 21.02 \text{ bar},$$

$$T = T_B = 447.12 \text{ K},$$

$$\omega = 0.4902,$$

A partir des expressions des paramètres de l'équation d'état *PR*, nous avons:

$$A = 0.457235 (P_r T_r^2) \alpha$$

$$A = 5.6458 \cdot 10^{-2},$$

$$B = 0.077796 P_r T_r$$

$$B = 5.1793 \cdot 10^{-3},$$

Nous résolvons l'équation 2.11 par rapport au facteur de compressibilité. L'équation 2.11 admet deux solutions:

$$Z^L = 6.7452 \cdot 10^{-3},$$

$$Z^V = 9.4649 \cdot 10^{-1}$$

Nous utilisons l'équation (3.19) pour calculer l'enthalpie résiduelle des deux phases:

$$(H-H^*)^L = -9.62898 \text{ kCal/mol}$$

$$(H-H^*)^V = -1.4163 \cdot 10^{-1} \text{ kCal/mol}$$

L'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition est:

$$H^{*ab} = (H-H^*)^V - (H-H^*)^L \\ = 9.487 \text{ kCal/mol}$$

La valeur expérimentale (API projet 44, 1972) est égale à 9.388 kCal/mol, soit un écart absolu en pour-cent de 1.05 %.

PRCG2

Le nombre d'atomes de carbone est égal à 10. Les paramètres de l'équation *PRCG2* sont:

$$F_1 = 28.991,$$

$$F_2 = 1.79248 \cdot 10^4,$$

$$F_4 = 1.058176,$$

A partir des expressions des paramètres de l'équation d'état *PRCG2*, nous avons:

$$A = 0.45723 F_2 \cdot (P/T^2) \cdot F_4$$

$$A = 5.573486 \cdot 10^{-2},$$

$$B = 0.077796 F_1 (P/T)$$

$$B = 5.11127 \cdot 10^{-3},$$

Nous résolvons l'équation 2.11 par rapport au facteur de compressibilité. L'équation 2.11 admet deux solutions:

$$Z^L = 6.6557 \cdot 10^{-3},$$

$$Z^V = 9.4772 \cdot 10^{-1}$$

Nous utilisons l'équation (3.19) pour calculer l'enthalpie résiduelle des deux phases:

$$(H-H^*)^L = -9.60473 \text{ kCal/mol}$$

$$(H-H^*)^V = -1.3943 \cdot 10^{-1} \text{ kCal/mol}$$

L'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition est:

$$H^{*ab} = (H-H^*)^V - (H-H^*)^L \\ = 9.465 \text{ kCal/mol}$$

La valeur expérimentale (API projet 44, 1972) est égale à 9.388 kCal/mol, soit un écart absolu en pour-cent de 0.82 %

Tableau 7.9 - Ecart absolu en pour-cent obtenus lors du calcul des quatre paramètres pour les trois familles d'hydrocarbures

N	Ecart absolu en pour-cent											
	n-alcanes				n-alkylcyclohexanes				n-alkylbenzènes			
	F ₁	F ₂	F ₃	F ₄	F ₁	F ₂	F ₃	F ₄	F ₁	F ₂	F ₃	F ₄
6	0.43	0.02	0.73	0.79	1.51	0.36	1.02	1.16	1.67	0.81	0.08	0.09
7	1.23	1.56	0.16	0.19	0.84	2.63	0.94	1.01	0.54	0.60	0.02	0.02
8	0.40	0.82	0.20	0.23	3.57	3.19	1.87	2.14	0.25	0.06	0.04	0.04
9	0.20	0.06	0.33	0.35	0.63	1.06	1.71	1.93	0.95	0.31	0.06	0.07
10	1.33	1.20	0.70	0.71	0.14	1.51	0.35	0.40	0.20	0.18	0.50	0.53
11	1.14	1.19	0.97	0.98	1.83	2.28	0.39	0.42	0.74	0.57	0.18	0.19
12	1.73	1.91	0.49	0.51	1.30	1.64	0.70	0.75	0.47	0.48	0.14	0.14
13	0.50	0.73	0.95	0.98	1.34	1.50	0.73	0.79	0.35	0.20	0.09	0.09
14	0.51	0.29	0.63	0.64	0.89	0.94	0.60	0.65	1.15	0.90	0.05	0.06
15	1.19	0.98	0.34	0.35	4.34	4.42	0.39	0.41	2.16	1.88	0.01	0.01
16	1.50	1.34	0.11	0.11	0.60	0.55	0.15	0.16	0.57	0.84	0.00	0.00
17	1.35	1.27	0.07	0.08	0.44	0.38	0.05	0.07	0.63	0.86	0.02	0.02
18	0.62	0.66	0.19	0.20	0.27	0.22	0.21	0.24	0.55	0.68	0.03	0.03
19	0.79	0.58	0.25	0.26	0.07	0.04	0.30	0.35	0.33	0.29	0.03	0.03
20	2.21	2.38	0.27	0.27	0.11	0.21	0.32	0.38	0.20	0.05	0.03	0.03
21	2.21	2.04	0.23	0.24	0.22	0.25	0.27	0.33	0.13	0.50	0.02	0.02
22	1.50	1.40	0.16	0.17	0.20	0.14	0.17	0.23	0.40	0.97	0.01	0.01
23	0.78	0.74	0.07	0.08	0.02	0.02	0.03	0.07	0.17	0.29	0.00	0.00
24	0.14	0.13	0.02	0.02	0.00	0.05	0.14	0.10	0.10	0.24	0.00	0.01
25	0.23	0.15	0.11	0.12	0.04	0.06	0.30	0.27	0.00	0.10	0.01	0.01
26	0.48	0.39	0.17	0.18	0.00	0.02	0.26	0.24	0.03	0.09	0.01	0.02
27	0.61	0.48	0.19	0.20	0.06	0.11	0.45	0.42	0.09	0.04	0.02	0.02
28	0.52	0.48	0.15	0.15	0.05	0.08	0.37	0.34	0.07	0.02	0.01	0.01
29	0.05	0.05	0.01	0.01	0.05	0.14	0.13	0.08	0.04	0.08	0.01	0.00
30	0.55	0.44	0.23	0.24	0.00	0.03	0.31	0.41	0.11	0.04	0.02	0.02
Maximum	2.21	2.38	0.97	0.98	4.34	4.42	1.87	2.14	2.16	1.88	0.5	0.53
Moyen	0.93	0.89	0.32	0.34	0.77	0.91	0.51	0.56	0.50	0.46	0.06	0.06

Tableau 7.10 - Calcul de l'enthalpie de vaporisation des corps purs à la température d'ébullition par les équations SRKCG2 et PRCG2

N	Enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition (kCal/mol)														
	n-alcanes					n-alkylcyclohexanes					n-alkylbenzènes				
	Exp*	PR	PRCG2	SRK	SRKCG2	Exp*	PR	PRCG2	SRK	SRKCG2	Exp*	PR	PRCG2	SRK	SRKCG2
6	6.896	6.894	6.88	6.997	6.983	7.16	7.111	6.949	7.232	7.066	7.352	7.272	7.184	7.401	7.309
7	7.576	7.639	7.67	7.751	7.784	7.44	7.414	7.569	7.533	7.695	7.931	7.895	7.89	8.023	8.018
8	8.225	8.288	8.334	8.41	8.459	8.2	7.89	8.036	8.011	8.159	8.5	8.519	8.559	8.653	8.694
9	8.823	8.903	8.924	9.037	9.059	8.62	8.491	8.528	8.618	8.652	9.14	9.073	9.171	9.211	9.314
10	9.388	9.487	9.465	9.635	9.612	9.2	9.182	9.003	9.318	9.13	9.38	9.682	9.709	9.83	9.858
11	9.92	10.046	9.972	10.211	10.131		9.431	9.474	9.559	9.605		10.174	10.217	10.33	10.375
12	10.43	10.447	10.452	10.622	10.626		9.935	9.944	10.07	10.081		10.689	10.699	10.857	10.867
13	10.91	10.882	10.91	11.072	11.101		10.428	10.401	10.573	10.548		11.169	11.146	11.35	11.326
14	11.38	11.344	11.347	11.555	11.559		10.893	10.854	11.049	11.012		11.629	11.579	11.827	11.774
15	11.82	11.79	11.768	12.024	12.002		11.331	11.292	11.502	11.463		12.05	11.985	12.267	12.198
16	12.24	12.207	12.173	12.468	12.433		11.759	11.732	11.948	11.921		12.454	12.389	12.692	12.623
17	12.64	12.599	12.566	12.887	12.853		12.159	12.151	12.367	12.359		12.832	12.772	13.093	13.03
18	13.02	12.962	12.95	13.281	13.268		12.549	12.559	12.779	12.788		13.183	13.146	13.469	13.43
19	13.39	13.29	13.327	13.64	13.679		12.926	12.951	13.181	13.205		13.502	13.509	13.815	13.822
20	13.74	13.691	13.703	14.078	14.091		13.27	13.335	13.552	13.618		13.829	13.873	14.173	14.219
21		14.038	14.077	14.465	14.506		13.659	13.702	13.972	14.016		14.123	14.236	14.498	14.618
22		14.436	14.458	14.907	14.931		14.018	14.061	14.366	14.408		14.403	14.583	14.812	15.003
23		14.839	14.849	15.359	15.37		14.433	14.43	14.821	14.816		14.985	14.944	15.45	15.406
24		15.251	15.256	15.824	15.829		14.817	14.787	15.248	15.214		15.346	15.296	15.857	15.802
25		15.702	15.682	16.335	16.314		15.192	15.168	15.669	15.642		15.706	15.67	16.266	16.227
26		16.143	16.129	16.84	16.824		15.513	15.55	16.026	16.074		16.086	16.042	16.7	16.652
27		16.633	16.603	17.401	17.368		16.014	15.94	16.596	16.517		16.465	16.446	17.136	17.116
28		17.111	17.109	17.954	17.951		16.436	16.38	17.078	17.018		16.875	16.853	17.61	17.586
29		17.647	17.648	18.574	18.575		16.86	16.882	17.566	17.59		17.286	17.299	18.09	18.104
30		18.207	18.223	19.226	19.244		17.342	17.389	18.121	18.167		17.729	17.755	18.607	18.635

* : expérimental

Nous avons représenté pour chaque famille et pour chaque équation, la variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone. Les figures 7.5, 7.6, 7.7, 7.8, 7.9 et 7.10 illustrent ces résultats.

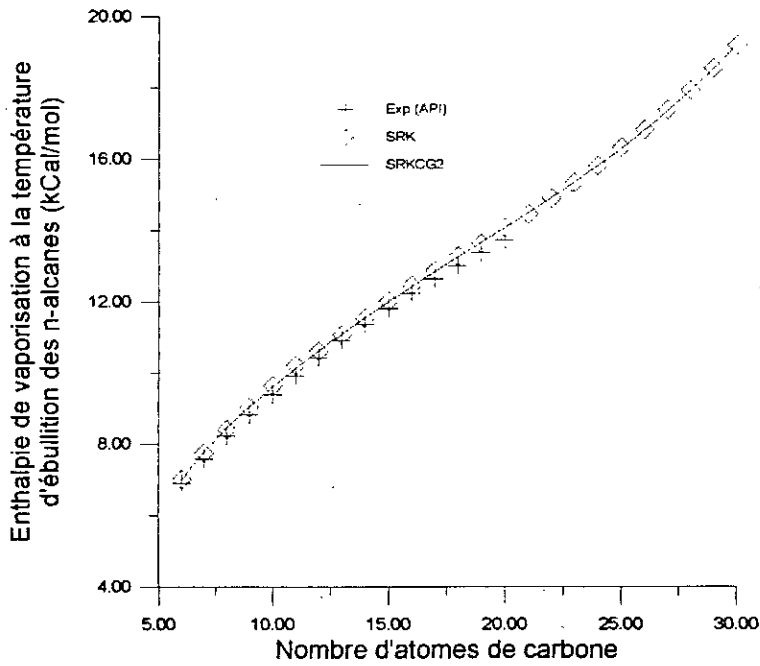


Figure 7.5 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alcanees. Comparaison entre les équations SRK et SRKCG2.

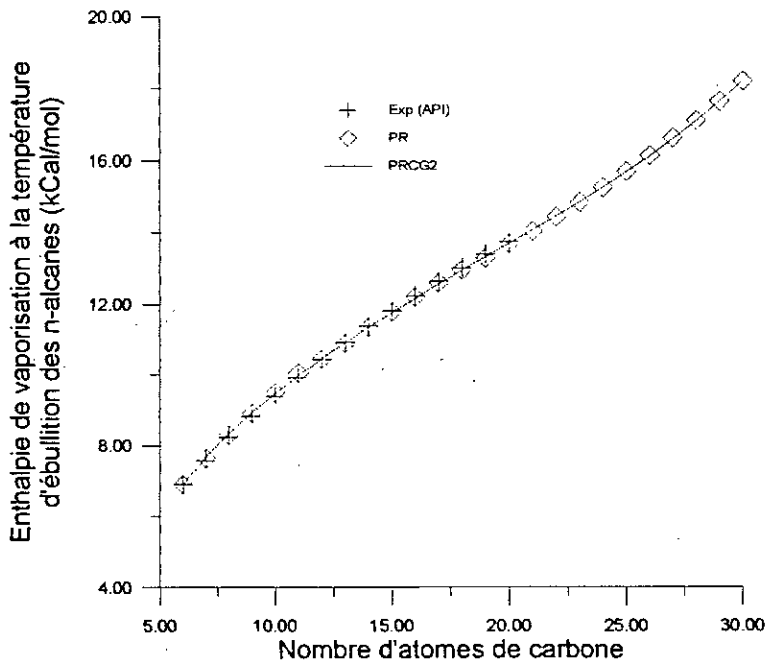


Figure 7.6 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alcanees. Comparaison entre les équations PR et PRCG2.

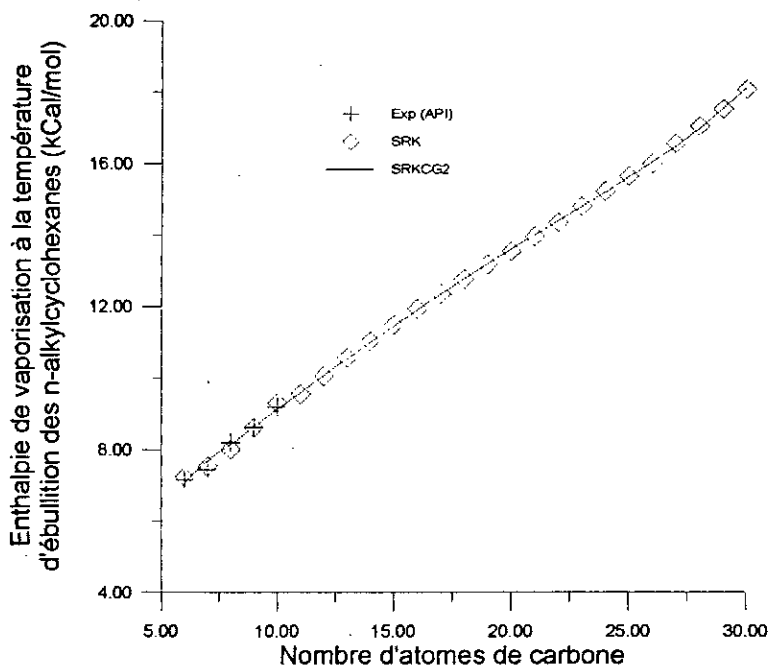


Figure 7.7 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylcyclohexanes. Comparaison entre les équations SRK et SRKCG2.

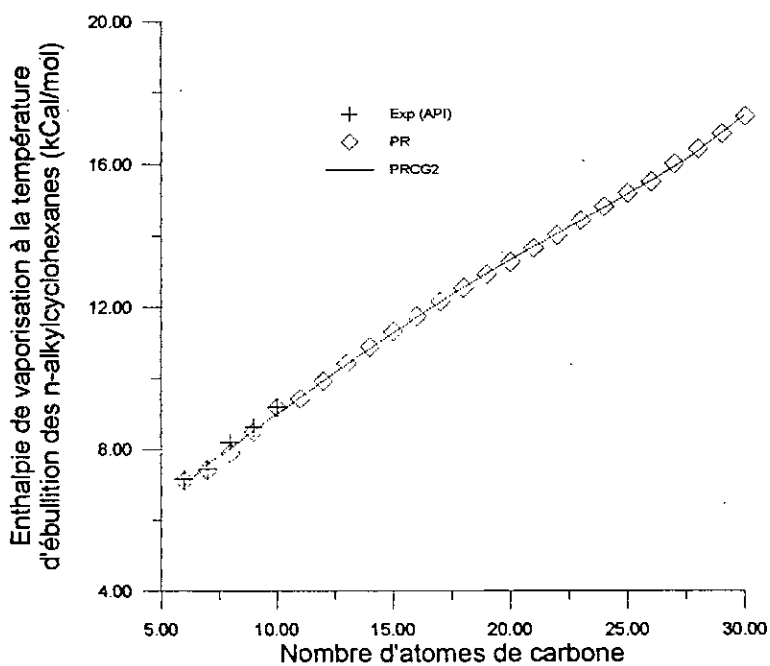


Figure 7.8- Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylcyclohexanes. Comparaison entre les équations PR et PRCG2.

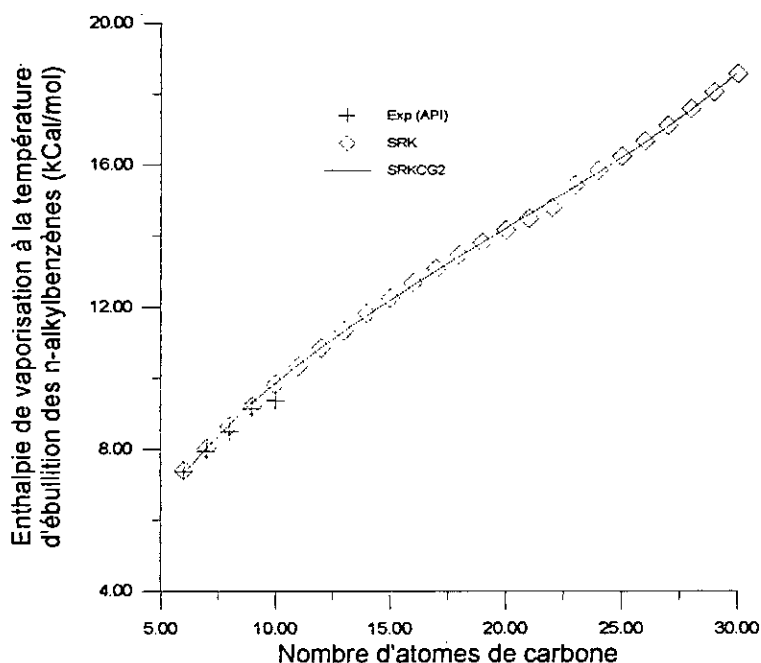


Figure 7.9 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylbenzènes. Comparaison entre les équations SRK et SRKCG2.

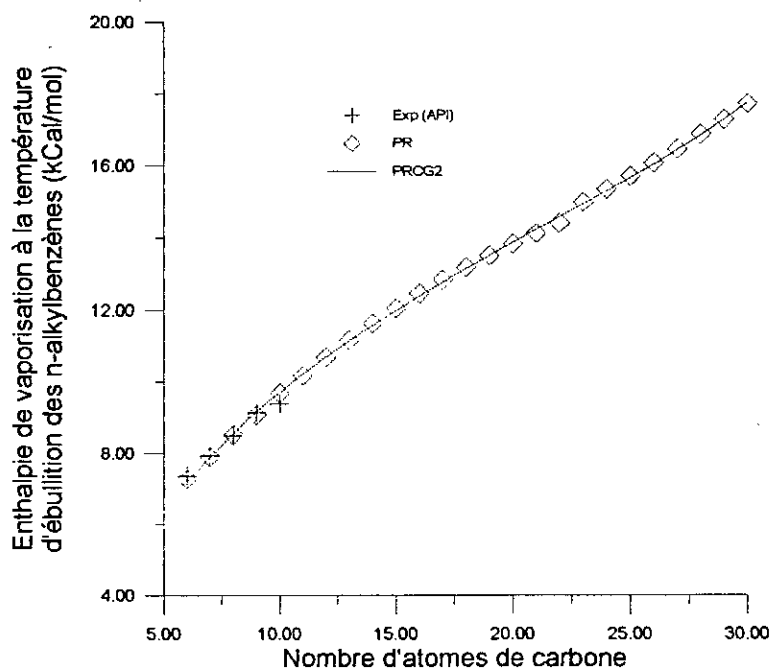


Figure 7.10 - Variation de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition en fonction du nombre d'atomes de carbone des n-alkylbenzènes. Comparaison entre les équations PR et PRCG2.

Nous pouvons remarquer que pour les trois familles d'hydrocarbures, les équations de type Peng-Robinson (PR et PRCG2) et les équations d'état de type Redlich-Kwong (SRK et SRKCG3) donnent des résultats très voisins.

Concernant les équations couplées à la méthode de contribution de groupe, nous pouvons constater qu'elles sont pratiquement confondues avec les équations d'état classiques. Ceci prouve que dans le cas de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition, le recours

aux quatre paramètres n'entraîne pratiquement aucun changement dans le comportement de l'équation d'état, mais offre surtout l'avantage de s'affranchir de contraintes telles que les propriétés critiques et le facteur acentrique (Sator et coll., 1996b). Il est nécessaire seulement de connaître que le nombre d'atomes de carbone et la nature de l'hydrocarbure.

7.2.2.2 Application des équations d'état SRKCG2 et PRCG2 au calcul de la tension de vapeur

Les données de tension de vapeur de l'ensemble des hydrocarbures n'étant pas disponibles dans leur totalité, nous allons suivre les recommandations de Reid et coll. (1988), en adoptant l'équation de tension de vapeur de Wagner - que nous donnons en annexe A - comme étant nos données de référence. L'équation de Wagner présente l'avantage de contenir des paramètres optimisés pour chaque hydrocarbure par lissage de données expérimentales de tension de vapeur. Les paramètres de l'équation de Wagner sont donnés par Reid et coll. (1988), ainsi que le domaine de validité de l'équation (température réduite minimale et 1.0). Dans le cas où ces paramètres ne sont pas disponibles (généralement à partir de dix atomes de carbone), nous avons utilisé l'équation de tension de Wagner généralisée par Twu et coll. (1994) - qui est valable du point triple au point critique - que nous donnons en annexe A. Le domaine de validité de l'équation de Twu et coll. est assez large, mais nous avons préféré l'appliquer pour les températures réduites comprises entre 0.5 et 1.0.

Nous avons calculé la tension de vapeur pour les hydrocarbures de nombre d'atomes de carbone compris entre six et vingt, car, pour un nombre d'atomes de carbone supérieur, l'équation de Twu et coll. (1994) ne permet pas une bonne représentation des données de tension de vapeur.

Dans le cas des deux équations (Wagner et Twu et coll.), nous avons fait un balayage du domaine de température réduite entre la valeur minimale de température réduite et un, avec un incrément de 0.05.

Dans le tableau 7.11, nous donnons les écarts moyens absolus obtenus lors du calcul de la tension de vapeur, dans le cas des équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe (SRKCG2 et PRCG2) et des équations d'état classiques (SRK et PR). L'ensemble des résultats sont donnés en annexe B.

Exemple de calcul

Nous allons calculer la tension de vapeur du n-Butylbenzène à la température réduite de 0.7.

Dans le cas du n-butylbenzène, les valeurs de référence de la tension de vapeur sont calculés par l'équation de Wagner. Les coefficients de cette équation sont (Reid et coll., 1988):

$$AI = -8.39978;$$

$$BI = 2.16916;$$

$$CI = -5.80532;$$

$$DI = 2.11591;$$

La valeur de la tension de vapeur à une température réduite de 0.7 est:

$$P^{1AP} = 1.1534 \text{ bar}$$

SRK

Les propriétés critiques et le facteur acentrique du n-butylbenzène sont donnés par l'API projet 44 (1972).

$$T_C = 660.3 \text{ K,}$$

$$P_C = 28.49 \text{ bar,}$$

$$T_B = 456.5 \text{ K,}$$

$$\omega = 0.3923$$

La tension de vapeur est initialisée à $P = 1.1545 \text{ bar}$. Les paramètres A et B calculés à cette pression sont:

$$A = 0.42748 (P_r/T_r^2) \alpha$$

$$A = 4.87972 \cdot 10^{-2}$$

$$B = 0.08664 P_r/T_r$$

$$B = 5.01558 \cdot 10^{-3}$$

La résolution de l'équation 2.11, donne deux racines:

$$Z^L = 6.5748 \cdot 10^{-3},$$

$$Z^V = 9.54423 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les fugacités des deux phases et nous comparons leurs valeurs. A cette pression, les fugacités ne sont pas égales et donc il faut changer la valeur de la pression en la multipliant par le rapport des fugacités. La nouvelle estimation est égale à 1.15340 bar.

Le calcul se poursuit selon la méthode présentée dans le chapitre Méthodes de calcul

des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques.

Le processus converge à la quatrième itération pour une valeur de la tension de vapeur égale à 1.15334 bar, soit un écart de 0.005 % par rapport à la valeur de référence.

SRKCG2

A partir du nombre d'atomes de carbone du n-butylbenzène, nous calculons les paramètres de l'équation d'état SRKCG2.

$$F_1 = 22.852,$$

$$F_2 = 1.51480 \cdot 10^4,$$

$$F_3 = 1.065,$$

La tension de vapeur est initialisée à une valeur égale à 1.15449 bar. Les paramètres A et B seront:

$$A = 0.42748 F_2 \cdot (P/T^2) \cdot F_4$$

$$A = 4.837 \cdot 10^{-2},$$

$$B = 0.08664 F_1 (P/T)$$

$$B = 4.945 \cdot 10^{-3},$$

La résolution de l'équation 2.11, donne deux racines:

$$Z^L = 6.4699 \cdot 10^{-3},$$

$$Z^V = 9.5481 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les fugacités des deux phases et nous comparons leurs valeurs.

A cette pression, les fugacités ne sont pas égales et donc il

faut changer la valeur de la pression en la multipliant par le rapport des fugacités.

La nouvelle estimation est égale à 1.13541 bar.

Le calcul se poursuit selon la méthode présentée dans le chapitre Méthodes de calcul des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques.

Le processus converge à la cinquième itération pour une valeur de la tension de vapeur égale à 1.13439 bar, soit un écart de 1.65 % par rapport à la valeur de référence.

Tableau 7.11 - Ecarts moyens absolus obtenus lors du calcul de la tension de vapeur pour les équations SRKCG2 et PRCG2

Hydrocarbures	Nombre hydrocarbures	Nombre Points	Ecart moyen absolu en pourcent			
			SRKCG2	Soave (1972)	PRCG2	Peng et Robinson (1976)
n-Alcanes	15	152	4.75	1.93	8.87	5.78
Alkylcyclohexanes	15	149	3.74	1.60	5.02	4.27
Alkylbenzènes	15	149	5.47	1.60	7.93	3.95
Moyenne générale	45	450	3.83	1.88	5.99	4.32

Nous pouvons constater à travers les résultats donnés dans le tableau précédent, que la prédiction de la tension de vapeur par nos méthodes conduit à des résultats en net retrait par rapport à SRK et PR. Cette différence est due au fait que les paramètres a et b sont sensibles à toute variation des rapports T_C/P_C et T_C^2/P_C . Par exemple pour le n-Eicosane, les erreurs enregistrées pour les paramètres F_1 et F_2 par rapport aux valeurs de référence (calculées à partir de T_C et P_C) sont égales à 2.21 % et 2.38 % respectivement. Cette erreur se propage lors du calcul de la tension de vapeur ou nous enregistrons un écart moyen de 11.23 % obtenu par l'équation PRCG2. Pour mieux illustrer cela, nous avons recalculé les écart par rapports aux données de tension de vapeur dans le cas du n-Eicosane, non plus en utilisant les paramètres F_1 et F_2 , mais en utilisant les rapports T_C/P_C et T_C^2/P_C expérimentaux. Nous avons constaté que, l'écart absolu moyen a baissé pour atteindre 6.42 % contre 11.23 % précédemment. De même que l'écart absolu moyen général qui est égal à 2.29 % contre 5.99 % précédemment. Ceci nous amène à proposer les solutions suivantes. Nous proposons de calculer les valeurs de T_C et P_C à partir de méthodes de contributions de groupes telles que les méthodes de Riazi et Al-Sahhaf (1995) qui permettent d'estimer les propriétés critiques des hydrocarbures étudiés avec une grande précision. Nous proposons de modifier les paramètres F_3 et F_4 afin de mieux représenter les données de tension de vapeur par les équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe.

7.3 Equations d'état Soave-Redlich-Kwong-Méthode-de-Contribution-de-groupe

A partir des constatations établies lors du travail précédent, nous proposons de modifier les fonction m des équations d'état cubiques en les exprimant en fonction du nombre d'atomes de carbone et de la température réduite. L'équation d'état cubique de Redlich-Kwong (1949) est la première équation d'état cubique appliquée avec succès à la prédiction des propriétés de la phase vapeur. Toutefois, des écarts importants sont enregistrés lors du calcul des équilibres liquide-vapeur par exemple. Plusieurs travaux ont tenté de modifier cette équation afin d'améliorer la prédiction de la tension de vapeur. Soave (1972) propose d'exprimer le paramètre a de l'équation de Redlich-Kwong, en introduisant un facteur alpha (équation 2.20). Ce facteur ne dépend que de la température et du facteur acentrique (équations (2.21) et (2.22)). De par sa simplicité et sa précision, l'équations de Soave (1972) s'est imposée comme une référence lors de la prédiction des propriétés des corps purs et des mélanges. Toutefois, Twu et coll. (1995b) ont noté que l'équation de Soave (1972) tend à diverger lors du calcul de la tension de vapeur pour de faibles valeurs de températures réduites, et ceci en particulier pour les hydrocarbures lourds.

Nous proposons d'apporter une amélioration à l'équation de Redlich-Kwong dans le cas des hydrocarbures lourds et des fractions pétrolières. Notre approche consiste à exprimer la valeur de alpha en fonction de la température et du nombre d'atomes de carbone pour différentes familles d'hydrocarbures représentatives des espèces chimiques présentes dans une fraction pétrolière.

7.3.1 Elaboration de l'équation d'état de Redlich-Kwong-Méthode-de-Contribution-de-Groupe

Nous avons étendu notre étude à d'autres familles d'hydrocarbures. Les familles d'hydrocarbures retenues sont: n-alcanes, iso-paraffines, n-alkylcyclohexanes, n-alkylbenzènes et n-alkylcyclopentanes. Les hydrocarbures considérés ont un nombre d'atomes de carbone variant avec la familles: n-alcanes (6 à 20), les n-alkylcyclohexanes (6 à 20) et les n-alkylbenzène (6 à 20), les iso-paraffines (4 à 20) et enfin les n-alkylcyclopentanes (5 à 20).

Les données (propriétés critiques et facteur acentrique) concernant les hydrocarbures sont prises de l'API projet 44 (1972) ou estimées par les différentes méthodes précédemment citées (Joback et Reid, 1984), (Constantinou et coll., 1995), sauf dans le cas des allylcyclopentanes, où les propriétés critiques et le facteur acentrique sont issus de l'API projet 44 (1972) ou calculés par la méthode de contribution de groupe de Riazi et Al-Saffaf (1995).

Nous utilisons des valeurs de références de tension de vapeur calculées par l'intermédiaire de l'équation généralisée de Twu et coll. (1994). L'intérêt de cette équation réside théoriquement dans son large domaine d'application (du point triple au point critique) et sa grande précision s'agissant des hydrocarbures lourds.

Nous déterminons la valeur de la fonction alpha pour chaque hydrocarbure entre $T_r = 0.3$ et $T_r = 1.0$ avec un incrément de 0.01 par la méthode de Soave décrite dans le chapitre *Equations d'état*. Cette méthode consiste à déterminer la valeur de alpha permettant le réajustement de la tension de vapeur calculée par l'équation d'état. Nous avons considéré que alpha varie en fonction de la température réduite selon la forme proposée par Soave (équation 2.21) et dans ce cas, nous calculons pour chaque hydrocarbure et pour chaque valeur de T_r , la valeur du paramètre m . Nous donnons en annexe C, les valeurs de m en fonction de la température réduite pour les différents hydrocarbures. Nous avons représenté sur la figure

7.11 les valeurs de m obtenues pour quelques hydrocarbures appartenant à la famille des n-alcanes à différentes températures réduites.

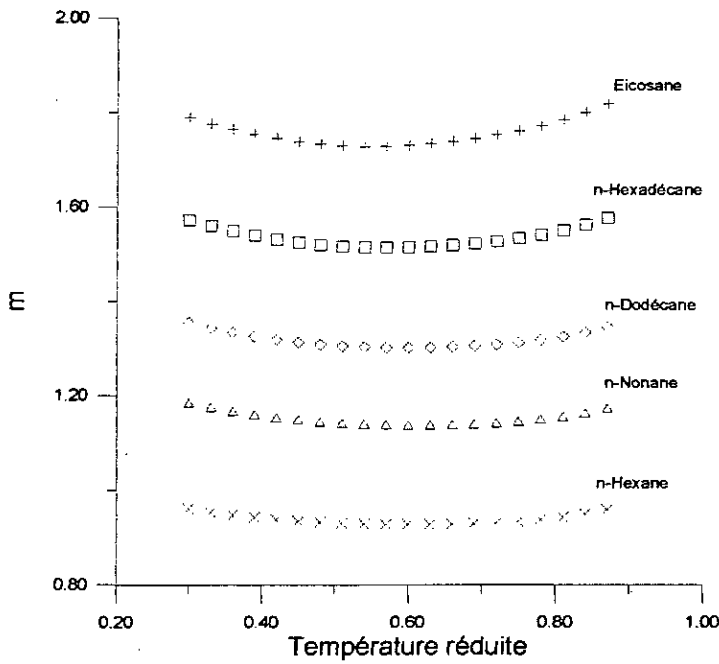


Figure 7.11 - Variation du paramètre m avec la température réduite pour quelques hydrocarbures.

La figure 7.11 montre l'évolution du paramètre m pour quelques hydrocarbures. Nous constatons que le paramètre m varie avec la température réduite pour chaque hydrocarbure. Contrairement à l'équation adoptée par Soave (équation 2.22) où m ne dépend que du facteur acentrique. La même constatation a été observée pour l'ensemble des hydrocarbures des cinq familles considérées. Nous proposons donc d'exprimer m en fonction de la température et du nombre d'atomes de carbone. La nouvelle forme est la suivante:

$$m = m_0 + m_1 T_r + m_2 T_r^2 + m_3 T_r^3 + m_4 T_r^4 \tag{7.14}$$

Les paramètres m_0, m_1, m_2, m_3 et m_4 sont obtenus par lissage des valeurs de m . Le tableau 7.12 donne les valeurs de ces paramètres pour quelques hydrocarbures.

Tableau 7.12 - Valeurs des paramètres m_0, m_1, m_2, m_3 et m_4 de l'équation SRKCG3 pour quelques hydrocarbures.

Hydrocarbure	m_0	m_1	m_2	m_3	m_4
n-Hexane	1.21823	-1.62839	3.73345	-4.08849	1.80032
n-Heptane	1.31230	-1.72684	3.89002	-4.21213	1.84529
n-Octane	1.40562	-1.81248	4.01101	-4.28845	1.89916
n-Nonane	1.48380	-1.87346	4.08151	-4.31157	1.87123
n-Décane	1.56254	-1.90231	4.11873	-4.29107	1.85442
n-Undécane	1.62885	-1.95467	4.12074	-4.23623	1.82426
n-Dodécane	1.70103	-1.97735	4.08958	-4.13438	1.77376
n-Tridécane	1.76256	-1.98612	4.03311	-4.01006	1.71513
n-Tetradécane	1.79978	-1.98657	3.98493	-3.91746	1.67254
n-Pentadécane	1.86066	-1.97841	3.88124	-3.73531	1.59040
n-Hexadécane	1.90287	-1.96600	3.79042	-3.58592	1.52417
n-Heptadécane	1.97117	-1.93406	3.61029	-3.30391	1.40103
n-Nonadécane	2.07257	-1.85749	3.26212	-2.78852	1.18056
Eicosane	2.13704	-1.78991	2.98900	-2.39980	1.01723

Hydrocarbure	m_0	m_1	m_2	m_3	m_4
Cyclohexane	1.00228	-1.36919	3.28124	-3.67322	1.63579
Methylcyclohexane	1.05065	-1.43029	3.39075	-3.77854	1.67862
Ethylcyclohexane	1.09195	-1.4813	3.4812	-3.86369	1.7128
Propylcyclohexane	1.16243	-1.56523	3.62708	-3.99646	1.76508
Butylcyclohexane	1.24934	-1.66214	3.78862	-4.13401	1.81731
Pentylcyclohexane	1.33336	-1.74733	3.92067	-4.2338	1.85265
Hexylcyclohexane	1.41416	-1.81968	4.02025	-4.29297	1.87025
Heptylcyclohexane	1.49163	-1.87893	4.08675	-4.31153	1.87042
Octylcyclohexane	1.5657	-1.92482	4.11942	-4.28921	1.85329
Nonylcyclohexane	1.63622	-1.95766	4.11946	-4.22821	1.8201
Decylcyclohexane	1.70334	-1.97793	4.08814	-4.13053	1.77188
Undecylcyclohexane	1.76727	-1.98647	4.02768	-3.99916	1.71007
Dodecylcyclohexane	1.82806	-1.98407	3.94038	-3.83729	1.63617
Tridecylcyclohexane	1.88592	-1.97168	3.82887	-3.64832	1.55173
Tetradecylcyclohexane	1.94102	-1.95008	3.69514	-3.43482	1.45792
Benzène	1.30254	-1.40757	3.35014	-3.73973	1.6629
Methylbenzène (Toluène)	1.12715	-1.52376	3.55555	-3.93217	1.73994
Ethylbenzène	1.21783	-1.62796	3.73273	-4.0879	1.8001
Propylbenzène	1.30254	-1.71714	3.87523	-4.20127	1.84151
Butylbenzène	1.39231	-1.80114	3.99626	-4.28088	1.86721
Pentylbenzène	1.46135	-1.85703	4.06439	-4.3093	1.87241
Hexylbenzène	1.53668	-1.90812	4.11029	-4.30268	1.86202
Heptylbenzène	1.60855	-1.94601	4.12299	-4.25667	1.83504
Octylbenzène	1.67697	-1.97126	4.10414	-4.17357	1.79278
Nonylbenzène	1.74227	-1.98437	4.05486	-4.05496	1.73607
Decylbenzène	1.80422	-1.98633	3.97836	-3.90538	1.66703
Undecylbenzène	1.86327	-1.97773	3.87587	-3.72637	1.58641
Dodecylbenzène	1.91938	-1.9598	3.75113	-3.52288	1.49644
Tridecylbenzène	1.97297	-1.93314	3.60532	-3.29621	1.39769

Par la suite, les paramètres m_0 , m_1 , m_2 , m_3 et m_4 sont exprimés sous la forme d'un polynôme de degrés trois en fonction du nombre d'atomes de carbone de chaque série homologue d'hydrocarbures.

$$m_i = m_{i_1} + m_{i_2} N + m_{i_3} N^2 + m_{i_4} N^3 \tag{7.15}$$

L'utilisation des équations 7.14 et 7.15 et 2.21 avec l'équation d'état de Redlich-Kwong forment la nouvelle équation d'état appelée *SRKCG3*.

Les meilleurs paramètres de l'équation (7.14) pour les différentes familles sont donnés dans le tableau 7.13, ainsi que les valeurs des coefficients de détermination R^2 . Nous constatons que la majorité des paramètres les coefficients de détermination tendent vers un, ce qui confirme le choix du polynôme de degré quatre.

Tableau 7.13 - Coefficients des paramètres m_0 , m_1 , m_2 , m_3 et m_4 pour les cinq familles d'hydrocarbures pour l'équation *SRKCG3*

i	m_{i_1}	m_{i_2}	m_{i_3}	m_{i_4}	R^2
<i>n-alcane</i>					
0	0.337036	0.192931	-0.00891432	0.000188136	0.999797
1	-0.689694	-0.215822	0.0105342	-0.000125629	0.999581
2	2.20051	0.367008	-0.0188988	0.000128949	0.999110
3	-2.81629	-0.325008	0.01853	-6.57821 10^{-5}	0.999254
4	1.31362	0.129515	-0.00799937	4.0771 10^{-5}	0.999286

<i>n-alkylcyclohexanes</i>					
0	0.905822	-0.0294035	0.00872161	-0.00023434	0.999821
1	-1.03563	-0.0195323	-0.00736255	0.000304543	0.999413
2	2.45759	0.0945809	0.00944543	-0.000557958	0.998769
3	-2.58086	-0.177433	-0.00241194	0.000461542	0.998736
4	1.12708	0.0922732	-0.000829046	-0.000149552	0.998907
<i>n-alkylbenzènes</i>					
0	0.395103	0.118045	-0.00195857	5.398 10 ⁻⁵	0.999938
1	-0.608969	-0.151874	0.00221005	0.000117025	0.995548
2	1.95824	0.264514	-0.00258672	-0.000372856	0.986754
3	-2.36363	-0.276841	0.00475208	0.000401097	0.990832
4	1.10411	0.116039	-0.00253839	-0.000154136	0.991396
<i>n-alkylcyclopentanes</i>					
0	0.53449	0.122994	-0.00109007	-3.33962 10 ⁻⁶	0.999457
1	-1.46834	-0.199116	0.00186081	0.000109298	0.999411
2	4.23911	0.407765	-0.00365679	-0.000269905	0.999334
3	-4.97789	-0.459601	0.00813908	0.000199699	0.999149
4	2.18597	0.198913	-0.00454184	-4.90727 10 ⁻⁵	0.999114
<i>iso-paraffines</i>					
0	0.574395	0.149562	-0.00458742	7.95725 10 ⁻⁵	0.999751
1	-1.53587	-0.24046	0.00736698	-6.11565 10 ⁻⁵	0.999499
2	4.38456	0.490292	-0.0147083	6.58823 10 ⁻⁵	0.999312
3	-5.17831	-0.52809	0.0180815	-0.000101524	0.999072
4	2.27957	0.223389	-0.00831974	6.67225 10 ⁻⁵	0.999025

7.3.2 Application de l'équation d'état SRKCG3 au calcul de la tension de vapeur

Nous avons utilisé l'équation *SRKCG3* pour le calcul de la tension de vapeur des différents hydrocarbures étudiés. En suivant les recommandations de Reid et coll. (1972), nous avons choisi l'équation de Wagner. Les coefficients et l'intervalle de validité (Tr_{min} et Tr_{max}) de l'équation de Wagner sont donnés par Reid et coll. (1972). Dans le cas où les paramètres de l'équation de Wagner ne sont pas disponibles, nous utilisons l'équation généralisée de Twu et coll. (1994) pour le calcul de la tension de vapeur. Celle-ci est calculée à partir de la valeur de $Tr_{min} = 0.5$ à $Tr_{max} = 1.0$. Dans le cas des deux équations (Twu et coll. et Wagner), nous calculons la tension de vapeur entre Tr_{min} et Tr_{max} avec un incrément de 0.05. Les résultats des différents calculs sont donnés en annexe B. Le tableau 7.14 donne les écarts absolus moyens en pour-cent enregistrés. L'écart moyen absolu en pour-cent global obtenu pour l'équation *SRKCG3* est légèrement supérieur à 1 % (1.17 %), contre 1.88 % pour l'équation *SRK*. Nous pouvons remarquer que les écarts obtenus sont souvent inférieures à 1% dans le cas des hydrocarbures lourds, il faut cependant préciser que dans le cas de ces hydrocarbures, nous avons utilisé comme référence l'équation de Twu et coll. (1994), qui est aussi l'équation de tension de vapeur utilisée pour la construction de notre équation d'état. Toutefois, la bonne reproduction des données de tension de vapeur générées par l'équation de Twu et coll., est d'un avantage certain car cette équation de tension de vapeur est particulièrement adaptée au traitement des hydrocarbures lourds. Nous savons que le critère de performance d'une équation d'état cubique est la bonne reproduction des données de tension de vapeur, et dans ce cas, l'équation d'état *SRKCG3* donne des résultats comparables avec l'équation d'état *SRK*. Les écarts absolus moyens sont assez faibles et cela sur un domaine de température réduite large (en moyenne entre $T_r = 0.5$ et 1.0). De plus, nous constatons donc une amélioration certaine par rapport à l'équation d'état *SRKCG2*.

Tableau 7.14 - Ecart absolu moyen en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Redlich-Kwong

Hydrocarbures	Nombre hydrocarbures	Nombre Points	Ecart absolu moyen en pour-cent	
			SRKCG3	Soave (1972)
<i>n</i> -alcanes	15	152	1.04	1.93
isoparaffines	5	58	1.06	2.37
alkylcyclopentanes	4	39	3.76	3.11
alkylcyclohexanes	15	149	1.39	1.60
alkylbenzènes	15	149	0.44	1.60
Moyenne générale	54	547	1.17	1.88

Exemple de calcul

Nous allons calculer la tension de vapeur du n-Hexylcyclohexane à la température réduite de 0.85.

Dans le cas du n-hexylcyclohexane, les valeurs de référence de la tension de vapeur sont calculés par l'équation de de Twu et coll. Pour une température réduite de 0.85, la tension de vapeur calculée est:

$$P^{VAP} = 3.50762 \text{ bar}$$

SRK

Les propriétés critiques et le facteur acentrique du n-hexylcyclohexane est donné par l'API projet 44 (1972).

$$T_C = 750.0 \text{ K,}$$

$$P_C = 16.4 \text{ bar,}$$

$$\omega = 0.5349$$

La tension de vapeur est initialisée à $P = 3.50762$ bar. Les paramètres A et B calculés à cette pression sont:

$$m = 1.3317$$

$$\alpha = 1.218577$$

$$A = 0.42748 (P_r/T_r^2) \alpha$$

$$A = 1.6637960 \cdot 10^{-1}$$

$$B = 0.08664 P_r/T_r$$

$$B = 2.35217 \cdot 10^{-2}$$

La résolution de l'équation 2.11, donne deux racines:

$$Z^L = 3.654 \cdot 10^{-2},$$

$$Z^V = 8.352 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les fugacités des deux phases et nous comparons

leurs valeurs. A cette pression, les fugacités ne sont pas égales et donc il faut changer la valeur de la pression en la multipliant par le rapport des fugacités. La nouvelle estimation est égale à 3.56165 bar.

Le calcul se poursuit selon la méthode présentée dans le chapitre *Méthodes de calcul des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques*.

Le processus converge à la huitième itération pour une valeur de la tension de vapeur égale à 3.5756 bar, soit un écart de 1.94 % par rapport à la valeur de référence.

SRKCG3

A partir du nombre d'atomes de carbone du n-butylbenzène, nous calculons les paramètres de l'équation d'état SRKCG3.

$$m_0 = 1.70824,$$

$$m_1 = -1.98555,$$

$$m_2 = 4.10352,$$

$$m_3 = -4.14676,$$

$$m_4 = 1.77865,$$

$$m = 1.36715,$$

$$\alpha = 1.224785,$$

La tension de vapeur est initialisée à une valeur égale à

3.50762 bar. Les paramètres A et B seront:

$$A = 0.42748 (P_r/T_r^2) \alpha$$

$$A = 1.672272 \cdot 10^{-1}$$

$$B = 0.08664 P_r/T_r$$

$$B = 2.35217 \cdot 10^{-2}$$

La résolution de l'équation 2.11, donne deux racines:

$$Z^L = 3.639 \cdot 10^{-3},$$

$$Z^V = 8.340 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les fugacités des deux phases et nous comparons leurs valeurs.

A cette pression, les fugacités ne sont pas égales et donc il faut changer la valeur de la pression en la multipliant par le rapport des fugacités.

La nouvelle estimation est égale à 3.50184 bar.

Le calcul se poursuit selon la méthode présentée dans le chapitre *Méthodes de calcul des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques*.

Le processus converge à la sixième itération pour une valeur de la tension de vapeur égale à 3.50038 bar, soit un écart de 0.21 % par rapport à la valeur de référence.

Nous avons représenté sur la figure 7.12, les écarts en pour-cent obtenus lors du calcul de la tension de vapeur pour différents hydrocarbures. Dans le cas des hydrocarbures considérés dans la figure 7.12, nous remarquons que l'écart en pour-cent a tendance à diminuer au fur et

à mesure que la température réduite augmente. Ceci pourrait s'expliquer par le fait que la forme adoptée pour le paramètre m (équation 7.14) est mieux plus performante dans le domaine de température proche du point critique. Nous donnons dans le tableau 7.15, les écarts absolus moyens en pour-cent (par rapport à l'équation de Wagner) constaté pour des valeurs de température réduite supérieures à 0.7. Nous constatons que les écarts moyens sont plus faibles sur l'intervalle considéré, et dans ce cas nous recommandons - plus particulièrement - l'utilisation de l'équation *SRKCG3* dans ce domaine de température.

Tableau 7.15 - Ecart absolu moyen pour des températures réduites supérieures à 0.7 pour quelques hydrocarbures

Hydrocarbure	Référence	Nombre points	Ecart moyen absolu en pour-cent	
			SRK	SRKCG3
n-Hexane	a	30	0.72	0.34
n-Heptane	a	30	1.87	1.00
n-Octane	a	30	1.26	0.41
n-Nonane	a	30	1.82	0.88
n-Décane	a	30	2.24	1.67
Cyclohexane	a	30	1.78	1.29
Méthylcyclohexane	a	30	2.30	1.66
Propylcyclohexane	a	30	1.63	2.63
Benzène	a	30	0.72	0.34
Méthylbenzène (Toluène)	a	30	1.87	1.00
Ethylbenzène	a	30	1.26	0.41
Propylbenzène	a	30	1.82	0.88
Butylbenzène	a	30	2.24	1.67

a : Wagner (Reid et coll., 1988).

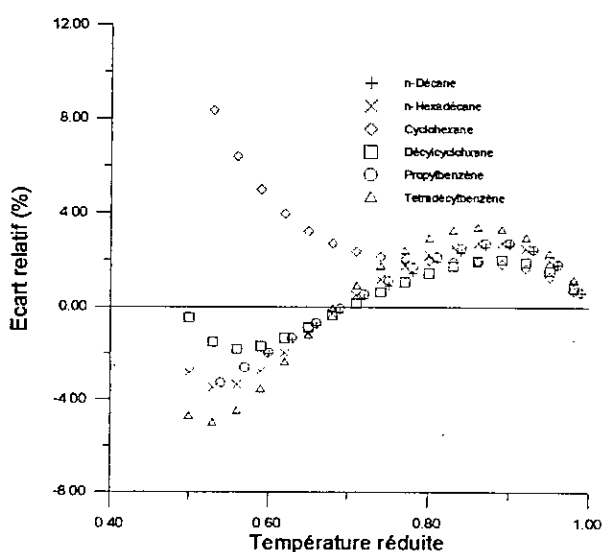
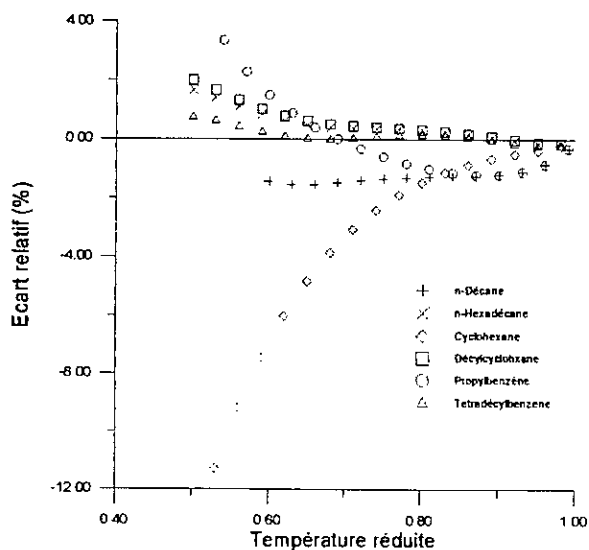


Figure 7.12 - Ecart relatif obtenu pour quelques hydrocarbures lors du calcul de la tension de vapeur par l'équation *SRKCG3*

Figure 7.13 - Ecart relatif obtenu pour quelques hydrocarbures lors du calcul de la tension de vapeur par l'équation *SRK*

7.4 Equation d'état Peng-Robinson-Méthode-de-Contribution-de-groupe

En adoptant la même méthode que pour la modification de Soave de l'équation de Redlich-Kwong, Peng et Robinson (1976) ont proposé une nouvelle équation de la forme:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + 2bV - b^2} \quad (2.27)$$

Le paramètre a est donné par l'équation (2.20). La fonction alpha adoptée par Peng et Robinson (1976) est la même que celle de l'équation de Soave (1972) (équation 2.21).

La fonction m de l'équation de Peng-Robinson est:

$$m = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad (2.30)$$

De la même manière que pour l'équation *SRKCG3*, nous nous sommes basé pour établir les paramètres de l'équation d'état *PRCG3*. Les valeurs du paramètre m pour les différents hydrocarbures sont données en annexe C. Le paramètre m a été modélisé selon l'équation (7.14) en fonction de la température réduite. Le polynôme de degré quatre donnant de faibles écarts avec les valeurs théoriques. Les paramètres m_0 , m_1 , m_2 , m_3 et m_4 ont été déterminés pour l'ensemble des hydrocarbures des cinq familles considérées. Le tableau 7.16 donne les valeurs de ces paramètres pour quelques hydrocarbures.

Tableau 7.16 -- Valeurs des paramètres m_0, m_1, m_2, m_3 et m_4 de l'équation *PRCG3* pour quelques hydrocarbures.

Hydrocarbure	m_0	m_1	m_2	m_3	m_4
n-Hexane	1.12305	-1.62839	3.73345	-4.08849	1.80032
n-Heptane	1.22622	-1.72684	3.89002	-4.21213	1.84529
n-Octane	1.31060	-1.81248	4.01101	-4.28845	1.89916
n-Nonane	1.38276	-1.87346	4.08151	-4.31157	1.87123
n-Décane	1.46437	-1.90231	4.11873	-4.29107	1.85442
Cyclohexane	0.92591	-1.37515	3.14204	-3.49375	1.51098
Methylcyclohexane	0.97252	-1.43340	3.24236	-3.58641	1.54619
Ethylcyclohexane	1.01231	-1.48082	3.32447	-3.66011	1.57354
Propylcyclohexane	1.08016	-1.56098	3.45501	-3.77191	1.61346
Butylcyclohexane	1.16373	-1.65141	3.59570	-3.88110	1.64912
Benzène	0.95507	-1.41178	3.20530	-3.55248	1.53339
Methylbenzène (Toluène)	1.04620	-1.52192	3.39125	-3.71824	1.59458
Ethylbenzène	1.13344	-1.61965	3.54759	-3.84555	1.63807
Propylbenzène	1.21484	-1.70212	3.66850	-3.92958	1.66247
Butylbenzène	1.30097	-1.77821	3.76413	-3.97475	1.66841

Nous avons exprimé les paramètres m_0 , m_1 , m_2 , m_3 et m_4 en fonction du nombre d'atomes de carbone des cinq familles considérés. L'équation (7.15) est utilisée pour exprimer la dépendance des paramètres m_0 , m_1 , m_2 , m_3 et m_4 en fonction du nombre d'atomes de carbone. Les paramètres en découlant sont donné dans le tableau 7.17.

Tableau 7.17 - Coefficients des paramètres m_0 , m_1 , m_2 , m_3 et m_4 pour les cinq familles d'hydrocarbures pour l'équation *PRCG3*

i	m_{i_1}	m_{i_2}	m_{i_3}	m_{i_4}	R^2
<i>n-alcane</i>					
0	0.350138	0.16755	-0.0071446	0.00014415	0.999759
1	-0.651387	-0.227489	0.0121357	-0.000167644	0.99906
2	1.86515	0.420491	-0.0252662	0.00029719	0.999386
3	-2.35038	-0.4303329	0.0275467	-0.000295415	0.999531
4	1.09557	0.154899	-0.0115359	0.000129772	0.999560

<i>n-alkylcyclohexanes</i>					
0	0.830154	-0.027555	0.00834917	-0.000225532	0.99983
1	-1.02853	-0.026763	-0.00641847	0.000286156	0.999299
2	2.27682	0.117752	0.00640991	-0.000498528	0.998481
3	-2.34846	-0.208005	-0.00165281	0.000381666	0.999285
4	0.977237	0.108624	-0.000310887	-0.000103612	0.999570
<i>n-alkylbenzènes</i>					
0	0.306454	0.12391	-0.00280883	3.01507 10 ⁻⁵	0.999962
1	-0.373866	-0.226925	0.00957976	-8.85639 10 ⁻⁵	0.999907
2	1.13249	0.479915	-0.00239339	0.000221724	0.999996
3	-1.35103	-0.540309	0.0311191	-0.00033258	0.999997
4	0.628431	0.23011	-0.0143423	0.000174031	0.999998
<i>n-alkylcyclopentanes</i>					
0	0.467639	0.120003	-0.00127957	-2.655 10 ⁻⁵	0.999430
1	-1.42382	-0.200959	0.00349984	6.43379 10 ⁻⁵	0.999077
2	3.90873	0.436535	-0.0112519	-5.04053 10 ⁻⁵	0.996414
3	-4.69725	-0.450232	0.0127139	7.90134 10 ⁻⁵	0.997168
4	2.04623	0.189266	-0.00642036	3.90975 10 ⁻⁷	0.996050
<i>iso-paraffines</i>					
0	0.514785	0.142161	-0.00428937	7.10129 10 ⁻⁵	0.999757
1	-1.54817	-0.216522	0.00627793	-2.07826 10 ⁻⁵	0.999588
2	4.27385	0.421902	-0.0118037	-4.32963 10 ⁻⁵	0.999414
3	-5.04865	-0.44385	0.014704	2.66734 10 ⁻⁵	0.999152
4	2.19817	0.182184	-0.00682451	1.03871 10 ⁻⁵	0.999017

7.4.1 Application de l'équation d'état PRCG3 au calcul de la tension de vapeur

Nous avons utilisé l'équation *PRCG3* pour le calcul de la tension de vapeur des différents hydrocarbures étudiés. En suivant les recommandations de Reid et coll. (1972), nous avons choisi l'équation de Wagner. Les coefficients et l'intervalle de validité (Tr_{min} et Tr_{max}) de l'équation de Wagner sont donnés par Reid et coll. (1972). Dans le cas où les paramètres de l'équation de Wagner ne sont pas disponibles, nous utilisons l'équation généralisée de Twu et coll. (1994) pour le calcul de la tension de vapeur. Celle-ci est calculée à partir de la valeur de $Tr_{min} = 0.5$ à $Tr_{max} = 1.0$. Dans le cas des deux équations (Twu et coll. et Wagner), nous calculons la tension de vapeur entre Tr_{min} et Tr_{max} avec un incrément de 0.05. Les résultats des différents calculs sont donnés en annexe B. Le tableau 7.18 donne les écarts absolus moyens en pour-cent. L'écart moyen absolu en pour-cent global obtenu pour l'équation *PRCG3* (1.20 %) est du même ordre de grandeur que l'équation *SRKCG3* (1.17 %). Nous constatons toutefois, que l'équation d'état *PR* ne permet pas une aussi bonne représentation de la tension de vapeur que l'équation d'état *SRK*. Ceci s'explique que l'intérêt de l'équation d'état *PR* réside dans son aptitude à mieux représenter l'état liquide que l'équation d'état *SRK*, en contre partie, une moins bonne représentation des équilibres (tension de vapeur) est enregistrée. D'autre part, cet état de fait n'est pas valable pour l'équation d'état *PRCG3* qui permet une bonne représentation des données de tension de vapeur et les résultats sont tout à fait comparables avec l'équation d'état *SRK* et *SRKCG3*.

Tableau 7.18 - Ecart absolu moyen en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Peng-Robinson

Hydrocarbures	Nombre hydrocarbures	Nombre Points	Ecart absolu moyen en pour-cent	
			PRCG3	Peng et Robinson (1976)
<i>n</i> -alcanes	15	152	1.17	5.78
isoparaffines	5	58	1.06	2.37
alkylcyclopentanes	4	39	3.76	3.11
alkylcyclohexanes	15	149	1.39	3.95
alkylbenzènes	15	149	0.44	4.27
Moyenne générale	54	547	1.20	4.32

Comme précédemment (équation *SRKCG3*), nous avons utilisé l'équation de Twu et coll. (1994) pour le calcul de la tension de vapeur des hydrocarbures lourds. Cependant, nous pouvons noter que dans le cas de l'utilisation des données de tension de vapeur calculées par l'équation de Wagner (Reid et coll., 1988), les équations *SRKCG3* et *PRCG3* donnent en général de meilleurs écarts que les équations *SRK* et *PR*. Nous avons porté dans le tableau 7.19, les écarts enregistrés par les différentes équations d'état lors de l'utilisation de l'équation de Wagner (Reid et coll., 1988). L'écart moyen sur les hydrocarbures considérées est plus faible dans le cas des équations d'état *PRCG3* et *SRKCG3* par rapport aux équations d'état *PR* et *SRK*.

Tableau 7.19 - Comparaison entre les différentes équations d'état cubiques lors du calcul de la tension de vapeur par l'équation de Wagner

Hydrocarbure	Référence	Nom. Points	Ecart moyen absolu en pour-cent			
			<i>SRK</i>	<i>SRKCG3</i>	<i>PR</i>	<i>PRCG3</i>
<i>n</i> -Hexane	a	58	1.77	0.80	1.85	0.90
<i>n</i> -Heptane	a	56	1.26	1.31	2.29	0.82
<i>n</i> -Octane	a	54	1.56	1.31	1.94	0.53
<i>n</i> -Nonane	a	42	1.66	0.70	1.72	1.18
<i>n</i> -Décane	a	40	1.54	0.54	1.26	1.00
Cyclohexane	a	47	2.84	3.50	3.08	3.50
Méthylcyclohexane	a	48	3.57	3.87	3.94	3.88
Propylcyclohexane	a	45	1.89	1.68	2.87	2.57
Benzène	a	49	0.75	0.49	1.25	0.49
Méthylbenzène (Toluène)	a	48	1.71	1.43	2.06	1.43
Ethylbenzène	a	47	1.04	0.37	0.88	0.36
Propylbenzène	a	46	1.77	1.03	0.87	1.03
Butylbenzène	a	44	2.13	1.32	1.12	1.33
Cyclopentane	a	44	0.34	1.45	0.90	1.41
Méthylcyclopentane	a	46	0.92	0.70	0.72	0.90
Ethylcyclopentane	a	47	1.57	2.58	0.95	2.72
Propylcyclopentane	a	46	9.66	9.19	9.37	9.21
Isobutane	a	60	1.31	0.75	2.52	0.75
Isopentane	a	52	1.37	1.29	0.98	1.29
Isohexane	a	52	1.20	0.97	1.07	0.96
Isoheptane	a	57	1.32	0.72	2.29	0.72
isooctane	a	55	1.30	0.82	2.16	0.82
Ecart moyen général		1082	1.97	1.65	2.10	1.66

a : Wagner (Reid et coll., 1988).

7.5 Conclusion

Dans cette partie du travail, nous nous sommes intéressés à l'établissement de nouvelles équations d'état basées sur la méthode de contribution de groupe. Nous avons proposé trois variantes d'équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe. La première variante est la méthode à sept paramètres. Cette méthode a été appliquée à différentes équations d'état cubiques. Cette méthode dans son ensemble ne donne pas de meilleurs résultats que les équations d'état cubiques, d'où l'idée de réduire le nombre de paramètres à quatre afin de mieux maîtriser le comportement des équations d'état couplées à la méthode de contribution. Cette réduction de paramètres donna lieu à la deuxième variante d'équations d'état cubiques couplées à la méthode de contribution de groupe. La nouvelle méthode a été appliquée à la prédiction de propriétés telles que l'enthalpie de vaporisation ou la tension de vapeur. Les résultats obtenus dans le cas de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition sont recevables, cependant, l'application à la tension de vapeur a donné des écarts trop importants, d'autant plus que la tension de vapeur représente le véritable "banc d'essai" de fiabilité des équations d'état. Cette état de fait, nous a poussé à voir les éventuelles sources d'erreurs. D'une part, les différents n'ont été que recorrélés en fonction du nombre d'atomes de carbone. D'autre part, Il s'est avéré que les deux premiers paramètres - de la méthode à quatre paramètres - influent grandement sur le comportement de l'équations d'état. Les corrélations proposées pour ces deux paramètres donnent malgré toutes leurs sophistication des erreurs, ces erreurs se propagent et génèrent des écarts lors de la prédiction de la tension de vapeur. Toutes ces constatations nous ont amené à reconsidéré notre approche et à proposer la troisième variante, qui à la différence des deux autres, permet d'élaborer les paramètres des équations d'état. Les résultats obtenus sont dans l'ensemble bon, les données de tension de vapeur sont dans l'ensemble reproduites avec des erreurs globales proches de 1 %, ce qui atteste de la fiabilité de la méthode proposée.

8. Equations d'état couplées à la loi des états correspondants

La loi des états correspondants est un des principes fondamentaux de la thermodynamique moderne. C'est en fait Van der Waals qui la fit connaître en 1880, en modifiant son équation d'état (1873), afin qu'elle soit unique pour tous les corps purs. Van der Waals a eu l'idée ingénieuse d'exprimer son équation, non plus en fonction de variables d'état (P , V et T), mais en fonction de variables réduites (P_r , V_r et T_r), représentées par les rapports P/P_c , V/V_c , T/T_c . Cette démarche est communément considérée comme étant la première tentative d'exprimer les lois de la physique en fonction de variables réduites.

L'énoncé de Van der Waals de la loi des états correspondants est le suivant:

Si deux substances pures possèdent le même volume réduit et la même température réduite, alors ils auront le même pression réduite

L'équation généralisée de *Van der Waals*, s'écrit alors:

$$P_r = \frac{3}{8} \frac{T_r}{V_r - 1} - \frac{3}{V_r^2} \quad (8.1)$$

$$P_r = \frac{P}{P_c} \quad (8.2)$$

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (8.3)$$

$$V_r = \frac{V}{V_c} \quad (8.4)$$

Cette équation d'état est unique pour tous les corps purs, et elle sert de guide aux essais préalables à la liquéfaction de l'hydrogène (J. Dewar, 1898) et de l'hélium (H. Kemerlingh Onnes, 1908).

La loi des états correspondants telle qu'elle a été énoncée par *Van der Waals* est souvent appelée loi des états correspondants à deux paramètres, car, si deux variables réduites sont fixées, alors la troisième découlera de l'équation (8.1).

L'équation de Van der Waals fut appliquée avec succès aux corps purs présentant une structure moléculaire supposée sphérique (hydrogène, gaz rares, méthane). Toutefois, des écarts importants furent enregistrés dans le cas de molécules de structure moléculaire complexe. D'où la nécessité d'introduire un troisième paramètre tenant compte de la non-sphéricité de la molécule. Plusieurs chercheurs se sont penchés sur ce problème (Riedel, 1954), (Martin et Hou, 1955). Le facteur acentrique de Pitzer (1955) qui rend compte de cette imperfection a été rapidement adopté comme troisième paramètre. Depuis lors, plusieurs chercheurs (Pitzer, 1955), (Lee et Kesler, 1975) adoptèrent la loi des états correspondants à trois paramètres pour exprimer des grandeurs thermodynamiques telles que le facteur de compressibilité, l'enthalpie résiduelle, l'entropie résiduelle, le coefficient de fugacité, etc..

Dans la présente étude, nous allons utiliser la loi des états correspondants pour déterminer la fonction alpha des équations d'état de Redlich-Kwong, de Peng-Robinson et de Van der Waals.

8.1 Elaboration des équations d'état généralisées

8.1.1 Elaboration de l'équation d'état Redlich-Kwong-Généralisée

Twu et coll. (1995b) ont constaté qu'en représentant la fonction alpha en fonction du facteur acentrique, on obtient une série de droite dont la pente varie avec la température réduite. A partir de cette constatation, ils ont proposé d'exprimer la fonction alpha sous la forme suivante par analogie mathématique avec la loi des états correspondants:

$$\alpha = \alpha^{(0)} + \omega(\alpha^{(1)} - \alpha^{(0)}) \quad (8.5)$$

avec

$\alpha^{(0)}$: représente la valeur de la fonction alpha dans le cas des molécules dites parfaitement sphériques ($\omega = 0$). Ce paramètre est déterminé à partir de l'ordonnée à l'origine de la droite $\alpha=f(\omega)$;

$\alpha^{(1)}$: correspond à la valeur de la fonction alpha dans le cas d'un n-alcane hypothétique dont le facteur acentrique est égal à 1. Ce paramètre est déterminé à partir de $\alpha^{(0)}$ et de la pente de la droite $\alpha=f(\omega)$.

La forme mathématique des fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ doit être choisi judicieusement afin de représenter correctement les données de tension de vapeur des corps purs (Twu et coll., 1995b). La forme mathématique adoptée par Twu et coll. (1995a, 1995b) est la suivante:

$$\alpha = T_r^{N(M-1)} e^{L(1-T_r^{NM})} \quad (8.6)$$

Les fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ proposées par Twu et coll. (1995b) pour l'équation de Redlich-Kwong sont les suivantes:

$$\alpha^{(0)} = T_r^{-0.171813} e^{0.125283(1-T_r^{1.77634})} \quad (8.7)$$

$$\alpha^{(1)} = T_r^{-0.607352} e^{0.511614(1-T_r^{2.20517})} \quad (8.8)$$

Nous proposons dans notre étude d'exprimer la fonction alpha selon l'équation (8.5) dans le cas de données de tension de vapeur calculées à partir de l'équation de Twu et coll. (1994). A partir de données de tension de vapeur - générées par l'intermédiaire de l'équation de tension de vapeur de Twu et coll. (1994) - nous déterminons les valeurs d'alpha pour des températures réduites comprises entre 0.3 et 1.0 avec un incrément de 0.01. Les hydrocarbures considérés sont les n-alcane du méthane ($\omega = 0.0115$) au n-Eicosane ($\omega = 0.9079$). Nous avons choisi ces hydrocarbures, car en général leurs propriétés critiques et leurs facteurs acentriques sont disponibles dans la littérature (DIPPR, 1995), de plus, ils permettent un "balayage" du domaine de détermination des fonctions $\alpha^{(0)}$ ($\omega = 0$) et $\alpha^{(1)}$ ($\omega = 1$).

Nous donnons dans le tableau 8.1 quelques valeurs de la fonction alpha obtenues pour différentes valeurs de la température réduite (l'ensemble des résultats est donné en annexe D).

Tableau 8.1 - Variation de la fonction alpha de l'équation d'état de Redlich-Kwong en fonction de la température et du facteur acentrique

ω	Température réduite					
	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80
0.0115	1.4647769	1.3735109	1.2980096	1.2309243	1.1692601	1.1116171
0.0995	1.6495989	1.5101013	1.3983422	1.3027853	1.2180941	1.1415625
0.1523	1.759837	1.5914587	1.4581359	1.3457305	1.24737	1.15955
0.2002	1.8594909	1.6649299	1.5121332	1.3845751	1.2739075	1.1758791
0.2515	1.965892	1.7432986	1.5697169	1.4260536	1.3023019	1.193377
0.3013	2.068896	1.8190926	1.6253871	1.4661967	1.3298361	1.2103713
0.3495	2.168352	1.8922108	1.6790661	1.5049356	1.3564547	1.2268257
0.3996	2.271506	1.9679832	1.7346628	1.545083	1.3840877	1.2439335
0.4435	2.361724	2.034204	1.783223	1.5801643	1.4082699	1.2589273
0.4897	2.456513	2.103731	1.8341792	1.6169865	1.4336861	1.2747086
0.5303	2.539691	2.164702	1.8788402	1.6492649	1.4559926	1.2885779
0.5764	2.634009	2.233799	1.9294243	1.6858267	1.481287	1.3043262
0.6174	2.717787	2.295139	1.9743049	1.7182655	1.503752	1.3183318
0.643	2.77005	2.333389	2.002279	1.7384837	1.5177638	1.3270762
0.6863	2.85837	2.398	2.049513	1.7726184	1.5414366	1.341865
0.7174	2.921748	2.444345	2.083377	1.797088	1.5584183	1.3524856
0.7697	3.028228	2.522171	2.140217	1.8381513	1.5869358	1.3703425
0.8114	3.11304	2.58413	2.185444	1.8708161	1.6096371	1.3845766
0.8522	3.195953	2.644676	2.229618	1.9027129	1.6318169	1.3984998
0.9079	3.309042	2.727219	2.28981	1.9461608	1.6620461	1.4175009

Nous avons exprimé alpha en fonction du facteur acentrique pour des valeurs de température réduite constantes (figure 8.1). Nous constatons que la fonction alpha est linéaire en fonction du facteur acentrique. Dans ce cas, l'équation (8.5) est parfaitement applicable à nos données de tension de vapeur.

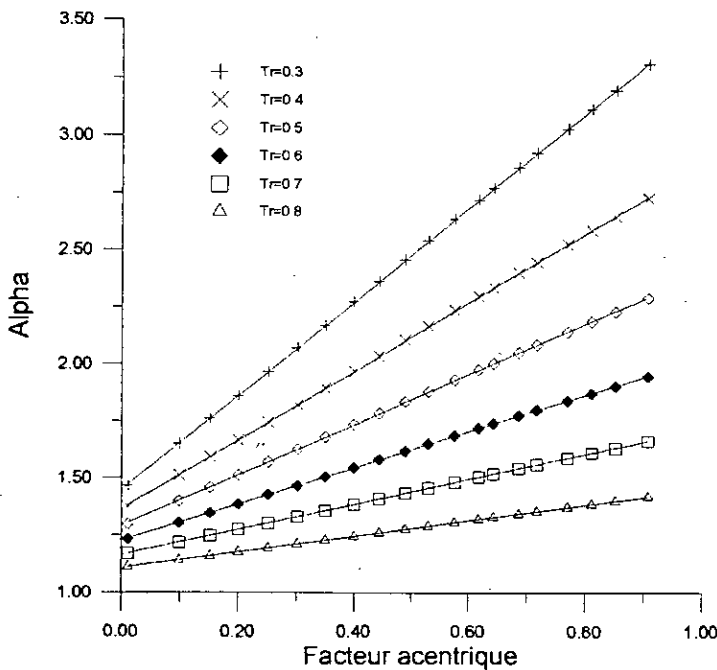


Figure 8.1 - Variation de alpha de l'équation de Redlich-Kwong en fonction du facteur acentrique.

L'étape suivante consiste à déterminer les pentes et les ordonnées à l'origine de la série de droites ainsi obtenues. L'ordonnée à l'origine représente la valeur de $\alpha^{(0)}$, tandis que la pente représente la valeur de $(\alpha^{(1)} - \alpha^{(0)})$. Nous donnons dans le tableau 8.2, les valeurs des fonctions $\alpha^{(1)}$ et $\alpha^{(0)}$ pour différentes valeurs de la température réduite.

Tableau 8.2 - Valeurs des fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ dans le cas de l'équation de Redlich-Kwong

T_r	$\alpha^{(0)}$	$\alpha^{(1)}$	T_r	$\alpha^{(0)}$	$\alpha^{(1)}$	T_r	$\alpha^{(0)}$	$\alpha^{(1)}$
0.3	1.45473	3.49903	0.5	1.29712	2.39245	0.7	1.16525	1.713072
0.31	1.44537	3.42673	0.51	1.29015	2.35139	0.71	1.1592	1.68496
0.32	1.43624	3.35666	0.52	1.28322	2.3113	0.72	1.15321	1.657255
0.33	1.42732	3.28873	0.53	1.27632	2.272124	0.73	1.14729	1.629957
0.34	1.41862	3.22289	0.54	1.26945	2.233825	0.74	1.14143	1.60304
0.35	1.4101	3.15903	0.55	1.26262	2.196371	0.75	1.13563	1.576496
0.36	1.40177	3.09709	0.56	1.25582	2.159715	0.76	1.12988	1.550306
0.37	1.39359	3.03696	0.57	1.24905	2.123817	0.77	1.1242	1.524478
0.38	1.38557	2.97862	0.58	1.24232	2.088651	0.78	1.11857	1.498984
0.39	1.37769	2.92196	0.59	1.23563	2.054182	0.79	1.113	1.473828
0.4	1.36993	2.86692	0.6	1.22898	2.020377	0.8	1.10747	1.448979
0.41	1.36229	2.81345	0.61	1.22237	1.987201	0.81	1.102	1.424454
0.42	1.35475	2.76146	0.62	1.21581	1.954635	0.82	1.09657	1.40022
0.43	1.3473	2.71091	0.63	1.20929	1.92264	0.83	1.09117	1.376266
0.44	1.33994	2.66173	0.64	1.20283	1.891208	0.84	1.08582	1.352601
0.45	1.33266	2.61388	0.65	1.19642	1.860305	0.85	1.0805	1.329199
0.46	1.32544	2.56728	0.66	1.19007	1.829916	0.86	1.0752	1.306042
0.47	1.31829	2.52189	0.67	1.18377	1.800009	0.87	1.06993	1.283133
0.48	1.31119	2.47766	0.68	1.17754	1.770585	0.88	1.06468	1.260456
0.49	1.30413	2.43452	0.69	1.17136	1.741605	0.89	1.05944	1.237991

Nous avons représenté sur la figure 8.2 les valeurs des fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ pour quelques valeurs de la température réduite. Nous constatons que les deux fonctions sont décroissantes et se rejoignent au point critique.

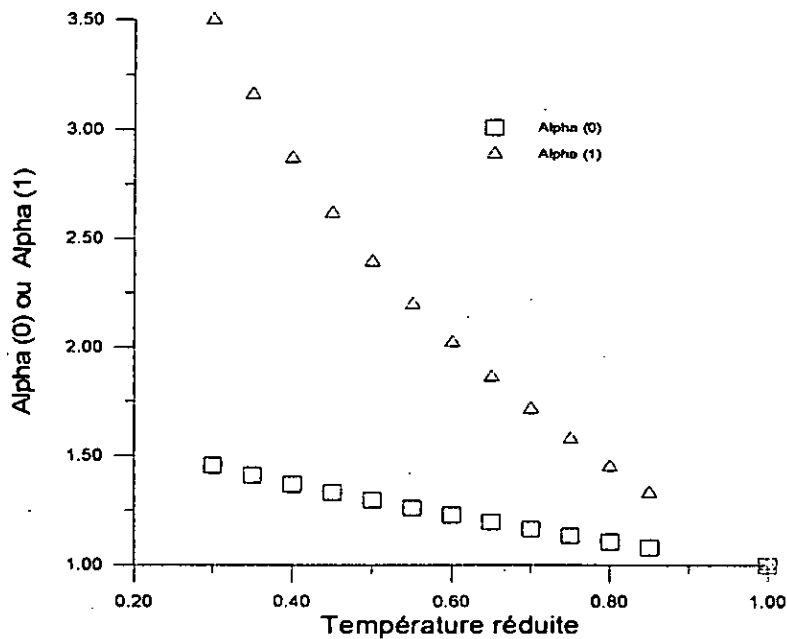


Figure 8.2 - Variation de $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ en fonction de la température réduite.

A partir des valeurs de $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$, nous nous proposons de modéliser les fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ sous forme d'une équation de type Wagner, qui est de la forme suivante:

$$\alpha - 1 = \left(A(1 - T_r) + B(1 - T_r)^{1.5} + C(1 - T_r)^3 + D(1 - T_r)^6 \right) / T_r \quad (8.9)$$

Le choix de ce type de fonction n'est fortuit, mais tiens compte du lien étroit qui lie le facteur α à la tension de vapeur. Nous avons utilisé une forme mathématique (pour la fonction α) qui donne en général d'excellents résultats lors du calcul de la tension de vapeur.

La nouvelle équation est dite équation d'état Redlich-Kwong-Généralisée (RKG). Nous avons choisi les n-paraffines (du méthane au n-eicosane) comme modèles pour la détermination des fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$. Nous validerons par la suite notre modèle aux autres familles d'hydrocarbures.

Les fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ ainsi déterminées sont données respectivement par les équations suivantes:

$$\alpha^{(0)} - 1 = \left(0.596539(1 - T_r) - 0.350583(1 - T_r)^{1.5} - 0.235278(1 - T_r)^3 + 0.022610(1 - T_r)^6 \right) / T_r \quad (8.10)$$

$$\alpha^{(1)} - 1 = \left(2.301775(1 - T_r) - 1.081708(1 - T_r)^{1.5} - 0.521166(1 - T_r)^3 - 0.411715(1 - T_r)^6 \right) / T_r \quad (8.11)$$

Les équations (8.10), (8.11) et (8.5) permettent de déterminer la fonction alpha de l'équation d'état de Redlich-Kwong. Il faut cependant souligner que les autres paramètres de l'équation d'état de Redlich-Kwong restent inchangés.

8.1.2 Elaboration de l'équation d'état Peng-Robinson-Généralisée

En partant des mêmes considérations que pour l'équation d'état Redlich-Kwong-Généralisée, nous avons entrepris de généraliser l'équation d'état de Peng-Robinson (PRG). Nous avons exprimé la fonction alpha de l'équation d'état de Peng-Robinson selon l'équation 8.5.

A partir de données de tension de vapeur - générées par l'intermédiaire de l'équation de tension de vapeur de Twu et coll. (1994) - nous déterminons les valeurs de alpha pour des températures réduites comprises entre 0.3 et 1.0 avec un incrément de 0.01. Les hydrocarbures considérés sont les n-alcane du méthane ($\omega = 0.0115$) au n-eicosane ($\omega = 0.9079$).

Nous donnons dans le tableau 8.3 quelques valeurs de la fonction alpha obtenues pour différentes valeurs de la température réduite (l'ensemble des résultats sont données en annexe D).

Tableau 8.3 - Variation de la fonction alpha de l'équation d'état de Peng-Robinson en fonction de la température et du facteur acentrique

ω	Température réduite						
	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.9
0.0115	1.385239	1.3058961	1.2413111	1.1847283	1.1335599	1.0867824	1.0433094
0.0995	1.5578058	1.4334254	1.3349714	1.2517597	1.1790195	1.1145447	1.056273
0.1523	1.6607347	1.5093866	1.3907925	1.2918277	1.2062844	1.1312308	1.0640666
0.2002	1.7537813	1.5779851	1.4412039	1.3280742	1.2310058	1.1463846	1.0711465
0.2515	1.8531278	1.6511565	1.4949647	1.3667825	1.2574634	1.1626291	1.0787388
0.3013	1.9493029	1.7219241	1.5469401	1.4042478	1.283125	1.1784115	1.0861186

ω	Température réduite						
	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.9
0.3495	2.042165	1.7901937	1.597057	1.4404048	1.3079379	1.1936974	1.0932698
0.3996	2.13848	1.8609415	1.648965	1.4778787	1.3337007	1.2095951	1.1007115
0.4435	2.222717	1.9227708	1.6943037	1.5106254	1.3562495	1.223532	1.1072394
0.4897	2.311222	1.9876877	1.7418796	1.5449983	1.379952	1.2382045	1.1141161
0.5303	2.388885	2.044617	1.7835781	1.5751306	1.4007566	1.2511022	1.120165
0.5764	2.476951	2.109132	1.830807	1.6092622	1.4243502	1.2657503	1.1270395
0.6174	2.555175	2.166405	1.8727108	1.6395458	1.4453066	1.27878	1.1331589
0.643	2.603973	2.202118	1.8988295	1.6584207	1.4583783	1.2869163	1.1369823
0.6863	2.686438	2.262446	1.9429306	1.6902882	1.480464	1.3006787	1.1434535
0.7174	2.745614	2.305718	1.9745491	1.713133	1.4963082	1.3105636	1.1481046
0.7697	2.845035	2.378384	2.027619	1.7514698	1.5229172	1.3271861	1.1559323
0.8114	2.924225	2.436235	2.069847	1.7819661	1.5441004	1.3404385	1.1621787
0.8522	3.001642	2.492767	2.111092	1.8117457	1.5647981	1.3534032	1.1682945
0.9079	3.107234	2.569837	2.167292	1.8523101	1.5930088	1.371099	1.1766505

Nous avons exprimé alpha en fonction du facteur acentrique pour des valeurs de température réduite constantes (figure 8.3). De la même façon que pour l'équation d'état *RKG*, Nous constatons un comportement parfaitement linéaire de la fonction alpha de l'équation de Peng-Robinson, ce qui nous permet d'appliquer l'équation (8.5).

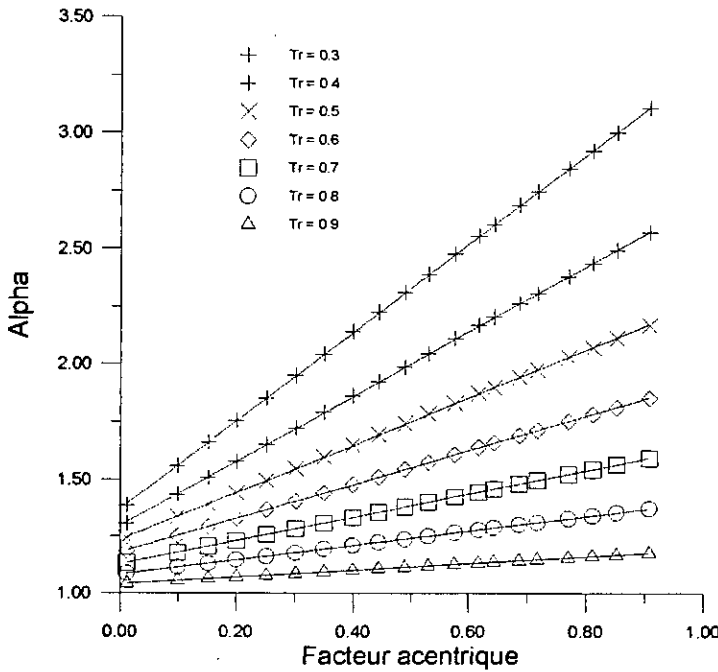


Figure 8.3 - Variation de alpha de l'équation de Peng-Robinson en fonction du facteur acentrique

En suivant les mêmes étapes que pour l'équation d'état *RKG*, nous avons calculer les valeurs des fonctions $\alpha^{(1)}$ et $\alpha^{(0)}$ pour différentes valeurs de la température réduite. A partir de ces valeurs, nous nous proposons de modéliser les fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ sous forme d'une équation de type Wagner, (équation 8.9).

Les fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ ainsi déterminées sont données respectivement par les équations suivantes:

$$\alpha^{(0)} - 1 = \left(0.4374109(1 - T_r) - 0.2161915(1 - T_r)^{1.5} - 0.201342(1 - T_r)^3 + 0.00103744(1 - T_r)^6 \right) / T_r \quad (8.12)$$

$$\alpha^{(1)} - 1 = \left(1.968106(1 - T_r) - 0.767858(1 - T_r)^{1.5} - 0.592729(1 - T_r)^3 - 0.317926(1 - T_r)^6 \right) / T_r \quad (8.13)$$

Les équations (8.12), (8.13) et (8.5) permettent de déterminer la fonction alpha de l'équation d'état de Peng-Robinson.

8.1.3 Elaboration de l'équation d'état Van der Waals-Généralisée

Nous avons entrepris de généraliser l'équation d'état de Van der Waals en exprimant la fonction alpha selon l'équation (8.5). En partant des données de tension de vapeur - générées par l'intermédiaire de l'équation de tension de vapeur de Twu et coll. (1994) - nous déterminons les valeurs de alpha pour des températures réduites comprises entre 0.3 et 1.0 avec un incrément de 0.01. Les hydrocarbures considérés sont les n-alcanes du méthane ($\omega = 0.0115$) au n-icosane ($\omega = 0.9079$).

Nous donnons dans le tableau 8.4 quelques valeurs de la fonction alpha obtenues pour différentes valeurs de la température réduite (l'ensemble des résultats sont données en annexe D).

Tableau 8.4 - Variation de la fonction alpha de l'équation d'état de Van der Waals en fonction de la température et du facteur acentrique

ω	Température réduite						
	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.9
0.0115	1.480729	1.387063	1.309367	1.240171	1.176398	1.116574	1.059092
0.0995	1.668012	1.525473	1.411039	1.313001	1.225909	1.146957	1.073397
0.1523	1.779718	1.607914	1.47163	1.356523	1.255588	1.165205	1.081992
0.2002	1.880698	1.682363	1.526347	1.395889	1.28249	1.18177	1.089796
0.2515	1.988516	1.761776	1.584698	1.437924	1.311273	1.199519	1.098162
0.3013	2.092892	1.838579	1.64111	1.478604	1.339182	1.216756	1.10629
0.3495	2.193672	1.912671	1.695504	1.517861	1.366163	1.233445	1.114163
0.3996	2.298199	1.989452	1.751841	1.558545	1.394171	1.250795	1.122353
0.4435	2.389618	2.056554	1.801048	1.594095	1.418681	1.266001	1.129534
0.4897	2.485669	2.127006	1.852682	1.631408	1.444442	1.282005	1.137097
0.5303	2.569954	2.188791	1.897938	1.664117	1.467049	1.296069	1.143747
0.5764	2.665528	2.258807	1.949196	1.701167	1.492685	1.312038	1.151303
0.6174	2.750422	2.320964	1.994674	1.734038	1.515453	1.326239	1.158027
0.643	2.803381	2.359723	2.023021	1.754526	1.529653	1.335105	1.162227
0.6863	2.892877	2.425194	2.070883	1.789115	1.553644	1.3501	1.169334
0.7174	2.957099	2.472156	2.105199	1.813911	1.570854	1.360868	1.174441
0.7697	3.064996	2.551018	2.162795	1.855522	1.599755	1.378973	1.183034
0.8114	3.150937	2.613803	2.208624	1.888622	1.622761	1.393404	1.189889
0.8522	3.234954	2.675154	2.253386	1.920943	1.645238	1.407519	1.196598
0.9079	3.349549	2.758796	2.31438	1.96497	1.675872	1.426782	1.205642

Nous avons exprimé alpha en fonction du facteur acentrique pour des valeurs de température réduite constantes (figure 8.4). De la même façon que pour les équations d'état *RKG* et *PRG*, Nous constatons un comportement parfaitement linéaire de la fonction alpha de l'équation de Van der Waals, ce qui nous permet d'appliquer l'équation (8.5).

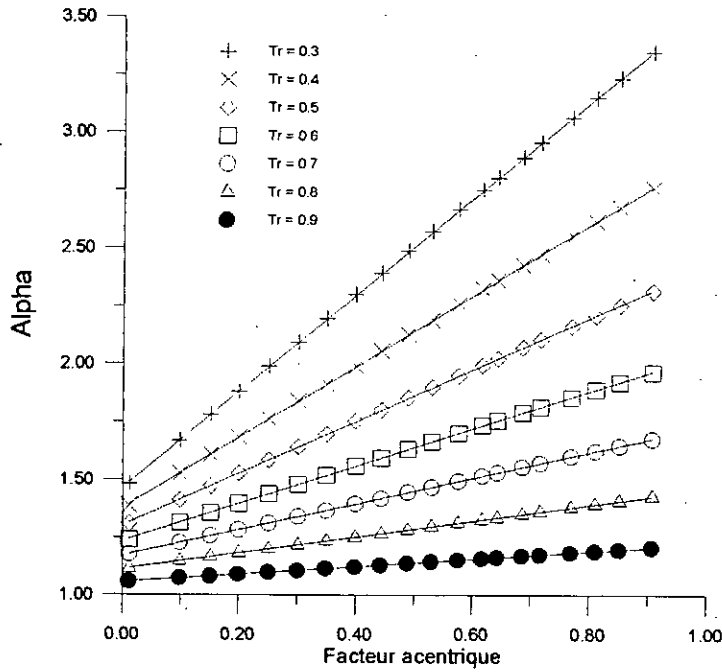


Figure 8.4 - Variation de α de l'équation de Van der Waals en fonction du facteur acentrique.

En suivant les mêmes étapes que pour l'équation d'état *RKG* et *PRG*, nous avons calculer les valeurs des fonctions $\alpha^{(1)}$ et $\alpha^{(0)}$ pour différentes valeurs de la température réduite. A partir de ces valeurs, nous nous proposons de modéliser les fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ sous forme d'une équation de type Wagner, (équation 8.9).

Les fonctions $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(1)}$ ainsi déterminées sont données respectivement par les équations suivantes:

$$\alpha^{(0)} - 1 = \left(0.63581296(1 - T_r) - 0.39371048(1 - T_r)^{1.5} - 0.22370409(1 - T_r)^3 + 0.0097811(1 - T_r)^6 \right) / T_r \quad (8.14)$$

$$\alpha^{(1)} - 1 = \left(2.338336(1 - T_r) - 1.0748802(1 - T_r)^{1.5} - 0.57261643(1 - T_r)^3 - 0.39428131(1 - T_r)^6 \right) / T_r \quad (8.15)$$

Les équations (8.14), (8.15) et (8.5) permettent de déterminer la fonction alpha de l'équation d'état de Van der Waals-Généralisée (VDWG).

8.2 Application des équations d'état généralisées au calcul de la tension de vapeur des hydrocarbures

Du fait que la fonction alpha est proposée pour réajuster l'équation d'état aux données de tension de vapeur, nous avons appliqué les nouvelles équations d'état au calcul de la tension de vapeur dans un large domaine de température. Les hydrocarbures considérés sont les paraffines (normaux (10) et ramifiés (37)), les naphènes (alkylcyclohexanes (9), alkylcyclopentanes (11)) et les aromatiques (19).

En suivant les recommandations de Reid et coll. (1988), nous avons utilisé l'équation de Wagner pour la tension de vapeur (annexe A). Les coefficients de l'équation de Wagner, ainsi que le domaine de validité de cette équation sont donnés par Reid et coll. (1988).

La tension de vapeur de chaque hydrocarbure est calculée entre la valeur de la température réduite minimale ($T_r = Tr_{min}$) et le point critique ($T_r = 1.0$) avec un incrément de 0.05 sur la

température réduite. L'essentiel des résultats est donné dans les tableaux 8.5, 8.6, 8.7 (l'ensemble des résultats est donné en annexe E).

Tableau 8.5 - Ecart moyen en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Redlich-Kwong.

Hydrocarbures	Nombre hydrocarbures	Nombre Points	Ecart moyen absolu en pour-cent		
			RKG	Twu et coll. (1995b)	Soave. (1972)
<i>n</i> -alcane	10	112	0.90	1.03	1.80
alcane ramifiés	37	412	0.66	0.97	1.41
alkylcyclopentane	11	109	2.40	2.48	2.54
alkylcyclohexane	9	88	2.53	2.60	2.28
alkylbenzène	19	182	1.81	2.06	2.34
Moyenne générale	86	903	1.31	1.54	1.86

Tableau 8.6 - Ecart absolu moyen en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Peng-Robinson.

Hydrocarbures	Nombre hydrocarbures	Nombre Points	Ecart absolu moyen en pourcent		
			PKG	Twu et coll. (1995a)	Peng-Robinson (1976)
<i>n</i> -alcane	10	112	0.88	1.40	1.95
alcane ramifiés	37	412	0.65	1.01	2.11
alkylcyclopentane	11	109	2.41	2.48	2.62
alkylcyclohexane	9	88	2.54	2.62	3.15
alkylbenzène	19	182	1.80	2.08	1.97
Moyenne générale	86	903	1.31	1.57	2.22

Tableau 8.7 - Ecart absolu moyen en pour-cent enregistrés lors du calcul de la tension de vapeur par les différentes équations d'état de type Van der Waals.

Hydrocarbures	Nombre hydrocarbures	Nombre Points	Ecart absolu moyen en pour-cent	
			VDWG	Soave-Van der Waals (1984)
<i>n</i> -alcane	10	112	0.89	2.32
alcane ramifiés	37	412	0.66	1.87
alkylcyclopentane	11	109	2.40	2.62
alkylcyclohexane	9	88	2.53	2.25
alkylbenzène	19	182	1.81	2.51
Moyenne générale	86	903	1.31	2.18

Aux vu des résultats précédents, nous constatons la supériorité des équations d'état généralisées (RKG, PRG, VDWG) par rapport aux autres équations de type Redlich-Kwong (équation de Twu et coll. (1995b), de type Peng-Robinson (Twu et coll. (1995a), Peng et Robinson (1976)) et de type Van der Waals (Soave (1984)). Les écarts absolus moyens obtenus par les équations d'état généralisées sont les plus faibles dans la majorité des cas. Les équations d'état de Twu et coll. (1995a, 1995b) donnent en général de meilleurs écarts que les équations d'état SRK et PR, mais restent en retrait par rapport aux équations d'état RKG, PRG et VDWG.

Les résultats engendrés par l'équation d'état VDWG se comparent favorablement aux autres types d'équations d'état, ce qui est en confirme le rôle important joué par la fonction alpha dans le but d'améliorer la prédiction de la tension de vapeur. De plus, nous pouvons remarquer que les trois équations d'état généralisées donnent des résultats pratiquement

comparables, ce qui nous permet d'en déduire que l'aptitude des équations d'état cubiques à représenter les équilibres de phases (tension de vapeur) dépend essentiellement du choix de la fonction alpha et non de la forme mathématique de l'équation d'état. Cette constatation n'est valable que pour la tension de vapeur et ne saurait être étendue à d'autres propriétés thermodynamiques comme nous le verrons par la suite.

Il faut noter que les équations d'état généralisées ont été construites sur la base de la connaissance de la tension de vapeur des n-alcanes seulement, mais reproduisent de manière assez précise la tension de vapeur des autres familles d'hydrocarbures. Les écarts absolus moyens enregistrés par les différentes familles - mis à part les n-alcanes - sont tout à fait acceptables.

Exemple de calcul

Nous allons calculer la tension de vapeur du 1,2-dimethylcyclopentane-trans à la température réduite de 0.89, par les équations d'état *RKG*, *PRG* et *VDWG*.

Dans le cas du 1,2-dimethylcyclopentane-trans, les valeurs de référence de la tension de vapeur sont calculées par l'équation de Wagner.

Les coefficients de l'équation de Wagner sont:

$$AW = -7.19675;$$

$$BW = 1.03696;$$

$$CW = -1.93618;$$

$$DW = -5.30531;$$

pour une température réduite de 0.89, la tension de vapeur calculée est:

$$P^{SAT} = 14.705 \text{ bar}$$

RKG

Les propriétés critiques et le facteur acentrique du 1,2-dimethylcyclopentane-trans sont (Reid et coll., 1988):

$$T_C = 553.2 \text{ K},$$

$$P_C = 34.4 \text{ bar},$$

$$\omega = 0.269$$

La tension de vapeur est initialisée à $P = 14.736 \text{ bar}$. La valeur de la fonction alpha est:

$$\alpha = 1.10747$$

La résolution de l'équation 2.11, donne deux racines:

$$Z^L = 7.419 \cdot 10^{-2},$$

$$Z^V = 7.820 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les fugacités des deux phases et nous comparons leurs valeurs. A cette pression, les fugacités ne sont pas égales et donc il faut changer la valeur de la pression en la multipliant par le rapport des fugacités. La

nouvelle estimation est égale à 14.739 bar.

Le calcul se poursuit selon la méthode présentée dans le chapitre *Méthodes de calcul des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques*.

Le processus converge à la cinquième itération pour une valeur de la tension de vapeur égale à 14.740 bar, soit un écart de 0.24 % par rapport à la valeur de référence.

PRG

La tension de vapeur est initialisée à $P = 14.736 \text{ bar}$. La valeur de la fonction alpha est:

$$\alpha = 1.10896$$

La résolution de l'équation 2.11, donne deux racines:

$$Z^L = 6.571 \cdot 10^{-2},$$

$$Z^V = 7.124 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les fugacités des deux phases et nous comparons leurs valeurs. A cette pression, les fugacités ne sont pas égales et donc il faut changer la valeur de la pression en la multipliant par le rapport des fugacités. La nouvelle estimation est égale à 14.739 bar.

Le calcul se poursuit selon la méthode présentée dans le chapitre *Méthodes de calcul des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques*.

Le processus converge à la cinquième itération pour une valeur de la tension de vapeur égale à 14.739 bar, soit un écart de 0.24 % par rapport à la valeur de référence.

VDWG

La tension de vapeur est initialisée à $P = 14.736 \text{ bar}$. La valeur de la fonction alpha est:

$$\alpha = 1.11106$$

La résolution de l'équation 2.11, donne deux racines:

$$Z^L = 9.350 \cdot 10^{-2},$$

$$Z^V = 7.489 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les fugacités des deux phases et nous comparons leurs valeurs. A cette pression, les fugacités ne sont pas égales et donc il faut changer la valeur de la pression en la multipliant par le rapport des fugacités. La nouvelle estimation est égale à 14.738 bar.

Le calcul se poursuit selon la méthode présentée dans le chapitre *Méthodes de calcul des propriétés thermodynamiques par les équations d'état cubiques*.

Le processus converge à la sixième itération pour une valeur de la tension de vapeur égale à 14.740 bar, soit un écart de 0.24 % par rapport à la valeur de référence.

8.3 Application des équations d'état généralisées au calcul des propriétés thermodynamiques

Nous allons dans cette partie du travail appliquer les équations d'état généralisées (*RKG*, *PRG* et *VDWG*) au calcul des propriétés thermodynamiques telles que l'enthalpie de vaporisation, l'entropie de vaporisation et les volumes spécifiques vapeur et liquide.

Nous avons appliqué les équations d'état généralisées au calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition et à 298 K. Les valeurs expérimentales de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à 298 K et à la température d'ébullition sont données par l'API projet 44 (1972). L'essentiel des résultats est donné dans les tableaux 8.8, 8.9, 8.10, 8.11, 8.12 et 8.13 (l'ensemble des résultats est donné en annexe F).

Tableau 8.8 - Ecart absolu moyen observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition par les équations d'état de type Redlich-Kwong

		Ecart absolu moyen en pour-cent					
		ΔH_{Eb}^{VAP}			ΔS_{Eb}^{VAP}		
Hydrocarbure	nombre	RKG	Twu et coll. (1995b)	Soave (1972)	RKG	Twu et coll. (1995b)	Soave (1972)
<i>n</i> -alcane	20	1.22	1.77	2.39	1.31	1.85	2.48
alcane branchés	39	0.62	0.62	1.17	0.65	0.65	1.21
alkylbenzènes	23	1.97	2.03	2.23	1.98	2.03	2.23
alkylcyclohexanes	14	1.58	2.03	2.58	1.58	2.03	2.58
alkylcyclopentanes	12	3.15	3.13	2.66	3.15	3.13	2.67
Moyenne globale	108	1.42	1.59	1.97	1.45	1.62	2.00

Tableau 8.9 - Ecart absolu moyen observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à 298 K par les équations d'état de type Redlich-Kwong

		Ecart absolu moyen en pour-cent					
		ΔH_{298}^{VAP}			ΔS_{298}^{VAP}		
Hydrocarbure	nombre	RKG	Twu et coll. (1995b)	Soave (1972)	RKG	Twu et coll. (1995b)	Soave (1972)
<i>n</i> -alcane	19	1.07	2.05	2.30	1.09	2.10	2.32
alcane branchés	38	0.78	0.84	0.77	0.71	0.77	0.70
alkylbenzènes	22	3.04	3.16	2.99	3.04	3.16	2.99
alkylcyclohexanes	14	0.97	1.68	1.77	0.96	1.70	1.78
alkylcyclopentanes	12	3.98	3.76	4.38	3.84	3.61	4.23
Moyenne globale	105	1.70	1.99	2.06	1.66	1.96	2.02

Tableau 8.10 - Ecart absolu moyen observé lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition par les équations d'état de type Peng-Robinson

		Ecart absolu moyen en pour-cent					
Hydrocarbure	nombre	PRG	ΔH_{Eb}^{VAP}		ΔS_{Eb}^{VAP}		
			Twu et coll. (1995a)	Peng-Robinson (1976)	PRG	Twu et coll. (1995a)	Peng et Robinson (1976)
<i>n</i> -alcane	20	1.15	1.42	0.54	1.23	1.50	0.62
alcane branchés	39	0.61	0.60	0.60	0.65	0.63	0.64
alkylbenzènes	23	1.98	2.02	1.98	1.98	2.02	1.98
alkylcyclohexanes	14	1.53	1.76	1.33	1.53	1.76	1.33
alkylcyclopentanes	12	3.20	3.23	3.58	3.21	3.24	3.58
Moyenne globale	108	1.41	1.50	1.31	1.44	1.52	1.34

Tableau 8.11 - Ecart absolu moyen observé lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à 298 K par les équations d'état de type Peng-Robinson

		Ecart absolu moyen en pour-cent					
Hydrocarbure	nombre	PRG	ΔH_{298}^{VAP}		ΔS_{298}^{VAP}		
			Twu et coll. (1995a)	Peng et Robinson (1976)	PRG	Twu et coll. (1995a)	Peng et Robinson (1976)
<i>n</i> -alcane	19	1.20	2.00	4.81	1.22	2.04	4.66
alcane branchés	38	0.84	0.92	1.73	0.77	0.85	1.73
alkylbenzènes	22	3.06	3.18	4.69	3.06	3.18	4.64
alkylcyclohexanes	14	1.02	1.61	3.82	1.02	1.63	3.72
alkylcyclopentanes	12	3.77	3.57	6.73	3.77	3.53	6.69
Moyenne globale	105	1.73	1.98	3.76	1.71	1.97	3.70

Tableau 8.12 - Ecart absolu moyen observé lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition par les équations d'état de type Van der Waals

		Ecart absolu moyen en pour-cent				
Hydrocarbure	nombre	VDWG	ΔH_{Eb}^{VAP}		ΔS_{Eb}^{VAP}	
			VDWG	Soave (1984)	VDWG	Soave (1984)
<i>n</i> -alcane	20	1.30		2.60	1.29	2.60
alcane branchés	39	0.64		1.42	0.68	1.46
alkylbenzènes	23	1.98		2.36	1.98	2.35
alkylcyclohexanes	14	1.72		2.85	1.72	2.85
alkylcyclopentanes	12	3.08		2.53	3.08	2.59
Moyenne globale	108	1.46		2.15	1.47	2.17

Tableau 8.13 - Ecart absolu moyen observés lors du calcul de l'enthalpie et de l'entropie de vaporisation à 298 K par les équations d'état de type Van der Waals

Ecart absolu moyen en pour-cent					
Hydrocarbure	nombre	ΔH_{298}^{VAP}		ΔS_{298}^{VAP}	
		VDWG	Soave (1984)	VDWG	Soave (1984)
<i>n</i> -alcane	19	0.81	1.49	0.83	1.51
alcane branchés	38	0.88	1.10	0.81	2.16
alkylbenzènes	22	3.06	2.92	3.06	2.92
alkylcyclohexanes	14	1.03	1.65	1.03	1.66
alkylcyclopentanes	12	3.77	3.80	3.77	3.99
Moyenne globale	105	1.67	1.93	1.65	2.34

Nous constatons que les équations d'état généralisées sont capables d'estimer des propriétés thermodynamiques telles que l'entropie de vaporisation à la température d'ébullition et à 298 K avec une meilleure précision que les équations d'état de Soave (1972) et de Twu et coll. (1995a, 1995b), de Peng et Robinson (1976) et de Soave (1984). Les écarts moyens sont dans la majorité des cas les plus faibles.

Nous donnons dans le tableau 8.14, 8.15 et 8.16, les écarts enregistrés lors du calcul de l'enthalpie de vaporisation, de l'entropie de vaporisation, du volume spécifique liquide et du volume spécifique vapeur pour quelques hydrocarbures (l'ensemble des résultats est donné en annexe G).

Nous constatons que dans l'ensemble les équations d'état généralisées *RKG*, *PRG* et *VDWG* permet de prédire avec le plus faible écart (par rapport aux autres équations d'état) l'enthalpie, l'entropie de vaporisation, ainsi que le volume spécifique liquide. Notons au passage que les écarts obtenus lors des calculs du volume spécifique liquide sont assez élevés, mais ceci est tout à fait prévisible, car les équations de type Redlich-Kwong donnent d'importants écarts dans le cas du volume spécifique liquide. Nous n'avons pas utiliser les équations d'état de type Van der Waals pour le calcul du volume spécifique, car ce type d'équation d'état s'écarte de manière considérable par rapport à l'expérience.

8.4 Conclusion

Nous pouvons conclure que l'utilisation de la forme de Wagner pour exprimer la fonction alpha des équations d'état de Redlich-Kwong, de Peng-Robinson et de Van der Waals a permis de prédire avec une assez bonne précision des propriétés thermodynamiques telles que l'enthalpie de vaporisation ou l'entropie de vaporisation, la tension de vapeur, le volume spécifique vapeur.

Nous avons exprimé la fonction alpha de trois équations d'état cubiques selon la loi des états correspondants, les fonctions alphas des trois équations d'état cubiques ont été exprimées selon une équation de type Wagner. Les nouvelles équations d'état ont été appliquées au calcul de la tension de vapeur, les résultats engendrés sont tout à fait acceptables et se comparent favorablement aux données de référence. Les écarts absolus moyens sont dans la majorité des cas les plus faibles comparés aux autres équations d'état. De plus, les équations d'état cubiques généralisées ont été construites à partir de données de tension de vapeur de *n*-alcane, mais elles ont été appliquées avec succès à des hydrocarbures de structures

chimiques différentes (alcane ramifiés, alkylcyclopentanes, alkylcyclohexanes et alkylbenzènes).

Les mêmes remarques que précédemment ont été relevées lors de la prédiction de propriétés thermodynamiques telles que l'enthalpie de vaporisation, l'entropie de vaporisation, les volumes liquide et vapeur à la saturation. Ceci confirme l'aptitude des équations d'état généralisées à prédire différentes propriétés thermodynamiques avec une précision comparable aux équations d'état de type Redlich-Kwong, Peng-Robinson ou Van der Waals.

Tableau 8.14 - Comparaison entre les équations d'état de type Redlich-Kwong lors du calcul des propriétés thermodynamiques à la saturation

Ecart absolu moyen en pour-cent											
Enthalpie de vaporisation							Entropie de vaporisation				
Hydrocarbures	Référence	Nombre points	Domaine Tr	RKG	Soave (1972)	Twu et coll. (1995b)	Nombre points	Domaine Tr	RKG	Soave (1972)	Twu et coll. (1995b)
Méthane	a	19	0.50 - 0.97	1.16	2.53	1.05	19	0.50 - 0.97	2.00	3.41	1.95
Ethane	b	26	0.57 - 0.98	2.23	3.31	2.28	26	0.57 - 0.98	2.21	3.30	2.27
Propane	b	27	0.52 - 0.87	0.59	1.18	0.46	27	0.52 - 0.87	0.60	1.17	0.46
n-Butane	a	29	0.33 - 0.99	1.78	2.20	2.47	29	0.33 - 0.99	1.73	2.16	2.43
n-Heptane	a	19	0.37 - 0.74	2.04	1.72	2.52	19	0.37 - 0.74	2.04	1.72	2.53
n-Octane	a	17	0.42 - 0.98	2.68	3.26	3.40	17	0.42 - 0.98	4.02	4.44	4.75
n-Nonane	a	14	0.44 - 0.87	4.27	4.87	4.75	14	0.44 - 0.87	4.78	4.89	5.26
n-Décane	a	18	0.42 - 0.97	1.88	2.26	2.43	18	0.42 - 0.97	2.14	2.25	2.70
iso-Butane	a	22	0.29 - 0.98	1.12	1.59	1.64	22	0.29 - 0.98	0.99	1.51	1.45
Benzène	a	27	0.52 - 0.98	0.91	1.50	1.18	25	0.52 - 0.98	0.95	1.52	1.26
Toluène	a	22	0.46 - 0.98	1.49	1.97	1.70	22	0.46 - 0.98	1.46	1.94	1.67
Ethylène	a	17	0.39 - 0.96	1.40	2.03	1.37	12	0.39 - 0.96	1.68	2.66	1.73
Propylène	a	21	0.44 - 0.99	1.09	2.12	1.37	21	0.44 - 0.99	1.22	2.25	1.51
Moyenne globale		278		1.63	2.25	1.93	271		1.84	2.42	2.15
Volume spécifique vapeur							Volume spécifique liquide				
Hydrocarbures	Référence	Nombre points	Domaine Tr	RKG	Soave (1972)	Twu et coll. (1995b)	Nombre points	Domaine Tr	RKG	Soave (1972)	Twu et coll. (1995b)
Méthane	a	20	0.50 - 0.997	1.87	2.46	1.35	20	0.50 - 0.997	4.64	4.89	4.74
Ethane	b	27	0.57 - 0.99	2.14	1.79	1.57	26	0.57 - 0.98	10.50	10.77	10.62
Propane	b	27	0.52 - 0.87	0.95	1.95	0.83	27	0.52 - 0.87	7.50	7.58	7.55
n-Butane	a	29	0.33 - 0.99	3.07	2.45	3.93	28	0.33 - 0.96	10.06	10.20	10.15
n-Heptane	a	15	0.55 - 0.93	0.85	0.64	0.41	25	0.37 - 0.96	15.60	15.71	15.68
n-Octane	a	17	0.42 - 0.98	3.13	3.09	3.38	16	0.42 - 0.95	18.55	18.73	18.65
n-Nonane	a	13	0.50 - 0.91	5.13	4.78	4.73	15	0.50 - 0.97	18.82	19.02	18.96
n-Décane	a	16	0.45 - 0.94	3.87	4.36	3.82	17	0.42 - 0.94	20.79	20.90	20.84
iso-Butane	a	21	0.34 - 0.98	2.39	1.76	1.82	22	0.29 - 0.98	9.85	10.07	9.97
Benzène	a	28	0.52 - 0.996	2.11	1.53	1.83	27	0.52 - 0.98	12.47	12.68	12.60
Toluène	a	23	0.46 - 0.997	1.22	2.01	1.32	22	0.46 - 0.95	14.42	14.52	14.50
Ethylène	a	17	0.39 - 0.96	3.27	2.23	3.23	17	0.39 - 0.96	7.79	7.93	7.87
Propylène	a	21	0.44 - 0.99	2.00	2.32	1.48	21	0.44 - 0.99	9.23	9.43	9.36
Moyenne globale		274		2.33	2.29	2.18	283		11.91	12.07	12.00

a: Perry et Chilton (1990), b:Raznjevic (1976).

Tableau 8.15 - Comparaison entre les équations d'état de type Peng-Robinson lors du calcul des propriétés thermodynamiques à la saturation

Ecart absolu moyen en pour-cent											
Enthalpie de vaporisation							Entropie de vaporisation				
Hydrocarbures	Référence	Nombre points	Domaine Tr	PRG	Peng et Robinson (1976)	Twu et coll. (1995a)	Nombre points	Domaine Tr	PRG	Peng et Robinson (1976)	Twu et coll. (1995a)
Méthane	a	19	0.50 - 0.97	1.25	1.45	1.19	19	0.50 - 0.97	2.15	2.42	2.14
Ethane	b	26	0.57 - 0.98	2.31	2.24	2.29	26	0.57 - 0.98	2.30	2.23	2.28
Propane	b	27	0.52 - 0.87	0.86	0.45	0.85	27	0.52 - 0.87	0.86	0.45	0.85
n-Butane	a	29	0.33 - 0.99	2.00	2.24	2.51	29	0.33 - 0.99	1.96	2.17	2.46
n-Heptane	a	19	0.37 - 0.74	2.08	0.77	2.45	19	0.37 - 0.74	2.08	0.76	2.46
n-Octane	a	17	0.42 - 0.98	2.75	3.23	3.25	17	0.42 - 0.98	4.09	3.16	4.60
n-Nonane	a	14	0.44 - 0.87	4.16	5.06	4.46	14	0.44 - 0.87	4.67	4.59	4.98
n-Décane	a	18	0.42 - 0.97	1.79	2.31	2.21	18	0.42 - 0.97	2.06	1.88	2.48
iso-Butane	a	22	0.29 - 0.98	0.84	1.85	1.32	22	0.29 - 0.98	0.70	1.99	1.12
Benzène	a	27	0.52 - 0.98	0.82	1.46	1.06	25	0.52 - 0.98	0.89	1.61	1.17
Toluène	a	22	0.46 - 0.98	1.59	1.99	1.74	22	0.46 - 0.98	1.56	1.99	1.71
Ethylène	a	17	0.39 - 0.96	1.50	2.14	1.44	12	0.39 - 0.96	1.85	1.98	1.85
Propylène	a	21	0.44 - 0.99	1.23	1.41	1.41	21	0.44 - 0.99	1.36	1.38	1.54
Moyenne globale		278		1.69	1.92	1.91	271		1.90	1.94	2.14
Volume spécifique vapeur							Volume spécifique liquide				
Hydrocarbures	Référence	Nombre points	Domaine Tr	PRG	Peng et Robinson (1976)	Twu et coll. (1995b)	Nombre points	Domaine Tr	PRG	Peng et Robinson (1976)	Twu et coll. (1995a)
Méthane	a	20	0.50 - 0.997	1.17	1.06	0.83	20	0.50 - 0.997	8.21	8.12	8.16
Ethane	b	27	0.57 - 0.99	1.44	1.24	1.21	26	0.57 - 0.98	5.61	5.64	5.63
Propane	b	27	0.52 - 0.87	1.36	1.10	1.37	27	0.52 - 0.87	4.96	4.94	4.91
n-Butane	a	29	0.33 - 0.99	3.02	3.45	3.86	28	0.33 - 0.96	4.07	4.06	4.11
n-Heptane	a	15	0.55 - 0.93	0.45	1.24	0.70	25	0.37 - 0.96	2.48	2.58	2.56
n-Octane	a	17	0.42 - 0.98	2.56	3.76	3.03	16	0.42 - 0.95	5.05	5.15	5.16
n-Nonane	a	13	0.50 - 0.91	4.45	5.90	4.02	15	0.50 - 0.97	5.22	5.30	5.34
n-Décane	a	16	0.45 - 0.94	3.51	4.65	3.37	17	0.42 - 0.94	7.00	7.11	7.06
iso-Butane	a	21	0.34 - 0.98	1.47	4.35	1.33	22	0.29 - 0.98	4.84	4.85	4.88
Benzène	a	28	0.52 - 0.996	0.91	1.48	0.90	27	0.52 - 0.98	3.06	3.09	3.11
Toluène	a	23	0.46 - 0.997	1.11	1.58	0.64	22	0.46 - 0.95	5.44	5.45	5.45
Ethylène	a	17	0.39 - 0.96	3.44	4.84	3.56	17	0.39 - 0.96	5.36	5.34	5.35
Propylène	a	21	0.44 - 0.99	2.01	3.21	1.98	21	0.44 - 0.99	1.68	1.71	1.73
Moyenne globale		274		1.95	2.70	1.97	283		4.72	4.75	4.76

a: Perry et Chilton (1990), b:Raznjevic (1976).

Tableau 8.16 - Comparaison entre les équations d'état de type Van der Waals lors du calcul des propriétés thermodynamiques à la saturation

Ecart absolu moyen en pour-cent									
Hydrocarbures	Référence	Nombre points	Enthalpie de vaporisation			Entropie de vaporisation			
			Domaine Tr	VDWG	Soave (1984)	Nombre points	Domaine Tr	VDWG	Soave (1984)
Méthane	a	19	0.50 - 0.97	1.17	2.37	19	0.50 - 0.97	1.99	3.63
Ethane	b	26	0.57 - 0.98	2.21	3.51	26	0.57 - 0.98	2.20	3.50
Propane	b	27	0.52 - 0.87	0.57	1.42	27	0.52 - 0.87	0.57	1.41
n-Butane	a	29	0.33 - 0.99	1.80	2.49	29	0.33 - 0.99	1.76	2.44
n-Heptane	a	19	0.37 - 0.74	2.16	2.12	19	0.37 - 0.74	2.16	2.12
n-Octane	a	17	0.42 - 0.98	2.78	2.38	17	0.42 - 0.98	4.12	4.70
n-Nonane	a	14	0.44 - 0.87	4.43	4.91	14	0.44 - 0.87	4.94	5.24
n-Décane	a	18	0.42 - 0.97	2.02	2.37	18	0.42 - 0.97	2.28	2.52
iso-Butane	a	22	0.29 - 0.98	1.24	1.62	22	0.29 - 0.98	1.08	1.48
Benzène	a	27	0.52 - 0.98	0.97	1.59	25	0.52 - 0.98	1.00	1.60
Toluène	a	22	0.46 - 0.98	1.56	2.22	22	0.46 - 0.98	1.53	2.19
Ethylène	a	17	0.39 - 0.96	1.37	2.33	12	0.39 - 0.96	1.67	2.86
Propylène	a	21	0.44 - 0.99	1.12	2.39	21	0.44 - 0.99	1.25	2.52
Moyenne globale		278		1.68	2.36	271		1.89	2.64
Volume spécifique vapeur									
Hydrocarbures	Référence	Nombre points	Domaine Tr	VDWG	Soave (1984)				
Méthane	a	20	0.50 - 0.997	4.23	4.44				
Ethane	b	27	0.57 - 0.99	4.49	3.77				
Propane	b	27	0.52 - 0.87	1.09	1.74				
n-Butane	a	29	0.33 - 0.99	4.65	4.79				
n-Heptane	a	15	0.55 - 0.93	1.42	1.37				
n-Octane	a	17	0.42 - 0.98	4.79	4.55				
n-Nonane	a	13	0.50 - 0.91	5.74	5.85				
n-Décane	a	16	0.45 - 0.94	4.70	4.81				
iso-Butane	a	21	0.34 - 0.98	3.94	2.80				
Benzène	a	28	0.52 - 0.996	4.16	3.53				
Toluène	a	23	0.46 - 0.997	2.16	2.30				
Ethylène	a	17	0.39 - 0.96	4.49	2.74				
Propylène	a	21	0.44 - 0.99	3.86	4.38				
Moyenne globale		274		3.75	3.56				

a: Perry et Chilton (1990), b:Raznjevic (1976).

9. Application des nouvelles équations d'état cubiques aux mélanges et aux fractions pétrolières

Les nouvelles équations d'état cubiques ont été élaborées à partir des données des corps purs. Leur application au calcul des propriétés thermodynamiques des corps purs a donné dans l'ensemble des résultats acceptables. Cependant, il est nécessaire de vérifier l'applicabilité des nouvelles équations d'état aux mélanges et aux fractions pétrolières. Dans ce cas, nous allons considérer les équations d'état les plus performantes et les plus générales, à savoir, les équations d'état cubiques *RKG* et *PRG*.

Les équations d'état cubiques généralisées sont caractérisées par leur fonction alpha généralisée. Telles qu'elles ont été élaborées, les fonctions alpha reproduisent la tension de vapeur des corps purs. Par définition, la température réduite est inférieure à un. Cependant, dans le cas des mélanges, souvent un des composés est à l'état supercritique, ce qui sous entend une température réduite supérieure à un et dans ce cas, les équations que nous avons proposées ne sont pas applicables. Pour palier à cette limitation, nous proposons de calculer la fonction alpha par la forme généralisée, dans le cas où la température réduite est inférieure à un, sinon la fonction alpha est calculée en utilisant l'expression proposée par Soave (1972) ou par Peng et Robinson (1976).

9.1 Application des équations d'état cubiques aux mélanges

9.1.1 Etude du mélange Méthane-n-Butane

Nous allons prendre comme exemple le mélange binaire Méthane-n-Butane. Ce mélange binaire a été étudié par Sage et coll.(1940). La pression de bulle de ce mélange varie en fonction de la température et de la composition. Le tableau 9.1 donne les différentes pressions de bulles déterminées expérimentalement.

Tableau 9.1 - Pression de bulle du mélange Méthane-n-Butane

Source	Sage, Budenholzer et Lacey			Ind. Eng. Chem.			Vol 32, n°9, 1262-1277, 1940.			
Fraction massique de Méthane	0.025	0.05	0.075	0.1	0.125	0.15	0.2	0.25	0.3	0.4
Fraction molaire de Méthane	0.085	0.160	0.227	0.287	0.341	0.390	0.475	0.547	0.608	0.707
Masse molaire du mélange	54.55	51.38	48.57	46.05	43.77	41.71	38.12	35.10	32.53	28.36
Température (K)	Pression de bulle (bar)									
294.26	17.72	31.75	44.50	56.47	67.29	77.36	96.04	110.59	120.31	130.52
310.93	18.96	35.45	49.37	62.28	74.05	84.67	102.39	115.28	123.83	131.41
327.59	23.10	39.27	54.05	67.53	79.50	90.18	107.90	119.69	126.38	
344.26	26.08	43.32	58.50	72.33	84.67	94.94	111.07	121.14		
360.93	31.01	48.02	58.51	76.60	87.98	97.15	111.69	117.07		
377.59	35.98	52.54	67.09	80.46	90.11	98.04				
394.26	41.37	56.87	70.60	80.88	86.53					

Nous pouvons constater que la pression de bulle du mélange dépend fortement de la composition. Ainsi, plus le mélange est riche en méthane, plus son point de bulle est élevé. Ceci s'explique par le fait qu'aux conditions de l'expérience, le méthane se trouve à l'état supercritique, et donc plus le mélange est riche en méthane plus il tend vers l'état supercritique, ce qui entraîne l'augmentation de la pression de bulle du mélange.

L'application des équations d'état aux mélanges, n'est possible que par l'utilisation d'une règle de mélange. Comme nous l'avons souligné auparavant, la règle de mélange classique est parfaitement applicable aux mélanges d'hydrocarbures. Nous adopterons cette règle de mélange dans le cas du binaire Méthane-n-Butane. Nous allons appliquer les équations d'état *SRK*, *PR*, *RKG* et *PRG* dans le cas de ce binaire.

La règle de mélange classique permet de calculer les paramètres a et b des équations d'état cubiques. Cette règle de mélange comporte un paramètre ajustable k_{ij} . La méthode de détermination de ce paramètre est donnée dans le chapitre *Les règles de mélange appliquées aux équations d'état cubiques*. Nous donnons dans le tableau 9.2 les valeurs des coefficients d'interactions binaires des quatre équations d'état cubiques, ainsi que la valeur minimale de la fonction objective Q .

Tableau 9.2 - Coefficients d'interactions binaires optimaux du mélange Méthane-n-Butane pour les équations d'état *SRK*, *PR*, *RKG* et *PRG*.

Equation d'état cubique	k_{ij}	Q
<i>SRK</i>	0.019	0.674
<i>PR</i>	0.022	0.581
<i>RKG</i>	0.019	0.669
<i>PRG</i>	0.021	0.583

Nous constatons que les coefficients d'interactions binaires des quatre équations d'état sont pratiquement identiques, de plus, leurs valeurs sont pratiquement nulles, ce qui confirme l'hypothèse posée par certains chercheurs sur la possibilité de considérer le coefficient d'interactions binaires comme nul dans le cas des mélanges d'hydrocarbures.

A partir des coefficients d'interactions binaires, nous avons calculé la pression de bulle des différents mélanges du tableau 9.1. Les résultats des calculs pour chaque équation d'état sont donnés dans le tableau 9.3 sous forme d'écarts absolus en pour-cent par rapport aux valeurs expérimentales (tableau 9.1). Nous constatons que les équations d'état cubiques généralisées (*RKG* et *PRG*) permettent de calculer la pression de bulle du mélange Méthane-n-Butane avec des écarts comparables avec les équations d'état cubiques de Soave (1972) et Peng-Robinson (1976). L'écart absolu moyen en pour-cent diminue en général avec l'enrichissement du mélange en méthane. Cet écart passe de 18 % environ dans le cas du mélange comportant 8.5 % mole de méthane à moins de 1 % dans le cas du mélange le plus riche en méthane. La composition joue dans le cas du point de bulle un rôle prépondérant, d'où l'importance de la règle de mélange. Il faut toutefois noter que dans le cas du mélange Méthane-n-Butane, les équations d'état de type Peng-Robinson (*PR* et *PRG*) donnent de plus faibles écarts que les équations d'état de type Redlich-Kwong (*SRK* et *RKG*).

Exemple de calcul

Nous allons calculer la pression de bulle du mélange méthane (1) - n-butane (2) contenant 8.5 % mole de méthane à la température de 344.26 K par l'équation d'état *PRG*.

La méthode de calcul du point de bulle est décrite dans le chapitre Application des équations d'état cubiques au calcul des équilibres liquide-vapeur. La valeur de la pression initiale est prise comme étant égale à la pression de bulle expérimentale.

$$P = 26.08 \text{ bar}$$

Nous avons fixé la pression de bulle, nous allons faire converger la composition de la phase vapeur.

Les coefficients d'équilibre liquide-vapeur sont calculés par l'équation (6.7).

La composition de la phase vapeur initiale est calculée par la relation ($y = Kx$).

$$y_1 = 0.8525$$

$$y_2 = 0.1475$$

A la pression considérée, les facteurs de compressibilité de la phase liquide et de la phase vapeur sont calculés par la méthode de Cardan.

$$Z^L = 9.8468 \cdot 10^{-2}$$

$$Z^{V'} = 9.3402 \cdot 10^{-1}$$

Nous calculons les coefficients de fugacité en phase liquide et en phase vapeur des deux composés à partir de la relation (3.23).

$$\phi_1^L = 7.204$$

$$\phi_2^L = 2.913 \cdot 10^{-1}$$

$$\phi_1^{V'} = 9.727 \cdot 10^{-1}$$

$$\phi_2^{V'} = 7.430 \cdot 10^{-1}$$

A partir de ces valeurs, nous calculons les coefficients d'équilibre liquide-vapeur définis comme étant les rapports des fugacités pour chaque composé.

$$K_1 = 7.406$$

$$K_2 = 0.392$$

Ces dernières valeurs vont nous permettre de calculer une nouvelle estimation de la composition en phase vapeur.

$$y_1 = 0.6295$$

$$y_2 = 0.3587$$

La somme des compositions est égale à:

$$\Sigma y_i = 0.9882.$$

Le calcul de la composition est répété jusqu'à ce que la composition ne change. Le processus converge à la composition suivante:

$$y_1 = 0.6005$$

$$y_2 = 0.4044$$

La somme des compositions est égale à:

$$\Sigma y_i = 1.049$$

Une nouvelle estimation de la pression est faite en multipliant la pression par la Σy_i , la nouvelle pression est:

$$P = 26.08 \cdot 1.049 = 26.21$$

Le processus de convergence de la composition est répété.

La pression converge au bout de 12 itérations. La pression de bulle estimée par l'équation d'état PRG est égale à 27.77 bar, soit un écart absolu en pour-cent de 6.48 %.

Nous avons appliqué les nouvelles équations d'état au calcul du facteur de compressibilité en phase gazeuse du mélange. Les valeurs expérimentales sont données par Sage et coll.(1940). Les valeurs expérimentales aux températures de 294.26 K et 394.26 K sont regroupées dans les tableaux 9.4 et 9.5. Nous calculons le facteur de compressibilité de la phase gazeuse par les équations d'état SRK, RKG, PR et PRG aux deux températures considérées et pour différents mélanges. Dans les tableaux 9.6 et 9.8 nous donnons les écarts absolus moyens obtenus par les équations SRK et RKG, par rapport aux valeurs expérimentales aux deux températures considérées. Nous constatons globalement que les deux équations d'état de type Redlich-Kwong donnent des résultats très proches, avec cependant, un léger avantage pour l'équation d'état RKG à la température de 394.26 K. Dans le cas des deux équations d'état, nous constatons que l'écart absolu moyen tend à diminuer avec l'enrichissement du mélange en méthane. Les mêmes remarques peuvent être établies dans le cas des équations d'état de type Peng-Robinson (tableau 9.7 et 9.9). Cependant, nous notons que les équations d'état de type Peng-Robinson donnent de plus faibles écarts que les équations d'état de type Redlich-Kwong. Cette constatation vient confirmer la remarque établie lors du calcul de la pression de bulle.

Tableau 9.3 - Ecart absolu en pour-cent par rapport à la pression de bulle du mélange méthane-n-butane des équations d'état SRK, PR, RKG et PRG

fraction massique de Méthane	0.025	0.05	0.075	0.1	0.125	0.15	0.2	0.25	0.3	0.4
Fraction molaire de Méthane	0.085	0.160	0.227	0.287	0.341	0.390	0.475	0.547	0.608	0.707
Masse molaire du mélange	54.55	51.38	48.57	46.05	43.77	41.71	38.12	35.10	32.53	28.36
Soave (1972)										
Température (K)	Ecart absolu en pour-cent									
294.26	14.00	5.14	2.73	2.38	4.10	2.87	2.35	1.16	1.38	2.27
310.93	59.57	7.13	5.59	5.76	5.83	5.47	1.97	0.76	2.14	0.95
327.59	6.56	10.25	11.11	11.25	7.76	5.23	2.58	1.11	0.52	
344.26	2.96	14.57	12.23	10.41	8.05	6.79	1.63	0.52		
360.93	19.11	17.23	6.83	10.81	6.08	2.86	0.01	0.11		
377.59	17.41	12.17	8.36	7.43	0.01	0.00				
394.26	10.07	9.59	0.00	0.01	0.00					
Ecart absolu moyens	18.53	10.87	6.69	6.86	4.55	3.32	1.22	0.52	0.58	0.46
RKG										
Température (K)	Ecart absolu en pour-cent									
294.26	13.98	5.11	2.76	2.41	4.13	2.89	2.34	1.15	1.39	2.27
310.93	59.97	6.61	5.00	5.74	5.33	5.06	1.68	0.99	2.31	0.99
327.59	6.55	9.61	10.30	10.51	7.14	4.74	2.28	0.88	0.11	
344.26	2.42	14.03	11.55	9.81	7.59	6.35	1.47	0.35		
360.93	19.89	17.01	7.59	10.38	5.79	2.69	0.07	0.08		
377.59	18.46	12.23	8.24	5.35	0.06	0.00				
394.26	10.84	9.70	0.00	0.01	0.00					
Ecart absolu moyens	18.87	10.61	6.49	6.32	4.29	3.11	1.12	0.49	0.55	0.47
Peng et Robinson (1976)										
Température (K)	Ecart absolu en pour-cent									
294.26	19.04	8.85	0.51	1.59	4.28	3.49	1.44	0.62	1.49	1.51
310.93	57.52	6.69	4.31	4.57	4.11	4.07	1.08	1.00	2.01	0.45
327.59	5.00	8.44	8.27	8.89	5.85	3.86	2.68	0.20	0.27	
344.26	8.16	11.30	9.37	8.27	6.60	3.94	1.39	0.23		
360.93	16.47	14.12	9.31	6.56	6.44	2.52	0.01	0.08		
377.59	15.16	10.13	7.02	2.93	0.01	0.00				
394.26	8.74	8.57	0.00	0.01	0.00					
Ecart absolu moyens	18.58	9.73	5.54	4.69	3.90	2.55	0.94	0.30	0.54	0.28
PRG										
Température (K)	Ecart absolu en pour-cent									
294.26	21.59	11.45	2.02	0.64	2.31	2.22	2.81	1.01	1.25	1.48
310.93	54.32	8.52	5.98	5.51	5.23	4.91	1.58	1.00	1.87	0.44
327.59	6.51	9.00	9.42	9.77	6.50	4.31	2.92	0.30	0.14	
344.26	6.48	12.10	9.98	8.69	6.88	4.11	1.44	0.24		
360.93	17.12	14.58	8.98	6.71	6.54	2.57	0.01	0.08		
377.59	15.68	10.35	7.12	2.97	0.01	0.00				
394.26	9.07	8.67	0.00	0.01	0.00					
Ecart absolu moyens	18.68	10.67	6.22	4.90	3.93	2.59	1.25	0.38	0.47	0.27

Tableau 9.4 - Facteur de compressibilité du mélange méthane-n-Butane à la
température de 294.26 K

<i>x</i> (méthane)	0.287	0.475	0.608	0.707	0.784	0.845	0.894	0.935	0.970
Pression(bar)	Facteur de compressibilité								
6.89				0.9349	0.9506	0.9632	0.9733	0.9799	0.9840
13.79						0.9270	0.9475	0.9598	0.9684
20.68							0.9230	0.9397	0.9528
27.58							0.8994	0.9209	0.9375
34.47								0.9030	0.9225
41.37								0.8871	0.9083
55.16								0.8577	0.8821
68.95								0.8311	0.8585
86.18								0.8012	0.8320
103.42								0.7745	0.8099
120.66							0.7018	0.7510	0.7909
137.89				0.5471	0.6218	0.6828	0.7324	0.7761	
155.13				0.5593	0.6163	0.6720	0.7215	0.7678	
172.37				0.5802	0.6230	0.6711	0.7192	0.7658	
189.61				0.6090	0.6425	0.6819	0.7264	0.7705	
206.84				0.6440	0.6708	0.7042	0.7405	0.7819	

Tableau 9.5 - Facteur de compressibilité du mélange méthane-n-Butane
à la température de 394.26 K

<i>x</i> (méthane)	0.287	0.475	0.608	0.707	0.784	0.845	0.894	0.935	0.970
Pression(bar)	Facteur de compressibilité								
6.89	0.9320	0.9505	0.9650	0.9738	0.9782	0.9822	0.9868	0.9902	0.9936
13.79	0.8670	0.9050	0.9335	0.9495	0.9596	0.9678	0.9750	0.9816	0.9873
20.68	0.7985	0.8630	0.9041	0.9275	0.9430	0.9551	0.9651	0.9735	0.9818
27.58	0.7255	0.8250	0.8778	0.9077	0.9282	0.9440	0.9563	0.9670	0.9765
34.47	0.6325	0.7885	0.8536	0.8900	0.9150	0.9345	0.9490	0.9610	0.9720
41.37		0.7540	0.8320	0.8740	0.9032	0.9260	0.9420	0.9557	0.9678
55.16		0.6882	0.7932	0.8466	0.8835	0.9120	0.9312	0.9466	0.9613
68.95		0.6355	0.7595	0.8230	0.8672	0.9005	0.9225	0.9398	0.9562
86.18		0.5908	0.7248	0.7982	0.8508	0.8900	0.9135	0.9332	0.9510
103.42		0.5671	0.6983	0.7787	0.8370	0.8812	0.9065	0.9281	0.9472
120.66		0.5615	0.6806	0.7650	0.8263	0.8748	0.9017	0.9242	0.9440
137.89		0.5711	0.6728	0.7570	0.8187	0.8693	0.8978	0.9212	0.9418
155.13		0.5890	0.6751	0.7550	0.8149	0.8660	0.8955	0.9198	0.9413
172.37		0.6135	0.6860	0.7587	0.8152	0.8650	0.8957	0.9210	0.9435
189.61		0.6435	0.7039	0.7672	0.8195	0.8670	0.8990	0.9251	0.9482
206.84		0.6760	0.7258	0.7790	0.8276	0.8720	0.9050	0.9320	0.9557

Tableau 9.6 - Ecart absolu en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 294.26 K des
équations d'état SRK et RKG

<i>Soave (1972)</i>									
<i>x (méthane)</i>	<i>0.287</i>	<i>0.475</i>	<i>0.608</i>	<i>0.707</i>	<i>0.784</i>	<i>0.845</i>	<i>0.894</i>	<i>0.935</i>	<i>0.970</i>
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecart absolu en pour-cent</i>								
6.89				2.33	1.70	1.10	0.56	0.27	0.15
13.79						2.17	1.05	0.55	0.27
20.68							1.42	0.87	0.43
27.58							1.72	1.07	0.58
34.47								1.22	0.74
41.37								1.17	0.85
55.16								0.96	0.99
68.95								0.68	1.09
86.18								0.51	1.32
103.42								0.85	1.68
120.66							0.72	1.91	2.43
137.89					4.16	2.43	2.90	3.54	3.47
155.13					7.13	5.88	5.42	5.22	4.45
172.37					8.86	8.24	7.50	6.57	5.27
189.61					9.30	8.95	8.43	7.21	5.75
206.84					8.78	8.51	8.03	7.33	5.78
Moyenne				2.33	6.65	5.33	3.77	2.50	2.20
<i>RKG</i>									
<i>x (méthane)</i>	<i>0.287</i>	<i>0.475</i>	<i>0.608</i>	<i>0.707</i>	<i>0.784</i>	<i>0.845</i>	<i>0.894</i>	<i>0.935</i>	<i>0.970</i>
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecart absolu en pour-cent</i>								
6.89				2.33	1.70	1.10	0.56	0.27	0.15
13.79						2.17	1.05	0.55	0.27
20.68							1.42	0.87	0.43
27.58							1.72	1.07	0.58
34.47								1.22	0.74
41.37								1.17	0.85
55.16								0.96	0.99
68.95								0.68	1.09
86.18								0.51	1.32
103.42								0.85	1.68
120.66							0.72	1.91	2.43
137.89					4.16	2.43	2.90	3.54	3.47
155.13					7.13	5.87	5.42	5.22	4.45
172.37					8.86	8.24	7.50	6.57	5.27
189.61					9.30	8.95	8.43	7.21	5.75
206.84					8.77	8.51	8.03	7.33	5.78
Moyenne				2.33	6.65	5.33	3.77	2.50	2.20

Tableau 9.7 - Ecart absolu en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 294.26 K des
équations d'état PR et PRG

<i>Peng et Robinson (1976)</i>									
<i>x (méthane)</i>	<i>0.287</i>	<i>0.475</i>	<i>0.608</i>	<i>0.707</i>	<i>0.784</i>	<i>0.845</i>	<i>0.894</i>	<i>0.935</i>	<i>0.970</i>
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecart absolu en pour-cent</i>								
6.89			1.78	1.21	0.64	0.14	0.13	0.23	
13.79					1.25	0.20	0.24	0.47	
20.68						0.15	0.31	0.68	
27.58						0.02	0.50	0.89	
34.47							0.73	1.08	
41.37							1.14	1.31	
55.16							2.05	1.83	
68.95							2.94	2.33	
86.18							3.78	2.75	
103.42							4.00	2.96	
120.66							4.84	3.44	2.70
137.89				3.50	4.13	3.19	2.29	2.10	
155.13				1.20	1.38	1.22	1.05	1.52	
172.37				0.06	0.43	0.36		1.04	
189.61				0.21	0.75	0.90			
206.84				0.47	0.08	0.25			
Moyenne			1.78	1.11	1.24	1.13	1.74	1.56	
<i>PRG</i>									
<i>x (méthane)</i>	<i>0.287</i>	<i>0.475</i>	<i>0.608</i>	<i>0.707</i>	<i>0.784</i>	<i>0.845</i>	<i>0.894</i>	<i>0.935</i>	<i>0.970</i>
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecart absolu en pour-cent</i>								
6.89			1.78	1.20	0.64	0.14	0.13	0.23	
13.79					1.25	0.20	0.24	0.47	
20.68						0.14	0.32	0.68	
27.58						0.01	0.50	0.89	
34.47							0.74	1.09	
41.37							1.15	1.32	
55.16							2.06	1.83	
68.95							2.96	2.33	
86.18							3.79	2.76	
103.42							4.03	2.97	
120.66							4.89	3.47	2.72
137.89				3.59	4.20	3.24	2.32	2.12	
155.13				1.27	1.45	1.27	1.08	1.53	
172.37				0.01	0.37	0.31		1.05	
189.61				0.15	0.69	0.86			
206.84				0.52	0.03	0.21			
Moyenne			1.78	1.12	1.23	1.13	1.75	1.57	

Tableau 9.8 - Ecartis absolus en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 394.26 K des équations d'état SRK et RKG

<i>Soave (1972)</i>									
<i>x (méthane)</i>	<i>0.287</i>	<i>0.475</i>	<i>0.608</i>	<i>0.707</i>	<i>0.784</i>	<i>0.845</i>	<i>0.894</i>	<i>0.935</i>	<i>0.970</i>
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecart absolu en pour-cent</i>								
6.89	2.06	1.88	1.38	1.10	1.06	0.95	0.68	0.49	0.27
13.79	3.73	3.44	2.47	2.07	1.86	1.59	1.26	0.90	0.55
20.68	5.67	4.66	3.41	2.86	2.50	2.11	1.68	1.28	0.78
27.58	7.97	5.40	4.05	3.47	3.00	2.50	2.02	1.52	1.01
34.47	13.27	5.95	4.50	3.91	3.38	2.75	2.24	1.74	1.18
41.37		6.21	4.69	4.21	3.65	2.94	2.46	1.92	1.35
55.16		6.33	4.72	4.46	3.89	3.10	2.65	2.20	1.55
68.95		5.10	4.52	4.56	3.98	3.16	2.75	2.35	1.70
86.18		3.44	4.28	4.68	4.00	3.08	2.90	2.50	1.92
103.42		4.14	4.54	4.91	4.19	3.13	3.07	2.70	2.14
120.66		6.28	5.47	5.28	4.53	3.26	3.25	2.96	2.46
137.89		8.05	6.69	5.81	5.03	3.64	3.59	3.32	2.83
155.13		9.45	7.72	6.36	5.57	4.11	4.01	3.70	3.17
172.37		10.19	8.34	6.83	6.07	4.64	4.38	3.97	3.36
189.61		10.26	8.50	7.19	6.46	5.10	4.61	4.09	3.42
206.84		10.09	8.47	7.54	6.72	5.47	4.72	4.05	3.29
Moyenne	6.54	6.30	5.23	4.70	4.12	3.22	2.89	2.48	1.94
<i>RKG</i>									
<i>x (méthane)</i>	<i>0.287</i>	<i>0.475</i>	<i>0.608</i>	<i>0.707</i>	<i>0.784</i>	<i>0.845</i>	<i>0.894</i>	<i>0.935</i>	<i>0.970</i>
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecartis absolus en pour-cent</i>								
6.89	2.03	1.87	1.37	1.09	1.06	0.94	0.68	0.49	0.27
13.79	3.67	3.41	2.45	2.06	1.85	1.59	1.26	0.89	0.55
20.68	5.57	4.61	3.38	2.84	2.49	2.10	1.68	1.27	0.78
27.58	7.81	5.33	4.01	3.45	2.99	2.49	2.02	1.52	1.01
34.47	12.98	5.85	4.45	3.88	3.36	2.74	2.23	1.74	1.18
41.37		6.07	4.62	4.17	3.62	2.92	2.45	1.91	1.34
55.16		6.10	4.62	4.40	3.86	3.08	2.64	2.19	1.55
68.95		4.76	4.39	4.49	3.94	3.14	2.74	2.34	1.70
86.18		3.01	4.10	4.58	3.94	3.05	2.88	2.49	1.91
103.42		3.71	4.33	4.80	4.12	3.09	3.04	2.68	2.13
120.66		5.90	5.24	5.15	4.45	3.21	3.22	2.94	2.45
137.89		7.72	6.46	5.67	4.95	3.59	3.56	3.31	2.83
155.13		9.16	7.50	6.22	5.49	4.06	3.98	3.68	3.16
172.37		9.93	8.13	6.69	5.98	4.58	4.34	3.95	3.35
189.61		10.03	8.30	7.06	6.38	5.05	4.57	4.07	3.41
206.84		9.88	8.29	7.41	6.63	5.41	4.69	4.03	3.28
Moyenne	6.41	6.08	5.10	4.62	4.07	3.19	2.87	2.47	1.93

Tableau 9.9 - Ecart absolu en pour-cent par rapport au facteur de compressibilité à 394.26 K des équations d'état PR et PRG

<i>Peng et Robinson (1976)</i>									
<i>x (méthane)</i>	0.287	0.475	0.608	0.707	0.784	0.845	0.894	0.935	0.970
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecart absolu en pour-cent</i>								
6.89	1.43	1.36	0.93	0.70	0.71	0.63	0.39	0.22	0.02
13.79	2.41	2.38	1.57	1.28	1.16	0.96	0.68	0.35	0.05
20.68	3.60	3.04	2.05	1.69	1.46	1.16	0.82	0.47	0.03
27.58	5.08	3.22	2.24	1.91	1.62	1.25	0.88	0.46	0.02
34.47	9.37	3.21	2.26	1.98	1.66	1.21	0.83	0.43	0.04
41.37		2.93	2.02	1.91	1.61	1.11	0.78	0.37	0.10
55.16		2.07	1.27	1.48	1.26	0.73	0.48	0.19	0.32
68.95		0.13	0.40	0.98	0.81	0.31	0.13	0.08	0.56
86.18		2.13	0.51	0.45	0.23	0.32	0.24	0.41	0.80
103.42		2.17	0.80	0.14	0.09	0.75	0.53	0.65	0.99
120.66		0.85	0.39	0.06	0.19	1.04	0.75	0.78	1.05
137.89		0.24	0.34	0.18	0.08	1.03	0.77	0.78	1.02
155.13		1.10	0.90	0.36	0.11	0.90	0.69	0.72	1.00
172.37		1.44	1.12		0.30	0.68	0.61	0.73	1.08
189.61		1.25	0.95		0.41	0.49	0.64	0.87	1.27
206.84		0.88	0.65		0.41	0.37	0.76	1.13	1.61
Moyenne	4.38	1.78	1.15	1.01	0.76	0.81	0.62	0.54	0.62
<i>PRG</i>									
<i>x (méthane)</i>	0.287	0.475	0.608	0.707	0.784	0.845	0.894	0.935	0.970
<i>Pression(bar)</i>	<i>Ecart absolu en pour-cent</i>								
6.89	1.42	1.36	0.93	0.70	0.71	0.63	0.39	0.22	0.02
13.79	2.39	2.38	1.57	1.28	1.16	0.96	0.68	0.35	0.05
20.68	3.58	3.04	2.05	1.69	1.46	1.16	0.82	0.47	0.03
27.58	5.03	3.22	2.24	1.91	1.62	1.25	0.88	0.46	0.02
34.47	9.28	3.21	2.26	1.98	1.66	1.21	0.83	0.43	0.04
41.37		2.93	2.02	1.91	1.61	1.11	0.78	0.37	0.10
55.16		2.07	1.27	1.48	1.26	0.73	0.48	0.19	0.32
68.95		0.13	0.40	0.98	0.81	0.31	0.13	0.08	0.56
86.18		2.13	0.51	0.45	0.23	0.32	0.24	0.41	0.80
103.42		2.17	0.80	0.14	0.09	0.75	0.53	0.65	0.99
120.66		0.85	0.39	0.06	0.19	1.04	0.75	0.78	1.05
137.89		0.24	0.34	0.18	0.08	1.03	0.77	0.78	1.02
155.13		1.10	0.90	0.36	0.11	0.90	0.69	0.72	1.00
172.37		1.44	1.12		0.30	0.68	0.61	0.73	1.08
189.61		1.25	0.95		0.41	0.49	0.64	0.87	1.27
206.84		0.88	0.65		0.41	0.37	0.76	1.13	1.61
Moyenne	4.34	1.78	1.15	1.01	0.76	0.81	0.62	0.54	0.62

9.1.2 Etude du mélange Méthane-n-Décane

Le mélange binaire méthane-n-décane a été étudié par Sage et coll.(1940b). La pression de bulle de ce mélange varie en fonction de la température et de la composition. Le tableau 9.10 donne les différentes pressions de bulles déterminées expérimentalement.

Tableau 9.10 - Pression de bulle du mélange Méthane-n-Décane

Source	Sage, Lavender et Lacey		Ind. Eng. Chem.		Vol 32, n°5, 743-747, 1940.	
x(méthane)	0.095	0.142	0.321	0.532	0.552	0.600
Température (K)	Pression de bulle (bar)					
294.26	27.99	30.54	85.84	172.09	181.68	208.57
310.93	29.51	32.34	93.08	179.61	189.88	217.60
344.26	32.75	35.71	102.73	192.57	202.71	229.18
377.59	35.92	38.96	109.56	198.98	209.60	234.42
394.26	37.85	40.54	112.38	199.88	209.81	234.42

Comme dans le cas du mélange étudié précédemment, nous allons appliquer la règle de mélange classique dans le cas du mélange Méthane-n-Décane. Nous avons déterminé le coefficient d'interaction binaire du mélange dans le cas des équations d'état *SRK*, *RKG*, *PR* et *PRG*. La méthode de détermination de ce paramètre est donnée dans le chapitre **Les règles de mélange appliquées aux équations d'état cubiques**. Nous donnons dans le tableau 9.11 les valeurs des coefficients d'interactions binaires des quatre équations d'état cubiques, ainsi que la valeur minimale de la fonction objective Q .

Tableau 9.11 - Coefficients d'interactions binaires optimaux du mélange Méthane-n-Décane pour les équations d'état *SRK*, *PR*, *RKG* et *PRG*.

Equation d'état cubique	k_{ij}	Q
<i>SRK</i>	0.050	0.352
<i>PR</i>	0.030	0.504
<i>RKG</i>	0.050	0.352
<i>PRG</i>	0.029	0.477

Comme dans le cas du mélange méthane-n-décane, les coefficients d'interactions binaires des équations d'état du même type sont pratiquement identiques, de plus, leurs valeurs sont pratiquement nulles.

A partir des coefficients d'interactions binaires, nous avons calculé la pression de bulle des différents mélanges du tableau 9.10. Les résultats des calculs pour chaque équation d'état sont donnés dans le tableau 9.12 sous forme d'écarts absolu en pour-cent par rapport aux valeurs expérimentales (tableau 9.10). Nous constatons que les équations d'état cubiques généralisées (*RKG* et *PRG*) permettent de calculer la pression de bulle du mélange Méthane-n-Décane avec des écarts comparables avec les équations d'état cubiques de Soave (1972) et Peng-Robinson (1976). Nous constatons que l'équation d'état *PRG* donne de meilleurs écarts par rapport à l'équation d'état *PR* quel que soit le mélange considéré. Par contre, les équations d'état *SRK* et *RKG* donnent pratiquement les mêmes écarts. Contrairement au mélange étudié auparavant, l'équation d'état *PR* donne les écarts les plus importants, ce qui nous amène à conclure que l'aptitude d'une équation d'état à représenter les propriétés des mélanges dépend de la règle de mélange, mais dépend aussi de la forme de l'équation d'état, par conséquent, chaque mélange possédera une équation d'état privilégiée et par conséquent, nous ne pouvons

pas affecter une équation d'état pour un mélange sans qu'une étude ne vienne étayer notre choix.

Tableau 9.12 - - Ecart absolu en pour-cent par rapport à la pression de bulle du mélange méthane-n-décane des équations d'état SRK, PR, RKG et PRG

x(méthane)	0.095	0.142	0.321	0.532	0.552	0.600
<i>Soave (1972)</i>						
Température (K)	Ecart absolu moyen en pour-cent					
294.26	26.13	4.61	2.51	1.75	2.63	3.66
310.93	23.69	7.49	2.84	3.18	3.62	4.03
344.26	22.52	9.39	2.43	3.27	3.71	4.39
377.59	24.41	6.96	3.69	2.73	2.81	3.83
394.26	26.86	4.56	5.10	2.37	2.69	3.49
Ecart moyen	24.72	6.60	3.31	2.66	3.09	3.88
<i>RKG</i>						
Température (K)	Ecart absolu moyen en pour-cent					
294.26	26.05	4.71	2.39	1.91	2.80	3.84
310.93	23.75	7.41	2.92	3.07	3.50	3.90
344.26	22.73	9.08	2.73	2.89	3.33	3.98
377.59	24.63	6.64	4.01	2.34	2.41	3.41
394.26	27.04	4.29	5.37	2.03	2.35	3.13
Ecart moyen	24.84	6.43	3.48	2.45	2.88	3.65
<i>Peng et Robinson (1976)</i>						
Température (K)	Ecart absolu moyen en pour-cent					
294.26	32.37	4.29	11.23	8.96	8.42	8.18
310.93	29.28	0.43	10.34	6.09	5.90	6.10
344.26	26.61	3.57	7.95	3.71	3.47	3.32
377.59	27.03	3.17	7.58	2.66	2.76	2.29
394.26	28.78	1.69	8.27	2.43	2.32	2.06
Ecart moyen	28.81	2.63	9.07	4.77	4.57	4.39
<i>PRG</i>						
Température (K)	Ecart absolu moyen en pour-cent					
294.26	31.71	3.32	10.16	7.54	6.95	0.00
310.93	28.80	0.28	9.59	5.11	4.89	5.04
344.26	26.43	3.83	7.68	3.37	3.12	2.95
377.59	27.06	3.12	7.62	2.71	2.81	2.33
394.26	28.88	1.55	8.41	2.59	2.48	2.23
Ecart moyen	28.58	2.42	8.69	4.26	4.05	2.51

9.1.3 Etude d'un mélange multicomposant

Le mélange étudié est un mélange d'un gaz en équilibre avec une huile d'absorption de masse moléculaire moyenne égale à 103 (Starling et Han, 1972). Les constituants du mélange, ainsi que la composition de l'alimentation sont donnés dans le tableau 9.13. Nous pouvons constater la présence de composés non-hydrocarbonnés, à savoir le dioxyde de carbone et l'azote. Les coefficients d'interactions binaires hydrocarbure-hydrocarbure sont supposés nuls, toutefois, les interactions entre l'azote et le dioxyde de carbone avec les hydrocarbures ne peuvent pas être supposés nuls. Reid et coll. (1988) donne les valeurs des coefficients d'interactions binaires entre le CO₂ et le N₂ avec quelques hydrocarbures, dans le cas des équations d'état SRK et PR. Nous avons constaté auparavant que les coefficients d'interactions binaires des équations d'état RKG et PRG étaient très proches de ceux des équations d'état SRK et PR respectivement et donc nous adopterons les mêmes valeurs de coefficients

d'interactions binaires dans le cas des interactions hydrocarbures-non hydrocarbures. Les valeurs des interactions binaires sont données dans le tableau 9.14. Certaines valeurs de coefficients d'interactions binaires ne sont pas disponibles. Nous les avons prises comme égales au coefficient d'interactions binaires de l'hydrocarbure le plus proche. Ces valeurs seront suivies d'un signe *.

Tableau 9.13 - Composition du mélange en équilibre d'un gaz avec une huile d'absorption

Composé	Composition de l'alimentation (%)
N ₂	0.531
CO ₂	0.816
CH ₄	90.620
C ₂ H ₆	2.600
C ₃ H ₈	0.313
iC ₄ H ₁₀	0.024
nC ₄ H ₁₀	0.055
iC ₅ H ₁₂	0.090
nC ₅ H ₁₂	0.069
nC ₆ H ₁₄	0.192
nC ₇ H ₁₆	1.100
nC ₈ H ₁₈	2.450
nC ₉ H ₂₀	0.943
nC ₁₀ H ₂₂	0.142
nC ₁₁ H ₂₄	0.049

Tableau 9.14 - Coefficients d'interactions binaires des composés du mélange étudié

	SRK - RKG		PR - PRG	
	CO ₂	N ₂	CO ₂	N ₂
N ₂	-0.032	0.0	-0.017	0.0
CO ₂	0.000	-0.032	0.000	-0.017
CH ₄	0.093	0.028	0.092	0.031
C ₂ H ₆	0.136	0.041	0.132	0.052
C ₃ H ₈	0.129	0.076	0.124	0.085
iC ₄ H ₁₀	0.128	0.094	0.120	0.103
nC ₄ H ₁₀	0.143	0.070	0.133	0.080
iC ₅ H ₁₂	0.131	0.087	0.122	0.092
nC ₅ H ₁₂	0.131	0.088	0.122	0.100
nC ₆ H ₁₄	0.118	0.150	0.110	0.150
nC ₇ H ₁₆	0.110	0.142	0.100	0.144
nC ₈ H ₁₈	0.110*	0.142*	0.100*	0.144*
nC ₉ H ₂₀	0.130*	0.142*	0.114*	0.144*
nC ₁₀ H ₂₂	0.130	0.142*	0.114	0.144*
nC ₁₁ H ₂₄	0.130*	0.142*	0.114*	0.144*

A la température de -40 °C (-40°F) et à la pression de 6.895 Mpa (1000 psia), le mélange est en équilibre liquide-vapeur. Dans ces conditions opératoires, les constantes d'équilibre liquide-vapeur expérimentales sont données dans le tableau 9.15. Nous avons calculé à la température et à la pression considérée et pour les équations d'état SRK, RKG, PR et PRG, le flash isotherme pour déterminer les constantes d'équilibre liquide-vapeur ainsi que le taux de

vaporisation du mélange. Les résultats obtenus sont regroupés dans le tableau 9.15 pour comparaison avec les valeurs expérimentales. Nous pouvons constater que les équations d'état de type Redlich-Kwong donnent des écarts comparables (2.23 %). D'autre part, l'équation d'état PRG donne un meilleur écart que l'équation d'état PR. Les écarts enregistrés sont tout à fait acceptables vu la nature du mélange et les conditions opératoires.

Tableau 9.15 - Comparaison entre les constantes d'équilibre liquide-vapeur calculées par les différentes équations d'état

Coefficients d'équilibre liquide-vapeur					
Composé	EXP	SRK	PR	RKG	PRG
N ₂	8.769	7.415	7.103	7.513	7.425
CO ₂	0.941	0.651	0.687	0.649	0.690
CH ₄	2.240	1.903	1.854	1.915	1.892
C ₂ H ₆	0.347	0.338	0.347	0.335	0.347
C ₃ H ₈	0.105	0.102	0.108	0.102	0.107
iC ₄ H ₁₀	0.047	0.046	0.050	0.046	0.049
nC ₄ H ₁₀	0.0278	0.0308	0.0342	0.0310	0.0330
iC ₅ H ₁₂	0.0119	0.0135	0.0155	0.0136	0.0146
nC ₅ H ₁₂	0.0089	0.0099	0.0115	0.0099	0.0107
nC ₆ H ₁₄	0.0032	0.0033	0.0040	0.0032	0.0035
nC ₇ H ₁₆	0.00086	0.00112	0.00143	0.00108	0.00120
nC ₈ H ₁₈	0.00071	0.00039	0.00052	0.00036	0.00041
nC ₉ H ₂₀	0.00040	0.00014	0.00019	0.00012	0.00014
nC ₁₀ H ₂₂	0.00006	0.00005	0.00007	0.00004	0.00005
nC ₁₁ H ₂₄	0.00001	0.00002	0.00003	0.00002	0.00002
Taux de vaporisation					
EXP	SRK	PR	RKG	PRG	
0.895	0.875	0.871	0.875	0.874	
Ecart (%)	2.23	2.68	2.23	2.34	

9.2 Application des équations d'état aux fractions pétrolières

Les équations d'état cubiques ont été établies à partir des données expérimentales des corps purs. Elles ont été appliquées aux mélanges par l'introduction d'une règle de mélange. Leur extension aux fractions pétrolières est possible par le biais d'une méthode de caractérisation, qui permet de transformer le mélange complexe, en un mélange simple auquel est appliquée une règle de mélange. De ce fait, l'aptitude d'une équation d'état à représenter les propriétés thermodynamiques des fractions pétrolières, dépend grandement des procédures de caractérisation et de pondération du mélange (règle de mélange).

Nous allons appliquer les équations d'état SRK, PR, RKG, PRG, SRKCG3 et PRCG3 au calcul des propriétés thermodynamiques d'une fraction pétrolière issue de la distillation T.B.P. d'un pétrole brut indonésien (Edmister, 1988). Les caractéristiques de la fraction pétrolière sont données dans le tableau 9.16. A partir des valeurs de la température d'ébullition et de la specific gravity, nous avons calculé les propriétés critiques (Riazi et Daubert, 1980), le facteur acentrique (Lee et Kesler, 1976) et le nombre équivalent d'atomes de carbone (Pedersen et coll., 1988) de chaque pseudocomposé à partir de la masse molaire (Riazi et Daubert, 1980). Ces différentes corrélations sont données en annexe H.

Nous avons appliqué les équations précédentes aux fractions pétrolières étudiées, les résultats des calculs sont donnés dans le tableau 9.17.

Tableau 9.16 - Caractéristiques des pseudocomposés de la fraction pétrolière étudiée

Pseudo	COMP1	COMP2	COMP3	COMP4	COMP5	COMP6	COMP7
Fr. mol.	0.0167	0.0667	0.0333	0.0667	0.0333	0.0667	0.0333
T _b (R)	459.67	564.67	648.07	688.57	728.07	7630.37	796.67
SpGr	0.6112	0.6624	0.6955	0.7260	0.7380	0.7476	0.7653
Pseudo	COMP8	COMP9	COMP10	COMP11	COMP12	COMP13	COMP14
Fr. mol.	0.0667	0.0333	0.0667	0.0333	0.0667	0.0333	0.0667
T _b (K)	831.67	867.47	901.57	936.07	972.47	1008.37	1046.07
SpGr	0.7803	0.7905	0.8031	0.8154	0.8210	0.8232	0.8272
Pseudo	COMP15	COMP16	COMP17	COMP18	COMP19	COMP20	COMP21
Fr. mol.	0.0333	0.0667	0.0333	0.0667	0.0333	0.0667	0.0167
T _b (K)	1090.47	1134.17	1174.67	1229.77	1288.97	1361.97	1452.67
SpGr	0.8340	0.8442	0.8495	0.8535	0.8613	0.8739	0.8896

Tableau 9.17 - Propriétés physiques des pseudocomposés

Pseudo	COMP1	COMP2	COMP3	COMP4	COMP5	COMP6	COMP7
T _c (K)	416.74	484.18	534.35	562.37	584.57	603.89	624.49
P _c (bar)	47.9	35.9	29.2	28.0	25.6	23.6	22.6
N	5.3	6.7	8.0	8.6	9.4	10.1	10.8
w	0.127	0.213	0.286	0.310	0.348	0.384	0.409
Pseudo	COMP8	COMP9	COMP10	COMP11	COMP12	COMP13	COMP14
T _c (K)	644.98	664.27	683.39	702.49	720.20	736.44	753.84
P _c (bar)	21.4	20.0	19.0	18.0	16.8	15.5	14.4
N	11.6	12.5	13.4	14.3	15.5	16.8	18.2
w	0.440	0.477	0.509	0.543	0.589	0.642	0.697
Pseudo	COMP15	COMP16	COMP17	COMP18	COMP19	COMP20	COMP21
T _c (K)	774.78	796.38	814.82	838.52	864.87	898.04	938.76
P _c (bar)	13.4	12.5	11.7	10.7	9.8	8.9	8.0
N	20.0	21.9	23.9	26.9	30.6	35.6	43.1
w	0.762	0.823	0.891	0.992	1.072	1.164	1.274

La fraction pétrolière considérée peut-être assimilée à un mélange de 21 composés. Nous pouvons ainsi appliquer la règle de mélange classique en considérant tous les coefficients d'interaction binaires comme nuls. A une température de 533.15 K (500 °F) et à une pression 1.034 bar (15 psia), les constantes d'équilibre de chaque pseudocomposé et le taux de vaporisation du mélange sont donnés dans le tableau 9.18. Nous appliquons les équations d'état cubiques *SRK*, *PR*, *RKG* et *PRG* à la fraction pétrolière. Les résultats des calculs sont donnés dans le tableau 9.18. Nous constatons que les quatre équations d'état donnent des résultats comparables. Les taux de vaporisation sont pratiquement confondus, les écarts par rapport à l'expérience sont très faibles (de l'ordre de 0.4 %), ce qui indique que les quatre équations d'état prédisent correctement les équilibres liquide-vapeur du mélange complexe considéré. Nous constatons que les nouvelles équations d'état peuvent être appliquées avec succès aux hydrocarbures lourds. L'hydrocarbure le plus lourd est à une température d'ébullition supérieure à 800 K. Ce qui confirme le choix de l'équation de Twu et coll. (1994) pour l'établissement des équations d'état *RKG* et *PRG*.

Tableau 9.18 - Constantes d'équilibre et taux de vaporisation de la fraction pétrolière d'Indonésie

Composé	Constante d'équilibre				
	EXP	SRK	PR	RKG	PRG
COMP1	63.240	63.225	65.158	63.099	65.126
COMP2	32.600	32.572	32.940	32.519	32.927
COMP3	18.200	17.991	17.983	17.952	17.970
COMP4	13.420	13.035	13.021	12.897	12.975
COMP5	9.767	9.475	9.430	9.348	9.397
COMP6	7.239	7.010	6.957	6.907	6.937
COMP7	5.381	5.193	5.154	5.119	5.145
COMP8	3.880	3.734	3.706	3.685	3.704
COMP9	2.718	2.629	2.608	2.598	2.610
COMP10	1.906	1.853	1.840	1.835	1.843
COMP11	1.304	1.274	1.267	1.265	1.270
COMP12	0.8520	0.8465	0.8429	0.8423	0.8453
COMP13	0.5445	0.5486	0.5470	0.5472	0.5487
COMP14	0.3317	0.3398	0.3398	0.3400	0.3409
COMP15	0.1784	0.1866	0.1876	0.1877	0.1882
COMP16	0.0930	0.0979	0.0991	0.0991	0.0994
COMP17	0.0492	0.0516	0.0525	0.0526	0.0528
COMP18	0.0198	0.0202	0.0208	0.0208	0.0209
COMP19	0.0071	0.0073	0.0077	0.0077	0.0078
COMP20	0.0018	0.0019	0.0021	0.0021	0.0021
COMP21	0.0003	0.0003	0.0004	0.0004	0.0004
Taux de vaporisation					
EXP	SRK	PR	RKG	PRG	
0.5083	0.5065	0.506	0.5054	0.5062	
Ecart (%)	0.35	0.45	0.57	0.41	

9.3 Conclusion

Nous avons étudié dans cette partie du travail l'application des équations d'état aux mélanges et aux fractions pétrolières. Dans le cas des mélanges, nous avons étudié deux mélanges binaires. Dans le cas du premier mélange, nous avons calculé la pression de bulle et le facteur de compressibilité pour différentes compositions. Nous avons constaté que les équations que nous avons proposées donnent des résultats comparables aux équations d'état *SRK* et *PR*. Nous avons tout de même noté un meilleur comportement des équations d'état de type Peng-Robinson par rapport aux autres équations d'état. Nous avons aussi étudié un mélange binaire constitué de méthane et de n-décane. Les mêmes constatations que dans le cas du premier mélange ont été enregistrées, nous avons toutefois observé un meilleur comportement des équations de type Redlich-Kwong par rapport aux autres équations d'état. Nous pouvons ainsi conclure, que dans le cas des mélanges, il n'y a pas d'équation d'état privilégiée par rapport à une autre et que le choix d'une équation ne peut se faire que par comparaison entre les écarts par rapport aux valeurs expérimentales. Nous avons par la suite étudié un mélange multicomposant, représentant un gaz (contenant des composés non-hydrocarbonés) en équilibre avec une huile d'absorption. Dans l'ensemble, les résultats obtenus par les nouvelles équations d'état (*RKG* et *PRG*) sont en accord avec les valeurs expérimentales et sont pratiquement confondus avec les résultats obtenus par les équations d'état *SRK* et *PR*. Les mêmes constatations ont pu être relevées lors de l'étude d'une fraction pétrolière. Les résultats obtenus sont en accord avec les valeurs expérimentales.

10. Application des équations d'état cubiques à des pétroles bruts algériens

Dans cette partie du travail, nous nous proposons d'appliquer les équations d'état cubiques en vue de déterminer les équilibres de phases de pétroles bruts algériens. Sur la base de l'utilisation des équations d'état et d'une méthode de caractérisation de fractions pétrolières, nous allons étudier cinq pétroles algériens en déterminant certaines propriétés thermodynamiques, mais surtout, en étudiant le comportement de chaque pétrole en fonction de la température et de la pression grâce à la détermination de la courbe de phase enveloppe.

10.1 Présentation des pétroles bruts étudiés

Les caractéristiques physico-chimiques des cinq pétroles bruts étudiés sont données dans les tableaux 10.1, 10.2, 10.3, 10.4 et 10.5 (Bouffadene et Bouguerra, 1996).

Tableau 10.1 - Caractéristiques physico-chimiques du pétrole brut de Mereksen

Caractéristiques	Résultats	Méthodes
Densité à 15 °C	0.7929	Densimètre électronique
Tension de vapeur Reid (kg/cm ³)	1.05	Norme AFNOR NF 07-007
Viscosité cinématique 25 °C (cst)	6.07	Viscosimètre Canon-Frenske
Viscosité cinématique 37.8 °C (cst)	4.12	Norme AFNOR NF T60-100
Teneur en eau (% vol.)	0	Norme AFNOR NF T60-103
Point de congélation (°C)	-27	Norme AFNOR NF T60-105
Indice d'acidité en mg KOH/g	0.29	Norme AFNOR NF T60-112
Teneur en soufre (%poids)	0.08	
Teneur en carbone Conradson (% poids)	0.45	Norme AFNOR NF T60-116
Facteur de caractérisation de Watson	11.9	Diagramme K _{UOP} 375-59
Point éclair (°C)	20	Norme AFNOR NF M07-019

Tableau 10.2 - Caractéristiques physico-chimiques du pétrole brut de Guellala

Caractéristiques	Résultats	Méthodes
Densité à 15 °C	0.8096	Densimètre électronique
Tension de vapeur Reid (kg/cm ³)	0.58	Norme AFNOR NF 07-007
Viscosité cinématique 25 °C (cst)	4.03	Viscosimètre Canon-Frenske
Viscosité cinématique 37.8 °C (cst)	2.99	Norme AFNOR NF T60-100
Teneur en eau (% vol.)	0	Norme AFNOR NF T60-103
Point de congélation (°C)	-35	Norme AFNOR NF T60-105
Indice d'acidité en mg KOH/g	0.47	Norme AFNOR NF T60-112
Facteur de caractérisation de Watson	12.3	Diagramme K _{UOP} 375-59
Point éclair (°C)	20	Norme AFNOR NF M07-019

Tableau 10.3 - Caractéristiques physico-chimiques du pétrole brut d'Ohanet

Caractéristiques	Résultats	Méthodes
Densité à 15 °C	0.821	Densimètre électronique
Teneur en eau (% vol.)	0.15	Norme AFNOR NF T60-103
Point de congélation (°C)	-46	Norme AFNOR NF T60-105
Teneur en soufre (%poids)	0.038	Spectrometre RX
Teneur en carbone Conradson (% poids)	0.8	Norme AFNOR NF T60-116

Tableau 10.4 - Caractéristiques physico-chimiques du pétrole brut HRS 162

Caractéristiques	Résultats	Méthodes
Densité à 15 °C	0.8465	Densimètre électronique
Tension de vapeur Reid (kg/cm3)	0.25	Norme AFNOR NF 07-007
Viscosité cinématique 25 °C (cst)	68.13	Viscosimètre Canon-Frenske
Viscosité cinématique 37.8 °C (cst)	8.75	Norme AFNOR NF T60-100
Teneur en eau (% vol.)	< 0.15	Norme AFNOR NF T60-103
Point de congélation (°C)	+2.5	Norme AFNOR NF T60-105
Indice d'acidité en mg KOH/g	3.12	Norme AFNOR NF T60-112

Tableau 10.5 - Caractéristiques physico-chimiques du pétrole brut PB 31

Caractéristiques	Résultats
Densité à 15 °C	0.8395
Viscosité 20 °C (SSU)	40.2
Viscosité 37.8 °C (SSU)	34.2
Indice saponification	0.28
Point de congélation (°C)	-15

Les courbes TBP de ces cinq pétroles bruts sont données en sur les figures 10.1, 10.2, 10.3, 10.4 et 10.5. Etant donné que les résidus de ces cinq pétroles ne sont pas caractérisés, nous ne considérons que les fractions distillées, les pourcentages distillés sont recalculés de façon à ce que le distillat de chaque pétrole brut correspond à 100%. Les résultats de l'analyse T.P.B. des fractions distillées de ces cinq pétroles bruts (Bouffadene et Bouguerra, 1996) sont donnés dans les tableau 10.6, 10.7, 10.8, 10.9 et 10.10.

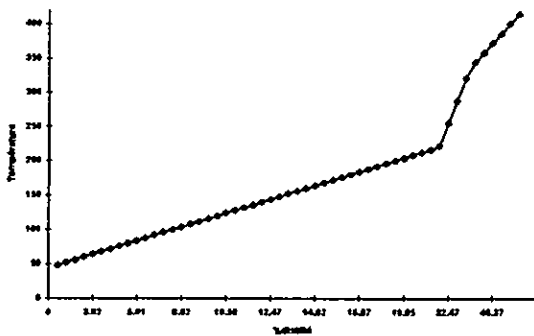


Figure 10.1 - Courbe de distillation TBP du pétrole brut d'Ohanet

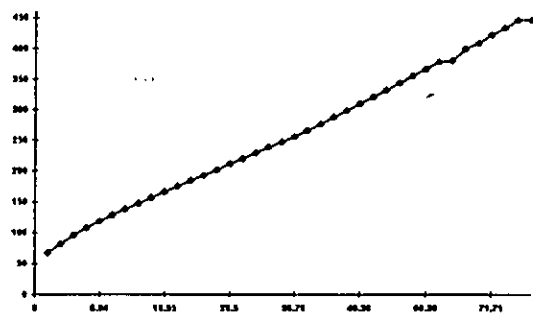


Figure 10.2 - Courbe TBP du pétrole brut PB 31

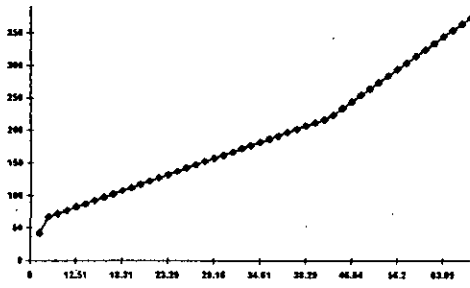


Figure 10.3 - Courbe TBP du pétrole brut de Guellala

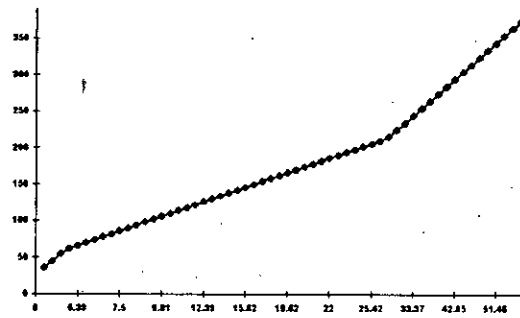


Figure 10.4 - Courbe de distillation TBP du pétrole brut HRS 162

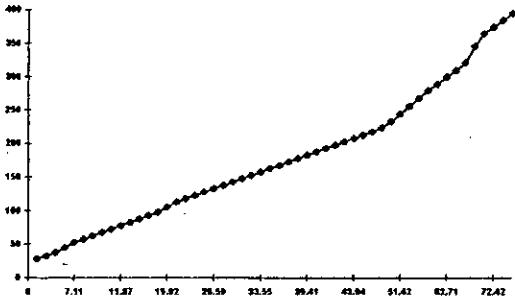


Figure 10.5 - Courbe de distillation TBP du pétrole brut de Merekseen

Tableau 10.6 - Température d'ébullition et densité en fonction du pourcentage massique distillé du pétrole brut HRS 162

% poids distillé	Tb(°C)	d	% poids distillé	Tb(°C)	d
1.0	84.0	0.7166	42.24	214.0	0.7959
4.6	100.0	0.7279	49.16	235.0	0.8010
8.42	116.0	0.7297	56.32	255.0	0.8104
12.86	132.0	0.7468	63.30	275.0	0.8210
18.62	148.0	0.7558	77.52	315.0	0.8332
25.24	164.0	0.7667	85.30	335.0	0.8407
28.76	180.0	0.7730	92.66	355.0	0.847
34.14	196.0	0.7818	100.00	375.0	0.8512

Tableau 10.7 - Température d'ébullition et densité en fonction du pourcentage massique distillé du pétrole brut d'Ohanet

% poids distillé	Tb(°C)	d	% poids distillé	Tb(°C)	d
3.43	48.0	0.6631	32.69	192.0	0.7764
5.58	56.0	0.6671	35.71	208.0	0.7820
7.99	72.0	0.6677	42.24	216.0	0.7831
11.55	92.0	0.7128	56.04	255.5	0.7904
13.84	104.0	0.7173	60.95	321.5	0.8170
20.14	136.0	0.7552	72.46	359.0	0.8337
25.11	160.0	0.7671	92.38	401.0	0.8593
29.07	180.0	0.7743	100.00	415.0	0.8676

Tableau 10.8 - Température d'ébullition et densité en fonction du pourcentage massique distillé du pétrole brut PB 31

% poids distillé	Tb(°C)	d	% poids distillé	Tb(°C)	d
2.24	68.0	0.677	45.28	239.0	0.812
6.89	96.0	0.712	56.22	277.0	0.835
9.27	108.0	0.722	61.79	299.0	0.845
16.66	139.0	0.754	73.18	344.5	0.871
21.72	157.0	0.768	84.97	380.5	0.889
26.85	176.0	0.779	87.83	400.0	0.895
32.04	194.0	0.787	93.80	423.0	0.911
39.93	221.0	0.800	100.00	447.0	0.976

Tableau 10.9 - Température d'ébullition et densité en fonction du pourcentage massique distillé du pétrole brut Guellala

% poids distillé	Tb(°C)	d	% poids distillé	Tb(°C)	d
7.87	35.0	0.6480	61.97	235.0	0.8135
10.86	72.5	0.6782	68.42	255.0	0.8266
22.96	107.5	0.7234	76.48	295.0	0.8343
31.36	132.5	0.7618	84.81	315.5	0.8459
39.07	162.5	0.7736	88.83	335.0	0.8580
48.84	192.5	0.7867	94.72	355.0	0.8632
56.44	217.5	0.8010	97.37	365.0	0.8666
59.33	222.5	0.8113	100.00	385.0	0.8693

Tableau 10.10 - Température d'ébullition et densité en fonction du pourcentage massique distillé du pétrole brut Mereksen

% poids distillé	Tb(°C)	d	% poids distillé	Tb(°C)	d
5.70	27.5	0.6286	53.43	192.5	0.7875
8.76	45.0	0.6578	56.21	202.5	0.8018
13.97	67.5	0.6861	64.13	230.0	0.8150
18.45	82.5	0.7086	70.68	255.5	0.8257
24.44	97.5	0.7185	81.50	310.0	0.8389
30.52	117.5	0.7332	90.82	345.0	0.8545
36.68	137.5	0.7768	97.12	385.0	0.8612
46.53	167.5	0.7875	100.00	395.0	0.8617

10.2 Caractérisation des pétroles bruts étudiés

En suivant la procédure donnée par Edmister (1988), nous subdivisons les fractions pétrolières étudiées en 15 pseudocomposés, pour lesquels nous avons déterminé la température d'ébullition et la densité par interpolation d'un polynôme de degré cinq à partir des caractéristiques des coupes de la T.B.P. Le résultat de fractionnement est donné dans les tableaux 10.11, 10.12, 10.13, 10.14 et 10.15.

Tableau 10.11 - Température d'ébullition et densité des 15 pseudocomposés pour le pétrole brut HRS 162

N	Fraction molaire	Tb(°C)	d	N	Fraction molaire	Tb(°C)	d
1	0.1097	95.67	0.7224	9	0.0592	255.92	0.8119
2	0.0984	123.07	0.7376	10	0.0553	273.81	0.8186
3	0.0898	146.64	0.7518	11	0.0515	292.18	0.8251
4	0.0829	167.42	0.7647	12	0.0479	310.92	0.8316
5	0.0772	186.32	0.7765	13	0.0446	329.79	0.8387
6	0.0722	204.08	0.7869	14	0.0416	348.39	0.8467
7	0.0676	221.31	0.7962	15	0.0390	366.19	0.8562
8	0.0633	238.49	0.8045				

Tableau 10.12 - Température d'ébullition et densité des 15 pseudocomposés pour le pétrole brut de Mereksen

N	Fraction molaire	Tb(°C)	d	N	Fraction molaire	Tb(°C)	d
1	0.1180	20.56	0.6118	9	0.0588	202.00	0.7986
2	0.1044	50.58	0.6638	10	0.0537	226.05	0.8099
3	0.0974	76.19	0.7018	11	0.0486	252.30	0.8217
4	0.0871	98.72	0.7293	12	0.0436	280.93	0.8338
5	0.0806	119.38	0.7494	13	0.0387	311.94	0.8452
6	0.0748	139.21	0.7645	14	0.0340	345.21	0.8542
7	0.0694	159.11	0.7768	15	0.0296	380.47	0.8607
8	0.0641	179.84	0.7878				

Tableau 10.13 - Température d'ébullition et densité des 15 pseudocomposés pour le pétrole brut de Guellala

N	Fraction molaire	Tb(°C)	d	N	Fraction molaire	Tb(°C)	d
1	0.1190	27.15	0.6476	9	0.0578	215.56	0.8061
2	0.1047	58.72	0.6795	10	0.0531	238.09	0.8176
3	0.0941	85.85	0.7064	11	0.0486	261.68	0.8286
4	0.0859	109.83	0.7292	12	0.0442	286.26	0.8391
5	0.0791	131.78	0.7486	13	0.0402	311.58	0.8492
6	0.0732	152.63	0.7655	14	0.0365	337.20	0.8587
7	0.0678	173.18	0.7804	15	0.0331	362.53	0.8675
8	0.0627	194.01	0.7937				

Tableau 10.14 - Température d'ébullition et densité des 15 pseudocomposés pour le pétrole brut d'Ohanet

N	Fraction molaire	Tb(°C)	d	N	Fraction molaire	Tb(°C)	d
1	0.1346	41.91	0.6537	9	0.0533	280.21	0.8077
2	0.1134	85.39	0.7019	10	0.0476	308.88	0.8155
3	0.0994	120.08	0.7359	11	0.0426	337.33	0.8247
4	0.0891	149.19	0.7593	12	0.0385	363.92	0.8350
5	0.0806	175.30	0.7751	13	0.0355	386.37	0.8458
6	0.0731	200.39	0.7859	14	0.0336	401.84	0.8563
7	0.0661	225.82	0.7939	15	0.0332	406.83	0.8648
8	0.0595	252.38	0.8007				

Tableau 10.15 - Température d'ébullition et densité des 15 pseudocomposés pour le pétrole brut PB 31

N	Fraction molaire	Tb(°C)	d	N	Fraction molaire	Tb(°C)	d
1	0.1220	75.93	0.6537	9	0.0566	276.28	0.8077
2	0.1072	109.61	0.7019	10	0.0517	304.22	0.8155
3	0.0962	138.43	0.7359	11	0.0470	330.14	0.8247
4	0.0874	163.93	0.7593	12	0.0427	356.73	0.8350
5	0.0800	187.42	0.7751	13	0.0388	383.46	0.8458
6	0.0735	209.97	0.7859	14	0.0353	409.56	0.8563
7	0.0675	232.42	0.7939	15	0.0322	434.02	0.8648
8	0.0619	255.40	0.8007				

A partir des résultats précédents, nous pouvons calculer les propriétés critiques et le facteur acentrique de chaque pseudocomposé en utilisant les équations données en annexe H. Les quatre paramètres des équations d'état *SRKCG2* et *PRCG2* sont déterminés à partir de la connaissance du nombre équivalent d'atomes de carbone des trois familles d'hydrocarbures (n-alcane, n-alkylcyclohexanes et n-alkylbenzènes). Le nombre équivalent d'atomes de carbone de chaque famille est déterminé à partir de la connaissance de la masse molaire (équation H.5) et des relations suivantes:

$$N_P = (M - 2)/14 \quad (10.1)$$

$$N_N = M/14 \quad (10.2)$$

$$N_A = (M + 6)/14 \quad (10.3)$$

Les valeurs des paramètres F_1, F_2, F_3 et F_4 de chaque famille d'hydrocarbures sont calculées pour chaque nombre équivalent d'atomes de carbone (N_P, N_N et N_A). A partir de la connaissance de la composition PNA du mélange qui peut être estimée par les équations de Riazi et Daubert (1987) (voir annexe H), nous calculons les valeurs des paramètres F_1, F_2, F_3 et F_4 de la fraction pétrolière à partir de la relation suivante:

$$F_i = F_{iP}x_P + F_{iN}x_N + F_{iA}x_A \quad (10.4)$$

Nous donnons dans les tableaux suivants les valeurs de propriétés critiques, du facteur acentrique et des quatre paramètres F_1, F_2, F_3 et F_4 de chaque pseudocomposé des cinq pétroles bruts étudiés.

Tableau 10.16 - Propriétés des pseudocomposés du pétrole brut PB 31

N°	T_C (K)	P_C (bar)	ω	F_1	F_2	F_3	F_4
1	520.1	30.5	0.2608	16.58	8696.86	0.91	0.79
2	558.9	28.1	0.3104	19.61	11122.83	0.97	0.84
3	590.7	26.1	0.3455	22.49	13481.61	1.02	0.89
4	617.6	24.3	0.3985	25.37	15880.08	1.08	0.94
5	641.4	22.7	0.4411	28.40	18425.20	1.13	0.99
6	663.4	21.1	0.4846	31.71	21243.68	1.18	1.04
7	684.7	19.6	0.5302	35.49	24492.09	1.24	1.10
8	706.2	18.3	0.5786	39.95	28363.67	1.31	1.16
9	728.4	17.0	0.6302	45.33	33093.85	1.39	1.22
10	751.5	15.8	0.6853	51.92	38962.27	1.47	1.30
11	775.4	14.7	0.7436	60.01	46290.00	1.56	1.38
12	799.8	13.7	0.8052	70.00	55502.38	1.66	1.46
13	823.9	12.8	0.8696	81.87	66759.46	1.77	1.55
14	846.7	11.9	0.9790	95.77	80349.57	1.88	1.64
15	867.0	11.0	1.0376	111.39	96206.51	1.98	1.73

Tableau 10.17 - Propriétés des pseudocomposés du pétrole brut de Guellala

N°	T_C (K)	P_C (bar)	ω	F_1	F_2	F_3	F_4
1	462.8	35.3	0.1922	12.30	5475.94	0.82	0.71
2	500.6	32.3	0.2353	15.06	7529.17	0.88	0.76
3	532.2	30.1	0.2742	17.41	9370.94	0.93	0.80
4	559.6	28.3	0.3098	19.60	11129.60	0.97	0.84
5	584.0	26.8	0.3437	21.76	12896.55	1.01	0.88
6	606.5	25.3	0.3774	24.01	14760.99	1.05	0.92
7	628.0	23.9	0.4125	26.47	16819.02	1.09	0.96
8	649.0	22.5	0.4503	29.26	19180.16	1.14	1.00
9	670.1	21.0	0.4918	32.53	21973.12	1.20	1.05
10	691.4	19.6	0.5377	36.45	25352.42	1.26	1.11
11	713.1	18.1	0.5886	41.22	29497.52	1.33	1.17
12	735.16	16.7	0.6446	47.05	34622.90	1.41	1.24
13	757.32	15.3	0.7055	54.16	40958.85	1.50	1.32

N°	T_C (K)	P_C (bar)	ω	F_1	F_2	F_3	F_4
14	779.25	14.1	0.7706	52.75	48729.53	1.59	1.40
15	800.5	12.9	0.8387	72.96	58152.47	1.68	1.48

Tableau 10.18 - Propriétés des pseudocomposés du pétrole brut d'Ohanet

N°	T_C (K)	P_C (bar)	ω	F_1	F_2	F_3	F_4
1	462.8	35.3	0.1922	13.93	6525.19	0.86	0.74
2	500.6	32.3	0.2353	17.42	9355.22	0.93	0.80
3	532.2	30.1	0.2742	20.63	11946.03	0.99	0.86
4	559.6	28.3	0.3098	23.67	14459.01	1.04	0.91
5	584.0	26.8	0.3437	26.83	17088.62	1.10	0.97
6	606.5	25.3	0.3774	30.36	20049.76	1.16	1.02
7	628.0	23.9	0.4125	34.55	23595.34	1.23	1.08
8	649.0	22.5	0.4503	39.71	28022.17	1.31	1.15
9	670.1	21.0	0.4918	46.20	33660.82	1.39	1.23
10	691.4	19.6	0.5377	54.31	40822.17	1.49	1.32
11	713.1	18.1	0.5886	64.10	49651.35	1.60	1.41
12	735.2	16.7	0.6446	75.07	59811.62	1.69	1.49
13	757.3	15.3	0.7055	85.92	70139.87	1.78	1.57
14	779.3	14.1	0.7706	94.19	78249.10	1.85	1.62
15	800.5	12.9	0.8387	96.69	80800.34	1.87	1.64

Tableau 10.19 - Propriétés des pseudocomposés du pétrole brut de Mereksen

N°	T_C (K)	P_C (bar)	ω	F_1	F_2	F_3	F_4
1	450.6	32.4	0.1801	11.67	4931.36	0.80	0.68
2	489.6	32.2	0.2248	14.44	7019.85	0.87	0.75
3	522.0	31.3	0.2588	16.51	8681.55	0.91	0.79
4	549.4	30.2	0.2889	18.45	10248.61	0.95	0.82
5	573.1	28.7	0.3186	20.38	11819.50	0.98	0.86
6	594.6	27.1	0.3498	22.41	13485.32	1.02	0.89
7	615.1	25.4	0.3839	24.67	15345.89	1.06	0.93
8	635.6	23.7	0.4221	27.28	17522.01	1.11	0.97
9	657.0	21.7	0.4653	30.42	20169.91	1.16	1.02
10	679.6	20.2	0.5144	34.32	23496.40	1.23	1.08
11	703.7	18.5	0.5708	39.29	27793.77	1.30	1.15
12	729.4	16.8	0.6359	45.78	33473.59	1.39	1.23
13	756.2	15.1	0.7118	54.40	41136.35	1.50	1.32
14	783.6	13.3	0.8018	66.10	51732.48	1.62	1.43
15	810.5	11.5	0.9564	81.96	66525.22	1.76	1.54

Tableau 10.20 - Propriétés des pseudocomposés du pétrole brut HRS 162

N°	T_C (K)	P_C (bar)	ω	F_1	F_2	F_3	F_4
1	545.0	30.0	0.2861	18.22	10044.13	0.95	0.82
2	573.6	27.1	0.3318	20.93	12191.84	0.99	0.87
3	597.8	25.0	0.3730	23.47	14254.55	1.04	0.91
4	618.9	23.4	0.4105	25.92	16288.42	1.09	0.95
5	637.8	22.0	0.4457	28.38	18355.83	1.13	0.99
6	655.2	20.9	0.4801	30.94	20529.09	1.17	1.03
7	671.7	19.7	0.5150	33.70	22891.54	1.22	1.07
8	687.6	18.6	0.5516	36.77	25537.43	1.26	1.11

N°	T_C (K)	P_C (bar)	ω	F_1	F_2	F_3	F_4
9	703.3	17.5	0.5908	40.27	28570.94	1.32	1.16
10	719.0	16.5	0.6331	44.32	32103.60	1.37	1.21
11	734.8	15.4	0.6785	49.03	36247.95	1.43	1.26
12	750.8	14.4	0.7265	54.48	41103.75	1.50	1.32
13	766.8	13.5	0.7758	60.73	46731.78	1.57	1.38
14	782.9	12.7	0.8244	67.72	53138.61	1.63	1.44
15	798.9	12.1	0.9188	75.16	60093.11	1.70	1.50

10.3 Génération de la courbe de phase enveloppe

La génération de la courbe de phase enveloppe consiste à calculer le flash à température et θ ou à pression et θ fixées. Nous avons calculé les coordonnées de la courbe de bulle ($\theta = 0$), la courbe de rosée ($\theta = 1$) ainsi que les courbes isotitres le long desquelles la valeur de θ est constante. Le point critique du mélange est estimé par les méthodes de Li (température critique) et de Key (pression critique) (Reid et coll, 1988).

Nous avons appliqué les équations d'état *SRK*, *SRKCG2*, *PR* et *PRCG2* aux cinq pétroles bruts. Les résultats des calculs sont donnés dans les tableaux 10.21, 10.22, 10.23, 10.24 et 10.25.

Les figures 10.6-10.26 représentent les courbes de phases enveloppe déterminées par différentes méthodes. Nous remarquons que toutes les courbes convergent vers la région du point critique. Les valeurs obtenues par *SRK* et *PR* sont pratiquement confondues, ce qui confirme que les deux équations donnent des résultats proches dans la détermination des équilibres de phases. La même remarque peut être faite pour les équations *SRKCG2* et *PRCG2*. Les équations d'état couplées à la méthode de contribution de groupe prédisent en moyenne des valeurs de températures supérieures de 5 K - pour une même pression - par rapport aux équations d'état classiques.

Nous comparons dans les figures 10.27, 10.28, 10.29, 10.30 et 10.31, les courbes de phases enveloppe - des cinq pétroles bruts - obtenues par les quatre équations d'état.

Nous remarquons que toutes les courbes de phases enveloppe relatives aux équations d'état *SRK* et *PR* - pour un même pétrole - sont confondues au niveau des basses pressions. Par contre, à haute pression, nous constatons un léger décalage entre les deux courbes. Ceci pourrait être dû à la forme de l'équation d'état, en effet, l'équation d'état *SRK* prédit un facteur de compressibilité critique de 0.333 quelque soit le composé, alors que l'équation d'état *PR* prédit un facteur de compressibilité critique de 0.307. La même constatation peut être faite pour les équations d'état *SRKCG2* et *PRCG2*.

Tableau 10.21 - Coordonnées de la courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par les équations d'état PR, PRCG2, SRKCG2 et SRK

Equation d'état	Pression	Température (K)				
PRCG2	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	352.04	398.32	429.65	464.67	529.65
	5	435.49	479.77	509.6	541.79	595.66
	10	486.78	527.96	555.32	583.71	628
	15	523.96	561.71	586.28	610.83	646.82
	20	555.24	589.07	610.41	630.82	658.85
	25	583.97	613.07	630.46	646.13	665.92
	30	613.14	635.77	647.77	657.31	667.51
PR	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	357.82	395.83	426.04	461.95	529.65
	5	440.99	477.85	506.1	538.27	593.29
	10	491.54	526.16	551.86	579.97	625.08
	15	527.85	559.82	582.78	606.95	643.77
	20	558.15	586.95	606.84	626.93	655.94
	25	585.72	610.56	626.81	642.37	663.42
	30	613.28	632.59	644	653.96	665.93
SRKCG2	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	351.92	398.56	430.13	465.55	529.89
	5	434.84	479.46	509.54	542.04	596.97
	10	486.17	527.72	555.38	584.18	629.24
	15	523.6	561.78	586.69	611.67	648.32
	20	555.23	589.57	611.29	632.14	660.79
	25	584.37	614.07	631.91	648.02	668.42
	30	613.89	637.29	649.83	659.88	670.75
SRK	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	357.76	395.88	426.16	462.12	529.89
	5	440.28	477.22	505.62	537.89	593.03
	10	490.8	525.61	551.44	579.7	624.98
	15	527.13	559.54	582.67	607.03	644.06
	20	558.0	587.06	607.16	627.46	656.73
	25	585.96	611.77	627.64	643.43	664.78
	30	613.97	633.7	645.41	655.63	667.94

Tableau 10.22 - Coordonnées de la courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par les équations d'état PR, PRCG2, SRKCG2 et SRK

Equation d'état Pression		Température (K)				
Equation	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
PRCG2	1	435.8	464.67	486.36	510.39	549.4
	5	528.02	554	572.6	592.15	622.14
	10	583.02	605.91	620.92	636.47	659.33
	15	622.36	640.94	653.09	664.85	681.33
	20	656.04	669.62	677.82	685.24	694.8
	24.6	695.84	696.12	696.27	696.4	696.58
	PR	1	430.46	460.66	483.53	508.8
5		522.49	549.31	568.6	588.86	619.84
10		577.26	600.29	616.14	632.16	655.7
15		616.31	635.27	647.74	659.89	677.05
20		649.48	663.42	671.99	679.88	690.33
25		691.36	691.72	691.9	692.06	692.26
SRKCG2	1	435.85	464.99	486.96	511.43	551.4
	5	527.52	553.78	572.62	592.48	622.99
	10	582.65	605.43	621.07	636.89	660.12
	15	622	641.27	653.65	665.65	682.45
	20	656.54	670.49	678.93	686.57	696.45
	24.6	697.59	698.09	698.31	698.49	698.71
	SRK	1	430.35	460.56	483.44	508.74
5		521.78	548.66	567.99	588.29	619.31
10		576.68	599.8	615.73	631.81	655.43
15		616.09	635.2	647.77	660.01	677.28
20		649.79	663.92	672.61	680.6	691.19
25		692.1	692.85	693.16	693.41	693.7

Tableau 10.23 - Coordonnées de la courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Mereksen par les équations d'état PR, PRCG2, SRKCG2 et SRK

Equation d'état	Pression	Température (K)				
		V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
PRCG2	P(bar)					
	1	343.49	386.66	416.49	451.54	536.86
	5	424.46	466.07	495.1	528.58	598.65
	10	474	513.16	540.46	571.12	628.65
	15	509.75	546.25	571.44	598.83	645.75
	20	539.67	573.15	595.8	619.44	654.12
	25	566.88	596.75	616.23	635.45	662.69
	30	593.69	618.82	634.01	647.66	664.46
	35	625.25	642.37	649.87	654.55	658.31
	37.1	655	651.92	655.38	655.51	655.7
PR	P(bar)					
	1	349.37	384.53	412.76	448.55	538.38
	5	430.59	464.65	491.72	525.14	597.69
	10	479.68	511.98	537.25	567.49	626.71
	15	514.79	545.07	568.3	595.13	643.43
	20	543.96	571.84	592.66	615.73	654.09
	25	570.3	595.19	613.04	631.82	660.46
	30	596.06	616.84	630.74	644.25	662.25
	35	626.01	639.4	646.47	651.88	657.28
	37.2	651.58	651.92	652.12	652.31	652.56
SRKCG2	P(bar)					
	1	343.57	386.95	416.99	452.39	539.88
	5	423.97	465.79	495.05	528.93	600.57
	10	473.48	512.92	540.49	571.62	630.48
	15	509.42	546.26	571.8	599.72	647.85
	20	539.62	573.54	596.61	620.84	659.01
	25	567.17	597.6	617.59	637.44	665.76
	30	594.29	620.16	635.99	650.35	668.22
	35	625.47	643.87	652.52	658.35	663.32
	37.1	658.56	658.92	659.13	659.31	659.57
SRK	P(bar)					
	1	349.16	384.6	412.95	448.8	538.67
	5	429.74	461.07	491.27	524.82	597.57
	10	478.8	511.38	536.83	567.27	626.81
	15	514.11	544.7	568.15	595.24	643.96
	20	543.59	571.83	592.91	616.3	655.13
	25	570.32	595.62	613.79	632.92	662.07
	30	596.49	617.77	632.04	645.95	664.92
	35	626.52	640.71	648.39	654.4	660.58
	37.5	654.57	654.86	655.03	655.19	655.42

Tableau 10.24 - Coordonnées de la courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par les équations d'état PR, PRCG2, SRKCG2 et SRK

Equation d'état Pression		Température (K)				
PRCG2	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	374.21	428.11	466.1	512.2	588.49
	5	465.11	517.47	554.3	595.81	651.83
	10	522.21	571.5	605.44	640.93	689.22
	15	564.62	610.18	640.29	669.51	706.58
	20	601.55	642.38	667.54	689.89	715.78
	25	637.71	671.92	690.22	704.18	717.74
	30.2	709.94	710.31	710.52	710.7	710.93
PR	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	377.21	425.48	463.8	511.6	586.49
	5	467.89	514.99	551.34	593.14	652.33
	10	524.28	568.83	601.84	636.89	683.66
	15	565.85	607.12	636.05	664.58	700.72
	20	601.77	638.7	662.65	684.38	710.13
	25	636.58	667.28	684.63	698.48	712.82
	30	682.55	702.15	703.03	704.41	705.2
30.6	705.23	705.46	705.6	705.72	702	
SRKCG2	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	374.36	428.73	467	513.75	586.34
	5	464.79	517.6	554.82	596.98	653.92
	10	522.01	571.85	606.27	642.41	691.31
	15	564.77	611.02	641.71	671.56	709.17
	20	602.35	643.85	669.68	692.64	719.11
	25	638.73	674.07	693.16	707.78	722.02
	30.5	717.74	715.1	715.31	715.47	715.7
SRK	P(bar)	V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
	1	377.28	425.68	463.98	511.66	586.34
	5	467.45	514.7	551.09	592.9	651.92
	10	523.96	568.74	601.89	637.03	683.72
	15	565.91	607.51	636.65	665.3	701.47
	20	602.35	639.71	663.91	685.81	711.67
	25	637.78	669	686.65	700.7	715.22
	30	683.58	704.28	706.42	707.4	708.31
30.6	707.94	708.27	708.46	708.62	704	

Tableau 10.25 - Coordonnées de la courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par les équations d'état PR, PRCG2, SRKCG2 et SRK

Equation d'état	Pression	Température (K)				
		V/F=0	V/F=0.3	V/F=0.5	V/F=0.7	V/F=1.0
PRCG2	P(bar)					
	1	415.97	454.39	485.05	523.14	596.73
	5	509.06	546.5	575.13	608.81	663.14
	10	566.71	601.22	626.91	655.33	701.4
	15	608.86	640.01	662.07	684.88	718.29
	20	645.71	672.25	689.53	705.77	726.64
	25	684.46	703.07	712.38	719.01	724.95
	27.5	720.25	720.54	720.72	720.86	721.07
PR	P(bar)					
	1	411.58	450.35	482.08	521.17	596.73
	5	503.77	540.82	569.97	604.07	663.14
	10	559.78	594.07	620.05	648.93	695.35
	15	600.34	631.33	653.82	677.58	713.37
	20	634.86	661.68	680.04	698.28	723.86
	25	668.08	688.9	701.74	713.29	727.63
	30	719.37	719.59	719.72	719.84	720.02
SRKCG2	P(bar)					
	1	416.22	454.95	485.91	524.62	596.7
	5	509.06	546.5	575.53	609.82	662.72
	10	566.51	601.46	627.6	656.66	703.92
	15	609	640.74	663.33	686.8	721.23
	20	646.28	673.59	691.51	708.44	730.28
	25	685.08	704.9	715.19	725.64	729.88
	27.5	724.96	725.173	725.3	725.42	725.59
SRK	P(bar)					
	1	411.4	450.25	482	521.1	596.7
	5	502.98	540.14	569.36	603.54	662.72
	10	559.09	593.56	619.67	648.69	695.25
	15	600.01	631.25	653.91	677.85	713.84
	20	635.05	662.18	680.75	699.2	725
	25	668.86	690.07	703.16	714.93	729.55
	29	702.68	714.44	718.86	721.41	723.58

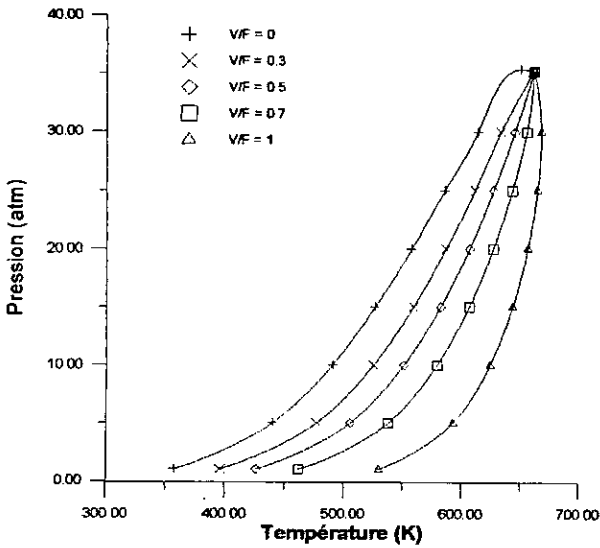


Figure 10.6 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état SRK

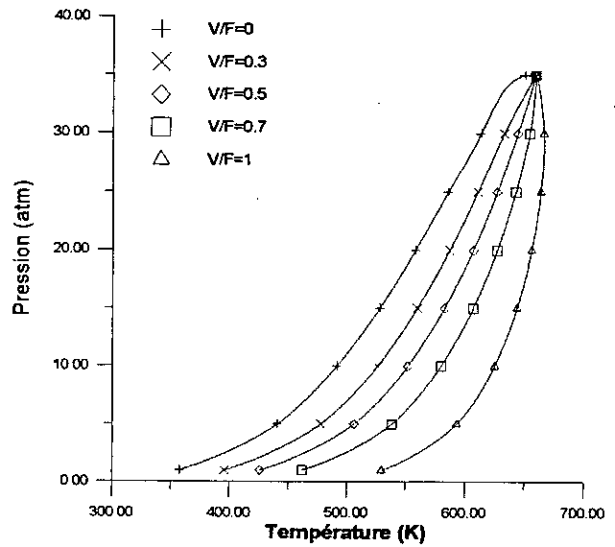


Figure 10.7 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état PR

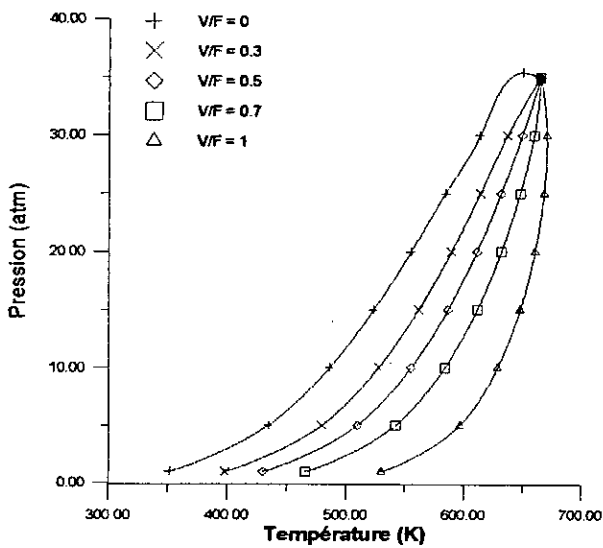


Figure 10.8 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état SRKCG2

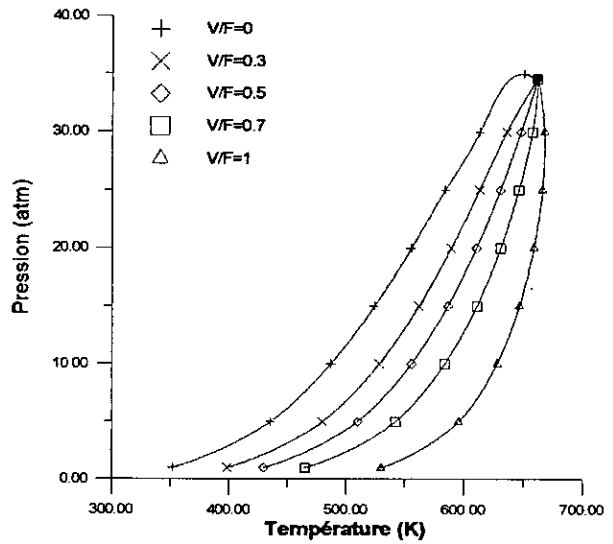


Figure 10.9 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Guellala par l'équation d'état PRCG2

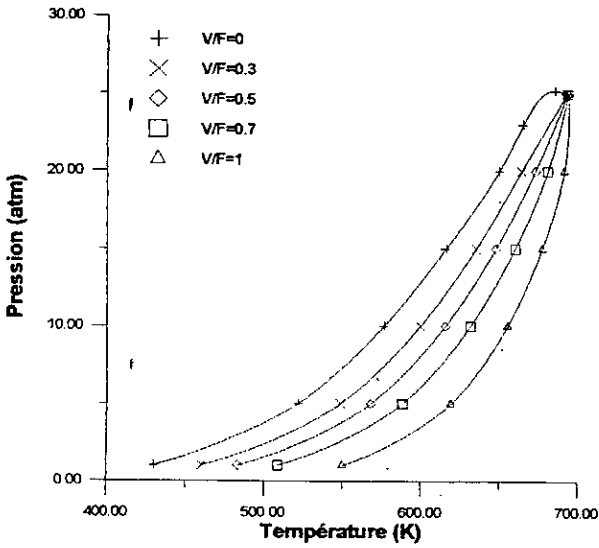


Figure 10.10 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état SRK

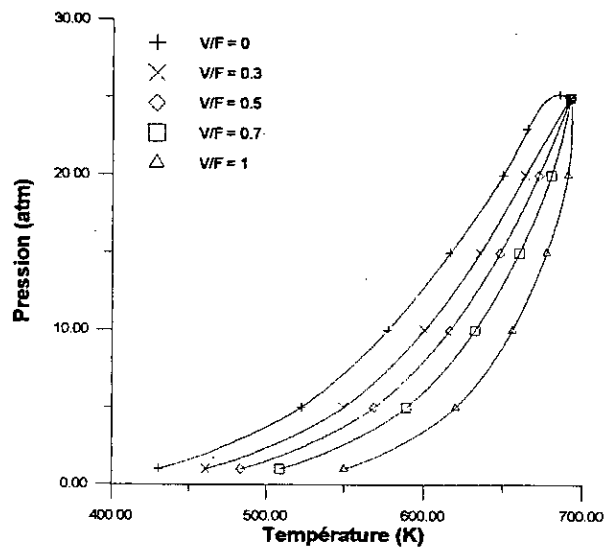


Figure 10.11 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état PR

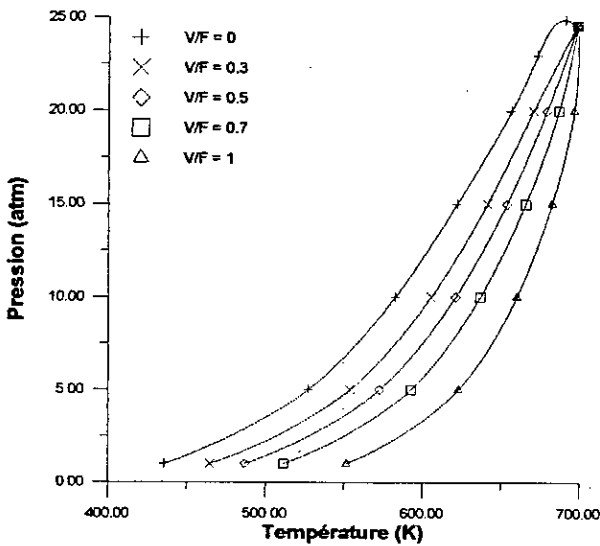


Figure 10.12 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état SRKCG2

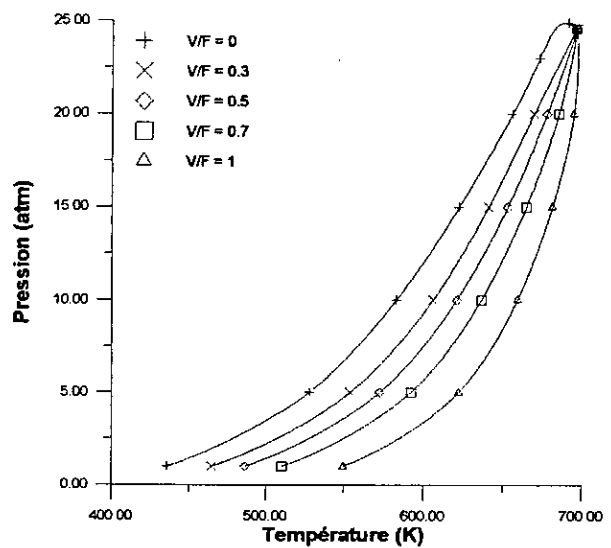


Figure 10.13 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut HRS 162 par l'équation d'état PRCG2

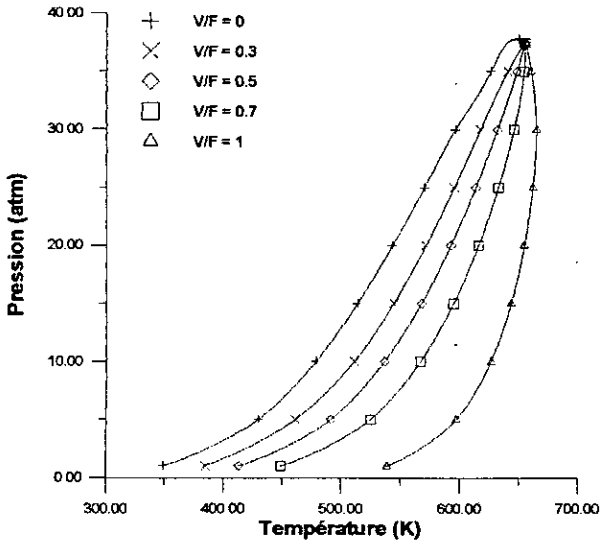


Figure 10.14 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Merkesen par l'équation d'état SRK

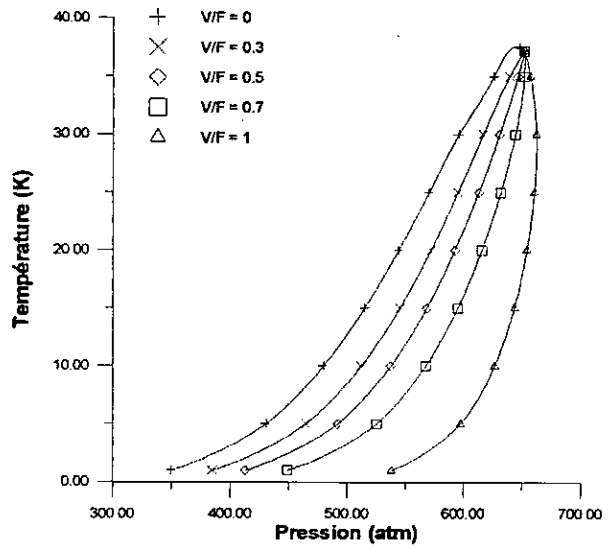


Figure 10.15 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Merkesen par l'équation d'état PR

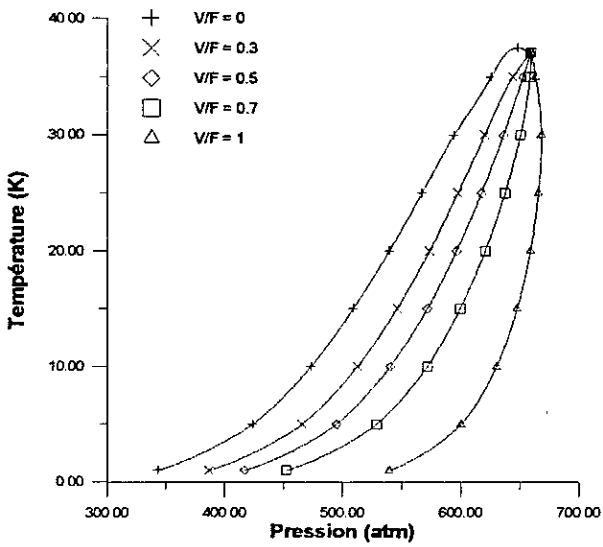


Figure 10.16 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Merkesen par l'équation d'état SRKCG2

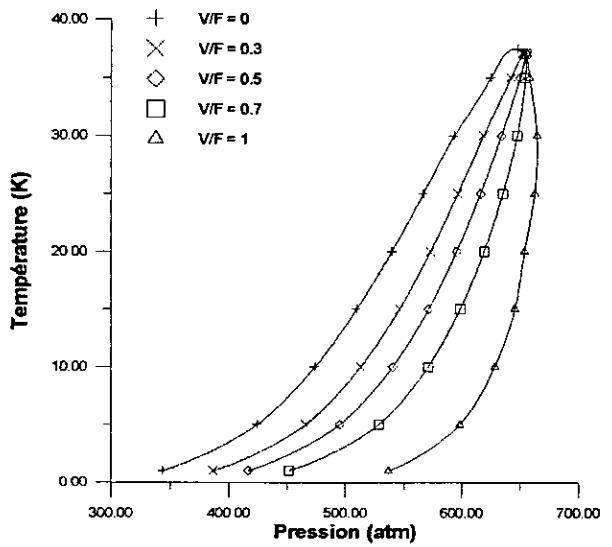


Figure 10.17 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut de Merkesen par l'équation d'état PRCG2

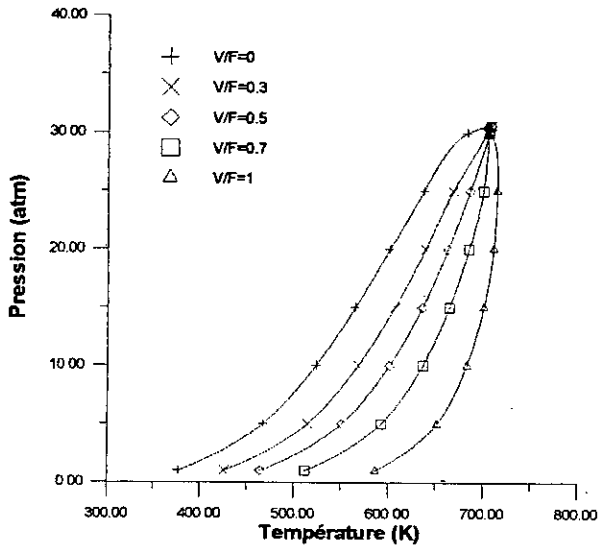


Figure 10.18 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état SRK

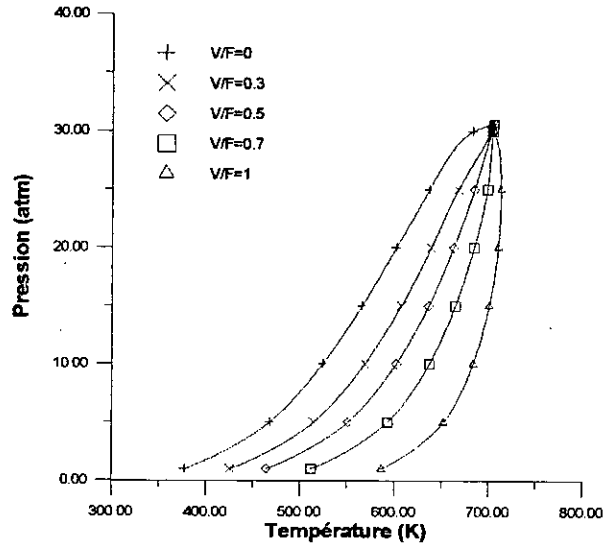


Figure 10.19 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état PR

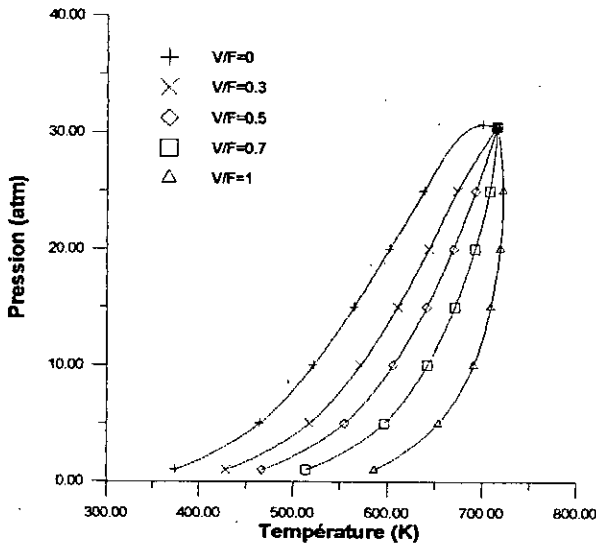


Figure 10.20 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état SRKCG2

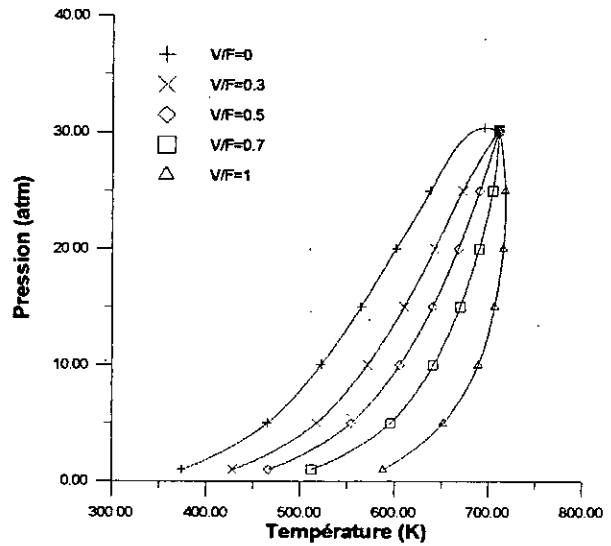


Figure 10.21 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut d'Ohanet par l'équation d'état PRCG2

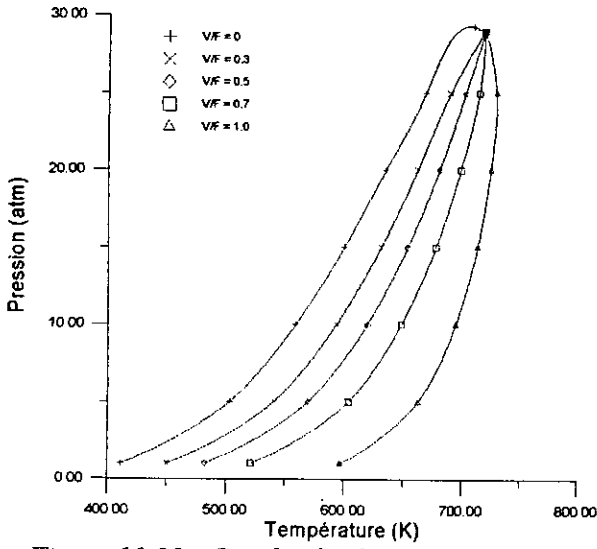


Figure 10.22 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état SRK

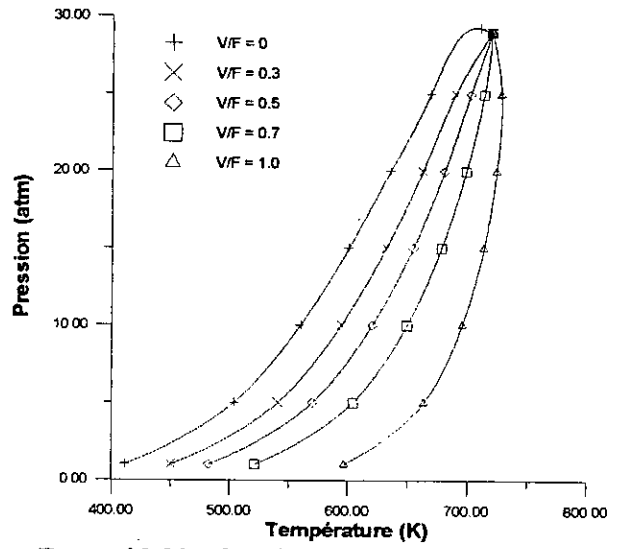


Figure 10.23 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état PR

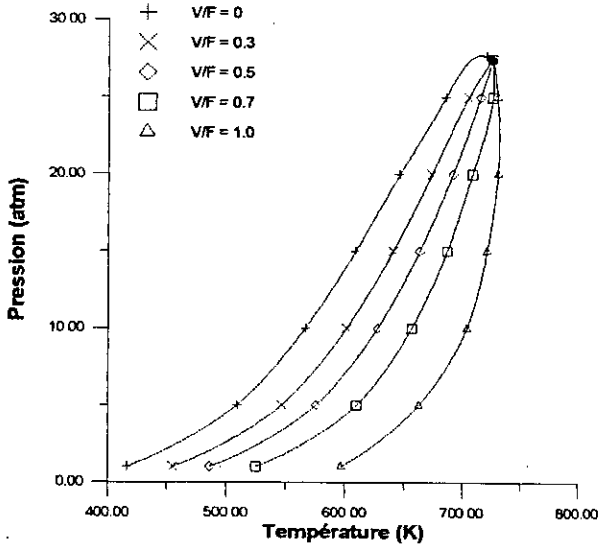


Figure 10.24 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état SRKCG2

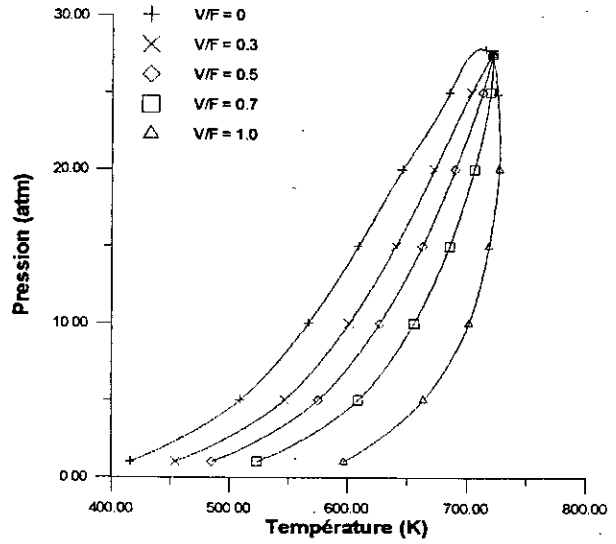


Figure 10.25 - Courbe de phase enveloppe du pétrole brut PB 31 par l'équation d'état PRCG2

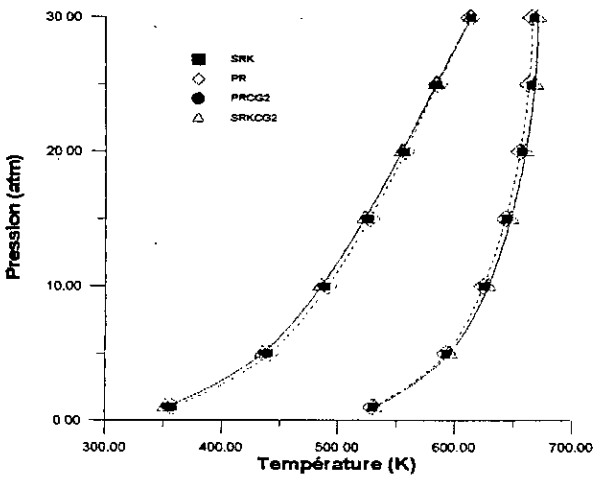


Figure 10.26 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut de Guellala

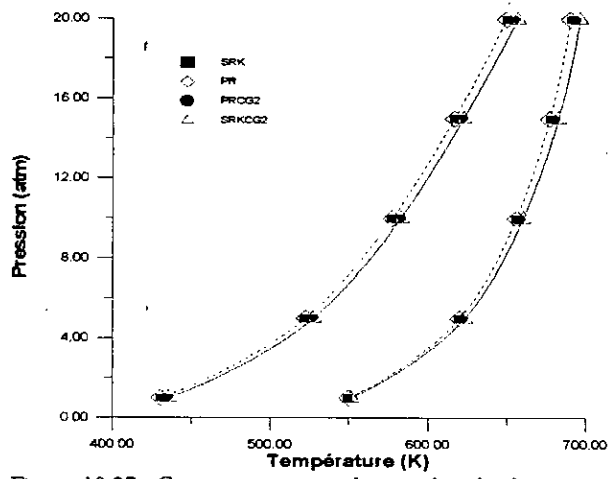


Figure 10.27 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut HRS 162

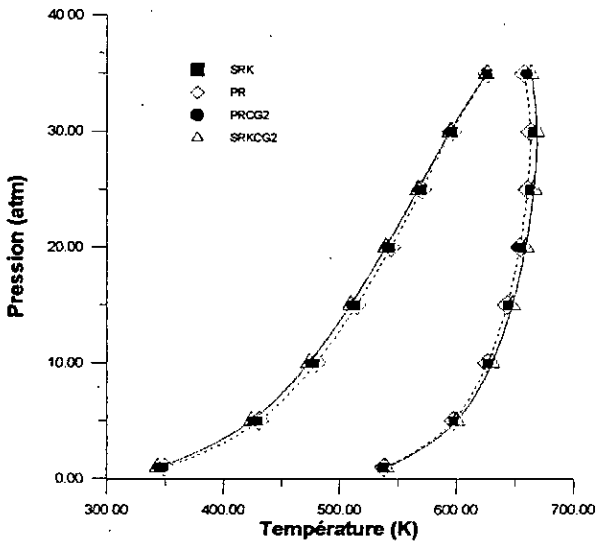


Figure 10.28 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut de Mereksen

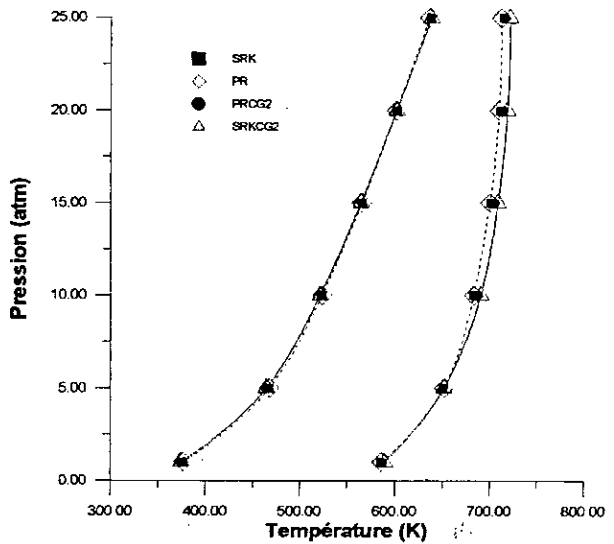


Figure 10.29 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut d'Ohanet

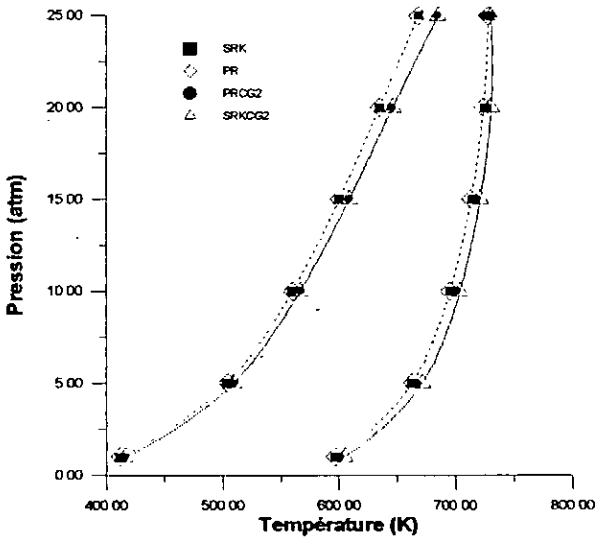


Figure 10.30 - Comparaison entre les courbes de phase enveloppe obtenues par les équations d'état SRK, PR, SRKCG2 et PRCG2 pour le pétrole brut PB31

Nous avons représenté sur la figure 10.31 et 10.32, les courbes de bulle et de rosée obtenues par l'équation d'état PR. Nous remarquons sur la figure 10.31 que la succession des courbes est en accord avec les intervalles de distillation correspondant aux différents pétroles bruts. Pour une pression de bulle fixe, la température de bulle la plus faible est obtenue pour le pétrole brut de Mereksen ($d = 0.7929$). Elle augmente progressivement pour les pétroles bruts de Guellala ($d = 0.8096$), d'Ohanet ($d = 0.821$), PB 31 ($d=0.8395$) et enfin pour le pétrole brut le plus lourds de cette étude, le HRS 162 ($d=0.8465$). Nous constatons sur la figure 10.32 que les courbes de rosée des pétroles brut de Mereksen et de Guellala sont pratiquement confondues. Ceci pourrait être dû au fait que ces deux pétroles possèdent approximativement le même point final de distillation.

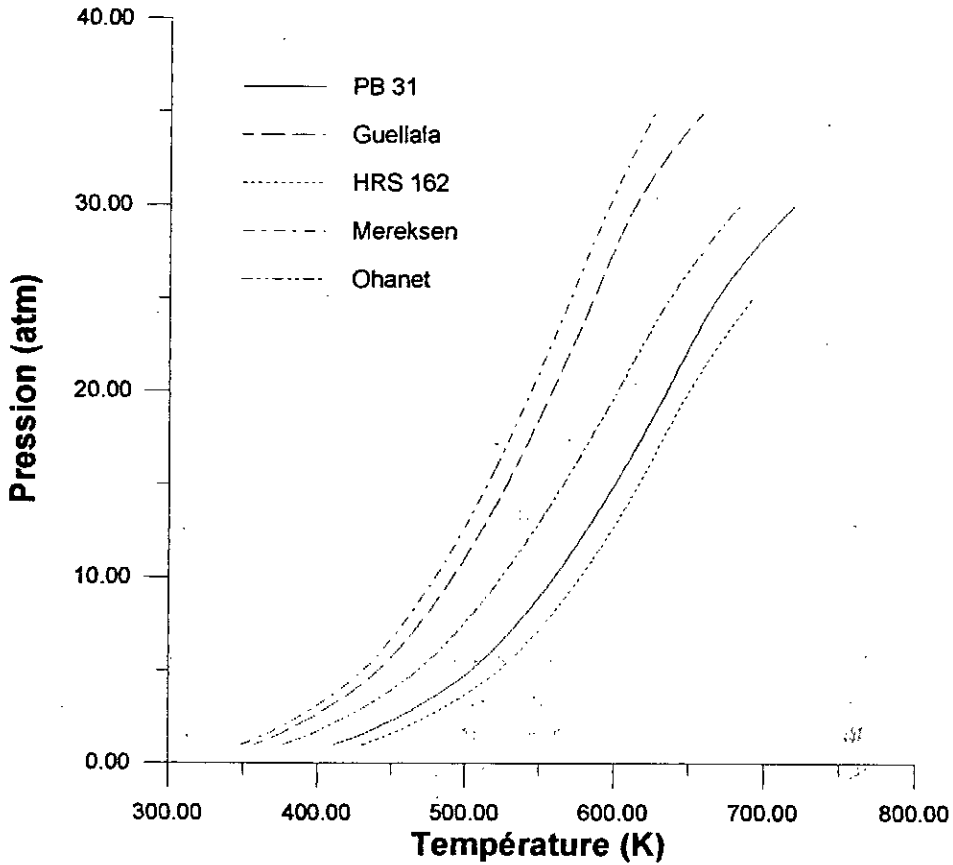


Figure 10.31 - Courbes de bulle des différents pétroles brut par l'équation d'état PR

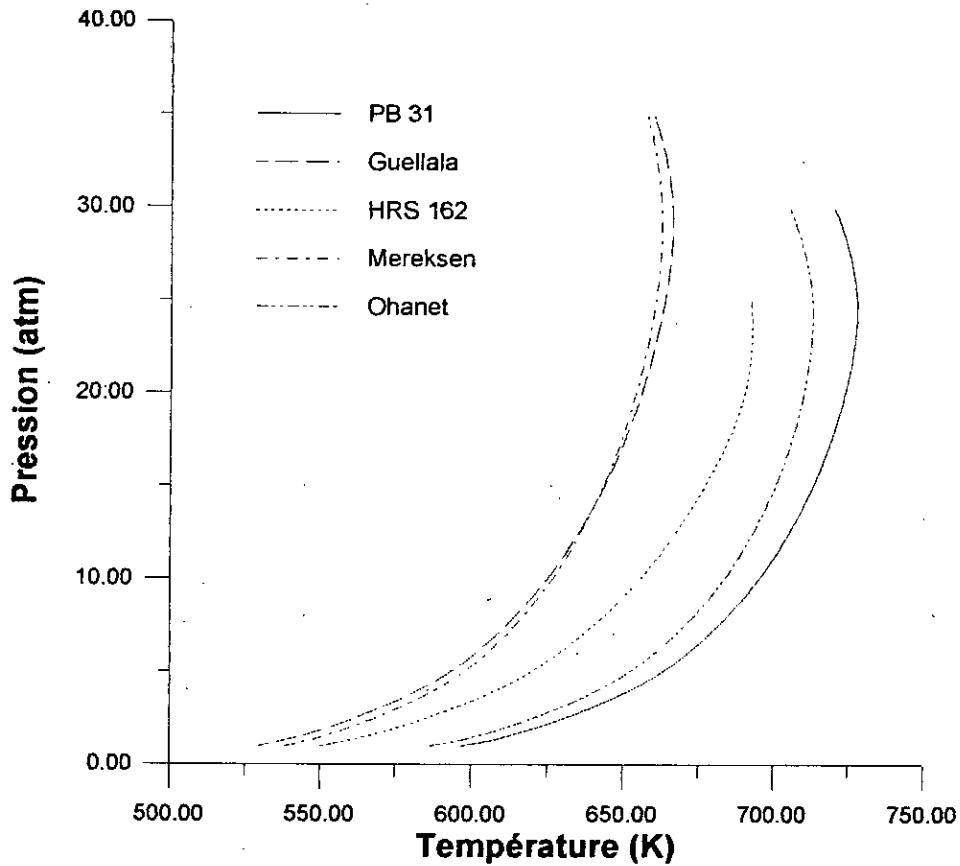


Figure 10.32 - Courbes de rosée des différents pétroles brut par l'équation d'état PR

10.4 Conclusion

L'objectif de notre étude est l'utilisation des équations d'état pour estimer les propriétés relatives aux changements de phases des mélanges pétroliers. A partir d'une caractérisation basée sur la connaissance de la courbe TBP des cinq pétroles bruts algériens, nous avons décomposé ces fractions en pseudocomposés selon la méthode d'Edmister (1988). Les propriétés critiques, le facteur acentrique et les nombres équivalents d'atomes de carbone de chaque famille d'hydrocarbure ont été calculés.

L'application des équations d'état *SRK*, *PR*, *SRKCG2* et *PRCG2* a permis de calculer les équilibres de phases à différentes température et pressions et déterminer ainsi les points de bulle et de rosée nécessaires à la construction de la courbe de phase enveloppe. La disponibilité de résultats expérimentaux des équilibres de phase pour les différents pétroles bruts permettra d'adopter le modèle adéquat d'équation d'état à chacun de ces pétroles bruts.

Conclusion générale

La présente étude a permis d'entrevoir une partie du domaine très vaste de la thermodynamique. L'étude des équations d'état prend de plus en plus d'importance de nos jours, du fait qu'une équation d'état ne représente pas seulement une forme mathématique reliant les variables PVT , mais constitue un modèle permettant d'atteindre plusieurs propriétés thermodynamiques (tension de vapeur, enthalpie de vaporisation, propriétés résiduelles). La grande innovation apportée par les équations d'état est l'unification de la thermodynamique de l'état liquide à la thermodynamique de l'état vapeur.

Nous nous sommes intéressés à l'établissement de nouvelles équations d'état basées sur la méthode de contribution de groupe. Plusieurs approches ont été envisagées permettant de simplifier l'utilisation des équations d'état dans le cas des fractions pétrolières. La première variante est la méthode à sept paramètres. Cette méthode a été appliquée à différentes équations d'état cubiques. Cette méthode dans son ensemble ne donne pas de meilleurs résultats que les équations d'état cubiques, d'où l'idée de réduire le nombre de paramètres à quatre afin de mieux maîtriser le comportement des équations d'état couplées à la méthode de contribution. Cette réduction de paramètres donna lieu à la deuxième variante d'équations d'état cubiques couplées à la méthode de contribution de groupe. La nouvelle méthode a été appliquée à la prédiction de propriétés telles que l'enthalpie de vaporisation ou la tension de vapeur. Les résultats obtenus dans le cas de l'enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition sont recevables, cependant, l'application à la tension de vapeur a donné des écarts trop importants. A partir de cette constatation, une troisième variante qui a été élaborée de manière plus rigoureuse que les deux premières. Les résultats obtenus sont dans l'ensemble bon, les données de tension de vapeur sont dans l'ensemble reproduites avec des erreurs globales proches de 1 %, ce qui atteste de la fiabilité de la méthode proposée.

Par la suite, une nouvelle approche consistant à coupler l'équation d'état à la loi des états correspondants a été proposée. Nous avons exprimé la fonction alpha de trois équations d'état cubiques selon la loi des états correspondants, les fonctions alpha des trois équations d'état cubiques ont été exprimées selon une équation de type Wagner. Les nouvelles équations d'état ont été appliquées au calcul de la tension de vapeur, les résultats engendrés sont tout à fait acceptables et se comparent favorablement aux données de référence. Les écarts absolus moyens sont dans la majorité des cas les plus faibles comparés aux autres équations d'état. De plus, les équations d'état cubiques généralisées ont été construites à partir de données de tension de vapeur de n-alcanes, mais elles ont été appliquées avec succès à des hydrocarbures de structures chimiques différentes (alcane)s ramifiés, alkylcyclopentanes, alkylcyclohexanes et alkylbenzènes).

Nous avons appliqué les nouvelles équations d'état aux mélanges et aux fractions pétrolières. Dans le cas des mélanges, nous avons étudié deux mélanges binaires. Nous avons constaté que les équations que nous avons proposées donnent des résultats comparables aux équations d'état SRK et PR . Nous avons par la suite étudié un mélange multicomposant, représentant un gaz (contenant des composés non-hydrocarbonés) en équilibre avec une huile d'absorption. Dans l'ensemble, les résultats obtenus par les nouvelles équations d'état (RKG et PRG) sont en accord avec les valeurs expérimentales et sont pratiquement confondus avec les résultats obtenus par les équations d'état SRK et PR . Les mêmes constatations ont pu être relevées lors de l'étude d'une fraction pétrolière. Les résultats obtenus sont en accord avec les valeurs expérimentales.

Enfin, une étude *PVT* de quelques pétroles algériens a été envisagée, nous permettant de prévoir le comportement de ces pétroles en fonction de la variation de la température ou de la pression. Un programme informatique a été développé pour cela.

Bibliographie

1. American Petroleum Institute, Projet 44, Selected Values of Properties of Hydrocarbons and Related Compounds, Texas A&M College Station, Texas (1972).
2. Basarova P. et V. Svoboda, *Fluid Phase Equilibria*, 105, 27-47, (1995).
3. Benedict, M., G. B. Webb, et L. C. Rubin, *J. Chem. Phys.*, 10, 747 (1942).
4. Beret, S., et J. M. Prausnitz, *AIChE J.*, 21, 1123 (1975).
5. Borel, L., Thermodynamique et Energétique, Presses Polytechniques Romandes, Lausanne, 1984.
6. Boufadene, K. et L. Bouguerra, Projet de Fin d'Etudes, Dept. Génie Chimique, 1996.
7. Carnahan, N. F., et K. E. Starling, *AIChE J.*, 18, 1184 (1972).
8. Constantinou, L., R. Gani, et J. P. O'Connell, *Fluid Phase Equilibria*, 103, 11 (1995).
9. Design Institute for Physical Properties Data (DIPPR), *AIChE*, 1995.
10. Edmister, W. C., et B. I. Lee, Applied Hydrocarbon Thermodynamics, Vol. 1, 2^{ème} édition, Gulf Publishing Company, Houston, Texas, 1984.
11. Edmister, W. C., Applied Hydrocarbon Thermodynamics, Vol 2, Second edition, Gulf Publishing Company, Houston (1988).
12. Fredenslund, Aa., R. L. Jones, et J. M. Prausnitz, *AIChE J.*, 21, 1086 (1975).
13. Harmens, A., et H. Knapp, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 19, 291 (1980).
14. Huron, M., et J. Vidal, *Fluid Phase Equilibria*, 3, 255 (1979).
15. Joback K. G., Thèse de Master of Science, M.I.T., Cambridge, Massachusetts, Etats-Unis d'Amérique, 1984.
16. Lee, B. I., et M. G. Kesler, *AIChE J.*, 21, 510 (1975).
17. Lee, B. I., et M. G. Kesler, *Hydrocarbon Process*, 55, 3 (1976).
18. Lydersen, A. L., Rapport Interne 3, University of Wisconsin at Madison, Wisconsin, Etats-Unis d'Amérique, 1955.
19. Martin, J. J., et Y. C. Hou, *AIChE J.*, 1, 142 (1955).
20. Missenard, F. A., *Chem. Res.*, 260, 5521 (1965).
21. Panagiotopoulos, A. Z., et R. C. Reid, Dans Equations of State Theories and Applications, Chao, K. C., Robinson, R. L., Eds., ACS Symposium Series 300, 571, American Chemical Society, Washington, DC, 1986.
22. Pedersen, K. S., P. Thomassen et Aa. Fredenslund, Properties of Oils and Natural Gas, Gulf Publishing Company, Vol 5, Houston (1989).
23. Peng, D. Y., et D. B. Robinson, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15, 59 (1976).
24. Perry, M.S., et J. C. Chilton, Chemical Engineering Handbook, Mc Graw Hill, N.-Y., 1990.

25. Pitzer, K. S., *J. Am. Chem. Soc.*, 77, 3427 (1955).
26. Prausnitz, J. M., C. A. Eckert, J. P. O'Connell, et R. V. Orye, *Computer Calculation for Multicomponent Vapor-liquid Equilibria*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J. (1967).
27. Prausnitz, J. M., T. F. Anderson, E. A. Grens, C. A. Eckert, R. Hsieh, et J. P. O'Connell, *Computer Calculation for Multicomponent Vapor-liquid and Liquid-Liquid Equilibria*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ (1980).
28. Rachford, H. H., Jr., et J. D. Rice, *J. Petro Technol.*, 4, 10, sec. 1, 19; sec. 2, 3 (1952).
29. Raznjevic, S., *Handbook of Thermodynamics Tables and Charts*, Addison Wesley, N.-Y., 1976.
30. Reid, R. C., J. M. Prausnitz et T. K. Sherwood, *The Properties of Gases and Liquids*, 3^{ème} édition, Mc Graw-Hill, NY, 1977.
31. Reid, R. C., J. M. Prausnitz et B. E. Poling, *The Properties of Gases and Liquids*, 4^{ème} édition, Mc Graw-Hill, NY, 1988.
32. Rødlich, O., et J. N. S. Kwong, *Chem. Rev.*, 44, 233 (1949).
33. Renon, H., L. Asselineau, G. Cohen, et C. Raimbault, *Calcul sur Ordinateur des Equilibres Liquide-Vapeur et Liquide-Liquide*, Technip, Paris, (1971).
34. Riazi, M. R., Thèse de Doctorat, Pennsylvania State University, University Park, Etats-Unis d'Amérique, 1980.
35. Riazi, M. R., et T. E. Daubert, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 26, 755 (1987).
36. Riazi, M. R., T. A. Al-Sahhaf, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 34, 4145 (1995).
37. Riedel, L., *Chem. Ing. Tech.*, 26, 83 (1954).
38. Sage, B. H., R. A. Budenholzer, et W. N. Lacey, *Ind. Eng. Chem.*, 9, 1262 (1940a).
39. Sage, B. H., H. M. Lavender, et W. N. Lacey, *Ind. Eng. Chem.*, 5, 743 (1940b).
40. Sator, S., N. Skander, F. Souahi, et C. E. Chitour, Communication au 3^{ème} Congrès Maghrebin de Génie des Procédés (COMAGEP3), Gabes, Tunisie, Avril 1996.
41. Sator, S., N. Skander, F. Souahi, et C. E. Chitour, Communication au 1^{er} Congrès Algérien de Génie des Procédés (CAGEP1), Pins Maritimes, Alger, Décembre 1996.
42. Schmidt, G., et H. Wenzel, *Chem. Eng. Sci.*, 35, 1503 (1980).
43. Shah, V. M., Y.-L. Lin, P. R. Bienkowski et H. D. Cochran, *Fluid Phase Equilibria*, 87-93, 116 (1996).
44. Sheng, W., et B. C.-Y. Lu, *Fluid Phase Equilibria*, 71-80, 56 (1990).
45. Soave, G., *Chem. Eng. Sci.*, 27, 1197 (1972).
46. Soave, G., *Chem. Eng. Sci.*, 39, 357 (1984).
47. Soave, G., *Fluid Phase Equilibria*, 84, 339 (1993).
48. Soave, G., A. Bertucco, et M. Sponchiado, *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 41, 8, 1964 (1995).

49. Starling, K. E., et M. S. Han, *Hydrocarbon Processing*, 5, 107 (1972).
50. Stryjek, R., et J. H. Vera, *Can. J. Chem. Eng.*, 64, 323 (1986).
51. Twu, C. H., J. E. Coon et J. R. Cunningham, *Fluid Phase Equilibria*, 96, 19 (1994).
52. Twu, C. H., J. E. Coon, et J. R. Cunningham, *Fluid Phase Equilibria*, 49-59, 105 (1995a).
53. Twu, C. H., J. E. Coon, et J. R. Cunningham, *Fluid Phase Equilibria*, 61-69, 105 (1995b).
54. Van der Waals, J. D., Thèse de Doctorat, Université de Leyden, Leyden, Pays-Bas (1873).
55. Wilson, G. M., Communication présentée au 65^{ème} Convention Annuelle de l'*AIChE*, Claveland, Ohio, Mai, 1969.
56. Whitson, C. H., *SPE Journal*, 23, 683 (1983).

Référence par auteur

Al Sahhaf T. A.	(36)	Edmister W. C.	(11)
Anderson T. F.	(27)	Edmister W. C.	(10), (11)
Asselineau L.	(33)	Fredenslund Aa	(12), (22)
Basarova P.	(2)	Gani, R.	(8)
Benedict M.	(3)	Grens E. A.	(27)
Beret S.	(4)	Han M. S.	(49)
Bienkowski P. R.	(43)	Harmens A.	(13)
Borel L.	(5)	Hou Y. C.	(19)
Bouguerra L.	(6)	Hsieh R.	(27)
Boufadene K.	(6)	Huron M.	(14)
Budenholzer R. A.	(38)	Joback K. G.	(15)
Carnahan N. F.	(7)	Jones R. L.	(12)
Chilton J. C.	(24)	Kesler M. G.	(16), (17)
Chitour C. E.	(40), (41)	Knapp H.	(13)
Cochran H. D.	(43)	Martin J. J.	(19)
Cohen G.	(33)	Missenard F. A.	(20)
Constantinou L.	(8)	Lavender H. M.	(39)
Coon J. E.	(51), (52), (53)	Lacey W. N.	(38), (39)
Cunningham J. R.	(51), (52), (53)	Lee B. I.	(10), (16), (17)
Daubert T. E.	(35)	Lin Y.-L.	(43)
Eckert C. A.	(26), (27)	Lu B. C.-Y.	(44)

Lydersen A. L.	(18)	Vera J. H.	(50)
O'Connell J. P.	(8), (26), (27)	Vidal J.	(14)
Orye R. V.	(26)	Webb G. B.	(3)
Panagioutopoulos A. Z.	(21)	Wenzel H.	(42)
Pedersen K. S.	(22)	Wilson G. M.	(55)
Peng D. Y.	(23)	Whitson C. H.	(56)
Perry M. S.	(24)		
Poling B. E.	(31)		
Pitzer K. S.	(25)		
Prausnitz J. M.	(4), (12), (26), (27), (30), (31)		
Reid R. C.	(21), (30), (31)		
Raimbault C.	(33)		
Raznjevic S.	(29)		
Kwong J. N. S.	(32)		
Rachford H. H. Jr.	(28)		
Renon H.	(33)		
Riazi M. R.	(34), (35), (36)		
Riedel L.	(37)		
Rice J. D.	(28)		
Robinson D. B.	(23)		
Rubin L. C.,	(3)		
Starling K. E.	(7), (49)		
Sage B. H.	(38), (39)		
Sator S.	(40), (41)		
Schmidt G.	(42)		
Shah V. M.	(43)		
Sheng W.	(44)		
Sherwood T. K.	(30)		
Skander N.	(40), (41)		
Soave G.	(45), (46), (47), (48)		
Souahi F.	(40), (41)		
Svoboda V.	(2)		
Thomassen P.	(22)		
Twu C. H.	(51), (52), (53)		
Van der Waals J. D.	(54)		

ANNEXES

Annexe A

Equations de tension vapeur

Equation de Wagner

L'équation de Wagner peut avoir différentes formes en fonction des composés étudiés. La forme la plus courante est la suivante:

$$\ln\left(\frac{P^{vap}}{P_C}\right) = (A\tau + B\tau^{1.5} + C\tau^3 + D\tau^6)/(1 - \tau) \quad (A.1)$$

$$\tau = 1 - T_r \quad (A.2)$$

Cette équation présente l'avantage d'être applicable jusqu'au point critique quelque soit le composé. Cependant, elle possède une limite de température réduite minimale, en dessous de laquelle, les écarts par rapport à l'expérience augmentent rapidement. Les coefficients de l'équation (A.1) sont déterminés à partir de données expérimentales de tension de vapeur. Les coefficients de l'équation de Wagner pour différents composés sont donnés par Reid et coll. (1988). A titre indicatif, nous donnons les valeurs de ces constantes pour quelques hydrocarbures.

Tableau A.1 - Valeurs des constantes de l'équation (A.1) pour quelques hydrocarbures

Hydrocarbure	A	B	C	D	T_{min}
Benzène	-6.98273	1.33213	-2.62863	-3.33399	0.51
Ethylbenzène	-7.48645	1.45488	-3.37538	-2.23048	0.53
Cyclohexane	-6.96009	1.31328	-2.75683	-2.45491	0.53
Cyclopentane	-6.51809	0.38442	-1.11706	-4.50275	0.56
Isobutane	-6.95579	1.50090	-2.52717	-1.49776	0.40
2,3-dimethylbutane	-7.27870	1.56349	-3.05387	-1.57752	0.47
2-methylhexane	-7.62477	1.47806	-3.53616	-2.70794	0.43
Méthane	-6.00435	1.18850	-0.83408	-1.22833	0.48
n-Hexane	-7.466765	1.44211	-3.28222	-2.50941	0.43
n-Décane	-8.56523	1.97756	-5.81971	-0.29982	0.60

Dans le cas où la température minimale d'application de l'équation n'est pas connue, Reid coll. (1988) recommande de la considérer comme étant égale à 0.5.

Le couplage de l'équation de Wagner avec l'équation de Clausius-Clapeyron permet de calculer l'enthalpie de vaporisation en fonction de la température réduite. L'expression de la l'enthlpie est exprimée sous la forme suivante:

$$\frac{\Delta H_v}{RT_C \Delta Z_v} = -A + B\tau^{0.5}(0.5\tau - 1.5) + C\tau^2(2\tau - 3) + D\tau^5(5\tau - 6) \quad (A.3)$$

ΔH_v représente l'enthalpie de vaporisation à la température T_r ;

ΔZ_v représente la différence entre le facteur de compressibilité de la phase vapeur et liquide en équilibre.

Equation de Twu et coll. (1994)

L'équation de Twu et coll. (1994) est une généralisation selon la loi des états correspondants de l'équation de Wagner. Elle s'exprime par:

$$\ln\left(\frac{P^{vap}}{P_c}\right) = \ln P_r^{(0)} + \omega \ln P_r^{(1)} \quad (\text{A.4})$$

$$\ln P_r^{(0)} = (-5.963462\tau + 1.17639\tau^{1.5} - 0.559607\tau^3 - 1.31901\tau^6)/(1 - \tau) \quad (\text{A.5})$$

$$\ln P_r^{(1)} = (-4.7852\tau + 0.413999\tau^{1.5} - 8.91239\tau^3 - 4.98662\tau^6)/(1 - \tau) \quad (\text{A.6})$$

L'équation de Twu et coll. (1994) présente l'avantage d'être établie pour les hydrocarbures lourds. Elle permet de prédire la tension de vapeur avec une bonne précision - pour des températures comprises entre le point triple et le point critique (Twu et coll., 1994).

Annexe B

Calcul de la tension de vapeur des hydrocarbures par les équations d'état SRKCG2, PRCG2, SRKCG3 et PRCG3

La présentation des résultats est la suivante:

Première colonne: dénomination du composé et valeurs de la température réduite;

Deuxième colonne: type d'équation de référence (1: Wagner, 2: Twu et coll.);

Troisième colonne: valeur de la tension de vapeur de référence en bar;

Par la suite, nous donnons pour chacune des équations d'état considérées, la valeur de la tension de vapeur prédite, ainsi que l'écart absolu en pour-cent par rapport à la valeur de référence.

n-Alkanes

n-Hexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.43	1	1.28E-03	1.37E-03	6.63	1.23E-03	3.96	1.25E-03	2.51	1.59E-03	24.13	1.23E-03	4.49	1.46E-03	13.90
0.48	1	9.87E-03	1.03E-02	3.81	9.63E-03	2.48	9.51E-03	3.66	1.13E-02	14.37	9.59E-03	2.92	1.05E-02	6.43
0.53	1	4.84E-02	4.97E-02	2.80	4.77E-02	1.42	4.67E-02	3.47	5.27E-02	8.97	4.75E-02	1.80	4.96E-02	2.54
0.58	1	1.71E-01	1.76E-01	2.58	1.70E-01	0.68	1.67E-01	2.75	1.81E-01	5.85	1.70E-01	1.02	1.72E-01	0.51
0.63	1	4.80E-01	4.93E-01	2.71	4.79E-01	0.19	4.71E-01	1.87	4.99E-01	4.03	4.77E-01	0.49	4.77E-01	0.50
0.68	1	1.12E+00	1.16E+00	2.99	1.13E+00	0.10	1.11E+00	0.99	1.16E+00	3.01	1.12E+00	0.16	1.11E+00	0.89
0.73	1	2.31E+00	2.38E+00	3.34	2.31E+00	0.28	2.30E+00	0.14	2.36E+00	2.54	2.31E+00	0.06	2.29E+00	0.87
0.78	1	4.26E+00	4.42E+00	3.70	4.27E+00	0.37	4.29E+00	0.61	4.36E+00	2.43	4.27E+00	0.19	4.23E+00	0.58
0.83	1	7.26E+00	7.55E+00	3.97	7.29E+00	0.41	7.35E+00	1.23	7.45E+00	2.56	7.28E+00	0.27	7.25E+00	0.15
0.88	1	1.16E+01	1.21E+01	4.05	1.17E+01	0.41	1.18E+01	1.58	1.19E+01	2.75	1.17E+01	0.31	1.17E+01	0.30
0.93	1	1.77E+01	1.84E+01	3.73	1.78E+01	0.39	1.80E+01	1.52	1.82E+01	2.83	1.78E+01	0.32	1.78E+01	0.58
0.98	1	2.61E+01	2.68E+01	2.72	2.61E+01	0.24	2.63E+01	0.72	2.67E+01	2.46	2.61E+01	0.21	2.62E+01	0.40
			MOY	3.59		0.91		1.75		6.33		1.02		2.30

n-Heptane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.44	1	1.13E-03	1.05E-03	6.83	1.06E-03	5.96	1.13E-03	0.28	1.23E-03	9.16	1.08E-03	3.86	1.32E-03	17.26
0.49	1	8.82E-03	8.10E-03	8.12	8.44E-03	4.29	8.65E-03	1.92	8.97E-03	1.71	8.58E-03	2.71	9.56E-03	8.41
0.54	1	4.38E-02	4.04E-02	7.80	4.25E-02	2.88	4.28E-02	2.23	4.29E-02	1.92	4.30E-02	1.70	4.55E-02	3.89
0.59	1	1.57E-01	1.46E-01	6.86	1.54E-01	1.79	1.54E-01	1.76	1.51E-01	3.65	1.56E-01	0.91	1.59E-01	1.53
0.64	1	4.44E-01	4.18E-01	5.75	4.39E-01	1.01	4.39E-01	1.03	4.24E-01	4.39	4.42E-01	0.37	4.45E-01	0.33
0.69	1	1.05E+00	1.00E+00	4.68	1.04E+00	0.51	1.05E+00	0.27	1.00E+00	4.56	1.05E+00	0.04	1.05E+00	0.19
0.74	1	2.17E+00	2.09E+00	3.70	2.16E+00	0.20	2.18E+00	0.46	2.07E+00	4.40	2.17E+00	0.13	2.16E+00	0.30
0.79	1	4.04E+00	3.92E+00	2.87	4.04E+00	0.02	4.08E+00	1.08	3.87E+00	4.03	4.05E+00	0.21	4.03E+00	0.14
0.84	1	6.93E+00	6.78E+00	2.23	6.94E+00	0.09	7.04E+00	1.54	6.68E+00	3.56	6.95E+00	0.24	6.94E+00	0.17
0.89	1	1.12E+01	1.10E+01	1.89	1.12E+01	0.16	1.14E+01	1.73	1.08E+01	3.11	1.12E+01	0.25	1.12E+01	0.48
0.94	1	1.71E+01	1.68E+01	2.01	1.72E+01	0.21	1.74E+01	1.47	1.66E+01	2.86	1.72E+01	0.24	1.72E+01	0.62
0.99	1	2.54E+01	2.46E+01	2.92	2.54E+01	0.12	2.55E+01	0.41	2.46E+01	3.13	2.54E+01	0.12	2.55E+01	0.24
			MOY	4.64		1.44		1.18		3.87		0.90		2.80

n-Octane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.46	1	1.62E-03	1.52E-03	5.96	1.54E-03	4.41	1.61E-03	0.12	1.76E-03	9.12	1.60E-03	0.94	1.87E-03	15.75
0.51	1	1.16E-02	1.06E-02	8.04	1.11E-02	3.95	1.13E-02	2.78	1.17E-02	1.13	1.14E-02	1.35	1.24E-02	6.80
0.56	1	5.40E-02	4.97E-02	7.92	5.23E-02	2.98	5.23E-02	3.05	5.26E-02	2.50	5.34E-02	1.03	5.53E-02	2.56
0.61	1	1.85E-01	1.72E-01	6.92	1.81E-01	1.99	1.80E-01	2.35	1.77E-01	4.04	1.84E-01	0.52	1.86E-01	0.61
0.66	1	5.05E-01	4.76E-01	5.68	4.99E-01	1.17	4.98E-01	1.35	4.82E-01	4.54	5.04E-01	0.08	5.04E-01	0.21

0.71	1	1.16E+00	1.11E+00	4.47	1.16E+00	0.59	1.16E+00	0.34	1.11E+00	4.50	1.17E+00	0.22	1.16E+00	0.42
0.76	1	2.36E+00	2.28E+00	3.40	2.36E+00	0.22	2.38E+00	0.56	2.26E+00	4.19	2.37E+00	0.37	2.36E+00	0.29
0.81	1	4.34E+00	4.23E+00	2.54	4.34E+00	0.01	4.39E+00	1.27	4.18E+00	3.73	4.36E+00	0.42	4.34E+00	0.02
0.86	1	7.38E+00	7.23E+00	1.96	7.39E+00	0.14	7.51E+00	1.72	7.14E+00	3.26	7.41E+00	0.40	7.41E+00	0.38
0.91	1	1.18E+01	1.16E+01	1.79	1.19E+01	0.21	1.20E+01	1.77	1.15E+01	2.90	1.19E+01	0.36	1.19E+01	0.64
0.96	1	1.81E+01	1.77E+01	2.21	1.82E+01	0.23	1.83E+01	1.23	1.76E+01	2.86	1.82E+01	0.28	1.82E+01	0.61
			MOY	4.62		1.45		1.50		3.89		0.54		2.57

n-Nonane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.58	1	6.75E-02	6.52E-02	3.31	6.65E-02	1.47	6.69E-02	0.87	6.87E-02	1.86	6.79E-02	0.70	7.05E-02	4.44
0.63	1	2.20E-01	2.14E-01	2.39	2.19E-01	0.43	2.19E-01	0.09	2.20E-01	0.27	2.22E-01	1.19	2.25E-01	2.63
0.68	1	5.79E-01	5.71E-01	1.38	5.81E-01	0.27	5.84E-01	0.80	5.77E-01	0.43	5.88E-01	1.47	5.89E-01	1.76
0.73	1	1.30E+00	1.30E+00	0.45	1.31E+00	0.68	1.32E+00	1.62	1.29E+00	0.65	1.32E+00	1.56	1.32E+00	1.41
0.78	1	2.60E+00	2.60E+00	0.30	2.62E+00	0.89	2.66E+00	2.28	2.58E+00	0.60	2.64E+00	1.51	2.63E+00	1.35
0.83	1	4.71E+00	4.75E+00	0.80	4.75E+00	0.94	4.84E+00	2.70	4.69E+00	0.44	4.77E+00	1.37	4.78E+00	1.43
0.88	1	7.95E+00	8.02E+00	0.95	8.02E+00	0.89	8.17E+00	2.76	7.92E+00	0.32	8.04E+00	1.15	8.07E+00	1.49
0.93	1	1.27E+01	1.28E+01	0.55	1.28E+01	0.73	1.30E+01	2.30	1.26E+01	0.42	1.28E+01	0.86	1.29E+01	1.34
0.98	1	1.94E+01	1.93E+01	0.70	1.95E+01	0.36	1.96E+01	0.98	1.92E+01	1.07	1.95E+01	0.39	1.96E+01	0.64
			MOY	1.20		0.74		1.60		0.68		1.13		1.83

n-Décane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.6	1	8.63E-02	8.63E-02	0.01	8.54E-02	1.04	8.47E-02	1.90	9.05E-02	4.89	8.71E-02	0.93	8.90E-02	3.07
0.65	1	2.68E-01	2.69E-01	0.61	2.67E-01	0.34	2.65E-01	0.90	2.76E-01	3.04	2.71E-01	1.11	2.72E-01	1.61
0.7	1	6.82E-01	6.91E-01	1.26	6.83E-01	0.02	6.83E-01	0.04	6.96E-01	2.02	6.90E-01	1.07	6.88E-01	0.88
0.75	1	1.50E+00	1.52E+00	1.95	1.50E+00	0.27	1.51E+00	0.96	1.52E+00	1.62	1.51E+00	1.02	1.51E+00	0.69
0.8	1	2.92E+00	2.99E+00	2.62	2.93E+00	0.51	2.97E+00	1.81	2.97E+00	1.64	2.95E+00	1.03	2.94E+00	0.88
0.85	1	5.21E+00	5.37E+00	3.11	5.24E+00	0.74	5.33E+00	2.45	5.30E+00	1.87	5.26E+00	1.07	5.27E+00	1.24
0.9	1	8.68E+00	8.95E+00	3.19	8.75E+00	0.89	8.91E+00	2.66	8.85E+00	2.02	8.77E+00	1.07	8.81E+00	1.51
0.95	1	1.37E+01	1.41E+01	2.50	1.39E+01	0.80	1.40E+01	2.08	1.40E+01	1.74	1.39E+01	0.87	1.39E+01	1.33
			MOY	1.91		0.58		1.60		2.35		1.02		1.40

n-Undécane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	2.51E-03	2.68E-03	7.07	2.48E-03	1.12	2.51E-03	0.10	3.10E-03	23.78	2.56E-03	2.24	2.91E-03	16.25
0.55	2	1.57E-02	1.64E-02	4.57	1.56E-02	0.78	1.55E-02	1.28	1.80E-02	14.74	1.60E-02	1.66	1.71E-02	8.68
0.6	2	6.73E-02	6.98E-02	3.77	6.69E-02	0.47	6.64E-02	1.29	7.38E-02	9.71	6.81E-02	1.29	7.04E-02	4.62
0.65	2	2.18E-01	2.26E-01	3.71	2.18E-01	0.28	2.17E-01	0.76	2.33E-01	6.81	2.20E-01	0.97	2.23E-01	2.39
0.7	2	5.75E-01	5.98E-01	3.96	5.74E-01	0.21	5.75E-01	0.06	6.05E-01	5.13	5.79E-01	0.66	5.82E-01	1.21
0.75	2	1.29E+00	1.35E+00	4.31	1.29E+00	0.20	1.30E+00	0.65	1.35E+00	4.23	1.30E+00	0.40	1.30E+00	0.68

0.8	2	2.58E+00	2.70E+00	4.65	2.58E+00	0.19	2.61E+00	1.29	2.68E+00	3.82	2.59E+00	0.21	2.59E+00	0.55
0.85	2	4.69E+00	4.91E+00	4.87	4.68E+00	0.12	4.77E+00	1.75	4.86E+00	3.70	4.69E+00	0.12	4.72E+00	0.65
0.9	2	7.92E+00	8.30E+00	4.81	7.92E+00	0.00	8.07E+00	1.89	8.21E+00	3.67	7.93E+00	0.13	7.98E+00	0.80
0.95	2	1.27E+01	1.32E+01	4.21	1.27E+01	0.13	1.29E+01	1.48	1.31E+01	3.46	1.27E+01	0.17	1.28E+01	0.75
			MOY	4.59		0.35		1.06		7.90		0.79		3.66

n-Dodécane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	1.70E-03	1.91E-03	12.01	1.76E-03	3.41	1.70E-03	0.44	2.25E-03	31.82	1.81E-03	6.27	2.01E-03	18.17
0.55	2	1.15E-02	1.25E-02	8.33	1.18E-02	2.68	1.13E-02	1.71	1.39E-02	20.41	1.20E-02	4.66	1.26E-02	9.94
0.6	2	5.22E-02	5.57E-02	6.79	5.33E-02	2.19	5.14E-02	1.55	5.95E-02	13.95	5.41E-02	3.55	5.51E-02	5.54
0.65	2	1.77E-01	1.88E-01	6.21	1.80E-01	1.76	1.75E-01	0.85	1.95E-01	10.10	1.82E-01	2.67	1.83E-01	3.14
0.7	2	4.83E-01	5.12E-01	6.05	4.89E-01	1.33	4.83E-01	0.02	5.20E-01	7.75	4.92E-01	1.92	4.92E-01	1.84
0.75	2	1.12E+00	1.18E+00	6.06	1.13E+00	0.94	1.13E+00	0.78	1.19E+00	6.31	1.13E+00	1.31	1.13E+00	1.20
0.8	2	2.27E+00	2.41E+00	6.11	2.29E+00	0.64	2.31E+00	1.46	2.40E+00	5.48	2.29E+00	0.86	2.30E+00	0.97
0.85	2	4.21E+00	4.46E+00	6.06	4.22E+00	0.45	4.29E+00	1.93	4.42E+00	5.00	4.23E+00	0.56	4.25E+00	0.98
0.9	2	7.21E+00	7.63E+00	5.74	7.24E+00	0.36	7.36E+00	2.05	7.55E+00	4.65	7.24E+00	0.40	7.29E+00	1.03
0.95	2	1.17E+01	1.23E+01	4.89	1.17E+01	0.31	1.19E+01	1.58	1.22E+01	4.16	1.17E+01	0.31	1.18E+01	0.87
			MOY	6.83		1.41		1.24		10.96		2.25		4.37

n-Tridécane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	1.19E-03	1.33E-03	12.44	1.25E-03	5.22	1.17E-03	1.02	1.60E-03	35.07	1.27E-03	7.24	1.42E-03	20.06
0.55	2	8.57E-03	9.32E-03	8.81	8.91E-03	4.05	8.38E-03	2.16	1.05E-02	22.78	9.02E-03	5.34	9.53E-03	11.20
0.6	2	4.09E-02	4.39E-02	7.40	4.22E-02	3.24	4.02E-02	1.81	4.74E-02	15.87	4.25E-02	4.03	4.36E-02	6.50
0.65	2	1.44E-01	1.54E-01	6.97	1.48E-01	2.56	1.43E-01	0.93	1.61E-01	11.76	1.49E-01	3.01	1.50E-01	3.92
0.7	2	4.05E-01	4.33E-01	6.92	4.13E-01	1.94	4.06E-01	0.04	4.43E-01	9.23	4.14E-01	2.15	4.16E-01	2.49
0.75	2	9.61E-01	1.03E+00	7.00	9.74E-01	1.39	9.69E-01	0.92	1.03E+00	7.65	9.75E-01	1.46	9.77E-01	1.74
0.8	2	2.00E+00	2.14E+00	7.08	2.01E+00	0.96	2.03E+00	1.64	2.13E+00	6.69	2.01E+00	0.94	2.02E+00	1.42
0.85	2	3.75E+00	4.01E+00	7.02	3.77E+00	0.67	3.83E+00	2.12	3.98E+00	6.10	3.77E+00	0.61	3.80E+00	1.33
0.9	2	6.51E+00	6.95E+00	6.66	6.55E+00	0.50	6.66E+00	2.21	6.88E+00	5.64	6.54E+00	0.43	6.60E+00	1.27
0.95	2	1.07E+01	1.13E+01	5.74	1.07E+01	0.39	1.09E+01	1.67	1.12E+01	5.02	1.07E+01	0.33	1.08E+01	0.99
			MOY	7.60		2.09		1.45		12.58		2.55		5.09

n-Tetradécane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	9.30E-04	1.00E-03	7.82	8.98E-04	3.39	9.16E-04	1.43	1.23E-03	32.18	9.07E-04	2.43	1.13E-03	21.35
0.55	2	7.00E-03	7.42E-03	6.04	6.82E-03	2.51	6.83E-03	2.46	8.50E-03	21.43	6.86E-03	2.04	7.85E-03	12.07
0.6	2	3.45E-02	3.66E-02	5.99	3.39E-02	1.76	3.38E-02	1.98	3.99E-02	15.56	3.39E-02	1.62	3.70E-02	7.16
0.65	2	1.25E-01	1.33E-01	6.57	1.23E-01	1.23	1.23E-01	0.98	1.40E-01	12.19	1.23E-01	1.31	1.30E-01	4.46
0.7	2	3.57E-01	3.83E-01	7.29	3.54E-01	0.93	3.57E-01	0.08	3.94E-01	10.19	3.53E-01	1.13	3.68E-01	2.95
0.75	2	8.59E-01	9.27E-01	7.94	8.53E-01	0.74	8.68E-01	1.02	9.36E-01	8.99	8.50E-01	1.01	8.77E-01	2.13
0.8	2	1.81E+00	1.96E+00	8.44	1.80E+00	0.59	1.84E+00	1.77	1.96E+00	8.31	1.79E+00	0.86	1.84E+00	1.73
0.85	2	3.43E+00	3.73E+00	8.70	3.41E+00	0.39	3.50E+00	2.25	3.70E+00	7.93	3.41E+00	0.64	3.48E+00	1.57
0.9	2	6.01E+00	6.52E+00	8.57	6.00E+00	0.15	6.15E+00	2.31	6.46E+00	7.62	5.99E+00	0.35	6.09E+00	1.43
0.95	2	9.91E+00	1.07E+01	7.80	9.92E+00	0.09	1.01E+01	1.74	1.06E+01	7.13	9.91E+00	0.04	1.00E+01	1.08
			MOY	7.52		1.18		1.60		13.15		1.14		5.59

n-Pentadécane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	6.51E-04	7.08E-04	8.73	6.51E-04	0.04	6.36E-04	2.20	8.89E-04	36.62	6.52E-04	0.17	8.05E-04	23.74
0.55	2	5.26E-03	5.60E-03	6.42	5.27E-03	0.11	5.10E-03	3.01	6.53E-03	24.10	5.25E-03	0.14	5.98E-03	13.70
0.6	2	2.73E-02	2.90E-02	6.08	2.74E-02	0.25	2.67E-02	2.28	3.21E-02	17.21	2.73E-02	0.22	2.96E-02	8.41
0.65	2	1.03E-01	1.10E-01	6.47	1.03E-01	0.30	1.02E-01	1.06	1.17E-01	13.16	1.03E-01	0.28	1.09E-01	5.48
0.7	2	3.05E-01	3.26E-01	7.03	3.05E-01	0.23	3.05E-01	0.17	3.37E-01	10.66	3.04E-01	0.39	3.16E-01	3.81
0.75	2	7.52E-01	8.08E-01	7.52	7.53E-01	0.11	7.61E-01	1.22	8.20E-01	9.07	7.48E-01	0.48	7.73E-01	2.85
0.8	2	1.61E+00	1.74E+00	7.85	1.61E+00	0.02	1.65E+00	2.01	1.74E+00	8.05	1.61E+00	0.50	1.65E+00	2.32
0.85	2	3.11E+00	3.36E+00	7.93	3.11E+00	0.03	3.19E+00	2.49	3.34E+00	7.36	3.10E+00	0.41	3.18E+00	2.02
0.9	2	5.53E+00	5.96E+00	7.62	5.54E+00	0.12	5.67E+00	2.51	5.91E+00	6.78	5.52E+00	0.21	5.63E+00	1.74
0.95	2	9.25E+00	9.86E+00	6.66	9.27E+00	0.22	9.42E+00	1.86	9.80E+00	6.04	9.25E+00	0.03	9.36E+00	1.24
			MOY	7.23		0.14		1.88		13.91		0.28		6.53

n-Hexadécane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	4.97E-04	5.15E-04	3.53	4.71E-04	5.32	4.83E-04	2.79	6.64E-04	33.50	4.68E-04	5.86	6.24E-04	25.63
0.55	2	4.23E-03	4.33E-03	2.49	4.06E-03	4.02	4.08E-03	3.43	5.15E-03	21.81	4.02E-03	4.83	4.86E-03	15.01
0.6	2	2.28E-02	2.36E-02	3.10	2.22E-02	2.92	2.23E-02	2.51	2.64E-02	15.50	2.20E-02	3.87	2.50E-02	9.41
0.65	2	8.86E-02	9.23E-02	4.22	8.67E-02	2.12	8.76E-02	1.11	9.91E-02	11.88	8.58E-02	3.12	9.42E-02	6.31
0.7	2	2.68E-01	2.83E-01	5.32	2.64E-01	1.61	2.69E-01	0.25	2.94E-01	9.67	2.61E-01	2.58	2.80E-01	4.51
0.75	2	6.74E-01	7.16E-01	6.21	6.66E-01	1.27	6.84E-01	1.37	7.30E-01	8.27	6.60E-01	2.15	6.98E-01	3.43
0.8	2	1.47E+00	1.57E+00	6.83	1.45E+00	0.99	1.50E+00	2.20	1.58E+00	7.37	1.44E+00	1.74	1.51E+00	2.79
0.85	2	2.87E+00	3.07E+00	7.11	2.85E+00	0.67	2.95E+00	2.68	3.06E+00	6.75	2.83E+00	1.28	2.94E+00	2.38
0.9	2	5.15E+00	5.51E+00	6.92	5.13E+00	0.31	5.29E+00	2.67	5.47E+00	6.21	5.11E+00	0.75	5.25E+00	1.99
0.95	2	8.68E+00	9.20E+00	6.04	8.68E+00	0.03	8.85E+00	1.95	9.15E+00	5.47	8.66E+00	0.22	8.80E+00	1.37

				MOY	5.18		1.93		2.10		12.64		2.64		7.28
n-Heptadécane															
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%	
0.5	2	3.32E-04	3.59E-04	8.24	3.40E-04	2.50	3.19E-04	3.85	4.77E-04	43.78	3.37E-04	1.56	4.29E-04	29.22	
0.55	2	3.08E-03	3.24E-03	5.27	3.14E-03	1.95	2.95E-03	4.16	3.93E-03	27.89	3.10E-03	0.73	3.61E-03	17.48	
0.6	2	1.77E-02	1.85E-02	4.57	1.80E-02	1.66	1.72E-02	2.89	2.11E-02	19.05	1.78E-02	0.32	1.97E-02	11.31	
0.65	2	7.23E-02	7.57E-02	4.72	7.33E-02	1.37	7.15E-02	1.19	8.22E-02	13.73	7.23E-02	0.03	7.80E-02	7.87	
0.7	2	2.28E-01	2.39E-01	5.05	2.30E-01	1.03	2.29E-01	0.41	2.51E-01	10.29	2.27E-01	0.23	2.41E-01	5.82	
0.75	2	5.90E-01	6.21E-01	5.28	5.94E-01	0.69	6.00E-01	1.68	6.37E-01	7.94	5.88E-01	0.44	6.17E-01	4.53	
0.8	2	1.32E+00	1.39E+00	5.32	1.32E+00	0.42	1.35E+00	2.57	1.40E+00	6.26	1.31E+00	0.53	1.37E+00	3.68	
0.85	2	2.63E+00	2.76E+00	5.09	2.63E+00	0.29	2.71E+00	3.03	2.76E+00	4.98	2.61E+00	0.46	2.71E+00	3.05	
0.9	2	4.80E+00	5.01E+00	4.44	4.81E+00	0.29	4.94E+00	2.95	4.98E+00	3.87	4.78E+00	0.25	4.91E+00	2.44	
0.95	2	8.20E+00	8.46E+00	3.13	8.23E+00	0.32	8.37E+00	2.12	8.42E+00	2.62	8.20E+00	0.02	8.33E+00	1.60	
				MOY	5.11		1.05		2.48		14.04		0.46		8.70
n-Octadécane															
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%	
0.5	2	2.36E-04	2.40E-04	1.41	2.40E-04	1.48	2.25E-04	4.74	3.29E-04	39.40	2.38E-04	0.66	3.13E-04	32.48	
0.55	2	2.34E-03	2.33E-03	0.77	2.37E-03	1.17	2.23E-03	4.76	2.90E-03	23.67	2.34E-03	0.05	2.81E-03	19.74	
0.6	2	1.42E-02	1.41E-02	0.84	1.44E-02	1.07	1.38E-02	3.19	1.64E-02	15.04	1.42E-02	0.34	1.61E-02	13.05	
0.65	2	6.04E-02	6.02E-02	0.18	6.09E-02	0.93	5.96E-02	1.23	6.63E-02	9.91	6.00E-02	0.53	6.60E-02	9.29	
0.7	2	1.96E-01	1.97E-01	0.55	1.97E-01	0.70	1.97E-01	0.56	2.09E-01	6.61	1.95E-01	0.70	2.10E-01	7.01	
0.75	2	5.21E-01	5.26E-01	1.08	5.23E-01	0.43	5.31E-01	1.95	5.43E-01	4.34	5.16E-01	0.82	5.49E-01	5.52	
0.8	2	1.19E+00	1.20E+00	1.32	1.19E+00	0.23	1.22E+00	2.89	1.22E+00	2.69	1.18E+00	0.83	1.24E+00	4.47	
0.85	2	2.40E+00	2.43E+00	1.21	2.41E+00	0.16	2.48E+00	3.34	2.44E+00	1.40	2.39E+00	0.69	2.49E+00	3.65	
0.9	2	4.45E+00	4.47E+00	0.63	4.46E+00	0.22	4.59E+00	3.20	4.46E+00	0.23	4.43E+00	0.39	4.57E+00	2.85	
0.95	2	7.69E+00	7.64E+00	0.64	7.71E+00	0.29	7.87E+00	2.26	7.61E+00	1.09	7.69E+00	0.04	7.83E+00	1.81	
				MOY	0.86		0.67		2.81		10.44		0.51		9.99
n-Nonadécane															
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%	
0.5	2	1.70E-04	1.62E-04	4.53	1.66E-04	2.32	1.60E-04	5.63	2.31E-04	36.08	1.66E-04	2.40	2.31E-04	36.06	
0.55	2	1.80E-03	1.69E-03	6.03	1.77E-03	1.73	1.71E-03	5.35	2.17E-03	20.31	1.76E-03	2.47	2.20E-03	22.23	
0.6	2	1.15E-02	1.09E-02	5.57	1.14E-02	1.14	1.11E-02	3.48	1.29E-02	11.75	1.13E-02	2.26	1.32E-02	14.95	
0.65	2	5.08E-02	4.85E-02	4.48	5.04E-02	0.74	5.01E-02	1.25	5.42E-02	6.71	4.97E-02	2.03	5.63E-02	10.84	
0.7	2	1.70E-01	1.64E-01	3.42	1.69E-01	0.56	1.71E-01	0.74	1.76E-01	3.48	1.67E-01	1.87	1.84E-01	8.30	
0.75	2	4.63E-01	4.50E-01	2.65	4.60E-01	0.50	4.73E-01	2.26	4.68E-01	1.23	4.55E-01	1.73	4.93E-01	6.59	
0.8	2	1.07E+00	1.05E+00	2.26	1.07E+00	0.44	1.11E+00	3.24	1.07E+00	0.45	1.06E+00	1.52	1.13E+00	5.32	
0.85	2	2.21E+00	2.16E+00	2.28	2.20E+00	0.30	2.29E+00	3.66	2.17E+00	1.79	2.18E+00	1.18	2.31E+00	4.29	
0.9	2	4.15E+00	4.03E+00	2.82	4.14E+00	0.06	4.29E+00	3.46	4.02E+00	3.04	4.12E+00	0.70	4.28E+00	3.28	

0.95	2	7.25E+00	6.96E+00	4.08	7.27E+00	0.17	7.43E+00	2.41	6.93E+00	4.46	7.24E+00	0.19	7.40E+00	2.02
			MOY	3.81		0.80		3.15		8.93		1.63		11.39
n-Eicosane														
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	1.11E-04	1.08E-04	3.22	1.13E-04	1.29	1.04E-04	6.86	1.60E-04	43.56	1.14E-04	2.77	1.57E-04	41.69
0.55	2	1.29E-03	1.21E-03	6.16	1.30E-03	1.05	1.21E-03	6.15	1.60E-03	23.77	1.31E-03	1.35	1.63E-03	26.11
0.6	2	8.83E-03	8.25E-03	6.64	8.92E-03	1.02	8.49E-03	3.85	9.98E-03	12.95	8.89E-03	0.58	1.04E-02	17.92
0.65	2	4.11E-02	3.85E-02	6.22	4.15E-02	0.94	4.06E-02	1.24	4.37E-02	6.47	4.11E-02	0.09	4.65E-02	13.24
0.7	2	1.43E-01	1.35E-01	5.69	1.44E-01	0.73	1.45E-01	1.04	1.47E-01	2.23	1.43E-01	0.31	1.58E-01	10.29
0.75	2	4.03E-01	3.82E-01	5.37	4.05E-01	0.47	4.14E-01	2.72	4.00E-01	0.79	4.01E-01	0.59	4.36E-01	8.21
0.8	2	9.61E-01	9.10E-01	5.38	9.64E-01	0.26	9.98E-01	3.76	9.32E-01	3.09	9.54E-01	0.72	1.02E+00	6.62
0.85	2	2.02E+00	1.90E+00	5.78	2.02E+00	0.19	2.11E+00	4.16	1.92E+00	4.98	2.01E+00	0.63	2.13E+00	5.26
0.9	2	3.86E+00	3.60E+00	6.66	3.87E+00	0.25	4.01E+00	3.84	3.60E+00	6.70	3.85E+00	0.37	4.01E+00	3.92
0.95	2	6.86E+00	6.29E+00	8.24	6.88E+00	0.33	7.04E+00	2.63	6.27E+00	8.54	6.86E+00	0.03	7.02E+00	2.35
			MOY	5.94		0.65		3.62		11.31		0.74		13.56

n-alkylbenzènes

Benzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.51	1	7.20E-02	8.07E-02	12.10	7.37E-02	2.44	7.28E-02	1.16	8.59E-02	19.40	7.37E-02	2.46	7.78E-02	8.05
0.56	1	2.57E-01	2.80E-01	8.78	2.59E-01	0.68	2.56E-01	0.55	2.90E-01	12.70	2.59E-01	0.69	2.66E-01	3.26
0.61	1	7.20E-01	7.71E-01	7.08	7.18E-01	0.17	7.12E-01	1.07	7.83E-01	8.83	7.18E-01	0.17	7.25E-01	0.72
0.66	1	1.68E+00	1.78E+00	6.27	1.67E+00	0.53	1.66E+00	0.97	1.79E+00	6.60	1.67E+00	0.53	1.67E+00	0.54
0.71	1	3.41E+00	3.61E+00	5.97	3.39E+00	0.63	3.39E+00	0.55	3.59E+00	5.39	3.39E+00	0.63	3.37E+00	1.01
0.76	1	6.24E+00	6.61E+00	5.95	6.20E+00	0.58	6.24E+00	0.01	6.54E+00	4.85	6.20E+00	0.58	6.18E+00	0.99
0.81	1	1.05E+01	1.12E+01	6.04	1.05E+01	0.46	1.06E+01	0.57	1.10E+01	4.72	1.05E+01	0.46	1.05E+01	0.67
0.86	1	1.67E+01	1.77E+01	6.10	1.66E+01	0.30	1.69E+01	1.03	1.75E+01	4.82	1.66E+01	0.30	1.66E+01	0.21
0.91	1	2.52E+01	2.67E+01	5.96	2.51E+01	0.11	2.55E+01	1.22	2.64E+01	4.97	2.51E+01	0.11	2.52E+01	0.22
0.96	1	3.65E+01	3.85E+01	5.37	3.66E+01	0.06	3.69E+01	0.93	3.83E+01	4.91	3.66E+01	0.06	3.67E+01	0.40
			MOY	6.96		0.60		0.81		7.72		0.60		1.61

Toluène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.52	1	6.03E-02	6.27E-02	4.00	6.18E-02	2.53	6.14E-02	1.85	6.67E-02	10.67	6.18E-02	2.54	6.54E-02	8.42
0.57	1	2.15E-01	2.22E-01	3.45	2.20E-01	2.27	2.18E-01	1.35	2.30E-01	7.08	2.20E-01	2.28	2.26E-01	4.94
0.62	1	6.03E-01	6.24E-01	3.40	6.16E-01	2.07	6.11E-01	1.33	6.33E-01	5.00	6.16E-01	2.08	6.21E-01	2.92
0.67	1	1.42E+00	1.47E+00	3.56	1.44E+00	1.87	1.44E+00	1.52	1.47E+00	3.79	1.44E+00	1.87	1.44E+00	1.76
0.72	1	2.90E+00	3.01E+00	3.81	2.95E+00	1.63	2.95E+00	1.78	2.99E+00	3.16	2.95E+00	1.64	2.93E+00	1.15
0.77	1	5.36E+00	5.58E+00	4.06	5.43E+00	1.39	5.47E+00	2.04	5.51E+00	2.90	5.43E+00	1.39	5.41E+00	0.91

0.82	1	9.13E+00	9.52E+00	4.24	9.23E+00	1.13	9.33E+00	2.23	9.39E+00	2.87	9.23E+00	1.13	9.21E+00	0.89
0.87	1	1.46E+01	1.52E+01	4.24	1.47E+01	0.88	1.49E+01	2.24	1.50E+01	2.93	1.47E+01	0.88	1.47E+01	0.96
0.92	1	2.22E+01	2.31E+01	3.92	2.24E+01	0.64	2.27E+01	1.94	2.29E+01	2.92	2.24E+01	0.63	2.24E+01	0.96
0.97	1	3.26E+01	3.36E+01	3.02	3.27E+01	0.36	3.30E+01	1.07	3.34E+01	2.58	3.27E+01	0.35	3.28E+01	0.63
			MOY	3.77		1.48		1.74		4.39		1.48		2.35

Ethylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.53	1	5.57E-02	5.33E-02	4.19	5.53E-02	0.69	5.50E-02	1.18	5.67E-02	1.88	5.53E-02	0.68	5.85E-02	5.00
0.58	1	1.98E-01	1.92E-01	3.43	1.98E-01	0.10	1.96E-01	0.94	1.98E-01	0.12	1.98E-01	0.09	2.03E-01	2.41
0.63	1	5.57E-01	5.43E-01	2.56	5.59E-01	0.22	5.55E-01	0.48	5.51E-01	1.13	5.59E-01	0.23	5.63E-01	0.93
0.68	1	1.31E+00	1.29E+00	1.68	1.32E+00	0.37	1.31E+00	0.05	1.29E+00	1.53	1.32E+00	0.38	1.31E+00	0.17
0.73	1	2.69E+00	2.67E+00	0.83	2.71E+00	0.44	2.71E+00	0.62	2.65E+00	1.52	2.71E+00	0.44	2.69E+00	0.10
0.78	1	4.99E+00	4.99E+00	0.05	5.01E+00	0.45	5.05E+00	1.16	4.93E+00	1.22	5.01E+00	0.46	4.99E+00	0.03
0.83	1	8.52E+00	8.57E+00	0.59	8.56E+00	0.45	8.66E+00	1.60	8.45E+00	0.77	8.56E+00	0.46	8.54E+00	0.23
0.88	1	1.37E+01	1.38E+01	0.98	1.37E+01	0.44	1.39E+01	1.83	1.36E+01	0.30	1.37E+01	0.44	1.37E+01	0.55
0.93	1	2.08E+01	2.10E+01	0.94	2.09E+01	0.40	2.12E+01	1.65	2.08E+01	0.00	2.09E+01	0.40	2.10E+01	0.73
0.98	1	3.07E+01	3.08E+01	0.17	3.08E+01	0.24	3.09E+01	0.76	3.06E+01	0.18	3.08E+01	0.24	3.08E+01	0.45
			MOY	1.54		0.38		1.03		0.87		0.38		1.06

n-Propylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.54	1	5.24E-02	4.67E-02	10.97	5.07E-02	3.24	5.07E-02	3.28	4.97E-02	5.27	5.08E-02	3.22	5.39E-02	2.72
0.59	1	1.86E-01	1.69E-01	8.86	1.83E-01	1.69	1.82E-01	2.19	1.75E-01	5.69	1.83E-01	1.68	1.88E-01	1.05
0.64	1	5.20E-01	4.84E-01	6.92	5.17E-01	0.69	5.15E-01	1.11	4.91E-01	5.55	5.17E-01	0.68	5.22E-01	0.24
0.69	1	1.22E+00	1.16E+00	5.16	1.22E+00	0.01	1.22E+00	0.06	1.16E+00	5.03	1.22E+00	0.02	1.22E+00	0.00
0.74	1	2.51E+00	2.42E+00	3.57	2.52E+00	0.53	2.53E+00	0.94	2.40E+00	4.25	2.52E+00	0.53	2.52E+00	0.18
0.79	1	4.65E+00	4.55E+00	2.18	4.69E+00	0.92	4.74E+00	1.84	4.50E+00	3.34	4.69E+00	0.92	4.68E+00	0.61
0.84	1	7.95E+00	7.86E+00	1.10	8.04E+00	1.17	8.15E+00	2.50	7.76E+00	2.44	8.04E+00	1.17	8.04E+00	1.12
0.89	1	1.28E+01	1.27E+01	0.49	1.29E+01	1.25	1.31E+01	2.74	1.26E+01	1.74	1.29E+01	1.25	1.30E+01	1.49
0.94	1	1.96E+01	1.95E+01	0.62	1.98E+01	1.07	2.01E+01	2.29	1.93E+01	1.51	1.98E+01	1.06	1.99E+01	1.44
0.99	1	2.92E+01	2.86E+01	1.99	2.93E+01	0.34	2.94E+01	0.62	2.86E+01	2.25	2.93E+01	0.34	2.93E+01	0.46
			MOY	4.19		1.09		1.76		3.71		1.09		0.93

n-Butylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.56	1	6.45E-02	6.07E-02	5.90	6.36E-02	1.46	6.21E-02	3.78	6.42E-02	0.54	6.36E-02	1.44	6.56E-02	1.68
0.61	1	2.17E-01	2.08E-01	4.16	2.17E-01	0.09	2.12E-01	2.22	2.14E-01	1.31	2.17E-01	0.08	2.19E-01	0.67
0.66	1	5.88E-01	5.72E-01	2.74	5.91E-01	0.58	5.82E-01	0.97	5.78E-01	1.64	5.91E-01	0.59	5.88E-01	0.13
0.71	1	1.35E+00	1.33E+00	1.38	1.36E+00	1.04	1.35E+00	0.23	1.33E+00	1.47	1.36E+00	1.05	1.35E+00	0.13
0.76	1	2.71E+00	2.71E+00	0.04	2.75E+00	1.47	2.75E+00	1.44	2.69E+00	0.89	2.75E+00	1.48	2.73E+00	0.58

0.81	1	4.94E+00	5.00E+00	1.18	5.04E+00	1.88	5.07E+00	2.55	4.94E+00	0.08	5.04E+00	1.88	5.01E+00	1.29
0.86	1	8.36E+00	8.53E+00	2.06	8.54E+00	2.15	8.64E+00	3.34	8.42E+00	0.71	8.54E+00	2.16	8.52E+00	1.98
0.91	1	1.34E+01	1.37E+01	2.26	1.36E+01	2.12	1.38E+01	3.45	1.35E+01	1.10	1.36E+01	2.12	1.37E+01	2.31
0.96	1	2.05E+01	2.08E+01	1.29	2.08E+01	1.49	2.10E+01	2.40	2.06E+01	0.62	2.08E+01	1.49	2.09E+01	1.78
			MOY	2.33		1.37		2.27		0.93		1.36		1.17

n-Pentylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	6.55E-03	6.46E-03	1.48	6.47E-03	1.25	6.60E-03	0.71	7.23E-03	10.31	6.47E-03	1.22	7.39E-03	12.72
0.55	2	3.49E-02	3.41E-02	2.20	3.45E-02	0.89	3.46E-02	0.67	3.66E-02	4.87	3.46E-02	0.86	3.71E-02	6.48
0.6	2	1.32E-01	1.30E-01	1.91	1.31E-01	0.58	1.31E-01	0.88	1.35E-01	2.03	1.31E-01	0.56	1.36E-01	3.07
0.65	2	3.90E-01	3.85E-01	1.22	3.88E-01	0.39	3.87E-01	0.60	3.92E-01	0.59	3.88E-01	0.38	3.94E-01	1.20
0.7	2	9.53E-01	9.50E-01	0.39	9.50E-01	0.30	9.52E-01	0.10	9.53E-01	0.03	9.51E-01	0.29	9.56E-01	0.25
0.75	2	2.02E+00	2.03E+00	0.45	2.02E+00	0.26	2.03E+00	0.47	2.02E+00	0.13	2.02E+00	0.25	2.02E+00	0.11
0.8	2	3.85E+00	3.90E+00	1.22	3.84E+00	0.21	3.89E+00	1.02	3.85E+00	0.11	3.84E+00	0.21	3.84E+00	0.08
0.85	2	6.72E+00	6.85E+00	1.84	6.71E+00	0.14	6.82E+00	1.46	6.76E+00	0.53	6.71E+00	0.14	6.73E+00	0.16
0.9	2	1.10E+01	1.12E+01	2.16	1.10E+01	0.03	1.12E+01	1.62	1.11E+01	0.97	1.10E+01	0.03	1.10E+01	0.45
0.95	2	1.71E+01	1.74E+01	1.96	1.71E+01	0.10	1.73E+01	1.30	1.73E+01	1.19	1.71E+01	0.10	1.72E+01	0.56
			MOY	1.48		0.41		0.88		2.08		0.40		2.51

n-Hexylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	4.44E-03	4.50E-03	1.38	4.39E-03	1.01	4.46E-03	0.54	5.11E-03	15.07	4.40E-03	0.98	5.07E-03	14.20
0.55	2	2.54E-02	2.54E-02	0.13	2.52E-02	0.70	2.51E-02	0.88	2.75E-02	8.42	2.52E-02	0.67	2.72E-02	7.39
0.6	2	1.01E-01	1.02E-01	0.12	1.01E-01	0.42	1.00E-01	1.04	1.06E-01	4.85	1.01E-01	0.40	1.05E-01	3.69
0.65	2	3.12E-01	3.14E-01	0.61	3.11E-01	0.26	3.10E-01	0.66	3.21E-01	2.93	3.11E-01	0.25	3.17E-01	1.67
0.7	2	7.88E-01	7.99E-01	1.28	7.87E-01	0.20	7.88E-01	0.09	8.04E-01	1.97	7.87E-01	0.19	7.93E-01	0.62
0.75	2	1.72E+00	1.75E+00	1.98	1.71E+00	0.19	1.73E+00	0.53	1.74E+00	1.61	1.71E+00	0.18	1.72E+00	0.19
0.8	2	3.33E+00	3.42E+00	2.63	3.33E+00	0.17	3.37E+00	1.12	3.39E+00	1.64	3.33E+00	0.16	3.34E+00	0.15
0.85	2	5.92E+00	6.11E+00	3.13	5.92E+00	0.11	6.02E+00	1.57	6.03E+00	1.88	5.92E+00	0.10	5.94E+00	0.35
0.9	2	9.83E+00	1.02E+01	3.33	9.83E+00	0.00	1.00E+01	1.73	1.00E+01	2.17	9.83E+00	0.00	9.88E+00	0.59
0.95	2	1.55E+01	1.59E+01	3.00	1.55E+01	0.12	1.57E+01	1.37	1.58E+01	2.25	1.55E+01	0.12	1.56E+01	0.64
			MOY	1.76		0.32		0.95		4.28		0.30		2.95

n-Heptylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	3.04E-03	3.14E-03	3.31	3.02E-03	0.73	3.05E-03	0.22	3.62E-03	19.15	3.02E-03	0.68	3.52E-03	15.80
0.55	2	1.87E-02	1.90E-02	1.62	1.86E-02	0.48	1.84E-02	1.18	2.08E-02	11.31	1.86E-02	0.44	2.02E-02	8.40
0.6	2	7.87E-02	7.98E-02	1.35	7.85E-02	0.24	7.77E-02	1.23	8.42E-02	7.03	7.85E-02	0.21	8.22E-02	4.41
0.65	2	2.52E-01	2.57E-01	1.68	2.52E-01	0.11	2.50E-01	0.74	2.64E-01	4.64	2.52E-01	0.09	2.58E-01	2.23
0.7	2	6.59E-01	6.73E-01	2.22	6.58E-01	0.09	6.58E-01	0.07	6.81E-01	3.33	6.58E-01	0.07	6.66E-01	1.08

0.75	2	1.47E+00	1.51E+00	2.80	1.47E+00	0.11	1.48E+00	0.62	1.51E+00	2.70	1.47E+00	0.10	1.48E+00	0.57
0.8	2	2.92E+00	3.01E+00	3.34	2.91E+00	0.12	2.95E+00	1.25	2.99E+00	2.51	2.91E+00	0.11	2.93E+00	0.46
0.85	2	5.27E+00	5.47E+00	3.72	5.27E+00	0.08	5.36E+00	1.70	5.41E+00	2.56	5.27E+00	0.07	5.30E+00	0.59
0.9	2	8.87E+00	9.21E+00	3.80	8.87E+00	0.02	9.03E+00	1.85	9.11E+00	2.68	8.87E+00	0.03	8.94E+00	0.75
0.95	2	1.41E+01	1.46E+01	3.34	1.42E+01	0.14	1.43E+01	1.45	1.45E+01	2.61	1.42E+01	0.14	1.42E+01	0.73
			MOY	2.72		0.21		1.03		5.85		0.19		3.50

n-Octylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	2.09E-03	2.19E-03	4.67	2.08E-03	0.47	2.09E-03	0.24	2.58E-03	22.96	2.09E-03	0.42	2.46E-03	17.54
0.55	2	1.38E-02	1.42E-02	2.65	1.37E-02	0.29	1.36E-02	1.56	1.57E-02	13.95	1.38E-02	0.24	1.51E-02	9.53
0.6	2	6.14E-02	6.27E-02	2.23	6.13E-02	0.08	6.05E-02	1.46	6.69E-02	8.99	6.13E-02	0.05	6.46E-02	5.24
0.65	2	2.05E-01	2.10E-01	2.46	2.05E-01	0.02	2.03E-01	0.82	2.18E-01	6.16	2.05E-01	0.04	2.11E-01	2.90
0.7	2	5.53E-01	5.69E-01	2.92	5.53E-01	0.01	5.52E-01	0.03	5.78E-01	4.53	5.53E-01	0.03	5.62E-01	1.63
0.75	2	1.27E+00	1.31E+00	3.42	1.27E+00	0.04	1.28E+00	0.74	1.31E+00	3.64	1.27E+00	0.03	1.28E+00	1.03
0.8	2	2.56E+00	2.66E+00	3.86	2.56E+00	0.07	2.60E+00	1.40	2.64E+00	3.23	2.56E+00	0.06	2.58E+00	0.84
0.85	2	4.71E+00	4.90E+00	4.14	4.70E+00	0.05	4.79E+00	1.87	4.85E+00	3.10	4.70E+00	0.03	4.75E+00	0.88
0.9	2	8.03E+00	8.36E+00	4.10	8.03E+00	0.05	8.19E+00	1.99	8.28E+00	3.04	8.03E+00	0.05	8.11E+00	0.96
0.95	2	1.30E+01	1.34E+01	3.51	1.30E+01	0.16	1.32E+01	1.54	1.33E+01	2.81	1.30E+01	0.16	1.31E+01	0.84
			MOY	3.40		0.12		1.16		7.24		0.11		4.14

n-Nonylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	1.45E-03	1.51E-03	4.09	1.45E-03	0.17	1.44E-03	0.82	1.81E-03	24.90	1.45E-03	0.11	1.73E-03	19.45
0.55	2	1.02E-02	1.05E-02	2.03	1.02E-02	0.06	1.00E-02	2.00	1.18E-02	15.03	1.02E-02	0.00	1.14E-02	10.80
0.6	2	4.81E-02	4.89E-02	1.67	4.81E-02	0.10	4.73E-02	1.72	5.27E-02	9.61	4.82E-02	0.14	5.11E-02	6.20
0.65	2	1.67E-01	1.71E-01	1.97	1.68E-01	0.17	1.66E-01	0.90	1.78E-01	6.49	1.68E-01	0.20	1.73E-01	3.67
0.7	2	4.66E-01	4.77E-01	2.47	4.66E-01	0.13	4.66E-01	0.02	4.87E-01	4.65	4.66E-01	0.14	4.76E-01	2.28
0.75	2	1.09E+00	1.13E+00	2.98	1.09E+00	0.04	1.10E+00	0.87	1.13E+00	3.59	1.10E+00	0.05	1.11E+00	1.57
0.8	2	2.26E+00	2.34E+00	3.40	2.26E+00	0.02	2.30E+00	1.58	2.33E+00	3.03	2.26E+00	0.01	2.29E+00	1.28
0.85	2	4.22E+00	4.37E+00	3.63	4.22E+00	0.01	4.31E+00	2.05	4.34E+00	2.75	4.22E+00	0.00	4.27E+00	1.22
0.9	2	7.30E+00	7.56E+00	3.53	7.31E+00	0.08	7.46E+00	2.15	7.49E+00	2.55	7.31E+00	0.08	7.39E+00	1.19
0.95	2	1.19E+01	1.23E+01	2.85	1.19E+01	0.18	1.21E+01	1.64	1.22E+01	2.18	1.19E+01	0.18	1.20E+01	0.96
			MOY	2.86		0.10		1.38		7.48		0.09		4.86

n-Décylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	1.02E-03	1.04E-03	1.86	1.02E-03	0.05	1.01E-03	1.49	1.28E-03	25.14	1.02E-03	0.02	1.24E-03	21.56
0.55	2	7.72E-03	7.72E-03	0.06	7.72E-03	0.03	7.53E-03	2.50	8.85E-03	14.65	7.73E-03	0.09	8.67E-03	12.22
0.6	2	3.82E-02	3.81E-02	0.26	3.83E-02	0.18	3.74E-02	2.00	4.16E-02	8.90	3.83E-02	0.23	4.10E-02	7.28
0.65	2	1.38E-01	1.39E-01	0.19	1.39E-01	0.23	1.37E-01	0.99	1.46E-01	5.59	1.39E-01	0.27	1.45E-01	4.55

0.7	2	3.98E-01	4.01E-01	0.80	3.98E-01	0.18	3.98E-01	0.09	4.12E-01	3.60	3.98E-01	0.20	4.10E-01	3.02
0.75	2	9.58E-01	9.71E-01	1.36	9.59E-01	0.07	9.68E-01	1.04	9.81E-01	2.41	9.59E-01	0.09	9.79E-01	2.19
0.8	2	2.02E+00	2.05E+00	1.79	2.02E+00	0.00	2.05E+00	1.79	2.05E+00	1.71	2.02E+00	0.01	2.05E+00	1.79
0.85	2	3.83E+00	3.91E+00	2.00	3.83E+00	0.00	3.92E+00	2.26	3.88E+00	1.30	3.83E+00	0.02	3.89E+00	1.61
0.9	2	6.72E+00	6.85E+00	1.85	6.73E+00	0.09	6.88E+00	2.33	6.79E+00	0.98	6.73E+00	0.10	6.82E+00	1.46
0.95	2	1.11E+01	1.12E+01	1.10	1.11E+01	0.20	1.13E+01	1.75	1.12E+01	0.47	1.11E+01	0.20	1.12E+01	1.10
			MOY	1.13		0.10		1.62		6.48		0.12		5.68

n-Undecylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	7.16E-04	7.11E-04	0.72	7.16E-04	0.02	7.00E-04	2.23	8.97E-04	25.23	7.17E-04	0.11	8.87E-04	23.90
0.55	2	5.81E-03	5.67E-03	2.34	5.81E-03	0.09	5.63E-03	3.03	6.63E-03	14.23	5.81E-03	0.15	6.61E-03	13.82
0.6	2	3.03E-02	2.96E-02	2.25	3.03E-02	0.23	2.96E-02	2.30	3.28E-02	8.25	3.03E-02	0.28	3.28E-02	8.50
0.65	2	1.14E-01	1.12E-01	1.55	1.14E-01	0.28	1.13E-01	1.06	1.20E-01	4.81	1.14E-01	0.32	1.20E-01	5.56
0.7	2	3.38E-01	3.36E-01	0.77	3.39E-01	0.21	3.39E-01	0.17	3.48E-01	2.74	3.39E-01	0.24	3.51E-01	3.87
0.75	2	8.36E-01	8.35E-01	0.09	8.36E-01	0.09	8.46E-01	1.23	8.48E-01	1.45	8.37E-01	0.11	8.60E-01	2.90
0.8	2	1.80E+00	1.80E+00	0.40	1.80E+00	0.01	1.83E+00	2.02	1.81E+00	0.66	1.80E+00	0.03	1.84E+00	2.36
0.85	2	3.47E+00	3.49E+00	0.63	3.47E+00	0.01	3.55E+00	2.50	3.47E+00	0.14	3.47E+00	0.03	3.54E+00	2.05
0.9	2	6.16E+00	6.19E+00	0.45	6.17E+00	0.11	6.32E+00	2.52	6.15E+00	0.30	6.17E+00	0.11	6.27E+00	1.77
0.95	2	1.03E+01	1.03E+01	0.35	1.03E+01	0.22	1.05E+01	1.86	1.02E+01	0.93	1.03E+01	0.21	1.04E+01	1.26
			MOY	0.95		0.13		1.89		5.88		0.16		6.60

n-Dodecylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	5.09E-04	4.81E-04	5.37	5.08E-04	0.10	4.93E-04	3.03	6.25E-04	22.92	5.09E-04	0.01	6.43E-04	26.49
0.55	2	4.41E-03	4.13E-03	6.43	4.41E-03	0.01	4.26E-03	3.60	4.94E-03	11.84	4.42E-03	0.06	5.10E-03	15.60
0.6	2	2.42E-02	2.28E-02	5.88	2.43E-02	0.16	2.36E-02	2.60	2.57E-02	5.90	2.43E-02	0.22	2.66E-02	9.87
0.65	2	9.51E-02	9.05E-02	4.81	9.53E-02	0.24	9.40E-02	1.13	9.75E-02	2.52	9.53E-02	0.28	1.01E-01	6.68
0.7	2	2.91E-01	2.80E-01	3.73	2.91E-01	0.18	2.91E-01	0.28	2.92E-01	0.49	2.91E-01	0.21	3.05E-01	4.82
0.75	2	7.36E-01	7.15E-01	2.85	7.36E-01	0.06	7.46E-01	1.44	7.30E-01	0.79	7.36E-01	0.09	7.63E-01	3.70
0.8	2	1.61E+00	1.58E+00	2.23	1.61E+00	0.02	1.65E+00	2.29	1.59E+00	1.61	1.61E+00	0.01	1.66E+00	3.01
0.85	2	3.16E+00	3.10E+00	1.94	3.16E+00	0.00	3.25E+00	2.75	3.09E+00	2.19	3.16E+00	0.01	3.24E+00	2.54
0.9	2	5.70E+00	5.58E+00	2.09	5.71E+00	0.11	5.86E+00	2.73	5.55E+00	2.71	5.71E+00	0.11	5.82E+00	2.10
0.95	2	9.64E+00	9.36E+00	2.89	9.66E+00	0.23	9.83E+00	1.99	9.31E+00	3.42	9.66E+00	0.22	9.78E+00	1.43
			MOY	3.82		0.11		2.18		5.44		0.12		7.62

n-Tridecylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	3.63E-04	3.21E-04	11.60	3.62E-04	0.30	3.49E-04	3.88	4.31E-04	18.62	3.62E-04	0.20	4.70E-04	29.38
0.55	2	3.37E-03	2.97E-03	11.90	3.37E-03	0.16	3.23E-03	4.18	3.64E-03	7.87	3.37E-03	0.08	3.97E-03	17.60
0.6	2	1.95E-02	1.74E-02	10.74	1.95E-02	0.06	1.89E-02	2.90	1.99E-02	2.22	1.95E-02	0.12	2.17E-02	11.40

0.65	2	7.95E-02	7.22E-02	9.18	7.97E-02	0.16	7.86E-02	1.19	7.88E-02	0.91	7.97E-02	0.21	8.58E-02	7.94
0.7	2	2.51E-01	2.31E-01	7.71	2.51E-01	0.12	2.52E-01	0.41	2.44E-01	2.78	2.51E-01	0.17	2.65E-01	5.88
0.75	2	6.50E-01	6.08E-01	6.54	6.50E-01	0.02	6.61E-01	1.69	6.25E-01	3.94	6.51E-01	0.05	6.80E-01	4.58
0.8	2	1.45E+00	1.37E+00	5.72	1.45E+00	0.05	1.49E+00	2.58	1.38E+00	4.72	1.45E+00	0.02	1.51E+00	3.72
0.85	2	2.90E+00	2.74E+00	5.29	2.90E+00	0.02	2.99E+00	3.04	2.74E+00	5.28	2.90E+00	0.01	2.99E+00	3.08
0.9	2	5.29E+00	5.01E+00	5.37	5.30E+00	0.11	5.45E+00	2.96	4.98E+00	5.84	5.30E+00	0.10	5.42E+00	2.47
0.95	2	9.05E+00	8.50E+00	6.13	9.08E+00	0.25	9.25E+00	2.12	8.46E+00	6.61	9.07E+00	0.22	9.20E+00	1.62
			MOY	8.02		0.13		2.49		5.88		0.12		8.77

n-Tetradecylbenzène

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	2.60E-04	2.17E-04	16.34	2.58E-04	0.73	2.47E-04	4.75	3.02E-04	16.20	2.58E-04	0.62	3.44E-04	32.58
0.55	2	2.58E-03	2.16E-03	16.03	2.56E-03	0.48	2.45E-03	4.76	2.72E-03	5.49	2.57E-03	0.40	3.09E-03	19.81
0.6	2	1.57E-02	1.34E-02	14.37	1.56E-02	0.17	1.52E-02	3.20	1.56E-02	0.05	1.56E-02	0.11	1.77E-02	13.10
0.65	2	6.64E-02	5.82E-02	12.38	6.64E-02	0.00	6.56E-02	1.23	6.44E-02	3.08	6.65E-02	0.05	7.26E-02	9.34
0.7	2	2.16E-01	1.93E-01	10.58	2.16E-01	0.00	2.17E-01	0.56	2.05E-01	4.87	2.16E-01	0.05	2.31E-01	7.05
0.75	2	5.74E-01	5.21E-01	9.17	5.73E-01	0.08	5.85E-01	1.96	5.39E-01	6.00	5.73E-01	0.03	6.05E-01	5.55
0.8	2	1.31E+00	1.20E+00	8.18	1.31E+00	0.12	1.34E+00	2.89	1.22E+00	6.78	1.31E+00	0.09	1.37E+00	4.50
0.85	2	2.65E+00	2.44E+00	7.66	2.65E+00	0.06	2.74E+00	3.34	2.45E+00	7.39	2.65E+00	0.05	2.74E+00	3.67
0.9	2	4.90E+00	4.52E+00	7.69	4.90E+00	0.10	5.06E+00	3.20	4.51E+00	8.01	4.90E+00	0.08	5.04E+00	2.86
0.95	2	8.48E+00	7.76E+00	8.45	8.50E+00	0.25	8.67E+00	2.26	7.73E+00	8.86	8.50E+00	0.22	8.63E+00	1.82
			MOY	11.08		0.20		2.82		6.67		0.17		10.03

n-alkylcyclohexanes

Cyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.53	1	1.03E-01	1.21E-01	17.28	1.16E-01	12.72	1.12E-01	8.36	1.27E-01	23.38	1.16E-01	12.72	1.18E-01	14.24
0.58	1	3.31E-01	3.77E-01	13.74	3.60E-01	8.69	3.49E-01	5.42	3.87E-01	16.83	3.60E-01	8.69	3.59E-01	8.48
0.63	1	8.55E-01	9.54E-01	11.53	9.06E-01	5.93	8.87E-01	3.68	9.64E-01	12.70	9.06E-01	5.92	8.97E-01	4.92
0.68	1	1.88E+00	2.07E+00	10.18	1.96E+00	4.02	1.93E+00	2.70	2.07E+00	10.10	1.96E+00	4.01	1.93E+00	2.74
0.73	1	3.66E+00	4.00E+00	9.38	3.75E+00	2.69	3.74E+00	2.21	3.97E+00	8.55	3.75E+00	2.69	3.71E+00	1.51
0.78	1	6.47E+00	7.04E+00	8.95	6.58E+00	1.78	6.60E+00	2.02	6.96E+00	7.72	6.58E+00	1.78	6.52E+00	0.90
0.83	1	1.06E+01	1.15E+01	8.71	1.07E+01	1.15	1.08E+01	1.96	1.14E+01	7.37	1.07E+01	1.15	1.07E+01	0.70
0.88	1	1.65E+01	1.79E+01	8.46	1.66E+01	0.74	1.68E+01	1.87	1.77E+01	7.28	1.66E+01	0.74	1.66E+01	0.72
0.93	1	2.44E+01	2.64E+01	8.00	2.45E+01	0.47	2.48E+01	1.55	2.62E+01	7.22	2.45E+01	0.47	2.46E+01	0.72
0.98	1	3.50E+01	3.75E+01	6.98	3.51E+01	0.23	3.52E+01	0.68	4.07E+01	16.13	3.51E+01	0.23	3.52E+01	0.41
			MOY	10.32		3.84		3.05		11.73		3.84		3.53

Methylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.52	1	5.90E-02	4.91E-02	16.85	6.61E-02	11.89	6.44E-02	9.08	5.24E-02	11.24	6.61E-02	11.90	6.84E-02	15.81
0.57	1	2.04E-01	1.72E-01	15.64	2.22E-01	8.80	2.17E-01	6.45	1.79E-01	12.43	2.22E-01	8.81	2.25E-01	10.05
0.62	1	5.59E-01	4.79E-01	14.22	5.96E-01	6.63	5.86E-01	4.92	4.88E-01	12.68	5.96E-01	6.63	5.95E-01	6.48
0.67	1	1.29E+00	1.12E+00	12.82	1.35E+00	4.99	1.34E+00	3.98	1.13E+00	12.45	1.35E+00	4.99	1.34E+00	4.20
0.72	1	2.60E+00	2.30E+00	11.54	2.69E+00	3.69	2.68E+00	3.37	2.28E+00	11.96	2.69E+00	3.69	2.67E+00	2.74
0.77	1	4.73E+00	4.24E+00	10.41	4.86E+00	2.63	4.87E+00	2.95	4.20E+00	11.32	4.86E+00	2.63	4.82E+00	1.84
0.82	1	7.98E+00	7.22E+00	9.46	8.12E+00	1.76	8.19E+00	2.61	7.13E+00	10.61	8.12E+00	1.76	8.08E+00	1.32
0.87	1	1.26E+01	1.15E+01	8.73	1.28E+01	1.07	1.29E+01	2.26	1.14E+01	9.90	1.28E+01	1.07	1.28E+01	1.03
0.92	1	1.91E+01	1.75E+01	8.31	1.92E+01	0.57	1.94E+01	1.76	1.73E+01	9.27	1.92E+01	0.57	1.92E+01	0.82
0.97	1	2.77E+01	2.54E+01	8.34	2.78E+01	0.24	2.79E+01	0.91	2.52E+01	8.90	2.78E+01	0.24	2.78E+01	0.49
			MOY	11.63		4.23		3.83		11.08		4.23		4.48

Ethylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	2.80E-02	2.52E-02	10.31	2.66E-02	5.10	2.78E-02	0.84	2.71E-02	3.22	2.66E-02	5.09	3.00E-02	6.88
0.55	2	1.09E-01	1.00E-01	7.99	1.05E-01	3.86	1.08E-01	1.12	1.05E-01	3.82	1.05E-01	3.86	1.13E-01	3.29
0.6	2	3.26E-01	3.08E-01	5.74	3.17E-01	2.91	3.23E-01	0.93	3.14E-01	3.63	3.17E-01	2.90	3.30E-01	1.25
0.65	2	8.03E-01	7.73E-01	3.69	7.85E-01	2.19	7.98E-01	0.54	7.78E-01	3.04	7.85E-01	2.19	8.04E-01	0.14
0.7	2	1.70E+00	1.67E+00	1.88	1.68E+00	1.65	1.70E+00	0.06	1.67E+00	2.21	1.68E+00	1.65	1.70E+00	0.39
0.75	2	3.23E+00	3.22E+00	0.28	3.19E+00	1.24	3.25E+00	0.43	3.19E+00	1.24	3.19E+00	1.23	3.22E+00	0.51
0.8	2	5.62E+00	5.68E+00	1.11	5.56E+00	0.90	5.67E+00	0.90	5.60E+00	0.19	5.56E+00	0.90	5.60E+00	0.36
0.85	2	9.11E+00	9.31E+00	2.24	9.05E+00	0.62	9.22E+00	1.25	9.19E+00	0.88	9.05E+00	0.62	9.11E+00	0.05
0.9	2	1.40E+01	1.44E+01	3.02	1.40E+01	0.35	1.42E+01	1.39	1.43E+01	1.84	1.40E+01	0.35	1.40E+01	0.28
0.95	2	2.07E+01	2.13E+01	3.29	2.06E+01	0.08	2.09E+01	1.11	2.12E+01	2.55	2.06E+01	0.08	2.08E+01	0.44
			MOY	3.95		1.89		0.86		2.26		1.89		1.36

n-Propylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.55	1	7.96E-02	8.63E-02	8.44	8.23E-02	3.36	8.45E-02	6.17	9.02E-02	13.35	8.23E-02	3.37	8.85E-02	11.17
0.6	1	2.59E-01	2.71E-01	4.57	2.59E-01	0.06	2.64E-01	1.78	2.77E-01	6.87	2.59E-01	0.06	2.70E-01	4.16
0.65	1	6.80E-01	6.93E-01	1.89	6.62E-01	2.71	6.72E-01	1.26	6.97E-01	2.53	6.62E-01	2.71	6.76E-01	0.53
0.7	1	1.51E+00	1.52E+00	0.59	1.45E+00	4.22	1.47E+00	2.85	1.51E+00	0.19	1.45E+00	4.22	1.46E+00	3.15
0.75	1	2.95E+00	2.96E+00	0.54	2.81E+00	4.62	2.86E+00	3.15	2.93E+00	0.49	2.81E+00	4.62	2.83E+00	4.07
0.8	1	5.19E+00	5.27E+00	1.43	4.98E+00	4.14	5.06E+00	2.49	5.20E+00	0.09	4.98E+00	4.14	5.00E+00	3.73
0.85	1	8.47E+00	8.71E+00	2.85	8.21E+00	3.06	8.36E+00	1.29	8.59E+00	1.47	8.21E+00	3.06	8.25E+00	2.59
0.9	1	1.30E+01	1.36E+01	4.32	1.28E+01	1.71	1.30E+01	0.02	1.34E+01	3.15	1.28E+01	1.71	1.29E+01	1.14
0.95	1	1.92E+01	2.02E+01	5.23	1.91E+01	0.45	1.93E+01	0.73	2.01E+01	4.55	1.91E+01	0.45	1.92E+01	0.04
			MOY	3.32		2.70		2.19		3.63		2.70		3.40

n-Butylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	1.36E-02	1.75E-02	28.60	1.36E-02	0.25	1.36E-02	0.28	1.89E-02	39.16	1.36E-02	0.24	1.48E-02	9.19
0.55	2	6.00E-02	7.47E-02	24.40	6.00E-02	0.15	5.97E-02	0.64	7.82E-02	30.19	6.00E-02	0.15	6.27E-02	4.48
0.6	2	1.98E-01	2.41E-01	21.86	1.97E-01	0.06	1.96E-01	0.75	2.46E-01	24.59	1.97E-01	0.06	2.01E-01	1.85
0.65	2	5.23E-01	6.29E-01	20.22	5.23E-01	0.02	5.20E-01	0.51	6.33E-01	20.98	5.23E-01	0.02	5.25E-01	0.40
0.7	2	1.18E+00	1.40E+00	19.15	1.18E+00	0.02	1.17E+00	0.09	1.40E+00	18.66	1.18E+00	0.02	1.17E+00	0.31
0.75	2	2.33E+00	2.76E+00	18.45	2.33E+00	0.04	2.34E+00	0.40	2.74E+00	17.22	2.33E+00	0.04	2.32E+00	0.52
0.8	2	4.21E+00	4.96E+00	17.98	4.20E+00	0.05	4.24E+00	0.89	4.90E+00	16.41	4.20E+00	0.05	4.19E+00	0.40
0.85	2	7.03E+00	8.27E+00	17.58	7.03E+00	0.03	7.12E+00	1.28	8.16E+00	16.01	7.03E+00	0.03	7.03E+00	0.08
0.9	2	1.11E+01	1.30E+01	17.06	1.11E+01	0.02	1.12E+01	1.44	1.28E+01	15.80	1.11E+01	0.02	1.11E+01	0.27
0.95	2	1.67E+01	1.94E+01	16.16	1.67E+01	0.11	1.69E+01	1.17	1.93E+01	15.52	1.67E+01	0.10	1.68E+01	0.45
			MOY	20.15		0.07		0.74		21.46		0.07		1.79

n-Pentylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	9.54E-03	9.04E-03	5.20	9.76E-03	2.31	9.59E-03	0.60	9.94E-03	4.26	9.76E-03	2.31	1.05E-02	10.50
0.55	2	4.52E-02	4.26E-02	5.82	4.60E-02	1.79	4.50E-02	0.56	4.51E-02	0.28	4.60E-02	1.79	4.76E-02	5.20
0.6	2	1.57E-01	1.48E-01	5.61	1.59E-01	1.42	1.56E-01	0.76	1.53E-01	2.67	1.59E-01	1.42	1.61E-01	2.26
0.65	2	4.34E-01	4.12E-01	5.05	4.38E-01	1.11	4.31E-01	0.52	4.17E-01	3.88	4.38E-01	1.10	4.36E-01	0.64
0.7	2	1.01E+00	9.63E-01	4.35	1.02E+00	0.82	1.01E+00	0.10	9.63E-01	4.37	1.02E+00	0.82	1.01E+00	0.16
0.75	2	2.05E+00	1.98E+00	3.62	2.06E+00	0.58	2.06E+00	0.41	1.96E+00	4.40	2.06E+00	0.57	2.04E+00	0.42
0.8	2	3.77E+00	3.66E+00	2.93	3.79E+00	0.39	3.81E+00	0.92	3.62E+00	4.12	3.79E+00	0.39	3.76E+00	0.33
0.85	2	6.41E+00	6.26E+00	2.37	6.43E+00	0.27	6.50E+00	1.33	6.18E+00	3.69	6.43E+00	0.27	6.41E+00	0.03
0.9	2	1.03E+01	1.00E+01	2.07	1.03E+01	0.21	1.04E+01	1.49	9.92E+00	3.24	1.03E+01	0.21	1.03E+01	0.31
0.95	2	1.56E+01	1.53E+01	2.23	1.57E+01	0.20	1.58E+01	1.21	1.52E+01	2.99	1.57E+01	0.20	1.57E+01	0.48
			MOY	3.93		0.91		0.79		3.39		0.91		2.03

n-Hexylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	6.42E-03	6.20E-03	3.38	6.63E-03	3.22	6.47E-03	0.73	6.90E-03	7.44	6.63E-03	3.22	7.18E-03	11.86
0.55	2	3.27E-02	3.12E-02	4.50	3.35E-02	2.48	3.25E-02	0.59	3.33E-02	1.93	3.35E-02	2.48	3.47E-02	5.98
0.6	2	1.20E-01	1.14E-01	4.55	1.22E-01	1.95	1.19E-01	0.82	1.19E-01	1.04	1.22E-01	1.95	1.23E-01	2.74
0.65	2	3.45E-01	3.31E-01	4.14	3.50E-01	1.51	3.43E-01	0.56	3.36E-01	2.60	3.50E-01	1.50	3.48E-01	0.97
0.7	2	8.28E-01	7.98E-01	3.55	8.37E-01	1.12	8.27E-01	0.10	8.00E-01	3.33	8.37E-01	1.11	8.28E-01	0.07
0.75	2	1.73E+00	1.68E+00	2.90	1.74E+00	0.79	1.74E+00	0.44	1.67E+00	3.53	1.74E+00	0.79	1.73E+00	0.25
0.8	2	3.25E+00	3.18E+00	2.27	3.27E+00	0.54	3.28E+00	0.98	3.14E+00	3.38	3.27E+00	0.54	3.24E+00	0.20
0.85	2	5.62E+00	5.52E+00	1.76	5.64E+00	0.37	5.70E+00	1.40	5.45E+00	3.04	5.64E+00	0.37	5.62E+00	0.07
0.9	2	9.11E+00	8.97E+00	1.52	9.14E+00	0.28	9.25E+00	1.57	8.87E+00	2.68	9.14E+00	0.28	9.15E+00	0.39
0.95	2	1.41E+01	1.38E+01	1.75	1.41E+01	0.24	1.42E+01	1.26	1.37E+01	2.52	1.41E+01	0.23	1.41E+01	0.52

		MOY	3.03		1.25		0.85		3.15		1.25		2.31	
n-Heptylcyclohexane														
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	4.37E-03	4.46E-03	2.13	4.49E-03	2.81	4.40E-03	0.66	5.02E-03	14.92	4.49E-03	2.81	4.95E-03	13.29
0.55	2	2.39E-02	2.39E-02	0.10	2.44E-02	2.18	2.37E-02	0.74	2.58E-02	7.73	2.44E-02	2.18	2.55E-02	6.83
0.6	2	9.25E-02	9.20E-02	0.54	9.41E-02	1.74	9.16E-02	0.94	9.60E-02	3.72	9.41E-02	1.74	9.56E-02	3.31
0.65	2	2.78E-01	2.76E-01	0.56	2.81E-01	1.36	2.76E-01	0.62	2.82E-01	1.45	2.81E-01	1.35	2.81E-01	1.38
0.7	2	6.88E-01	6.86E-01	0.28	6.95E-01	1.01	6.87E-01	0.10	6.89E-01	0.21	6.95E-01	1.00	6.91E-01	0.39
0.75	2	1.48E+00	1.48E+00	0.11	1.49E+00	0.70	1.48E+00	0.49	1.47E+00	0.37	1.49E+00	0.70	1.48E+00	0.00
0.8	2	2.83E+00	2.84E+00	0.52	2.84E+00	0.47	2.86E+00	1.06	2.81E+00	0.52	2.84E+00	0.47	2.83E+00	0.00
0.85	2	4.97E+00	5.02E+00	0.83	4.99E+00	0.32	5.05E+00	1.50	4.95E+00	0.42	4.99E+00	0.32	4.99E+00	0.23
0.9	2	8.18E+00	8.26E+00	0.89	8.20E+00	0.26	8.32E+00	1.66	8.16E+00	0.26	8.20E+00	0.25	8.22E+00	0.50
0.95	2	1.28E+01	1.29E+01	0.47	1.28E+01	0.24	1.30E+01	1.33	1.28E+01	0.27	1.28E+01	0.23	1.29E+01	0.59
		MOY	0.64		1.11		0.91		2.99		1.10		2.65	
n-Octylcyclohexane														
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	2.99E-03	3.08E-03	3.28	3.03E-03	1.52	3.00E-03	0.43	3.52E-03	17.98	3.03E-03	1.52	3.43E-03	14.82
0.55	2	1.75E-02	1.77E-02	1.07	1.78E-02	1.21	1.74E-02	0.99	1.93E-02	9.96	1.78E-02	1.21	1.89E-02	7.78
0.6	2	7.17E-02	7.20E-02	0.39	7.24E-02	1.03	7.09E-02	1.11	7.56E-02	5.51	7.24E-02	1.02	7.45E-02	3.97
0.65	2	2.24E-01	2.25E-01	0.38	2.26E-01	0.83	2.23E-01	0.69	2.31E-01	2.96	2.26E-01	0.83	2.28E-01	1.88
0.7	2	5.74E-01	5.78E-01	0.66	5.77E-01	0.62	5.73E-01	0.08	5.83E-01	1.53	5.77E-01	0.61	5.78E-01	0.79
0.75	2	1.26E+00	1.28E+00	1.05	1.27E+00	0.41	1.27E+00	0.57	1.27E+00	0.81	1.27E+00	0.40	1.27E+00	0.33
0.8	2	2.47E+00	2.51E+00	1.45	2.48E+00	0.26	2.50E+00	1.17	2.48E+00	0.55	2.48E+00	0.25	2.48E+00	0.27
0.85	2	4.42E+00	4.50E+00	1.73	4.43E+00	0.18	4.49E+00	1.62	4.45E+00	0.55	4.43E+00	0.18	4.44E+00	0.44
0.9	2	7.38E+00	7.50E+00	1.75	7.39E+00	0.18	7.51E+00	1.77	7.42E+00	0.62	7.39E+00	0.17	7.42E+00	0.65
0.95	2	1.17E+01	1.18E+01	1.26	1.17E+01	0.21	1.18E+01	1.40	1.17E+01	0.52	1.17E+01	0.20	1.17E+01	0.67
		MOY	1.30		0.64		0.98		4.10		0.64		3.16	
n-Nonylcyclohexane														
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	2.04E-03	2.14E-03	4.86	2.04E-03	0.26	2.04E-03	0.05	2.49E-03	21.85	2.04E-03	0.26	2.38E-03	16.47
0.55	2	1.29E-02	1.32E-02	2.58	1.29E-02	0.13	1.27E-02	1.32	1.46E-02	12.99	1.29E-02	0.12	1.40E-02	8.83
0.6	2	5.55E-02	5.66E-02	1.94	5.56E-02	0.03	5.48E-02	1.32	6.00E-02	8.08	5.55E-02	0.03	5.82E-02	4.73
0.65	2	1.81E-01	1.85E-01	1.99	1.81E-01	0.10	1.80E-01	0.77	1.90E-01	5.26	1.81E-01	0.09	1.85E-01	2.48
0.7	2	4.79E-01	4.90E-01	2.32	4.79E-01	0.07	4.78E-01	0.06	4.96E-01	3.65	4.79E-01	0.07	4.85E-01	1.29
0.75	2	1.08E+00	1.11E+00	2.73	1.08E+00	0.01	1.09E+00	0.67	1.11E+00	2.78	1.08E+00	0.00	1.09E+00	0.74
0.8	2	2.16E+00	2.23E+00	3.12	2.16E+00	0.04	2.19E+00	1.30	2.21E+00	2.39	2.16E+00	0.04	2.17E+00	0.60
0.85	2	3.93E+00	4.06E+00	3.38	3.92E+00	0.02	4.00E+00	1.77	4.02E+00	2.28	3.92E+00	0.02	3.95E+00	0.70
0.9	2	6.64E+00	6.86E+00	3.35	6.65E+00	0.06	6.77E+00	1.90	6.79E+00	2.26	6.65E+00	0.06	6.70E+00	0.83

0.95	2	1.06E+01	1.09E+01	2.78	1.07E+01	0.16	1.08E+01	1.49	1.09E+01	2.06	1.07E+01	0.16	1.07E+01	0.77
			MOY	2.91		0.09		1.06		6.36		0.08		3.74
n-Decylcyclohexane														
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	1.41E-03	1.44E-03	2.43	1.38E-03	1.97	1.40E-03	0.46	1.71E-03	21.49	1.38E-03	1.96	1.67E-03	18.28
0.55	2	9.53E-03	9.60E-03	0.70	9.40E-03	1.41	9.37E-03	1.73	1.07E-02	12.58	9.40E-03	1.41	1.05E-02	10.02
0.6	2	4.33E-02	4.36E-02	0.54	4.29E-02	0.92	4.27E-02	1.56	4.67E-02	7.75	4.29E-02	0.93	4.58E-02	5.61
0.65	2	1.47E-01	1.49E-01	1.00	1.46E-01	0.61	1.46E-01	0.85	1.55E-01	5.04	1.46E-01	0.61	1.52E-01	3.19
0.7	2	4.02E-01	4.08E-01	1.64	4.00E-01	0.45	4.02E-01	0.01	4.16E-01	3.51	4.00E-01	0.46	4.09E-01	1.88
0.75	2	9.30E-01	9.51E-01	2.29	9.26E-01	0.38	9.37E-01	0.79	9.55E-01	2.70	9.26E-01	0.38	9.41E-01	1.23
0.8	2	1.90E+00	1.95E+00	2.84	1.89E+00	0.32	1.92E+00	1.47	1.94E+00	2.34	1.89E+00	0.31	1.92E+00	1.00
0.85	2	3.51E+00	3.62E+00	3.20	3.50E+00	0.21	3.58E+00	1.94	3.59E+00	2.24	3.50E+00	0.21	3.54E+00	1.01
0.9	2	6.02E+00	6.21E+00	3.23	6.02E+00	0.04	6.14E+00	2.05	6.15E+00	2.21	6.02E+00	0.05	6.08E+00	1.05
0.95	2	9.76E+00	1.00E+01	2.68	9.77E+00	0.12	9.91E+00	1.58	9.95E+00	1.97	9.77E+00	0.12	9.84E+00	0.88
			MOY	2.05		0.64		1.24		6.18		0.64		4.41
n-Undecylcyclohexane														
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	9.74E-04	9.80E-04	0.65	9.44E-04	3.05	9.64E-04	1.07	1.19E-03	22.10	9.44E-04	3.04	1.17E-03	20.27
0.55	2	7.07E-03	7.03E-03	0.58	6.91E-03	2.23	6.92E-03	2.20	7.99E-03	13.00	6.91E-03	2.22	7.87E-03	11.35
0.6	2	3.39E-02	3.38E-02	0.29	3.34E-02	1.53	3.33E-02	1.83	3.66E-02	8.15	3.34E-02	1.53	3.61E-02	6.61
0.65	2	1.20E-01	1.21E-01	0.55	1.19E-01	1.05	1.19E-01	0.94	1.26E-01	5.47	1.19E-01	1.05	1.25E-01	4.01
0.7	2	3.38E-01	3.43E-01	1.49	3.35E-01	0.78	3.38E-01	0.04	3.51E-01	3.98	3.35E-01	0.78	3.46E-01	2.56
0.75	2	8.02E-01	8.21E-01	2.35	7.97E-01	0.62	8.09E-01	0.94	8.27E-01	3.18	7.97E-01	0.62	8.16E-01	1.81
0.8	2	1.67E+00	1.72E+00	3.05	1.66E+00	0.49	1.70E+00	1.66	1.72E+00	2.82	1.66E+00	0.49	1.69E+00	1.47
0.85	2	3.14E+00	3.25E+00	3.49	3.13E+00	0.32	3.20E+00	2.13	3.22E+00	2.69	3.13E+00	0.32	3.18E+00	1.37
0.9	2	5.46E+00	5.65E+00	3.55	5.45E+00	0.11	5.58E+00	2.22	5.60E+00	2.61	5.45E+00	0.11	5.53E+00	1.30
0.95	2	8.95E+00	9.22E+00	2.99	8.96E+00	0.10	9.10E+00	1.68	9.16E+00	2.31	8.96E+00	0.09	9.04E+00	1.01
			MOY	1.90		1.03		1.47		6.63		1.03		5.18
n-Dodecylcyclohexane														
TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	6.77E-04	6.69E-04	1.07	6.56E-04	3.00	6.65E-04	1.77	8.32E-04	23.04	6.56E-04	2.99	8.29E-04	22.46
0.55	2	5.26E-03	5.17E-03	1.80	5.15E-03	2.19	5.12E-03	2.71	5.98E-03	13.68	5.15E-03	2.19	5.94E-03	12.84
0.6	2	2.66E-02	2.63E-02	1.05	2.62E-02	1.49	2.60E-02	2.12	2.89E-02	8.76	2.62E-02	1.49	2.86E-02	7.74
0.65	2	9.79E-02	9.81E-02	0.18	9.69E-02	1.01	9.69E-02	1.02	1.04E-01	6.09	9.69E-02	1.02	1.03E-01	4.94
0.7	2	2.85E-01	2.89E-01	1.42	2.83E-01	0.75	2.85E-01	0.12	2.98E-01	4.60	2.83E-01	0.75	2.94E-01	3.35
0.75	2	6.93E-01	7.10E-01	2.49	6.89E-01	0.60	7.00E-01	1.11	7.19E-01	3.80	6.89E-01	0.61	7.10E-01	2.47
0.8	2	1.47E+00	1.52E+00	3.33	1.46E+00	0.48	1.50E+00	1.88	1.52E+00	3.41	1.46E+00	0.48	1.50E+00	2.01
0.85	2	2.81E+00	2.92E+00	3.85	2.80E+00	0.32	2.88E+00	2.35	2.90E+00	3.23	2.80E+00	0.32	2.86E+00	1.78

0.9	2	4.96E+00	5.15E+00	3.93	4.95E+00	0.10	5.08E+00	2.40	5.11E+00	3.08	4.95E+00	0.10	5.04E+00	1.58
0.95	2	8.23E+00	8.51E+00	3.34	8.24E+00	0.12	8.38E+00	1.79	8.45E+00	2.69	8.24E+00	0.11	8.33E+00	1.16
			MOY	2.24		1.01		1.73		7.24		1.00		6.03

n-Tridecylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	4.72E-04	4.60E-04	2.69	4.67E-04	1.20	4.60E-04	2.55	5.87E-04	24.37	4.67E-04	1.20	5.90E-04	24.90
0.55	2	3.94E-03	3.82E-03	2.96	3.90E-03	0.84	3.81E-03	3.25	4.51E-03	14.61	3.90E-03	0.84	4.51E-03	14.51
0.6	2	2.09E-02	2.06E-02	1.77	2.08E-02	0.46	2.04E-02	2.42	2.29E-02	9.55	2.08E-02	0.46	2.28E-02	9.02
0.65	2	8.02E-02	8.01E-02	0.18	8.00E-02	0.23	7.93E-02	1.09	8.57E-02	6.83	8.00E-02	0.24	8.50E-02	5.99
0.7	2	2.41E-01	2.44E-01	1.35	2.40E-01	0.17	2.41E-01	0.21	2.54E-01	5.31	2.40E-01	0.18	2.51E-01	4.24
0.75	2	6.01E-01	6.16E-01	2.62	5.99E-01	0.19	6.08E-01	1.31	6.27E-01	4.46	5.99E-01	0.19	6.20E-01	3.21
0.8	2	1.30E+00	1.35E+00	3.57	1.30E+00	0.19	1.33E+00	2.13	1.35E+00	4.01	1.30E+00	0.19	1.33E+00	2.61
0.85	2	2.53E+00	2.63E+00	4.15	2.52E+00	0.12	2.59E+00	2.60	2.82E+00	3.75	2.52E+00	0.12	2.58E+00	2.24
0.9	2	4.52E+00	4.71E+00	4.24	4.52E+00	0.03	4.64E+00	2.60	4.68E+00	3.50	4.52E+00	0.02	4.60E+00	1.90
0.95	2	7.59E+00	7.86E+00	3.61	7.60E+00	0.19	7.73E+00	1.91	7.81E+00	3.00	7.60E+00	0.17	7.69E+00	1.33
			MOY	2.71		0.36		2.01		7.94		0.36		6.99

n-Tetradecylcyclohexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG2	%	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG2	%	PRCG3	%	PR	%
0.5	2	3.26E-04	3.66E-04	12.17	3.36E-04	3.11	3.15E-04	3.37	4.79E-04	46.82	3.36E-04	3.10	4.16E-04	27.60
0.55	2	2.91E-03	3.20E-03	10.24	2.98E-03	2.39	2.80E-03	3.83	3.85E-03	32.47	2.98E-03	2.38	3.38E-03	16.37
0.6	2	1.63E-02	1.80E-02	10.33	1.66E-02	1.97	1.58E-02	2.72	2.03E-02	24.58	1.66E-02	1.95	1.80E-02	10.46
0.65	2	6.49E-02	7.21E-02	11.09	6.59E-02	1.58	6.42E-02	1.16	7.78E-02	19.93	6.59E-02	1.56	6.96E-02	7.17
0.7	2	2.01E-01	2.25E-01	11.90	2.03E-01	1.17	2.02E-01	0.33	2.35E-01	16.98	2.03E-01	1.15	2.11E-01	5.23
0.75	2	5.13E-01	5.78E-01	12.52	5.17E-01	0.78	5.21E-01	1.54	5.91E-01	15.01	5.17E-01	0.77	5.34E-01	4.04
0.8	2	1.13E+00	1.28E+00	12.88	1.14E+00	0.48	1.16E+00	2.40	1.29E+00	13.66	1.14E+00	0.48	1.17E+00	3.28
0.85	2	2.24E+00	2.53E+00	12.91	2.25E+00	0.33	2.30E+00	2.86	2.52E+00	12.66	2.25E+00	0.33	2.30E+00	2.75
0.9	2	4.06E+00	4.56E+00	12.46	4.07E+00	0.31	4.17E+00	2.82	4.54E+00	11.78	4.07E+00	0.30	4.15E+00	2.24
0.95	2	6.89E+00	7.67E+00	11.30	6.92E+00	0.32	7.03E+00	2.04	7.63E+00	10.74	6.92E+00	0.31	7.00E+00	1.50
			MOY	11.78		1.24		2.31		20.46		1.23		8.06

n-alkylcyclopentanes

Cyclopentane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.56	1	2.62E-01	2.72E-01	3.98	2.68E-01	2.35	2.72E-01	3.98	2.68E-01	2.35
0.61	1	7.12E-01	7.34E-01	3.01	7.18E-01	0.81	7.34E-01	3.01	7.18E-01	0.81
0.66	1	1.63E+00	1.67E+00	2.26	1.63E+00	0.13	1.67E+00	2.26	1.63E+00	0.13
0.71	1	3.28E+00	3.33E+00	1.56	3.26E+00	0.74	3.33E+00	1.56	3.26E+00	0.74
0.76	1	5.98E+00	6.03E+00	0.79	5.91E+00	1.11	6.03E+00	0.79	5.91E+00	1.11

0.81	1	1.01E+01	1.01E+01	0.02	9.94E+00	1.26	1.01E+01	0.02	9.94E+00	1.26
0.86	1	1.59E+01	1.58E+01	0.63	1.57E+01	1.19	1.58E+01	0.63	1.57E+01	1.19
0.91	1	2.39E+01	2.37E+01	0.97	2.37E+01	0.91	2.37E+01	0.97	2.37E+01	0.91
0.96	1	3.45E+01	3.42E+01	0.75	3.43E+01	0.43	3.42E+01	0.75	3.43E+01	0.43
		MOY		1.55		0.99		1.55		0.99

Methylcyclopentane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.54	1	1.14E-01	1.11E-01	2.78	1.18E-01	3.99	1.11E-01	2.78	1.18E-01	3.99
0.59	1	3.53E-01	3.45E-01	2.27	3.59E-01	1.71	3.45E-01	2.27	3.59E-01	1.71
0.64	1	8.91E-01	8.76E-01	1.72	8.95E-01	0.42	8.76E-01	1.72	8.95E-01	0.42
0.69	1	1.93E+00	1.91E+00	1.19	1.93E+00	0.20	1.91E+00	1.19	1.93E+00	0.20
0.74	1	3.71E+00	3.69E+00	0.74	3.70E+00	0.34	3.69E+00	0.74	3.70E+00	0.34
0.79	1	6.52E+00	6.49E+00	0.41	6.51E+00	0.16	6.49E+00	0.41	6.51E+00	0.16
0.84	1	1.07E+01	1.06E+01	0.21	1.07E+01	0.19	1.06E+01	0.21	1.07E+01	0.19
0.89	1	1.65E+01	1.65E+01	0.10	1.66E+01	0.54	1.65E+01	0.10	1.66E+01	0.54
0.94	1	2.45E+01	2.45E+01	0.00	2.46E+01	0.70	2.45E+01	0.00	2.46E+01	0.70
0.99	1	3.52E+01	3.52E+01	0.07	3.53E+01	0.27	3.52E+01	0.07	3.53E+01	0.27
		MOY		0.95		0.85		0.95		0.85

Ethylcyclopentane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.53	1	6.39E-02	5.82E-02	8.92	6.60E-02	3.29	5.82E-02	8.92	6.60E-02	3.29
0.58	1	2.18E-01	2.03E-01	6.72	2.21E-01	1.30	2.03E-01	6.72	2.21E-01	1.30
0.63	1	5.93E-01	5.64E-01	5.03	5.94E-01	0.08	5.64E-01	5.03	5.94E-01	0.08
0.68	1	1.36E+00	1.31E+00	3.57	1.35E+00	0.42	1.31E+00	3.57	1.35E+00	0.42
0.73	1	2.73E+00	2.67E+00	2.29	2.72E+00	0.34	2.67E+00	2.29	2.72E+00	0.34
0.78	1	4.96E+00	4.90E+00	1.14	4.97E+00	0.17	4.90E+00	1.14	4.97E+00	0.17
0.83	1	8.33E+00	8.31E+00	0.22	8.40E+00	0.86	8.31E+00	0.22	8.40E+00	0.86
0.88	1	1.32E+01	1.32E+01	0.40	1.34E+01	1.48	1.32E+01	0.40	1.34E+01	1.48
0.93	1	1.99E+01	2.01E+01	0.67	2.03E+01	1.66	2.01E+01	0.67	2.03E+01	1.66
0.98	1	2.93E+01	2.94E+01	0.45	2.95E+01	0.89	2.94E+01	0.45	2.95E+01	0.89
		MOY		2.94		1.05		2.94		1.05

n-Propylcyclopentane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.54	1	6.58E-02	5.19E-02	21.06	5.40E-02	17.88	5.19E-02	21.06	5.40E-02	17.88
0.59	1	2.23E-01	1.83E-01	17.81	1.85E-01	16.86	1.83E-01	17.81	1.85E-01	16.86
0.64	1	6.05E-01	5.13E-01	15.31	5.10E-01	15.71	5.13E-01	15.31	5.10E-01	15.71
0.69	1	1.38E+00	1.20E+00	12.91	1.19E+00	13.99	1.20E+00	12.91	1.19E+00	13.99
0.74	1	2.75E+00	2.46E+00	10.35	2.43E+00	11.62	2.46E+00	10.35	2.43E+00	11.62

0.79	1	4.93E+00	4.55E+00	7.67	4.50E+00	8.71	4.55E+00	7.67	4.50E+00	8.71
0.84	1	8.15E+00	7.74E+00	5.01	7.70E+00	5.55	7.74E+00	5.01	7.70E+00	5.55
0.89	1	1.27E+01	1.24E+01	2.61	1.24E+01	2.56	1.24E+01	2.61	1.24E+01	2.56
0.94	1	1.90E+01	1.89E+01	0.72	1.90E+01	0.31	1.89E+01	0.72	1.90E+01	0.31
0.99	1	2.78E+01	2.78E+01	0.14	2.79E+01	0.31	2.78E+01	0.14	2.79E+01	0.31
		MOY		9.36		9.35		9.36		9.35

Isoparaffines

iso-butane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.4	1	1.32E-03	1.33E-03	0.70	0.001513	14.82	1.33E-03	0.70	1.51E-03	14.82
0.45	1	1.04E-02	1.05E-02	1.17	0.011292	9.04	1.05E-02	1.17	1.13E-02	9.04
0.5	1	5.10E-02	5.15E-02	1.01	0.053655	5.19	5.15E-02	1.01	5.37E-02	5.19
0.55	1	1.81E-01	1.82E-01	0.81	0.18562	2.77	1.82E-01	0.81	1.86E-01	2.77
0.6	1	5.03E-01	5.07E-01	0.73	0.509597	1.28	5.07E-01	0.73	5.10E-01	1.28
0.65	1	1.17E+00	1.18E+00	0.74	1.177535	0.44	1.18E+00	0.74	1.18E+00	0.44
0.7	1	2.39E+00	2.40E+00	0.80	2.387453	0.07	2.40E+00	0.80	2.39E+00	0.07
0.75	1	4.37E+00	4.41E+00	0.84	4.376429	0.05	4.41E+00	0.84	4.38E+00	0.05
0.8	1	7.39E+00	7.45E+00	0.80	7.414119	0.26	7.45E+00	0.80	7.41E+00	0.26
0.85	1	1.17E+01	1.18E+01	0.68	11.79915	0.57	1.18E+01	0.68	1.18E+01	0.57
0.9	1	1.77E+01	1.78E+01	0.49	17.85945	0.82	1.78E+01	0.49	1.79E+01	0.82
0.95	1	2.58E+01	2.58E+01	0.31	25.95754	0.79	2.58E+01	0.31	2.60E+01	0.79
		MOY		0.76		3.01		0.76		3.01

iso-pentane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.48	1	1.91E-02	1.81E-02	5.40	0.020228	5.91	1.81E-02	5.40	2.02E-02	5.91
0.53	1	8.21E-02	7.88E-02	4.01	0.084475	2.92	7.88E-02	4.01	8.45E-02	2.92
0.58	1	2.64E-01	2.56E-01	2.77	0.266927	1.28	2.56E-01	2.77	2.67E-01	1.28
0.63	1	6.84E-01	6.72E-01	1.73	0.686476	0.42	6.72E-01	1.73	6.86E-01	0.42
0.68	1	1.51E+00	1.50E+00	0.89	1.511868	0.03	1.50E+00	0.89	1.51E+00	0.03
0.73	1	2.96E+00	2.95E+00	0.30	2.957437	0.02	2.95E+00	0.30	2.96E+00	0.02
0.78	1	5.27E+00	5.27E+00	0.05	5.276588	0.13	5.27E+00	0.05	5.28E+00	0.13
0.83	1	8.72E+00	8.74E+00	0.18	8.756886	0.40	8.74E+00	0.18	8.76E+00	0.40
0.88	1	1.36E+01	1.37E+01	0.16	13.71863	0.66	1.37E+01	0.16	1.37E+01	0.66
0.93	1	2.04E+01	2.04E+01	0.11	20.51827	0.76	2.04E+01	0.11	2.05E+01	0.76
0.98	1	2.94E+01	2.95E+01	0.09	29.55761	0.44	2.95E+01	0.09	2.96E+01	0.44
		MOY		1.57		1.30		1.57		1.30

iso-hexane

TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.48	1	1.16E-02	1.11E-02	4.61	0.012363	6.61	1.11E-02	4.61	1.24E-02	6.61
0.53	1	5.44E-02	5.27E-02	3.07	0.056232	3.39	5.27E-02	3.07	5.62E-02	3.39

0.58	1	1.87E-01	1.83E-01	1.99	0.189742	1.44	1.83E-01	1.99	1.90E-01	1.44
0.63	1	5.12E-01	5.06E-01	1.19	0.513546	0.28	5.06E-01	1.19	5.14E-01	0.28
0.68	1	1.18E+00	1.17E+00	0.63	1.177475	0.33	1.17E+00	0.63	1.18E+00	0.33
0.73	1	2.39E+00	2.38E+00	0.26	2.37859	0.52	2.38E+00	0.26	2.38E+00	0.52
0.78	1	4.37E+00	4.37E+00	0.08	4.355448	0.43	4.37E+00	0.08	4.36E+00	0.43
0.83	1	7.39E+00	7.39E+00	0.03	7.384644	0.13	7.39E+00	0.03	7.38E+00	0.13
0.88	1	1.18E+01	1.17E+01	0.06	11.77847	0.23	1.17E+01	0.06	1.18E+01	0.23
0.93	1	1.78E+01	1.78E+01	0.07	17.88864	0.49	1.78E+01	0.07	1.79E+01	0.49
0.98	1	2.60E+01	2.60E+01	0.02	26.11587	0.35	2.60E+01	0.02	2.61E+01	0.35
		MOY		1.20		1.42		1.20		1.42
iso-heptane										
TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.43	1	8.59E-04	8.39E-04	2.24	0.000999	16.30	8.39E-04	2.24	9.99E-04	16.30
0.48	1	7.11E-03	7.00E-03	1.64	0.007713	8.45	7.00E-03	1.64	7.71E-03	8.45
0.53	1	3.67E-02	3.63E-02	1.10	0.038241	4.08	3.63E-02	1.10	3.82E-02	4.08
0.58	1	1.36E-01	1.35E-01	0.53	0.13785	1.67	1.35E-01	0.53	1.38E-01	1.67
0.63	1	3.91E-01	3.91E-01	0.00	0.392789	0.40	3.91E-01	0.00	3.93E-01	0.40
0.68	1	9.39E-01	9.43E-01	0.42	0.937983	0.16	9.43E-01	0.42	9.38E-01	0.16
0.73	1	1.96E+00	1.98E+00	0.68	1.955915	0.32	1.98E+00	0.68	1.96E+00	0.32
0.78	1	3.68E+00	3.71E+00	0.77	3.675761	0.14	3.71E+00	0.77	3.68E+00	0.14
0.83	1	6.35E+00	6.40E+00	0.69	6.366154	0.20	6.40E+00	0.69	6.37E+00	0.20
0.88	1	1.03E+01	1.03E+01	0.52	10.3356	0.56	1.03E+01	0.52	1.03E+01	0.56
0.93	1	1.58E+01	1.59E+01	0.32	15.93579	0.75	1.59E+01	0.32	1.59E+01	0.75
0.98	1	2.35E+01	2.35E+01	0.16	23.57239	0.46	2.35E+01	0.16	2.36E+01	0.46
		MOY		0.82		3.04		0.82		3.04
iso-octane										
TR	EQ	P(bar)	SRKCG3	%	SRK	%	PRCG3	%	PR	%
0.45	1	1.24E-03	1.26E-03	1.62	0.001436	15.83	1.26E-03	1.62	1.44E-03	15.83
0.5	1	9.33E-03	9.41E-03	0.84	0.010047	7.65	9.41E-03	0.84	1.00E-02	7.65
0.55	1	4.51E-02	4.55E-02	0.68	0.046797	3.66	4.55E-02	0.68	4.68E-02	3.66
0.6	1	1.59E-01	1.60E-01	0.83	0.161104	1.30	1.60E-01	0.83	1.61E-01	1.30
0.65	1	4.44E-01	4.49E-01	1.05	0.444725	0.18	4.49E-01	1.05	4.45E-01	0.18
0.7	1	1.04E+00	1.05E+00	1.18	1.037534	0.30	1.05E+00	1.18	1.04E+00	0.30
0.75	1	2.14E+00	2.16E+00	1.15	2.129105	0.32	2.16E+00	1.15	2.13E+00	0.32
0.8	1	3.96E+00	4.00E+00	1.00	3.952743	0.11	4.00E+00	1.00	3.95E+00	0.11
0.85	1	6.77E+00	6.82E+00	0.73	6.785472	0.23	6.82E+00	0.73	6.79E+00	0.23
0.9	1	1.09E+01	1.09E+01	0.43	10.94722	0.54	1.09E+01	0.43	1.09E+01	0.54
0.95	1	1.67E+01	1.67E+01	0.20	16.80775	0.61	1.67E+01	0.20	1.68E+01	0.61
		MOY		0.97		3.07		0.97		3.07

Annexe C

Paramètres m des hydrocarbures en fonction de la température réduite

Nous donnons dans cette annexe les valeurs de paramètres m des équations d'état de type Redlich-Kwong et Peng-Robinson calculés à partir des données de référence de tension de vapeur générés par l'équation de Twu et coll. (1994).

La présentation des résultats est la suivante:

Première colonne: valeurs de la température réduite;

Par la suite, nous donnons pour chaque nombre d'atome de carbone, la valeur de m en fonction de la température réduite.

TR	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.62	0.9273	1.0075	1.0755	1.1354	1.2055	1.2608	1.3018	1.3561	1.4097	1.4628	1.5153	1.5802	1.6315	1.6823	1.7326
0.63	0.9274	1.0076	1.0755	1.1355	1.2056	1.2610	1.3021	1.3564	1.4102	1.4633	1.5160	1.5810	1.6325	1.6834	1.7339
0.64	0.9275	1.0077	1.0756	1.1356	1.2058	1.2612	1.3024	1.3569	1.4107	1.4640	1.5168	1.5820	1.6336	1.6848	1.7354
0.65	0.9277	1.0079	1.0758	1.1358	1.2061	1.2616	1.3029	1.3574	1.4114	1.4648	1.5177	1.5831	1.6349	1.6862	1.7370
0.66	0.9279	1.0081	1.0761	1.1361	1.2064	1.2621	1.3034	1.3580	1.4121	1.4657	1.5187	1.5844	1.6363	1.6878	1.7388
0.67	0.9283	1.0084	1.0764	1.1365	1.2069	1.2626	1.3040	1.3587	1.4130	1.4667	1.5199	1.5857	1.6379	1.6895	1.7408
0.68	0.9286	1.0088	1.0768	1.1369	1.2074	1.2632	1.3047	1.3595	1.4139	1.4678	1.5211	1.5872	1.6395	1.6914	1.7429
0.69	0.9291	1.0092	1.0773	1.1375	1.2080	1.2639	1.3055	1.3605	1.4150	1.4690	1.5225	1.5888	1.6413	1.6934	1.7451
0.7	0.9296	1.0097	1.0778	1.1381	1.2087	1.2647	1.3064	1.3615	1.4161	1.4703	1.5240	1.5906	1.6433	1.6956	1.7475
0.71	0.9302	1.0103	1.0785	1.1388	1.2095	1.2656	1.3074	1.3626	1.4174	1.4717	1.5257	1.5924	1.6454	1.6979	1.7500
0.72	0.9309	1.0110	1.0792	1.1396	1.2105	1.2666	1.3085	1.3638	1.4188	1.4733	1.5274	1.5944	1.6476	1.7004	1.7527
0.73	0.9317	1.0119	1.0801	1.1405	1.2115	1.2678	1.3097	1.3652	1.4203	1.4750	1.5293	1.5966	1.6500	1.7030	1.7556
0.74	0.9326	1.0128	1.0810	1.1415	1.2126	1.2690	1.3110	1.3667	1.4220	1.4769	1.5313	1.5989	1.6525	1.7057	1.7586
0.75	0.9336	1.0138	1.0821	1.1427	1.2139	1.2704	1.3125	1.3684	1.4238	1.4789	1.5335	1.6014	1.6552	1.7087	1.7618
0.76	0.9347	1.0149	1.0833	1.1440	1.2153	1.2719	1.3142	1.3702	1.4258	1.4810	1.5359	1.6040	1.6581	1.7118	1.7652
0.77	0.9360	1.0162	1.0847	1.1454	1.2169	1.2736	1.3160	1.3721	1.4279	1.4833	1.5384	1.6068	1.6612	1.7152	1.7688
0.78	0.9374	1.0177	1.0862	1.1470	1.2186	1.2755	1.3179	1.3742	1.4302	1.4858	1.5412	1.6098	1.6644	1.7187	1.7726
0.79	0.9389	1.0193	1.0878	1.1488	1.2205	1.2775	1.3201	1.3766	1.4327	1.4886	1.5441	1.6131	1.6679	1.7224	1.7767
0.8	0.9406	1.0210	1.0897	1.1507	1.2226	1.2798	1.3225	1.3791	1.4354	1.4915	1.5472	1.6165	1.6716	1.7264	1.7810
0.81	0.9425	1.0230	1.0917	1.1529	1.2249	1.2822	1.3250	1.3818	1.4384	1.4946	1.5506	1.6202	1.6756	1.7307	1.7855
0.82	0.9445	1.0251	1.0940	1.1552	1.2275	1.2849	1.3278	1.3848	1.4416	1.4980	1.5543	1.6242	1.6798	1.7352	1.7903
0.83	0.9468	1.0275	1.0965	1.1578	1.2302	1.2878	1.3309	1.3881	1.4450	1.5017	1.5582	1.6284	1.6843	1.7400	1.7955
0.84	0.9492	1.0301	1.0992	1.1607	1.2333	1.2910	1.3342	1.3916	1.4488	1.5057	1.5624	1.6330	1.6892	1.7452	1.8009
0.85	0.9520	1.0329	1.1022	1.1638	1.2366	1.2945	1.3379	1.3955	1.4528	1.5100	1.5670	1.6379	1.6944	1.7506	1.8067
0.86	0.9550	1.0360	1.1054	1.1672	1.2402	1.2983	1.3418	1.3996	1.4572	1.5146	1.5719	1.6431	1.6999	1.7565	1.8129
0.87	0.9582	1.0394	1.1090	1.1710	1.2442	1.3025	1.3461	1.4041	1.4620	1.5197	1.5772	1.6488	1.7059	1.7628	1.8195
0.88	0.9618	1.0432	1.1129	1.1751	1.2485	1.3070	1.3508	1.4091	1.4672	1.5251	1.5829	1.6549	1.7123	1.7695	1.8266
0.89	0.9657	1.0473	1.1172	1.1796	1.2532	1.3120	1.3559	1.4144	1.4728	1.5310	1.5890	1.6614	1.7191	1.7767	1.8342

TR	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.62	0.7810	0.8149	0.8441	0.8947	0.9586	1.0220	1.0848	1.1467	1.2077	1.2675	1.3262	1.3838	1.4402	1.4954	1.5495
0.63	0.7813	0.8151	0.8443	0.8948	0.9586	1.0221	1.0848	1.1468	1.2078	1.2677	1.3265	1.3842	1.4407	1.4960	1.5503
0.64	0.7816	0.8153	0.8445	0.8950	0.9588	1.0222	1.0849	1.1469	1.2080	1.2680	1.3269	1.3847	1.4413	1.4968	1.5512
0.65	0.7820	0.8156	0.8447	0.8952	0.9589	1.0223	1.0851	1.1472	1.2083	1.2684	1.3273	1.3853	1.4420	1.4977	1.5522
0.66	0.7824	0.8160	0.8451	0.8955	0.9592	1.0226	1.0854	1.1474	1.2087	1.2688	1.3279	1.3859	1.4428	1.4986	1.5534
0.67	0.7829	0.8164	0.8454	0.8958	0.9595	1.0229	1.0857	1.1478	1.2091	1.2694	1.3286	1.3867	1.4438	1.4997	1.5546
0.68	0.7834	0.8169	0.8459	0.8962	0.9599	1.0232	1.0861	1.1483	1.2097	1.2700	1.3293	1.3876	1.4448	1.5009	1.5560
0.69	0.7840	0.8174	0.8464	0.8967	0.9603	1.0237	1.0866	1.1488	1.2103	1.2707	1.3301	1.3886	1.4459	1.5022	1.5575
0.7	0.7846	0.8180	0.8470	0.8972	0.9608	1.0242	1.0871	1.1494	1.2110	1.2715	1.3311	1.3897	1.4472	1.5037	1.5591
0.71	0.7853	0.8187	0.8476	0.8978	0.9614	1.0248	1.0878	1.1502	1.2118	1.2724	1.3321	1.3909	1.4486	1.5052	1.5609
0.72	0.7861	0.8195	0.8484	0.8985	0.9621	1.0255	1.0885	1.1510	1.2127	1.2735	1.3333	1.3922	1.4501	1.5069	1.5627
0.73	0.7870	0.8203	0.8492	0.8993	0.9629	1.0264	1.0894	1.1519	1.2137	1.2746	1.3346	1.3937	1.4517	1.5087	1.5648
0.74	0.7880	0.8213	0.8501	0.9002	0.9638	1.0273	1.0904	1.1530	1.2149	1.2759	1.3360	1.3952	1.4535	1.5107	1.5669
0.75	0.7891	0.8223	0.8511	0.9012	0.9648	1.0283	1.0915	1.1541	1.2162	1.2773	1.3376	1.3970	1.4554	1.5128	1.5693
0.76	0.7902	0.8235	0.8523	0.9024	0.9659	1.0295	1.0927	1.1554	1.2176	1.2789	1.3393	1.3988	1.4574	1.5151	1.5718
0.77	0.7915	0.8247	0.8535	0.9036	0.9672	1.0308	1.0941	1.1569	1.2192	1.2806	1.3411	1.4009	1.4597	1.5175	1.5745
0.78	0.7929	0.8261	0.8549	0.9050	0.9686	1.0322	1.0956	1.1585	1.2209	1.2824	1.3432	1.4031	1.4621	1.5202	1.5773
0.79	0.7944	0.8276	0.8564	0.9065	0.9701	1.0338	1.0973	1.1603	1.2228	1.2845	1.3454	1.4055	1.4647	1.5230	1.5804
0.8	0.7961	0.8293	0.8581	0.9082	0.9719	1.0356	1.0991	1.1623	1.2249	1.2868	1.3478	1.4081	1.4676	1.5261	1.5837
0.81	0.7980	0.8311	0.8599	0.9100	0.9738	1.0376	1.1012	1.1644	1.2272	1.2892	1.3505	1.4110	1.4706	1.5294	1.5873
0.82	0.8000	0.8331	0.8619	0.9121	0.9758	1.0397	1.1034	1.1668	1.2298	1.2919	1.3534	1.4141	1.4739	1.5329	1.5911
0.83	0.8021	0.8353	0.8641	0.9143	0.9781	1.0421	1.1059	1.1695	1.2325	1.2949	1.3565	1.4174	1.4775	1.5368	1.5952
0.84	0.8045	0.8377	0.8665	0.9167	0.9807	1.0447	1.1087	1.1723	1.2356	1.2981	1.3599	1.4211	1.4814	1.5409	1.5996
0.85	0.8071	0.8403	0.8691	0.9194	0.9834	1.0476	1.1117	1.1755	1.2389	1.3016	1.3637	1.4250	1.4856	1.5453	1.6043
0.86	0.8099	0.8432	0.8720	0.9224	0.9864	1.0507	1.1150	1.1789	1.2425	1.3054	1.3677	1.4293	1.4901	1.5501	1.6094
0.87	0.8130	0.8463	0.8752	0.9256	0.9898	1.0542	1.1186	1.1827	1.2465	1.3096	1.3721	1.4340	1.4950	1.5553	1.6149
0.88	0.8163	0.8497	0.8786	0.9291	0.9934	1.0580	1.1225	1.1868	1.2508	1.3142	1.3769	1.4390	1.5004	1.5609	1.6208
0.89	0.8200	0.8534	0.8824	0.9330	0.9974	1.0621	1.1269	1.1914	1.2556	1.3192	1.3821	1.4445	1.5061	1.5670	1.6271

C-5

TR	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.62	0.8022	0.8692	0.9352	0.9985	1.0676	1.1223	1.1836	1.2438	1.3029	1.3611	1.4178	1.4736	1.5281	1.5816	1.6339
0.63	0.8024	0.8694	0.9353	0.9986	1.0677	1.1223	1.1837	1.2440	1.3032	1.3614	1.4183	1.4742	1.5288	1.5824	1.6349
0.64	0.8027	0.8696	0.9354	0.9987	1.0678	1.1225	1.1839	1.2443	1.3035	1.3619	1.4189	1.4749	1.5296	1.5834	1.6361
0.65	0.8030	0.8698	0.9356	0.9989	1.0680	1.1227	1.1841	1.2446	1.3040	1.3624	1.4195	1.4757	1.5306	1.5846	1.6374
0.66	0.8034	0.8701	0.9359	0.9991	1.0682	1.1230	1.1845	1.2450	1.3045	1.3630	1.4203	1.4766	1.5317	1.5858	1.6388
0.67	0.8038	0.8705	0.9362	0.9994	1.0685	1.1233	1.1849	1.2455	1.3051	1.3638	1.4212	1.4776	1.5329	1.5872	1.6403
0.68	0.8043	0.8709	0.9366	0.9998	1.0689	1.1237	1.1854	1.2461	1.3058	1.3646	1.4222	1.4788	1.5342	1.5887	1.6420
0.69	0.8049	0.8714	0.9370	1.0002	1.0694	1.1242	1.1860	1.2468	1.3066	1.3655	1.4232	1.4800	1.5356	1.5903	1.6438
0.7	0.8055	0.8719	0.9375	1.0007	1.0699	1.1248	1.1866	1.2475	1.3075	1.3666	1.4244	1.4814	1.5371	1.5920	1.6458
0.71	0.8062	0.8726	0.9381	1.0013	1.0706	1.1255	1.1874	1.2484	1.3085	1.3677	1.4257	1.4828	1.5388	1.5939	1.6479
0.72	0.8069	0.8733	0.9388	1.0020	1.0713	1.1263	1.1883	1.2494	1.3096	1.3690	1.4271	1.4844	1.5406	1.5959	1.6501
0.73	0.8078	0.8741	0.9396	1.0028	1.0721	1.1272	1.1893	1.2505	1.3108	1.3703	1.4287	1.4862	1.5425	1.5981	1.6525
0.74	0.8087	0.8750	0.9405	1.0037	1.0731	1.1282	1.1904	1.2517	1.3122	1.3718	1.4304	1.4881	1.5446	1.6004	1.6550
0.75	0.8098	0.8760	0.9415	1.0048	1.0742	1.1294	1.1916	1.2531	1.3137	1.3735	1.4322	1.4901	1.5469	1.6028	1.6578
0.76	0.8110	0.8771	0.9426	1.0059	1.0754	1.1307	1.1930	1.2546	1.3153	1.3753	1.4342	1.4923	1.5493	1.6055	1.6606
0.77	0.8122	0.8784	0.9439	1.0072	1.0767	1.1321	1.1945	1.2562	1.3171	1.3773	1.4364	1.4947	1.5519	1.6083	1.6637
0.78	0.8136	0.8797	0.9453	1.0086	1.0782	1.1336	1.1962	1.2580	1.3191	1.3794	1.4387	1.4972	1.5547	1.6113	1.6670
0.79	0.8151	0.8813	0.9468	1.0102	1.0799	1.1354	1.1981	1.2600	1.3212	1.3818	1.4413	1.5000	1.5576	1.6146	1.6705
0.8	0.8168	0.8829	0.9485	1.0120	1.0817	1.1373	1.2001	1.2622	1.3236	1.3843	1.4440	1.5029	1.5608	1.6180	1.6742
0.81	0.8186	0.8848	0.9504	1.0139	1.0837	1.1394	1.2024	1.2646	1.3262	1.3871	1.4470	1.5061	1.5643	1.6217	1.6782
0.82	0.8206	0.8868	0.9525	1.0160	1.0860	1.1418	1.2048	1.2673	1.3290	1.3901	1.4502	1.5096	1.5680	1.6257	1.6826
0.83	0.8228	0.8890	0.9547	1.0184	1.0884	1.1443	1.2075	1.2702	1.3320	1.3934	1.4537	1.5133	1.5720	1.6300	1.6870
0.84	0.8252	0.8914	0.9572	1.0209	1.0911	1.1472	1.2105	1.2733	1.3354	1.3969	1.4575	1.5173	1.5763	1.6345	1.6918
0.85	0.8278	0.8941	0.9599	1.0238	1.0941	1.1502	1.2138	1.2767	1.3390	1.4008	1.4616	1.5217	1.5809	1.6394	1.6970
0.86	0.8306	0.8970	0.9629	1.0269	1.0973	1.1536	1.2173	1.2805	1.3430	1.4050	1.4660	1.5264	1.5859	1.6447	1.7026
0.87	0.8337	0.9002	0.9662	1.0303	1.1009	1.1573	1.2212	1.2846	1.3473	1.4095	1.4708	1.5315	1.5912	1.6503	1.7086
0.88	0.8371	0.9036	0.9698	1.0340	1.1048	1.1614	1.2255	1.2890	1.3520	1.4145	1.4760	1.5370	1.5970	1.6564	1.7150
0.89	0.8408	0.9075	0.9738	1.0381	1.1091	1.1659	1.2301	1.2939	1.3571	1.4198	1.4817	1.5429	1.6033	1.6630	1.7250

C-7

TR	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.62	0.7580	0.8248	0.9011	0.9761	1.0471	1.1114	1.1621	1.2141	1.2738	1.3324	1.3898	1.4461	1.5013	1.5552	1.6081	1.6599	1.7105
0.63	0.7583	0.8250	0.9012	0.9762	1.0471	1.1114	1.1622	1.2142	1.2740	1.3327	1.3902	1.4466	1.5020	1.5560	1.6090	1.6610	1.7118
0.64	0.7587	0.8253	0.9014	0.9763	1.0473	1.1116	1.1624	1.2144	1.2743	1.3331	1.3907	1.4473	1.5027	1.5570	1.6101	1.6622	1.7132
0.65	0.7591	0.8256	0.9016	0.9765	1.0474	1.1118	1.1627	1.2147	1.2747	1.3336	1.3913	1.4480	1.5035	1.5580	1.6113	1.6636	1.7147
0.66	0.7595	0.8259	0.9018	0.9767	1.0477	1.1120	1.1630	1.2151	1.2752	1.3342	1.3920	1.4489	1.5046	1.5591	1.6126	1.6651	1.7164
0.67	0.7600	0.8263	0.9022	0.9770	1.0480	1.1124	1.1634	1.2156	1.2757	1.3348	1.3928	1.4498	1.5057	1.5604	1.6141	1.6667	1.7183
0.68	0.7606	0.8268	0.9026	0.9774	1.0484	1.1128	1.1638	1.2161	1.2764	1.3355	1.3937	1.4509	1.5069	1.5618	1.6157	1.6685	1.7203
0.69	0.7612	0.8273	0.9030	0.9778	1.0488	1.1133	1.1644	1.2167	1.2771	1.3365	1.3947	1.4520	1.5082	1.5633	1.6174	1.6704	1.7224
0.7	0.7619	0.8279	0.9036	0.9783	1.0493	1.1139	1.1650	1.2174	1.2779	1.3374	1.3958	1.4533	1.5097	1.5650	1.6192	1.6725	1.7247
0.71	0.7626	0.8286	0.9042	0.9789	1.0500	1.1146	1.1658	1.2183	1.2789	1.3385	1.3970	1.4547	1.5113	1.5667	1.6212	1.6747	1.7271
0.72	0.7635	0.8293	0.9049	0.9796	1.0507	1.1153	1.1666	1.2192	1.2799	1.3397	1.3984	1.4562	1.5130	1.5686	1.6233	1.6771	1.7297
0.73	0.7644	0.8302	0.9057	0.9804	1.0515	1.1162	1.1676	1.2202	1.2811	1.3410	1.3998	1.4578	1.5148	1.5707	1.6256	1.6796	1.7325
0.74	0.7654	0.8311	0.9066	0.9813	1.0525	1.1172	1.1686	1.2214	1.2824	1.3424	1.4014	1.4596	1.5168	1.5729	1.6280	1.6822	1.7354
0.75	0.7665	0.8321	0.9076	0.9823	1.0535	1.1183	1.1698	1.2227	1.2838	1.3440	1.4032	1.4616	1.5189	1.5752	1.6306	1.6851	1.7385
0.76	0.7676	0.8333	0.9087	0.9835	1.0547	1.1196	1.1712	1.2241	1.2853	1.3457	1.4051	1.4636	1.5212	1.5778	1.6334	1.6881	1.7418
0.77	0.7690	0.8345	0.9099	0.9847	1.0560	1.1210	1.1726	1.2257	1.2871	1.3476	1.4072	1.4659	1.5237	1.5805	1.6363	1.6913	1.7453
0.78	0.7704	0.8359	0.9113	0.9861	1.0575	1.1226	1.1743	1.2275	1.2890	1.3497	1.4094	1.4684	1.5264	1.5834	1.6395	1.6947	1.7489
0.79	0.7719	0.8372	0.9128	0.9877	1.0591	1.1243	1.1761	1.2294	1.2910	1.3519	1.4118	1.4710	1.5293	1.5865	1.6429	1.6983	1.7529
0.8	0.7736	0.8391	0.9145	0.9894	1.0609	1.1262	1.1781	1.2315	1.2933	1.3543	1.4145	1.4739	1.5323	1.5898	1.6464	1.7022	1.7570
0.81	0.7754	0.8409	0.9164	0.9913	1.0629	1.1283	1.1803	1.2338	1.2958	1.3570	1.4174	1.4769	1.5357	1.5934	1.6503	1.7063	1.7614
0.82	0.7774	0.8429	0.9184	0.9935	1.0651	1.1306	1.1827	1.2364	1.2985	1.3599	1.4205	1.4803	1.5393	1.5972	1.6544	1.7107	1.7661
0.83	0.7796	0.8451	0.9206	0.9958	1.0676	1.1331	1.1854	1.2392	1.3015	1.3631	1.4238	1.4839	1.5431	1.6014	1.6588	1.7154	1.7711
0.84	0.7820	0.8475	0.9231	0.9983	1.0702	1.1359	1.1883	1.2422	1.3047	1.3665	1.4275	1.4878	1.5473	1.6058	1.6635	1.7204	1.7764
0.85	0.7846	0.8501	0.9258	1.0011	1.0731	1.1390	1.1915	1.2456	1.3083	1.3703	1.4315	1.4920	1.5517	1.6105	1.6685	1.7258	1.7821
0.86	0.7874	0.8530	0.9287	1.0042	1.0763	1.1424	1.1950	1.2492	1.3121	1.3744	1.4358	1.4966	1.5566	1.6156	1.6739	1.7315	1.7881
0.87	0.7904	0.8561	0.9320	1.0075	1.0799	1.1460	1.1988	1.2532	1.3163	1.3788	1.4405	1.5015	1.5618	1.6212	1.6798	1.7376	1.7946
0.88	0.7937	0.8595	0.9355	1.0112	1.0837	1.1501	1.2030	1.2576	1.3209	1.3836	1.4455	1.5069	1.5674	1.6271	1.6860	1.7442	1.8015
0.89	0.7974	0.8632	0.9394	1.0153	1.0879	1.1545	1.2076	1.2623	1.3259	1.3889	1.4511	1.5127	1.5735	1.6335	1.6928	1.7513	1.8089
0.9	0.8014	0.8674	0.9436	1.0197	1.0926	1.1593	1.2126	1.2676	1.3314	1.3946	1.4571	1.5190	1.5802	1.6404	1.7000	1.7589	1.8169

<i>Tr</i>	<i>N=5</i>	<i>N=6</i>	<i>N=7</i>	<i>N=8</i>	<i>N=9</i>	<i>N=10</i>	<i>N=11</i>	<i>N=12</i>	<i>N=13</i>	<i>N=14</i>	<i>N=15</i>	<i>N=16</i>	<i>N=17</i>	<i>N=18</i>	<i>N=19</i>	<i>N=20</i>
0.62	0.7778	0.8309	0.8907	0.9849	1.0413	1.1180	1.1859	1.2401	1.3073	1.3695	1.4283	1.4549	1.5140	1.5608	1.6046	1.6607
0.63	0.7781	0.8310	0.8908	0.9849	1.0414	1.1181	1.1861	1.2403	1.3076	1.3699	1.4288	1.4554	1.5147	1.5616	1.6055	1.6618
0.64	0.7784	0.8313	0.8910	0.9850	1.0415	1.1182	1.1862	1.2405	1.3079	1.3704	1.4294	1.4561	1.5155	1.5625	1.6066	1.6631
0.65	0.7788	0.8316	0.8912	0.9852	1.0417	1.1184	1.1865	1.2409	1.3083	1.3709	1.4301	1.4568	1.5164	1.5636	1.6078	1.6645
0.66	0.7792	0.8319	0.8915	0.9854	1.0419	1.1187	1.1869	1.2413	1.3089	1.3716	1.4309	1.4577	1.5174	1.5648	1.6091	1.6660
0.67	0.7797	0.8323	0.8918	0.9857	1.0422	1.1190	1.1873	1.2418	1.3095	1.3723	1.4318	1.4586	1.5186	1.5661	1.6105	1.6676
0.68	0.7802	0.8328	0.8922	0.9861	1.0426	1.1195	1.1878	1.2423	1.3102	1.3732	1.4328	1.4597	1.5198	1.5675	1.6121	1.6694
0.69	0.7808	0.8333	0.8927	0.9866	1.0430	1.1200	1.1884	1.2430	1.3110	1.3741	1.4339	1.4609	1.5212	1.5690	1.6138	1.6714
0.7	0.7815	0.8339	0.8932	0.9871	1.0436	1.1206	1.1890	1.2438	1.3119	1.3752	1.4351	1.4622	1.5227	1.5707	1.6157	1.6734
0.71	0.7822	0.8345	0.8939	0.9877	1.0442	1.1213	1.1898	1.2446	1.3129	1.3763	1.4365	1.4636	1.5243	1.5725	1.6176	1.6756
0.72	0.7830	0.8353	0.8946	0.9884	1.0449	1.1220	1.1907	1.2456	1.3140	1.3776	1.4379	1.4652	1.5261	1.5744	1.6197	1.6780
0.73	0.7839	0.8361	0.8954	0.9892	1.0457	1.1229	1.1917	1.2467	1.3153	1.3790	1.4395	1.4668	1.5279	1.5765	1.6220	1.6805
0.74	0.7848	0.8370	0.8963	0.9901	1.0467	1.1239	1.1928	1.2479	1.3166	1.3806	1.4412	1.4687	1.5300	1.5787	1.6244	1.6832
0.75	0.7859	0.8381	0.8973	0.9911	1.0477	1.1251	1.1940	1.2493	1.3181	1.3823	1.4431	1.4706	1.5322	1.5811	1.6270	1.6860
0.76	0.7871	0.8392	0.8984	0.9922	1.0489	1.1263	1.1954	1.2508	1.3198	1.3841	1.4451	1.4727	1.5345	1.5836	1.6297	1.6890
0.77	0.7884	0.8405	0.8996	0.9935	1.0502	1.1278	1.1969	1.2524	1.3216	1.3861	1.4473	1.4750	1.5371	1.5864	1.6327	1.6922
0.78	0.7898	0.8418	0.9010	0.9949	1.0517	1.1293	1.1986	1.2542	1.3236	1.3883	1.4497	1.4775	1.5398	1.5893	1.6358	1.6957
0.79	0.7913	0.8434	0.9025	0.9965	1.0533	1.1311	1.2005	1.2562	1.3258	1.3906	1.4523	1.4802	1.5427	1.5924	1.6392	1.6993
0.8	0.7930	0.8450	0.9042	0.9982	1.0551	1.1330	1.2025	1.2584	1.3281	1.3932	1.4551	1.4831	1.5458	1.5958	1.6427	1.7032
0.81	0.7948	0.8469	0.9060	1.0001	1.0571	1.1351	1.2048	1.2608	1.3307	1.3960	1.4581	1.4862	1.5492	1.5994	1.6465	1.7073
0.82	0.7968	0.8489	0.9081	1.0023	1.0593	1.1374	1.2073	1.2634	1.3336	1.3990	1.4614	1.4896	1.5529	1.6032	1.6506	1.7117
0.83	0.7990	0.8511	0.9103	1.0046	1.0617	1.1400	1.2100	1.2663	1.3366	1.4023	1.4649	1.4932	1.5568	1.6074	1.6550	1.7164
0.84	0.8014	0.8535	0.9127	1.0071	1.0644	1.1428	1.2130	1.2694	1.3400	1.4059	1.4687	1.4972	1.5610	1.6118	1.6597	1.7214
0.85	0.8040	0.8561	0.9154	1.0099	1.0673	1.1459	1.2162	1.2728	1.3436	1.4098	1.4729	1.5014	1.5655	1.6166	1.6647	1.7267
0.86	0.8068	0.8589	0.9184	1.0130	1.0705	1.1492	1.2198	1.2766	1.3476	1.4140	1.4773	1.5060	1.5704	1.6218	1.6701	1.7325
0.87	0.8098	0.8621	0.9216	1.0164	1.0740	1.1529	1.2237	1.2806	1.3519	1.4186	1.4822	1.5110	1.5757	1.6273	1.6759	1.7386
0.88	0.8132	0.8655	0.9251	1.0201	1.0778	1.1570	1.2280	1.2851	1.3567	1.4236	1.4875	1.5164	1.5814	1.6333	1.6821	1.7452
0.89	0.8169	0.8692	0.9289	1.0242	1.0820	1.1614	1.2326	1.2900	1.3618	1.4290	1.4932	1.5223	1.5876	1.6397	1.6889	1.7523
0.9	0.8209	0.8733	0.9332	1.0286	1.0866	1.1663	1.2377	1.2953	1.3674	1.4350	1.4994	1.5286	1.5943	1.6467	1.6961	1.7599

TR	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.67	0.8148	0.8816	0.9503	1.0097	1.0716	1.1254	1.1859	1.2392	1.2722	1.3276	1.3670	1.4327	1.4845	1.5348	1.6027
0.68	0.8140	0.8809	0.9495	1.0090	1.0709	1.1248	1.1854	1.2387	1.2718	1.3273	1.3668	1.4327	1.4847	1.5352	1.6034
0.69	0.8134	0.8801	0.9488	1.0083	1.0702	1.1242	1.1849	1.2383	1.2714	1.3271	1.3667	1.4328	1.4850	1.5356	1.6041
0.7	0.8127	0.8795	0.9481	1.0076	1.0696	1.1236	1.1844	1.2380	1.2712	1.3269	1.3667	1.4330	1.4854	1.5362	1.6049
0.71	0.8122	0.8788	0.9475	1.0070	1.0691	1.1232	1.1840	1.2377	1.2710	1.3269	1.3668	1.4333	1.4858	1.5368	1.6058
0.72	0.8116	0.8783	0.9469	1.0065	1.0686	1.1227	1.1837	1.2375	1.2708	1.3269	1.3669	1.4336	1.4863	1.5375	1.6068
0.73	0.8112	0.8778	0.9464	1.0060	1.0682	1.1224	1.1835	1.2374	1.2708	1.3270	1.3671	1.4340	1.4870	1.5384	1.6080
0.74	0.8108	0.8774	0.9460	1.0056	1.0679	1.1221	1.1833	1.2373	1.2708	1.3272	1.3674	1.4346	1.4877	1.5393	1.6092
0.75	0.8105	0.8770	0.9457	1.0053	1.0676	1.1220	1.1833	1.2374	1.2710	1.3275	1.3678	1.4352	1.4885	1.5403	1.6105
0.76	0.8102	0.8768	0.9454	1.0051	1.0675	1.1219	1.1833	1.2375	1.2712	1.3279	1.3683	1.4359	1.4895	1.5415	1.6120
0.77	0.8101	0.8766	0.9452	1.0050	1.0674	1.1219	1.1834	1.2378	1.2715	1.3283	1.3689	1.4368	1.4905	1.5428	1.6136
0.78	0.8101	0.8766	0.9452	1.0050	1.0675	1.1221	1.1837	1.2381	1.2720	1.3290	1.3697	1.4378	1.4917	1.5441	1.6153
0.79	0.8101	0.8766	0.9453	1.0051	1.0676	1.1223	1.1840	1.2386	1.2726	1.3297	1.3705	1.4389	1.4930	1.5457	1.6172
0.8	0.8103	0.8768	0.9455	1.0053	1.0679	1.1227	1.1845	1.2393	1.2733	1.3306	1.3716	1.4401	1.4944	1.5474	1.6192
0.81	0.8106	0.8771	0.9458	1.0057	1.0684	1.1232	1.1852	1.2400	1.2741	1.3316	1.3727	1.4415	1.4961	1.5492	1.6213
0.82	0.8111	0.8775	0.9463	1.0062	1.0690	1.1239	1.1860	1.2410	1.2752	1.3328	1.3741	1.4431	1.4979	1.5512	1.6237
0.83	0.8117	0.8782	0.9469	1.0069	1.0698	1.1248	1.1870	1.2421	1.2764	1.3342	1.3756	1.4449	1.4998	1.5534	1.6262
0.84	0.8125	0.8790	0.9478	1.0078	1.0708	1.1259	1.1882	1.2435	1.2778	1.3358	1.3773	1.4468	1.5020	1.5558	1.6290
0.85	0.8134	0.8799	0.9488	1.0089	1.0720	1.1272	1.1896	1.2450	1.2795	1.3376	1.3792	1.4490	1.5044	1.5585	1.6320
0.86	0.8146	0.8811	0.9501	1.0102	1.0734	1.1287	1.1913	1.2468	1.2814	1.3397	1.3814	1.4515	1.5071	1.5614	1.6352
0.87	0.8160	0.8826	0.9515	1.0118	1.0750	1.1305	1.1932	1.2488	1.2835	1.3420	1.3839	1.4542	1.5100	1.5645	1.6387
0.88	0.8176	0.8842	0.9533	1.0136	1.0770	1.1325	1.1954	1.2512	1.2859	1.3446	1.3867	1.4572	1.5133	1.5680	1.6425
0.89	0.8195	0.8862	0.9554	1.0158	1.0792	1.1349	1.1979	1.2539	1.2887	1.3476	1.3898	1.4606	1.5169	1.5718	1.6467

TR	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.67	0.6887	0.7520	0.8145	0.8746	0.9403	0.9925	1.0511	1.1088	1.1655	1.2215	1.2762	1.3300	1.3826	1.4344	1.4852
0.68	0.6882	0.7514	0.8138	0.8738	0.9395	0.9917	1.0503	1.1081	1.1649	1.2209	1.2758	1.3297	1.3825	1.4345	1.4853
0.69	0.6877	0.7508	0.8131	0.8731	0.9388	0.9910	1.0496	1.1075	1.1644	1.2205	1.2754	1.3295	1.3825	1.4346	1.4856
0.7	0.6872	0.7502	0.8125	0.8724	0.9381	0.9903	1.0490	1.1069	1.1639	1.2201	1.2752	1.3294	1.3825	1.4348	1.4860
0.71	0.6868	0.7497	0.8119	0.8718	0.9375	0.9897	1.0485	1.1064	1.1635	1.2198	1.2750	1.3293	1.3826	1.4350	1.4864
0.72	0.6864	0.7492	0.8114	0.8713	0.9369	0.9892	1.0480	1.1060	1.1631	1.2196	1.2749	1.3294	1.3828	1.4354	1.4870
0.73	0.6861	0.7488	0.8109	0.8708	0.9364	0.9887	1.0475	1.1056	1.1629	1.2194	1.2748	1.3295	1.3830	1.4358	1.4876
0.74	0.6859	0.7485	0.8105	0.8704	0.9360	0.9883	1.0472	1.1053	1.1627	1.2193	1.2749	1.3297	1.3834	1.4364	1.4883
0.75	0.6857	0.7483	0.8102	0.8700	0.9357	0.9880	1.0469	1.1051	1.1626	1.2193	1.2750	1.3299	1.3838	1.4370	1.4892
0.76	0.6856	0.7481	0.8100	0.8698	0.9354	0.9877	1.0467	1.1050	1.1626	1.2194	1.2753	1.3303	1.3844	1.4377	1.4901
0.77	0.6856	0.7480	0.8098	0.8696	0.9353	0.9876	1.0466	1.1050	1.1626	1.2196	1.2756	1.3308	1.3851	1.4386	1.4911
0.78	0.6857	0.7480	0.8098	0.8695	0.9352	0.9876	1.0467	1.1051	1.1629	1.2200	1.2761	1.3314	1.3859	1.4396	1.4923
0.79	0.6858	0.7481	0.8098	0.8696	0.9353	0.9877	1.0468	1.1054	1.1632	1.2204	1.2767	1.3322	1.3868	1.4407	1.4936
0.8	0.6861	0.7483	0.8100	0.8698	0.9355	0.9879	1.0471	1.1057	1.1637	1.2210	1.2774	1.3331	1.3878	1.4419	1.4951
0.81	0.6865	0.7487	0.8103	0.8701	0.9358	0.9883	1.0475	1.1063	1.1643	1.2217	1.2783	1.3341	1.3891	1.4433	1.4967
0.82	0.6871	0.7491	0.8108	0.8705	0.9363	0.9888	1.0481	1.1069	1.1651	1.2227	1.2793	1.3353	1.3905	1.4449	1.4985
0.83	0.6877	0.7498	0.8114	0.8711	0.9369	0.9895	1.0489	1.1078	1.1660	1.2237	1.2806	1.3367	1.3920	1.4467	1.5005
0.84	0.6885	0.7505	0.8122	0.8719	0.9378	0.9903	1.0498	1.1088	1.1672	1.2250	1.2820	1.3383	1.3938	1.4487	1.5027
0.85	0.6895	0.7515	0.8131	0.8729	0.9388	0.9914	1.0510	1.1101	1.1685	1.2265	1.2836	1.3402	1.3958	1.4509	1.5051
0.86	0.6907	0.7527	0.8143	0.8741	0.9400	0.9927	1.0524	1.1115	1.1701	1.2283	1.2855	1.3422	1.3981	1.4533	1.5078
0.87	0.6921	0.7540	0.8157	0.8755	0.9415	0.9943	1.0540	1.1133	1.1720	1.2303	1.2877	1.3446	1.4006	1.4561	1.5107
0.88	0.6937	0.7557	0.8173	0.8772	0.9432	0.9961	1.0559	1.1153	1.1741	1.2326	1.2902	1.3472	1.4034	1.4591	1.5140
0.89	0.6956	0.7575	0.8193	0.8792	0.9453	0.9982	1.0581	1.1176	1.1766	1.2352	1.2929	1.3502	1.4066	1.4625	1.5175

TR	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.67	0.6688	0.7007	0.7283	0.7761	0.8366	0.8969	0.9567	1.0158	1.0742	1.1315	1.1879	1.2433	1.2977	1.3510	1.4034
0.68	0.6683	0.7001	0.7276	0.7754	0.8359	0.8961	0.9559	1.0150	1.0734	1.1309	1.1873	1.2429	1.2974	1.3508	1.4033
0.69	0.6679	0.6996	0.7271	0.7748	0.8352	0.8954	0.9552	1.0143	1.0728	1.1303	1.1868	1.2425	1.2971	1.3507	1.4033
0.7	0.6674	0.6991	0.7265	0.7742	0.8345	0.8947	0.9545	1.0137	1.0722	1.1297	1.1864	1.2421	1.2969	1.3506	1.4034
0.71	0.6671	0.6987	0.7261	0.7737	0.8339	0.8941	0.9539	1.0131	1.0716	1.1293	1.1860	1.2419	1.2967	1.3506	1.4036
0.72	0.6667	0.6983	0.7256	0.7732	0.8334	0.8935	0.9533	1.0125	1.0711	1.1289	1.1857	1.2417	1.2967	1.3507	1.4038
0.73	0.6665	0.6980	0.7253	0.7727	0.8329	0.8931	0.9528	1.0121	1.0707	1.1285	1.1855	1.2415	1.2967	1.3509	1.4042
0.74	0.6663	0.6977	0.7250	0.7724	0.8325	0.8926	0.9524	1.0117	1.0704	1.1283	1.1853	1.2415	1.2968	1.3511	1.4046
0.75	0.6661	0.6975	0.7248	0.7721	0.8322	0.8923	0.9521	1.0114	1.0702	1.1281	1.1852	1.2416	1.2970	1.3515	1.4051
0.76	0.6661	0.6974	0.7246	0.7719	0.8320	0.8920	0.9518	1.0112	1.0700	1.1280	1.1853	1.2417	1.2973	1.3519	1.4057
0.77	0.6661	0.6974	0.7245	0.7718	0.8318	0.8919	0.9517	1.0111	1.0700	1.1281	1.1854	1.2420	1.2977	1.3525	1.4065
0.78	0.6662	0.6974	0.7246	0.7718	0.8318	0.8918	0.9516	1.0111	1.0700	1.1282	1.1857	1.2424	1.2982	1.3532	1.4074
0.79	0.6664	0.6976	0.7247	0.7719	0.8318	0.8919	0.9517	1.0112	1.0702	1.1285	1.1860	1.2429	1.2989	1.3540	1.4083
0.8	0.6667	0.6979	0.7249	0.7721	0.8320	0.8920	0.9519	1.0114	1.0705	1.1289	1.1866	1.2435	1.2996	1.3550	1.4095
0.81	0.6671	0.6983	0.7253	0.7724	0.8323	0.8924	0.9522	1.0118	1.0710	1.1294	1.1872	1.2443	1.3006	1.3561	1.4108
0.82	0.6676	0.6988	0.7258	0.7729	0.8328	0.8928	0.9527	1.0124	1.0716	1.1302	1.1880	1.2453	1.3017	1.3574	1.4122
0.83	0.6683	0.6994	0.7264	0.7735	0.8334	0.8934	0.9534	1.0131	1.0724	1.1310	1.1890	1.2464	1.3030	1.3588	1.4139
0.84	0.6692	0.7002	0.7272	0.7743	0.8342	0.8942	0.9542	1.0140	1.0734	1.1321	1.1903	1.2478	1.3045	1.3605	1.4158
0.85	0.6702	0.7012	0.7282	0.7752	0.8351	0.8952	0.9553	1.0151	1.0746	1.1334	1.1917	1.2493	1.3062	1.3624	1.4178
0.86	0.6713	0.7024	0.7294	0.7764	0.8363	0.8964	0.9565	1.0164	1.0760	1.1349	1.1933	1.2511	1.3082	1.3645	1.4202
0.87	0.6727	0.7038	0.7307	0.7778	0.8377	0.8979	0.9580	1.0180	1.0776	1.1367	1.1952	1.2532	1.3104	1.3669	1.4228
0.88	0.6743	0.7054	0.7323	0.7794	0.8393	0.8996	0.9598	1.0198	1.0796	1.1388	1.1974	1.2555	1.3129	1.3696	1.4257
0.89	0.6762	0.7072	0.7342	0.7813	0.8413	0.9015	0.9618	1.0220	1.0819	1.1412	1.2000	1.2582	1.3158	1.3727	1.4289

P-17

TR	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.67	0.6471	0.7101	0.7821	0.8533	0.9208	0.9820	1.0306	1.0803	1.1376	1.1939	1.2491	1.3035	1.3567	1.4089	1.4601	1.5103	1.5595
0.68	0.6467	0.7095	0.7815	0.8525	0.9200	0.9812	1.0298	1.0796	1.1369	1.1933	1.2487	1.3031	1.3565	1.4089	1.4602	1.5106	1.5600
0.69	0.6463	0.7090	0.7808	0.8518	0.9193	0.9805	1.0291	1.0789	1.1363	1.1928	1.2483	1.3029	1.3564	1.4089	1.4604	1.5110	1.5605
0.7	0.6459	0.7085	0.7802	0.8512	0.9186	0.9799	1.0285	1.0783	1.1358	1.1924	1.2480	1.3027	1.3564	1.4090	1.4607	1.5114	1.5612
0.71	0.6456	0.7080	0.7797	0.8506	0.9180	0.9793	1.0279	1.0778	1.1354	1.1920	1.2477	1.3025	1.3564	1.4092	1.4610	1.5120	1.5619
0.72	0.6453	0.7076	0.7792	0.8500	0.9174	0.9787	1.0274	1.0773	1.1350	1.1917	1.2475	1.3025	1.3565	1.4094	1.4615	1.5126	1.5628
0.73	0.6451	0.7073	0.7787	0.8495	0.9169	0.9782	1.0269	1.0769	1.1346	1.1915	1.2475	1.3025	1.3567	1.4098	1.4620	1.5133	1.5637
0.74	0.6449	0.7070	0.7784	0.8491	0.9165	0.9778	1.0266	1.0766	1.1344	1.1914	1.2474	1.3026	1.3570	1.4102	1.4626	1.5142	1.5647
0.75	0.6448	0.7068	0.7781	0.8488	0.9161	0.9775	1.0263	1.0763	1.1342	1.1913	1.2475	1.3029	1.3573	1.4108	1.4634	1.5151	1.5659
0.76	0.6448	0.7067	0.7779	0.8485	0.9159	0.9773	1.0261	1.0762	1.1342	1.1914	1.2477	1.3032	1.3578	1.4114	1.4642	1.5161	1.5671
0.77	0.6448	0.7066	0.7778	0.8484	0.9157	0.9771	1.0260	1.0762	1.1342	1.1915	1.2479	1.3036	1.3584	1.4122	1.4652	1.5173	1.5685
0.78	0.6449	0.7067	0.7778	0.8483	0.9157	0.9771	1.0260	1.0762	1.1344	1.1918	1.2483	1.3041	1.3591	1.4131	1.4662	1.5186	1.5700
0.79	0.6452	0.7068	0.7778	0.8484	0.9157	0.9772	1.0261	1.0764	1.1346	1.1922	1.2488	1.3048	1.3599	1.4141	1.4675	1.5200	1.5717
0.8	0.6455	0.7071	0.7780	0.8486	0.9159	0.9774	1.0264	1.0767	1.1351	1.1927	1.2495	1.3058	1.3609	1.4152	1.4688	1.5216	1.5735
0.81	0.6460	0.7075	0.7784	0.8489	0.9162	0.9778	1.0268	1.0772	1.1356	1.1934	1.2503	1.3066	1.3620	1.4166	1.4703	1.5233	1.5754
0.82	0.6465	0.7080	0.7788	0.8493	0.9167	0.9783	1.0273	1.0778	1.1364	1.1942	1.2513	1.3077	1.3633	1.4181	1.4720	1.5252	1.5775
0.83	0.6472	0.7086	0.7794	0.8499	0.9173	0.9790	1.0281	1.0786	1.1373	1.1952	1.2524	1.3090	1.3648	1.4197	1.4739	1.5273	1.5799
0.84	0.6481	0.7094	0.7802	0.8507	0.9181	0.9798	1.0290	1.0796	1.1384	1.1965	1.2538	1.3105	1.3665	1.4216	1.4760	1.5296	1.5824
0.85	0.6491	0.7104	0.7812	0.8517	0.9191	0.9809	1.0301	1.0808	1.1397	1.1979	1.2554	1.3123	1.3684	1.4237	1.4783	1.5321	1.5852
0.86	0.6503	0.7116	0.7823	0.8529	0.9204	0.9822	1.0315	1.0823	1.1412	1.1995	1.2572	1.3142	1.3706	1.4261	1.4808	1.5349	1.5882
0.87	0.6517	0.7129	0.7837	0.8543	0.9218	0.9837	1.0331	1.0839	1.1430	1.2017	1.2593	1.3165	1.3730	1.4287	1.4837	1.5380	1.5915
0.88	0.6533	0.7146	0.7853	0.8559	0.9236	0.9855	1.0349	1.0859	1.1451	1.2037	1.2616	1.3190	1.3757	1.4316	1.4868	1.5413	1.5951
0.89	0.6552	0.7164	0.7872	0.8579	0.9256	0.9876	1.0371	1.0882	1.1475	1.2062	1.2643	1.3219	1.3788	1.4349	1.4903	1.5450	1.5990

5-19

TR	N=5	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10	N=11	N=12	N=13	N=14	N=15	N=16	N=17	N=18	N=19	N=20
0.67	0.6658	0.7158	0.7723	0.8616	0.9153	0.9884	1.0533	1.1052	1.1697	1.2296	1.2863	1.3119	1.3690	1.4143	1.4567	1.5112
0.68	0.6653	0.7152	0.7716	0.8608	0.9145	0.9876	1.0526	1.1045	1.1691	1.2291	1.2859	1.3116	1.3688	1.4143	1.4568	1.5115
0.69	0.6649	0.7146	0.7710	0.8601	0.9138	0.9869	1.0519	1.1039	1.1686	1.2287	1.2856	1.3113	1.3688	1.4143	1.4570	1.5119
0.7	0.6644	0.7141	0.7704	0.8595	0.9131	0.9862	1.0513	1.1033	1.1681	1.2283	1.2854	1.3112	1.3687	1.4144	1.4573	1.5123
0.71	0.6641	0.7137	0.7699	0.8589	0.9125	0.9856	1.0507	1.1028	1.1677	1.2280	1.2852	1.3111	1.3688	1.4146	1.4576	1.5129
0.72	0.6638	0.7133	0.7694	0.8583	0.9119	0.9851	1.0502	1.1024	1.1674	1.2278	1.2851	1.3110	1.3689	1.4149	1.4581	1.5135
0.73	0.6635	0.7129	0.7690	0.8578	0.9114	0.9846	1.0498	1.1020	1.1671	1.2277	1.2851	1.3111	1.3692	1.4153	1.4586	1.5142
0.74	0.6633	0.7126	0.7686	0.8574	0.9110	0.9842	1.0495	1.1017	1.1669	1.2276	1.2852	1.3112	1.3695	1.4158	1.4592	1.5151
0.75	0.6632	0.7124	0.7683	0.8571	0.9107	0.9839	1.0492	1.1015	1.1668	1.2276	1.2854	1.3115	1.3699	1.4163	1.4599	1.5160
0.76	0.6631	0.7123	0.7681	0.8568	0.9104	0.9837	1.0490	1.1014	1.1668	1.2277	1.2856	1.3118	1.3704	1.4170	1.4607	1.5170
0.77	0.6631	0.7122	0.7680	0.8567	0.9102	0.9835	1.0489	1.1014	1.1669	1.2280	1.2860	1.3122	1.3710	1.4178	1.4617	1.5182
0.78	0.6632	0.7123	0.7680	0.8566	0.9102	0.9835	1.0490	1.1015	1.1671	1.2283	1.2865	1.3128	1.3718	1.4187	1.4627	1.5195
0.79	0.6634	0.7124	0.7681	0.8567	0.9102	0.9836	1.0491	1.1017	1.1675	1.2288	1.2871	1.3135	1.3726	1.4197	1.4639	1.5209
0.8	0.6637	0.7127	0.7683	0.8568	0.9104	0.9838	1.0494	1.1021	1.1679	1.2294	1.2879	1.3143	1.3737	1.4209	1.4653	1.5225
0.81	0.6642	0.7130	0.7687	0.8571	0.9107	0.9842	1.0498	1.1026	1.1686	1.2302	1.2888	1.3153	1.3748	1.4222	1.4668	1.5242
0.82	0.6647	0.7135	0.7691	0.8576	0.9112	0.9847	1.0504	1.1033	1.1694	1.2311	1.2899	1.3165	1.3762	1.4237	1.4685	1.5261
0.83	0.6654	0.7142	0.7697	0.8582	0.9118	0.9854	1.0512	1.1041	1.1702	1.2322	1.2911	1.3178	1.3777	1.4254	1.4703	1.5282
0.84	0.6662	0.7150	0.7705	0.8590	0.9126	0.9862	1.0521	1.1052	1.1715	1.2335	1.2926	1.3194	1.3794	1.4273	1.4724	1.5305
0.85	0.6672	0.7160	0.7715	0.8600	0.9136	0.9873	1.0533	1.1064	1.1729	1.2350	1.2943	1.3211	1.3814	1.4294	1.4747	1.5331
0.86	0.6684	0.7171	0.7726	0.8611	0.9149	0.9886	1.0547	1.1079	1.1745	1.2368	1.2962	1.3231	1.3836	1.4318	1.4772	1.5359
0.87	0.6698	0.7185	0.7740	0.8626	0.9163	0.9901	1.0563	1.1096	1.1764	1.2388	1.2984	1.3254	1.3861	1.4345	1.4801	1.5389
0.88	0.6714	0.7201	0.7756	0.8642	0.9180	0.9920	1.0582	1.1116	1.1785	1.2412	1.3009	1.3280	1.3888	1.4374	1.4832	1.5423
0.89	0.6733	0.7220	0.7775	0.8662	0.9201	0.9941	1.0605	1.1139	1.1810	1.2438	1.3037	1.3309	1.3919	1.4407	1.4866	1.5460

Annexe D

Valeurs de alpha en fonction du facteur acentrique et de la température réduite des équations d'état généralisées RKG, PRG et VDWG

0.643	1.7027344	1.6803722	1.6584207	1.6368635	1.6156849	1.5948707	1.5744076	1.5542835	1.5344869	1.5150076	1.4958355	1.4769619	1.4583783	1.4400767
0.6863	1.7368088	1.7133304	1.6902882	1.6676642	1.6454415	1.6236047	1.6021393	1.581032	1.5602703	1.5398428	1.5197391	1.4999492	1.480464	1.461275
0.7174	1.7612348	1.7369566	1.713133	1.6897449	1.6667747	1.6442058	1.622023	1.600212	1.5787598	1.5576541	1.5368838	1.5164384	1.4963082	1.4764842
0.7697	1.8022241	1.776604	1.7514698	1.7268006	1.7025772	1.6787815	1.6553966	1.632407	1.6097981	1.5875567	1.5656703	1.5441273	1.5229172	1.50203
0.8114	1.8348301	1.8081426	1.7819661	1.7562786	1.7310594	1.7062889	1.6819494	1.6580238	1.6344967	1.6113538	1.5885815	1.5661675	1.5441004	1.5223694
0.8522	1.8666697	1.8389397	1.8117457	1.7850642	1.758873	1.7331517	1.707881	1.6830428	1.6586205	1.6345988	1.6109631	1.5877004	1.5647981	1.5422449
0.9079	1.9100406	1.8808902	1.8523101	1.8242748	1.7967607	1.7697452	1.7432075	1.717128	1.6914884	1.6662718	1.6414626	1.6170461	1.5930088	1.5693383
OM	TR=0.72	TR=0.73	TR=0.74	TR=0.75	TR=0.76	TR=0.77	TR=0.78	TR=0.79	TR=0.80	TR=0.81	TR=0.82	TR=0.83	TR=0.84	TR=0.85
0.0115	1.1238795	1.1191033	1.1143688	1.109675	1.105021	1.1004058	1.0958284	1.0912877	1.0867824	1.0823112	1.0778726	1.073465	1.0690868	1.0647359
0.0995	1.1655207	1.1588909	1.1523386	1.1458619	1.139459	1.1331278	1.1268665	1.1206728	1.1145447	1.1084796	1.1024753	1.0965291	1.0906382	1.0847998
0.1523	1.1905094	1.1827734	1.1751355	1.1675932	1.1601442	1.152786	1.1455162	1.138332	1.1312308	1.1242097	1.1172656	1.1103955	1.1035959	1.0968634
0.2002	1.2131761	1.2044408	1.1958216	1.1873157	1.1789203	1.1706325	1.1624494	1.1543678	1.1463846	1.1384965	1.1307	1.1229914	1.1153671	1.1078229
0.2515	1.2374444	1.2276435	1.2179775	1.2084432	1.1990372	1.1897562	1.1805969	1.1715557	1.1626291	1.1538131	1.1451039	1.1364975	1.1279895	1.1195754
0.3013	1.2609922	1.2501618	1.2394838	1.2289548	1.2185709	1.2083285	1.1982238	1.1882528	1.1784115	1.1686957	1.1591011	1.1496232	1.1402573	1.1309984
0.3495	1.2837701	1.2719479	1.2602947	1.2488066	1.2374794	1.2263092	1.2152916	1.2044225	1.1936974	1.1831117	1.1726608	1.1623398	1.1521436	1.1420668
0.3996	1.3074291	1.2945809	1.2819185	1.2694375	1.2571334	1.2450017	1.2330378	1.2212372	1.2095951	1.1981065	1.1867665	1.1755696	1.1645106	1.1535836
0.4435	1.3281441	1.3144011	1.3008583	1.2875106	1.2743534	1.2613818	1.2485911	1.2359761	1.223532	1.2112534	1.1991351	1.1871714	1.1753566	1.1636848
0.4897	1.3499262	1.3352459	1.3207802	1.3065241	1.2924722	1.2786196	1.2649609	1.251491	1.2382045	1.2250959	1.2121594	1.1993894	1.1867797	1.1743241
0.5303	1.3690513	1.3535509	1.3382777	1.3232262	1.3083908	1.2937662	1.279347	1.2651275	1.2511022	1.2372653	1.2236109	1.210133	1.1968251	1.1836809
0.5764	1.390747	1.3743195	1.358133	1.3421818	1.32646	1.3109617	1.2956812	1.2806127	1.2657503	1.251088	1.2366195	1.2223385	1.2082386	1.1943129
0.6174	1.4100234	1.3927749	1.3757796	1.3590313	1.3425239	1.3262511	1.3102069	1.2943853	1.27878	1.2633848	1.2481934	1.2331992	1.2183954	1.203775
0.643	1.4220498	1.4042904	1.3867917	1.3695473	1.3525506	1.3357955	1.3192755	1.3029846	1.2869163	1.2710643	1.255422	1.2399828	1.2247398	1.2096859
0.6863	1.442374	1.4237534	1.4054061	1.387325	1.3695033	1.3519344	1.3346117	1.3175286	1.3006787	1.2840552	1.2676513	1.2514604	1.2354751	1.2196882
0.7174	1.4569579	1.4377212	1.4187664	1.4000864	1.381674	1.3635223	1.3456244	1.3279738	1.3105636	1.2933869	1.276437	1.2597066	1.2431887	1.2268758
0.7697	1.4814563	1.4611876	1.4412154	1.4215319	1.4021296	1.383001	1.3641389	1.3455364	1.3271861	1.3090812	1.2912144	1.2735784	1.2561657	1.2389688
0.8114	1.5009647	1.4798768	1.4590969	1.4386168	1.4184282	1.3985236	1.3788953	1.3595361	1.3404385	1.3215952	1.3029988	1.284642	1.2665169	1.2486158
0.8522	1.5200302	1.498144	1.4765769	1.45532	1.4343649	1.4137035	1.3933278	1.3732303	1.3534032	1.3338391	1.3145302	1.2954691	1.2766478	1.2580585
0.9079	1.5460228	1.5230516	1.5004144	1.4781017	1.4561044	1.4344137	1.4130213	1.391919	1.371099	1.3505533	1.330274	1.3102533	1.290483	1.2709552

Tableau D.3 - Valeurs de α en fonction du facteur acentrique et de la température réduite pour l'équation d'état VDWG

OM	TR=0.30	TR=0.31	TR=0.32	TR=0.33	TR=0.34	TR=0.35	TR=0.36	TR=0.37	TR=0.38	TR=0.39	TR=0.40	TR=0.41	TR=0.42	TR=0.43
0.0115	1.480729	1.470295	1.46014	1.450246	1.440598	1.431181	1.42198	1.41298	1.404168	1.395533	1.387063	1.378747	1.370574	1.362535
0.0995	1.668012	1.651988	1.636415	1.62127	1.606531	1.592175	1.578184	1.564536	1.551214	1.538198	1.525473	1.513022	1.500829	1.48888
0.1523	1.779718	1.760341	1.741519	1.723226	1.705436	1.688123	1.671263	1.654835	1.638814	1.623181	1.607914	1.592995	1.578404	1.564126
0.2002	1.880698	1.858279	1.83651	1.815361	1.794804	1.774809	1.75535	1.736401	1.717936	1.699931	1.682363	1.665211	1.648452	1.632067
0.2515	1.988516	1.962837	1.937911	1.913704	1.890183	1.867316	1.845075	1.823427	1.802346	1.781804	1.761776	1.742235	1.723158	1.704521
0.3013	2.092892	2.064047	2.036055	2.008878	1.98248	1.956826	1.931883	1.907617	1.883998	1.860994	1.838579	1.816722	1.795398	1.77458
0.3495	2.193672	2.161762	2.130801	2.100749	2.071566	2.043214	2.015655	1.988856	1.96278	1.937396	1.912671	1.888574	1.865077	1.84215
0.3996	2.298199	2.263101	2.229053	2.196011	2.163932	2.132774	2.102498	2.073064	2.044436	2.016577	1.989452	1.963028	1.937273	1.912156
0.4435	2.389618	2.351726	2.314971	2.279309	2.244692	2.211075	2.178417	2.146675	2.115809	2.085781	2.056554	2.028092	2.000359	1.973323
0.4897	2.485669	2.444834	2.40523	2.366809	2.329519	2.293314	2.258148	2.223977	2.190757	2.158446	2.127006	2.096399	2.066586	2.037533
0.5303	2.569954	2.526532	2.484424	2.443577	2.403938	2.365457	2.328087	2.29178	2.25649	2.222174	2.188791	2.156298	2.124657	2.09383
0.5764	2.665528	2.619167	2.574213	2.530611	2.488304	2.447239	2.407365	2.368633	2.330992	2.294398	2.258807	2.224174	2.190457	2.157617
0.6174	2.750422	2.701446	2.65396	2.607906	2.563225	2.519862	2.477761	2.43687	2.397139	2.358519	2.320964	2.284427	2.248864	2.214234
0.643	2.803381	2.752771	2.703704	2.656119	2.609955	2.565156	2.521664	2.479426	2.438389	2.398504	2.359723	2.321997	2.285281	2.249533
0.6863	2.892877	2.839503	2.78776	2.737585	2.688913	2.641684	2.595839	2.551321	2.508076	2.466051	2.425194	2.385458	2.346792	2.309153
0.7174	2.957099	2.901739	2.848074	2.796037	2.745563	2.696588	2.649053	2.602898	2.558066	2.514503	2.472156	2.430975	2.390909	2.351912
0.7697	3.064996	3.006295	2.949396	2.894228	2.840722	2.788811	2.738432	2.689521	2.642021	2.595871	2.551018	2.507407	2.464986	2.423705
0.8114	3.150937	3.089571	3.030093	2.972428	2.916503	2.862251	2.809603	2.758496	2.708866	2.660654	2.613803	2.568253	2.523954	2.480852
0.8522	3.234954	3.17098	3.108977	3.048867	2.990575	2.934031	2.879163	2.825906	2.774193	2.723962	2.675154	2.62771	2.581572	2.536687
0.9079	3.349549	3.282012	3.21656	3.153112	3.091588	3.031913	2.974014	2.91782	2.863263	2.810276	2.758796	2.708763	2.660115	2.612797
OM	TR=0.44	TR=0.45	TR=0.46	TR=0.47	TR=0.48	TR=0.49	TR=0.50	TR=0.51	TR=0.52	TR=0.53	TR=0.54	TR=0.55	TR=0.56	TR=0.57
0.0115	1.354622	1.346826	1.33914	1.331557	1.32407	1.316676	1.309367	1.302139	1.294989	1.287912	1.280905	1.273964	1.267087	1.260272
0.0995	1.477161	1.465661	1.454366	1.443267	1.432352	1.421612	1.411039	1.400624	1.390361	1.380242	1.370262	1.360414	1.350694	1.341097
0.1523	1.550142	1.536438	1.522999	1.50981	1.496861	1.484137	1.47163	1.459328	1.447221	1.435302	1.423563	1.411996	1.400594	1.389351
0.2002	1.616035	1.600341	1.584965	1.569893	1.555108	1.540597	1.526347	1.512345	1.49858	1.485041	1.47172	1.458606	1.445692	1.43297
0.2515	1.686304	1.668484	1.651043	1.63396	1.617219	1.600804	1.584698	1.568887	1.553357	1.538096	1.523092	1.508335	1.493814	1.479521
0.3013	1.754244	1.734366	1.714925	1.695898	1.677266	1.659009	1.64111	1.623551	1.606318	1.589396	1.57277	1.556428	1.540359	1.524552
0.3495	1.819766	1.7979	1.776527	1.755623	1.735165	1.715132	1.695504	1.676262	1.657387	1.638864	1.620677	1.602811	1.585253	1.56799
0.3996	1.887647	1.863717	1.840339	1.817487	1.795135	1.773261	1.751841	1.730855	1.710281	1.690102	1.670299	1.650857	1.631759	1.612992
0.4435	1.946953	1.921216	1.896083	1.871527	1.847519	1.824034	1.801048	1.778537	1.756479	1.734854	1.713642	1.692824	1.672383	1.652305
0.4897	2.009204	1.981566	1.954589	1.92824	1.902491	1.877314	1.852682	1.828571	1.804955	1.781811	1.75912	1.73686	1.715012	1.693559
0.5303	2.063781	2.034474	2.005876	1.977953	1.950676	1.924014	1.897938	1.872422	1.847439	1.822966	1.798978	1.775454	1.752373	1.729717
0.5764	2.125615	2.094413	2.063976	2.034268	2.005256	1.976909	1.949196	1.922088	1.895555	1.869573	1.844117	1.819162	1.794685	1.770667

D-7

0.6174	2.180495	2.147608	2.115536	2.08424	2.053687	2.023842	1.994674	1.966151	1.938243	1.910922	1.884162	1.857936	1.832221	1.806995
0.643	2.21471	2.180771	2.147678	2.115391	2.083876	2.053097	2.023021	1.993615	1.964848	1.936692	1.909119	1.882102	1.855615	1.829636
0.6863	2.272496	2.236778	2.201958	2.167996	2.134854	2.102494	2.070883	2.039985	2.009768	1.980201	1.951254	1.922899	1.89511	1.86786
0.7174	2.313938	2.276942	2.240882	2.205716	2.171406	2.137912	2.105199	2.07323	2.041971	2.011392	1.981459	1.952145	1.923421	1.895259
0.7697	2.383516	2.344371	2.306226	2.269037	2.232762	2.197361	2.162795	2.129026	2.096019	2.063737	2.032149	2.001224	1.970929	1.941239
0.8114	2.438896	2.398038	2.358231	2.319428	2.281588	2.244666	2.208624	2.17342	2.139019	2.105381	2.072475	2.040266	2.008723	1.977815
0.8522	2.493003	2.450469	2.409035	2.368655	2.329282	2.290873	2.253386	2.21678	2.181015	2.146052	2.111857	2.078393	2.045628	2.013531
0.9079	2.566753	2.52193	2.478276	2.435741	2.394277	2.353838	2.31438	2.275858	2.238232	2.201461	2.165507	2.130332	2.095902	2.062183

OM	TR=0.58	TR=0.59	TR=0.60	TR=0.61	TR=0.62	TR=0.63	TR=0.64	TR=0.65	TR=0.66	TR=0.67	TR=0.68	TR=0.69	TR=0.70	TR=0.71
0.0115	1.253515	1.246815	1.240171	1.233579	1.227039	1.220548	1.214106	1.207711	1.201362	1.195057	1.188796	1.182576	1.176398	1.170259
0.0995	1.331618	1.322254	1.313001	1.303855	1.294813	1.285873	1.277032	1.268286	1.259633	1.251072	1.242599	1.234212	1.225909	1.217687
0.1523	1.378262	1.367321	1.356523	1.345865	1.335342	1.32495	1.314685	1.304544	1.294524	1.284621	1.274833	1.265156	1.255588	1.246125
0.2002	1.420433	1.408075	1.395889	1.383871	1.372015	1.360317	1.348771	1.337375	1.326123	1.315012	1.304039	1.293199	1.28249	1.271907
0.2515	1.465447	1.451583	1.437924	1.424461	1.41119	1.398104	1.385198	1.372467	1.359905	1.34751	1.335275	1.323198	1.311273	1.299496
0.3013	1.508996	1.493683	1.478604	1.463751	1.449116	1.434694	1.420477	1.40646	1.392637	1.379003	1.365552	1.35228	1.339182	1.326254
0.3495	1.551011	1.534304	1.517861	1.501672	1.485727	1.470021	1.454545	1.439292	1.424256	1.40943	1.39481	1.38039	1.366163	1.352126
0.3996	1.594542	1.576397	1.558545	1.540976	1.52368	1.506648	1.489871	1.473343	1.457054	1.441	1.425172	1.409564	1.394171	1.378987
0.4435	1.632573	1.613174	1.594095	1.575324	1.556851	1.538664	1.520756	1.503117	1.485738	1.468612	1.451732	1.435091	1.418681	1.402498
0.4897	1.672484	1.651772	1.631408	1.61138	1.591674	1.572281	1.553188	1.534386	1.515866	1.49762	1.479638	1.461915	1.444442	1.427212
0.5303	1.707466	1.685605	1.664117	1.642989	1.622206	1.601756	1.581628	1.56181	1.542293	1.523066	1.504123	1.485453	1.467049	1.448904
0.5764	1.747086	1.723925	1.701167	1.678795	1.656794	1.635151	1.613852	1.592887	1.572243	1.55191	1.531879	1.51214	1.492685	1.473505
0.6174	1.782236	1.757923	1.734038	1.710565	1.687486	1.664786	1.642452	1.62047	1.598829	1.577517	1.556523	1.535838	1.515453	1.495357
0.643	1.804142	1.779112	1.754526	1.730367	1.706616	1.683259	1.66028	1.637667	1.615405	1.593483	1.571891	1.550617	1.529653	1.508988
0.6863	1.841125	1.814884	1.789115	1.763799	1.738917	1.714451	1.690386	1.666707	1.6434	1.620451	1.59785	1.575585	1.553644	1.532019
0.7174	1.867636	1.840528	1.813911	1.787766	1.762073	1.736814	1.711971	1.68753	1.663474	1.639791	1.616468	1.593493	1.570854	1.548542
0.7697	1.912124	1.88356	1.855522	1.827988	1.800936	1.774346	1.7482	1.722481	1.697172	1.672258	1.647726	1.623562	1.599755	1.576291
0.8114	1.947513	1.91779	1.888622	1.859983	1.831851	1.804204	1.777023	1.75029	1.723986	1.698095	1.672603	1.647496	1.622761	1.598384
0.8522	1.982069	1.951216	1.920943	1.891227	1.86204	1.833362	1.805172	1.777449	1.750174	1.723331	1.696904	1.670878	1.645238	1.619971
0.9079	2.029141	1.996746	1.96497	1.933785	1.903163	1.873082	1.843518	1.814448	1.785854	1.757717	1.730018	1.702741	1.675872	1.649395

OM	TR=0.72	TR=0.73	TR=0.74	TR=0.75	TR=0.76	TR=0.77	TR=0.78	TR=0.79	TR=0.80	TR=0.81	TR=0.81	TR=0.82	TR=0.83	TR=0.84
0.0115	1.164158	1.158095	1.152068	1.146075	1.140115	1.134187	1.128288	1.122418	1.116574	1.110755	1.104959	1.099183	1.093425	1.087682
0.0995	1.209544	1.201479	1.193487	1.185568	1.177718	1.169934	1.162215	1.154557	1.146957	1.139413	1.13192	1.124476	1.117078	1.10972
0.1523	1.236765	1.227504	1.21834	1.209269	1.200289	1.191396	1.182586	1.173857	1.165205	1.156626	1.148116	1.139672	1.131288	1.122961
0.2002	1.261447	1.251107	1.240882	1.230771	1.220768	1.210871	1.201074	1.191376	1.18177	1.172253	1.162821	1.153469	1.144191	1.134984
0.2515	1.287864	1.276373	1.265018	1.253796	1.242702	1.231731	1.22088	1.210145	1.199519	1.188999	1.17858	1.168256	1.158021	1.147871
0.3013	1.31349	1.300887	1.288439	1.276142	1.263992	1.251983	1.240111	1.22837	1.216756	1.205263	1.193887	1.18262	1.171457	1.160391

0.3495	1.338272	1.324597	1.311096	1.297763	1.284594	1.271582	1.258724	1.246014	1.233445	1.221012	1.208709	1.196531	1.184469	1.172518
0.3996	1.364006	1.349223	1.334631	1.320226	1.306002	1.291952	1.278072	1.264355	1.250795	1.237387	1.224123	1.210997	1.198002	1.185131
0.4435	1.386534	1.370784	1.355241	1.339899	1.324753	1.309797	1.295023	1.280427	1.266001	1.251739	1.237634	1.223679	1.209867	1.196189
0.4897	1.410218	1.393455	1.376915	1.360592	1.34448	1.328571	1.31286	1.29734	1.282005	1.266846	1.251857	1.23703	1.222358	1.207833
0.5303	1.43101	1.41336	1.395947	1.378765	1.361806	1.345064	1.328532	1.312202	1.296069	1.280123	1.264359	1.248767	1.23334	1.21807
0.5764	1.454593	1.435941	1.417542	1.399387	1.38147	1.363784	1.346322	1.329076	1.312038	1.2952	1.278556	1.262097	1.245814	1.229699
0.6174	1.475543	1.456004	1.43673	1.417715	1.398949	1.380426	1.362139	1.344079	1.326239	1.30861	1.291185	1.273955	1.256911	1.240045
0.643	1.488613	1.468521	1.448703	1.429151	1.409858	1.390813	1.372012	1.353446	1.335105	1.316983	1.299071	1.28136	1.263842	1.246506
0.6863	1.510699	1.489676	1.46894	1.448484	1.428298	1.408376	1.388707	1.369285	1.3501	1.331145	1.31241	1.293887	1.275566	1.257439
0.7174	1.526545	1.504855	1.483463	1.46236	1.441536	1.420983	1.400693	1.380658	1.360868	1.341315	1.321991	1.302885	1.283989	1.265293
0.7697	1.553162	1.530356	1.507863	1.485675	1.463781	1.442173	1.420841	1.399778	1.378973	1.358417	1.338102	1.318018	1.298156	1.278504
0.8114	1.574355	1.550663	1.527297	1.504247	1.481503	1.459056	1.436897	1.415016	1.393404	1.372051	1.350948	1.330085	1.309453	1.28904
0.8522	1.595065	1.57051	1.546292	1.522402	1.49883	1.475565	1.452598	1.429919	1.407519	1.385387	1.363515	1.341892	1.320507	1.299351
0.9079	1.623298	1.597568	1.572193	1.547162	1.522462	1.498085	1.474019	1.450255	1.426782	1.40359	1.380669	1.35801	1.3356	1.31343
OM	TR=0.86	TR=0.87	Tr=0.88	TR=0.89	TR=0.9	TR=0.91	TR=0.92	TR=0.93	TR=0.94	TR=0.95	TR=0.96	TR=0.97	TR=0.98	
0.0115	1.081952	1.076232	1.070518	1.064806	1.059092	1.053371	1.047639	1.041888	1.036111	1.030298	1.024457	1.018486	1.012452	
0.0995	1.1024	1.095112	1.087853	1.080616	1.073397	1.06619	1.058987	1.05178	1.044562	1.03732	1.030042	1.022715	1.015252	
0.1523	1.114685	1.106456	1.098268	1.090116	1.081992	1.07389	1.065804	1.057723	1.049638	1.041537	1.033407	1.025254	1.016938	
0.2002	1.125841	1.116757	1.107726	1.098742	1.089796	1.080883	1.071993	1.063118	1.054246	1.045365	1.036461	1.027514	1.018469	
0.2515	1.137799	1.127799	1.117865	1.107988	1.098162	1.088378	1.078627	1.0689	1.059185	1.049468	1.039734	1.029963	1.02011	
0.3013	1.149417	1.138528	1.127715	1.116972	1.10629	1.09566	1.085073	1.074517	1.063982	1.053453	1.042913	1.032341	1.021705	
0.3495	1.160671	1.14892	1.137257	1.125674	1.114163	1.102713	1.091316	1.079958	1.068628	1.057312	1.045991	1.034644	1.023251	
0.3996	1.172376	1.159729	1.147182	1.134727	1.122353	1.110051	1.097809	1.085617	1.073461	1.061325	1.049192	1.037038	1.024861	
0.4435	1.182639	1.169207	1.155886	1.142665	1.129534	1.116485	1.103503	1.090579	1.077698	1.064844	1.051998	1.039137	1.02623	
0.4897	1.193446	1.179188	1.165051	1.151024	1.137097	1.12326	1.1095	1.095804	1.08216	1.068548	1.054953	1.041347	1.0277	
0.5303	1.202948	1.187964	1.17311	1.158374	1.143747	1.129218	1.114773	1.100399	1.086083	1.071806	1.05755	1.04329	1.028992	
0.5764	1.213742	1.197934	1.182266	1.166726	1.151303	1.135986	1.120763	1.105619	1.090539	1.075506	1.060501	1.045496	1.030459	
0.6174	1.223346	1.206805	1.190413	1.174157	1.158027	1.14201	1.126094	1.110264	1.094505	1.078799	1.063126	1.047459	1.031765	
0.643	1.229345	1.212347	1.195502	1.178799	1.162227	1.145773	1.129424	1.113166	1.096982	1.080856	1.064765	1.048685	1.03258	
0.6863	1.239494	1.221723	1.204113	1.186654	1.169334	1.15214	1.135059	1.118076	1.101174	1.084336	1.06754	1.050759	1.033959	
0.7174	1.246786	1.228459	1.2103	1.192298	1.174441	1.156716	1.139108	1.121604	1.104186	1.086836	1.069533	1.052249	1.03495	
0.7697	1.259053	1.239792	1.22071	1.201795	1.183034	1.164414	1.145921	1.12754	1.109254	1.091043	1.072886	1.054756	1.036616	
0.8114	1.268837	1.248832	1.229014	1.20937	1.189889	1.170555	1.151356	1.132275	1.113296	1.094399	1.075561	1.056756	1.037946	
0.8522	1.278412	1.257679	1.237141	1.216785	1.196598	1.176567	1.156677	1.136911	1.117253	1.097683	1.078179	1.058712	1.039246	
0.9079	1.291487	1.269762	1.248242	1.226882	1.205642	1.184556	1.163611	1.142795	1.122105	1.101559	1.081604	1.061222	1.040867	

Annexe E

Tension de vapeur calculée par les équations d'état cubiques généralisées

La présentation des résultats est la suivante:

- Première colonne: nature de l'hydrocarbure;
- Deuxième colonne: valeur de la température réduite;
- Troisième colonne: valeur de la tension de vapeur de référence, calculée par l'équation de Wagner,

La suite des colonnes représente les résultats de chaque équation d'état, ainsi que les écarts engendrés par rapport aux valeurs de référence.

Hydrocarbures

Methane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.48	1.30E-01	1.28E-01	1.24	1.31E-01	0.95	1.19E-01	8.11	1.28E-01	1.20	1.31E-01	0.89	1.31E-01	0.90	1.28E-01	1.24	1.18E-01	9.35
0.53	3.82E-01	3.78E-01	1.20	3.85E-01	0.76	3.62E-01	5.29	3.78E-01	1.13	3.85E-01	0.71	3.85E-01	0.68	3.78E-01	1.20	3.59E-01	6.07
0.58	9.23E-01	9.13E-01	1.10	9.27E-01	0.43	8.94E-01	3.20	9.14E-01	1.03	9.27E-01	0.42	9.28E-01	0.54	9.13E-01	1.10	8.90E-01	3.64
0.63	1.92E+00	1.91E+00	0.96	1.93E+00	0.12	1.89E+00	1.66	1.91E+00	0.91	1.93E+00	0.14	1.93E+00	0.46	1.91E+00	0.96	1.89E+00	1.85
0.68	3.59E+00	3.56E+00	0.79	3.58E+00	0.08	3.57E+00	0.53	3.56E+00	0.76	3.58E+00	0.05	3.60E+00	0.43	3.56E+00	0.79	3.57E+00	0.55
0.73	6.13E+00	6.09E+00	0.60	6.12E+00	0.14	6.15E+00	0.31	6.09E+00	0.58	6.12E+00	0.13	6.16E+00	0.47	6.09E+00	0.59	6.15E+00	0.40
0.78	9.78E+00	9.74E+00	0.39	9.78E+00	0.06	9.87E+00	0.91	9.75E+00	0.37	9.77E+00	0.08	9.84E+00	0.57	9.74E+00	0.38	9.89E+00	1.06
0.83	1.48E+01	1.48E+01	0.18	1.48E+01	0.11	1.50E+01	1.28	1.48E+01	0.14	1.48E+01	0.07	1.49E+01	0.68	1.48E+01	0.17	1.50E+01	1.46
0.88	2.14E+01	2.14E+01	0.00	2.15E+01	0.32	2.17E+01	1.42	2.14E+01	0.06	2.15E+01	0.26	2.16E+01	0.77	2.14E+01	0.00	2.18E+01	1.59
0.93	3.00E+01	3.00E+01	0.10	3.01E+01	0.46	3.03E+01	1.24	3.00E+01	0.19	3.01E+01	0.39	3.02E+01	0.74	3.00E+01	0.09	3.04E+01	1.36
0.98	4.08E+01	4.09E+01	0.07	4.09E+01	0.30	4.11E+01	0.56	4.09E+01	0.14	4.09E+01	0.28	4.10E+01	0.39	4.09E+01	0.06	4.11E+01	0.60
	DAM(%)		0.60		0.34		2.23		0.59		0.31		0.60		0.60		2.54

Ethane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	2.16E-02	2.08E-02	3.66	2.10E-02	2.55	1.97E-02	8.59	2.08E-02	3.65	2.10E-02	2.60	2.23E-02	3.27	2.08E-02	3.65	1.93E-02	10.60
0.49	9.48E-02	9.23E-02	2.63	9.38E-02	1.08	8.88E-02	6.30	9.23E-02	2.58	9.37E-02	1.17	9.61E-02	1.40	9.23E-02	2.63	8.76E-02	7.61
0.54	3.07E-01	3.01E-01	1.83	3.06E-01	0.44	2.94E-01	4.28	3.02E-01	1.78	3.06E-01	0.47	3.09E-01	0.49	3.01E-01	1.83	2.91E-01	5.10
0.59	7.98E-01	7.88E-01	1.29	7.96E-01	0.26	7.77E-01	2.68	7.88E-01	1.25	7.97E-01	0.21	7.98E-01	0.00	7.88E-01	1.29	7.73E-01	3.12
0.64	1.76E+00	1.75E+00	0.96	1.76E+00	0.26	1.74E+00	1.46	1.75E+00	0.93	1.76E+00	0.17	1.76E+00	0.25	1.75E+00	0.95	1.73E+00	1.64
0.69	3.44E+00	3.42E+00	0.75	3.43E+00	0.30	3.42E+00	0.55	3.42E+00	0.75	3.44E+00	0.21	3.43E+00	0.36	3.42E+00	0.75	3.42E+00	0.55
0.74	6.11E+00	6.08E+00	0.61	6.10E+00	0.28	6.12E+00	0.12	6.07E+00	0.62	6.10E+00	0.22	6.09E+00	0.35	6.08E+00	0.61	6.13E+00	0.24
0.79	1.01E+01	1.00E+01	0.50	1.01E+01	0.18	1.01E+01	0.61	1.00E+01	0.51	1.01E+01	0.17	1.00E+01	0.24	1.00E+01	0.49	1.01E+01	0.79
0.84	1.56E+01	1.56E+01	0.38	1.56E+01	0.00	1.58E+01	0.92	1.56E+01	0.38	1.56E+01	0.04	1.56E+01	0.06	1.56E+01	0.38	1.58E+01	1.12
0.89	2.31E+01	2.31E+01	0.27	2.32E+01	0.21	2.34E+01	1.04	2.31E+01	0.23	2.32E+01	0.13	2.32E+01	0.15	2.31E+01	0.27	2.34E+01	1.22
0.94	3.30E+01	3.30E+01	0.16	3.31E+01	0.34	3.33E+01	0.89	3.30E+01	0.09	3.31E+01	0.26	3.31E+01	0.29	3.30E+01	0.17	3.33E+01	1.01
0.99	4.57E+01	4.57E+01	0.04	4.58E+01	0.15	4.59E+01	0.26	4.57E+01	0.01	4.58E+01	0.14	4.58E+01	0.14	4.57E+01	0.05	4.59E+01	0.28
	DAM(%)		1.09		0.51		2.31		1.06		0.48		0.58		1.09		2.77

Propane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.39	1.41E-03	1.35E-03	3.81	1.33E-03	5.40	1.33E-03	5.41	1.35E-03	3.83	1.34E-03	5.07	1.60E-03	13.90	1.35E-03	3.79	1.29E-03	8.72
0.44	1.12E-02	1.10E-02	1.85	1.11E-02	1.22	1.07E-02	4.49	1.10E-02	1.83	1.11E-02	1.30	1.21E-02	7.93	1.10E-02	1.84	1.05E-02	6.70
0.49	5.58E-02	5.53E-02	0.85	5.60E-02	0.37	5.39E-02	3.41	5.54E-02	0.80	5.59E-02	0.26	5.83E-02	4.43	5.53E-02	0.84	5.31E-02	4.84
0.54	1.98E-01	1.98E-01	0.43	2.00E-01	0.69	1.94E-01	2.43	1.98E-01	0.37	2.00E-01	0.68	2.03E-01	2.26	1.98E-01	0.42	1.92E-01	3.30
0.59	5.54E-01	5.52E-01	0.31	5.57E-01	0.49	5.45E-01	1.60	5.53E-01	0.27	5.57E-01	0.58	5.59E-01	0.90	5.52E-01	0.31	5.43E-01	2.07

	0.97	2.71E+01	2.72E+01	0.28	2.73E+01	0.84	2.74E+01	1.07	2.72E+01	0.34	2.73E+01	0.77	2.73E+01	0.63	2.72E+01	0.27	2.74E+01	1.15
		DAM(%)		1.66		1.88		2.32		1.65		1.94		1.66		1.66		2.96
n-Hexane																		
TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)	
	0.43	1.28E-03	1.21E-03	5.42	1.20E-03	6.61	1.25E-03	2.51	1.21E-03	5.38	1.20E-03	6.72	1.46E-03	13.95	1.21E-03	5.41	1.22E-03	5.25
	0.48	9.87E-03	9.53E-03	3.47	9.54E-03	3.39	9.51E-03	3.66	9.54E-03	3.41	9.52E-03	3.55	1.05E-02	6.47	9.53E-03	3.46	9.34E-03	5.38
	0.53	4.84E-02	4.73E-02	2.15	4.75E-02	1.86	4.67E-02	3.47	4.73E-02	2.09	4.75E-02	1.86	4.96E-02	2.58	4.73E-02	2.14	4.62E-02	4.50
	0.58	1.71E-01	1.69E-01	1.32	1.69E-01	1.17	1.67E-01	2.75	1.69E-01	1.28	1.70E-01	0.99	1.72E-01	0.54	1.69E-01	1.32	1.66E-01	3.30
	0.63	4.80E-01	4.76E-01	0.84	4.76E-01	0.83	4.71E-01	1.87	4.76E-01	0.82	4.77E-01	0.55	4.77E-01	0.47	4.76E-01	0.83	4.70E-01	2.09
	0.68	1.12E+00	1.12E+00	0.55	1.12E+00	0.57	1.11E+00	0.99	1.12E+00	0.56	1.12E+00	0.27	1.11E+00	0.87	1.12E+00	0.54	1.11E+00	0.97
	0.73	2.31E+00	2.30E+00	0.34	2.30E+00	0.25	2.30E+00	0.14	2.30E+00	0.37	2.30E+00	0.01	2.29E+00	0.85	2.30E+00	0.33	2.31E+00	0.02
	0.78	4.26E+00	4.25E+00	0.15	4.27E+00	0.16	4.29E+00	0.61	4.25E+00	0.19	4.27E+00	0.29	4.24E+00	0.57	4.25E+00	0.14	4.30E+00	0.86
	0.83	7.26E+00	7.26E+00	0.04	7.30E+00	0.60	7.35E+00	1.23	7.26E+00	0.00	7.31E+00	0.62	7.25E+00	0.14	7.26E+00	0.05	7.37E+00	1.50
	0.88	1.16E+01	1.16E+01	0.18	1.17E+01	0.97	1.18E+01	1.58	1.16E+01	0.17	1.17E+01	0.89	1.17E+01	0.31	1.16E+01	0.19	1.18E+01	1.83
	0.93	1.77E+01	1.78E+01	0.22	1.79E+01	1.07	1.80E+01	1.52	1.78E+01	0.25	1.79E+01	0.95	1.78E+01	0.59	1.78E+01	0.22	1.80E+01	1.69
	0.98	2.61E+01	2.61E+01	0.09	2.62E+01	0.57	2.63E+01	0.72	2.61E+01	0.14	2.62E+01	0.52	2.62E+01	0.41	2.61E+01	0.09	2.63E+01	0.78
		DAM(%)		1.23		1.50		1.75		1.22		1.44		2.31		1.23		2.35
n-Heptane																		
TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)	
	0.44	1.13E-03	1.10E-03	2.78	1.08E-03	4.06	1.13E-03	0.28	1.10E-03	2.73	1.08E-03	4.24	1.32E-03	17.32	1.10E-03	2.76	1.10E-03	2.40
	0.49	8.82E-03	8.67E-03	1.66	8.66E-03	1.82	8.65E-03	1.92	8.68E-03	1.60	8.64E-03	1.98	9.56E-03	8.45	8.67E-03	1.65	8.50E-03	3.57
	0.54	4.38E-02	4.34E-02	0.80	4.34E-02	0.79	4.28E-02	2.23	4.34E-02	0.74	4.34E-02	0.74	4.55E-02	3.92	4.34E-02	0.79	4.24E-02	3.19
	0.59	1.57E-01	1.57E-01	0.25	1.56E-01	0.35	1.54E-01	1.76	1.57E-01	0.20	1.57E-01	0.10	1.59E-01	1.56	1.57E-01	0.24	1.53E-01	2.25
	0.64	4.44E-01	4.44E-01	0.03	4.43E-01	0.14	4.39E-01	1.03	4.44E-01	0.06	4.45E-01	0.21	4.45E-01	0.36	4.44E-01	0.04	4.38E-01	1.19
	0.69	1.05E+00	1.05E+00	0.14	1.05E+00	0.03	1.05E+00	0.27	1.05E+00	0.14	1.05E+00	0.38	1.05E+00	0.18	1.05E+00	0.15	1.05E+00	0.20
	0.74	2.17E+00	2.17E+00	0.18	2.17E+00	0.26	2.18E+00	0.46	2.17E+00	0.15	2.18E+00	0.53	2.16E+00	0.29	2.17E+00	0.19	2.18E+00	0.66
	0.79	4.04E+00	4.05E+00	0.21	4.06E+00	0.57	4.08E+00	1.08	4.04E+00	0.16	4.07E+00	0.72	4.03E+00	0.13	4.05E+00	0.22	4.09E+00	1.35
	0.84	6.93E+00	6.95E+00	0.24	6.99E+00	0.91	7.04E+00	1.54	6.94E+00	0.20	6.99E+00	0.92	6.94E+00	0.18	6.95E+00	0.25	7.06E+00	1.83
	0.89	1.12E+01	1.12E+01	0.25	1.13E+01	1.15	1.14E+01	1.73	1.12E+01	0.23	1.13E+01	1.05	1.12E+01	0.49	1.12E+01	0.25	1.14E+01	1.98
	0.94	1.71E+01	1.72E+01	0.18	1.73E+01	1.09	1.74E+01	1.47	1.72E+01	0.21	1.73E+01	0.96	1.72E+01	0.63	1.72E+01	0.18	1.74E+01	1.64
	0.99	2.54E+01	2.54E+01	0.02	2.55E+01	0.34	2.55E+01	0.41	2.54E+01	0.06	2.55E+01	0.31	2.55E+01	0.25	2.54E+01	0.02	2.55E+01	0.44
		DAM(%)		0.56		0.96		1.18		0.54		1.01		2.81		0.56		1.73

iso-butane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.40	1.32E-03	1.29E-03	2.04	1.27E-03	3.46	1.29E-03	1.90	1.29E-03	2.05	1.27E-03	3.25	1.54E-03	16.76	1.29E-03	2.02	1.25E-03	5.15
0.45	1.04E-02	1.03E-02	0.60	1.04E-02	0.03	1.01E-02	2.25	1.03E-02	0.57	1.03E-02	0.16	1.13E-02	9.51	1.03E-02	0.59	9.90E-03	4.38
0.50	5.10E-02	5.10E-02	0.07	5.16E-02	1.11	5.00E-02	1.95	5.11E-02	0.12	5.15E-02	1.01	5.37E-02	5.32	5.10E-02	0.08	4.93E-02	3.29
0.55	1.81E-01	1.81E-01	0.30	1.83E-01	1.20	1.78E-01	1.42	1.81E-01	0.35	1.83E-01	1.23	1.86E-01	2.80	1.81E-01	0.31	1.77E-01	2.21
0.60	5.03E-01	5.05E-01	0.31	5.08E-01	0.92	4.99E-01	0.84	5.05E-01	0.35	5.08E-01	1.05	5.10E-01	1.28	5.05E-01	0.32	4.97E-01	1.25
0.65	1.17E+00	1.18E+00	0.26	1.18E+00	0.63	1.17E+00	0.25	1.18E+00	0.27	1.18E+00	0.81	1.18E+00	0.44	1.18E+00	0.26	1.17E+00	0.39
0.70	2.39E+00	2.39E+00	0.24	2.40E+00	0.49	2.39E+00	0.34	2.39E+00	0.23	2.40E+00	0.66	2.39E+00	0.07	2.39E+00	0.25	2.39E+00	0.38
0.75	4.37E+00	4.39E+00	0.29	4.40E+00	0.55	4.41E+00	0.91	4.39E+00	0.26	4.40E+00	0.66	4.38E+00	0.05	4.39E+00	0.30	4.42E+00	1.07
0.80	7.39E+00	7.42E+00	0.39	7.45E+00	0.76	7.50E+00	1.42	7.42E+00	0.37	7.45E+00	0.79	7.41E+00	0.26	7.42E+00	0.40	7.52E+00	1.64
0.85	1.17E+01	1.18E+01	0.51	1.19E+01	1.03	1.19E+01	1.78	1.18E+01	0.50	1.18E+01	0.98	1.18E+01	0.57	1.18E+01	0.51	1.20E+01	2.01
0.90	1.77E+01	1.78E+01	0.55	1.79E+01	1.19	1.80E+01	1.85	1.78E+01	0.58	1.79E+01	1.10	1.79E+01	0.82	1.78E+01	0.55	1.81E+01	2.04
0.95	2.58E+01	2.59E+01	0.42	2.60E+01	1.03	2.61E+01	1.42	2.59E+01	0.48	2.60E+01	0.94	2.60E+01	0.80	2.59E+01	0.41	2.61E+01	1.54
	DAM(%)		0.50		1.03		1.36		0.51		1.05		3.22		0.50		2.11

2-méthylbutane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.48	1.91E-02	1.88E-02	1.69	1.89E-02	1.07	1.86E-02	2.85	1.88E-02	1.65	1.89E-02	1.21	2.03E-02	6.26	1.88E-02	1.68	1.82E-02	4.51
0.53	8.21E-02	8.14E-02	0.81	8.20E-02	0.09	8.01E-02	2.40	8.15E-02	0.76	8.20E-02	0.11	8.46E-02	3.03	8.14E-02	0.81	7.93E-02	3.41
0.58	2.64E-01	2.63E-01	0.24	2.64E-01	0.27	2.59E-01	1.61	2.63E-01	0.20	2.65E-01	0.39	2.67E-01	1.31	2.63E-01	0.24	2.58E-01	2.15
0.63	6.84E-01	6.84E-01	0.08	6.86E-01	0.38	6.78E-01	0.77	6.84E-01	0.11	6.88E-01	0.58	6.86E-01	0.42	6.84E-01	0.09	6.77E-01	0.99
0.68	1.51E+00	1.52E+00	0.27	1.52E+00	0.44	1.51E+00	0.02	1.52E+00	0.26	1.52E+00	0.66	1.51E+00	0.03	1.52E+00	0.28	1.51E+00	0.01
0.73	2.96E+00	2.97E+00	0.38	2.97E+00	0.57	2.98E+00	0.71	2.97E+00	0.35	2.98E+00	0.74	2.96E+00	0.02	2.97E+00	0.39	2.98E+00	0.85
0.78	5.27E+00	5.29E+00	0.46	5.31E+00	0.77	5.34E+00	1.29	5.29E+00	0.43	5.32E+00	0.86	5.28E+00	0.13	5.29E+00	0.47	5.35E+00	1.51
0.83	8.72E+00	8.77E+00	0.52	8.81E+00	1.02	8.87E+00	1.70	8.77E+00	0.50	8.81E+00	1.01	8.76E+00	0.40	8.77E+00	0.53	8.89E+00	1.95
0.88	1.36E+01	1.37E+01	0.53	1.38E+01	1.20	1.39E+01	1.86	1.37E+01	0.53	1.38E+01	1.12	1.37E+01	0.66	1.37E+01	0.53	1.39E+01	2.09
0.93	2.04E+01	2.04E+01	0.43	2.06E+01	1.15	2.07E+01	1.63	2.05E+01	0.46	2.06E+01	1.04	2.05E+01	0.77	2.04E+01	0.42	2.07E+01	1.79
0.98	2.94E+01	2.95E+01	0.16	2.96E+01	0.57	2.96E+01	0.73	2.95E+01	0.21	2.96E+01	0.52	2.96E+01	0.44	2.95E+01	0.15	2.97E+01	0.79
	DAM(%)		0.51		0.68		1.41		0.50		0.75		1.23		0.51		1.82

2,2-dimethylpropane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.60	4.16E-01	4.19E-01	0.70	4.21E-01	1.25	4.14E-01	0.46	4.19E-01	0.74	4.22E-01	1.39	4.23E-01	1.66	4.19E-01	0.70	4.12E-01	0.87
0.65	9.89E-01	9.88E-01	0.12	9.91E-01	0.21	9.83E-01	0.66	9.88E-01	0.11	9.93E-01	0.40	9.89E-01	0.01	9.88E-01	0.11	9.81E-01	0.79
0.70	2.04E+00	2.03E+00	0.43	2.04E+00	0.21	2.03E+00	0.37	2.03E+00	0.44	2.04E+00	0.03	2.03E+00	0.66	2.03E+00	0.42	2.03E+00	0.31
0.75	3.77E+00	3.76E+00	0.47	3.76E+00	0.22	3.78E+00	0.13	3.75E+00	0.49	3.77E+00	0.10	3.74E+00	0.76	3.76E+00	0.46	3.78E+00	0.29
0.80	6.42E+00	6.40E+00	0.36	6.42E+00	0.00	6.46E+00	0.64	6.39E+00	0.39	6.42E+00	0.04	6.39E+00	0.54	6.40E+00	0.35	6.48E+00	0.86

2,2-dimethylbutane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.46	8.46E-03	8.17E-03	3.41	8.20E-03	3.09	8.13E-03	3.95	8.18E-03	3.37	8.19E-03	3.24	9.06E-03	7.04	8.17E-03	3.40	7.96E-03	5.93
0.51	4.20E-02	4.15E-02	1.18	4.18E-02	0.46	4.09E-02	2.66	4.15E-02	1.13	4.18E-02	0.54	4.37E-02	4.11	4.15E-02	1.17	4.04E-02	3.90
0.56	1.51E-01	1.50E-01	0.26	1.51E-01	0.33	1.48E-01	1.76	1.50E-01	0.21	1.51E-01	0.40	1.54E-01	2.08	1.50E-01	0.26	1.47E-01	2.47
0.61	4.25E-01	4.25E-01	0.01	4.27E-01	0.36	4.21E-01	1.07	4.26E-01	0.05	4.28E-01	0.55	4.29E-01	0.74	4.25E-01	0.02	4.19E-01	1.41
0.66	1.00E+00	1.00E+00	0.05	1.01E+00	0.24	9.99E-01	0.46	1.00E+00	0.06	1.01E+00	0.47	1.00E+00	0.03	1.00E+00	0.06	9.98E-01	0.54
0.71	2.06E+00	2.07E+00	0.08	2.07E+00	0.23	2.07E+00	0.17	2.07E+00	0.06	2.07E+00	0.44	2.06E+00	0.31	2.07E+00	0.09	2.07E+00	0.26
0.76	3.82E+00	3.82E+00	0.18	3.83E+00	0.43	3.85E+00	0.82	3.82E+00	0.15	3.84E+00	0.56	3.81E+00	0.21	3.82E+00	0.20	3.86E+00	1.01
0.81	6.50E+00	6.52E+00	0.36	6.55E+00	0.78	6.59E+00	1.42	6.52E+00	0.33	6.55E+00	0.82	6.51E+00	0.14	6.52E+00	0.37	6.61E+00	1.66
0.86	1.04E+01	1.04E+01	0.55	1.05E+01	1.16	1.06E+01	1.85	1.04E+01	0.53	1.05E+01	1.11	1.04E+01	0.57	1.04E+01	0.55	1.06E+01	2.09
0.91	1.58E+01	1.59E+01	0.62	1.60E+01	1.36	1.61E+01	1.93	1.59E+01	0.64	1.60E+01	1.25	1.59E+01	0.89	1.59E+01	0.62	1.61E+01	2.12
0.96	2.31E+01	2.32E+01	0.44	2.33E+01	1.06	2.34E+01	1.36	2.32E+01	0.50	2.33E+01	0.98	2.33E+01	0.81	2.32E+01	0.43	2.34E+01	1.46
	DAM(%)		0.65		0.87		1.58		0.64		0.94		1.54		0.65		2.08

2,3-dimethylbutane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.47	1.09E-02	1.05E-02	3.03	1.06E-02	2.67	1.05E-02	3.59	1.05E-02	2.98	1.06E-02	2.83	1.16E-02	6.63	1.05E-02	3.01	1.03E-02	5.42
0.52	5.17E-02	5.10E-02	1.44	5.13E-02	0.82	5.02E-02	2.88	5.10E-02	1.39	5.13E-02	0.87	5.34E-02	3.30	5.10E-02	1.44	4.97E-02	4.00
0.57	1.80E-01	1.78E-01	0.62	1.79E-01	0.16	1.76E-01	2.05	1.79E-01	0.57	1.79E-01	0.05	1.82E-01	1.37	1.78E-01	0.62	1.75E-01	2.68
0.62	4.94E-01	4.93E-01	0.23	4.94E-01	0.02	4.88E-01	1.24	4.93E-01	0.20	4.95E-01	0.23	4.96E-01	0.28	4.93E-01	0.23	4.87E-01	1.52
0.67	1.14E+00	1.14E+00	0.04	1.14E+00	0.09	1.14E+00	0.46	1.14E+00	0.04	1.15E+00	0.34	1.14E+00	0.24	1.14E+00	0.03	1.14E+00	0.50
0.72	2.32E+00	2.32E+00	0.10	2.32E+00	0.25	2.32E+00	0.28	2.32E+00	0.08	2.33E+00	0.46	2.31E+00	0.34	2.32E+00	0.12	2.33E+00	0.40
0.77	4.24E+00	4.25E+00	0.26	4.26E+00	0.53	4.28E+00	0.97	4.25E+00	0.23	4.27E+00	0.66	4.24E+00	0.14	4.25E+00	0.27	4.29E+00	1.18
0.82	7.17E+00	7.20E+00	0.43	7.23E+00	0.90	7.28E+00	1.54	7.20E+00	0.39	7.23E+00	0.92	7.18E+00	0.22	7.20E+00	0.43	7.30E+00	1.79
0.87	1.14E+01	1.14E+01	0.55	1.15E+01	1.22	1.16E+01	1.88	1.14E+01	0.54	1.15E+01	1.15	1.15E+01	0.62	1.15E+01	0.55	1.16E+01	2.12
0.92	1.72E+01	1.73E+01	0.54	1.75E+01	1.31	1.76E+01	1.82	1.73E+01	0.57	1.75E+01	1.20	1.74E+01	0.85	1.73E+01	0.54	1.76E+01	2.01
0.97	2.52E+01	2.53E+01	0.30	2.54E+01	0.86	2.55E+01	1.08	2.53E+01	0.36	2.54E+01	0.79	2.54E+01	0.65	2.53E+01	0.29	2.55E+01	1.16
	DAM(%)		0.69		0.80		1.62		0.67		0.86		1.33		0.68		2.07

2-methylhexane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.43	8.59E-04	8.28E-04	3.59	8.15E-04	5.09	8.59E-04	0.08	8.28E-04	3.55	8.14E-04	5.21	1.01E-03	17.92	8.28E-04	3.57	8.35E-04	2.80
0.48	7.11E-03	6.97E-03	2.05	6.96E-03	2.17	6.97E-03	2.00	6.97E-03	1.99	6.94E-03	2.35	7.74E-03	8.90	6.97E-03	2.04	6.84E-03	3.80
0.53	3.67E-02	3.64E-02	1.01	3.64E-02	0.88	3.59E-02	2.31	3.64E-02	0.95	3.64E-02	0.88	3.83E-02	4.19	3.64E-02	1.00	3.55E-02	3.38
0.58	1.36E-01	1.35E-01	0.39	1.35E-01	0.36	1.33E-01	1.88	1.35E-01	0.33	1.35E-01	0.16	1.38E-01	1.69	1.35E-01	0.38	1.32E-01	2.44
0.63	3.91E-01	3.91E-01	0.06	3.91E-01	0.15	3.87E-01	1.18	3.91E-01	0.03	3.92E-01	0.16	3.93E-01	0.39	3.91E-01	0.05	3.86E-01	1.39
0.68	9.39E-01	9.40E-01	0.09	9.40E-01	0.01	9.36E-01	0.41	9.40E-01	0.09	9.43E-01	0.34	9.38E-01	0.19	9.40E-01	0.10	9.36E-01	0.39
0.73	1.96E+00	1.97E+00	0.18	1.97E+00	0.24	1.97E+00	0.34	1.97E+00	0.15	1.97E+00	0.51	1.96E+00	0.32	1.97E+00	0.19	1.97E+00	0.52

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.43	1.30E-03	1.23E-03	5.56	1.22E-03	6.69	1.27E-03	2.79	1.23E-03	5.52	1.21E-03	6.80	1.48E-03	13.46	1.23E-03	5.54	1.23E-03	5.52
0.48	9.83E-03	9.55E-03	2.85	9.56E-03	2.73	9.52E-03	3.09	9.55E-03	2.79	9.54E-03	2.89	1.05E-02	6.99	9.55E-03	2.83	9.35E-03	4.82
0.53	4.76E-02	4.69E-02	1.32	4.71E-02	1.00	4.63E-02	2.66	4.70E-02	1.26	4.71E-02	1.00	4.92E-02	3.37	4.69E-02	1.31	4.58E-02	3.70
0.58	1.67E-01	1.67E-01	0.56	1.67E-01	0.37	1.64E-01	1.98	1.67E-01	0.51	1.67E-01	0.20	1.70E-01	1.29	1.67E-01	0.55	1.63E-01	2.53
0.63	4.67E-01	4.66E-01	0.23	4.66E-01	0.19	4.61E-01	1.25	4.66E-01	0.20	4.67E-01	0.08	4.67E-01	0.13	4.66E-01	0.22	4.60E-01	1.46
0.68	1.09E+00	1.09E+00	0.10	1.09E+00	0.10	1.09E+00	0.52	1.09E+00	0.10	1.09E+00	0.19	1.09E+00	0.42	1.09E+00	0.09	1.09E+00	0.51
0.73	2.23E+00	2.23E+00	0.03	2.23E+00	0.07	2.24E+00	0.18	2.23E+00	0.05	2.24E+00	0.31	2.22E+00	0.54	2.23E+00	0.01	2.24E+00	0.34
0.78	4.12E+00	4.12E+00	0.07	4.13E+00	0.38	4.15E+00	0.84	4.12E+00	0.03	4.14E+00	0.51	4.10E+00	0.35	4.12E+00	0.08	4.16E+00	1.08
0.83	7.01E+00	7.02E+00	0.19	7.06E+00	0.75	7.11E+00	1.38	7.02E+00	0.16	7.06E+00	0.77	7.01E+00	0.02	7.02E+00	0.20	7.13E+00	1.65
0.88	1.12E+01	1.12E+01	0.30	1.13E+01	1.08	1.14E+01	1.69	1.12E+01	0.28	1.13E+01	1.00	1.13E+01	0.42	1.12E+01	0.30	1.14E+01	1.94
0.93	1.71E+01	1.71E+01	0.30	1.73E+01	1.14	1.73E+01	1.59	1.71E+01	0.33	1.72E+01	1.02	1.72E+01	0.67	1.71E+01	0.30	1.74E+01	1.76
0.98	2.51E+01	2.51E+01	0.12	2.52E+01	0.60	2.53E+01	0.75	2.51E+01	0.17	2.52E+01	0.54	2.52E+01	0.44	2.51E+01	0.12	2.53E+01	0.81
	DAM(%)		0.97		1.26		1.56		0.95		1.28		2.34		0.96		2.18

2,4-dimethylpentane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.43	1.11E-03	1.09E-03	2.00	1.08E-03	3.24	1.12E-03	1.03	1.09E-03	1.97	1.08E-03	3.36	1.32E-03	18.11	1.09E-03	1.99	1.09E-03	1.81
0.48	8.65E-03	8.59E-03	0.72	8.60E-03	0.65	8.57E-03	0.91	8.59E-03	0.67	8.58E-03	0.82	9.47E-03	9.52	8.59E-03	0.71	8.42E-03	2.69
0.53	4.27E-02	4.27E-02	0.09	4.28E-02	0.20	4.21E-02	1.43	4.27E-02	0.03	4.28E-02	0.20	4.47E-02	4.75	4.27E-02	0.08	4.17E-02	2.49
0.58	1.53E-01	1.53E-01	0.12	1.53E-01	0.28	1.51E-01	1.32	1.53E-01	0.17	1.53E-01	0.46	1.56E-01	2.02	1.53E-01	0.13	1.50E-01	1.88
0.63	4.29E-01	4.30E-01	0.11	4.30E-01	0.12	4.25E-01	0.93	4.30E-01	0.14	4.31E-01	0.40	4.31E-01	0.48	4.30E-01	0.12	4.24E-01	1.15
0.68	1.01E+00	1.01E+00	0.02	1.01E+00	0.00	1.01E+00	0.42	1.01E+00	0.02	1.01E+00	0.31	1.01E+00	0.30	1.01E+00	0.03	1.01E+00	0.40
0.73	2.08E+00	2.08E+00	0.04	2.08E+00	0.06	2.08E+00	0.16	2.08E+00	0.06	2.08E+00	0.30	2.07E+00	0.55	2.08E+00	0.02	2.09E+00	0.33
0.78	3.85E+00	3.85E+00	0.02	3.86E+00	0.29	3.88E+00	0.75	3.85E+00	0.06	3.87E+00	0.43	3.83E+00	0.44	3.85E+00	0.00	3.89E+00	1.00
0.83	6.57E+00	6.57E+00	0.07	6.61E+00	0.64	6.65E+00	1.26	6.57E+00	0.03	6.61E+00	0.65	6.56E+00	0.10	6.57E+00	0.08	6.67E+00	1.53
0.88	1.05E+01	1.05E+01	0.17	1.06E+01	0.96	1.07E+01	1.57	1.05E+01	0.15	1.06E+01	0.88	1.06E+01	0.30	1.05E+01	0.17	1.07E+01	1.82
0.93	1.61E+01	1.61E+01	0.20	1.62E+01	1.05	1.63E+01	1.49	1.61E+01	0.22	1.62E+01	0.93	1.61E+01	0.57	1.61E+01	0.19	1.63E+01	1.67
0.98	2.36E+01	2.36E+01	0.08	2.38E+01	0.56	2.38E+01	0.71	2.37E+01	0.13	2.37E+01	0.51	2.37E+01	0.40	2.36E+01	0.08	2.38E+01	0.77
	DAM(%)		0.30		0.67		1.00		0.30		0.77		3.13		0.30		1.46

3,3-dimethylpentane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.42	1.14E-03	1.05E-03	7.79	1.04E-03	9.05	1.08E-03	5.09	1.05E-03	7.77	1.04E-03	9.08	1.27E-03	11.48	1.05E-03	7.78	1.05E-03	7.93
0.47	8.79E-03	8.46E-03	3.77	8.47E-03	3.56	8.44E-03	4.00	8.46E-03	3.72	8.46E-03	3.73	9.36E-03	6.47	8.46E-03	3.75	8.27E-03	5.85
0.52	4.32E-02	4.25E-02	1.64	4.28E-02	1.14	4.20E-02	2.97	4.26E-02	1.58	4.27E-02	1.18	4.47E-02	3.39	4.25E-02	1.63	4.15E-02	4.10
0.57	1.54E-01	1.53E-01	0.60	1.54E-01	0.23	1.51E-01	2.03	1.53E-01	0.55	1.54E-01	0.11	1.56E-01	1.50	1.53E-01	0.59	1.50E-01	2.66
0.62	4.33E-01	4.33E-01	0.12	4.34E-01	0.06	4.28E-01	1.17	4.33E-01	0.09	4.35E-01	0.29	4.35E-01	0.41	4.33E-01	0.11	4.27E-01	1.45
0.67	1.02E+00	1.02E+00	0.14	1.02E+00	0.21	1.02E+00	0.34	1.02E+00	0.14	1.02E+00	0.48	1.02E+00	0.09	1.02E+00	0.15	1.02E+00	0.37

0.45	1.24E-03	1.21E-03	2.18	1.20E-03	3.37	1.24E-03	0.32	1.21E-03	2.13	1.20E-03	3.59	1.45E-03	16.93	1.21E-03	2.17	1.21E-03	2.20
0.50	9.33E-03	9.20E-03	1.44	9.17E-03	1.71	9.15E-03	2.00	9.20E-03	1.38	9.16E-03	1.83	1.01E-02	8.09	9.20E-03	1.43	9.00E-03	3.53
0.55	4.51E-02	4.48E-02	0.77	4.47E-02	0.93	4.41E-02	2.34	4.48E-02	0.71	4.48E-02	0.83	4.68E-02	3.61	4.48E-02	0.76	4.37E-02	3.21
0.60	1.59E-01	1.59E-01	0.32	1.58E-01	0.57	1.56E-01	1.86	1.59E-01	0.27	1.59E-01	0.27	1.61E-01	1.32	1.59E-01	0.31	1.55E-01	2.28
0.65	4.44E-01	4.44E-01	0.08	4.42E-01	0.35	4.39E-01	1.10	4.44E-01	0.06	4.44E-01	0.04	4.45E-01	0.19	4.44E-01	0.07	4.39E-01	1.21
0.70	1.04E+00	1.04E+00	0.02	1.04E+00	0.12	1.04E+00	0.29	1.04E+00	0.01	1.04E+00	0.25	1.04E+00	0.27	1.04E+00	0.03	1.04E+00	0.19
0.75	2.14E+00	2.14E+00	0.07	2.14E+00	0.18	2.15E+00	0.47	2.14E+00	0.04	2.15E+00	0.45	2.13E+00	0.32	2.14E+00	0.08	2.15E+00	0.69
0.80	3.96E+00	3.96E+00	0.12	3.98E+00	0.55	4.00E+00	1.12	3.96E+00	0.07	3.98E+00	0.69	3.95E+00	0.11	3.96E+00	0.13	4.01E+00	1.40
0.85	6.77E+00	6.78E+00	0.17	6.83E+00	0.93	6.88E+00	1.58	6.78E+00	0.12	6.83E+00	0.92	6.79E+00	0.23	6.78E+00	0.17	6.90E+00	1.87
0.90	1.09E+01	1.09E+01	0.18	1.10E+01	1.16	1.11E+01	1.72	1.09E+01	0.17	1.10E+01	1.05	1.09E+01	0.54	1.09E+01	0.18	1.11E+01	1.97
0.95	1.67E+01	1.67E+01	0.12	1.69E+01	1.02	1.69E+01	1.35	1.67E+01	0.15	1.69E+01	0.90	1.68E+01	0.62	1.67E+01	0.12	1.70E+01	1.50
	DAM(%)		0.50		0.99		1.29		0.46		0.98		2.93		0.50		1.82

3-methylheptane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.45	1.35E-03	1.34E-03	0.58	1.33E-03	1.71	1.37E-03	1.87	1.34E-03	0.52	1.32E-03	1.93	1.60E-03	18.41	1.34E-03	0.56	1.34E-03	0.67
0.50	1.00E-02	9.99E-03	0.58	9.97E-03	0.79	9.93E-03	1.16	1.00E-02	0.51	9.96E-03	0.92	1.09E-02	8.81	9.99E-03	0.56	9.78E-03	2.69
0.55	4.82E-02	4.80E-02	0.33	4.80E-02	0.45	4.73E-02	1.89	4.81E-02	0.27	4.80E-02	0.34	5.01E-02	3.95	4.80E-02	0.32	4.69E-02	2.76
0.60	1.68E-01	1.68E-01	0.09	1.68E-01	0.30	1.66E-01	1.61	1.68E-01	0.05	1.68E-01	0.01	1.71E-01	1.49	1.68E-01	0.08	1.65E-01	2.03
0.65	4.67E-01	4.67E-01	0.06	4.66E-01	0.17	4.63E-01	0.93	4.67E-01	0.09	4.68E-01	0.20	4.68E-01	0.30	4.67E-01	0.07	4.62E-01	1.04
0.70	1.09E+00	1.09E+00	0.16	1.09E+00	0.04	1.09E+00	0.14	1.09E+00	0.15	1.09E+00	0.40	1.09E+00	0.16	1.09E+00	0.17	1.09E+00	0.04
0.75	2.22E+00	2.23E+00	0.25	2.23E+00	0.36	2.24E+00	0.65	2.23E+00	0.21	2.24E+00	0.63	2.22E+00	0.16	2.23E+00	0.26	2.24E+00	0.87
0.80	4.10E+00	4.11E+00	0.34	4.13E+00	0.77	4.15E+00	1.33	4.11E+00	0.29	4.14E+00	0.90	4.10E+00	0.09	4.11E+00	0.35	4.17E+00	1.62
0.85	6.99E+00	7.02E+00	0.41	7.07E+00	1.17	7.12E+00	1.81	7.02E+00	0.37	7.07E+00	1.15	7.02E+00	0.46	7.02E+00	0.42	7.14E+00	2.10
0.90	1.12E+01	1.13E+01	0.42	1.14E+01	1.39	1.14E+01	1.95	1.13E+01	0.41	1.14E+01	1.27	1.13E+01	0.76	1.13E+01	0.42	1.15E+01	2.19
0.95	1.72E+01	1.72E+01	0.30	1.74E+01	1.18	1.74E+01	1.51	1.72E+01	0.33	1.74E+01	1.06	1.73E+01	0.78	1.72E+01	0.29	1.75E+01	1.66
	DAM(%)		0.32		0.76		1.35		0.29		0.80		3.21		0.32		1.61

4-methylheptane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.47	3.19E-03	3.15E-03	1.14	3.13E-03	1.75	3.18E-03	0.25	3.15E-03	1.08	3.12E-03	1.96	3.61E-03	13.22	3.15E-03	1.12	3.11E-03	2.32
0.52	1.95E-02	1.94E-02	0.69	1.94E-02	0.82	1.92E-02	1.83	1.94E-02	0.63	1.93E-02	0.86	2.07E-02	6.27	1.94E-02	0.68	1.89E-02	3.07
0.57	8.15E-02	8.12E-02	0.28	8.11E-02	0.44	7.99E-02	1.91	8.13E-02	0.23	8.13E-02	0.25	8.37E-02	2.71	8.12E-02	0.27	7.94E-02	2.58
0.62	2.58E-01	2.57E-01	0.03	2.57E-01	0.27	2.54E-01	1.38	2.58E-01	0.01	2.58E-01	0.07	2.60E-01	0.89	2.57E-01	0.02	2.53E-01	1.66
0.67	6.63E-01	6.63E-01	0.09	6.62E-01	0.12	6.58E-01	0.64	6.63E-01	0.10	6.64E-01	0.26	6.63E-01	0.03	6.63E-01	0.10	6.58E-01	0.66
0.72	1.46E+00	1.46E+00	0.13	1.46E+00	0.09	1.46E+00	0.12	1.46E+00	0.11	1.47E+00	0.42	1.46E+00	0.26	1.46E+00	0.15	1.46E+00	0.28
0.77	2.86E+00	2.86E+00	0.17	2.87E+00	0.41	2.88E+00	0.82	2.86E+00	0.13	2.88E+00	0.62	2.85E+00	0.19	2.86E+00	0.18	2.89E+00	1.08
0.82	5.10E+00	5.11E+00	0.21	5.14E+00	0.78	5.17E+00	1.40	5.11E+00	0.17	5.14E+00	0.85	5.10E+00	0.08	5.11E+00	0.22	5.19E+00	1.69
0.87	8.48E+00	8.50E+00	0.25	8.57E+00	1.11	8.62E+00	1.74	8.50E+00	0.22	8.57E+00	1.05	8.51E+00	0.42	8.50E+00	0.26	8.65E+00	2.02

2,2-dimethylhexane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.45	1.77E-03	1.78E-03	0.39	1.76E-03	0.46	1.81E-03	2.43	1.78E-03	0.44	1.76E-03	0.67	2.09E-03	17.89	1.78E-03	0.40	1.77E-03	0.06
0.50	1.23E-02	1.23E-02	0.19	1.23E-02	0.19	1.23E-02	0.48	1.23E-02	0.25	1.23E-02	0.07	1.34E-02	8.80	1.23E-02	0.20	1.21E-02	1.98
0.55	5.62E-02	5.63E-02	0.17	5.63E-02	0.23	5.54E-02	1.33	5.63E-02	0.23	5.64E-02	0.32	5.85E-02	4.03	5.63E-02	0.18	5.50E-02	2.19
0.60	1.89E-01	1.90E-01	0.17	1.89E-01	0.10	1.87E-01	1.25	1.90E-01	0.22	1.90E-01	0.36	1.92E-01	1.52	1.90E-01	0.18	1.86E-01	1.66
0.65	5.10E-01	5.11E-01	0.16	5.10E-01	0.03	5.06E-01	0.75	5.11E-01	0.18	5.12E-01	0.37	5.11E-01	0.27	5.11E-01	0.17	5.06E-01	0.86
0.70	1.16E+00	1.16E+00	0.17	1.16E+00	0.11	1.16E+00	0.07	1.16E+00	0.16	1.17E+00	0.44	1.16E+00	0.23	1.16E+00	0.18	1.16E+00	0.02
0.75	2.33E+00	2.33E+00	0.23	2.34E+00	0.37	2.34E+00	0.64	2.33E+00	0.20	2.34E+00	0.61	2.32E+00	0.25	2.33E+00	0.24	2.35E+00	0.86
0.80	4.23E+00	4.25E+00	0.33	4.26E+00	0.76	4.29E+00	1.30	4.24E+00	0.29	4.27E+00	0.87	4.23E+00	0.03	4.25E+00	0.34	4.30E+00	1.58
0.85	7.13E+00	7.16E+00	0.44	7.21E+00	1.15	7.25E+00	1.79	7.16E+00	0.40	7.21E+00	1.13	7.16E+00	0.42	7.16E+00	0.45	7.27E+00	2.07
0.90	1.13E+01	1.14E+01	0.48	1.15E+01	1.39	1.15E+01	1.95	1.14E+01	0.47	1.15E+01	1.28	1.14E+01	0.76	1.14E+01	0.48	1.16E+01	2.18
0.95	1.72E+01	1.72E+01	0.36	1.74E+01	1.19	1.74E+01	1.53	1.72E+01	0.39	1.74E+01	1.08	1.73E+01	0.80	1.72E+01	0.35	1.75E+01	1.67
	DAM(%)		0.28		0.54		1.23		0.29		0.65		3.18		0.29		1.37

2,3-dimethylhexane

E-14

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	1.13E-03	1.09E-03	3.56	1.07E-03	4.79	1.12E-03	0.58	1.09E-03	3.51	1.07E-03	4.97	1.31E-03	16.18	1.09E-03	3.54	1.09E-03	3.24
0.49	8.71E-03	8.54E-03	1.95	8.53E-03	2.08	8.51E-03	2.22	8.54E-03	1.89	8.51E-03	2.24	9.41E-03	8.03	8.54E-03	1.94	8.37E-03	3.86
0.54	4.29E-02	4.25E-02	0.92	4.25E-02	0.89	4.19E-02	2.34	4.25E-02	0.85	4.25E-02	0.84	4.45E-02	3.74	4.25E-02	0.91	4.15E-02	3.30
0.59	1.53E-01	1.53E-01	0.32	1.52E-01	0.40	1.50E-01	1.81	1.53E-01	0.27	1.53E-01	0.16	1.55E-01	1.46	1.53E-01	0.31	1.49E-01	2.30
0.64	4.31E-01	4.31E-01	0.00	4.30E-01	0.16	4.26E-01	1.05	4.31E-01	0.02	4.32E-01	0.18	4.32E-01	0.31	4.31E-01	0.01	4.26E-01	1.21
0.69	1.02E+00	1.02E+00	0.17	1.02E+00	0.06	1.01E+00	0.23	1.02E+00	0.16	1.02E+00	0.41	1.01E+00	0.16	1.02E+00	0.18	1.01E+00	0.17
0.74	2.09E+00	2.10E+00	0.29	2.10E+00	0.37	2.10E+00	0.57	2.10E+00	0.26	2.11E+00	0.64	2.09E+00	0.18	2.10E+00	0.30	2.11E+00	0.77
0.79	3.89E+00	3.90E+00	0.41	3.92E+00	0.78	3.94E+00	1.29	3.90E+00	0.37	3.92E+00	0.92	3.89E+00	0.07	3.90E+00	0.42	3.95E+00	1.56
0.84	6.65E+00	6.69E+00	0.53	6.73E+00	1.19	6.78E+00	1.83	6.69E+00	0.48	6.73E+00	1.20	6.68E+00	0.46	6.69E+00	0.53	6.79E+00	2.12
0.89	1.07E+01	1.08E+01	0.57	1.09E+01	1.46	1.09E+01	2.05	1.08E+01	0.55	1.09E+01	1.37	1.08E+01	0.81	1.08E+01	0.57	1.10E+01	2.30
0.94	1.64E+01	1.65E+01	0.45	1.66E+01	1.35	1.67E+01	1.74	1.65E+01	0.48	1.66E+01	1.23	1.66E+01	0.90	1.65E+01	0.45	1.67E+01	1.91
0.99	2.44E+01	2.44E+01	0.10	2.45E+01	0.41	2.45E+01	0.48	2.44E+01	0.13	2.45E+01	0.38	2.44E+01	0.32	2.44E+01	0.09	2.45E+01	0.52
	DAM(%)		0.77		1.16		1.35		0.75		1.21		2.72		0.77		1.94

2,4-dimethylhexane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	1.10E-03	1.09E-03	0.97	1.08E-03	2.21	1.12E-03	2.03	1.09E-03	0.92	1.07E-03	2.39	1.31E-03	19.12	1.09E-03	0.95	1.09E-03	0.69
0.49	8.54E-03	8.49E-03	0.61	8.48E-03	0.73	8.47E-03	0.90	8.50E-03	0.55	8.47E-03	0.88	9.35E-03	9.42	8.49E-03	0.60	8.33E-03	2.56
0.54	4.22E-02	4.20E-02	0.29	4.21E-02	0.24	4.14E-02	1.72	4.21E-02	0.23	4.21E-02	0.19	4.40E-02	4.36	4.20E-02	0.28	4.10E-02	2.68
0.59	1.50E-01	1.50E-01	0.10	1.50E-01	0.16	1.48E-01	1.59	1.50E-01	0.05	1.51E-01	0.08	1.53E-01	1.66	1.50E-01	0.09	1.47E-01	2.08
0.64	4.24E-01	4.23E-01	0.03	4.23E-01	0.18	4.19E-01	1.08	4.24E-01	0.01	4.24E-01	0.16	4.25E-01	0.27	4.23E-01	0.02	4.18E-01	1.24
0.69	9.98E-01	9.98E-01	0.03	9.97E-01	0.13	9.94E-01	0.42	9.98E-01	0.03	1.00E+00	0.21	9.94E-01	0.36	9.98E-01	0.02	9.94E-01	0.36

3,4-dimethylhexane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	1.24E-03	1.20E-03	2.92	1.19E-03	4.09	1.24E-03	0.07	1.20E-03	2.88	1.18E-03	4.27	1.44E-03	16.48	1.20E-03	2.91	1.20E-03	2.72
0.49	9.40E-03	9.25E-03	1.61	9.24E-03	1.68	9.22E-03	1.92	9.26E-03	1.55	9.23E-03	1.84	1.02E-02	8.18	9.25E-03	1.59	9.07E-03	3.56
0.54	4.57E-02	4.54E-02	0.73	4.54E-02	0.66	4.48E-02	2.15	4.54E-02	0.67	4.55E-02	0.61	4.75E-02	3.82	4.54E-02	0.72	4.43E-02	3.10
0.59	1.62E-01	1.61E-01	0.20	1.61E-01	0.25	1.59E-01	1.68	1.61E-01	0.15	1.62E-01	0.01	1.64E-01	1.52	1.61E-01	0.19	1.58E-01	2.16
0.64	4.52E-01	4.52E-01	0.09	4.51E-01	0.04	4.47E-01	0.94	4.52E-01	0.11	4.53E-01	0.29	4.53E-01	0.37	4.52E-01	0.10	4.47E-01	1.10
0.69	1.06E+00	1.06E+00	0.25	1.06E+00	0.17	1.06E+00	0.13	1.06E+00	0.25	1.06E+00	0.50	1.06E+00	0.09	1.06E+00	0.26	1.06E+00	0.07
0.74	2.17E+00	2.18E+00	0.38	2.18E+00	0.48	2.18E+00	0.67	2.18E+00	0.35	2.19E+00	0.73	2.17E+00	0.10	2.18E+00	0.39	2.19E+00	0.87
0.79	4.01E+00	4.03E+00	0.51	4.05E+00	0.88	4.07E+00	1.39	4.03E+00	0.47	4.05E+00	1.01	4.02E+00	0.16	4.03E+00	0.52	4.08E+00	1.65
0.84	6.85E+00	6.89E+00	0.62	6.94E+00	1.28	6.98E+00	1.92	6.89E+00	0.58	6.94E+00	1.29	6.89E+00	0.54	6.89E+00	0.63	7.00E+00	2.20
0.89	1.10E+01	1.11E+01	0.66	1.12E+01	1.54	1.12E+01	2.13	1.11E+01	0.64	1.12E+01	1.44	1.11E+01	0.88	1.11E+01	0.66	1.13E+01	2.38
0.94	1.68E+01	1.69E+01	0.52	1.71E+01	1.40	1.71E+01	1.79	1.69E+01	0.54	1.70E+01	1.28	1.70E+01	0.95	1.69E+01	0.51	1.72E+01	1.96
0.99	2.49E+01	2.49E+01	0.11	2.50E+01	0.42	2.50E+01	0.49	2.50E+01	0.15	2.50E+01	0.39	2.50E+01	0.33	2.49E+01	0.11	2.51E+01	0.53
	DAM(%)		0.72		1.07		1.27		0.69		1.14		2.79		0.72		1.86

3-ethylhexane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	9.52E-04	9.36E-04	1.69	9.22E-04	3.10	9.67E-04	1.60	9.36E-04	1.64	9.20E-04	3.28	1.14E-03	19.31	9.36E-04	1.67	9.41E-04	1.15
0.49	7.70E-03	7.60E-03	1.27	7.58E-03	1.51	7.58E-03	1.48	7.61E-03	1.21	7.57E-03	1.67	8.41E-03	9.23	7.60E-03	1.26	7.46E-03	3.16
0.54	3.91E-02	3.88E-02	0.74	3.88E-02	0.80	3.83E-02	2.18	3.88E-02	0.68	3.88E-02	0.74	4.07E-02	4.16	3.88E-02	0.73	3.79E-02	3.16
0.59	1.43E-01	1.42E-01	0.32	1.42E-01	0.47	1.40E-01	1.87	1.42E-01	0.27	1.42E-01	0.22	1.45E-01	1.58	1.42E-01	0.31	1.39E-01	2.36
0.64	4.08E-01	4.08E-01	0.07	4.07E-01	0.28	4.03E-01	1.16	4.08E-01	0.04	4.08E-01	0.08	4.09E-01	0.31	4.08E-01	0.06	4.02E-01	1.33
0.69	9.73E-01	9.74E-01	0.06	9.73E-01	0.07	9.70E-01	0.36	9.74E-01	0.06	9.76E-01	0.29	9.71E-01	0.22	9.74E-01	0.07	9.70E-01	0.30
0.74	2.02E+00	2.03E+00	0.15	2.03E+00	0.21	2.03E+00	0.42	2.03E+00	0.12	2.03E+00	0.49	2.02E+00	0.30	2.03E+00	0.16	2.04E+00	0.62
0.79	3.79E+00	3.80E+00	0.22	3.81E+00	0.58	3.83E+00	1.10	3.79E+00	0.17	3.82E+00	0.74	3.78E+00	0.09	3.80E+00	0.23	3.84E+00	1.37
0.84	6.53E+00	6.55E+00	0.28	6.59E+00	0.97	6.63E+00	1.61	6.54E+00	0.24	6.59E+00	0.98	6.54E+00	0.24	6.55E+00	0.29	6.65E+00	1.90
0.89	1.06E+01	1.06E+01	0.31	1.07E+01	1.23	1.07E+01	1.82	1.06E+01	0.29	1.07E+01	1.13	1.06E+01	0.58	1.06E+01	0.31	1.08E+01	2.07
0.94	1.63E+01	1.63E+01	0.24	1.64E+01	1.16	1.65E+01	1.55	1.63E+01	0.26	1.64E+01	1.03	1.64E+01	0.70	1.63E+01	0.23	1.65E+01	1.72
0.99	2.42E+01	2.42E+01	0.04	2.43E+01	0.36	2.43E+01	0.43	2.42E+01	0.08	2.42E+01	0.33	2.42E+01	0.27	2.42E+01	0.03	2.43E+01	0.47
	DAM(%)		0.45		0.90		1.30		0.42		0.91		3.08		0.45		1.63

2,2,3-trimethylpentane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	1.84E-03	1.80E-03	2.05	1.79E-03	2.83	1.84E-03	0.02	1.80E-03	2.01	1.79E-03	2.98	2.12E-03	15.24	1.80E-03	2.03	1.79E-03	2.59
0.49	1.27E-02	1.26E-02	0.78	1.26E-02	0.57	1.25E-02	1.36	1.26E-02	0.72	1.26E-02	0.71	1.37E-02	7.95	1.26E-02	0.77	1.23E-02	2.96
0.54	5.78E-02	5.77E-02	0.13	5.79E-02	0.17	5.69E-02	1.56	5.77E-02	0.07	5.79E-02	0.21	6.00E-02	3.89	5.77E-02	0.12	5.63E-02	2.50
0.59	1.94E-01	1.94E-01	0.12	1.95E-01	0.26	1.92E-01	1.26	1.94E-01	0.17	1.95E-01	0.47	1.97E-01	1.60	1.94E-01	0.13	1.91E-01	1.74
0.64	5.22E-01	5.23E-01	0.17	5.23E-01	0.18	5.18E-01	0.75	5.23E-01	0.19	5.24E-01	0.47	5.24E-01	0.34	5.23E-01	0.18	5.17E-01	0.91

DAM(%)	1.32	1.56	2.00	1.30	1.55	1.51	1.32	2.55
--------	------	------	------	------	------	------	------	------

2,3,4-trimethylpentane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	1.60E-03	1.52E-03	5.30	1.50E-03	6.22	1.56E-03	2.96	1.52E-03	5.26	1.50E-03	6.38	1.80E-03	12.37	1.52E-03	5.29	1.52E-03	5.49
0.49	1.14E-02	1.11E-02	2.73	1.11E-02	2.65	1.10E-02	3.18	1.11E-02	2.68	1.11E-02	2.80	1.21E-02	6.30	1.11E-02	2.72	1.09E-02	4.76
0.54	5.29E-02	5.23E-02	1.22	5.24E-02	1.01	5.15E-02	2.62	5.23E-02	1.16	5.24E-02	0.97	5.45E-02	3.00	5.23E-02	1.21	5.10E-02	3.56
0.59	1.81E-01	1.80E-01	0.39	1.80E-01	0.32	1.78E-01	1.80	1.80E-01	0.34	1.81E-01	0.11	1.83E-01	1.18	1.80E-01	0.38	1.77E-01	2.28
0.64	4.94E-01	4.94E-01	0.03	4.94E-01	0.02	4.89E-01	0.93	4.94E-01	0.05	4.95E-01	0.29	4.95E-01	0.24	4.94E-01	0.04	4.88E-01	1.09
0.69	1.14E+00	1.14E+00	0.25	1.14E+00	0.21	1.13E+00	0.09	1.14E+00	0.24	1.14E+00	0.52	1.13E+00	0.13	1.14E+00	0.26	1.14E+00	0.04
0.74	2.30E+00	2.30E+00	0.39	2.31E+00	0.51	2.31E+00	0.70	2.30E+00	0.36	2.31E+00	0.75	2.29E+00	0.12	2.30E+00	0.41	2.32E+00	0.89
0.79	4.20E+00	4.22E+00	0.53	4.23E+00	0.89	4.26E+00	1.39	4.22E+00	0.48	4.24E+00	1.01	4.20E+00	0.15	4.22E+00	0.54	4.27E+00	1.66
0.84	7.10E+00	7.15E+00	0.64	7.19E+00	1.27	7.24E+00	1.91	7.14E+00	0.60	7.19E+00	1.27	7.14E+00	0.53	7.15E+00	0.65	7.26E+00	2.19
0.89	1.13E+01	1.14E+01	0.67	1.15E+01	1.52	1.15E+01	2.10	1.14E+01	0.66	1.15E+01	1.42	1.14E+01	0.87	1.14E+01	0.67	1.16E+01	2.35
0.94	1.72E+01	1.73E+01	0.53	1.74E+01	1.38	1.75E+01	1.77	1.73E+01	0.56	1.74E+01	1.26	1.74E+01	0.94	1.73E+01	0.52	1.75E+01	1.93
0.99	2.53E+01	2.53E+01	0.12	2.54E+01	0.41	2.54E+01	0.49	2.54E+01	0.16	2.54E+01	0.39	2.54E+01	0.33	2.53E+01	0.11	2.54E+01	0.52
DAM(%)			1.07		1.37		1.66		1.05		1.43		2.18		1.07		2.23

2-methyl-3-ethylbutane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	1.35E-03	1.30E-03	3.28	1.29E-03	4.37	1.34E-03	0.59	1.30E-03	3.23	1.28E-03	4.54	1.56E-03	15.60	1.30E-03	3.26	1.30E-03	3.21
0.49	1.00E-02	9.84E-03	1.79	9.84E-03	1.81	9.80E-03	2.14	9.84E-03	1.73	9.82E-03	1.96	1.08E-02	7.76	9.84E-03	1.77	9.64E-03	3.76
0.54	4.80E-02	4.76E-02	0.85	4.77E-02	0.73	4.69E-02	2.26	4.77E-02	0.78	4.77E-02	0.68	4.98E-02	3.58	4.76E-02	0.84	4.65E-02	3.21
0.59	1.68E-01	1.67E-01	0.32	1.67E-01	0.33	1.65E-01	1.77	1.68E-01	0.27	1.68E-01	0.10	1.70E-01	1.35	1.67E-01	0.31	1.64E-01	2.25
0.64	4.66E-01	4.65E-01	0.06	4.65E-01	0.16	4.61E-01	1.06	4.66E-01	0.03	4.67E-01	0.16	4.67E-01	0.20	4.66E-01	0.05	4.60E-01	1.22
0.69	1.09E+00	1.09E+00	0.08	1.09E+00	0.01	1.08E+00	0.29	1.09E+00	0.07	1.09E+00	0.33	1.08E+00	0.28	1.09E+00	0.09	1.08E+00	0.23
0.74	2.21E+00	2.22E+00	0.18	2.22E+00	0.28	2.22E+00	0.47	2.22E+00	0.15	2.23E+00	0.53	2.21E+00	0.32	2.22E+00	0.19	2.23E+00	0.67
0.79	4.08E+00	4.09E+00	0.30	4.11E+00	0.66	4.13E+00	1.16	4.09E+00	0.25	4.11E+00	0.79	4.08E+00	0.07	4.09E+00	0.31	4.14E+00	1.43
0.84	6.94E+00	6.97E+00	0.41	7.01E+00	1.06	7.06E+00	1.69	6.97E+00	0.37	7.01E+00	1.06	6.96E+00	0.32	6.97E+00	0.42	7.08E+00	1.97
0.89	1.11E+01	1.12E+01	0.47	1.13E+01	1.34	1.13E+01	1.92	1.12E+01	0.45	1.12E+01	1.24	1.12E+01	0.68	1.12E+01	0.47	1.13E+01	2.17
0.94	1.70E+01	1.70E+01	0.39	1.72E+01	1.26	1.72E+01	1.65	1.70E+01	0.41	1.71E+01	1.13	1.71E+01	0.81	1.70E+01	0.38	1.73E+01	1.81
0.99	2.50E+01	2.51E+01	0.08	2.51E+01	0.39	2.51E+01	0.46	2.51E+01	0.12	2.51E+01	0.36	2.51E+01	0.30	2.50E+01	0.08	2.52E+01	0.49
DAM(%)			0.68		1.03		1.29		0.66		1.07		2.61		0.68		1.87

3-methyl-3-ethylbutane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.44	1.91E-03	1.75E-03	8.39	1.74E-03	9.17	1.79E-03	6.36	1.75E-03	8.35	1.73E-03	9.32	2.07E-03	8.09	1.75E-03	8.37	1.74E-03	8.78
0.49	1.30E-02	1.24E-02	4.47	1.25E-02	4.31	1.24E-02	4.99	1.24E-02	4.42	1.24E-02	4.45	1.36E-02	4.09	1.24E-02	4.46	1.22E-02	6.53
0.54	5.87E-02	5.75E-02	2.12	5.76E-02	1.85	5.67E-02	3.51	5.75E-02	2.06	5.77E-02	1.82	5.98E-02	1.90	5.75E-02	2.11	5.61E-02	4.44

0.59	1.91E-01	1.90E-01	0.39	1.90E-01	0.27	1.88E-01	1.78	1.90E-01	0.35	1.91E-01	0.07	1.93E-01	1.11	1.90E-01	0.38	1.87E-01	2.26
0.64	5.15E-01	5.15E-01	0.07	5.15E-01	0.08	5.10E-01	1.00	5.15E-01	0.05	5.16E-01	0.22	5.16E-01	0.11	5.15E-01	0.06	5.09E-01	1.16
0.69	1.18E+00	1.18E+00	0.07	1.18E+00	0.06	1.17E+00	0.24	1.18E+00	0.06	1.18E+00	0.36	1.17E+00	0.32	1.18E+00	0.08	1.17E+00	0.19
0.74	2.36E+00	2.36E+00	0.12	2.37E+00	0.24	2.37E+00	0.44	2.36E+00	0.09	2.37E+00	0.47	2.35E+00	0.40	2.36E+00	0.13	2.38E+00	0.62
0.79	4.30E+00	4.30E+00	0.13	4.32E+00	0.49	4.34E+00	1.00	4.30E+00	0.09	4.32E+00	0.60	4.29E+00	0.25	4.30E+00	0.14	4.35E+00	1.25
0.84	7.24E+00	7.25E+00	0.14	7.30E+00	0.76	7.34E+00	1.39	7.25E+00	0.10	7.30E+00	0.75	7.24E+00	0.03	7.25E+00	0.15	7.36E+00	1.66
0.89	1.15E+01	1.15E+01	0.13	1.16E+01	0.95	1.17E+01	1.54	1.15E+01	0.12	1.16E+01	0.86	1.15E+01	0.32	1.15E+01	0.13	1.17E+01	1.78
0.94	1.74E+01	1.74E+01	0.08	1.76E+01	0.91	1.76E+01	1.30	1.74E+01	0.12	1.75E+01	0.79	1.75E+01	0.48	1.74E+01	0.08	1.77E+01	1.46
0.99	2.55E+01	2.55E+01	0.00	2.55E+01	0.29	2.55E+01	0.36	2.55E+01	0.04	2.55E+01	0.26	2.55E+01	0.21	2.55E+01	0.01	2.56E+01	0.39
	DAM(%)		0.21		0.48		1.14		0.19		0.50		0.63		0.21		1.41

2,2,3,4-tetramethylpentane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.56	8.56E-02	8.52E-02	0.47	8.54E-02	0.31	8.39E-02	1.96	8.53E-02	0.42	8.55E-02	0.19	8.77E-02	2.47	8.52E-02	0.46	8.33E-02	2.70
0.61	2.65E-01	2.65E-01	0.02	2.65E-01	0.00	2.62E-01	1.28	2.65E-01	0.02	2.66E-01	0.26	2.67E-01	0.88	2.65E-01	0.01	2.61E-01	1.62
0.66	6.72E-01	6.73E-01	0.14	6.72E-01	0.08	6.68E-01	0.58	6.73E-01	0.15	6.74E-01	0.40	6.72E-01	0.04	6.73E-01	0.15	6.67E-01	0.65
0.71	1.46E+00	1.46E+00	0.20	1.46E+00	0.22	1.46E+00	0.13	1.46E+00	0.18	1.47E+00	0.50	1.46E+00	0.27	1.46E+00	0.21	1.46E+00	0.25
0.76	2.83E+00	2.83E+00	0.28	2.84E+00	0.49	2.85E+00	0.83	2.83E+00	0.25	2.85E+00	0.68	2.82E+00	0.20	2.83E+00	0.30	2.86E+00	1.05
0.81	4.99E+00	5.01E+00	0.41	5.04E+00	0.88	5.07E+00	1.46	5.01E+00	0.36	5.04E+00	0.95	5.00E+00	0.13	5.01E+00	0.42	5.08E+00	1.73
0.86	8.22E+00	8.27E+00	0.53	8.33E+00	1.26	8.38E+00	1.89	8.26E+00	0.50	8.32E+00	1.21	8.27E+00	0.54	8.27E+00	0.53	8.40E+00	2.16
0.91	1.28E+01	1.29E+01	0.55	1.30E+01	1.43	1.31E+01	1.96	1.29E+01	0.56	1.30E+01	1.32	1.29E+01	0.86	1.29E+01	0.55	1.31E+01	2.17
0.96	1.92E+01	1.93E+01	0.37	1.94E+01	1.10	1.95E+01	1.37	1.93E+01	0.41	1.94E+01	1.00	1.93E+01	0.78	1.93E+01	0.36	1.95E+01	1.49
	DAM(%)		0.33		0.64		1.27		0.32		0.72		0.69		0.33		1.54

2,2,4,4-tetramethylpentane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.55	6.42E-02	6.34E-02	1.25	6.36E-02	1.05	6.25E-02	2.71	6.35E-02	1.19	6.36E-02	0.98	6.57E-02	2.25	6.34E-02	1.24	6.20E-02	3.54
0.60	2.08E-01	2.07E-01	0.55	2.07E-01	0.50	2.04E-01	1.89	2.07E-01	0.51	2.07E-01	0.27	2.09E-01	0.65	2.07E-01	0.54	2.03E-01	2.29
0.65	5.45E-01	5.44E-01	0.23	5.43E-01	0.27	5.39E-01	1.06	5.44E-01	0.21	5.45E-01	0.04	5.44E-01	0.19	5.44E-01	0.22	5.39E-01	1.17
0.70	1.22E+00	1.22E+00	0.01	1.22E+00	0.02	1.21E+00	0.21	1.22E+00	0.02	1.22E+00	0.28	1.21E+00	0.44	1.22E+00	0.00	1.21E+00	0.12
0.75	2.40E+00	2.40E+00	0.24	2.41E+00	0.40	2.41E+00	0.67	2.40E+00	0.20	2.41E+00	0.61	2.39E+00	0.26	2.40E+00	0.25	2.42E+00	0.88
0.80	4.29E+00	4.32E+00	0.53	4.33E+00	0.94	4.36E+00	1.49	4.31E+00	0.48	4.34E+00	1.03	4.30E+00	0.19	4.32E+00	0.54	4.37E+00	1.76
0.85	7.15E+00	7.20E+00	0.79	7.25E+00	1.47	7.30E+00	2.11	7.20E+00	0.76	7.25E+00	1.45	7.20E+00	0.74	7.20E+00	0.80	7.32E+00	2.39
0.90	1.12E+01	1.13E+01	0.90	1.14E+01	1.77	1.15E+01	2.33	1.13E+01	0.90	1.14E+01	1.66	1.14E+01	1.16	1.13E+01	0.90	1.15E+01	2.56
0.95	1.70E+01	1.71E+01	0.71	1.72E+01	1.51	1.73E+01	1.85	1.71E+01	0.75	1.72E+01	1.40	1.71E+01	1.13	1.71E+01	0.70	1.73E+01	1.99
	DAM(%)		0.58		0.88		1.59		0.56		0.86		0.78		0.58		1.85

2,3,3,4-tetramethylpentane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.55	7.00E-02	6.89E-02	1.48	6.91E-02	1.29	6.79E-02	2.93	6.90E-02	1.42	6.91E-02	1.21	7.14E-02	2.02	6.89E-02	1.47	6.73E-02	3.76

0.58	2.28E-01	2.18E-01	4.41	2.19E-01	4.13	2.15E-01	5.75	2.18E-01	4.36	2.19E-01	3.98	2.22E-01	2.76	2.18E-01	4.40	2.14E-01	6.28
0.63	6.10E-01	5.95E-01	2.43	5.96E-01	2.31	5.89E-01	3.37	5.95E-01	2.40	5.97E-01	2.06	5.97E-01	2.11	5.95E-01	2.42	5.88E-01	3.58
0.68	1.38E+00	1.37E+00	0.95	1.37E+00	0.89	1.36E+00	1.31	1.37E+00	0.95	1.37E+00	0.62	1.36E+00	1.26	1.37E+00	0.94	1.36E+00	1.30
0.73	2.75E+00	2.76E+00	0.13	2.76E+00	0.26	2.77E+00	0.37	2.76E+00	0.10	2.77E+00	0.47	2.74E+00	0.37	2.76E+00	0.14	2.77E+00	0.52
0.78	4.99E+00	5.03E+00	0.87	5.05E+00	1.18	5.07E+00	1.65	5.03E+00	0.83	5.06E+00	1.30	5.01E+00	0.45	5.03E+00	0.88	5.08E+00	1.89
0.83	8.39E+00	8.50E+00	1.30	8.54E+00	1.85	8.60E+00	2.49	8.49E+00	1.27	8.54E+00	1.85	8.48E+00	1.13	8.50E+00	1.31	8.62E+00	2.76
0.88	1.33E+01	1.35E+01	1.42	1.36E+01	2.17	1.37E+01	2.80	1.35E+01	1.41	1.36E+01	2.09	1.35E+01	1.54	1.35E+01	1.42	1.37E+01	3.05
0.93	2.02E+01	2.04E+01	1.17	2.06E+01	1.98	2.07E+01	2.44	2.04E+01	1.20	2.05E+01	1.86	2.05E+01	1.53	2.04E+01	1.16	2.07E+01	2.61
0.98	2.96E+01	2.98E+01	0.46	2.99E+01	0.91	3.00E+01	1.06	2.98E+01	0.51	2.99E+01	0.86	2.99E+01	0.76	2.98E+01	0.45	3.00E+01	1.12
DAM(%)			2.01		2.22		2.95		2.00		2.17		1.48		2.01		3.24

1,2-dimethylcyclopentane-cis

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.53	6.66E-02	6.48E-02	2.58	6.52E-02	2.10	6.39E-02	3.96	6.49E-02	2.52	6.52E-02	2.11	6.77E-02	1.69	6.49E-02	2.57	6.33E-02	4.97
0.58	2.25E-01	2.22E-01	1.54	2.22E-01	1.23	2.19E-01	2.91	2.22E-01	1.49	2.23E-01	1.08	2.26E-01	0.15	2.22E-01	1.53	2.17E-01	3.45
0.63	6.08E-01	6.03E-01	0.79	6.04E-01	0.66	5.97E-01	1.74	6.03E-01	0.77	6.05E-01	0.41	6.05E-01	0.47	6.03E-01	0.79	5.96E-01	1.96
0.68	1.38E+00	1.38E+00	0.16	1.38E+00	0.09	1.38E+00	0.52	1.38E+00	0.17	1.39E+00	0.17	1.38E+00	0.47	1.38E+00	0.15	1.38E+00	0.51
0.73	2.77E+00	2.78E+00	0.44	2.78E+00	0.57	2.79E+00	0.69	2.78E+00	0.41	2.79E+00	0.79	2.77E+00	0.06	2.78E+00	0.45	2.79E+00	0.84
0.78	5.01E+00	5.06E+00	1.00	5.08E+00	1.31	5.10E+00	1.79	5.06E+00	0.96	5.08E+00	1.43	5.04E+00	0.59	5.06E+00	1.01	5.11E+00	2.03
0.83	8.41E+00	8.53E+00	1.45	8.58E+00	2.00	8.63E+00	2.64	8.53E+00	1.42	8.58E+00	2.00	8.52E+00	1.28	8.53E+00	1.46	8.65E+00	2.91
0.88	1.33E+01	1.35E+01	1.67	1.36E+01	2.42	1.37E+01	3.05	1.35E+01	1.66	1.36E+01	2.33	1.35E+01	1.79	1.35E+01	1.67	1.37E+01	3.29
0.93	2.01E+01	2.04E+01	1.47	2.06E+01	2.28	2.07E+01	2.73	2.04E+01	1.50	2.06E+01	2.16	2.05E+01	1.82	2.04E+01	1.46	2.07E+01	2.90
0.98	2.96E+01	2.98E+01	0.62	2.99E+01	1.08	3.00E+01	1.23	2.98E+01	0.67	2.99E+01	1.02	2.99E+01	0.93	2.98E+01	0.61	3.00E+01	1.29
DAM(%)			1.17		1.37		2.13		1.16		1.35		0.93		1.17		2.42

1,2-dimethylcyclopentane-trans

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.54	8.76E-02	8.48E-02	3.18	8.52E-02	2.74	8.35E-02	4.60	8.48E-02	3.13	8.52E-02	2.71	8.79E-02	0.41	8.48E-02	3.18	8.27E-02	5.50
0.59	2.81E-01	2.75E-01	1.91	2.76E-01	1.64	2.72E-01	3.21	2.75E-01	1.87	2.77E-01	1.47	2.79E-01	0.58	2.75E-01	1.90	2.70E-01	3.68
0.64	7.27E-01	7.20E-01	0.86	7.21E-01	0.75	7.14E-01	1.69	7.21E-01	0.84	7.23E-01	0.49	7.21E-01	0.71	7.20E-01	0.85	7.13E-01	1.86
0.69	1.61E+00	1.60E+00	0.15	1.60E+00	0.08	1.60E+00	0.38	1.60E+00	0.16	1.61E+00	0.18	1.60E+00	0.53	1.60E+00	0.14	1.60E+00	0.34
0.74	3.15E+00	3.16E+00	0.24	3.16E+00	0.40	3.17E+00	0.60	3.16E+00	0.21	3.17E+00	0.59	3.14E+00	0.26	3.16E+00	0.25	3.17E+00	0.78
0.79	5.63E+00	5.65E+00	0.38	5.67E+00	0.73	5.70E+00	1.25	5.65E+00	0.34	5.68E+00	0.83	5.63E+00	0.01	5.65E+00	0.39	5.71E+00	1.50
0.84	9.36E+00	9.40E+00	0.36	9.45E+00	0.94	9.51E+00	1.59	9.39E+00	0.33	9.45E+00	0.93	9.39E+00	0.24	9.40E+00	0.37	9.54E+00	1.85
0.89	1.47E+01	1.47E+01	0.24	1.49E+01	1.01	1.49E+01	1.61	1.47E+01	0.24	1.48E+01	0.91	1.48E+01	0.41	1.47E+01	0.24	1.50E+01	1.84
0.94	2.21E+01	2.21E+01	0.08	2.23E+01	0.85	2.24E+01	1.25	2.21E+01	0.12	2.22E+01	0.74	2.22E+01	0.46	2.21E+01	0.07	2.24E+01	1.40
0.99	3.20E+01	3.20E+01	0.02	3.21E+01	0.25	3.21E+01	0.33	3.20E+01	0.02	3.21E+01	0.23	3.21E+01	0.18	3.20E+01	0.03	3.21E+01	0.36
DAM(%)			0.74		0.94		1.65		0.72		0.91		0.38		0.74		1.91

Ethylcyclopentane

		DAM(%)	3.99	4.03	3.24	4.00	4.05	4.64	3.99	3.02									
1-methyl-1-ethylcyclopentane																			
TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)		
	0.53	5.75E-02	6.31E-02	9.80	6.35E-02	10.45	6.22E-02	8.16	6.31E-02	9.86	6.35E-02	10.44	6.57E-02	14.35	6.31E-02	9.81	6.15E-02	7.03	
	0.58	1.98E-01	2.10E-01	6.14	2.11E-01	6.57	2.07E-01	4.68	2.10E-01	6.19	2.11E-01	6.72	2.14E-01	7.87	2.10E-01	6.15	2.06E-01	4.10	
	0.63	5.43E-01	5.60E-01	3.17	5.62E-01	3.39	5.55E-01	2.24	5.61E-01	3.20	5.63E-01	3.63	5.62E-01	3.50	5.61E-01	3.18	5.54E-01	2.01	
	0.68	1.25E+00	1.26E+00	1.04	1.27E+00	1.15	1.26E+00	0.73	1.26E+00	1.03	1.27E+00	1.40	1.26E+00	0.75	1.26E+00	1.05	1.26E+00	0.73	
	0.73	2.52E+00	2.51E+00	0.30	2.52E+00	0.14	2.52E+00	0.02	2.51E+00	0.33	2.52E+00	0.05	2.50E+00	0.76	2.51E+00	0.29	2.53E+00	0.13	
	0.78	4.58E+00	4.54E+00	0.95	4.55E+00	0.64	4.57E+00	0.16	4.53E+00	0.99	4.55E+00	0.54	4.52E+00	1.32	4.54E+00	0.94	4.58E+00	0.06	
	0.83	7.66E+00	7.58E+00	1.07	7.62E+00	0.56	7.67E+00	0.09	7.58E+00	1.10	7.62E+00	0.56	7.57E+00	1.23	7.58E+00	1.06	7.69E+00	0.34	
	0.88	1.20E+01	1.19E+01	0.85	1.20E+01	0.15	1.21E+01	0.48	1.19E+01	0.86	1.20E+01	0.23	1.20E+01	0.73	1.19E+01	0.85	1.21E+01	0.71	
	0.93	1.80E+01	1.79E+01	0.48	1.81E+01	0.28	1.82E+01	0.74	1.80E+01	0.45	1.81E+01	0.17	1.80E+01	0.14	1.79E+01	0.49	1.82E+01	0.90	
	0.98	2.61E+01	2.60E+01	0.12	2.61E+01	0.31	2.62E+01	0.46	2.60E+01	0.07	2.61E+01	0.26	2.61E+01	0.17	2.60E+01	0.13	2.62E+01	0.52	
		DAM(%)	2.39	2.37	1.78	2.41	2.40	3.08	2.39	1.65									
n-propylcyclopentane																			
TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)		
	0.54	6.58E-02	5.15E-02	21.72	5.15E-02	21.65	5.07E-02	22.84	5.15E-02	21.67	5.16E-02	21.62	5.38E-02	18.17	5.15E-02	21.71	5.03E-02	23.59	
	0.59	2.23E-01	1.82E-01	18.33	1.82E-01	18.35	1.80E-01	19.53	1.82E-01	18.29	1.83E-01	18.16	1.85E-01	16.93	1.82E-01	18.32	1.79E-01	19.92	
	0.64	6.05E-01	5.09E-01	15.89	5.08E-01	15.99	5.04E-01	16.75	5.09E-01	15.87	5.10E-01	15.72	5.10E-01	15.67	5.09E-01	15.88	5.03E-01	16.89	
	0.69	1.38E+00	1.19E+00	13.60	1.19E+00	13.67	1.19E+00	13.93	1.19E+00	13.61	1.20E+00	13.39	1.19E+00	13.91	1.19E+00	13.59	1.19E+00	13.88	
	0.74	2.75E+00	2.44E+00	11.10	2.44E+00	11.01	2.45E+00	10.84	2.44E+00	11.12	2.45E+00	10.79	2.43E+00	11.53	2.44E+00	11.09	2.45E+00	10.67	
	0.79	4.93E+00	4.52E+00	8.33	4.53E+00	8.00	4.55E+00	7.53	4.51E+00	8.37	4.54E+00	7.87	4.50E+00	8.65	4.52E+00	8.32	4.57E+00	7.29	
	0.84	8.15E+00	7.71E+00	5.45	7.76E+00	4.83	7.81E+00	4.24	7.71E+00	5.49	7.76E+00	4.83	7.70E+00	5.53	7.71E+00	5.44	7.83E+00	3.97	
	0.89	1.27E+01	1.24E+01	2.78	1.25E+01	1.93	1.25E+01	1.36	1.24E+01	2.79	1.25E+01	2.02	1.24E+01	2.56	1.24E+01	2.78	1.26E+01	1.12	
	0.94	1.90E+01	1.89E+01	0.74	1.90E+01	0.13	1.91E+01	0.52	1.89E+01	0.71	1.90E+01	0.01	1.90E+01	0.31	1.89E+01	0.74	1.92E+01	0.68	
	0.99	2.78E+01	2.78E+01	0.09	2.79E+01	0.40	2.79E+01	0.47	2.78E+01	0.13	2.79E+01	0.37	2.79E+01	0.31	2.78E+01	0.09	2.79E+01	0.50	
		DAM(%)	9.80	9.60	9.80	9.81	9.48	9.36	9.80	9.85									
isopropylcyclopentane																			
TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)		
	0.53	5.94E-02	6.68E-02	12.49	6.73E-02	13.23	6.58E-02	10.77	6.69E-02	12.56	6.73E-02	13.21	6.95E-02	17.02	6.69E-02	12.50	6.51E-02	9.62	
	0.58	2.04E-01	2.20E-01	7.72	2.21E-01	8.21	2.17E-01	6.25	2.20E-01	7.78	2.21E-01	8.36	2.23E-01	9.44	2.20E-01	7.73	2.16E-01	5.66	
	0.63	5.58E-01	5.80E-01	3.83	5.81E-01	4.08	5.75E-01	2.91	5.80E-01	3.85	5.82E-01	4.31	5.82E-01	4.16	5.80E-01	3.83	5.73E-01	2.68	
	0.68	1.28E+00	1.30E+00	1.06	1.30E+00	1.21	1.29E+00	0.78	1.30E+00	1.06	1.30E+00	1.44	1.29E+00	0.80	1.30E+00	1.07	1.29E+00	0.78	
	0.73	2.58E+00	2.56E+00	0.60	2.57E+00	0.43	2.57E+00	0.30	2.56E+00	0.62	2.57E+00	0.24	2.55E+00	1.03	2.56E+00	0.59	2.57E+00	0.16	
	0.78	4.66E+00	4.60E+00	1.33	4.61E+00	1.03	4.64E+00	0.54	4.60E+00	1.37	4.62E+00	0.93	4.58E+00	1.69	4.60E+00	1.32	4.65E+00	0.32	
	0.83	7.77E+00	7.66E+00	1.38	7.70E+00	0.88	7.75E+00	0.22	7.66E+00	1.40	7.70E+00	0.88	7.65E+00	1.52	7.66E+00	1.37	7.77E+00	0.02	
	0.88	1.21E+01	1.20E+01	1.00	1.21E+01	0.31	1.22E+01	0.33	1.20E+01	1.00	1.21E+01	0.40	1.20E+01	0.87	1.20E+01	1.00	1.22E+01	0.55	

E-24

0.83	7.67E+00	7.57E+00	1.22	7.61E+00	0.72	7.66E+00	0.06	7.57E+00	1.25	7.61E+00	0.72	7.56E+00	1.36	7.57E+00	1.21	7.68E+00	0.18
0.88	1.20E+01	1.19E+01	1.05	1.20E+01	0.37	1.20E+01	0.27	1.19E+01	1.06	1.19E+01	0.46	1.19E+01	0.93	1.19E+01	1.05	1.21E+01	0.49
0.93	1.79E+01	1.78E+01	0.71	1.79E+01	0.03	1.80E+01	0.49	1.78E+01	0.67	1.79E+01	0.08	1.78E+01	0.37	1.78E+01	0.72	1.80E+01	0.65
0.98	2.58E+01	2.57E+01	0.25	2.58E+01	0.17	2.59E+01	0.33	2.57E+01	0.20	2.58E+01	0.12	2.58E+01	0.04	2.57E+01	0.26	2.59E+01	0.38
	DAM(%)		1.71		1.62		0.97		1.72		1.66		2.33		1.71		0.80

1,2-dimethylcyclohexane-cis

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.53	6.02E-02	6.75E-02	12.17	6.80E-02	12.93	6.64E-02	10.43	6.75E-02	12.24	6.79E-02	12.92	7.02E-02	16.63	6.75E-02	12.18	6.58E-02	9.29
0.58	2.06E-01	2.21E-01	7.37	2.22E-01	7.88	2.18E-01	5.90	2.21E-01	7.42	2.22E-01	8.02	2.24E-01	9.07	2.21E-01	7.38	2.16E-01	5.31
0.63	5.59E-01	5.80E-01	3.75	5.81E-01	4.02	5.75E-01	2.85	5.80E-01	3.78	5.82E-01	4.25	5.82E-01	4.09	5.80E-01	3.76	5.73E-01	2.62
0.68	1.28E+00	1.29E+00	1.26	1.30E+00	1.41	1.29E+00	0.98	1.29E+00	1.26	1.30E+00	1.64	1.29E+00	1.00	1.29E+00	1.27	1.29E+00	0.98
0.73	2.56E+00	2.55E+00	0.27	2.55E+00	0.09	2.56E+00	0.05	2.55E+00	0.29	2.56E+00	0.09	2.54E+00	0.69	2.55E+00	0.25	2.56E+00	0.19
0.78	4.61E+00	4.56E+00	1.00	4.58E+00	0.69	4.60E+00	0.20	4.56E+00	1.03	4.58E+00	0.60	4.55E+00	1.35	4.56E+00	0.99	4.61E+00	0.02
0.83	7.67E+00	7.59E+00	1.14	7.63E+00	0.65	7.68E+00	0.01	7.58E+00	1.17	7.62E+00	0.65	7.58E+00	1.28	7.59E+00	1.14	7.69E+00	0.26
0.88	1.20E+01	1.19E+01	0.91	1.20E+01	0.24	1.21E+01	0.41	1.19E+01	0.92	1.20E+01	0.32	1.19E+01	0.79	1.19E+01	0.91	1.21E+01	0.63
0.93	1.79E+01	1.78E+01	0.52	1.79E+01	0.22	1.80E+01	0.69	1.78E+01	0.48	1.79E+01	0.11	1.79E+01	0.18	1.78E+01	0.52	1.80E+01	0.85
0.98	2.57E+01	2.57E+01	0.13	2.58E+01	0.29	2.59E+01	0.45	2.57E+01	0.08	2.58E+01	0.24	2.58E+01	0.16	2.57E+01	0.14	2.59E+01	0.50
	DAM(%)		2.85		2.84		2.20		2.87		2.88		3.52		2.85		2.06

E-26
n-propylcyclohexane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.55	8.07E-02	9.44E-02	16.89	9.48E-02	17.47	9.30E-02	15.15	9.44E-02	16.96	9.49E-02	17.54	9.72E-02	20.42	9.44E-02	16.90	9.22E-02	14.19
0.60	2.63E-01	2.88E-01	9.67	2.89E-01	9.98	2.85E-01	8.33	2.88E-01	9.72	2.89E-01	10.19	2.91E-01	10.79	2.88E-01	9.68	2.83E-01	7.89
0.65	6.90E-01	7.20E-01	4.29	7.20E-01	4.42	7.15E-01	3.56	7.20E-01	4.30	7.22E-01	4.68	7.20E-01	4.29	7.20E-01	4.30	7.14E-01	3.44
0.70	1.53E+00	1.55E+00	0.82	1.55E+00	0.92	1.54E+00	0.74	1.55E+00	0.81	1.55E+00	1.16	1.54E+00	0.41	1.55E+00	0.83	1.55E+00	0.81
0.75	2.99E+00	2.96E+00	0.98	2.97E+00	0.78	2.98E+00	0.50	2.96E+00	1.02	2.97E+00	0.62	2.95E+00	1.44	2.96E+00	0.97	2.98E+00	0.31
0.80	5.27E+00	5.19E+00	1.52	5.21E+00	1.13	5.24E+00	0.57	5.19E+00	1.55	5.21E+00	1.07	5.17E+00	1.82	5.19E+00	1.51	5.25E+00	0.33
0.85	8.59E+00	8.48E+00	1.22	8.54E+00	0.61	8.59E+00	0.04	8.48E+00	1.24	8.53E+00	0.65	8.48E+00	1.27	8.48E+00	1.21	8.61E+00	0.29
0.90	1.32E+01	1.31E+01	0.54	1.32E+01	0.23	1.33E+01	0.80	1.31E+01	0.53	1.32E+01	0.12	1.32E+01	0.31	1.31E+01	0.54	1.33E+01	1.01
0.95	1.95E+01	1.95E+01	0.05	1.96E+01	0.77	1.97E+01	1.12	1.95E+01	0.10	1.96E+01	0.66	1.95E+01	0.43	1.95E+01	0.05	1.97E+01	1.24
	DAM(%)		4.00		4.04		3.42		4.03		4.08		4.58		4.00		3.28

isopropylcyclohexane

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.54	6.95E-02	8.31E-02	19.50	8.36E-02	20.28	8.18E-02	17.65	8.31E-02	19.57	8.36E-02	20.29	8.59E-02	23.55	8.31E-02	19.51	8.10E-02	16.56
0.59	2.33E-01	2.59E-01	11.12	2.60E-01	11.59	2.55E-01	9.69	2.59E-01	11.17	2.60E-01	11.76	2.62E-01	12.52	2.59E-01	11.13	2.54E-01	9.17
0.64	6.25E-01	6.56E-01	4.94	6.58E-01	5.18	6.51E-01	4.15	6.56E-01	4.96	6.59E-01	5.41	6.57E-01	5.12	6.56E-01	4.95	6.50E-01	3.97
0.69	1.41E+00	1.43E+00	0.95	1.43E+00	1.09	1.42E+00	0.79	1.43E+00	0.94	1.43E+00	1.32	1.42E+00	0.63	1.43E+00	0.96	1.42E+00	0.83
0.74	2.78E+00	2.75E+00	1.19	2.76E+00	1.00	2.76E+00	0.78	2.75E+00	1.22	2.76E+00	0.83	2.74E+00	1.61	2.75E+00	1.18	2.77E+00	0.62

0.74	2.54E+00	2.52E+00	0.93	2.52E+00	0.75	2.53E+00	0.54	2.52E+00	0.96	2.53E+00	0.57	2.51E+00	1.39	2.52E+00	0.92	2.53E+00	0.37
0.79	4.54E+00	4.47E+00	1.66	4.48E+00	1.32	4.51E+00	0.80	4.47E+00	1.70	4.49E+00	1.24	4.45E+00	2.00	4.47E+00	1.65	4.52E+00	0.56
0.84	7.49E+00	7.38E+00	1.46	7.42E+00	0.91	7.47E+00	0.25	7.38E+00	1.49	7.42E+00	0.92	7.37E+00	1.56	7.38E+00	1.45	7.49E+00	0.00
0.89	1.16E+01	1.15E+01	0.77	1.16E+01	0.04	1.17E+01	0.57	1.15E+01	0.77	1.16E+01	0.13	1.15E+01	0.60	1.15E+01	0.77	1.17E+01	0.79
0.94	1.72E+01	1.72E+01	0.08	1.73E+01	0.66	1.74E+01	1.07	1.72E+01	0.04	1.73E+01	0.55	1.72E+01	0.29	1.72E+01	0.09	1.74E+01	1.22
0.99	2.48E+01	2.48E+01	0.10	2.48E+01	0.36	2.49E+01	0.44	2.48E+01	0.14	2.48E+01	0.34	2.48E+01	0.29	2.48E+01	0.09	2.49E+01	0.47
	DAM(%)		4.10		4.14		3.54		4.12		4.18		4.76		4.10		3.34

Benzene

TR

	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.51	7.28E-02	7.49E-02	2.88	7.55E-02	3.76	7.36E-02	1.16	7.49E-02	2.94	7.55E-02	3.68	7.87E-02	8.05	7.49E-02	2.89	7.27E-02	0.12
0.56	2.60E-01	2.63E-01	1.00	2.65E-01	1.70	2.59E-01	0.55	2.63E-01	1.05	2.65E-01	1.76	2.69E-01	3.26	2.63E-01	1.00	2.57E-01	1.27
0.61	7.28E-01	7.28E-01	0.01	7.31E-01	0.42	7.20E-01	1.07	7.28E-01	0.02	7.32E-01	0.59	7.33E-01	0.72	7.28E-01	0.01	7.18E-01	1.41
0.66	1.70E+00	1.69E+00	0.51	1.69E+00	0.26	1.68E+00	0.97	1.69E+00	0.51	1.70E+00	0.06	1.69E+00	0.54	1.69E+00	0.51	1.68E+00	1.05
0.71	3.45E+00	3.42E+00	0.69	3.43E+00	0.50	3.43E+00	0.55	3.42E+00	0.71	3.44E+00	0.32	3.41E+00	1.01	3.42E+00	0.68	3.43E+00	0.47
0.76	6.31E+00	6.27E+00	0.65	6.28E+00	0.40	6.31E+00	0.01	6.27E+00	0.68	6.29E+00	0.28	6.25E+00	0.99	6.27E+00	0.64	6.32E+00	0.19
0.81	1.07E+01	1.06E+01	0.48	1.06E+01	0.08	1.07E+01	0.57	1.06E+01	0.51	1.06E+01	0.05	1.06E+01	0.67	1.06E+01	0.47	1.07E+01	0.81
0.86	1.69E+01	1.68E+01	0.26	1.69E+01	0.33	1.70E+01	1.03	1.68E+01	0.27	1.69E+01	0.27	1.68E+01	0.21	1.68E+01	0.25	1.71E+01	1.26
0.91	2.54E+01	2.54E+01	0.06	2.56E+01	0.64	2.58E+01	1.22	2.54E+01	0.03	2.56E+01	0.54	2.55E+01	0.22	2.54E+01	0.06	2.58E+01	1.41
0.96	3.70E+01	3.70E+01	0.03	3.72E+01	0.63	3.73E+01	0.93	3.70E+01	0.09	3.72E+01	0.54	3.71E+01	0.40	3.70E+01	0.03	3.73E+01	1.03
	DAM(%)		0.66		0.87		0.81		0.68		0.81		1.61		0.65		0.90

E-28

Toluene

TR

	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.52	6.10E-02	6.06E-02	0.65	6.09E-02	0.12	5.97E-02	2.01	6.06E-02	0.59	6.09E-02	0.17	6.36E-02	4.37	6.06E-02	0.64	5.90E-02	3.16
0.57	2.17E-01	2.17E-01	0.18	2.18E-01	0.20	2.14E-01	1.62	2.17E-01	0.13	2.18E-01	0.32	2.22E-01	1.90	2.17E-01	0.18	2.12E-01	2.25
0.62	6.10E-01	6.10E-01	0.09	6.11E-01	0.28	6.04E-01	0.95	6.10E-01	0.12	6.13E-01	0.51	6.13E-01	0.61	6.10E-01	0.10	6.02E-01	1.23
0.67	1.43E+00	1.43E+00	0.23	1.44E+00	0.32	1.43E+00	0.24	1.43E+00	0.23	1.44E+00	0.58	1.43E+00	0.01	1.43E+00	0.24	1.43E+00	0.27
0.72	2.93E+00	2.94E+00	0.30	2.95E+00	0.42	2.95E+00	0.45	2.94E+00	0.28	2.95E+00	0.65	2.93E+00	0.17	2.94E+00	0.31	2.95E+00	0.58
0.77	5.42E+00	5.44E+00	0.36	5.45E+00	0.63	5.48E+00	1.05	5.44E+00	0.32	5.46E+00	0.76	5.41E+00	0.07	5.44E+00	0.37	5.49E+00	1.27
0.82	9.23E+00	9.27E+00	0.41	9.31E+00	0.90	9.37E+00	1.53	9.27E+00	0.38	9.32E+00	0.92	9.25E+00	0.19	9.27E+00	0.42	9.40E+00	1.78
0.87	1.48E+01	1.48E+01	0.43	1.49E+01	1.13	1.50E+01	1.78	1.48E+01	0.42	1.49E+01	1.06	1.48E+01	0.50	1.48E+01	0.44	1.51E+01	2.02
0.92	2.25E+01	2.26E+01	0.38	2.27E+01	1.17	2.29E+01	1.67	2.26E+01	0.40	2.27E+01	1.06	2.26E+01	0.69	2.26E+01	0.37	2.29E+01	1.86
0.97	3.30E+01	3.30E+01	0.18	3.32E+01	0.75	3.33E+01	0.98	3.30E+01	0.24	3.32E+01	0.68	3.31E+01	0.54	3.30E+01	0.17	3.33E+01	1.06
	DAM(%)		0.32		0.59		1.23		0.31		0.67		0.90		0.32		1.55

o-Xylene

TR

	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.53	5.66E-02	5.55E-02	1.96	5.56E-02	1.72	5.47E-02	3.26	5.55E-02	1.90	5.56E-02	1.72	5.82E-02	2.90	5.55E-02	1.95	5.41E-02	4.31
0.58	2.02E-01	2.01E-01	0.68	2.01E-01	0.57	1.98E-01	2.13	2.01E-01	0.63	2.01E-01	0.39	2.05E-01	1.25	2.01E-01	0.67	1.97E-01	2.69

0.53	5.63E-02	5.61E-02	0.35	5.62E-02	0.06	5.53E-02	1.69	5.61E-02	0.29	5.62E-02	0.06	5.88E-02	4.47	5.61E-02	0.34	5.47E-02	2.74
0.58	2.00E-01	2.01E-01	0.11	2.01E-01	0.27	1.98E-01	1.33	2.01E-01	0.16	2.01E-01	0.44	2.04E-01	2.01	2.01E-01	0.12	1.97E-01	1.89
0.63	5.63E-01	5.65E-01	0.25	5.65E-01	0.27	5.59E-01	0.79	5.65E-01	0.28	5.66E-01	0.55	5.67E-01	0.63	5.65E-01	0.26	5.58E-01	1.01
0.68	1.33E+00	1.33E+00	0.26	1.33E+00	0.24	1.32E+00	0.18	1.33E+00	0.26	1.33E+00	0.54	1.32E+00	0.06	1.33E+00	0.27	1.32E+00	0.17
0.73	2.72E+00	2.73E+00	0.24	2.73E+00	0.33	2.74E+00	0.44	2.73E+00	0.21	2.74E+00	0.58	2.72E+00	0.27	2.73E+00	0.25	2.74E+00	0.60
0.78	5.04E+00	5.06E+00	0.26	5.07E+00	0.57	5.09E+00	1.03	5.05E+00	0.22	5.08E+00	0.71	5.04E+00	0.16	5.06E+00	0.27	5.11E+00	1.27
0.83	8.61E+00	8.64E+00	0.32	8.69E+00	0.88	8.74E+00	1.51	8.63E+00	0.28	8.69E+00	0.90	8.62E+00	0.14	8.64E+00	0.33	8.76E+00	1.78
0.88	1.38E+01	1.39E+01	0.36	1.40E+01	1.16	1.40E+01	1.77	1.38E+01	0.35	1.39E+01	1.07	1.39E+01	0.49	1.39E+01	0.37	1.41E+01	2.02
0.93	2.11E+01	2.11E+01	0.33	2.13E+01	1.18	2.14E+01	1.62	2.11E+01	0.35	2.13E+01	1.06	2.12E+01	0.70	2.11E+01	0.32	2.14E+01	1.80
0.98	3.10E+01	3.11E+01	0.12	3.12E+01	0.60	3.13E+01	0.75	3.11E+01	0.17	3.12E+01	0.55	3.12E+01	0.44	3.11E+01	0.12	3.13E+01	0.81
	DAM(%)		0.26		0.56		1.11		0.26		0.65		0.94		0.26		1.41

n-propylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.54	5.31E-02	5.23E-02	1.60	5.23E-02	1.56	5.15E-02	3.01	5.23E-02	1.54	5.23E-02	1.51	5.47E-02	2.99	5.23E-02	1.59	5.10E-02	3.97
0.59	1.88E-01	1.87E-01	0.52	1.87E-01	0.59	1.84E-01	2.00	1.87E-01	0.47	1.87E-01	0.35	1.90E-01	1.25	1.87E-01	0.51	1.83E-01	2.49
0.64	5.27E-01	5.28E-01	0.07	5.27E-01	0.08	5.22E-01	0.98	5.28E-01	0.10	5.29E-01	0.26	5.29E-01	0.37	5.28E-01	0.08	5.21E-01	1.14
0.69	1.24E+00	1.24E+00	0.44	1.24E+00	0.34	1.24E+00	0.04	1.24E+00	0.43	1.25E+00	0.68	1.24E+00	0.10	1.24E+00	0.45	1.24E+00	0.10
0.74	2.54E+00	2.56E+00	0.73	2.57E+00	0.82	2.57E+00	1.02	2.56E+00	0.70	2.57E+00	1.09	2.55E+00	0.25	2.56E+00	0.75	2.58E+00	1.21
0.79	4.71E+00	4.76E+00	1.01	4.78E+00	1.38	4.80E+00	1.89	4.76E+00	0.97	4.78E+00	1.52	4.74E+00	0.66	4.76E+00	1.02	4.81E+00	2.16
0.84	8.06E+00	8.15E+00	1.23	8.21E+00	1.90	8.26E+00	2.54	8.15E+00	1.18	8.21E+00	1.90	8.15E+00	1.15	8.15E+00	1.23	8.28E+00	2.82
0.89	1.30E+01	1.31E+01	1.27	1.32E+01	2.17	1.33E+01	2.77	1.31E+01	1.26	1.32E+01	2.08	1.31E+01	1.51	1.31E+01	1.27	1.33E+01	3.02
0.94	1.99E+01	2.01E+01	1.01	2.03E+01	1.91	2.03E+01	2.30	2.01E+01	1.04	2.02E+01	1.78	2.02E+01	1.45	2.01E+01	1.00	2.04E+01	2.47
0.99	2.96E+01	2.97E+01	0.24	2.98E+01	0.55	2.98E+01	0.63	2.97E+01	0.28	2.98E+01	0.52	2.97E+01	0.46	2.97E+01	0.24	2.98E+01	0.66
	DAM(%)		0.81		1.13		1.72		0.80		1.17		1.02		0.81		2.00

isopropylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.54	5.71E-02	5.79E-02	1.44	5.80E-02	1.58	5.71E-02	0.01	5.79E-02	1.50	5.80E-02	1.62	6.04E-02	5.91	5.79E-02	1.45	5.65E-02	0.98
0.59	2.00E-01	2.02E-01	1.07	2.02E-01	1.08	2.00E-01	0.39	2.03E-01	1.12	2.03E-01	1.31	2.06E-01	2.73	2.02E-01	1.08	1.99E-01	0.88
0.64	5.56E-01	5.61E-01	0.73	5.60E-01	0.65	5.55E-01	0.27	5.61E-01	0.76	5.62E-01	0.97	5.62E-01	0.98	5.61E-01	0.74	5.54E-01	0.43
0.69	1.30E+00	1.30E+00	0.42	1.30E+00	0.36	1.30E+00	0.06	1.30E+00	0.41	1.31E+00	0.68	1.30E+00	0.05	1.30E+00	0.43	1.30E+00	0.11
0.74	2.65E+00	2.66E+00	0.15	2.66E+00	0.26	2.66E+00	0.45	2.66E+00	0.12	2.67E+00	0.50	2.64E+00	0.35	2.66E+00	0.16	2.67E+00	0.64
0.79	4.89E+00	4.89E+00	0.02	4.91E+00	0.33	4.93E+00	0.84	4.89E+00	0.07	4.91E+00	0.46	4.87E+00	0.39	4.89E+00	0.01	4.94E+00	1.10
0.84	8.33E+00	8.32E+00	0.11	8.37E+00	0.53	8.42E+00	1.16	8.31E+00	0.15	8.37E+00	0.53	8.31E+00	0.21	8.32E+00	0.11	8.45E+00	1.44
0.89	1.33E+01	1.33E+01	0.14	1.34E+01	0.72	1.35E+01	1.30	1.33E+01	0.15	1.34E+01	0.63	1.33E+01	0.07	1.33E+01	0.13	1.35E+01	1.55
0.94	2.03E+01	2.03E+01	0.12	2.04E+01	0.74	2.05E+01	1.13	2.03E+01	0.09	2.04E+01	0.62	2.03E+01	0.30	2.03E+01	0.13	2.05E+01	1.29
0.99	2.98E+01	2.98E+01	0.05	2.99E+01	0.25	2.99E+01	0.32	2.98E+01	0.02	2.99E+01	0.22	2.99E+01	0.16	2.98E+01	0.06	2.99E+01	0.35
	DAM(%)		0.43		0.65		0.59		0.44		0.75		1.12		0.43		0.88

E-30

1-methyl-3-ethylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.55	6.16E-02	5.63E-02	8.48	5.63E-02	8.54	5.55E-02	9.89	5.64E-02	8.42	5.64E-02	8.45	5.87E-02	4.68	5.64E-02	8.47	5.50E-02	10.68
0.60	2.12E-01	1.95E-01	7.94	1.95E-01	8.09	1.92E-01	9.30	1.95E-01	7.90	1.95E-01	7.83	1.98E-01	6.56	1.95E-01	7.93	1.91E-01	9.69
0.65	5.82E-01	5.36E-01	7.91	5.35E-01	8.10	5.31E-01	8.81	5.36E-01	7.89	5.37E-01	7.77	5.37E-01	7.74	5.36E-01	7.90	5.31E-01	8.91
0.70	1.34E+00	1.24E+00	7.59	1.24E+00	7.69	1.24E+00	7.86	1.24E+00	7.60	1.25E+00	7.37	1.24E+00	7.92	1.24E+00	7.58	1.24E+00	7.77
0.75	2.71E+00	2.52E+00	6.70	2.53E+00	6.58	2.53E+00	6.32	2.52E+00	6.73	2.53E+00	6.34	2.51E+00	7.10	2.52E+00	6.69	2.54E+00	6.12
0.80	4.90E+00	4.64E+00	5.26	4.66E+00	4.85	4.68E+00	4.33	4.64E+00	5.30	4.66E+00	4.74	4.63E+00	5.51	4.64E+00	5.25	4.70E+00	4.06
0.85	8.17E+00	7.89E+00	3.49	7.94E+00	2.78	7.99E+00	2.16	7.88E+00	3.53	7.94E+00	2.79	7.89E+00	3.47	7.89E+00	3.48	8.02E+00	1.88
0.90	1.28E+01	1.26E+01	1.72	1.27E+01	0.80	1.28E+01	0.25	1.26E+01	1.73	1.27E+01	0.91	1.27E+01	1.41	1.26E+01	1.72	1.28E+01	0.01
0.95	1.93E+01	1.92E+01	0.37	1.94E+01	0.49	1.95E+01	0.82	1.92E+01	0.34	1.94E+01	0.37	1.93E+01	0.09	1.92E+01	0.38	1.95E+01	0.96
	DAM(%)		5.50		5.32		5.53		5.49		5.17		4.94		5.49		5.56

1-methyl-4-ethylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.55	6.55E-02	7.11E-02	8.50	7.12E-02	8.65	7.00E-02	6.89	7.11E-02	8.56	7.13E-02	8.74	7.37E-02	12.47	7.11E-02	8.51	6.94E-02	5.97
0.60	2.23E-01	2.35E-01	5.49	2.35E-01	5.49	2.32E-01	4.04	2.35E-01	5.53	2.35E-01	5.75	2.38E-01	6.81	2.35E-01	5.50	2.31E-01	3.61
0.65	6.05E-01	6.23E-01	2.88	6.22E-01	2.79	6.17E-01	1.99	6.23E-01	2.89	6.24E-01	3.13	6.23E-01	2.94	6.23E-01	2.89	6.17E-01	1.87
0.70	1.39E+00	1.40E+00	1.04	1.40E+00	1.02	1.40E+00	0.82	1.40E+00	1.03	1.41E+00	1.32	1.40E+00	0.61	1.40E+00	1.05	1.40E+00	0.91
0.75	2.79E+00	2.79E+00	0.03	2.79E+00	0.18	2.80E+00	0.45	2.79E+00	0.01	2.80E+00	0.40	2.77E+00	0.47	2.79E+00	0.04	2.81E+00	0.66
0.80	5.05E+00	5.03E+00	0.30	5.05E+00	0.11	5.08E+00	0.66	5.03E+00	0.34	5.06E+00	0.21	5.02E+00	0.62	5.03E+00	0.29	5.10E+00	0.93
0.85	8.45E+00	8.43E+00	0.17	8.49E+00	0.52	8.54E+00	1.15	8.43E+00	0.21	8.49E+00	0.49	8.43E+00	0.21	8.43E+00	0.17	8.57E+00	1.42
0.90	1.33E+01	1.33E+01	0.13	1.34E+01	1.01	1.35E+01	1.56	1.33E+01	0.13	1.34E+01	0.90	1.34E+01	0.39	1.33E+01	0.13	1.35E+01	1.79
0.95	2.01E+01	2.01E+01	0.30	2.03E+01	1.11	2.03E+01	1.45	2.01E+01	0.34	2.03E+01	1.00	2.02E+01	0.73	2.01E+01	0.29	2.04E+01	1.59
	DAM(%)		2.09		2.32		2.11		2.12		2.44		2.80		2.10		2.08

1,2,3-trimethylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.55	6.95E-02	6.63E-02	4.51	6.63E-02	4.60	6.53E-02	5.99	6.64E-02	4.45	6.63E-02	4.50	6.92E-02	0.46	6.63E-02	4.50	6.47E-02	6.82
0.60	2.36E-01	2.31E-01	1.99	2.31E-01	2.17	2.28E-01	3.46	2.31E-01	1.94	2.32E-01	1.89	2.35E-01	0.47	2.31E-01	1.98	2.27E-01	3.87
0.65	6.43E-01	6.40E-01	0.53	6.38E-01	0.75	6.34E-01	1.51	6.40E-01	0.51	6.41E-01	0.38	6.41E-01	0.32	6.40E-01	0.52	6.33E-01	1.62
0.70	1.48E+00	1.49E+00	0.49	1.49E+00	0.38	1.48E+00	0.20	1.49E+00	0.48	1.49E+00	0.73	1.48E+00	0.16	1.49E+00	0.50	1.49E+00	0.29
0.75	2.99E+00	3.03E+00	1.36	3.04E+00	1.48	3.05E+00	1.76	3.03E+00	1.33	3.05E+00	1.75	3.02E+00	0.93	3.04E+00	1.37	3.05E+00	1.99
0.80	5.48E+00	5.59E+00	2.12	5.62E+00	2.56	5.65E+00	3.13	5.59E+00	2.07	5.62E+00	2.69	5.58E+00	1.86	5.59E+00	2.13	5.66E+00	3.41
0.85	9.29E+00	9.53E+00	2.64	9.60E+00	3.41	9.66E+00	4.07	9.53E+00	2.60	9.60E+00	3.39	9.53E+00	2.68	9.53E+00	2.65	9.69E+00	4.36
0.90	1.49E+01	1.53E+01	2.71	1.54E+01	3.69	1.55E+01	4.26	1.53E+01	2.70	1.54E+01	3.57	1.53E+01	3.05	1.53E+01	2.71	1.55E+01	4.51
0.95	2.29E+01	2.33E+01	2.00	2.35E+01	2.89	2.36E+01	3.23	2.33E+01	2.03	2.35E+01	2.77	2.34E+01	2.49	2.33E+01	1.99	2.37E+01	3.38
	DAM(%)		2.04		2.44		3.07		2.01		2.41		1.38		2.04		3.36

isobutylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.55	5.82E-02	5.61E-02	3.58	5.60E-02	3.74	5.52E-02	5.11	5.62E-02	3.52	5.61E-02	3.64	5.86E-02	0.71	5.61E-02	3.57	5.47E-02	5.96
0.60	2.00E-01	1.99E-01	0.26	1.99E-01	0.52	1.96E-01	1.81	1.99E-01	0.21	1.99E-01	0.22	2.02E-01	1.40	1.99E-01	0.25	1.95E-01	2.23
0.65	5.46E-01	5.58E-01	2.25	5.57E-01	1.98	5.52E-01	1.21	5.58E-01	2.28	5.59E-01	2.37	5.60E-01	2.54	5.58E-01	2.26	5.52E-01	1.09
0.70	1.26E+00	1.31E+00	3.82	1.31E+00	3.67	1.31E+00	3.49	1.31E+00	3.81	1.31E+00	4.05	1.31E+00	3.52	1.31E+00	3.83	1.31E+00	3.59
0.75	2.58E+00	2.70E+00	4.50	2.70E+00	4.61	2.71E+00	4.92	2.70E+00	4.47	2.71E+00	4.90	2.69E+00	4.10	2.70E+00	4.51	2.71E+00	5.15
0.80	4.79E+00	5.00E+00	4.46	5.03E+00	4.92	5.05E+00	5.51	5.00E+00	4.41	5.03E+00	5.06	4.99E+00	4.24	5.00E+00	4.47	5.07E+00	5.81
0.85	8.25E+00	8.57E+00	3.87	8.64E+00	4.66	8.69E+00	5.34	8.57E+00	3.83	8.64E+00	4.66	8.58E+00	3.94	8.57E+00	3.88	8.72E+00	5.64
0.90	1.34E+01	1.38E+01	2.87	1.39E+01	3.87	1.40E+01	4.45	1.38E+01	2.85	1.39E+01	3.75	1.38E+01	3.23	1.38E+01	2.86	1.40E+01	4.70
0.95	2.08E+01	2.12E+01	1.54	2.14E+01	2.45	2.14E+01	2.79	2.12E+01	1.57	2.13E+01	2.32	2.13E+01	2.04	2.12E+01	1.53	2.15E+01	2.94
	DAM(%)		3.02		3.38		3.85		2.99		3.44		2.86		3.02		4.12

sec-butylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.54	5.94E-02	7.05E-02	18.59	7.08E-02	19.11	6.95E-02	16.86	7.05E-02	18.66	7.08E-02	19.14	7.31E-02	23.05	7.05E-02	18.60	6.88E-02	15.76
0.59	2.07E-01	2.30E-01	11.15	2.31E-01	11.43	2.27E-01	9.67	2.31E-01	11.20	2.31E-01	11.63	2.34E-01	12.67	2.30E-01	11.16	2.26E-01	9.14
0.64	5.75E-01	6.06E-01	5.35	6.07E-01	5.45	6.01E-01	4.45	6.06E-01	5.37	6.08E-01	5.73	6.07E-01	5.51	6.06E-01	5.36	6.00E-01	4.28
0.69	1.33E+00	1.35E+00	1.48	1.35E+00	1.54	1.35E+00	1.23	1.35E+00	1.47	1.36E+00	1.81	1.35E+00	1.10	1.35E+00	1.49	1.35E+00	1.28
0.74	2.69E+00	2.67E+00	0.64	2.68E+00	0.49	2.68E+00	0.29	2.67E+00	0.67	2.68E+00	0.29	2.66E+00	1.14	2.67E+00	0.63	2.69E+00	0.11
0.79	4.87E+00	4.80E+00	1.39	4.81E+00	1.05	4.84E+00	0.53	4.80E+00	1.43	4.82E+00	0.95	4.78E+00	1.76	4.80E+00	1.38	4.85E+00	0.29
0.84	8.09E+00	7.99E+00	1.21	8.04E+00	0.63	8.09E+00	0.01	7.99E+00	1.24	8.04E+00	0.64	7.98E+00	1.32	7.99E+00	1.20	8.11E+00	0.27
0.89	1.26E+01	1.26E+01	0.56	1.27E+01	0.21	1.27E+01	0.81	1.26E+01	0.56	1.26E+01	0.12	1.26E+01	0.39	1.26E+01	0.56	1.28E+01	1.03
0.94	1.88E+01	1.89E+01	0.07	1.90E+01	0.85	1.91E+01	1.25	1.89E+01	0.11	1.90E+01	0.74	1.89E+01	0.45	1.89E+01	0.06	1.91E+01	1.40
0.99	2.73E+01	2.74E+01	0.13	2.74E+01	0.41	2.75E+01	0.48	2.74E+01	0.17	2.74E+01	0.38	2.74E+01	0.33	2.74E+01	0.13	2.75E+01	0.51
	DAM(%)		4.06		4.12		3.56		4.09		4.14		4.77		4.06		3.41

tert-butylbenzene

TR	P(bar)	RKG	DA(%)	TRK	DA(%)	SRK	DA(%)	PRG	DA(%)	TPR	DA(%)	PR	DA(%)	VDWG	DA(%)	SVDW	DA(%)
0.54	6.24E-02	7.46E-02	19.52	7.49E-02	20.10	7.35E-02	17.76	7.46E-02	19.59	7.49E-02	20.13	7.73E-02	23.90	7.46E-02	19.53	7.28E-02	16.65
0.59	2.17E-01	2.41E-01	11.14	2.42E-01	11.47	2.38E-01	9.68	2.41E-01	11.19	2.42E-01	11.66	2.44E-01	12.63	2.41E-01	11.15	2.37E-01	9.15
0.64	5.99E-01	6.28E-01	4.85	6.29E-01	4.98	6.23E-01	3.98	6.28E-01	4.87	6.30E-01	5.25	6.29E-01	5.01	6.28E-01	4.86	6.22E-01	3.80
0.69	1.38E+00	1.39E+00	0.78	1.39E+00	0.86	1.39E+00	0.55	1.39E+00	0.77	1.40E+00	1.12	1.39E+00	0.41	1.39E+00	0.79	1.39E+00	0.60
0.74	2.77E+00	2.74E+00	1.36	2.74E+00	1.20	2.75E+00	1.00	2.73E+00	1.39	2.75E+00	1.01	2.72E+00	1.84	2.74E+00	1.35	2.75E+00	0.83
0.79	4.99E+00	4.89E+00	2.02	4.91E+00	1.67	4.93E+00	1.16	4.89E+00	2.05	4.91E+00	1.58	4.87E+00	2.37	4.89E+00	2.01	4.94E+00	0.92
0.84	8.25E+00	8.11E+00	1.67	8.16E+00	1.11	8.21E+00	0.46	8.11E+00	1.70	8.16E+00	1.12	8.11E+00	1.78	8.12E+00	1.66	8.24E+00	0.21
0.89	1.28E+01	1.27E+01	0.83	1.28E+01	0.08	1.29E+01	0.52	1.27E+01	0.84	1.28E+01	0.18	1.27E+01	0.66	1.27E+01	0.83	1.29E+01	0.74
0.94	1.90E+01	1.90E+01	0.04	1.92E+01	0.73	1.93E+01	1.13	1.90E+01	0.00	1.92E+01	0.62	1.91E+01	0.34	1.90E+01	0.04	1.93E+01	1.28
0.99	2.75E+01	2.76E+01	0.13	2.76E+01	0.40	2.76E+01	0.48	2.76E+01	0.17	2.76E+01	0.38	2.76E+01	0.33	2.76E+01	0.12	2.77E+01	0.51

Alcanes branchés

Enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition (kCal/mole)

Hydrocarbure	EXP	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
iC4	5.09	5.093	0.06	5.151	1.20	5.088	0.04	5.134	0.86	5.078	0.24	5.085	0.10	5.047	0.84	5.074	0.31
iC5	5.901	5.965	1.08	6.029	2.17	5.959	0.98	6.01	1.85	5.954	0.90	5.955	0.92	5.915	0.24	5.948	0.80
2,2-dimethyl-C3	5.438	5.443	0.09	5.504	1.21	5.438	0.00	5.486	0.88	5.429	0.17	5.434	0.07	5.398	0.74	5.424	0.26
iC6	6.643	6.727	1.26	6.798	2.33	6.718	1.13	6.778	2.03	6.723	1.20	6.715	1.08	6.675	0.48	6.715	1.08
3-methyl-C5	6.711	6.773	0.92	6.845	2.00	6.765	0.80	6.825	1.70	6.768	0.85	6.761	0.75	6.722	0.16	6.76	0.73
2,2-dimethyl-C4	6.287	6.324	0.59	6.392	1.67	6.318	0.49	6.373	1.37	6.314	0.43	6.313	0.41	6.275	0.19	6.307	0.32
2,3-dimethyl-C4	6.519	6.566	0.72	6.635	1.78	6.558	0.60	6.616	1.49	6.557	0.58	6.555	0.55	6.515	0.06	6.55	0.48
iC7	7.33	7.402	0.98	7.483	2.09	7.392	0.85	7.464	1.83	7.409	1.08	7.388	0.79	7.356	0.35	7.395	0.89
3-methyl-C6	7.359	7.45	1.24	7.532	2.35	7.44	1.10	7.512	2.08	7.456	1.32	7.437	1.06	7.403	0.60	7.443	1.14
2,2-dimethyl-C5	6.97	7.021	0.73	7.096	1.81	7.012	0.60	7.077	1.54	7.021	0.73	7.008	0.55	6.974	0.06	7.01	0.57
2,3-dimethyl-C5	7.263	7.33	0.92	7.409	2.01	7.321	0.80	7.388	1.72	7.33	0.92	7.317	0.74	7.28	0.23	7.32	0.78
2,4-dimethyl-C5	7.051	7.094	0.61	7.171	1.70	7.085	0.48	7.152	1.43	7.096	0.64	7.081	0.43	7.049	0.03	7.084	0.47
3,3-dimethyl-C5	7.086	7.141	0.78	7.217	1.85	7.133	0.66	7.197	1.57	7.136	0.71	7.129	0.61	7.09	0.06	7.127	0.58
3-ethyl-C5	7.399	7.457	0.78	7.537	1.86	7.447	0.65	7.517	1.59	7.46	0.82	7.444	0.61	7.407	0.11	7.448	0.66
2,2,3-trimethyl-C4	6.919	6.967	0.69	7.042	1.78	6.959	0.58	7.021	1.47	6.96	0.59	6.955	0.52	6.916	0.04	6.951	0.46
iC8	8.08	8.059	0.26	8.153	0.90	8.047	0.41	8.133	0.66	8.077	0.04	8.044	0.45	8.017	0.78	8.059	0.26
3-methyl-C7	8.1	8.084	0.20	8.177	0.95	8.072	0.35	8.157	0.70	8.1	0.00	8.069	0.38	8.04	0.74	8.083	0.21
4-methyl-C7	8.101	8.06	0.51	8.153	0.64	8.048	0.65	8.133	0.40	8.076	0.31	8.045	0.69	8.016	1.05	8.059	0.52
2,2-dimethyl-C6	7.71	7.686	0.31	7.772	0.80	7.675	0.45	7.752	0.54	7.696	0.18	7.672	0.49	7.643	0.87	7.681	0.38
2,3-dimethyl-C6	7.936	7.949	0.16	8.038	1.29	7.938	0.03	8.018	1.03	7.96	0.30	7.934	0.03	7.903	0.42	7.945	0.11
2,4-dimethyl-C6	7.79	7.773	0.22	7.86	0.90	7.762	0.36	7.84	0.64	7.784	0.08	7.758	0.41	7.729	0.78	7.768	0.28
2,5-dimethyl-C6	7.8	7.79	0.13	7.878	1.00	7.778	0.28	7.859	0.76	7.803	0.04	7.775	0.32	7.747	0.68	7.787	0.17
3,3-dimethyl-C6	7.76	7.768	0.10	7.853	1.20	7.757	0.04	7.833	0.94	7.774	0.18	7.753	0.09	7.721	0.50	7.76	0.00
3,4-dimethyl-C6	7.953	7.989	0.45	8.078	1.57	7.978	0.31	8.057	1.31	7.998	0.57	7.974	0.26	7.941	0.15	7.983	0.38
3-ethyl-C6	8.033	8.069	0.45	8.16	1.58	8.056	0.29	8.14	1.33	8.082	0.61	8.053	0.25	8.023	0.12	8.066	0.41
2,2,3-trimethyl-C5	7.65	7.657	0.09	7.74	1.18	7.647	0.04	7.719	0.90	7.658	0.10	7.643	0.09	7.608	0.55	7.646	0.05
2,2,4-trimethyl-C5	7.411	7.397	0.19	7.477	0.89	7.387	0.32	7.457	0.62	7.4	0.15	7.382	0.39	7.352	0.80	7.386	0.34
2,3,3-trimethyl-C5	7.73	7.767	0.48	7.851	1.57	7.758	0.36	7.829	1.28	7.767	0.48	7.753	0.30	7.715	0.19	7.755	0.32
2,3,4-trimethyl-C5	7.832	7.813	0.24	7.898	0.84	7.803	0.37	7.878	0.59	7.818	0.18	7.799	0.42	7.764	0.87	7.805	0.34
2-methyl-3-ethyl-C5	7.879	7.914	0.44	8.002	1.56	7.903	0.30	7.981	1.29	7.922	0.55	7.9	0.27	7.866	0.16	7.908	0.37
3-methyl-3-ethyl-C5	7.838	7.891	0.68	7.976	1.76	7.881	0.55	7.955	1.49	7.893	0.70	7.877	0.50	7.839	0.01	7.881	0.55
2,2,3,3-tetramethyl-C4	7.51	7.439	0.94	7.518	0.11	7.43	1.07	7.497	0.17	7.431	1.05	7.425	1.13	7.385	1.66	7.421	1.19
iC9	8.76	8.694	0.75	8.799	0.44	8.679	0.92	8.779	0.22	8.723	0.42	8.676	0.96	8.652	1.23	8.699	0.70
2,2,5-trimethyl-C6	8.07	8.007	0.78	8.098	0.35	7.995	0.93	8.079	0.11	8.023	0.58	7.991	0.98	7.967	1.28	8.004	0.82
3,3-diethyl-C5	8.44	8.712	3.22	8.806	4.34	8.699	3.07	8.781	4.04	8.717	3.28	8.698	3.06	8.647	2.45	8.706	3.15
2,2,3,3-tetramethyl-C4	8.43	8.303	1.51	8.392	0.45	8.292	1.64	8.37	0.71	8.305	1.48	8.287	1.70	8.249	2.15	8.292	1.64
2,2,3,4-tetramethyl-C5	8.19	8.134	0.68	8.223	0.40	8.123	0.82	8.202	0.15	8.14	0.61	8.119	0.87	8.085	1.28	8.125	0.79

2,2,3,3-tetramethyl-C4	9.76	9.712	0.49	9.681	0.81	9.702	0.59	9.636	1.27	9.725	0.36	9.711	0.50	9.395	3.74	9.736	0.25
2,2,3,4-tetramethyl-C5	9.12	9.275	1.70	9.266	1.60	9.265	1.59	9.224	1.14	9.278	1.73	9.274	1.69	9.002	1.29	9.289	1.85
2,2,4,4-tetramethyl-C5	10	10.069	0.69	10.019	0.19	10.059	0.59	9.971	0.29	10.093	0.93	10.069	0.69	9.715	2.85	10.102	1.02
2,3,3,4-tetramethyl-C4	MOY		0.88		1.10		0.78		0.77		0.84		0.84		1.73		0.92

Entropie de vaporisation à la température d'ébullition (Cal/mole K)

Hydrocarbure	EXP	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
iC4	19.471	19.481	0.05	19.702	1.19	19.464	0.04	19.638	0.86	19.423	0.25	19.451	0.10	19.304	0.86	19.41	0.31
iC5	19.605	19.817	1.08	20.029	2.16	19.796	0.97	19.967	1.85	19.781	0.90	19.785	0.92	19.651	0.23	19.762	0.80
2,2-dimethyl-C3	19.239	19.256	0.09	19.471	1.21	19.239	0.00	19.41	0.89	19.209	0.16	19.224	0.08	19.096	0.74	19.191	0.25
iC6	19.924	20.296	1.87	20.51	2.94	20.272	1.75	20.451	2.65	20.285	1.81	20.263	1.70	20.142	1.09	20.26	1.69
3-methyl-C5	19.948	20.132	0.92	20.344	1.99	20.107	0.80	20.286	1.69	20.118	0.85	20.098	0.75	19.981	0.17	20.093	0.73
2,2-dimethyl-C4	19.471	19.586	0.59	19.797	1.67	19.566	0.49	19.737	1.37	19.556	0.44	19.553	0.42	19.433	0.20	19.533	0.32
2,3-dimethyl-C4	19.687	19.828	0.72	20.038	1.78	19.805	0.60	19.979	1.48	19.803	0.59	19.794	0.54	19.673	0.07	19.78	0.47
iC7	20.182	20.38	0.98	20.604	2.09	20.351	0.84	20.55	1.82	20.398	1.07	20.342	0.79	20.254	0.36	20.362	0.89
3-methyl-C6	20.162	20.412	1.24	20.635	2.35	20.384	1.10	20.581	2.08	20.427	1.31	20.376	1.06	20.282	0.60	20.393	1.15
2,2-dimethyl-C5	19.782	19.927	0.73	20.141	1.81	19.902	0.61	20.086	1.54	19.925	0.72	19.89	0.55	19.794	0.06	19.894	0.57
2,3-dimethyl-C5	20.012	20.197	0.92	20.413	2.00	20.171	0.79	20.358	1.73	20.198	0.93	20.161	0.74	20.059	0.23	20.168	0.78
2,4-dimethyl-C5	19.938	20.06	0.61	20.276	1.70	20.033	0.48	20.222	1.42	20.066	0.64	20.023	0.43	19.931	0.04	20.032	0.47
3,3-dimethyl-C5	19.726	19.88	0.78	20.091	1.85	19.856	0.66	20.034	1.56	19.867	0.71	19.845	0.60	19.736	0.05	19.84	0.58
3-ethyl-C5	20.181	20.34	0.79	20.559	1.87	20.312	0.65	20.504	1.60	20.347	0.82	20.304	0.61	20.204	0.11	20.315	0.66
2,2,3-trimethyl-C4	19.543	19.68	0.70	19.89	1.78	19.657	0.58	19.832	1.48	19.659	0.59	19.645	0.52	19.534	0.05	19.633	0.46
iC8	20.68	20.623	0.28	20.861	0.88	20.591	0.43	20.811	0.63	20.668	0.06	20.583	0.47	20.513	0.81	20.622	0.28
3-methyl-C7	20.66	20.62	0.19	20.856	0.95	20.588	0.35	20.805	0.70	20.66	0.00	20.58	0.39	20.506	0.75	20.616	0.21
4-methyl-C7	20.726	20.622	0.50	20.858	0.64	20.591	0.65	20.808	0.40	20.663	0.30	20.583	0.69	20.51	1.04	20.619	0.52
2,2-dimethyl-C6	20.29	20.228	0.31	20.453	0.80	20.199	0.45	20.402	0.55	20.254	0.18	20.189	0.50	20.113	0.87	20.213	0.38
2,3-dimethyl-C6	20.414	20.448	0.17	20.677	1.29	20.418	0.02	20.624	1.03	20.476	0.30	20.41	0.02	20.329	0.42	20.436	0.11
2,4-dimethyl-C6	20.36	20.318	0.21	20.545	0.91	20.289	0.35	20.494	0.66	20.346	0.07	20.279	0.40	20.203	0.77	20.305	0.27
2,5-dimethyl-C6	20.41	20.379	0.15	20.609	0.98	20.348	0.30	20.559	0.73	20.414	0.02	20.339	0.35	20.268	0.70	20.37	0.20
3,3-dimethyl-C6	20.15	20.17	0.10	20.391	1.20	20.143	0.03	20.338	0.93	20.186	0.18	20.132	0.09	20.048	0.51	20.149	0.00
3,4-dimethyl-C6	20.347	20.439	0.45	20.665	1.56	20.41	0.31	20.612	1.30	20.462	0.57	20.401	0.27	20.316	0.15	20.424	0.38
3-ethyl-C6	20.509	20.6	0.44	20.833	1.58	20.569	0.29	20.781	1.33	20.635	0.61	20.561	0.25	20.483	0.13	20.593	0.41
2,2,3-trimethyl-C5	19.97	19.993	0.12	20.208	1.19	19.967	0.02	20.154	0.92	19.996	0.13	19.956	0.07	19.864	0.53	19.963	0.04
2,2,4-trimethyl-C5	19.901	19.863	0.19	20.079	0.89	19.836	0.33	20.026	0.63	19.872	0.15	19.824	0.39	19.742	0.80	19.835	0.33
2,3,3-trimethyl-C5	19.93	20.024	0.47	20.238	1.55	19.998	0.34	20.183	1.27	20.023	0.47	19.988	0.29	19.889	0.21	19.992	0.31
2,3,4-trimethyl-C5	20.234	20.21	0.12	20.43	0.97	20.182	0.26	20.376	0.70	20.222	0.06	20.172	0.31	20.083	0.75	20.187	0.23
2-methyl-3-ethyl-C5	20.265	20.356	0.45	20.58	1.55	20.327	0.31	20.527	1.29	20.375	0.54	20.318	0.26	20.232	0.16	20.339	0.37
3-methyl-3-ethyl-C5	20.025	20.161	0.68	20.378	1.76	20.134	0.54	20.323	1.49	20.166	0.70	20.124	0.49	20.028	0.01	20.134	0.54
2,2,3,3-tetramethyl-C4	19.78	19.595	0.93	19.804	0.12	19.573	1.05	19.748	0.16	19.576	1.03	19.56	1.11	19.453	1.65	19.549	1.17
iC9	21.04	20.878	0.78	21.131	0.43	20.843	0.94	21.083	0.20	20.947	0.44	20.835	0.97	20.777	1.25	20.891	0.71
2,2,5-trimethyl-C6	20.32	20.158	0.80	20.387	0.33	20.128	0.94	20.338	0.09	20.196	0.61	20.116	1.00	20.056	1.30	20.149	0.84

iC9	32.2	32.118	0.25	32.07	0.40	32.081	0.37	31.929	0.84	32.13	0.22	32.115	0.26	31.158	3.24	32.176	0.07
2,2,5-trimethyl-C6	34.14	34.933	2.32	34.714	1.68	34.898	2.22	34.544	1.18	35.03	2.61	34.932	2.32	33.656	1.42	35.06	2.69
3,3-diethyl-C5	33	33.384	1.16	33.234	0.71	33.352	1.07	33.073	0.22	33.461	1.40	33.383	1.16	32.239	2.31	33.489	1.48
2,2,3,3-tetramethyl-C4	32.74	32.574	0.51	32.472	0.82	32.541	0.61	32.319	1.29	32.619	0.37	32.572	0.51	31.521	3.72	32.654	0.26
2,2,3,4-tetramethyl-C5	30.59	31.107	1.69	31.078	1.60	31.074	1.58	30.937	1.13	31.118	1.73	31.104	1.68	30.199	1.28	31.157	1.85
2,2,4,4-tetramethyl-C5	33.54	33.772	0.69	33.605	0.19	33.739	0.59	33.442	0.29	33.853	0.93	33.771	0.69	32.595	2.82	33.882	1.02
2,3,3,4-tetramethyl-C4			0.81		1.03		0.71		0.70		0.77		0.77		1.73		0.85
MOY			2.32		2.16												

n-alcane

Enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition (kCal/mole)

Hydrocarbure	EXP	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
CH4	1.955	1.969	0.72	2.019	3.27	1.968	0.66	2.011	2.86	1.956	0.05	1.966	0.56	1.96	0.26	1.955	0.00
nC2	3.517	3.536	0.54	3.59	2.08	3.534	0.48	3.577	1.71	3.519	0.06	3.531	0.40	3.503	0.40	3.518	0.03
nC3	4.487	4.509	0.49	4.564	1.72	4.505	0.40	4.548	1.36	4.492	0.11	4.502	0.33	4.465	0.49	4.49	0.07
nC4	5.352	5.407	1.03	5.467	2.15	5.402	0.93	5.449	1.81	5.393	0.77	5.399	0.88	5.358	0.11	5.39	0.71
nC5	6.16	6.224	1.04	6.289	2.09	6.217	0.93	6.27	1.79	6.216	0.91	6.214	0.88	6.173	0.21	6.21	0.81
nC6	6.896	6.976	1.16	7.05	2.23	6.967	1.03	7.031	1.96	6.976	1.16	6.964	0.99	6.927	0.45	6.966	1.02
nC7	7.576	7.665	1.17	7.751	2.31	7.654	1.03	7.731	2.05	7.676	1.32	7.651	0.99	7.619	0.57	7.661	1.12
nC8	8.225	8.328	1.25	8.427	2.46	8.315	1.09	8.407	2.21	8.35	1.52	8.312	1.06	8.284	0.72	8.331	1.29
nC9	8.823	8.929	1.20	9.04	2.46	8.913	1.02	9.019	2.22	8.962	1.58	8.91	0.99	8.886	0.71	8.937	1.29
nC10	9.388	9.516	1.36	9.64	2.68	9.499	1.18	9.619	2.46	9.562	1.85	9.496	1.15	9.471	0.88	9.531	1.52
nC11	9.92	10.048	1.29	10.182	2.64	10.029	1.10	10.16	2.42	10.105	1.86	10.024	1.05	9.997	0.78	10.068	1.49
nC12	10.43	10.591	1.54	10.735	2.92	10.757	3.14	10.904	4.54	10.845	3.98	10.755	3.12	10.708	2.67	10.806	3.60
nC13	10.91	11.059	1.37	11.21	2.75	11.037	1.16	11.185	2.52	11.14	2.11	11.031	1.11	10.984	0.68	11.089	1.64
nC14	11.38	11.463	0.73	11.618	2.09	11.44	0.53	11.591	1.85	11.552	1.51	11.432	0.46	11.375	0.04	11.495	1.01
nC15	11.82	11.943	1.04	12.101	2.38	11.918	0.83	12.071	2.12	12.042	1.88	11.908	0.74	11.83	0.08	11.977	1.33
nC16	12.24	12.344	0.85	12.503	2.15	12.318	0.64	12.471	1.89	12.451	1.72	12.307	0.55	12.208	0.26	12.38	1.14
nC17	12.64	12.883	1.92	13.043	3.19	12.856	1.71	13.005	2.89	13.002	2.86	12.843	1.61	12.703	0.50	12.923	2.24
nC18	13.02	13.271	1.93	13.423	3.10	13.243	1.71	13.379	2.76	13.396	2.89	13.227	1.59	13.047	0.21	13.309	2.22
nC19	13.39	13.668	2.08	13.811	3.14	13.639	1.86	13.76	2.76	13.8	3.06	13.62	1.72	13.394	0.03	13.706	2.36
nC20	13.74	14.18	3.20	14.31	4.15	14.15	2.98	14.249	3.70	14.32	4.22	14.128	2.82	13.83	0.66	14.217	3.47
MOY			1.30		2.60		1.22		2.39		1.77		1.15		0.54		1.42

Enthalpie de vaporisation à la 298 K (kCal/mole)

Hydrocarbure	EXP	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
nC2	1.2	1.119	6.75	1.058	11.83	1.113	7.25	1.059	11.75	1.086	9.50	1.086	9.50	1.065	11.25	1.067	11.08
nC3	3.542	3.576	0.96	3.588	1.30	3.571	0.82	3.584	1.19	3.578	1.02	3.551	0.25	3.56	0.51	3.55	0.23
nC4	5.035	5.076	0.81	5.13	1.89	5.07	0.70	5.117	1.63	5.07	0.70	5.061	0.52	5.05	0.30	5.056	0.42
nC5	6.316	6.373	0.90	6.436	1.90	6.366	0.79	6.415	1.57	6.362	0.73	6.366	0.79	6.307	0.14	6.36	0.70
nC6	7.541	7.608	0.89	7.657	1.54	7.599	0.77	7.628	1.15	7.595	0.72	7.604	0.84	7.475	0.88	7.603	0.82
nC7	8.736	8.81	0.85	8.829	1.06	8.799	0.72	8.792	0.64	8.804	0.78	8.808	0.82	8.593	1.64	8.817	0.93

nC3	11.88	11.995	0.97	12.035	1.30	11.978	0.82	12.02	1.18	12	1.01	11.909	0.24	11.94	0.51	11.905	0.21
nC4	16.887	17.024	0.81	17.207	1.89	17.006	0.70	17.163	1.63	17.006	0.70	16.976	0.53	16.939	0.31	16.959	0.43
nC5	21.124	21.376	1.19	21.588	2.20	21.353	1.08	21.517	1.86	21.337	1.01	21.35	1.07	21.152	0.13	21.331	0.98
nC6	25.293	25.517	0.89	25.68	1.53	25.486	0.76	25.584	1.15	25.475	0.72	25.503	0.83	25.073	0.87	25.5	0.82
nC7	29.301	29.549	0.85	29.611	1.06	29.513	0.72	29.489	0.64	29.529	0.78	29.543	0.83	28.824	1.63	29.572	0.92
nC8	33.258	33.642	1.15	33.564	0.92	33.601	1.03	33.415	0.47	33.667	1.23	33.639	1.15	32.579	2.04	33.718	1.38
nC9	37.23	37.602	1.00	37.355	0.34	37.557	0.88	37.179	0.14	37.693	1.24	37.6	0.99	36.164	2.86	37.743	1.36
nC10	41.177	41.661	1.18	41.228	0.12	41.614	1.06	41.022	0.38	41.841	1.61	41.66	1.17	39.804	3.33	41.882	1.71
nC11	45.162	45.565	0.89	44.932	0.51	45.514	0.78	44.694	1.04	45.88	1.59	45.562	0.89	43.272	4.18	45.878	1.59
nC12	49.13	49.69	1.14	48.85	0.57	49.636	1.03	48.575	1.13	50.109	1.99	49.685	1.13	46.915	4.51	50.108	1.99
nC13	53.09	53.567	0.90	52.526	1.06	53.512	0.79	52.213	1.65	54.13	1.96	53.561	0.89	50.314	5.23	54.1	1.90
nC14	57.05	56.996	0.09	55.728	2.32	56.941	0.19	55.379	2.93	57.725	1.18	56.989	0.11	53.279	6.61	57.655	1.06
nC15	61.04	61.089	0.08	59.611	2.34	61.032	0.01	59.213	2.99	62.002	1.58	61.081	0.07	56.829	6.90	61.891	1.39
nC16	65	64.708	0.45	63.01	3.06	64.651	0.54	62.565	3.75	65.821	1.26	64.7	0.46	59.936	7.79	65.661	1.02
nC17	69.1	69.351	0.36	67.459	2.37	69.293	0.28	66.938	3.13	70.702	2.32	69.343	0.35	63.933	7.48	70.487	2.01
nC18	72.8	73.283	0.66	71.226	2.16	73.224	0.58	70.632	2.98	74.858	2.83	73.275	0.65	67.294	7.56	74.589	2.46
nC19	76.8	77.291	0.64	75.069	2.25	77.231	0.56	74.39	3.14	79.116	3.02	77.284	0.63	70.699	7.94	78.785	2.58
nC20	80.8	82.149	1.67	79.807	1.23	82.088	1.59	78.998	2.23	84.273	4.30	82.144	1.66	74.822	7.40	83.87	3.80
	MOY		0.83		1.51		1.09		2.32		2.10		1.22		4.66		2.04

alkylcyclohexanes

Enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition (kCal/mole)

Hydrocarbure	exp	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
cyclohexane	7.16	7.151	0.13	7.228	0.95	7.144	0.22	7.204	0.61	7.134	0.36	7.141	0.27	7.083	1.08	7.13	0.42
methylethylcyclohexane	7.44	7.489	0.66	7.568	1.72	7.481	0.55	7.545	1.41	7.476	0.48	7.477	0.50	7.425	0.20	7.469	0.39
ethylcyclohexane	8.2	7.94	3.17	8.025	2.13	7.931	3.28	8.001	2.43	7.93	3.29	7.926	3.34	7.88	3.90	7.92	3.41
1.1-dimethylethylcyclohexane	7.79	7.667	1.58	7.749	0.53	7.658	1.69	7.726	0.82	7.656	1.72	7.653	1.76	7.609	2.32	7.647	1.84
1.2-.....-cis	8.04	7.841	2.48	7.925	1.43	7.832	2.59	7.902	1.72	7.83	2.61	7.827	2.65	7.782	3.21	7.82	2.74
1.3-.....-cis	7.84	7.541	3.81	7.623	2.77	7.533	3.92	7.6	3.06	7.529	3.97	7.527	3.99	7.485	4.53	7.519	4.09
1.3-.....-trans	8.09	7.335	9.33	7.418	8.31	7.328	9.42	7.396	8.58	7.318	9.54	7.32	9.52	7.281	10.00	7.308	9.67
1.4-.....-cis	8.07	7.721	4.32	7.804	3.30	7.713	4.42	7.782	3.57	7.71	4.46	7.708	4.49	7.664	5.03	7.701	4.57
1.4-.....-trans	7.79	7.63	2.05	7.712	1.00	7.621	2.17	7.69	1.28	7.621	2.17	7.616	2.23	7.575	2.76	7.611	2.30
n-propylCyclohexane	8.62	8.397	2.59	8.487	1.54	8.388	2.69	8.463	1.82	8.391	2.66	8.382	2.76	8.339	3.26	8.379	2.80
n-butylCyclohexane	9.2	9.66	5.00	9.767	6.16	9.646	4.85	9.742	5.89	9.672	5.13	9.644	4.83	9.594	4.28	9.657	4.97
n-decylcyclohexane	12.04	11.823	1.80	11.974	0.55	11.8	1.99	11.95	0.75	11.906	1.11	11.788	2.09	11.759	2.33	11.846	1.61
	MOY		3.08		2.53		3.15		2.66		3.13		3.20		3.58		3.23

Enthalpie de vaporisation à la 298 K (kCal/mole)

Hydrocarbure	Exp	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
cyclohexane	7.896	7.805	1.15	7.852	0.56	7.798	1.24	7.818	0.99	7.792	1.32	7.803	1.18	7.641	3.23	7.8	1.22
methylethylcyclohexane	8.451	8.431	0.24	8.456	0.06	8.423	0.33	8.418	0.39	8.426	0.30	8.429	0.26	8.219	2.75	8.435	0.19
ethylcyclohexane	9.674	9.288	3.99	9.28	4.07	9.28	4.07	9.234	4.55	9.306	3.80	9.288	3.99	9	6.97	9.312	3.74

alkylcyclopentanes

Enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition (kCal/mole)

Hydrocarbure	Exp	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
cyclopentane	6.524	6.546	0.34	6.617	1.43	6.54	0.25	6.595	1.09	6.527	0.05	6.537	0.20	6.48	0.67	6.525	0.02
methylethylcyclopentane	6.95	6.976	0.37	7.05	1.44	6.969	0.27	7.027	1.11	6.963	0.19	6.966	0.23	6.914	0.52	6.958	0.12
1.1-dimethylethylcyclopentane	7.239	7.411	2.38	7.488	3.44	7.402	2.25	7.466	3.14	7.404	2.28	7.399	2.21	7.35	1.53	7.397	2.18
1.2-dimethylethylcyclo5-cis	7.576	7.615	0.51	7.694	1.56	7.606	0.40	7.672	1.27	7.608	0.42	7.603	0.36	7.553	0.30	7.6	0.32
1.2-dimethylethylcyclo5-trans	7.375	7.459	1.14	7.536	2.18	7.45	1.02	7.514	1.88	7.452	1.04	7.447	0.98	7.398	0.31	7.444	0.94
ethylcyclopentane	7.715	7.683	0.41	7.763	0.62	7.674	0.53	7.74	0.32	7.676	0.51	7.671	0.57	7.621	1.22	7.668	0.61
n-propylcyclopentane	8.152	8.608	5.59	8.7	6.72	8.596	5.45	8.676	6.43	8.612	5.64	8.595	5.43	8.542	4.78	8.602	5.52
n-hexylcyclopentane	9.84	10.091	2.55	10.22	3.86	10.073	2.37	10.198	3.64	10.137	3.02	10.069	2.33	10.043	2.06	10.105	2.69
n-heptyl.....	10.36	10.572	2.05	10.711	3.39	10.552	1.85	10.688	3.17	10.629	2.60	10.548	1.81	10.521	1.55	10.591	2.23
n-octyl.....	10.85	11.051	1.85	11.199	3.22	11.029	1.65	11.175	3.00	11.122	2.51	11.023	1.59	10.991	1.30	11.075	2.07
n-nonyl.....	11.29	11.578	2.55	11.735	3.94	11.555	2.35	11.709	3.71	11.661	3.29	11.547	2.28	11.501	1.87	11.607	2.81
n-decyl.....	11.712	12.008	2.53	12.169	3.90	11.984	2.32	12.141	3.66	12.103	3.34	11.975	2.25	11.911	1.70	12.041	2.81
n-dodecyl.....	12.57	12.718	1.18	12.876	2.43	12.692	0.97	12.843	2.17	12.829	2.06	13.016	0.28	12.886	0.72	13.094	0.88
n-tridecyl.....	12.98	13.06	0.62	13.212	1.79	13.033	0.41	13.176	1.51	13.178	1.53	1.53	13.176	1.51	13.178	1.53	
MOY			1.72		2.85		1.58		2.58		2.03			1.33		1.76	

Enthalpie de vaporisation à la 298 K (kCal/mole)

Hydrocarbure	Exp	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
cyclopentane	6.818	6.824	0.09	6.889	1.04	6.818	0.00	6.862	0.65	6.804	0.21	6.82	0.03	6.724	1.38	6.809	0.13
methylethylcyclopentane	7.55	7.555	0.07	7.604	0.72	7.548	0.03	7.573	0.30	7.539	0.15	7.552	0.03	7.411	1.84	7.547	0.04
1.1-dimethylethylcyclopentane	8.079	8.251	2.13	8.28	2.49	8.243	2.03	8.245	2.05	8.241	2.01	8.249	2.10	8.062	0.21	8.251	2.13
1.2-dimethylethylcyclo5-cis	8.549	8.607	0.68	8.624	0.88	8.598	0.57	8.585	0.42	8.603	0.63	8.606	0.67	8.386	1.91	8.613	0.75
1.2-dimethylethylcyclo5-trans	8.259	8.35	1.10	8.376	1.42	8.342	1.00	8.34	0.98	8.342	1.00	8.349	1.09	8.152	1.30	8.352	1.13
ethylcyclopentane	8.72	8.732	0.14	8.743	0.26	8.723	0.03	8.704	0.18	8.729	0.10	8.73	0.11	8.5	2.52	8.739	0.22
n-propylcyclopentane	9.821	10.208	3.94	10.154	3.39	10.197	3.83	10.105	2.89	10.231	4.17	10.208	3.94	9.845	0.24	10.241	4.28
n-hexylcyclopentane	13.36	13.527	1.25	13.295	0.49	13.514	1.15	13.225	1.01	13.636	2.07	13.526	1.24	12.808	4.13	13.634	2.05
n-heptyl.....	14.54	14.655	0.79	14.354	1.28	14.641	0.69	14.274	1.83	14.805	1.82	14.654	0.78	13.794	5.13	14.795	1.75
n-octyl.....	15.72	15.86	0.89	15.493	1.44	15.845	0.80	15.403	2.02	16.054	2.12	15.858	0.88	14.846	5.56	16.035	2.00
n-nonyl.....	16.9	17.132	1.37	16.691	1.24	17.116	1.28	16.589	1.84	17.38	2.84	17.13	1.36	15.945	5.65	17.349	2.66
n-decyl.....	18.08	18.313	1.29	17.809	1.50	18.297	1.20	17.693	2.14	18.614	2.95	18.31	1.27	16.96	6.19	18.57	2.71
n-dodecyl.....	20.44	20.412	0.14	19.78	3.23	20.396	0.22	19.638	3.92	20.829	1.90	20.41	0.15	18.739	8.32	20.757	1.55
n-tridecyl.....	21.62	21.489	0.61	20.799	3.80	21.472	0.68	20.641	4.53	21.966	1.60	21.487	0.62	19.645	9.14	21.879	1.20
MOY			1.03		1.65		0.97		1.77		1.68		1.02		3.82		1.61

Entropie de vaporisation à la température d'ébullition (Cal/mole K)

Hydrocarbure	Exp	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
cyclopentane	20.235	20.303	0.34	20.525	1.43	20.285	0.25	20.455	1.09	20.245	0.05	20.276	0.20	20.098	0.68	20.238	0.01
methylethylcyclopentane	20.147	20.223	0.38	20.436	1.43	20.202	0.27	20.372	1.12	20.184	0.18	20.193	0.23	20.041	0.53	20.17	0.11
1.1-dimethylethylcyclopentane	20.073	20.549	2.37	20.763	3.44	20.525	2.25	20.702	3.13	20.531	2.28	20.517	2.21	20.38	1.53	20.512	2.19

1-methylethyl-2-ethylbenzene	9.29	8.882	4.39	8.977	3.37	8.87	4.52	8.952	3.64	8.881	4.40	8.866	4.56	8.819	5.07	8.869	4.53
1-methylethyl-3-ethylbenzene	9.21	9.194	0.17	9.297	0.94	9.181	0.31	9.273	0.68	9.206	0.04	9.179	0.34	9.133	0.84	9.192	0.20
1-methylethyl-4-ethylbenzene	9.18	8.919	2.84	9.016	1.79	8.906	2.98	8.992	2.05	8.924	2.79	8.903	3.02	8.86	3.49	8.91	2.94
1.2.3-trimethylethylbenzene	9.57	9.714	1.50	9.821	2.62	9.7	1.36	9.795	2.35	9.726	1.63	9.699	1.35	9.643	0.76	9.713	1.49
1.2.4-trimethylethylbenzene	9.38	9.521	1.50	9.628	2.64	9.506	1.34	9.603	2.38	9.536	1.66	9.505	1.33	9.456	0.81	9.521	1.50
1.3.5-trimethylethylbenzene	9.33	9.491	1.73	9.601	2.90	9.476	1.56	9.576	2.64	9.511	1.94	9.475	1.55	9.428	1.05	9.494	1.76
n-butylbenzene	9.38	9.735	3.78	9.848	4.99	9.719	3.61	9.823	4.72	9.756	4.01	9.718	3.60	9.675	3.14	9.737	3.81
iso-butylbenzene	9.04	9.52	5.31	9.628	6.50	9.505	5.14	9.603	6.23	9.536	5.49	9.504	5.13	9.458	4.62	9.52	5.31
sec-butylbenzene	9.07	8.88	2.09	8.975	1.05	8.869	2.22	8.949	1.33	8.876	2.14	8.864	2.27	8.818	2.78	8.863	2.28
tert-butylbenzene	8.99	8.952	0.42	9.047	0.63	8.94	0.56	9.021	0.34	8.949	0.46	8.936	0.60	8.886	1.16	8.937	0.59
1-methylethyl-2-isopropyl...	9.17	8.977	2.10	9.073	1.06	8.966	2.22	9.047	1.34	8.973	2.15	8.961	2.28	8.915	2.78	8.96	2.29
1-methylethyl-3-.....	9.11	8.948	1.78	9.043	0.74	8.937	1.90	9.018	1.01	8.945	1.81	8.932	1.95	8.886	2.46	8.932	1.95
1-methylethyl-4-.....	9.12	9.408	3.16	9.515	4.33	9.393	2.99	9.491	4.07	9.425	3.34	9.738	3.49	9.698	3.06	9.76	3.72
1.4-diethylbenzene	9.41	9.755	3.67	9.87	4.89	9.74	3.51	9.846	4.63	9.779	3.92	9.74	3.51	9.846	4.63	9.779	3.92
1.2.4.5-tetramethylethyl....	10.88	10.275	5.56	10.401	4.40	10.258	5.72	10.375	4.64	10.306	5.28	10.258	5.72	10.212	6.14	10.285	5.47
MOY			1.98		2.36		1.97		2.23		2.03		1.98		1.98		2.02

Enthalpie de vaporisation à la 298 K (kCal/mole)

Hydrocarbure	Exp	VDWG	%	SVDW	%	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
benzene	8.09	7.981	1.35	8.024	0.82	7.974	1.43	7.988	1.26	7.971	1.47	26.763	1.37	26.176	3.53	26.762	1.37
toluene	9.08	9.14	0.66	9.136	0.62	9.132	0.57	9.092	0.13	9.148	0.75	30.655	0.66	29.754	2.30	30.714	0.85
o-xylene	10.381	10.573	1.85	10.492	1.07	10.563	1.75	10.44	0.57	10.617	2.27	35.462	1.85	34.098	2.07	35.623	2.31
methyl-xylene	10.195	10.437	2.37	10.366	1.68	10.426	2.27	10.316	1.19	10.47	2.70	35.004	2.37	33.705	1.43	35.141	2.77
p-xylene	10.128	10.355	2.24	10.289	1.59	10.345	2.14	10.239	1.10	10.387	2.56	34.731	2.24	33.458	1.50	34.864	2.63
ethylbenzene	10.098	10.165	0.66	10.108	0.10	10.155	0.56	10.059	0.39	10.196	0.97	34.094	0.66	32.873	2.94	34.219	1.03
n-propylbenzene	11.05	11.193	1.29	11.077	0.24	11.182	1.19	11.021	0.26	11.249	1.80	37.539	1.29	35.971	2.94	37.741	1.83
iso-propylbenzene	10.789	10.791	0.02	10.698	0.84	10.78	0.08	10.644	1.34	10.837	0.44	36.191	0.01	34.76	3.94	36.363	0.49
1-methylethyl-2-ethylbenzene	11.4	10.86	4.74	10.759	5.62	10.85	4.82	10.704	6.11	10.923	4.18	36.424	4.75	34.939	8.63	36.632	4.21
1-methylethyl-3-ethylbenzene	11.21	11.364	1.37	11.241	0.28	11.353	1.28	11.184	0.23	11.422	1.89	38.115	1.37	36.498	2.93	38.323	1.92
1-methylethyl-4-ethylbenzene	11.14	10.958	1.63	10.853	2.58	10.948	1.72	10.798	3.07	11.013	1.14	36.753	1.62	35.253	5.64	36.947	1.11
1.2.3-trimethylethylbenzene	11.726	12.158	3.68	11.976	2.13	12.147	3.59	11.913	1.59	12.251	4.48	40.776	3.68	38.849	1.22	41.078	4.45
1.2.4-trimethylethylbenzene	11.458	11.889	3.76	11.732	2.39	11.877	3.66	11.672	1.87	11.963	4.41	39.873	3.75	38.06	0.96	40.128	4.42
1.3.5-trimethylethylbenzene	11.348	11.866	4.56	11.721	3.29	11.853	4.45	11.662	2.77	11.929	5.12	39.796	4.56	38.027	0.09	40.027	5.17
n-butylbenzene	11.98	12.417	3.65	12.226	2.05	12.406	3.56	12.162	1.52	12.511	4.43	41.646	3.65	39.628	1.37	41.95	4.41
iso-butylbenzene	11.82	11.962	1.20	11.801	0.16	11.951	1.11	11.741	0.67	12.039	1.85	40.12	1.21	38.282	3.43	40.38	1.87
sec-butylbenzene	11.83	10.895	7.90	10.793	8.77	10.886	7.98	10.735	9.26	10.969	7.28	36.54	7.91	35.03	11.72	36.773	7.33
tert-butylbenzene	11.73	10.951	6.64	10.844	7.55	10.942	6.72	10.787	8.04	11.022	6.04	36.729	6.64	35.203	10.52	36.958	6.05
1-methylethyl-2-isopropyl...	12.1	11.073	8.49	10.959	9.43	11.064	8.56	10.9	9.92	11.155	7.81	37.139	8.48	35.562	12.37	37.393	7.85
1-methylethyl-3-.....	11.94	11.008	7.81	10.898	8.73	10.999	7.88	10.84	9.21	11.086	7.15	36.922	7.81	35.371	11.68	37.165	7.20
1-methylethyl-4-.....	12.02	11.897	1.02	11.738	2.35	11.885	1.12	11.678	2.85	11.973	0.39	39.9	1.04	38.08	5.56	40.159	0.40
1.4-diethylbenzene	12.54	12.494	0.37	12.302	1.90	12.482	0.46	12.238	2.41	12.586	0.37	41.904	0.37	39.857	5.24	42.21	0.36

Annexe G

Propriétés thermodynamique de quelques hydrocarbures en fonction de la température

La présentation des résultats est la suivante:

- Première colonne: nature de l'hydrocarbure, propriété calculée et valeurs de la température;
- Deuxième colonne: valeur expérimentale de la propriété considérée;

La suite des colonnes représente les résultats de chaque équation d'état, ainsi que les écarts engendrés par rapport aux valeurs de expérimentales.

Propane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
193.15	455.105	463.78	1.91	466.57	2.52	463.43	1.83	464.04	1.96	455.26	0.03	463.77	1.90	464.133	1.98	468.754	3.00
198.15	451.923	459.22	1.61	462.32	2.30	458.53	1.46	459.43	1.66	451.47	0.10	458.89	1.54	459.561	1.69	464.414	2.76
203.15	448.197	454.62	1.43	458	2.19	453.69	1.23	454.78	1.47	447.6	0.13	454.03	1.30	454.964	1.51	460	2.63
208.15	443.968	449.99	1.36	453.58	2.17	448.87	1.10	450.08	1.38	443.64	0.07	449.17	1.17	450.326	1.43	455.5	2.60
213.15	439.823	445.3	1.25	449.07	2.10	444.05	0.96	445.32	1.25	439.58	0.06	444.29	1.02	445.632	1.32	450.901	2.52
218.15	435.637	440.54	1.13	444.45	2.02	439.22	0.82	440.49	1.11	435.4	0.05	439.37	0.86	440.865	1.20	446.189	2.42
223.15	431.45	435.69	0.98	439.69	1.91	434.34	0.67	435.56	0.95	431.08	0.09	434.39	0.68	436.011	1.06	441.35	2.29
228.15	427.054	430.73	0.86	434.8	1.81	429.41	0.55	430.51	0.81	426.63	0.10	429.33	0.53	431.051	0.94	436.368	2.18
233.15	422.448	425.65	0.76	429.74	1.73	424.39	0.46	425.34	0.68	422.01	0.10	424.17	0.41	425.971	0.83	431.227	2.08
238.15	418.554	420.43	0.45	424.51	1.42	419.27	0.17	420.03	0.35	417.21	0.32	418.89	0.08	420.751	0.52	425.911	1.76
243.15	414.242	415.06	0.20	419.09	1.17	414.01	0.06	414.55	0.07	412.21	0.49	413.47	0.19	415.375	0.27	420.403	1.49
248.15	409.134	409.5	0.09	413.45	1.05	408.61	0.13	408.88	0.06	407.01	0.52	407.88	0.31	409.823	0.17	414.683	1.36
253.15	403.398	403.75	0.09	407.58	1.04	403.02	0.09	403.02	0.09	401.57	0.45	402.11	0.32	404.077	0.17	408.732	1.32
258.15	397.955	397.78	0.04	401.46	0.88	397.23	0.18	396.93	0.26	395.87	0.52	396.12	0.46	398.115	0.04	402.53	1.15
263.15	392.303	391.57	0.19	395.07	0.71	391.2	0.28	390.6	0.43	389.9	0.61	389.89	0.62	391.915	0.10	396.054	0.96
268.15	385.604	385.1	0.13	388.38	0.72	384.91	0.18	384	0.42	383.63	0.51	383.4	0.57	385.454	0.04	389.279	0.95
273.15	378.654	378.34	0.08	381.36	0.71	378.33	0.09	377.11	0.41	377.04	0.43	376.61	0.54	378.706	0.01	382.182	0.93
278.15	371.369	371.26	0.03	373.99	0.71	371.42	0.01	369.9	0.40	370.09	0.34	369.5	0.50	371.643	0.07	374.731	0.91
283.15	364.168	363.83	0.09	366.23	0.57	364.15	0.00	362.33	0.50	362.74	0.39	362.03	0.59	364.235	0.02	366.896	0.75
288.15	356.632	356.02	0.17	358.06	0.40	356.47	0.05	354.38	0.63	354.98	0.46	354.15	0.70	356.447	0.05	358.642	0.56
293.15	348.551	347.79	0.22	349.42	0.25	348.34	0.06	346	0.73	346.75	0.52	345.84	0.78	348.24	0.09	349.93	0.40
298.15	340.178	339.1	0.32	340.28	0.03	339.71	0.14	337.15	0.89	338.01	0.64	337.03	0.93	339.568	0.18	340.713	0.16
303.15	331.05	329.88	0.35	330.58	0.14	330.52	0.16	327.78	0.99	328.7	0.71	327.68	1.02	330.382	0.20	330.94	0.03
308.15	321.086	320.09	0.31	320.27	0.25	320.7	0.12	317.83	1.01	318.77	0.72	317.72	1.05	320.619	0.15	320.549	0.17
313.15	310.828	309.65	0.38	309.26	0.50	310.18	0.21	307.22	1.16	308.13	0.87	307.07	1.21	310.207	0.20	309.471	0.44
318.15	300.194	298.47	0.57	297.47	0.91	298.85	0.45	295.88	1.44	296.71	1.16	295.64	1.52	299.058	0.38	297.609	0.86
323.15	289.392	286.44	1.02	284.79	1.59	286.61	0.96	283.69	1.97	284.37	1.74	283.32	2.10	287.062	0.81	284.876	1.56
MOY			0.59		1.18		0.46		0.86		0.45		0.85		0.57		1.42

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
193.15	2.358	2.4012	1.83	2.4156	2.44	2.3993	1.75	2.4025	1.89	2.3572	0.03	2.4011	1.83	2.403	1.91	2.427	2.93
198.15	2.2805	2.3175	1.62	2.3332	2.31	2.3141	1.47	2.3186	1.67	2.2786	0.08	2.3159	1.55	2.3193	1.70	2.3439	2.78
203.15	2.2056	2.2379	1.46	2.2545	2.22	2.2333	1.26	2.2386	1.50	2.2034	0.10	2.235	1.33	2.2395	1.54	2.2644	2.67
208.15	2.1336	2.1619	1.33	2.1791	2.13	2.1565	1.07	2.1623	1.35	2.1314	0.10	2.1579	1.14	2.1635	1.40	2.1884	2.57
213.15	2.0633	2.0891	1.25	2.1068	2.11	2.0833	0.97	2.0893	1.26	2.0623	0.05	2.0844	1.02	2.0907	1.33	2.1155	2.53
218.15	1.9967	2.0194	1.14	2.0373	2.03	2.0134	0.84	2.0192	1.13	1.9959	0.04	2.0141	0.87	2.0209	1.21	2.0454	2.44
223.15	1.9335	1.9524	0.98	1.9704	1.91	1.9464	0.67	1.9519	0.95	1.9318	0.09	1.9466	0.68	1.9539	1.06	1.9778	2.29
228.15	1.8715	1.8879	0.88	1.9058	1.83	1.8821	0.57	1.887	0.83	1.8699	0.09	1.8818	0.55	1.8893	0.95	1.9127	2.20

233.15	1.812	1.8257	0.76	1.8432	1.72	1.8203	0.46	1.8243	0.68	1.81	0.11	1.8193	0.40	1.827	0.83	1.8496	2.08
238.15	1.7572	1.7654	0.47	1.7825	1.44	1.7605	0.19	1.7637	0.37	1.7519	0.30	1.759	0.10	1.7667	0.54	1.7884	1.78
243.15	1.7036	1.707	0.20	1.7236	1.17	1.7027	0.05	1.7049	0.08	1.6953	0.49	1.7005	0.18	1.7083	0.28	1.729	1.49
248.15	1.6484	1.6502	0.11	1.6661	1.07	1.6466	0.11	1.6477	0.04	1.6402	0.50	1.6437	0.29	1.6515	0.19	1.6711	1.38
253.15	1.5931	1.5949	0.11	1.61	1.06	1.592	0.07	1.592	0.07	1.5863	0.43	1.5884	0.30	1.5962	0.19	1.6146	1.35
258.15	1.5407	1.5409	0.01	1.5552	0.94	1.5387	0.13	1.5376	0.20	1.5335	0.47	1.5345	0.40	1.5422	0.10	1.5593	1.21
263.15	1.4905	1.488	0.17	1.5013	0.72	1.4866	0.26	1.4843	0.42	1.4817	0.59	1.4816	0.60	1.4893	0.08	1.505	0.97
268.15	1.4382	1.4361	0.15	1.4484	0.71	1.4354	0.19	1.4321	0.42	1.4307	0.52	1.4298	0.58	1.4375	0.05	1.4517	0.94
273.15	1.3862	1.3851	0.08	1.3962	0.72	1.3851	0.08	1.3806	0.40	1.3803	0.43	1.3788	0.53	1.3864	0.01	1.3992	0.94
278.15	1.3373	1.3347	0.19	1.3446	0.55	1.3353	0.15	1.3298	0.56	1.3305	0.51	1.3284	0.67	1.3361	0.09	1.3472	0.74
283.15	1.2862	1.2849	0.10	1.2934	0.56	1.2861	0.01	1.2796	0.51	1.2811	0.40	1.2786	0.59	1.2864	0.02	1.2958	0.75
288.15	1.2381	1.2355	0.21	1.2426	0.36	1.2371	0.08	1.2298	0.67	1.2319	0.50	1.2291	0.73	1.237	0.09	1.2446	0.52
293.15	1.1891	1.1864	0.23	1.192	0.24	1.1883	0.07	1.1803	0.74	1.1828	0.53	1.1797	0.79	1.1879	0.10	1.1937	0.39
298.15	1.1409	1.1373	0.32	1.1413	0.04	1.1394	0.13	1.1308	0.89	1.1337	0.63	1.1304	0.92	1.1389	0.18	1.1428	0.17
303.15	1.0927	1.0882	0.41	1.0905	0.20	1.0903	0.22	1.0812	1.05	1.0843	0.77	1.0809	1.08	1.0898	0.27	1.0917	0.09
308.15	1.0417	1.0388	0.28	1.0393	0.23	1.0407	0.10	1.0314	0.99	1.0345	0.69	1.031	1.03	1.0405	0.12	1.0403	0.13
313.15	0.9922	0.9888	0.34	0.9876	0.46	0.9905	0.17	0.9811	1.12	0.984	0.83	0.9806	1.17	0.9906	0.16	0.9883	0.39
318.15	0.9433	0.9381	0.55	0.935	0.88	0.9394	0.41	0.93	1.41	0.9326	1.13	0.9293	1.48	0.94	0.35	0.9354	0.84
323.15	0.8951	0.8864	0.97	0.8813	1.54	0.8869	0.92	0.8779	1.92	0.88	1.69	0.8768	2.04	0.8883	0.76	0.8816	1.51
MOY			0.60		1.17		0.46		0.86		0.45		0.85		0.57		1.41

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
193.15	2.724	2.7785	2.00	2.8491	4.59	2.7527	1.05	2.7828	2.16	2.6937	1.11	2.7534	1.08	2.786	2.28	2.884	5.87
198.15	2.012	2.0611	2.44	2.1093	4.84	2.0425	1.52	2.0637	2.57	2.0085	0.17	2.0423	1.51	2.067	2.73	2.132	5.96
203.15	1.544	1.5553	0.73	1.5884	2.88	1.5421	0.12	1.5569	0.84	1.5225	1.39	1.5413	0.17	1.559	0.97	1.603	3.82
208.15	1.173	1.1922	1.64	1.2151	3.59	1.1828	0.84	1.1931	1.71	1.1715	0.13	1.1818	0.75	1.195	1.88	1.225	4.43
213.15	0.911	0.9271	1.77	0.9428	3.49	0.9204	1.03	0.9276	1.82	0.914	0.33	0.9192	0.90	0.9294	2.02	0.9496	4.24
218.15	0.72	0.7305	1.46	0.7413	2.96	0.7257	0.79	0.7306	1.47	0.7221	0.29	0.7244	0.61	0.7323	1.71	0.7459	3.60
223.15	0.58	0.5825	0.43	0.5899	1.71	0.579	0.17	0.5825	0.43	0.5772	0.48	0.5779	0.36	0.584	0.69	0.5931	2.26
228.15	0.467	0.4696	0.56	0.4746	1.63	0.4672	0.04	0.4695	0.54	0.4662	0.17	0.466	0.21	0.471	0.86	0.4769	2.12
233.15	0.38	0.3825	0.66	0.3857	1.50	0.3807	0.18	0.3823	0.61	0.3803	0.08	0.3796	0.11	0.3837	0.97	0.3875	1.97
238.15	0.318	0.3144	1.13	0.3165	0.47	0.3131	1.54	0.3141	1.23	0.313	1.57	0.3121	1.86	0.3155	0.79	0.3178	0.06
243.15	0.26	0.2607	0.27	0.2618	0.69	0.2597	0.12	0.2603	0.12	0.2597	0.12	0.2588	0.46	0.2616	0.62	0.2629	1.12
248.15	0.215	0.2178	1.30	0.2184	1.58	0.2171	0.98	0.2174	1.12	0.2171	0.98	0.2162	0.56	0.2187	1.72	0.2192	1.95
253.15	0.182	0.1833	0.71	0.1834	0.77	0.1828	0.44	0.1829	0.49	0.1827	0.38	0.1819	0.05	0.1841	1.15	0.1842	1.21
258.15	0.1556	0.1552	0.26	0.1551	0.32	0.1548	0.51	0.1548	0.51	0.1548	0.51	0.1541	0.96	0.1561	0.32	0.1558	0.13
263.15	0.1318	0.1323	0.38	0.1319	0.08	0.132	0.15	0.1318	0.00	0.1319	0.08	0.1312	0.46	0.1331	0.99	0.1326	0.61
268.15	0.1133	0.1134	0.09	0.1129	0.35	0.1131	0.18	0.1129	0.35	0.1129	0.35	0.1124	0.79	0.1141	0.71	0.1135	0.18
273.15	0.0974	0.0976	0.21	0.097	0.41	0.0974	0.00	0.0971	0.31	0.0972	0.21	0.0967	0.72	0.09837	1.00	0.09762	0.23
278.15	0.0846	0.0844	0.24	0.0838	0.95	0.0842	0.47	0.0839	0.83	0.084	0.71	0.0836	1.18	0.08518	0.69	0.08439	0.25
283.15	0.0731	0.0733	0.27	0.0727	0.55	0.0731	0.00	0.0728	0.41	0.0729	0.27	0.0725	0.82	0.07408	1.34	0.07328	0.25

288.15	0.0639	0.0639	0.00	0.0633	0.94	0.0637	0.31	0.0634	0.78	0.0634	0.78	0.0631	1.25	0.06467	1.21	0.06387	0.05
293.15	0.0561	0.0559	0.36	0.0553	1.43	0.0557	0.71	0.0554	1.25	0.0554	1.25	0.0551	1.78	0.05665	0.98	0.05588	0.39
298.15	0.0495	0.049	1.01	0.0484	2.22	0.0489	1.21	0.0485	2.02	0.0485	2.02	0.0483	2.42	0.04977	0.55	0.04904	0.93
303.15	0.0435	0.0431	0.92	0.0425	2.30	0.0429	1.38	0.0426	2.07	0.0426	2.07	0.0424	2.53	0.04385	0.80	0.04315	0.80
308.15	0.0385	0.038	1.30	0.0375	2.60	0.0378	1.82	0.0375	2.60	0.0374	2.86	0.0373	3.12	0.03872	0.57	0.03807	1.12
313.15	0.0339	0.0335	1.18	0.033	2.65	0.0334	1.47	0.033	2.65	0.0329	2.95	0.0328	3.24	0.03425	1.03	0.03365	0.74
318.15	0.0302	0.0296	1.99	0.0292	3.31	0.0295	2.32	0.0291	3.64	0.029	3.97	0.0289	4.30	0.03035	0.50	0.02979	1.36
323.15	0.0268	0.0262	2.24	0.0258	3.73	0.026	2.99	0.0257	4.10	0.0256	4.48	0.0255	4.85	0.02691	0.41	0.02641	1.46
MOY			0.95		1.95		0.83		1.36		1.10		1.37		1.09		1.74

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
193.15	0.001603	0.001697	5.86	0.001696	5.80	0.001698	5.93	0.001505	6.11	0.001506	6.05	0.001505	6.11
198.15	0.001616	0.001711	5.88	0.00171	5.82	0.001712	5.94	0.001517	6.13	0.001518	6.06	0.001517	6.13
203.15	0.00163	0.001726	5.89	0.001725	5.83	0.001726	5.89	0.001529	6.20	0.00153	6.13	0.001529	6.20
208.15	0.001644	0.001741	5.90	0.00174	5.84	0.001741	5.90	0.001542	6.20	0.001543	6.14	0.001542	6.20
213.15	0.001659	0.001757	5.91	0.001755	5.79	0.001757	5.91	0.001555	6.27	0.001556	6.21	0.001556	6.21
218.15	0.001674	0.001773	5.91	0.001772	5.85	0.001774	5.97	0.001569	6.27	0.00157	6.21	0.00157	6.21
223.15	0.00169	0.00179	5.92	0.001789	5.86	0.001791	5.98	0.001584	6.27	0.001585	6.21	0.001585	6.21
228.15	0.001707	0.001809	5.98	0.001808	5.92	0.001809	5.98	0.0016	6.27	0.0016	6.27	0.0016	6.27
233.15	0.001725	0.001828	5.97	0.001827	5.91	0.001828	5.97	0.001616	6.32	0.001616	6.32	0.001617	6.26
238.15	0.001743	0.001848	6.02	0.001847	5.97	0.001848	6.02	0.001633	6.31	0.001634	6.25	0.001634	6.25
243.15	0.001761	0.001869	6.13	0.001868	6.08	0.001869	6.13	0.001652	6.19	0.001652	6.19	0.001652	6.19
248.15	0.00178	0.001891	6.24	0.001891	6.24	0.001892	6.29	0.001671	6.12	0.001671	6.12	0.001671	6.12
253.15	0.001799	0.001915	6.45	0.001915	6.45	0.001915	6.45	0.001691	6.00	0.001691	6.00	0.001692	5.95
258.15	0.00182	0.00194	6.59	0.00194	6.59	0.00194	6.59	0.001713	5.88	0.001713	5.88	0.001714	5.82
263.15	0.001842	0.001966	6.73	0.001967	6.79	0.001967	6.79	0.001736	5.75	0.001736	5.75	0.001737	5.70
268.15	0.001864	0.001994	6.97	0.001995	7.03	0.001995	7.03	0.001761	5.53	0.001761	5.53	0.001762	5.47
273.15	0.001887	0.002024	7.26	0.002026	7.37	0.002025	7.31	0.001787	5.30	0.001787	5.30	0.001788	5.25
278.15	0.001911	0.002057	7.64	0.002058	7.69	0.002057	7.64	0.001815	5.02	0.001815	5.02	0.001816	4.97
283.15	0.001935	0.002091	8.06	0.002093	8.17	0.002092	8.11	0.001846	4.60	0.001846	4.60	0.001847	4.55
288.15	0.001963	0.002128	8.41	0.002131	8.56	0.002129	8.46	0.001878	4.33	0.001878	4.33	0.00188	4.23
293.15	0.001992	0.002168	8.84	0.002171	8.99	0.002169	8.89	0.001914	3.92	0.001914	3.92	0.001915	3.87
298.15	0.002023	0.002211	9.29	0.002215	9.49	0.002212	9.34	0.001952	3.51	0.001952	3.51	0.001954	3.41
303.15	0.002055	0.002258	9.88	0.002263	10.12	0.002259	9.93	0.001994	2.97	0.001995	2.92	0.001996	2.87
308.15	0.002095	0.002309	10.21	0.002315	10.50	0.002311	10.31	0.00204	2.63	0.002041	2.58	0.002042	2.53
313.15	0.002135	0.002365	10.77	0.002373	11.15	0.002368	10.91	0.002091	2.06	0.002092	2.01	0.002094	1.92
318.15	0.002178	0.002428	11.48	0.002437	11.89	0.002431	11.62	0.002148	1.38	0.002149	1.33	0.00215	1.29
323.15	0.002222	0.002497	12.38	0.002508	12.87	0.002501	12.56	0.002211	0.50	0.002213	0.41	0.002214	0.36
MOY			7.50		7.58		7.55		4.96		4.94		4.91

Ethane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
173.15	500.532	505.81	1.05	512.1	2.31	503.96	0.68	505.74	1.04	500.37	0.03	504.15	0.72	506.091	1.11	514.261	2.74
178.15	493.917	499.86	1.20	506.05	2.46	497.84	0.79	499.68	1.17	494.94	0.21	497.93	0.81	500.134	1.26	508.096	2.87
183.15	487.009	493.74	1.38	499.78	2.62	491.62	0.95	493.43	1.32	489.28	0.47	491.58	0.94	494	1.44	501.71	3.02
188.15	479.933	487.4	1.56	493.26	2.78	485.28	1.11	486.96	1.46	483.37	0.72	485.07	1.07	487.659	1.61	495.073	3.15
193.15	472.857	480.82	1.68	486.46	2.88	478.76	1.25	480.25	1.56	477.16	0.91	478.37	1.17	481.078	1.74	488.153	3.23
198.15	465.488	473.97	1.82	479.34	2.98	472.02	1.40	473.24	1.67	470.64	1.11	471.42	1.27	474.223	1.88	480.918	3.31
203.15	457.994	466.8	1.92	471.87	3.03	465.02	1.53	465.92	1.73	463.77	1.26	464.19	1.35	467.058	1.98	473.332	3.35
208.15	450.332	459.28	1.99	464.01	3.04	457.7	1.64	458.24	1.76	456.5	1.37	456.63	1.40	459.547	2.05	465.357	3.34
213.15	442.335	451.37	2.04	455.72	3.03	450.03	1.74	450.16	1.77	448.8	1.46	448.69	1.44	451.649	2.11	456.955	3.31
218.15	434.046	443.02	2.07	446.95	2.97	441.94	1.82	441.64	1.75	440.62	1.51	440.34	1.45	443.323	2.14	448.08	3.23
223.15	425.714	434.19	1.99	437.67	2.81	433.38	1.80	432.64	1.63	431.92	1.46	431.51	1.36	434.52	2.07	438.686	3.05
228.15	416.754	424.83	1.94	427.81	2.65	424.29	1.81	423.1	1.52	422.64	1.41	422.14	1.29	425.189	2.02	428.718	2.87
233.15	407.124	414.88	1.91	417.32	2.50	414.59	1.83	412.96	1.43	412.73	1.38	412.17	1.24	415.272	2.00	418.118	2.70
238.15	396.783	404.27	1.89	406.12	2.35	404.21	1.87	402.15	1.35	402.1	1.34	401.52	1.19	404.701	2.00	406.816	2.53
243.15	385.688	392.92	1.88	394.15	2.19	393.06	1.91	390.61	1.28	390.69	1.30	390.12	1.15	393.4	2.00	394.734	2.35
248.15	374.174	380.74	1.75	381.3	1.90	381.03	1.83	378.24	1.09	378.39	1.13	377.85	0.98	381.278	1.90	381.78	2.03
253.15	361.572	367.63	1.68	367.46	1.63	367.99	1.78	364.93	0.93	365.09	0.97	364.61	0.84	368.223	1.84	367.843	1.73
258.15	347.965	353.45	1.58	352.5	1.30	353.81	1.68	350.54	0.74	350.65	0.77	350.25	0.66	354.101	1.76	352.788	1.39
263.15	334.065	338.03	1.19	336.25	0.65	338.3	1.27	334.91	0.25	334.91	0.25	334.59	0.16	338.741	1.40	336.445	0.71
268.15	319.202	321.14	0.61	318.49	0.22	321.21	0.63	317.82	0.43	317.62	0.50	317.4	0.56	321.919	0.85	318.596	0.19
273.15	303.292	302.49	0.26	298.93	1.44	302.23	0.35	298.99	1.42	298.5	1.58	298.38	1.62	303.338	0.02	298.953	1.43
278.15	285.037	281.67	1.18	277.16	2.76	280.95	1.43	277.99	2.47	277.14	2.77	277.11	2.78	282.577	0.86	277.11	2.78
283.15	264.187	258.05	2.32	252.59	4.39	256.72	2.83	254.22	3.77	252.92	4.26	252.97	4.25	259.009	1.96	252.474	4.43
288.15	239.024	230.63	3.51	224.26	6.18	228.55	4.38	226.7	5.16	224.87	5.92	225.01	5.86	231.628	3.09	224.103	6.24
293.15	210.219	197.59	6.01	190.49	9.38	194.66	7.40	193.67	7.87	191.27	9.01	191.46	8.92	198.605	5.52	190.302	9.47
298.15	174.966	154.91	11.46	147.51	15.69	151.16	13.61	151.22	13.57	148.31	15.23	148.52	15.11	155.866	10.92	147.334	15.79
MOY			2.23		3.31		2.28		2.31		2.24		2.29		2.21		3.51

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
173.15	2.8905	2.9212	1.06	2.9575	2.32	2.9106	0.70	2.9208	1.05	2.8899	0.02	2.9116	0.73	2.9228	1.12	2.9702	2.76
178.15	2.7724	2.8058	1.20	2.8406	2.46	2.7945	0.80	2.8048	1.17	2.7783	0.21	2.795	0.82	2.8074	1.26	2.8522	2.88
183.15	2.659	2.6958	1.38	2.7288	2.63	2.6843	0.95	2.6941	1.32	2.6715	0.47	2.684	0.94	2.6972	1.44	2.7394	3.02
188.15	2.5506	2.5905	1.56	2.6216	2.78	2.5792	1.12	2.5882	1.47	2.5691	0.73	2.5781	1.08	2.5919	1.62	2.6313	3.16
193.15	2.448	2.4894	1.69	2.5186	2.88	2.4787	1.25	2.4864	1.57	2.4704	0.92	2.4767	1.17	2.4907	1.74	2.5273	3.24
198.15	2.3492	2.392	1.82	2.4191	2.98	2.3821	1.40	2.3883	1.66	2.3752	1.11	2.3791	1.27	2.3933	1.88	2.427	3.31
203.15	2.2545	2.2978	1.92	2.3227	3.03	2.289	1.53	2.2935	1.73	2.2829	1.26	2.2849	1.35	2.2991	1.98	2.33	3.35
208.15	2.1633	2.2065	2.00	2.2292	3.05	2.1989	1.65	2.2015	1.77	2.1931	1.38	2.1937	1.41	2.2078	2.06	2.2357	3.35
213.15	2.075	2.1176	2.05	2.138	3.04	2.1113	1.75	2.1119	1.78	2.1055	1.47	2.1051	1.45	2.1189	2.12	2.1438	3.32
218.15	1.99	2.0308	2.05	2.0488	2.95	2.0259	1.80	2.0245	1.73	2.0198	1.50	2.0185	1.43	2.0322	2.12	2.054	3.22
223.15	1.9075	1.9457	2.00	1.9613	2.82	1.9421	1.81	1.9388	1.64	1.9356	1.47	1.9337	1.37	1.9472	2.08	1.9659	3.06

228.15	1.8267	1.8621	1.94	1.8751	2.65	1.8597	1.81	1.8545	1.52	1.8525	1.41	1.8503	1.29	1.8636	2.02	1.8791	2.87
233.15	1.7463	1.7794	1.90	1.7899	2.50	1.7782	1.83	1.7712	1.43	1.7702	1.37	1.7678	1.23	1.7811	1.99	1.7933	2.69
238.15	1.6659	1.6975	1.90	1.7053	2.37	1.6973	1.88	1.6887	1.37	1.6884	1.35	1.686	1.21	1.6994	2.01	1.7082	2.54
243.15	1.5863	1.6159	1.87	1.621	2.19	1.6165	1.90	1.6065	1.27	1.6068	1.29	1.6044	1.14	1.6179	1.99	1.6234	2.34
248.15	1.5076	1.5343	1.77	1.5366	1.92	1.5355	1.85	1.5242	1.10	1.5248	1.14	1.5227	1.00	1.5365	1.92	1.5385	2.05
253.15	1.4281	1.4522	1.69	1.4516	1.65	1.4537	1.79	1.4415	0.94	1.4422	0.99	1.4403	0.85	1.4546	1.86	1.4531	1.75
258.15	1.3477	1.3692	1.60	1.3655	1.32	1.3706	1.70	1.3579	0.76	1.3583	0.79	1.3568	0.68	1.3717	1.78	1.3666	1.40
263.15	1.2695	1.2845	1.18	1.2778	0.65	1.2856	1.27	1.2727	0.25	1.2727	0.25	1.2715	0.16	1.2873	1.40	1.2786	0.72
268.15	1.1903	1.1976	0.61	1.1878	0.21	1.1979	0.64	1.1852	0.43	1.1845	0.49	1.1837	0.55	1.2005	0.86	1.1882	0.18
273.15	1.1103	1.1074	0.26	1.0944	1.43	1.1065	0.34	1.0946	1.41	1.0928	1.58	1.0924	1.61	1.1105	0.02	1.0945	1.42
278.15	1.0249	1.0127	1.19	0.9965	2.77	1.0101	1.44	0.9994	2.49	0.9964	2.78	0.9963	2.79	1.0159	0.88	0.9963	2.79
283.15	0.9333	0.9114	2.35	0.8921	4.41	0.9067	2.85	0.8978	3.80	0.8932	4.30	0.8934	4.28	0.9147	1.99	0.8917	4.46
288.15	0.8256	0.8004	3.05	0.7783	5.73	0.7932	3.92	0.7867	4.71	0.7804	5.47	0.7809	5.41	0.8038	2.64	0.7777	5.80
293.15	0.7172	0.674	6.02	0.6498	9.40	0.664	7.42	0.6607	7.88	0.6525	9.02	0.6531	8.94	0.6775	5.54	0.6492	9.48
298.15	0.587	0.5196	11.48	0.4948	15.71	0.507	13.63	0.5072	13.59	0.4974	15.26	0.4982	15.13	0.5228	10.94	0.4942	15.81
MOY			2.21		3.30		2.27		2.30		2.23		2.28		2.20		3.50

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
173.15	0.8888	0.904	1.71	0.9226	3.80	0.894	0.59	0.9038	1.69	0.889	0.02	0.8932	0.50	0.9059	1.92	0.9298	4.61
178.15	0.6731	0.6848	1.74	0.6964	3.46	0.6779	0.71	0.6845	1.69	0.6752	0.31	0.677	0.58	0.6863	1.96	0.701	4.15
183.15	0.5177	0.5274	1.87	0.5345	3.25	0.5227	0.97	0.527	1.80	0.5211	0.66	0.5218	0.79	0.5287	2.12	0.5376	3.84
188.15	0.4048	0.4124	1.88	0.4166	2.92	0.4091	1.06	0.4119	1.75	0.4081	0.82	0.4081	0.82	0.4135	2.15	0.4187	3.43
193.15	0.3209	0.3268	1.84	0.3291	2.56	0.3245	1.12	0.3263	1.68	0.3238	0.90	0.3236	0.84	0.3277	2.12	0.3307	3.05
198.15	0.257	0.2621	1.98	0.2633	2.45	0.2605	1.36	0.2616	1.79	0.2599	1.13	0.2596	1.01	0.263	2.33	0.2644	2.88
203.15	0.2084	0.2125	1.97	0.2129	2.16	0.2114	1.44	0.212	1.73	0.2109	1.20	0.2106	1.06	0.2134	2.40	0.2139	2.64
208.15	0.1706	0.174	1.99	0.174	1.99	0.1732	1.52	0.1735	1.70	0.1728	1.29	0.1725	1.11	0.1749	2.52	0.1748	2.46
213.15	0.1409	0.1438	2.06	0.1434	1.77	0.1432	1.63	0.1433	1.70	0.1427	1.28	0.1425	1.14	0.1446	2.63	0.1441	2.27
218.15	0.1173	0.1198	2.13	0.1192	1.62	0.1193	1.71	0.1192	1.62	0.1188	1.28	0.1186	1.11	0.1206	2.81	0.1199	2.22
223.15	0.09832	0.1005	2.22	0.0998	1.51	0.1001	1.81	0.0999	1.61	0.0996	1.30	0.0995	1.20	0.1013	3.03	0.1004	2.12
228.15	0.08301	0.0848	2.16	0.0841	1.31	0.0845	1.79	0.0843	1.55	0.084	1.19	0.0839	1.07	0.0856	3.12	0.08473	2.07
233.15	0.07046	0.072	2.19	0.0713	1.19	0.0718	1.90	0.0715	1.48	0.0712	1.05	0.0712	1.05	0.07278	3.29	0.07191	2.06
238.15	0.06013	0.0614	2.11	0.0607	0.95	0.0612	1.78	0.0609	1.28	0.0607	0.95	0.0606	0.78	0.0622	3.44	0.06136	2.05
243.15	0.05153	0.0526	2.08	0.052	0.91	0.0525	1.88	0.0521	1.11	0.0519	0.72	0.0519	0.72	0.05341	3.65	0.05261	2.10
248.15	0.04436	0.0453	2.12	0.0446	0.54	0.0451	1.67	0.0447	0.77	0.0446	0.54	0.0445	0.32	0.04603	3.76	0.04529	2.10
253.15	0.0383	0.039	1.83	0.0385	0.52	0.0389	1.57	0.0385	0.52	0.0383	0.00	0.0383	0.00	0.03981	3.94	0.03912	2.14
258.15	0.03316	0.0337	1.63	0.0332	0.12	0.0336	1.33	0.0332	0.12	0.0331	0.18	0.033	0.48	0.03452	4.10	0.03389	2.20
263.15	0.02879	0.0292	1.42	0.0287	0.31	0.0291	1.08	0.0287	0.31	0.0285	1.01	0.0285	1.01	0.02999	4.17	0.02942	2.19
268.15	0.02502	0.0253	1.12	0.0249	0.48	0.0252	0.72	0.0248	0.88	0.0246	1.68	0.0246	1.68	0.02608	4.24	0.02557	2.20
273.15	0.02175	0.0219	0.69	0.0215	1.15	0.0218	0.23	0.0214	1.61	0.0212	2.53	0.0213	2.07	0.02268	4.28	0.02224	2.25
278.15	0.0188	0.019	1.06	0.0186	1.06	0.0188	0.00	0.0184	2.13	0.0183	2.66	0.0183	2.66	0.01971	4.84	0.01932	2.77
283.15	0.0163	0.0163	0.00	0.016	1.84	0.0162	0.61	0.0158	3.07	0.0157	3.68	0.0157	3.68	0.01708	4.79	0.01675	2.76

288.15	0.01366	0.014	2.49	0.0137	0.29	0.0139	1.76	0.0134	1.90	0.0133	2.64	0.0133	2.64	0.01472	7.76	0.01445	5.78
293.15	0.01143	0.0118	3.24	0.0116	1.49	0.0117	2.36	0.0113	1.14	0.0112	2.01	0.0112	2.01	0.01256	9.89	0.01235	8.05
298.15	0.00937	0.0098	4.59	0.0096	2.45	0.0097	3.52	0.0092	1.81	0.0092	1.81	0.0092	1.81	0.01051	12.17	0.01036	10.57
303.15	0.00706	0.0076	7.65	0.0075	6.23	0.0075	6.23	0.0071	0.57	0.0071	0.57	0.0071	0.57	0.008311	17.72	0.008242	16.74
MOY			2.14		1.79		1.57		1.44		1.24		1.21		4.49		3.77

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%				
173.15	0.001789	0.00186	3.97	0.001858	3.86	0.001861	4.02	0.001646	7.99	0.001647	7.94	0.001647	7.94				
178.15	0.001808	0.001881	4.04	0.00188	3.98	0.001882	4.09	0.001664	7.96	0.001665	7.91	0.001665	7.91				
183.15	0.001825	0.001903	4.27	0.001902	4.22	0.001904	4.33	0.001684	7.73	0.001684	7.73	0.001684	7.73				
188.15	0.001844	0.001927	4.50	0.001926	4.45	0.001928	4.56	0.001704	7.59	0.001705	7.54	0.001705	7.54				
193.15	0.001863	0.001952	4.78	0.001951	4.72	0.001953	4.83	0.001726	7.35	0.001726	7.35	0.001726	7.35				
198.15	0.001884	0.001979	5.04	0.001978	4.99	0.00198	5.10	0.001749	7.17	0.001749	7.17	0.001749	7.17				
203.15	0.001905	0.002007	5.35	0.002007	5.35	0.002008	5.41	0.001773	6.93	0.001774	6.88	0.001774	6.88				
208.15	0.001927	0.002038	5.76	0.002038	5.76	0.002038	5.76	0.0018	6.59	0.0018	6.59	0.001801	6.54				
213.15	0.001951	0.00207	6.10	0.002071	6.15	0.002071	6.15	0.001828	6.30	0.001829	6.25	0.001829	6.25				
218.15	0.001967	0.002105	7.02	0.002106	7.07	0.002106	7.07	0.001858	5.54	0.001859	5.49	0.001859	5.49				
223.15	0.002003	0.002143	6.99	0.002144	7.04	0.002143	6.99	0.001891	5.59	0.001892	5.54	0.001892	5.54				
228.15	0.002032	0.002183	7.43	0.002185	7.53	0.002184	7.48	0.001927	5.17	0.001928	5.12	0.001928	5.12				
233.15	0.002062	0.002227	8.00	0.00223	8.15	0.002228	8.05	0.001966	4.66	0.001967	4.61	0.001967	4.61				
238.15	0.002093	0.002275	8.70	0.002279	8.89	0.002276	8.74	0.002009	4.01	0.002009	4.01	0.00201	3.97				
243.15	0.002128	0.002328	9.40	0.002332	9.59	0.002329	9.45	0.002055	3.43	0.002056	3.38	0.002057	3.34				
248.15	0.002167	0.002386	10.11	0.002391	10.34	0.002387	10.15	0.002107	2.77	0.002108	2.72	0.002109	2.68				
253.15	0.002209	0.00245	10.91	0.002457	11.23	0.002451	10.96	0.002165	1.99	0.002166	1.95	0.002166	1.95				
258.15	0.002255	0.002521	11.80	0.00253	12.20	0.002524	11.93	0.002229	1.15	0.002231	1.06	0.002231	1.06				
263.15	0.002305	0.002602	12.89	0.002612	13.32	0.002605	13.02	0.002303	0.09	0.002305	0.00	0.002305	0.00				
268.15	0.002364	0.002694	13.96	0.002706	14.47	0.002698	14.13	0.002387	0.97	0.00239	1.10	0.00239	1.10				
273.15	0.002429	0.002801	15.31	0.002815	15.89	0.002806	15.52	0.002485	2.31	0.002489	2.47	0.002489	2.47				
278.15	0.002503	0.002927	16.94	0.002944	17.62	0.002933	17.18	0.002601	3.92	0.002606	4.12	0.002606	4.12				
283.15	0.002587	0.003079	19.02	0.003098	19.75	0.003087	19.33	0.002742	5.99	0.002748	6.22	0.002748	6.22				
288.15	0.002706	0.003269	20.81	0.003292	21.66	0.003279	21.18	0.00292	7.91	0.002928	8.20	0.002927	8.17				
293.15	0.002856	0.00352	23.25	0.003547	24.19	0.003533	23.70	0.003156	10.50	0.003166	10.85	0.003166	10.85				
298.15	0.00307	0.003886	26.58	0.003916	27.56	0.003903	27.13	0.003504	14.14	0.003517	14.56	0.003516	14.53				
MOY			10.50		10.77		10.62		5.61		5.64		5.63				

Benzène

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
290	439.2	432.36	1.56	432.54	1.52	432.56	1.51	432.69	1.48	422.2	3.87	432.96	1.42	432.746	1.47	434.565	1.06
300	432.1	426.25	1.35	427.15	1.15	426.04	1.40	426.54	1.29	417.36	3.41	426.47	1.30	426.637	1.26	429.062	0.70
310	424.9	420.15	1.12	421.66	0.76	419.65	1.24	420.39	1.06	412.43	2.93	420.07	1.14	420.534	1.03	423.464	0.34
320	417.7	414.02	0.88	416.05	0.40	413.35	1.04	414.2	0.84	407.37	2.47	413.71	0.96	414.404	0.79	417.747	0.01

330	410.3	407.83	0.60	410.29	0.00	407.08	0.78	407.94	0.58	402.15	1.99	407.34	0.72	408.214	0.51	411.883	0.39
340	402.8	401.55	0.31	404.36	0.39	400.8	0.50	401.57	0.31	396.75	1.50	400.93	0.46	401.93	0.22	405.843	0.76
350	395.4	395.14	0.07	398.21	0.71	394.45	0.24	395.06	0.09	391.13	1.08	394.42	0.25	395.516	0.03	399.594	1.06
360	388	388.56	0.14	391.82	0.98	388	0.00	388.38	0.10	385.27	0.70	387.78	0.06	388.935	0.24	393.102	1.31
370	380.5	381.77	0.33	385.15	1.22	381.38	0.23	381.48	0.26	379.13	0.36	380.95	0.12	382.15	0.43	386.33	1.53
380	372.9	374.74	0.49	378.17	1.41	374.54	0.44	374.33	0.38	372.66	0.06	373.89	0.27	375.12	0.60	379.24	1.70
390	365.3	367.42	0.58	370.82	1.51	367.43	0.58	366.87	0.43	365.82	0.14	366.54	0.34	367.802	0.68	371.789	1.78
400	357.3	359.76	0.69	363.06	1.61	359.99	0.75	359.07	0.50	358.58	0.36	358.85	0.43	360.151	0.80	363.93	1.86
410	349.2	351.72	0.72	354.84	1.62	352.16	0.85	350.87	0.48	350.87	0.48	350.76	0.45	352.115	0.83	355.614	1.84
420	340.7	343.23	0.74	346.11	1.59	343.86	0.93	342.23	0.45	342.65	0.57	342.21	0.44	343.64	0.86	346.783	1.79
430	331.7	334.25	0.77	336.8	1.54	335.03	1.00	333.06	0.41	333.84	0.65	333.13	0.43	334.663	0.89	337.374	1.71
440	322.1	324.68	0.80	326.83	1.47	325.58	1.08	323.32	0.38	324.37	0.70	323.44	0.42	325.112	0.94	327.314	1.62
450	311.9	314.46	0.82	316.13	1.36	315.4	1.12	312.9	0.32	314.16	0.72	313.04	0.37	314.903	0.96	316.517	1.48
460	301	303.47	0.82	304.58	1.19	304.39	1.13	301.72	0.24	303.1	0.70	301.83	0.28	303.935	0.98	304.882	1.29
470	289.1	291.6	0.86	292.08	1.03	292.41	1.14	289.64	0.19	291.05	0.67	289.67	0.20	292.085	1.03	292.284	1.10
480	276.3	278.69	0.87	278.45	0.78	279.29	1.08	276.52	0.08	277.87	0.57	276.41	0.04	279.198	1.05	278.57	0.82
490	262.1	264.54	0.93	263.5	0.53	264.81	1.03	262.16	0.02	263.34	0.47	261.84	0.10	265.071	1.13	263.54	0.55
500	246.4	248.88	1.01	246.96	0.23	248.69	0.93	246.29	0.04	247.19	0.32	245.67	0.30	249.432	1.23	246.928	0.21
510	229	231.32	1.01	228.46	0.24	230.54	0.67	228.53	0.21	229.04	0.02	227.54	0.64	231.894	1.26	228.363	0.28
520	209.4	211.29	0.90	207.44	0.94	209.78	0.18	208.31	0.52	208.31	0.52	206.86	1.21	211.874	1.18	207.288	1.01
530	187.1	187.82	0.38	183.02	2.18	185.46	0.88	184.71	1.28	184.08	1.61	182.72	2.34	188.415	0.70	182.803	2.30
540	160.7	159.13	0.98	153.46	4.51	155.86	3.01	155.99	2.93	154.63	3.78	153.44	4.52	159.72	0.61	153.246	4.64
550	127.2	120.97	4.90	114.9	9.67	116.96	8.05	118.02	7.22	115.96	8.84	115.03	9.57	121.511	4.47	114.708	9.82
	MOY		0.91		1.50		1.18		0.82		1.46		1.06		0.97		1.59

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
290	1.514	1.4909	1.53	1.4915	1.49	1.4916	1.48	1.492	1.45	1.456	3.83	1.493	1.39	1.4922	1.44	1.4985	1.02
300	1.441	1.4209	1.39	1.4238	1.19	1.4201	1.45	1.4218	1.33	1.3913	3.45	1.4216	1.35	1.4221	1.31	1.4302	0.75
310	1.371	1.3553	1.15	1.3602	0.79	1.3537	1.26	1.3561	1.09	1.3305	2.95	1.3551	1.16	1.3566	1.05	1.366	0.36
320	1.306	1.2938	0.93	1.3002	0.44	1.2917	1.09	1.2944	0.89	1.2731	2.52	1.2928	1.01	1.295	0.84	1.3055	0.04
330	1.243	1.2359	0.57	1.2433	0.02	1.2336	0.76	1.2362	0.55	1.2187	1.95	1.2344	0.69	1.237	0.48	1.2481	0.41
340	1.186	1.181	0.42	1.1893	0.28	1.1788	0.61	1.1811	0.41	1.1669	1.61	1.1792	0.57	1.1821	0.33	1.1937	0.65
350	1.131	1.129	0.18	1.1377	0.59	1.127	0.35	1.1288	0.19	1.1175	1.19	1.1269	0.36	1.13	0.09	1.1417	0.95
360	1.078	1.0793	0.12	1.0884	0.96	1.0778	0.02	1.0788	0.07	1.0702	0.72	1.0772	0.07	1.0804	0.22	1.092	1.30
370	1.029	1.0318	0.27	1.041	1.17	1.0308	0.17	1.031	0.19	1.0247	0.42	1.0296	0.06	1.0328	0.37	1.0441	1.47
380	0.982	0.9862	0.43	0.9952	1.34	0.9856	0.37	0.9851	0.32	0.9807	0.13	0.9839	0.19	0.9872	0.53	0.998	1.63
410	0.851	0.8578	0.80	0.8655	1.70	0.8589	0.93	0.8558	0.56	0.8558	0.56	0.8555	0.53	0.8588	0.92	0.8674	1.93
420	0.811	0.8172	0.76	0.8241	1.62	0.8187	0.95	0.8148	0.47	0.8158	0.59	0.8148	0.47	0.8182	0.89	0.8257	1.81
430	0.771	0.7773	0.82	0.7832	1.58	0.7791	1.05	0.7746	0.47	0.7764	0.70	0.7747	0.48	0.7783	0.95	0.7846	1.76
440	0.732	0.7379	0.81	0.7428	1.48	0.7399	1.08	0.7348	0.38	0.7372	0.71	0.7351	0.42	0.7389	0.94	0.7439	1.63
450	0.693	0.6988	0.84	0.7025	1.37	0.7009	1.14	0.6953	0.33	0.6981	0.74	0.6956	0.38	0.6998	0.98	0.7034	1.50

460	0.655	0.6597	0.72	0.6621	1.08	0.6617	1.02	0.6559	0.14	0.6589	0.60	0.6561	0.17	0.6607	0.87	0.6628	1.19
470	0.616	0.6204	0.71	0.6214	0.88	0.6221	0.99	0.6163	0.05	0.6193	0.54	0.6163	0.05	0.6215	0.89	0.6219	0.96
480	0.574	0.5806	1.15	0.5801	1.06	0.5818	1.36	0.5761	0.37	0.5789	0.85	0.5759	0.33	0.5817	1.34	0.5804	1.11
490	0.535	0.5399	0.92	0.5378	0.52	0.5404	1.01	0.535	0.00	0.5374	0.45	0.5344	0.11	0.541	1.12	0.5378	0.52
500	0.493	0.4978	0.97	0.4939	0.18	0.4974	0.89	0.4926	0.08	0.4944	0.28	0.4914	0.32	0.4989	1.20	0.4939	0.18
510	0.449	0.4536	1.02	0.448	0.22	0.452	0.67	0.4481	0.20	0.4491	0.02	0.4462	0.62	0.4547	1.27	0.4478	0.27
520	0.403	0.4063	0.82	0.3989	1.02	0.4034	0.10	0.4006	0.60	0.4006	0.60	0.3978	1.29	0.4075	1.12	0.3986	1.09
530	0.354	0.3544	0.11	0.3453	2.46	0.3499	1.16	0.3485	1.55	0.3473	1.89	0.3448	2.60	0.3555	0.42	0.3449	2.57
540	0.298	0.2947	1.11	0.2842	4.63	0.2886	3.15	0.2889	3.05	0.2864	3.89	0.2841	4.66	0.2958	0.74	0.2838	4.77
550	0.232	0.2199	5.22	0.2089	9.96	0.2126	8.36	0.2146	7.50	0.2108	9.14	0.2091	9.87	0.2209	4.78	0.2086	10.09
MOY			0.95		1.52		1.26		0.89		1.61		1.17		1.00		1.60

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
290	3.569	3.4806	2.48	3.5518	0.48	3.4641	2.94	3.4902	2.21	3.3444	6.29	3.4658	2.89	3.494	2.10	3.597	0.78
300	2.292	2.2547	1.63	2.2998	0.34	2.244	2.09	2.26	1.40	2.1871	4.58	2.2438	2.10	2.262	1.31	2.324	1.40
310	1.525	1.5104	0.96	1.5389	0.91	1.5037	1.40	1.5133	0.77	1.4765	3.18	1.5027	1.46	1.515	0.66	1.553	1.84
320	1.046	1.0423	0.35	1.0603	1.37	1.0383	0.74	1.0439	0.20	1.0254	1.97	1.037	0.86	1.045	0.10	1.068	2.10
330	0.7379	0.7386	0.09	0.75	1.64	0.7362	0.23	0.7395	0.22	0.7303	1.03	0.7348	0.42	0.7408	0.39	0.7546	2.26
340	0.5332	0.5359	0.51	0.543	1.84	0.5344	0.23	0.5363	0.58	0.532	0.23	0.5332	0.00	0.5374	0.79	0.5458	2.36
350	0.3938	0.397	0.81	0.4014	1.93	0.3962	0.61	0.3972	0.86	0.3953	0.38	0.395	0.30	0.3982	1.12	0.4031	2.36
360	0.2965	0.2997	1.08	0.3023	1.96	0.2992	0.91	0.2997	1.08	0.2991	0.88	0.2982	0.57	0.3007	1.42	0.3034	2.33
370	0.2233	0.2301	3.05	0.2315	3.67	0.2298	2.91	0.2299	2.96	0.23	3.00	0.2288	2.46	0.2309	3.40	0.2323	4.03
380	0.1767	0.1793	1.47	0.1799	1.81	0.179	1.30	0.179	1.30	0.1793	1.47	0.1782	0.85	0.18	1.87	0.1805	2.15
390	0.1393	0.1415	1.58	0.1417	1.72	0.1414	1.51	0.1413	1.44	0.1416	1.65	0.1407	1.01	0.1422	2.08	0.1422	2.08
400	0.1112	0.1131	1.71	0.113	1.62	0.1129	1.53	0.1128	1.44	0.1131	1.71	0.1123	0.99	0.1137	2.25	0.1134	1.98
410	0.08972	0.0913	1.76	0.091	1.43	0.0912	1.65	0.091	1.43	0.0913	1.76	0.0906	0.98	0.09188	2.41	0.09141	1.88
420	0.07309	0.0744	1.79	0.074	1.25	0.0742	1.52	0.074	1.25	0.0743	1.66	0.0737	0.83	0.07496	2.56	0.0744	1.79
430	0.06003	0.0611	1.78	0.0607	1.12	0.061	1.62	0.0608	1.28	0.061	1.62	0.0605	0.78	0.06167	2.73	0.06107	1.73
440	0.04965	0.0506	1.91	0.0501	0.91	0.0504	1.51	0.0502	1.11	0.0503	1.31	0.0499	0.50	0.05111	2.94	0.05052	1.75
450	0.04131	0.0421	1.91	0.0416	0.70	0.0419	1.43	0.0417	0.94	0.0418	1.19	0.0415	0.46	0.04264	3.22	0.04206	1.82
460	0.03455	0.0352	1.88	0.0348	0.72	0.0351	1.59	0.0348	0.72	0.0349	1.01	0.0346	0.14	0.03576	3.50	0.03521	1.91
470	0.02901	0.0296	2.03	0.0292	0.65	0.0294	1.34	0.0292	0.65	0.0292	0.65	0.029	0.03	0.03013	3.86	0.02962	2.10
480	0.02441	0.0249	2.01	0.0246	0.78	0.0248	1.60	0.0245	0.37	0.0245	0.37	0.0244	0.04	0.02547	4.34	0.02502	2.50
490	0.02059	0.0211	2.48	0.0207	0.53	0.0209	1.51	0.0207	0.53	0.0206	0.05	0.0205	0.44	0.02159	4.86	0.02118	2.87
500	0.01736	0.0178	2.53	0.0175	0.81	0.0176	1.38	0.0174	0.23	0.0173	0.35	0.0173	0.35	0.01832	5.53	0.01796	3.46
510	0.01462	0.015	2.60	0.0147	0.55	0.0149	1.92	0.0146	0.14	0.0146	0.14	0.0145	0.82	0.01554	6.29	0.01523	4.17
520	0.01226	0.0126	2.77	0.0124	1.14	0.0125	1.96	0.0122	0.49	0.0122	0.49	0.0121	1.31	0.01315	7.26	0.01289	5.14
530	0.0102	0.0105	2.94	0.0104	1.96	0.0104	1.96	0.0101	0.98	0.0101	0.98	0.0101	0.98	0.01106	8.43	0.01085	6.37
540	0.008349	0.0087	4.20	0.0085	1.81	0.0086	3.01	0.0083	0.59	0.0082	1.78	0.0082	1.78	0.009199	10.18	0.009041	8.29
550	0.006616	0.0069	4.29	0.0068	2.78	0.0069	4.29	0.0066	0.24	0.0065	1.75	0.0065	1.75	0.007461	12.77	0.007357	11.20
560	0.004696	0.005	6.47	0.005	6.47	0.005	6.47	0.0047	0.09	0.0047	0.09	0.0047	0.09	0.005542	18.02	0.005455	16.16

	MOY		2.11		1.53		1.83		0.91		1.48		0.90		4.16		3.53
Volume spécifique liquide (m3/kg)																	
T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%				
290	0.001133	0.00125	10.33	0.001249	10.24	0.00125	10.33	0.001109	2.12	0.00111	2.03	0.001109	2.12				
300	0.001147	0.001263	10.11	0.001262	10.03	0.001263	10.11	0.001119	2.44	0.00112	2.35	0.00112	2.35				
310	0.001162	0.001276	9.81	0.001276	9.81	0.001276	9.81	0.001131	2.67	0.001132	2.58	0.001131	2.67				
320	0.001176	0.001291	9.78	0.00129	9.69	0.001291	9.78	0.001143	2.81	0.001144	2.72	0.001144	2.72				
330	0.001192	0.001306	9.56	0.001305	9.48	0.001306	9.56	0.001156	3.02	0.001157	2.94	0.001157	2.94				
340	0.001207	0.001323	9.61	0.001322	9.53	0.001323	9.61	0.00117	3.07	0.001171	2.98	0.001171	2.98				
350	0.001224	0.00134	9.48	0.001339	9.40	0.00134	9.48	0.001185	3.19	0.001186	3.10	0.001186	3.10				
360	0.001241	0.001359	9.51	0.001358	9.43	0.001359	9.51	0.001202	3.14	0.001202	3.14	0.001202	3.14				
370	0.001259	0.001379	9.53	0.001378	9.45	0.001379	9.53	0.001219	3.18	0.001219	3.18	0.001219	3.18				
380	0.001277	0.0014	9.63	0.0014	9.63	0.001401	9.71	0.001237	3.13	0.001237	3.13	0.001238	3.05				
390	0.001297	0.001424	9.79	0.001423	9.71	0.001424	9.79	0.001258	3.01	0.001257	3.08	0.001258	3.01				
400	0.001318	0.001449	9.94	0.001449	9.94	0.001449	9.94	0.001279	2.96	0.001279	2.96	0.00128	2.88				
410	0.00134	0.001476	10.15	0.001476	10.15	0.001476	10.15	0.001303	2.76	0.001303	2.76	0.001304	2.69				
420	0.001363	0.001506	10.49	0.001507	10.56	0.001506	10.49	0.001329	2.49	0.001329	2.49	0.00133	2.42				
430	0.001388	0.001538	10.81	0.001539	10.88	0.001539	10.88	0.001358	2.16	0.001357	2.23	0.001358	2.16				
440	0.001415	0.001574	11.24	0.001576	11.38	0.001575	11.31	0.001389	1.84	0.001389	1.84	0.00139	1.77				
450	0.001444	0.001614	11.77	0.001616	11.91	0.001615	11.84	0.001425	1.32	0.001424	1.39	0.001426	1.25				
460	0.001475	0.001658	12.41	0.001661	12.61	0.001659	12.47	0.001464	0.75	0.001464	0.75	0.001465	0.68				
470	0.00151	0.001708	13.11	0.001712	13.38	0.001709	13.18	0.001509	0.07	0.001509	0.07	0.00151	0.00				
480	0.001548	0.001764	13.95	0.00177	14.34	0.001767	14.15	0.00156	0.78	0.00156	0.78	0.001562	0.90				
490	0.001591	0.001829	14.96	0.001836	15.40	0.001832	15.15	0.001619	1.76	0.001619	1.76	0.001621	1.89				
500	0.00164	0.001905	16.16	0.001914	16.71	0.00191	16.46	0.001688	2.93	0.001689	2.99	0.001691	3.11				
510	0.001697	0.001996	17.62	0.002007	18.27	0.002002	17.97	0.001771	4.36	0.001773	4.48	0.001776	4.66				
520	0.001765	0.002107	19.38	0.00212	20.11	0.002114	19.77	0.001874	6.18	0.001877	6.35	0.00188	6.52				
530	0.001849	0.002248	21.58	0.002265	22.50	0.002258	22.12	0.002006	8.49	0.00201	8.71	0.002013	8.87				
540	0.002126	0.002441	14.82	0.00246	15.71	0.002453	15.38	0.002187	2.87	0.002193	3.15	0.002196	3.29				
550	0.002258	0.002734	21.08	0.002757	22.10	0.00275	21.79	0.002465	9.17	0.002474	9.57	0.002477	9.70				
	MOY		12.47		12.68		12.60		3.06		3.09		3.11				

Butane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
140	490.01	504.71	3.00	488.26	0.36	521.49	6.42	504.41	2.94	471.3	3.82	517.19	5.55	504.688	3.00	491.581	0.32
150	481.95	493.9	2.48	481.18	0.16	506.84	5.16	493.83	2.46	465.13	3.49	503.75	4.52	494.001	2.50	484.323	0.49
160	474.03	483.84	2.07	474.2	0.04	493.58	4.12	483.93	2.09	459.03	3.16	491.45	3.67	484.03	2.11	477.17	0.66
170	466.22	474.37	1.75	467.29	0.23	481.47	3.27	474.59	1.80	452.98	2.84	480.12	2.98	474.628	1.80	470.098	0.83
180	458.51	465.37	1.50	460.44	0.42	470.31	2.57	465.67	1.56	446.96	2.52	469.58	2.41	465.68	1.56	463.079	1.00
190	450.85	456.75	1.31	453.61	0.61	459.96	2.02	457.1	1.39	440.94	2.20	459.69	1.96	457.089	1.38	456.087	1.16
200	443.22	448.41	1.17	446.77	0.80	450.27	1.59	448.77	1.25	434.89	1.88	450.33	1.60	448.772	1.25	449.09	1.32

210	435.61	440.28	1.07	439.88	0.98	441.11	1.26	440.63	1.15	428.77	1.57	441.38	1.32	440.649	1.16	442.051	1.48
220	427.93	432.27	1.01	432.9	1.16	432.36	1.04	432.58	1.09	422.56	1.25	432.75	1.13	432.648	1.10	434.928	1.64
230	420.19	424.32	0.98	425.79	1.33	423.9	0.88	424.57	1.04	416.19	0.95	424.31	0.98	424.693	1.07	427.67	1.78
240	412.33	416.34	0.97	418.49	1.49	415.62	0.80	416.51	1.01	409.61	0.66	415.98	0.89	416.712	1.06	420.223	1.91
250	404.3	408.26	0.98	410.93	1.64	407.41	0.77	408.33	1.00	402.77	0.38	407.65	0.83	408.626	1.07	412.524	2.03
260	396.05	399.99	0.99	403.05	1.77	399.16	0.79	399.95	0.98	395.59	0.12	399.22	0.80	400.357	1.09	404.505	2.13
270	387.52	391.46	1.02	394.77	1.87	390.76	0.84	391.28	0.97	388.01	0.13	390.58	0.79	391.824	1.11	396.089	2.21
280	373.66	382.57	2.38	386.01	3.31	382.08	2.25	382.25	2.30	379.95	1.68	381.63	2.13	382.939	2.48	387.196	3.62
290	369.37	373.24	1.05	376.69	1.98	373.01	0.99	372.75	0.92	371.31	0.53	372.26	0.78	373.61	1.15	377.735	2.26
300	359.59	363.36	1.05	366.69	1.97	363.42	1.07	362.68	0.86	362	0.67	362.34	0.76	363.737	1.15	367.606	2.23
310	349.21	352.82	1.03	355.91	1.92	353.16	1.13	351.94	0.78	351.9	0.77	351.75	0.73	353.209	1.15	356.698	2.14
320	338.13	341.5	1.00	344.23	1.80	342.09	1.17	340.4	0.67	340.89	0.82	340.34	0.65	341.9	1.11	344.882	2.00
330	326.19	329.24	0.94	331.48	1.62	330.02	1.17	327.91	0.53	328.8	0.80	327.95	0.54	329.661	1.06	332.009	1.78
340	313.24	315.87	0.84	317.49	1.36	316.74	1.12	314.29	0.34	315.46	0.71	314.37	0.36	316.314	0.98	317.891	1.48
350	299.05	301.16	0.71	302.03	1.00	302	0.99	299.31	0.09	300.63	0.53	299.37	0.11	301.632	0.86	302.305	1.09
360	283.38	284.82	0.51	284.79	0.50	285.47	0.74	282.7	0.24	284	0.22	282.63	0.26	285.32	0.68	284.964	0.56
370	265.84	266.44	0.23	265.38	0.17	266.71	0.33	264.04	0.68	265.16	0.26	263.73	0.79	266.971	0.43	265.439	0.15
380	245.92	245.42	0.20	243.21	1.10	245.1	0.33	242.75	1.29	243.5	0.98	242.07	1.57	245.989	0.03	243.169	1.12
390	222.8	220.83	0.88	217.36	2.44	219.68	1.40	217.91	2.19	218.08	2.12	216.7	2.74	221.429	0.62	217.24	2.50
400	195.1	190.98	2.11	186.24	4.54	188.78	3.24	187.87	3.71	187.26	4.02	185.99	4.67	191.598	1.79	186.051	4.64
410	159.8	152.2	4.76	146.38	8.40	148.83	6.86	149.07	6.71	147.52	7.68	146.46	8.35	152.813	4.37	146.178	8.52
420	106.45	92	13.57	86.31	18.92	88.02	17.31	89.39	16.03	87.14	18.14	86.48	18.76	92.493	13.11	86.161	19.06
	MOY		1.78		2.20		2.47		2.00		2.24		2.51		1.80		2.49

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
140	3.5001	3.6051	3.00	3.4874	0.36	3.7277	6.50	3.6029	2.94	3.3737	3.61	3.696	5.60	3.6049	2.99	3.5116	0.33
150	3.213	3.2927	2.48	3.2078	0.16	3.3798	5.19	3.2922	2.46	3.1059	3.33	3.3589	4.54	3.2933	2.50	3.229	0.50
160	2.9627	3.024	2.07	2.9638	0.04	3.0851	4.13	3.0246	2.09	2.8724	3.05	3.0717	3.68	3.0252	2.11	2.9823	0.66
170	2.7425	2.7904	1.75	2.7488	0.23	2.8322	3.27	2.7917	1.79	2.6669	2.76	2.8242	2.98	2.7919	1.80	2.7653	0.83
180	2.5473	2.5854	1.50	2.558	0.42	2.6129	2.58	2.5871	1.56	2.4847	2.46	2.6088	2.41	2.5871	1.56	2.5728	1.00
190	2.3729	2.404	1.31	2.3874	0.61	2.4209	2.02	2.4058	1.39	2.3217	2.16	2.4194	1.96	2.4057	1.38	2.4006	1.17
200	2.2161	2.2421	1.17	2.2338	0.80	2.2514	1.59	2.2439	1.25	2.1751	1.85	2.2517	1.61	2.2439	1.25	2.2456	1.33
210	2.0743	2.0966	1.08	2.0946	0.98	2.1006	1.27	2.0982	1.15	2.0422	1.55	2.1019	1.33	2.0983	1.16	2.1051	1.48
220	1.9452	1.9649	1.01	1.9677	1.16	1.9653	1.03	1.9663	1.08	1.9209	1.25	1.9671	1.13	1.9666	1.10	1.977	1.63
230	1.8269	1.8449	0.99	1.8513	1.34	1.8431	0.89	1.846	1.05	1.8096	0.95	1.8449	0.99	1.8465	1.07	1.8595	1.78
240	1.718	1.7348	0.98	1.7437	1.50	1.7318	0.80	1.7355	1.02	1.7068	0.65	1.7333	0.89	1.7363	1.07	1.751	1.92
250	1.6171	1.633	0.98	1.6437	1.64	1.6297	0.78	1.6333	1.00	1.6111	0.37	1.6306	0.83	1.6345	1.08	1.6501	2.04
260	1.5232	1.5384	1.00	1.5502	1.77	1.5353	0.79	1.5383	0.99	1.5215	0.11	1.5355	0.81	1.5398	1.09	1.5558	2.14
270	1.4352	1.4499	1.02	1.4621	1.87	1.4473	0.84	1.4492	0.98	1.4371	0.13	1.4466	0.79	1.4512	1.11	1.467	2.22
280	1.3524	1.3663	1.03	1.3786	1.94	1.3646	0.90	1.3652	0.95	1.357	0.34	1.363	0.78	1.3676	1.12	1.3828	2.25
290	1.2737	1.287	1.04	1.2989	1.98	1.2862	0.98	1.2853	0.91	1.2804	0.53	1.2836	0.78	1.2883	1.15	1.3025	2.26

300	1.1986	1.2112	1.05	1.2223	1.98	1.2114	1.07	1.2089	0.86	1.2067	0.68	1.2078	0.77	1.2125	1.16	1.2254	2.24
310	1.1265	1.1381	1.03	1.1481	1.92	1.1392	1.13	1.1353	0.78	1.1352	0.77	1.1347	0.73	1.1394	1.15	1.1506	2.14
320	1.0567	1.0672	0.99	1.0757	1.80	1.069	1.16	1.0637	0.66	1.0653	0.81	1.0636	0.65	1.0684	1.11	1.0778	2.00
330	0.9884	0.9977	0.94	1.0045	1.63	1	1.17	0.9937	0.54	0.9964	0.81	0.9938	0.55	0.999	1.07	1.0061	1.79
340	0.9213	0.929	0.84	0.9338	1.36	0.9316	1.12	0.9244	0.34	0.9278	0.71	0.9246	0.36	0.9303	0.98	0.935	1.49
350	0.8545	0.8605	0.70	0.8629	0.98	0.8629	0.98	0.8552	0.08	0.8589	0.51	0.8554	0.11	0.8618	0.85	0.8637	1.08
360	0.7872	0.7912	0.51	0.7911	0.50	0.793	0.74	0.7853	0.24	0.7889	0.22	0.7851	0.27	0.7926	0.69	0.7916	0.56
370	0.7185	0.7201	0.22	0.7173	0.17	0.7208	0.32	0.7136	0.68	0.7166	0.26	0.7128	0.79	0.7215	0.42	0.7174	0.15
380	0.6471	0.6458	0.20	0.64	1.10	0.645	0.32	0.6388	1.28	0.6408	0.97	0.637	1.56	0.6473	0.03	0.6399	1.11
390	0.5713	0.5662	0.89	0.5574	2.43	0.5633	1.40	0.5587	2.21	0.5592	2.12	0.5556	2.75	0.5678	0.61	0.557	2.50
400	0.4878	0.4775	2.11	0.4656	4.55	0.472	3.24	0.4697	3.71	0.4681	4.04	0.465	4.67	0.479	1.80	0.4651	4.65
410	0.3898	0.3712	4.77	0.357	8.41	0.363	6.88	0.3636	6.72	0.3598	7.70	0.3572	8.36	0.3727	4.39	0.3565	8.54
420	0.2534	0.219	13.58	0.2055	18.90	0.2096	17.28	0.2128	16.02	0.2075	18.11	0.2059	18.75	0.2202	13.10	0.2051	19.06
MOY		1.73		2.16		2.43		1.96		2.17		2.46		1.76		2.44	

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
140	11635	13725.52	17.97	12292.35	5.65	15896.12	36.62	13802.25	18.63	9452.845	18.76	15380.8	32.19	13830	18.87	13120	12.76
150	2470	2789.24	12.92	2625.039	6.28	3034.838	22.87	2806.658	13.63	2097.285	15.09	2985.944	20.89	2810	13.77	2765	11.94
160	654	716.0773	9.49	696.3413	6.47	750.3666	14.73	720.5173	10.17	575.7133	11.97	745.1284	13.93	721.2	10.28	726.2	11.04
170	207	222.0151	7.25	220.5644	6.55	227.3673	9.84	223.2871	7.87	187.9148	9.22	226.8756	9.60	223.4	7.92	228.4	10.34
180	76.4	80.3102	5.12	80.8719	5.85	81.111	6.17	80.7203	5.65	70.7417	7.41	81.1304	6.19	80.77	5.72	83.27	8.99
190	31.8	33.0006	3.78	33.5019	5.35	33.0565	3.95	33.1459	4.23	29.9877	5.70	33.0971	4.08	33.17	4.31	34.33	7.96
200	14.7	15.0815	2.60	15.3776	4.61	15.0387	2.30	15.1377	2.98	14.0413	4.48	15.0593	2.44	15.15	3.06	15.69	6.73
210	7.39	7.5365	1.98	7.6979	4.17	7.4988	1.47	7.5599	2.30	7.1511	3.23	7.5066	1.58	7.566	2.38	7.824	5.87
220	4	4.0617	1.54	4.1484	3.71	4.0387	0.97	4.0719	1.80	3.9113	2.22	4.0403	1.01	4.076	1.90	4.203	5.08
230	2.31	2.3341	1.04	2.3808	3.06	2.3213	0.49	2.3387	1.24	2.2734	1.58	2.3206	0.46	2.341	1.34	2.405	4.11
240	1.4	1.4167	1.19	1.442	3.00	1.4099	0.71	1.4188	1.34	1.392	0.57	1.4085	0.61	1.421	1.50	1.454	3.86
250	0.893	0.9012	0.92	0.9148	2.44	0.8976	0.52	0.902	1.01	0.8912	0.20	0.896	0.34	0.9037	1.20	0.9205	3.08
260	0.592	0.5967	0.79	0.6039	2.01	0.5948	0.47	0.5969	0.83	0.5929	0.15	0.5933	0.22	0.5984	1.08	0.6069	2.52
270	0.406	0.4089	0.71	0.4126	1.63	0.408	0.49	0.4089	0.71	0.4077	0.42	0.4067	0.17	0.4102	1.03	0.4143	2.04
280	0.286	0.2887	0.94	0.2903	1.50	0.2882	0.77	0.2885	0.87	0.2884	0.84	0.287	0.35	0.2897	1.29	0.2914	1.89
290	0.207	0.2091	1.01	0.2096	1.26	0.2088	0.87	0.2087	0.82	0.2091	1.01	0.2078	0.39	0.21	1.45	0.2103	1.59
300	0.1533	0.1547	0.91	0.1547	0.91	0.1545	0.78	0.1543	0.65	0.1548	0.98	0.1537	0.26	0.1556	1.50	0.1553	1.30
310	0.1156	0.1167	0.95	0.1163	0.61	0.1165	0.78	0.1163	0.61	0.1166	0.87	0.1158	0.17	0.1175	1.64	0.1169	1.12
320	0.0885	0.0894	1.02	0.0889	0.45	0.0892	0.79	0.089	0.56	0.0892	0.79	0.0886	0.11	0.09017	1.89	0.08942	1.04
330	0.0687	0.0695	1.16	0.0689	0.29	0.0693	0.87	0.069	0.44	0.0692	0.73	0.0686	0.15	0.07018	2.15	0.0694	1.02
340	0.0539	0.0545	1.11	0.0539	0.00	0.0543	0.74	0.054	0.19	0.0541	0.37	0.0538	0.19	0.05525	2.50	0.0545	1.11
350	0.0427	0.0432	1.17	0.0426	0.23	0.043	0.70	0.0427	0.00	0.0427	0.00	0.0425	0.47	0.04391	2.83	0.04322	1.22
360	0.034	0.0345	1.47	0.0339	0.29	0.0342	0.59	0.0339	0.29	0.0339	0.29	0.0337	0.88	0.03516	3.41	0.03455	1.62
370	0.0272	0.0276	1.47	0.0271	0.37	0.0274	0.74	0.0271	0.37	0.027	0.74	0.0269	1.10	0.02828	3.97	0.02775	2.02
380	0.0218	0.0221	1.38	0.0217	0.46	0.0219	0.46	0.0216	0.92	0.0215	1.38	0.0214	1.83	0.0228	4.59	0.02236	2.57

390	0.0174	0.0177	1.72	0.0173	0.57	0.0175	0.57	0.0171	1.72	0.0171	1.72	0.017	2.30	0.01835	5.46	0.01799	3.39
400	0.0138	0.014	1.45	0.0137	0.72	0.0138	0.00	0.0135	2.17	0.0134	2.90	0.0133	3.62	0.01466	6.23	0.01439	4.28
410	0.0106	0.0108	1.89	0.0106	0.00	0.0107	0.94	0.0103	2.83	0.0102	3.77	0.0102	3.77	0.01149	8.40	0.0113	6.60
420	0.0075	0.0078	4.00	0.0077	2.67	0.0077	2.67	0.0073	2.67	0.0073	2.67	0.0073	2.67	0.008487	13.16	0.008394	11.92
MOY			3.07		2.45		3.93		3.02		3.45		3.86		4.65		4.79

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
140	0.001369	0.001504	9.86	0.001505	9.93	0.001503	9.79	0.001341	2.05	0.001344	1.83	0.001341	2.05
150	0.001387	0.001518	9.44	0.001518	9.44	0.001517	9.37	0.001352	2.52	0.001355	2.31	0.001352	2.52
160	0.001405	0.001532	9.04	0.001532	9.04	0.001532	9.04	0.001364	2.92	0.001367	2.70	0.001364	2.92
170	0.001424	0.001547	8.64	0.001547	8.64	0.001547	8.64	0.001377	3.30	0.001379	3.16	0.001377	3.30
180	0.001443	0.001563	8.32	0.001563	8.32	0.001563	8.32	0.00139	3.67	0.001392	3.53	0.00139	3.67
190	0.001463	0.001581	8.07	0.00158	8.00	0.001581	8.07	0.001405	3.96	0.001407	3.83	0.001405	3.96
200	0.001484	0.001599	7.75	0.001599	7.75	0.001599	7.75	0.00142	4.31	0.001422	4.18	0.00142	4.31
210	0.001505	0.001619	7.57	0.001618	7.51	0.001619	7.57	0.001437	4.52	0.001438	4.45	0.001437	4.52
220	0.001528	0.00164	7.33	0.001639	7.26	0.00164	7.33	0.001455	4.78	0.001456	4.71	0.001455	4.78
230	0.001551	0.001663	7.22	0.001662	7.16	0.001663	7.22	0.001474	4.96	0.001475	4.90	0.001474	4.96
240	0.001575	0.001688	7.17	0.001687	7.11	0.001688	7.17	0.001495	5.08	0.001496	5.02	0.001495	5.08
250	0.001601	0.001714	7.06	0.001713	7.00	0.001715	7.12	0.001518	5.18	0.001518	5.18	0.001518	5.18
260	0.001628	0.001743	7.06	0.001743	7.06	0.001744	7.13	0.001543	5.22	0.001543	5.22	0.001543	5.22
270	0.001656	0.001775	7.19	0.001774	7.13	0.001775	7.19	0.00157	5.19	0.00157	5.19	0.00157	5.19
280	0.001686	0.00181	7.35	0.001809	7.30	0.00181	7.35	0.001599	5.16	0.001599	5.16	0.0016	5.10
290	0.001718	0.001848	7.57	0.001847	7.51	0.001848	7.57	0.001632	5.01	0.001632	5.01	0.001633	4.95
300	0.001752	0.00189	7.88	0.00189	7.88	0.00189	7.88	0.001669	4.74	0.001668	4.79	0.001669	4.74
310	0.00179	0.001936	8.16	0.001937	8.21	0.001937	8.21	0.00171	4.47	0.001709	4.53	0.00171	4.47
320	0.00183	0.001989	8.69	0.00199	8.74	0.001989	8.69	0.001756	4.04	0.001755	4.10	0.001756	4.04
330	0.001874	0.002048	9.28	0.00205	9.39	0.002049	9.34	0.001808	3.52	0.001807	3.58	0.001809	3.47
340	0.001923	0.002116	10.04	0.002119	10.19	0.002117	10.09	0.001868	2.86	0.001867	2.91	0.001869	2.81
350	0.001978	0.002194	10.92	0.002198	11.12	0.002195	10.97	0.001937	2.07	0.001937	2.07	0.001939	1.97
360	0.002041	0.002285	11.95	0.002292	12.30	0.002288	12.10	0.00202	1.03	0.00202	1.03	0.002022	0.93
370	0.002114	0.002394	13.25	0.002403	13.67	0.002398	13.43	0.002119	0.24	0.002119	0.24	0.002122	0.38
380	0.0022	0.002528	14.91	0.00254	15.45	0.002534	15.18	0.002241	1.86	0.002243	1.95	0.002246	2.09
390	0.002307	0.002699	16.99	0.002715	17.69	0.002708	17.38	0.002398	3.94	0.002402	4.12	0.002405	4.25
400	0.002447	0.002929	19.70	0.002949	20.51	0.002941	20.19	0.002612	6.74	0.002618	6.99	0.002621	7.11
410	0.002652	0.003271	23.34	0.003297	24.32	0.003288	23.98	0.002934	10.63	0.002943	10.97	0.002946	11.09
MOY			10.06		10.20		10.15		4.07		4.06		4.11

Décane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
260	383.6	389.93	1.65	378.28	1.39	395.5	3.10	390.22	1.73	365.52	4.71	394.81	2.92	390.255	1.73	380.436	0.82
280	371.6	376.54	1.33	368.59	0.81	379.89	2.23	376.9	1.43	356.83	3.97	379.87	2.23	376.925	1.43	370.56	0.28

300	360.2	363.94	1.04	359	0.33	365.83	1.56	364.35	1.15	348.21	3.33	366.22	1.67	364.366	1.16	360.796	0.17
320	349.2	351.94	0.78	349.46	0.07	352.99	1.09	352.39	0.91	339.61	2.75	353.58	1.25	352.41	0.92	351.084	0.54
340	337.8	340.41	0.77	339.9	0.62	341.06	0.97	340.87	0.91	330.96	2.02	341.68	1.15	340.906	0.92	341.351	1.05
360	326.1	329.18	0.94	330.21	1.26	329.78	1.13	329.63	1.08	322.16	1.21	330.29	1.28	329.703	1.10	331.503	1.66
380	314.3	318.11	1.21	320.29	1.91	318.88	1.46	318.5	1.34	313.11	0.38	319.17	1.55	318.642	1.38	321.423	2.27
400	303	307.01	1.32	309.99	2.31	308.09	1.68	307.31	1.42	303.66	0.22	308.08	1.68	307.549	1.50	310.965	2.63
420	290.6	295.7	1.75	299.12	2.93	297.13	2.25	295.86	1.81	293.64	1.05	296.76	2.12	296.23	1.94	299.951	3.22
440	278.8	283.94	1.84	287.5	3.12	285.71	2.48	283.92	1.84	282.84	1.45	284.94	2.20	284.461	2.03	288.172	3.36
460	266.9	271.5	1.72	274.85	2.98	273.48	2.47	271.24	1.63	271.02	1.54	272.3	2.02	271.989	1.91	275.376	3.18
480	252.6	258.05	2.16	260.88	3.28	260.07	2.96	257.51	1.94	257.87	2.09	258.51	2.34	258.507	2.34	261.256	3.43
500	236.7	243.2	2.75	245.18	3.58	245.01	3.51	242.35	2.39	242.99	2.66	243.12	2.71	243.623	2.92	245.42	3.68
520	219.9	226.44	2.97	227.24	3.34	227.72	3.56	225.22	2.42	225.84	2.70	225.58	2.58	226.811	3.14	227.343	3.38
540	199.4	206.98	3.80	206.28	3.45	207.34	3.98	205.36	2.99	205.63	3.12	205.07	2.84	207.29	3.96	206.255	3.44
560	176.1	183.52	4.21	181.04	2.81	182.54	3.66	181.5	3.07	181.07	2.82	180.29	2.38	183.763	4.35	180.909	2.73
580	149.6	153.5	2.61	149.11	0.33	150.83	0.82	151.14	1.03	149.68	0.05	148.8	0.53	153.684	2.73	148.906	0.46
600	111.1	110.04	0.95	104.16	6.25	105.67	4.89	107.59	3.16	104.97	5.52	104.17	6.24	110.16	0.85	103.942	6.44
MOY			1.88		2.26		2.43		1.79		2.31		2.21		2.02		2.37

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
260	1.421	1.4997	5.54	1.455	2.39	1.5213	7.06	1.5008	5.62	1.408	0.91	1.5187	6.88	1.501	5.63	1.4631	2.96
280	1.302	1.3448	3.29	1.3164	1.11	1.3568	4.21	1.3461	3.39	1.2756	2.03	1.3567	4.20	1.3462	3.39	1.3234	1.64
300	1.193	1.2131	1.68	1.1967	0.31	1.2194	2.21	1.2145	1.80	1.1614	2.65	1.2207	2.32	1.2146	1.81	1.2027	0.81
320	1.093	1.0998	0.62	1.0921	0.08	1.1031	0.92	1.1012	0.75	1.0617	2.86	1.1049	1.09	1.1013	0.76	1.0972	0.38
340	0.993	1.0012	0.83	0.9997	0.67	1.0031	1.02	1.0026	0.97	0.9736	1.95	1.0049	1.20	1.0027	0.98	1.004	1.11
360	0.907	0.9144	0.82	0.9172	1.12	0.9161	1.00	0.9156	0.95	0.895	1.32	0.9175	1.16	0.9158	0.97	0.9209	1.53
380	0.827	0.8371	1.22	0.8429	1.92	0.8392	1.48	0.8382	1.35	0.824	0.36	0.8399	1.56	0.8385	1.39	0.8458	2.27
400	0.757	0.7675	1.39	0.775	2.38	0.7702	1.74	0.7683	1.49	0.7592	0.29	0.7702	1.74	0.7689	1.57	0.7774	2.69
420	0.692	0.704	1.73	0.7122	2.92	0.7075	2.24	0.7044	1.79	0.6991	1.03	0.7066	2.11	0.7053	1.92	0.7142	3.21
440	0.634	0.6453	1.78	0.6534	3.06	0.6494	2.43	0.6453	1.78	0.6429	1.40	0.6476	2.15	0.6465	1.97	0.6549	3.30
460	0.581	0.5902	1.58	0.5975	2.84	0.5945	2.32	0.5897	1.50	0.5892	1.41	0.592	1.89	0.5913	1.77	0.5986	3.03
480	0.526	0.5376	2.21	0.5435	3.33	0.5418	3.00	0.5365	2.00	0.5372	2.13	0.5386	2.40	0.5386	2.40	0.5443	3.48
500	0.473	0.4864	2.83	0.4904	3.68	0.49	3.59	0.4847	2.47	0.486	2.75	0.4862	2.79	0.4872	3.00	0.4909	3.78
520	0.423	0.4355	2.96	0.437	3.31	0.4379	3.52	0.4331	2.39	0.4343	2.67	0.4338	2.55	0.4362	3.12	0.4372	3.36
540	0.376	0.3833	1.94	0.382	1.60	0.384	2.13	0.3803	1.14	0.3808	1.28	0.3798	1.01	0.3839	2.10	0.382	1.60
560	0.313	0.3277	4.70	0.3233	3.29	0.326	4.15	0.3241	3.55	0.3233	3.29	0.322	2.88	0.3281	4.82	0.3231	3.23
580	0.258	0.2647	2.60	0.2571	0.35	0.26	0.78	0.2606	1.01	0.2581	0.04	0.2566	0.54	0.265	2.71	0.2567	0.50
600	0.185	0.1834	0.86	0.1736	6.16	0.1761	4.81	0.1793	3.08	0.1749	5.46	0.1736	6.16	0.1836	0.76	0.1732	6.38
MOY			2.14		2.25		2.70		2.06		1.88		2.48		2.28		2.52

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
280	443	364.7619	17.66	358.4686	19.08	377.1516	14.86	368.7513	16.76	301.0101	32.05	378.3135	14.60	369.1	16.68	369.4	16.61

300	88.74	86.3974	2.64	87.1263	1.82	88.3498	0.44	87.1958	1.74	75.9679	14.39	88.5355	0.23	87.26	1.67	89.17	0.48
320	22.73	25.6805	12.98	26.2357	15.42	26.1246	14.93	25.8757	13.84	23.5929	3.80	26.1317	14.97	25.89	13.90	26.69	17.42
340	8.883	9.1507	3.01	9.3927	5.74	9.2854	4.53	9.2066	3.64	8.6707	2.39	9.2695	4.35	9.213	3.71	9.509	7.05
360	3.763	3.7737	0.28	3.8714	2.88	3.8234	1.61	3.7916	0.76	3.6521	2.95	3.81	1.25	3.795	0.85	3.904	3.75
380	1.75	1.7519	0.11	1.7905	2.31	1.7723	1.27	1.758	0.46	1.7191	1.77	1.7637	0.78	1.76	0.57	1.799	2.80
400	0.892	0.8954	0.38	0.91	2.02	0.9041	1.36	0.8974	0.61	0.8861	0.66	0.8988	0.76	0.899	0.78	0.9131	2.37
420	0.49	0.4948	0.98	0.4996	1.96	0.4985	1.73	0.4953	1.08	0.4919	0.39	0.4952	1.06	0.4968	1.39	0.5007	2.18
440	0.29	0.2914	0.48	0.2924	0.83	0.2929	1.00	0.2912	0.41	0.2904	0.14	0.2906	0.21	0.2925	0.86	0.2927	0.93
460	0.178	0.1805	1.40	0.1799	1.07	0.1807	1.52	0.1801	1.18	0.1796	0.90	0.1794	0.79	0.1814	1.91	0.1803	1.29
480	0.115	0.1165	1.30	0.1154	0.35	0.1162	1.04	0.116	0.87	0.1156	0.52	0.1152	0.17	0.1173	2.00	0.1158	0.70
500	0.0759	0.0776	2.24	0.0765	0.79	0.0771	1.58	0.0771	1.58	0.0767	1.05	0.0764	0.66	0.07833	3.20	0.07697	1.41
520	0.0525	0.0529	0.76	0.0519	1.14	0.0524	0.19	0.0524	0.19	0.052	0.95	0.0518	1.33	0.05364	2.17	0.05248	0.04
540	0.0369	0.0367	0.54	0.0358	2.98	0.0361	2.17	0.0361	2.17	0.0358	2.98	0.0356	3.52	0.03735	1.22	0.03644	1.25
560	0.0248	0.0255	2.82	0.0249	0.40	0.0251	1.21	0.0249	0.40	0.0247	0.40	0.0246	0.81	0.02621	5.69	0.02553	2.94
580	0.0154	0.0176	14.29	0.0171	11.04	0.0172	11.69	0.017	10.39	0.0168	9.09	0.0167	8.44	0.01827	18.64	0.01782	15.71
MOY			3.87		4.36		3.82		3.51		4.65		3.37		4.70		4.81

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
260	0.001334	0.001625	21.81	0.001625	21.81	0.001624	21.74	0.001447	8.47	0.00145	8.70	0.001447	8.47
280	0.001356	0.001646	21.39	0.001646	21.39	0.001645	21.31	0.001465	8.04	0.001468	8.26	0.001465	8.04
300	0.001381	0.001669	20.85	0.001669	20.85	0.001669	20.85	0.001484	7.46	0.001487	7.68	0.001484	7.46
320	0.00141	0.001695	20.21	0.001695	20.21	0.001695	20.21	0.001506	6.81	0.001508	6.95	0.001506	6.81
340	0.001442	0.001725	19.63	0.001724	19.56	0.001724	19.56	0.001531	6.17	0.001532	6.24	0.001531	6.17
360	0.001478	0.001757	18.88	0.001756	18.81	0.001757	18.88	0.001558	5.41	0.00156	5.55	0.001558	5.41
380	0.001515	0.001794	18.42	0.001793	18.35	0.001793	18.35	0.001589	4.88	0.00159	4.95	0.001589	4.88
400	0.001552	0.001836	18.30	0.001835	18.23	0.001835	18.23	0.001625	4.70	0.001626	4.77	0.001625	4.70
420	0.001591	0.001884	18.42	0.001883	18.35	0.001883	18.35	0.001666	4.71	0.001666	4.71	0.001666	4.71
440	0.001632	0.001939	18.81	0.001939	18.81	0.001938	18.75	0.001714	5.02	0.001714	5.02	0.001714	5.02
460	0.001682	0.002004	19.14	0.002004	19.14	0.002004	19.14	0.00177	5.23	0.00177	5.23	0.00177	5.23
480	0.001735	0.002081	19.94	0.002083	20.06	0.002082	20.00	0.001837	5.88	0.001838	5.94	0.001838	5.94
500	0.001797	0.002175	21.04	0.002179	21.26	0.002176	21.09	0.00192	6.84	0.001921	6.90	0.001922	6.96
520	0.001868	0.002291	22.64	0.002298	23.02	0.002295	22.86	0.002024	8.35	0.002025	8.40	0.002027	8.51
540	0.001952	0.002442	25.10	0.002453	25.67	0.002449	25.46	0.002159	10.60	0.002162	10.76	0.002164	10.86
560	0.002067	0.002646	28.01	0.002664	28.88	0.002658	28.59	0.002345	13.45	0.002351	13.74	0.002353	13.84
MOY			20.79		20.90		20.84		7.00		7.11		7.06

Ethylène

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
110	557	552.62	0.79	556.86	0.03	560.56	0.64	552.73	0.77	538.15	3.38	558.82	0.33	552.821	0.75	560.342	0.60
120	545	540.52	0.82	546.18	0.22	545.04	0.01	540.83	0.77	528.99	2.94	544.23	0.14	540.812	0.77	549.374	0.80
130	533	528.97	0.76	535.43	0.46	530.9	0.39	529.31	0.69	519.7	2.50	530.69	0.43	529.283	0.70	538.343	1.00

140	520	517.62	0.46	524.45	0.86	517.68	0.45	517.9	0.40	510.12	1.90	517.81	0.42	517.93	0.40	527.089	1.36
150	509	506.17	0.56	513.04	0.79	504.99	0.79	506.3	0.53	500.07	1.75	505.23	0.74	506.461	0.50	515.42	1.26
160	497.3	494.33	0.60	500.98	0.74	492.42	0.98	494.24	0.62	489.34	1.60	492.58	0.95	494.587	0.55	503.108	1.17
170	480.3	481.78	0.31	488.02	1.61	479.58	0.15	481.42	0.23	477.67	0.55	479.49	0.17	482.012	0.36	489.896	2.00
180	463.1	468.2	1.10	473.87	2.33	466.07	0.64	467.55	0.96	464.79	0.36	465.61	0.54	468.427	1.15	475.496	2.68
190	445.1	453.27	1.84	458.2	2.94	451.46	1.43	452.29	1.62	450.39	1.19	450.53	1.22	453.505	1.89	459.586	3.25
200	426.3	436.61	2.42	440.65	3.37	435.31	2.11	435.28	2.11	434.09	1.83	433.83	1.77	436.878	2.48	441.8	3.64
210	407.2	417.79	2.60	420.79	3.34	417.06	2.42	416.09	2.18	415.46	2.03	415.01	1.92	418.121	2.68	421.701	3.56
220	387.7	396.29	2.22	398.06	2.67	396.1	2.17	394.19	1.67	393.95	1.61	393.48	1.49	396.703	2.32	398.747	2.85
230	366.9	371.39	1.22	371.75	1.32	371.59	1.28	368.88	0.54	368.82	0.52	368.46	0.43	371.92	1.37	372.219	1.45
240	340.7	342.1	0.41	340.83	0.04	342.39	0.50	339.16	0.45	339.03	0.49	338.85	0.54	342.755	0.60	341.094	0.12
250	307.3	306.77	0.17	303.69	1.17	306.72	0.19	303.42	1.26	302.9	1.43	302.95	1.42	307.576	0.09	303.757	1.15
260	267.1	262.43	1.75	257.38	3.64	261.45	2.12	258.72	3.14	257.45	3.61	257.72	3.51	263.373	1.40	257.296	3.67
270	214.5	202.03	5.81	195.19	9.00	199.48	7.00	198.18	7.61	195.83	8.70	196.23	8.52	203.051	5.34	195.014	9.08
MOY			1.40		2.03		1.37		1.50		2.14		1.44		1.37		2.33

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
160	3.108	3.0895	0.60	3.1312	0.75	3.0776	0.98	3.0889	0.61	3.0584	1.60	3.0786	0.95	3.0912	0.54	3.1446	1.18
170	2.825	2.834	0.32	2.8707	1.62	2.8211	0.14	2.8319	0.24	2.8099	0.53	2.8206	0.16	2.8354	0.37	2.8818	2.01
180	2.573	2.6011	1.09	2.6326	2.32	2.5893	0.63	2.5975	0.95	2.5822	0.36	2.5867	0.53	2.6024	1.14	2.6417	2.67
190	2.343	2.3856	1.82	2.4116	2.93	2.3761	1.41	2.3805	1.60	2.3705	1.17	2.3712	1.20	2.3869	1.87	2.4189	3.24
200	2.132	2.183	2.39	2.2033	3.34	2.1765	2.09	2.1764	2.08	2.1705	1.81	2.1691	1.74	2.1844	2.46	2.209	3.61
210	1.939	1.9895	2.60	2.0037	3.34	1.986	2.42	1.9814	2.19	1.9784	2.03	1.9762	1.92	1.9911	2.69	2.0081	3.56
220	1.764	1.8013	2.11	1.8094	2.57	1.8005	2.07	1.7918	1.58	1.7907	1.51	1.7886	1.39	1.8032	2.22	1.8125	2.75
230	1.595	1.6148	1.24	1.6163	1.34	1.6156	1.29	1.6038	0.55	1.6036	0.54	1.602	0.44	1.617	1.38	1.6184	1.47
240	1.42	1.4254	0.38	1.4202	0.01	1.4266	0.46	1.4132	0.48	1.4126	0.52	1.4119	0.57	1.4281	0.57	1.4212	0.08
250	1.229	1.2271	0.15	1.2148	1.16	1.2269	0.17	1.2137	1.24	1.2116	1.42	1.2118	1.40	1.2303	0.11	1.2151	1.13
260	1.027	1.0093	1.72	0.9899	3.61	1.0056	2.08	0.9951	3.11	0.9902	3.58	0.9912	3.49	1.013	1.36	0.9896	3.64
270	0.794	0.7483	5.76	0.723	8.94	0.7388	6.95	0.734	7.56	0.7253	8.65	0.7268	8.46	0.752	5.29	0.7223	9.03
MOY			1.68		2.66		1.73		1.85		1.98		1.85		1.67		2.86

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
110	109	93.2423	14.46	101.2343	7.12	94.1698	13.61	93.5252	14.20	84.3804	22.59	93.8483	13.90	93.55	14.17	104.9	3.76
120	27.8	25.1084	9.68	26.8774	3.32	24.9599	10.22	25.1691	9.46	23.4323	15.71	24.955	10.23	25.19	9.39	27.63	0.61
130	8.72	8.5245	2.24	8.9995	3.21	8.4166	3.48	8.5382	2.08	8.1234	6.84	8.4231	3.40	8.547	1.98	9.189	5.38
140	3.611	3.4551	4.32	3.6019	0.25	3.405	5.70	3.4581	4.23	3.3403	7.50	3.4072	5.64	3.463	4.10	3.657	1.27
150	1.676	1.6067	4.13	1.6566	1.16	1.5846	5.45	1.607	4.12	1.5689	6.39	1.5846	5.45	1.61	3.94	1.675	0.06
160	0.8281	0.8321	0.48	0.8499	2.63	0.8223	0.70	0.8318	0.45	0.8181	1.21	0.8216	0.78	0.8338	0.69	0.8566	3.44
170	0.4605	0.4693	1.91	0.4755	3.26	0.4649	0.96	0.4688	1.80	0.4635	0.65	0.464	0.76	0.4704	2.15	0.4782	3.84
180	0.2761	0.2832	2.57	0.285	3.22	0.2812	1.85	0.2827	2.39	0.2805	1.59	0.2804	1.56	0.2841	2.90	0.2863	3.69
190	0.1752	0.1804	2.97	0.1805	3.03	0.1795	2.45	0.1799	2.68	0.1789	2.11	0.1787	2.00	0.1812	3.42	0.1814	3.54

200	0.1162	0.12	3.27	0.1195	2.84	0.1195	2.84	0.1195	2.84	0.119	2.41	0.1189	2.32	0.1208	3.96	0.1202	3.44
210	0.0801	0.0826	3.12	0.0819	2.25	0.0823	2.75	0.0821	2.50	0.0818	2.12	0.0817	2.00	0.08337	4.08	0.08253	3.03
220	0.057	0.0584	2.46	0.0577	1.23	0.0582	2.11	0.0579	1.58	0.0577	1.23	0.0576	1.05	0.05915	3.77	0.05833	2.33
230	0.0415	0.0421	1.45	0.0415	0.00	0.042	1.20	0.0416	0.24	0.0414	0.24	0.0414	0.24	0.04285	3.25	0.04214	1.54
240	0.0305	0.0308	0.98	0.0303	0.66	0.0306	0.33	0.0302	0.98	0.0301	1.31	0.0301	1.31	0.03151	3.31	0.03092	1.38
250	0.0224	0.0226	0.89	0.0222	0.89	0.0225	0.45	0.0221	1.34	0.0219	2.23	0.022	1.79	0.02334	4.20	0.02288	2.14
260	0.0164	0.0165	0.61	0.0162	1.22	0.0164	0.00	0.016	2.44	0.0159	3.05	0.0159	3.05	0.01725	5.18	0.01692	3.17
270	0.0118	0.0118	0.00	0.0116	1.69	0.0117	0.85	0.0112	5.08	0.0112	5.08	0.0112	5.08	0.01248	5.76	0.01227	3.98
MOY			3.27		2.23		3.23		3.44		4.84		3.56		4.49		2.74

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
110	0.001449	0.001619	11.73	0.001617	11.59	0.001618	11.66	0.00144	0.62	0.001441	0.55	0.001439	0.69
120	0.0015	0.001646	9.73	0.001644	9.60	0.001646	9.73	0.001462	2.53	0.001464	2.40	0.001462	2.53
130	0.001553	0.001675	7.86	0.001674	7.79	0.001676	7.92	0.001487	4.25	0.001488	4.19	0.001487	4.25
140	0.001605	0.001708	6.42	0.001706	6.29	0.001709	6.48	0.001515	5.61	0.001516	5.55	0.001515	5.61
150	0.001659	0.001745	5.18	0.001743	5.06	0.001745	5.18	0.001546	6.81	0.001547	6.75	0.001546	6.81
160	0.001711	0.001785	4.32	0.001784	4.27	0.001786	4.38	0.00158	7.66	0.001581	7.60	0.001581	7.60
170	0.001762	0.001831	3.92	0.001829	3.80	0.001831	3.92	0.001619	8.12	0.00162	8.06	0.00162	8.06
180	0.001811	0.001882	3.92	0.001881	3.87	0.001883	3.98	0.001663	8.17	0.001664	8.12	0.001664	8.12
190	0.001865	0.001941	4.08	0.001941	4.08	0.001942	4.13	0.001714	8.10	0.001715	8.04	0.001715	8.04
200	0.001923	0.002009	4.47	0.00201	4.52	0.00201	4.52	0.001774	7.75	0.001774	7.75	0.001775	7.70
210	0.001986	0.002088	5.14	0.00209	5.24	0.002089	5.19	0.001843	7.20	0.001844	7.15	0.001844	7.15
220	0.002056	0.002183	6.18	0.002186	6.32	0.002184	6.23	0.001927	6.27	0.001928	6.23	0.001928	6.23
230	0.002142	0.002298	7.28	0.002304	7.56	0.002299	7.33	0.00203	5.23	0.002031	5.18	0.002031	5.18
240	0.002243	0.002442	8.87	0.002451	9.27	0.002444	8.96	0.00216	3.70	0.002162	3.61	0.002162	3.61
250	0.00237	0.00263	10.97	0.002643	11.52	0.002634	11.14	0.002332	1.60	0.002335	1.48	0.002335	1.48
260	0.002539	0.002894	13.98	0.002912	14.69	0.002901	14.26	0.002575	1.42	0.002581	1.65	0.00258	1.61
270	0.002798	0.003313	18.41	0.003338	19.30	0.003325	18.83	0.002968	6.08	0.002977	6.40	0.002976	6.36
MOY			7.79		7.93		7.87		5.36		5.34		5.35

Heptane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
200	403.2	437.77	8.57	420.47	4.28	448.62	11.26	437.92	8.61	406.62	0.85	446.28	10.68	437.981	8.63	423.053	4.92
220	397.4	421.51	6.07	409.46	3.03	428.13	7.73	421.76	6.13	396.82	0.15	427.05	7.46	421.8	6.14	411.803	3.62
240	390.9	406.55	4.00	398.62	1.97	410.25	4.95	406.89	4.09	387.15	0.96	410.02	4.89	406.906	4.09	400.748	2.52
250	387	399.45	3.22	393.25	1.61	402.09	3.90	399.82	3.31	382.34	1.20	402.15	3.91	399.832	3.32	395.266	2.14
260	382.6	392.56	2.60	387.89	1.38	394.36	3.07	392.94	2.70	377.53	1.33	394.63	3.14	392.959	2.71	389.797	1.88
270	377.6	385.84	2.18	382.52	1.30	386.99	2.49	386.23	2.29	372.72	1.29	387.42	2.60	386.254	2.29	384.329	1.78
280	372.6	379.25	1.78	377.14	1.22	379.94	1.97	379.65	1.89	367.87	1.27	380.45	2.11	379.685	1.90	378.844	1.68
290	367.6	372.78	1.41	371.72	1.12	373.14	1.51	373.17	1.52	362.98	1.26	373.69	1.66	373.221	1.53	373.325	1.56
300	362.3	366.38	1.13	366.25	1.09	366.55	1.17	366.75	1.23	358.02	1.18	367.08	1.32	366.832	1.25	367.752	1.50

310	356.6	360.02	0.96	360.7	1.15	360.11	0.98	360.36	1.05	352.98	1.02	360.58	1.12	360.484	1.09	362.1	1.54
320	350.6	353.68	0.88	355.04	1.27	353.77	0.90	353.98	0.96	347.83	0.79	354.14	1.01	354.146	1.01	356.344	1.64
330	344.5	347.31	0.82	349.24	1.38	347.48	0.87	347.55	0.89	342.53	0.57	347.71	0.93	347.783	0.95	350.455	1.73
340	338.4	340.89	0.74	343.28	1.44	341.18	0.82	341.06	0.79	337.07	0.39	341.25	0.84	341.358	0.87	344.401	1.77
350	332.1	334.36	0.68	337.13	1.51	334.83	0.82	334.46	0.71	331.4	0.21	334.71	0.79	334.834	0.82	338.155	1.82
360	325.6	327.7	0.64	330.73	1.58	328.36	0.85	327.7	0.64	325.49	0.03	328.03	0.75	328.171	0.79	331.663	1.86
370	319	320.86	0.58	324.06	1.59	321.72	0.85	320.76	0.55	319.3	0.09	321.17	0.68	321.326	0.73	324.898	1.85
380	311.5	313.79	0.74	317.06	1.78	314.86	1.08	313.57	0.66	312.79	0.41	314.06	0.82	314.254	0.88	317.812	2.03
390	303.8	306.45	0.87	309.7	1.94	307.69	1.28	306.1	0.76	305.9	0.69	306.66	0.94	306.906	1.02	310.354	2.16
400	296	298.77	0.94	301.9	1.99	300.17	1.41	298.28	0.77	298.58	0.87	298.9	0.98	299.227	1.09	302.472	2.19
MOY			2.04		1.72		2.52		2.08		0.77		2.45		2.16		2.12

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
200	2.016	2.1889	8.58	2.1026	4.30	2.244	11.31	2.1896	8.61	2.0377	1.08	2.232	10.71	2.1899	8.63	2.1155	4.94
220	1.806	1.9159	6.09	1.8613	3.08	1.9462	7.76	1.9171	6.15	1.8061	0.01	1.9412	7.49	1.9173	6.16	1.8718	3.64
240	1.629	1.694	3.99	1.661	1.96	1.7095	4.94	1.6954	4.08	1.6149	0.87	1.7085	4.88	1.6954	4.08	1.6698	2.50
250	1.548	1.5978	3.22	1.573	1.61	1.6084	3.90	1.5993	3.31	1.5303	1.14	1.6086	3.91	1.5993	3.31	1.5811	2.14
260	1.472	1.5099	2.57	1.4919	1.35	1.5168	3.04	1.5113	2.67	1.4527	1.31	1.5178	3.11	1.5114	2.68	1.4992	1.85
270	1.399	1.4291	2.15	1.4168	1.27	1.4333	2.45	1.4305	2.25	1.3809	1.29	1.4349	2.57	1.4306	2.26	1.4235	1.75
280	1.331	1.3545	1.77	1.3469	1.19	1.3569	1.95	1.3559	1.87	1.3141	1.27	1.3588	2.09	1.356	1.88	1.353	1.65
290	1.268	1.2855	1.38	1.2818	1.09	1.2867	1.47	1.2868	1.48	1.2518	1.28	1.2886	1.62	1.287	1.50	1.2874	1.53
300	1.208	1.2213	1.10	1.2208	1.06	1.2219	1.15	1.2225	1.20	1.1935	1.20	1.2236	1.29	1.2228	1.23	1.2259	1.48
310	1.15	1.1614	0.99	1.1635	1.17	1.1617	1.02	1.1625	1.09	1.1387	0.98	1.1632	1.15	1.1629	1.12	1.1681	1.57
320	1.096	1.1053	0.85	1.1095	1.23	1.1055	0.87	1.1062	0.93	1.087	0.82	1.1067	0.98	1.1067	0.98	1.1136	1.61
330	1.044	1.0525	0.81	1.0583	1.37	1.053	0.86	1.0532	0.88	1.038	0.57	1.0537	0.93	1.0539	0.95	1.062	1.72
340	0.994	1.0026	0.87	1.0097	1.58	1.0035	0.96	1.0031	0.92	0.9914	0.26	1.0037	0.98	1.004	1.01	1.0129	1.90
350	0.949	0.9553	0.66	0.9632	1.50	0.9567	0.81	0.9556	0.70	0.9469	0.22	0.9563	0.77	0.9567	0.81	0.9663	1.82
360	0.904	0.9103	0.70	0.9187	1.63	0.9121	0.90	0.9103	0.70	0.9041	0.01	0.9112	0.80	0.9116	0.84	0.9213	1.91
370	0.862	0.8672	0.60	0.8758	1.60	0.8695	0.87	0.8669	0.57	0.863	0.12	0.868	0.70	0.8684	0.74	0.8781	1.87
380	0.82	0.8258	0.71	0.8344	1.76	0.8286	1.05	0.8252	0.63	0.8231	0.38	0.8265	0.79	0.827	0.85	0.8363	1.99
390	0.779	0.7858	0.87	0.7941	1.94	0.789	1.28	0.7849	0.76	0.7844	0.69	0.7863	0.94	0.7869	1.01	0.7958	2.16
400	0.74	0.7469	0.93	0.7548	2.00	0.7504	1.41	0.7457	0.77	0.7465	0.88	0.7472	0.97	0.7481	1.09	0.7562	2.19
MOY			2.04		1.72		2.53		2.08		0.76		2.46		2.16		2.12

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
300	3.744	3.717	0.72	3.7909	1.25	3.7349	0.24	3.7315	0.33	3.607	3.66	3.7301	0.37	3.735	0.24	3.826	2.19
310	2.412	2.3856	1.09	2.4324	0.85	2.3968	0.63	2.3935	0.77	2.3365	3.13	2.3917	0.84	2.396	0.66	2.451	1.62
320	1.596	1.5844	0.73	1.6138	1.12	1.5917	0.27	1.5888	0.45	1.5632	2.06	1.5872	0.55	1.591	0.31	1.624	1.75
330	1.101	1.0847	1.48	1.1029	0.17	1.0896	1.04	1.0871	1.26	1.0763	2.24	1.0858	1.38	1.089	1.09	1.108	0.64
340	0.765	0.7629	0.27	0.774	1.18	0.7662	0.16	0.7642	0.10	0.7602	0.63	0.7631	0.25	0.7656	0.08	0.7763	1.48
350	0.551	0.5496	0.25	0.5562	0.94	0.5518	0.15	0.5501	0.16	0.5493	0.31	0.5492	0.33	0.5515	0.09	0.5588	1.42

360	0.4058	0.4044	0.34	0.4081	0.57	0.4058	0.00	0.4045	0.32	0.405	0.20	0.4038	0.49	0.4058	0.00	0.4091	0.81
370	0.3036	0.3032	0.13	0.3051	0.49	0.3041	0.16	0.3031	0.16	0.304	0.13	0.3024	0.40	0.3044	0.26	0.3058	0.72
380	0.2308	0.2311	0.13	0.2319	0.48	0.2316	0.35	0.2309	0.04	0.2318	0.43	0.2303	0.22	0.2321	0.56	0.2324	0.69
390	0.1781	0.1788	0.39	0.1789	0.45	0.179	0.51	0.1785	0.22	0.1793	0.67	0.1779	0.11	0.1797	0.90	0.1794	0.73
400	0.1388	0.1402	1.01	0.1398	0.72	0.1402	1.01	0.1398	0.72	0.1404	1.15	0.1392	0.29	0.141	1.59	0.1403	1.08
440	0.0576	0.0585	1.56	0.0577	0.17	0.0581	0.87	0.058	0.69	0.0581	0.87	0.0575	0.17	0.05918	2.74	0.05828	1.18
460	0.0389	0.0394	1.29	0.0387	0.51	0.039	0.26	0.0388	0.26	0.0388	0.26	0.0385	1.03	0.04004	2.93	0.03928	0.98
480	0.0265	0.0268	1.13	0.0263	0.75	0.0265	0.00	0.0263	0.75	0.0262	1.13	0.026	1.89	0.02749	3.74	0.0269	1.51
500	0.0178	0.0182	2.25	0.0178	0.00	0.0179	0.56	0.0177	0.56	0.0175	1.69	0.0174	2.25	0.01888	6.07	0.01847	3.76
MOY			0.85		0.64		0.41		0.45		1.24		0.70		1.42		1.37

Volumé spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
200	0.001316	0.00154	17.02	0.001542	17.17	0.00154	17.02	0.001373	4.33	0.001376	4.56	0.001373	4.33
220	0.001344	0.001562	16.22	0.001563	16.29	0.001562	16.22	0.001391	3.50	0.001394	3.72	0.001391	3.50
240	0.001374	0.001587	15.50	0.001587	15.50	0.001587	15.50	0.001412	2.77	0.001414	2.91	0.001412	2.77
250	0.001389	0.0016	15.19	0.0016	15.19	0.0016	15.19	0.001423	2.45	0.001425	2.59	0.001423	2.45
260	0.001405	0.001614	14.88	0.001614	14.88	0.001614	14.88	0.001434	2.06	0.001437	2.28	0.001434	2.06
270	0.001422	0.001629	14.56	0.001629	14.56	0.001629	14.56	0.001447	1.76	0.001449	1.90	0.001447	1.76
280	0.00144	0.001645	14.24	0.001644	14.17	0.001645	14.24	0.00146	1.39	0.001462	1.53	0.00146	1.39
290	0.001457	0.001662	14.07	0.001661	14.00	0.001661	14.00	0.001474	1.17	0.001476	1.30	0.001474	1.17
300	0.001475	0.001679	13.83	0.001679	13.83	0.001679	13.83	0.001489	0.95	0.001491	1.08	0.001489	0.95
310	0.001494	0.001699	13.72	0.001698	13.65	0.001698	13.65	0.001505	0.74	0.001506	0.80	0.001505	0.74
320	0.001514	0.001719	13.54	0.001718	13.47	0.001719	13.54	0.001523	0.59	0.001523	0.59	0.001523	0.59
330	0.001534	0.001741	13.49	0.00174	13.43	0.00174	13.43	0.001541	0.46	0.001542	0.52	0.001541	0.46
340	0.001555	0.001764	13.44	0.001763	13.38	0.001764	13.44	0.001561	0.39	0.001561	0.39	0.001561	0.39
350	0.001578	0.001789	13.37	0.001788	13.31	0.001789	13.37	0.001582	0.25	0.001583	0.32	0.001583	0.32
360	0.001601	0.001816	13.43	0.001815	13.37	0.001816	13.43	0.001606	0.31	0.001606	0.31	0.001606	0.31
370	0.001625	0.001845	13.54	0.001844	13.48	0.001845	13.54	0.001631	0.37	0.001631	0.37	0.001631	0.37
380	0.001651	0.001877	13.69	0.001876	13.63	0.001877	13.69	0.001658	0.42	0.001658	0.42	0.001659	0.48
390	0.001678	0.001911	13.89	0.001911	13.89	0.001911	13.89	0.001688	0.60	0.001688	0.60	0.001689	0.66
400	0.001708	0.001949	14.11	0.00195	14.17	0.001949	14.11	0.001721	0.76	0.001721	0.76	0.001722	0.82
420	0.001775	0.002037	14.76	0.002039	14.87	0.002038	14.82	0.001798	1.30	0.001797	1.24	0.001799	1.35
440	0.001853	0.002146	15.81	0.00215	16.03	0.002148	15.92	0.001894	2.21	0.001894	2.21	0.001896	2.32
460	0.001954	0.002285	16.94	0.002292	17.30	0.002289	17.14	0.002019	3.33	0.00202	3.38	0.002023	3.53
480	0.002065	0.002474	19.81	0.002485	20.34	0.002481	20.15	0.00219	6.05	0.002192	6.15	0.002196	6.34
500	0.002235	0.002749	23.00	0.002768	23.85	0.002762	23.58	0.002443	9.31	0.002448	9.53	0.002452	9.71
520	0.00252	0.003224	27.94	0.003252	29.05	0.003245	28.77	0.002887	14.56	0.002897	14.96	0.002902	15.16
MOY			15.60		15.71		15.68		2.48		2.58		2.56

Isobutane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
------	-----	-----	---	-----	---	-----	---	-----	---	----	---	-----	---	-----	---	-------	---

120	480.1	488.14	1.67	468.18	2.48	509.98	6.22	487.33	1.51	450.84	6.09	503.92	4.96	487.842	1.61	471.573	1.78
140	464.1	465.97	0.40	454.38	2.09	479.22	3.26	465.79	0.36	438.87	5.44	475.94	2.55	466.011	0.41	457.411	1.44
160	448.7	447.09	0.36	441.01	1.71	454.35	1.26	447.25	0.32	427.21	4.79	452.89	0.93	447.308	0.31	443.705	1.11
180	413.5	430.22	4.04	427.85	3.47	433.5	4.84	430.53	4.12	415.68	0.53	433.14	4.75	430.523	4.12	430.229	4.05
200	418.2	414.52	0.88	414.66	0.85	415.35	0.68	414.84	0.80	404.02	3.39	415.56	0.63	414.851	0.80	416.733	0.35
220	402.5	399.3	0.80	401.09	0.35	398.84	0.91	399.52	0.74	391.93	2.63	399.2	0.82	399.638	0.71	402.881	0.09
240	386	383.93	0.54	386.72	0.19	383.01	0.77	383.96	0.53	378.97	1.82	383.21	0.72	384.251	0.45	388.226	0.58
260	368.4	367.71	0.19	370.97	0.70	366.92	0.40	367.49	0.25	364.6	1.03	366.72	0.46	368.034	0.10	372.213	1.04
270	358.9	359.07	0.05	362.39	0.97	358.49	0.11	358.7	0.06	356.69	0.62	358.01	0.25	359.394	0.14	363.493	1.28
280	349.1	349.94	0.24	353.2	1.17	349.61	0.15	349.4	0.09	348.18	0.26	348.84	0.07	350.271	0.34	354.171	1.45
290	338.5	340.22	0.51	343.29	1.42	340.17	0.49	339.49	0.29	338.95	0.13	339.08	0.17	340.557	0.61	344.141	1.67
300	327.3	329.78	0.76	332.56	1.61	330.01	0.83	328.85	0.47	328.88	0.48	328.6	0.40	330.134	0.87	333.281	1.83
310	315.3	318.49	1.01	320.86	1.76	318.97	1.16	317.34	0.65	317.83	0.80	317.23	0.61	318.863	1.13	321.452	1.95
320	302.4	306.19	1.25	308.02	1.86	306.83	1.46	304.81	0.80	305.63	1.07	304.79	0.79	306.58	1.38	308.485	2.01
330	288.5	292.66	1.44	293.83	1.85	293.38	1.69	291.03	0.88	292.08	1.24	291.05	0.88	293.081	1.59	294.175	1.97
340	273.1	277.65	1.67	278.03	1.81	278.32	1.91	275.76	0.97	276.88	1.38	275.74	0.97	278.105	1.83	278.257	1.89
350	256.1	260.81	1.84	260.26	1.62	261.25	2.01	258.66	1.00	259.69	1.40	258.49	0.93	261.299	2.03	260.38	1.67
360	237.1	241.62	1.91	240.02	1.23	241.63	1.91	239.21	0.89	239.99	1.22	238.78	0.71	242.157	2.13	240.044	1.24
370	215.2	219.33	1.92	216.56	0.63	218.68	1.62	216.66	0.68	216.99	0.83	215.82	0.29	219.899	2.18	216.494	0.60
380	189.2	192.58	1.79	188.58	0.33	191.03	0.97	189.7	0.26	189.38	0.10	188.3	0.48	193.187	2.11	188.453	0.39
390	156.6	158.71	1.35	153.58	1.93	156.06	0.34	155.73	0.56	154.57	1.30	153.64	1.89	159.32	1.74	153.392	2.05
400	110	110.15	0.14	104.48	5.02	106.53	3.15	107.4	2.36	105.4	4.18	104.73	4.79	110.7	0.64	104.33	5.15
	MOY		1.12		1.59		1.64		0.84		1.85		1.32		1.24		1.62

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
120	4	4.0679	1.70	3.9004	2.49	4.2613	6.53	4.0611	1.53	3.7679	5.80	4.2066	5.17	4.0653	1.63	3.9296	1.76
140	3.315	3.3284	0.40	3.2455	2.10	3.4242	3.29	3.3271	0.37	3.14	5.28	3.4003	2.57	3.3286	0.41	3.2672	1.44
160	2.805	2.7943	0.38	2.7563	1.74	2.8397	1.24	2.7953	0.35	2.6725	4.72	2.8306	0.91	2.7957	0.33	2.7733	1.13
180	2.409	2.3901	0.78	2.3769	1.33	2.4084	0.02	2.3918	0.71	2.3103	4.10	2.4063	0.11	2.3918	0.71	2.3903	0.78
200	2.091	2.0726	0.88	2.0733	0.85	2.0768	0.68	2.0742	0.80	2.0205	3.37	2.0778	0.63	2.0743	0.80	2.0838	0.34
220	1.83	1.815	0.82	1.8231	0.38	1.8129	0.93	1.816	0.77	1.7816	2.64	1.8146	0.84	1.8165	0.74	1.8313	0.07
240	1.608	1.5997	0.52	1.6113	0.21	1.5959	0.75	1.5998	0.51	1.5791	1.80	1.5967	0.70	1.601	0.44	1.6176	0.60
260	1.417	1.4143	0.19	1.4268	0.69	1.4113	0.40	1.4134	0.25	1.4023	1.04	1.4105	0.46	1.4155	0.11	1.4316	1.03
270	1.329	1.3299	0.07	1.3422	0.99	1.3277	0.10	1.3285	0.04	1.3211	0.59	1.326	0.23	1.3311	0.16	1.3463	1.30
280	1.246	1.2498	0.30	1.2614	1.24	1.2486	0.21	1.2479	0.15	1.2435	0.20	1.2459	0.01	1.251	0.40	1.2649	1.52
290	1.167	1.1732	0.53	1.1838	1.44	1.173	0.51	1.1707	0.32	1.1688	0.15	1.1693	0.20	1.1743	0.63	1.1867	1.69
300	1.091	1.0993	0.76	1.1085	1.60	1.1	0.82	1.0962	0.48	1.0963	0.49	1.0953	0.39	1.1004	0.86	1.1109	1.82
310	1.017	1.0274	1.02	1.035	1.77	1.0289	1.17	1.0237	0.66	1.0253	0.82	1.0233	0.62	1.0286	1.14	1.0369	1.96
320	0.945	0.9568	1.25	0.9626	1.86	0.9589	1.47	0.9525	0.79	0.9551	1.07	0.9525	0.79	0.9581	1.39	0.964	2.01
330	0.874	0.8868	1.46	0.8904	1.88	0.889	1.72	0.8819	0.90	0.8851	1.27	0.882	0.92	0.8881	1.61	0.8915	2.00
340	0.803	0.8166	1.69	0.8177	1.83	0.8186	1.94	0.8111	1.01	0.8144	1.42	0.811	1.00	0.818	1.87	0.8184	1.92

350	0.732	0.7452	1.80	0.7436	1.58	0.7464	1.97	0.739	0.96	0.742	1.37	0.7386	0.90	0.7466	1.99	0.744	1.64
360	0.659	0.6712	1.85	0.6667	1.17	0.6712	1.85	0.6645	0.83	0.6666	1.15	0.6633	0.65	0.6727	2.08	0.6668	1.18
370	0.582	0.5928	1.86	0.5853	0.57	0.591	1.55	0.5856	0.62	0.5865	0.77	0.5833	0.22	0.5943	2.11	0.5851	0.53
380	0.498	0.5068	1.77	0.4963	0.34	0.5027	0.94	0.4992	0.24	0.4984	0.08	0.4955	0.50	0.5084	2.09	0.496	0.40
390	0.401	0.4069	1.47	0.3938	1.80	0.4001	0.22	0.3993	0.42	0.3963	1.17	0.3939	1.77	0.4085	1.87	0.3933	1.92
400	0.276	0.2754	0.22	0.2612	5.36	0.2663	3.51	0.2685	2.72	0.2635	4.53	0.2618	5.14	0.2768	0.29	0.2608	5.51
MOY			0.99		1.51		1.45		0.70		1.99		1.12		1.08		1.48

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
140	4210	3946.553	6.26	3731.6	11.36	4355.078	3.45	3968.348	5.74	2933.822	30.31	4265.498	1.32	3974	5.61	3941	6.39
160	278.2	260.586	6.33	260.4156	6.39	267.6633	3.79	262.0157	5.82	219.8619	20.97	266.7864	4.10	262.2	5.75	270.3	2.84
180	36.66	34.7746	5.14	35.4573	3.28	34.8208	5.02	34.9204	4.75	31.5792	13.86	34.8546	4.92	34.95	4.66	36.36	0.82
200	7.723	7.452	3.51	7.6304	1.20	7.4054	4.11	7.4733	3.23	7.0717	8.43	7.4132	4.01	7.48	3.15	7.757	0.44
220	2.265	2.2218	1.91	2.2684	0.15	2.2068	2.57	2.2256	1.74	2.1642	4.45	2.2064	2.59	2.228	1.63	2.292	1.19
240	0.8423	0.8383	0.47	0.8509	1.02	0.8342	0.96	0.8389	0.40	0.8289	1.59	0.8328	1.13	0.8406	0.20	0.8562	1.65
260	0.3738	0.3751	0.35	0.3782	1.18	0.3739	0.03	0.3749	0.29	0.3737	0.03	0.3727	0.29	0.3763	0.67	0.3797	1.58
270	0.2617	0.2635	0.69	0.2647	1.15	0.2628	0.42	0.2632	0.57	0.263	0.50	0.2618	0.04	0.2644	1.03	0.2657	1.53
280	0.1882	0.19	0.96	0.1903	1.12	0.1896	0.74	0.1896	0.74	0.1898	0.85	0.1887	0.27	0.1909	1.43	0.191	1.49
290	0.1385	0.1401	1.16	0.1399	1.01	0.1399	1.01	0.1397	0.87	0.14	1.08	0.1391	0.43	0.1409	1.73	0.1405	1.44
300	0.104	0.1054	1.35	0.1049	0.87	0.1051	1.06	0.1049	0.87	0.1051	1.06	0.1044	0.38	0.1061	2.02	0.1054	1.35
310	0.0794	0.0805	1.39	0.0799	0.63	0.0803	1.13	0.08	0.76	0.0802	1.01	0.0797	0.38	0.08122	2.29	0.08045	1.32
320	0.0614	0.0623	1.47	0.0617	0.49	0.0621	1.14	0.0618	0.65	0.0619	0.81	0.0615	0.16	0.06304	2.67	0.06228	1.43
330	0.0481	0.0488	1.46	0.0482	0.21	0.0486	1.04	0.0483	0.42	0.0483	0.42	0.048	0.21	0.0495	2.91	0.04878	1.41
340	0.038	0.0385	1.32	0.038	0.00	0.0383	0.79	0.038	0.00	0.038	0.00	0.0378	0.53	0.03921	3.18	0.03857	1.50
350	0.0301	0.0306	1.66	0.0301	0.00	0.0304	1.00	0.0301	0.00	0.03	0.33	0.0299	0.66	0.03127	3.89	0.03071	2.03
360	0.024	0.0243	1.25	0.0239	0.42	0.0242	0.83	0.0238	0.83	0.0238	0.83	0.0237	1.25	0.02504	4.33	0.02456	2.33
370	0.019	0.0194	2.11	0.019	0.00	0.0192	1.05	0.0188	1.05	0.0188	1.05	0.0187	1.58	0.02005	5.53	0.01966	3.47
380	0.015	0.0153	2.00	0.015	0.00	0.0151	0.67	0.0148	1.33	0.0147	2.00	0.0147	2.00	0.01598	6.53	0.01568	4.53
390	0.0115	0.0119	3.48	0.0117	1.74	0.0118	2.61	0.0114	0.87	0.0113	1.74	0.0113	1.74	0.01256	9.22	0.01234	7.30
400	0.0083	0.0088	6.02	0.0087	4.82	0.0087	4.82	0.0083	0.00	0.0083	0.00	0.0083	0.00	0.009485	14.28	0.00936	12.77
MOY			2.39		1.76		1.82		1.47		4.35		1.33		3.94		2.80

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
120	0.00136	0.001486	9.26	0.001487	9.34	0.001485	9.19	0.001326	2.50	0.001329	2.28	0.001325	2.57
140	0.001396	0.001513	8.38	0.001513	8.38	0.001512	8.31	0.001348	3.44	0.001351	3.22	0.001347	3.51
160	0.001435	0.001543	7.53	0.001543	7.53	0.001542	7.46	0.001373	4.32	0.001375	4.18	0.001373	4.32
180	0.001476	0.001577	6.84	0.001577	6.84	0.001577	6.84	0.001402	5.01	0.001404	4.88	0.001402	5.01
200	0.00152	0.001617	6.38	0.001616	6.32	0.001617	6.38	0.001435	5.59	0.001437	5.46	0.001435	5.59
220	0.001568	0.001663	6.06	0.001662	5.99	0.001663	6.06	0.001474	5.99	0.001475	5.93	0.001474	5.99
240	0.001621	0.001717	5.92	0.001716	5.86	0.001717	5.92	0.00152	6.23	0.00152	6.23	0.00152	6.23
260	0.00168	0.00178	5.95	0.00178	5.95	0.001781	6.01	0.001574	6.31	0.001575	6.25	0.001575	6.25

270	0.001712	0.001817	6.13	0.001817	6.13	0.001817	6.13	0.001606	6.19	0.001606	6.19	0.001606	6.19
280	0.001746	0.001857	6.36	0.001857	6.36	0.001858	6.41	0.001641	6.01	0.001641	6.01	0.001641	6.01
290	0.001784	0.001902	6.61	0.001903	6.67	0.001903	6.67	0.00168	5.83	0.00168	5.83	0.00168	5.83
300	0.001824	0.001953	7.07	0.001953	7.07	0.001953	7.07	0.001724	5.48	0.001723	5.54	0.001724	5.48
310	0.001868	0.002009	7.55	0.002011	7.66	0.00201	7.60	0.001774	5.03	0.001773	5.09	0.001774	5.03
320	0.001916	0.002074	8.25	0.002076	8.35	0.002074	8.25	0.00183	4.49	0.00183	4.49	0.001832	4.38
330	0.001971	0.002148	8.98	0.002152	9.18	0.002149	9.03	0.001896	3.81	0.001896	3.81	0.001898	3.70
340	0.002032	0.002234	9.94	0.00224	10.24	0.002236	10.04	0.001974	2.85	0.001974	2.85	0.001976	2.76
350	0.002103	0.002337	11.13	0.002345	11.51	0.00234	11.27	0.002067	1.71	0.002067	1.71	0.002069	1.62
360	0.002187	0.002462	12.57	0.002473	13.08	0.002467	12.80	0.002181	0.27	0.002182	0.23	0.002184	0.14
370	0.002289	0.00262	14.46	0.002634	15.07	0.002627	14.77	0.002325	1.57	0.002328	1.70	0.00233	1.79
380	0.00242	0.002827	16.82	0.002846	17.60	0.002838	17.27	0.002518	4.05	0.002522	4.21	0.002525	4.34
390	0.002604	0.003126	20.05	0.003149	20.93	0.00314	20.58	0.002797	7.41	0.002805	7.72	0.002807	7.80
400	0.00292	0.003636	24.52	0.003665	25.51	0.003656	25.21	0.003282	12.40	0.003293	12.77	0.003296	12.88
MOY			9.85		10.07		9.97		4.84		4.85		4.88

Methane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
95	536.5	538.54	0.38	554.15	3.29	537.68	0.22	538.68	0.41	537.27	0.14	537.63	0.21	538.738	0.42	556.904	3.80
100	530.6	531.64	0.20	545.91	2.89	529.75	0.16	531.61	0.19	530.12	0.09	529.76	0.16	531.801	0.23	548.471	3.37
105	522.5	524.32	0.35	537.24	2.82	521.67	0.16	524.09	0.30	522.52	0.00	521.65	0.16	524.447	0.37	539.601	3.27
110	514.4	516.47	0.40	528.02	2.65	513.31	0.21	516	0.31	514.35	0.01	513.17	0.24	516.557	0.42	530.186	3.07
115	504.8	507.95	0.62	518.14	2.64	504.52	0.06	507.22	0.48	505.5	0.14	504.18	0.12	508.013	0.64	520.11	3.03
120	495.1	498.64	0.72	507.47	2.50	495.15	0.01	497.63	0.51	495.86	0.15	494.54	0.11	498.689	0.72	509.251	2.86
125	483.8	488.4	0.95	495.88	2.50	485.04	0.26	487.11	0.68	485.3	0.31	484.1	0.06	488.454	0.96	497.477	2.83
130	472.4	477.09	0.99	483.23	2.29	474.01	0.34	475.51	0.66	473.67	0.27	472.71	0.07	477.165	1.01	484.643	2.59
135	458.9	464.54	1.23	469.36	2.28	461.88	0.65	462.67	0.82	460.8	0.41	460.17	0.28	464.665	1.26	470.586	2.55
140	445.3	450.58	1.19	454.07	1.97	448.43	0.70	448.42	0.70	446.52	0.27	446.28	0.22	450.774	1.23	455.121	2.21
145	434.9	435	0.02	437.16	0.52	433.39	0.35	432.54	0.54	430.6	0.99	430.81	0.94	435.279	0.09	438.027	0.72
150	424.5	417.52	1.64	418.34	1.45	416.47	1.89	414.77	2.29	412.76	2.77	413.46	2.60	417.916	1.55	419.036	1.29
155	397.7	397.82	0.03	397.27	0.11	397.27	0.11	394.78	0.73	392.67	1.26	393.87	0.96	398.352	0.16	397.807	0.03
160	370.9	375.45	1.23	373.51	0.70	375.28	1.18	372.12	0.33	369.85	0.28	371.54	0.17	376.138	1.41	373.891	0.81
165	344.6	349.79	1.51	346.43	0.53	349.81	1.51	346.18	0.46	343.67	0.27	345.8	0.35	350.642	1.75	346.661	0.60
170	318.4	319.88	0.46	315.1	1.04	319.84	0.45	316.02	0.75	313.18	1.64	315.68	0.85	320.91	0.79	315.189	1.01
175	281.8	284.17	0.84	277.97	1.36	283.7	0.67	280.09	0.61	276.83	1.76	279.56	0.79	285.357	1.26	277.953	1.37
180	245.2	239.65	2.26	232.21	5.30	238.33	2.80	235.46	3.97	231.71	5.50	234.47	4.38	240.957	1.73	232.103	5.34
185	192.3	178.91	6.96	170.84	11.16	176.38	8.28	174.92	9.04	170.81	11.18	173.21	9.93	180.22	6.28	170.711	11.23
MOY			1.16		2.53		1.05		1.25		1.45		1.19		1.17		2.73

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
95	5.628	5.6686	0.72	5.834	3.66	5.6596	0.56	5.6701	0.75	5.6553	0.49	5.6591	0.55	5.671	0.76	5.8645	4.20

100	5.306	5.3162	0.19	5.4596	2.89	5.2974	0.16	5.316	0.19	5.3012	0.09	5.2976	0.16	5.3181	0.23	5.4862	3.40
105	4.991	4.9935	0.05	5.1169	2.52	4.9683	0.45	4.9913	0.01	4.9763	0.29	4.9681	0.46	4.9948	0.08	5.1399	2.98
110	4.676	4.6951	0.41	4.8003	2.66	4.6664	0.21	4.6908	0.32	4.6759	0.00	4.6652	0.23	4.696	0.43	4.8203	3.09
115	4.401	4.417	0.36	4.5056	2.38	4.3871	0.32	4.4106	0.22	4.3957	0.12	4.3842	0.38	4.4175	0.37	4.5229	2.77
120	4.126	4.1553	0.71	4.2289	2.49	4.1262	0.00	4.1469	0.51	4.1322	0.15	4.1212	0.12	4.1558	0.72	4.2439	2.86
125	3.73	3.9072	4.75	3.9671	6.36	3.8803	4.03	3.8969	4.47	3.8824	4.09	3.8728	3.83	3.9077	4.76	3.9799	6.70
130	3.334	3.6699	10.07	3.7172	11.49	3.6463	9.37	3.6578	9.71	3.6436	9.29	3.6362	9.06	3.6705	10.09	3.728	11.82
135	3.257	3.4411	5.65	3.4767	6.75	3.4213	5.04	3.4272	5.23	3.4133	4.80	3.4086	4.65	3.442	5.68	3.4858	7.02
140	3.181	3.2184	1.18	3.2434	1.96	3.203	0.69	3.203	0.69	3.1894	0.26	3.1877	0.21	3.2198	1.22	3.2509	2.20
145	3.006	3	0.20	3.0149	0.30	2.9889	0.57	2.983	0.77	2.9697	1.21	2.9711	1.16	3.0019	0.14	3.0209	0.50
150	2.83	2.7835	1.64	2.7889	1.45	2.7765	1.89	2.7651	2.29	2.7518	2.76	2.7564	2.60	2.7861	1.55	2.7936	1.29
155	2.574	2.5666	0.29	2.5631	0.42	2.563	0.43	2.5469	1.05	2.5333	1.58	2.5411	1.28	2.57	0.16	2.5666	0.29
160	2.318	2.3466	1.23	2.3345	0.71	2.3455	1.19	2.3258	0.34	2.3116	0.28	2.3221	0.18	2.3509	1.42	2.3369	0.82
165	2.096	2.1199	1.14	2.0997	0.18	2.1201	1.15	2.0981	0.10	2.0829	0.63	2.0958	0.01	2.1251	1.39	2.101	0.24
170	1.873	1.8817	0.46	1.8536	1.04	1.8814	0.45	1.8589	0.75	1.8423	1.64	1.8569	0.86	1.8877	0.78	1.8541	1.01
175	1.618	1.6238	0.36	1.5884	1.83	1.6211	0.19	1.6005	1.08	1.5819	2.23	1.5975	1.27	1.6306	0.78	1.5884	1.83
180	1.362	1.3314	2.25	1.2901	5.28	1.3241	2.78	1.3081	3.96	1.2873	5.48	1.3026	4.36	1.3386	1.72	1.2895	5.32
185	1.032	0.9671	6.29	0.9235	10.51	0.9534	7.62	0.9455	8.38	0.9233	10.53	0.9363	9.27	0.9742	5.60	0.9228	10.58
MOY			2.00		3.41		1.95		2.15		2.42		2.14		1.99		3.63

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
95	2.463	2.4822	0.78	2.6425	7.29	2.4299	1.34	2.4801	0.69	2.4317	1.27	2.4307	1.31	2.485	0.89	2.682	8.89
100	1.479	1.4999	1.41	1.5717	6.27	1.4701	0.60	1.498	1.28	1.4706	0.57	1.4701	0.60	1.502	1.56	1.59	7.51
105	0.94	0.9544	1.53	0.9873	5.03	0.9372	0.30	0.9529	1.37	0.9365	0.37	0.9367	0.35	0.9557	1.67	0.996	5.96
110	0.625	0.6343	1.49	0.6492	3.87	0.6242	0.13	0.633	1.28	0.6228	0.35	0.6235	0.24	0.6353	1.65	0.6538	4.61
115	0.43	0.4373	1.70	0.4437	3.19	0.4313	0.30	0.4362	1.44	0.4296	0.09	0.4306	0.14	0.4383	1.93	0.4463	3.79
120	0.306	0.311	1.63	0.3133	2.39	0.3074	0.46	0.3101	1.34	0.3056	0.13	0.3066	0.20	0.3119	1.93	0.315	2.94
125	0.223	0.227	1.79	0.2274	1.97	0.225	0.90	0.2262	1.43	0.2232	0.09	0.2241	0.49	0.228	2.24	0.2286	2.51
130	0.167	0.1695	1.50	0.169	1.20	0.1683	0.78	0.1688	1.08	0.1666	0.24	0.1675	0.30	0.1705	2.10	0.17	1.80
135	0.127	0.129	1.57	0.1281	0.87	0.1282	0.94	0.1283	1.02	0.1267	0.24	0.1275	0.39	0.13	2.36	0.129	1.57
140	0.098	0.0997	1.73	0.0987	0.71	0.0993	1.33	0.099	1.02	0.0979	0.10	0.0985	0.51	0.1007	2.76	0.09954	1.57
145	0.077	0.0781	1.43	0.0771	0.13	0.0779	1.17	0.0774	0.52	0.0766	0.52	0.0771	0.13	0.07911	2.74	0.07796	1.25
150	0.061	0.0619	1.48	0.061	0.00	0.0617	1.15	0.0612	0.33	0.0605	0.82	0.061	0.00	0.06286	3.05	0.06179	1.30
155	0.049	0.0494	0.82	0.0486	0.82	0.0493	0.61	0.0487	0.61	0.0482	1.63	0.0486	0.82	0.0504	2.86	0.04946	0.94
160	0.039	0.0397	1.79	0.039	0.00	0.0396	1.54	0.039	0.00	0.0386	1.03	0.0389	0.26	0.04069	4.33	0.03988	2.26
165	0.032	0.032	0.00	0.0315	1.56	0.0319	0.31	0.0313	2.19	0.031	3.13	0.0313	2.19	0.03299	3.09	0.03231	0.97
170	0.026	0.0258	0.77	0.0254	2.31	0.0257	1.15	0.0251	3.46	0.0249	4.23	0.0251	3.46	0.02678	3.00	0.02623	0.88
175	0.02	0.0207	3.50	0.0204	2.00	0.0206	3.00	0.0201	0.50	0.0199	0.50	0.02	0.00	0.02168	8.40	0.02125	6.25
180	0.016	0.0164	2.50	0.0162	1.25	0.0163	1.88	0.0158	1.25	0.0156	2.50	0.0157	1.88	0.01737	8.56	0.01705	6.56
185	0.012	0.0126	5.00	0.0124	3.33	0.0125	4.17	0.012	0.00	0.0119	0.83	0.0119	0.83	0.01354	12.83	0.01334	11.17
190	0.008	0.0084	5.00	0.0084	5.00	0.0084	5.00	0.0078	2.50	0.0078	2.50	0.0078	2.50	0.009327	16.59	0.009279	15.99

MOY		1.87	2.46	1.35	1.17	1.06	0.83	4.23	4.44				
Volume spécifique liquide (m3/kg)													
T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
95	0.002244	0.002244	0.00	0.00224	0.18	0.002245	0.04	0.001988	11.41	0.00199	11.32	0.00199	11.32
100	0.002278	0.00228	0.09	0.002277	0.04	0.002282	0.18	0.002019	11.37	0.002021	11.28	0.002021	11.28
105	0.002316	0.002319	0.13	0.002316	0.00	0.002321	0.22	0.002053	11.36	0.002054	11.31	0.002054	11.31
110	0.002353	0.002362	0.38	0.00236	0.30	0.002364	0.47	0.002089	11.22	0.002091	11.13	0.002091	11.13
115	0.002396	0.002409	0.54	0.002407	0.46	0.00241	0.58	0.002129	11.14	0.002131	11.06	0.002131	11.06
120	0.002438	0.002459	0.86	0.002458	0.82	0.002461	0.94	0.002173	10.87	0.002175	10.79	0.002175	10.79
125	0.002487	0.002515	1.13	0.002515	1.13	0.002517	1.21	0.002222	10.66	0.002224	10.57	0.002223	10.62
130	0.002536	0.002577	1.62	0.002578	1.66	0.002579	1.70	0.002275	10.29	0.002278	10.17	0.002277	10.21
135	0.002594	0.002645	1.97	0.002647	2.04	0.002647	2.04	0.002336	9.95	0.002338	9.87	0.002337	9.91
140	0.002652	0.002722	2.64	0.002726	2.79	0.002724	2.71	0.002403	9.39	0.002407	9.24	0.002405	9.31
145	0.002722	0.002809	3.20	0.002814	3.38	0.002811	3.27	0.00248	8.89	0.002484	8.74	0.002482	8.82
150	0.002792	0.002909	4.19	0.002916	4.44	0.00291	4.23	0.002569	7.99	0.002573	7.84	0.00257	7.95
155	0.002882	0.003024	4.93	0.003033	5.24	0.003025	4.96	0.002672	7.29	0.002677	7.11	0.002673	7.25
160	0.002971	0.003159	6.33	0.003171	6.73	0.003161	6.40	0.002794	5.96	0.0028	5.76	0.002796	5.89
165	0.003095	0.003322	7.33	0.003337	7.82	0.003324	7.40	0.002942	4.94	0.00295	4.68	0.002944	4.88
170	0.003218	0.003523	9.48	0.003542	10.07	0.003527	9.60	0.003126	2.86	0.003136	2.55	0.003129	2.77
175	0.003419	0.003782	10.62	0.003807	11.35	0.003788	10.79	0.003367	1.52	0.003379	1.17	0.003371	1.40
180	0.003619	0.004141	14.42	0.004171	15.25	0.00415	14.67	0.003702	2.29	0.003717	2.71	0.003708	2.46
185	0.003979	0.004706	18.27	0.004743	19.20	0.004721	18.65	0.004238	6.51	0.004257	6.99	0.004247	6.74
MOY			4.64		4.89		4.74	0.005652	15.35	0.005668	15.67	0.005663	15.57
Nonane									8.56		8.50		8.53

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)																	
T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
260	386.5	390.26	0.97	380.7	1.50	394.55	2.08	390.58	1.06	368.77	4.59	394.22	2.00	390.612	1.06	382.774	0.96
280	374.6	376.97	0.63	370.79	1.02	379.37	1.27	377.35	0.73	359.87	3.93	379.58	1.33	377.369	0.74	372.672	0.51
300	363.1	364.38	0.35	360.94	0.59	365.63	0.70	364.81	0.47	351.01	3.33	366.13	0.83	364.825	0.48	362.64	0.13
320	351.8	352.32	0.15	351.07	0.21	352.96	0.33	352.76	0.27	342.09	2.76	353.57	0.50	352.799	0.28	352.596	0.23
340	339.1	340.62	0.45	341.09	0.59	341.07	0.58	341.04	0.57	333.04	1.79	341.6	0.74	341.118	0.60	342.44	0.98
360	326.9	329.09	0.67	330.86	1.21	329.63	0.84	329.46	0.78	323.71	0.98	329.97	0.94	329.602	0.83	332.042	1.57
380	314	317.54	1.13	320.22	1.98	318.35	1.39	317.81	1.21	313.96	0.01	318.4	1.40	318.055	1.29	321.241	2.31
400	299.3	305.74	2.15	308.99	3.24	306.92	2.55	305.87	2.20	303.59	1.43	306.6	2.44	306.259	2.33	309.843	3.52
420	283.3	293.47	3.59	296.92	4.81	295	4.13	293.41	3.57	292.39	3.21	294.26	3.87	293.971	3.77	297.615	5.05
440	266.9	280.42	5.07	283.74	6.31	282.22	5.74	280.13	4.96	280.07	4.93	281.06	5.31	280.908	5.25	284.282	6.51
460	248.9	266.27	6.98	269.12	8.12	268.16	7.74	265.69	6.75	266.29	6.99	266.6	7.11	266.732	7.16	269.504	8.28
480	229.2	250.59	9.33	252.61	10.21	252.31	10.08	249.68	8.94	250.62	9.35	250.39	9.25	251.015	9.52	252.851	10.32
500	206.7	232.79	12.62	233.64	13.03	234.01	13.21	231.5	12.00	232.46	12.46	231.82	12.15	233.172	12.81	233.737	13.08
520	183.2	212	15.72	211.33	15.35	212.32	15.90	210.3	14.79	210.92	15.13	209.98	14.62	212.329	15.90	211.299	15.34
MOY			4.27		4.87		4.75		4.16		5.06		4.46		4.43		4.91

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
260	1.436	1.501	4.53	1.4643	1.97	1.5175	5.68	1.5022	4.61	1.4199	1.12	1.5163	5.59	1.5024	4.62	1.4722	2.52
280	1.311	1.3463	2.69	1.3243	1.01	1.3549	3.35	1.3477	2.80	1.2858	1.92	1.3556	3.40	1.3477	2.80	1.331	2.23
300	1.199	1.2146	1.30	1.2031	0.34	1.2188	1.65	1.216	1.42	1.1705	2.38	1.2205	1.79	1.2161	1.43	1.2097	0.89
320	1.095	1.101	0.55	1.0971	0.19	1.103	0.73	1.1024	0.68	1.0693	2.35	1.1049	0.90	1.1025	0.68	1.1019	0.63
340	0.998	1.0018	0.38	1.0032	0.52	1.0031	0.51	1.0031	0.51	0.9796	1.84	1.0047	0.67	1.0033	0.53	1.0072	0.92
360	0.908	0.9142	0.68	0.9191	1.22	0.9156	0.84	0.9152	0.79	0.8992	0.97	0.9166	0.95	0.9156	0.84	0.9223	1.57
380	0.826	0.8356	1.16	0.8427	2.02	0.8378	1.43	0.8363	1.25	0.8262	0.02	0.8379	1.44	0.837	1.33	0.8454	2.35
400	0.748	0.7644	2.19	0.7725	3.28	0.7673	2.58	0.7647	2.23	0.759	1.47	0.7665	2.47	0.7657	2.37	0.7746	3.56
420	0.674	0.6987	3.66	0.7069	4.88	0.7024	4.21	0.6986	3.65	0.6962	3.29	0.7006	3.95	0.6999	3.84	0.7086	5.13
440	0.607	0.6373	4.99	0.6449	6.24	0.6414	5.67	0.6367	4.89	0.6365	4.86	0.6388	5.24	0.6384	5.17	0.6461	6.44
460	0.541	0.5789	7.01	0.585	8.13	0.583	7.76	0.5776	6.77	0.5789	7.01	0.5796	7.13	0.5799	7.19	0.5859	8.30
480	0.478	0.5221	9.23	0.5263	10.10	0.5257	9.98	0.5202	8.83	0.5221	9.23	0.5217	9.14	0.5229	9.39	0.5268	10.21
500	0.413	0.4656	12.74	0.4673	13.15	0.468	13.32	0.463	12.11	0.4649	12.57	0.4636	12.25	0.4663	12.91	0.4675	13.20
520	0.352	0.4077	15.82	0.4064	15.45	0.4083	15.99	0.4044	14.89	0.4056	15.23	0.4038	14.72	0.4083	15.99	0.4064	15.45
MOY			4.78		4.89		5.26		4.67		4.59		4.98		4.94		5.24

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
300	30.35	30.0057	1.13	30.4578	0.36	30.4533	0.34	30.2258	0.41	27.4453	9.57	30.4852	0.45	30.25	0.33	31.4	3.46
320	10.19	10.0831	1.05	10.3122	1.20	10.2046	0.14	10.1431	0.46	9.5436	6.34	10.1963	0.06	10.15	0.39	10.45	2.55
340	4	3.9846	0.39	4.0802	2.01	4.0271	0.68	4.003	0.08	3.8596	3.51	4.0166	0.42	4.006	0.15	4.115	2.88
360	1.8	1.793	0.39	1.8313	1.74	1.8102	0.57	1.799	0.06	1.7633	2.04	1.8029	0.16	1.801	0.06	1.841	2.28
380	0.894	0.8957	0.19	0.9105	1.85	0.9031	1.02	0.8976	0.40	0.8891	0.55	0.8985	0.50	0.8993	0.59	0.9135	2.18
400	0.485	0.4868	0.37	0.4919	1.42	0.4899	1.01	0.4872	0.45	0.4855	0.10	0.487	0.41	0.4886	0.74	0.4929	1.63
420	0.286	0.2831	1.01	0.2842	0.63	0.2842	0.63	0.2829	1.08	0.2828	1.12	0.2823	1.29	0.2842	0.63	0.2847	0.45
440	0.161	0.1738	7.95	0.1734	7.70	0.174	8.07	0.1734	7.70	0.1735	7.76	0.1727	7.27	0.1747	8.51	0.1738	7.95
460	0.104	0.1114	7.12	0.1105	6.25	0.1111	6.83	0.1109	6.63	0.1109	6.63	0.1102	5.96	0.1121	7.79	0.1109	6.63
480	0.069	0.0738	6.96	0.0728	5.51	0.0734	6.38	0.0733	6.23	0.0732	6.09	0.0727	5.36	0.07451	7.99	0.07332	6.26
500	0.045	0.0501	11.33	0.0492	9.33	0.0496	10.22	0.0495	10.00	0.0494	9.78	0.049	8.89	0.0508	12.89	0.04978	10.62
520	0.03	0.0345	15.00	0.0338	12.67	0.0341	13.67	0.034	13.33	0.0338	12.67	0.0336	12.00	0.03523	17.43	0.03443	14.77
540	0.021	0.0239	13.81	0.0234	11.43	0.0235	11.90	0.0233	10.95	0.0232	10.48	0.023	9.52	0.02461	17.19	0.02402	14.38
MOY			5.13		4.78		4.73		4.45		5.90		4.02		5.74		5.85

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
300	0.001404	0.001664	18.52	0.001664	18.52	0.001664	18.52	0.001479	5.34	0.001481	5.48	0.001479	5.34
320	0.001436	0.001693	17.90	0.001693	17.90	0.001693	17.90	0.001503	4.67	0.001505	4.81	0.001503	4.67
340	0.001471	0.001726	17.34	0.001725	17.27	0.001726	17.34	0.001531	4.08	0.001532	4.15	0.001531	4.08
360	0.001508	0.001763	16.91	0.001762	16.84	0.001763	16.91	0.001562	3.58	0.001563	3.65	0.001562	3.58
380	0.001548	0.001805	16.60	0.001804	16.54	0.001805	16.60	0.001598	3.23	0.001598	3.23	0.001598	3.23
400	0.001591	0.001853	16.47	0.001852	16.40	0.001853	16.47	0.001639	3.02	0.001639	3.02	0.001639	3.02

420	0.001637	0.001909	16.62	0.001909	16.62	0.001909	16.62	0.001687	3.05	0.001687	3.05	0.001688	3.12
440	0.00169	0.001975	16.86	0.001975	16.86	0.001975	16.86	0.001744	3.20	0.001744	3.20	0.001745	3.25
460	0.001748	0.002053	17.45	0.002055	17.56	0.002054	17.51	0.001813	3.72	0.001813	3.72	0.001814	3.78
480	0.001815	0.002149	18.40	0.002152	18.57	0.00215	18.46	0.001897	4.52	0.001897	4.52	0.001899	4.63
500	0.001895	0.002268	19.68	0.002275	20.05	0.002272	19.89	0.002003	5.70	0.002004	5.75	0.002006	5.86
520	0.002	0.002423	21.15	0.002434	21.70	0.00243	21.50	0.002143	7.15	0.002145	7.25	0.002148	7.40
540	0.00213	0.002636	23.76	0.002653	24.55	0.002647	24.27	0.002337	9.72	0.002342	9.95	0.002345	10.09
560	0.00235	0.002958	25.87	0.002983	26.94	0.002976	26.64	0.002634	12.09	0.002643	12.47	0.002648	12.68
MOY			18.82		19.02		18.96		5.22		5.30		5.34

Octane

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
240	397.3	406.19	2.24	395.16	0.54	411.59	3.60	406.48	2.31	382.89	3.63	410.9	3.42	406.512	2.32	397.356	0.01
260	386.3	392.04	1.49	384.78	0.39	395.07	2.27	392.4	1.58	373.6	3.29	395.07	2.27	392.422	1.58	386.78	0.12
280	375.1	378.73	0.97	374.49	0.16	380.24	1.37	379.13	1.07	364.36	2.86	380.64	1.48	379.149	1.08	376.292	0.32
300	363.8	366.02	0.61	364.19	0.11	366.69	0.79	366.44	0.73	355.07	2.40	367.26	0.95	366.474	0.74	365.801	0.55
320	350	353.71	1.06	353.77	1.08	354.03	1.15	354.11	1.17	345.63	1.25	354.58	1.31	354.189	1.20	355.193	1.48
340	336.7	341.59	1.45	343.07	1.89	341.92	1.55	341.93	1.55	335.89	0.24	342.29	1.66	342.084	1.60	344.318	2.26
360	323.3	329.43	1.90	331.93	2.67	330.01	2.08	329.67	1.97	325.67	0.73	330.08	2.10	329.932	2.05	332.993	3.00
380	309.6	316.98	2.38	320.1	3.39	317.92	2.69	317.07	2.41	314.76	1.67	317.61	2.59	317.481	2.55	320.995	3.68
400	294.7	303.96	3.14	307.33	4.29	305.28	3.59	303.85	3.10	302.91	2.79	304.54	3.34	304.452	3.31	308.057	4.53
420	280.5	290.05	3.40	293.31	4.57	291.67	3.98	289.68	3.27	289.78	3.31	290.48	3.56	290.522	3.57	293.863	4.76
440	265	274.85	3.72	277.63	4.77	276.6	4.38	274.18	3.46	275	3.77	274.97	3.76	275.302	3.89	278.023	4.91
460	247.2	257.87	4.32	259.8	5.10	259.47	4.96	256.84	3.90	258.04	4.39	257.46	4.15	258.294	4.49	260.035	5.19
480	228.3	238.42	4.43	239.13	4.74	239.51	4.91	236.99	3.81	238.21	4.34	237.22	3.91	238.808	4.60	239.206	4.78
500	208.4	215.43	3.37	214.55	2.95	215.58	3.45	213.57	2.48	214.42	2.89	213.14	2.27	215.781	3.54	214.489	2.92
520	182.6	187.03	2.43	184.25	0.90	185.75	1.73	184.76	1.18	184.78	1.19	183.37	0.42	187.343	2.60	184.074	0.81
540	150.9	149.12	1.18	144.32	4.36	145.99	3.25	146.53	2.90	145.31	3.70	143.94	4.61	149.378	1.01	144.09	4.51
560	93.7	86.77	7.40	81.11	13.44	82.33	12.13	84.43	9.89	81.99	12.50	81.06	13.49	86.962	7.19	80.93	13.63
MOY			2.68		3.26		3.40		2.75		3.23		3.25		2.78		3.38

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
240	1.509	1.6924	12.15	1.6465	9.11	1.715	13.65	1.6937	12.24	1.5973	5.85	1.7122	13.47	1.6938	12.25	1.6557	9.72
260	1.394	1.5078	8.16	1.4799	6.16	1.5195	9.00	1.5092	8.26	1.4372	3.10	1.5195	9.00	1.5093	8.27	1.4876	6.71
280	1.289	1.3526	4.93	1.3375	3.76	1.358	5.35	1.3541	5.05	1.3018	0.99	1.3594	5.46	1.3541	5.05	1.3439	4.26
300	1.191	1.2201	2.44	1.214	1.93	1.2223	2.63	1.2215	2.56	1.1838	0.60	1.2242	2.79	1.2216	2.57	1.2194	2.38
320	1.094	1.1054	1.04	1.1055	1.05	1.1064	1.13	1.1066	1.15	1.0802	1.26	1.1081	1.29	1.1068	1.17	1.11	1.46
340	0.99	1.0047	1.48	1.009	1.92	1.0057	1.59	1.0057	1.59	0.9879	0.21	1.0067	1.69	1.0061	1.63	1.0127	2.29
360	0.898	0.9151	1.90	0.922	2.67	0.9167	2.08	0.9157	1.97	0.9047	0.75	0.9169	2.10	0.9165	2.06	0.925	3.01
380	0.815	0.8342	2.36	0.8424	3.36	0.8366	2.65	0.8344	2.38	0.8283	1.63	0.8358	2.55	0.8355	2.52	0.8447	3.64
400	0.736	0.7599	3.25	0.7683	4.39	0.7632	3.70	0.7596	3.21	0.7573	2.89	0.7614	3.45	0.7611	3.41	0.7701	4.63

420	0.667	0.6906	3.54	0.6983	4.69	0.6944	4.11	0.6897	3.40	0.69	3.45	0.6916	3.69	0.6917	3.70	0.6997	4.90
440	0.603	0.6247	3.60	0.631	4.64	0.6286	4.25	0.6231	3.33	0.625	3.65	0.6249	3.63	0.6257	3.76	0.6319	4.79
460	0.538	0.5606	4.20	0.5648	4.98	0.5641	4.85	0.5583	3.77	0.561	4.28	0.5597	4.03	0.5615	4.37	0.5653	5.07
480	0.476	0.4967	4.35	0.4982	4.66	0.499	4.83	0.4937	3.72	0.4963	4.26	0.4942	3.82	0.4975	4.52	0.4984	4.71
500	0.416	0.4309	3.58	0.4291	3.15	0.4312	3.65	0.4271	2.67	0.4288	3.08	0.4263	2.48	0.4316	3.75	0.429	3.13
520	0.351	0.3597	2.48	0.3543	0.94	0.3572	1.77	0.3553	1.23	0.3554	1.25	0.3526	0.46	0.3603	2.65	0.354	0.85
540	0.279	0.2761	1.04	0.2673	4.19	0.2704	3.08	0.2713	2.76	0.2691	3.55	0.2666	4.44	0.2766	0.86	0.2668	4.37
560	0.168	0.1549	7.80	0.1448	13.81	0.147	12.50	0.1508	10.24	0.1464	12.86	0.1447	13.87	0.1553	7.56	0.1445	13.99
MOY			4.02		4.44		4.75		4.09		3.16		4.60		4.12		4.70

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
240	700	718.9931	2.71	682.9726	2.43	748.8605	6.98	726.2954	3.76	572.678	18.19	749.5122	7.07	727	3.86	706.6	0.94
260	125	134.2173	7.37	132.5126	6.01	137.1992	9.76	135.3842	8.31	114.4834	8.41	137.4204	9.94	135.5	8.40	136	8.80
280	31.9	33.7083	5.67	34.0234	6.66	34.1368	7.01	33.9449	6.41	30.6996	3.76	34.19	7.18	33.97	6.49	34.66	8.65
300	10.7	10.6473	0.49	10.852	1.42	10.7464	0.43	10.7073	0.07	10.064	5.94	10.745	0.42	10.71	0.09	11	2.80
320	4.01	4.0274	0.43	4.1157	2.64	4.0599	1.24	4.0449	0.87	3.903	2.67	4.0521	1.05	4.048	0.95	4.154	3.59
340	1.752	1.7571	0.29	1.7925	2.31	1.7701	1.03	1.7626	0.61	1.7306	1.22	1.764	0.68	1.765	0.74	1.803	2.91
360	0.844	0.8587	1.74	0.8724	3.36	0.8644	2.42	0.8605	1.95	0.8541	1.20	0.8604	1.94	0.862	2.13	0.8755	3.73
380	0.448	0.4595	2.57	0.4642	3.62	0.4618	3.08	0.4598	2.63	0.4594	2.54	0.4593	2.52	0.4611	2.92	0.4652	3.84
400	0.252	0.2642	4.84	0.2653	5.28	0.265	5.16	0.264	4.76	0.2646	5.00	0.2634	4.52	0.2653	5.28	0.2658	5.48
420	0.155	0.1609	3.81	0.1606	3.61	0.161	3.87	0.1605	3.55	0.161	3.87	0.1598	3.10	0.1617	4.32	0.161	3.87
440	0.1	0.1025	2.50	0.1017	1.70	0.1022	2.20	0.102	2.00	0.1022	2.20	0.1014	1.40	0.1032	3.20	0.1021	2.10
460	0.066	0.0675	2.27	0.0667	1.06	0.0671	1.67	0.067	1.52	0.067	1.52	0.0665	0.76	0.06822	3.36	0.06717	1.77
480	0.045	0.0456	1.33	0.0448	0.44	0.0452	0.44	0.045	0.00	0.045	0.00	0.0446	0.89	0.04629	2.87	0.0454	0.89
500	0.031	0.0312	0.65	0.0306	1.29	0.0309	0.32	0.0307	0.97	0.0306	1.29	0.0303	2.26	0.03194	3.03	0.03124	0.77
520	0.021	0.0215	2.38	0.021	0.00	0.0211	0.48	0.0209	0.48	0.0208	0.95	0.0206	1.90	0.02215	5.48	0.02164	3.05
540	0.014	0.0144	2.86	0.0141	0.71	0.0142	1.43	0.0139	0.71	0.0138	1.43	0.0137	2.14	0.01515	8.21	0.01482	5.86
560	0.008	0.0089	11.25	0.0088	10.00	0.0088	10.00	0.0084	5.00	0.0083	3.75	0.0083	3.75	0.009603	20.04	0.009465	18.31
MOY			3.13		3.09		3.38		2.56		3.76		3.03		4.79		4.55

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
240	0.001353	0.00159	17.52	0.001591	17.59	0.00159	17.52	0.001416	4.66	0.001419	4.88	0.001416	4.66
260	0.001368	0.001614	17.98	0.001614	17.98	0.001614	17.98	0.001436	4.97	0.001438	5.12	0.001436	4.97
280	0.001384	0.001641	18.57	0.00164	18.50	0.00164	18.50	0.001458	5.35	0.00146	5.49	0.001458	5.35
300	0.00142	0.00167	17.61	0.00167	17.61	0.00167	17.61	0.001483	4.44	0.001485	4.58	0.001483	4.44
320	0.001457	0.001704	16.95	0.001703	16.88	0.001703	16.88	0.001511	3.71	0.001512	3.77	0.001511	3.71
340	0.001495	0.001742	16.52	0.001741	16.45	0.001741	16.45	0.001543	3.21	0.001544	3.28	0.001543	3.21
360	0.001536	0.001785	16.21	0.001784	16.15	0.001784	16.15	0.00158	2.86	0.00158	2.86	0.00158	2.86
380	0.001582	0.001835	15.99	0.001834	15.93	0.001834	15.93	0.001622	2.53	0.001622	2.53	0.001622	2.53
400	0.001632	0.001892	15.93	0.001892	15.93	0.001892	15.93	0.001672	2.45	0.001672	2.45	0.001672	2.45
420	0.001685	0.001961	16.38	0.001961	16.38	0.001961	16.38	0.001731	2.73	0.001731	2.73	0.001732	2.79

440	0.001747	0.002043	16.94	0.002044	17.00	0.002043	16.94	0.001803	3.21	0.001803	3.21	0.001804	3.26
460	0.001818	0.002143	17.88	0.002147	18.10	0.002145	17.99	0.001892	4.07	0.001892	4.07	0.001894	4.18
480	0.001904	0.00227	19.22	0.002276	19.54	0.002273	19.38	0.002005	5.30	0.002005	5.30	0.002008	5.46
500	0.002013	0.002437	21.06	0.002448	21.61	0.002444	21.41	0.002156	7.10	0.002158	7.20	0.002161	7.35
520	0.00216	0.002672	23.70	0.002689	24.49	0.002683	24.21	0.00237	9.72	0.002375	9.95	0.002379	10.14
540	0.00237	0.003043	28.40	0.003069	29.49	0.003062	29.20	0.002715	14.56	0.002724	14.94	0.002729	15.15
MOY			18.55		18.73		18.65		5.05		5.15		5.16

Propylène

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
160	498.9	502.94	0.81	503.06	0.83	506.66	1.56	503.29	0.88	488.36	2.11	506.17	1.46	503.269	0.88	505.893	1.40
170	489.2	493.34	0.85	494.78	1.14	495.26	1.24	493.7	0.92	481.11	1.65	495.2	1.23	493.685	0.92	497.416	1.68
180	479.6	483.95	0.91	486.41	1.42	484.53	1.03	484.28	0.98	473.74	1.22	484.73	1.07	484.303	0.98	488.847	1.93
190	470.3	474.65	0.92	477.86	1.61	474.27	0.84	474.9	0.98	466.16	0.88	474.6	0.91	474.994	1.00	480.106	2.09
200	461	465.29	0.93	469.04	1.74	464.29	0.71	465.44	0.96	458.29	0.59	464.62	0.79	465.632	1.00	471.104	2.19
210	451.9	455.76	0.85	459.85	1.76	454.41	0.56	455.77	0.86	450.04	0.41	454.64	0.61	456.086	0.93	461.736	2.18
220	442.6	445.91	0.75	450.19	1.71	444.45	0.42	445.75	0.71	441.29	0.30	444.49	0.43	446.225	0.82	451.889	2.10
230	432.4	435.6	0.74	439.91	1.74	434.22	0.42	435.26	0.66	431.92	0.11	433.98	0.37	435.911	0.81	441.433	2.09
240	421.5	424.69	0.76	428.88	1.75	423.53	0.48	424.13	0.62	421.79	0.07	422.96	0.35	424.998	0.83	430.234	2.07
250	409.7	413.01	0.81	416.96	1.77	412.17	0.60	412.23	0.62	410.76	0.26	411.22	0.37	413.332	0.89	418.136	2.06
260	396.5	400.4	0.98	403.96	1.88	399.94	0.87	399.37	0.72	398.64	0.54	398.58	0.52	400.739	1.07	404.968	2.14
270	381.7	386.66	1.30	389.69	2.09	386.58	1.28	385.36	0.96	385.25	0.93	384.79	0.81	387.026	1.40	390.531	2.31
280	365.2	371.56	1.74	373.92	2.39	371.81	1.81	369.97	1.31	370.33	1.40	369.61	1.21	371.962	1.85	374.589	2.57
290	347.8	354.81	2.02	356.34	2.46	355.31	2.16	352.92	1.47	353.61	1.67	352.72	1.41	355.264	2.15	356.856	2.60
300	329.4	336.05	2.02	336.6	2.19	336.65	2.20	333.84	1.35	334.69	1.61	333.71	1.31	336.565	2.18	336.958	2.29
310	309.8	314.79	1.61	314.19	1.42	315.27	1.77	312.25	0.79	313.05	1.05	312.06	0.73	315.369	1.80	314.397	1.48
320	287.4	290.3	1.01	288.38	0.34	290.4	1.04	287.43	0.01	287.97	0.20	287.02	0.13	290.951	1.24	288.456	0.37
330	261.2	261.44	0.09	258.06	1.20	260.85	0.13	258.25	1.13	258.29	1.11	257.42	1.45	262.163	0.37	258.019	1.22
340	226.9	226.16	0.33	221.25	2.49	224.51	1.05	222.72	1.84	221.98	2.17	221.25	2.49	226.949	0.02	221.12	2.55
350	181.3	180.01	0.71	173.73	4.18	177	2.37	176.49	2.65	174.74	3.62	174.17	3.93	180.814	0.27	173.551	4.27
360	110.4	107.46	2.66	101.14	8.39	103.47	6.28	104.49	5.35	101.94	7.66	101.62	7.95	108.131	2.06	101.005	8.51
MOY			1.09		2.12		1.37		1.23		1.41		1.41		1.12		2.39

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
160	3.118	3.1434	0.81	3.1441	0.84	3.1666	1.56	3.1455	0.88	3.0532	2.08	3.1636	1.46	3.1454	0.88	3.1621	1.41
170	2.798	2.902	3.72	2.9104	4.02	2.9133	4.12	2.9041	3.79	2.8306	1.17	2.913	4.11	2.904	3.79	2.9262	4.58
180	2.664	2.6886	0.92	2.7022	1.43	2.6919	1.05	2.6904	0.99	2.6322	1.19	2.693	1.09	2.6906	1.00	2.716	1.95
190	2.475	2.4981	0.93	2.515	1.62	2.4962	0.86	2.4995	0.99	2.4536	0.86	2.4979	0.93	2.5	1.01	2.527	2.10
200	2.305	2.3265	0.93	2.3452	1.74	2.3215	0.72	2.3272	0.96	2.2916	0.58	2.3231	0.79	2.3282	1.01	2.3556	2.20
210	2.152	2.1703	0.85	2.1898	1.76	2.1639	0.55	2.1703	0.85	2.1431	0.41	2.165	0.60	2.1718	0.92	2.1988	2.17
220	2.012	2.0269	0.74	2.0463	1.70	2.0202	0.41	2.0261	0.70	2.0059	0.30	2.0204	0.42	2.0283	0.81	2.0542	2.10

230	1.88	1.8939	0.74	1.9126	1.73	1.8879	0.42	1.8924	0.66	1.8779	0.11	1.8869	0.37	1.8953	0.81	1.9193	2.09
240	1.756	1.7695	0.77	1.787	1.77	1.7647	0.50	1.7672	0.64	1.7575	0.09	1.7623	0.36	1.7708	0.84	1.7926	2.08
250	1.639	1.652	0.79	1.6678	1.76	1.6487	0.59	1.6489	0.60	1.643	0.24	1.6449	0.36	1.6533	0.87	1.6725	2.04
260	1.528	1.54	0.79	1.5537	1.68	1.5382	0.67	1.536	0.52	1.5332	0.34	1.533	0.33	1.5413	0.87	1.5576	1.94
270	1.414	1.4321	1.28	1.4433	2.07	1.4318	1.26	1.4272	0.93	1.4268	0.91	1.4252	0.79	1.4334	1.37	1.4464	2.29
280	1.304	1.327	1.76	1.3354	2.41	1.3279	1.83	1.3213	1.33	1.3226	1.43	1.32	1.23	1.3284	1.87	1.3378	2.59
290	1.199	1.2235	2.04	1.2288	2.49	1.2252	2.19	1.217	1.50	1.2193	1.69	1.2163	1.44	1.225	2.17	1.2305	2.63
300	1.098	1.1202	2.02	1.122	2.19	1.1222	2.20	1.1128	1.35	1.1156	1.60	1.1124	1.31	1.1219	2.18	1.1232	2.30
310	0.999	1.0154	1.64	1.0135	1.45	1.017	1.80	1.0073	0.83	1.0099	1.09	1.0066	0.76	1.0173	1.83	1.0142	1.52
320	0.898	0.9072	1.02	0.9012	0.36	0.9075	1.06	0.8982	0.02	0.8999	0.21	0.8969	0.12	0.9092	1.25	0.9014	0.38
330	0.792	0.7922	0.03	0.782	1.26	0.7904	0.20	0.7826	1.19	0.7827	1.17	0.7801	1.50	0.7944	0.30	0.7819	1.28
340	0.667	0.6652	0.27	0.6507	2.44	0.6603	1.00	0.6551	1.78	0.6529	2.11	0.6507	2.44	0.6675	0.07	0.6504	2.49
350	0.518	0.5143	0.71	0.4964	4.17	0.5057	2.37	0.5042	2.66	0.4993	3.61	0.4976	3.94	0.5166	0.27	0.4959	4.27
360	0.307	0.2985	2.77	0.281	8.47	0.2874	6.38	0.2903	5.44	0.2832	7.75	0.2823	8.05	0.3004	2.15	0.2806	8.60
MOY			1.22		2.25		1.51		1.36		1.38		1.54		1.25		2.52

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
160	25.66	25.7315	0.28	26.6466	3.84	25.6625	0.01	25.8183	0.62	23.6683	7.76	25.6798	0.08	25.84	0.70	27.33	6.51
170	10.73	10.7937	0.59	11.1609	4.02	10.7099	0.19	10.8225	0.86	10.1569	5.34	10.7217	0.08	10.83	0.93	11.39	6.15
180	5.025	5.0716	0.93	5.2275	4.03	5.0221	0.06	5.0818	1.13	4.8545	3.39	5.0264	0.03	5.087	1.23	5.311	5.69
190	2.581	2.6158	1.35	2.6853	4.04	2.5898	0.34	2.6195	1.49	2.5361	1.74	2.5906	0.37	2.623	1.63	2.718	5.31
200	1.435	1.4573	1.55	1.4893	3.78	1.444	0.63	1.4586	1.64	1.4264	0.60	1.4434	0.59	1.461	1.81	1.503	4.74
210	0.8528	0.8657	1.51	0.8806	3.26	0.8589	0.72	0.866	1.55	0.8532	0.05	0.8579	0.60	0.8678	1.76	0.8869	4.00
220	0.5354	0.5425	1.33	0.5494	2.61	0.539	0.67	0.5424	1.31	0.5373	0.35	0.5379	0.47	0.5439	1.59	0.5527	3.23
230	0.3511	0.3556	1.28	0.3585	2.11	0.3538	0.77	0.3553	1.20	0.3533	0.63	0.3528	0.48	0.3566	1.57	0.3601	2.56
240	0.239	0.242	1.26	0.243	1.67	0.241	0.84	0.2416	1.09	0.2409	0.79	0.2401	0.46	0.2428	1.59	0.244	2.09
250	0.168	0.1699	1.13	0.17	1.19	0.1694	0.83	0.1695	0.89	0.1693	0.77	0.1686	0.36	0.1707	1.61	0.1707	1.61
260	0.121	0.1225	1.24	0.1222	0.99	0.1222	0.99	0.1221	0.91	0.1221	0.91	0.1215	0.41	0.1233	1.90	0.1228	1.49
270	0.089	0.0903	1.46	0.0898	0.90	0.0901	1.24	0.0899	1.01	0.0899	1.01	0.0895	0.56	0.09107	2.33	0.09034	1.51
280	0.0665	0.0678	1.95	0.0672	1.05	0.0676	1.65	0.0673	1.20	0.0673	1.20	0.067	0.75	0.06853	3.05	0.06776	1.89
290	0.0505	0.0517	2.38	0.0511	1.19	0.0515	1.98	0.0512	1.39	0.0512	1.39	0.0509	0.79	0.05237	3.70	0.05164	2.26
300	0.0389	0.0398	2.31	0.0393	1.03	0.0396	1.80	0.0393	1.03	0.0393	1.03	0.0391	0.51	0.0405	4.11	0.03985	2.44
310	0.0302	0.0309	2.32	0.0304	0.66	0.0308	1.99	0.0304	0.66	0.0303	0.33	0.0303	0.33	0.03161	4.67	0.03104	2.78
320	0.0236	0.0241	2.12	0.0237	0.42	0.024	1.69	0.0236	0.00	0.0235	0.42	0.0235	0.42	0.0248	5.08	0.02433	3.09
330	0.0185	0.0188	1.62	0.0185	0.00	0.0187	1.08	0.0183	1.08	0.0182	1.62	0.0182	1.62	0.01948	5.30	0.0191	3.24
340	0.0142	0.0145	2.11	0.0143	0.70	0.0144	1.41	0.014	1.41	0.014	1.41	0.0139	2.11	0.01521	7.11	0.01493	5.14
350	0.0105	0.011	4.76	0.0108	2.86	0.0109	3.81	0.0105	0.00	0.0104	0.95	0.0104	0.95	0.01166	11.05	0.01147	9.24
360	0.0071	0.0077	8.45	0.0077	8.45	0.0077	8.45	0.0073	2.82	0.0072	1.41	0.0072	1.41	0.008402	18.34	0.00831	17.04
MOY			2.00		2.32		1.48		1.11		1.58		0.64		3.86		4.38

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
------	------	-----	---	-----	---	-----	---	-----	---	----	---	-----	---

160	0.001453	0.001551	6.74	0.001551	6.74	0.001551	6.74	0.001378	5.16	0.00138	5.02	0.001379	5.09
170	0.001477	0.001573	6.50	0.001572	6.43	0.001573	6.50	0.001396	5.48	0.001398	5.35	0.001397	5.42
180	0.001504	0.001596	6.12	0.001595	6.05	0.001596	6.12	0.001416	5.85	0.001417	5.78	0.001416	5.85
190	0.001531	0.001621	5.88	0.00162	5.81	0.001622	5.94	0.001437	6.14	0.001438	6.07	0.001438	6.07
200	0.001559	0.001649	5.77	0.001647	5.64	0.001649	5.77	0.00146	6.35	0.001461	6.29	0.001461	6.29
210	0.001588	0.001678	5.67	0.001677	5.60	0.001679	5.73	0.001486	6.42	0.001487	6.36	0.001486	6.42
220	0.001619	0.001711	5.68	0.00171	5.62	0.001712	5.74	0.001514	6.49	0.001515	6.42	0.001515	6.42
230	0.001653	0.001747	5.69	0.001747	5.69	0.001748	5.75	0.001545	6.53	0.001545	6.53	0.001546	6.47
240	0.00169	0.001788	5.80	0.001787	5.74	0.001788	5.80	0.00158	6.51	0.00158	6.51	0.00158	6.51
250	0.001728	0.001832	6.02	0.001832	6.02	0.001833	6.08	0.001618	6.37	0.001618	6.37	0.001619	6.31
260	0.001769	0.001882	6.39	0.001883	6.44	0.001883	6.44	0.001662	6.05	0.001662	6.05	0.001663	5.99
270	0.001816	0.001939	6.77	0.00194	6.83	0.00194	6.83	0.001712	5.73	0.001712	5.73	0.001713	5.67
280	0.001866	0.002004	7.40	0.002007	7.56	0.002005	7.45	0.001769	5.20	0.001769	5.20	0.00177	5.14
290	0.001923	0.00208	8.16	0.002083	8.32	0.002081	8.22	0.001836	4.52	0.001836	4.52	0.001837	4.47
300	0.001987	0.002168	9.11	0.002173	9.36	0.00217	9.21	0.001915	3.62	0.001916	3.57	0.001917	3.52
310	0.002062	0.002275	10.33	0.002282	10.67	0.002277	10.43	0.002011	2.47	0.002012	2.42	0.002013	2.38
320	0.002149	0.002406	11.96	0.002416	12.42	0.002409	12.10	0.00213	0.88	0.002132	0.79	0.002133	0.74
330	0.002261	0.002573	13.80	0.002587	14.42	0.002579	14.06	0.002284	1.02	0.002287	1.15	0.002289	1.24
340	0.002406	0.0028	16.38	0.002819	17.17	0.00281	16.79	0.002495	3.70	0.0025	3.91	0.002501	3.95
350	0.002626	0.003142	19.65	0.003166	20.56	0.003156	20.18	0.002816	7.24	0.002824	7.54	0.002825	7.58
360	0.003069	0.003808	24.08	0.003837	25.02	0.003827	24.70	0.003451	12.45	0.003463	12.84	0.003464	12.87
MOY			9.23		9.43		9.36		5.44		5.45		5.45

Toluène

Enthalpie de vaporisation (kJ/kg)

T(K)	Exp	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
270	429	432.11	0.72	427.09	0.45	434.95	1.39	432.47	0.81	415.45	3.16	434.87	1.37	432.477	0.81	429.342	0.08
280	423.1	425.9	0.66	422.15	0.22	427.85	1.12	426.27	0.75	411.05	2.85	427.99	1.16	426.277	0.75	424.298	0.28
290	417.2	419.81	0.63	417.2	0.00	421.05	0.92	420.19	0.72	406.63	2.53	421.35	0.99	420.203	0.72	419.245	0.49
300	411.3	413.83	0.62	412.23	0.23	414.5	0.78	414.19	0.70	402.18	2.22	414.91	0.88	414.228	0.71	414.169	0.70
310	405.5	407.92	0.60	407.21	0.42	408.17	0.66	408.27	0.68	397.68	1.93	408.64	0.77	408.327	0.70	409.054	0.88
320	399.6	402.06	0.62	402.14	0.64	402.01	0.60	402.38	0.70	393.12	1.62	402.49	0.72	402.474	0.72	403.883	1.07
330	393.3	396.23	0.74	396.99	0.94	395.97	0.68	396.51	0.82	388.47	1.23	396.43	0.80	396.642	0.85	398.638	1.36
340	387.8	390.39	0.67	391.75	1.02	390.03	0.58	390.62	0.73	383.72	1.05	390.42	0.68	390.804	0.77	393.298	1.42
350	381.8	384.51	0.71	386.39	1.20	384.13	0.61	384.69	0.76	378.84	0.78	384.42	0.69	384.934	0.82	387.839	1.58
360	375.6	378.58	0.79	380.88	1.41	378.23	0.70	378.69	0.82	373.82	0.47	378.4	0.75	379.002	0.91	382.238	1.77
370	369.2	372.56	0.91	375.2	1.63	372.3	0.84	372.59	0.92	368.62	0.16	372.31	0.84	372.979	1.02	376.497	1.98
380	362.8	366.42	1.00	369.33	1.80	366.29	0.96	366.36	0.98	363.22	0.12	366.13	0.92	366.836	1.11	370.501	2.12
390	356.2	360.12	1.10	363.23	1.97	360.16	1.11	359.97	1.06	357.59	0.39	359.8	1.01	360.54	1.22	364.308	2.28
400	349.4	353.64	1.21	356.86	2.14	353.86	1.28	353.38	1.14	351.7	0.66	353.3	1.12	354.057	1.33	357.855	2.42
420	335	339.97	1.48	343.22	2.45	340.58	1.67	339.47	1.33	338.99	1.19	339.57	1.36	340.389	1.61	344.028	2.69
440	319.7	325.09	1.69	328.07	2.62	326.04	1.98	324.31	1.44	324.76	1.58	324.56	1.52	325.512	1.82	328.703	2.82

460	303.2	308.61	1.78	311.03	2.58	309.78	2.17	307.51	1.42	308.63	1.79	307.85	1.53	309.044	1.93	311.491	2.73
480	285.6	290.04	1.55	291.6	2.10	291.2	1.96	288.58	1.04	290.08	1.57	288.87	1.14	290.486	1.71	291.887	2.20
500	266.9	268.69	0.67	269.06	0.81	269.52	0.98	266.84	0.02	268.39	0.56	266.9	0.00	269.148	0.84	269.195	0.86
520	246.5	243.5	1.22	242.38	1.67	243.62	1.17	241.25	2.13	242.48	1.63	240.82	2.30	243.973	1.03	242.369	1.68
540	222.3	212.64	4.35	209.75	5.65	211.58	4.82	210	5.53	210.5	5.31	208.81	6.07	213.127	4.13	209.623	5.70
560	189.3	172.24	9.01	167.58	11.47	169.54	10.44	169.31	10.56	168.64	10.91	167.07	11.74	172.723	8.76	167.273	11.64
MOY			1.49		1.97		1.70		1.59		1.99		1.74		1.56		2.22

Entropie de vaporisation (kJ/kg.K)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
270	1.589	1.6004	0.72	1.5818	0.45	1.6109	1.38	1.6018	0.81	1.5395	3.12	1.6106	1.36	1.6018	0.81	1.5902	0.08
280	1.511	1.5211	0.67	1.5077	0.22	1.528	1.13	1.5224	0.75	1.4686	2.81	1.5285	1.16	1.5224	0.75	1.5154	0.29
290	1.439	1.4476	0.60	1.4386	0.03	1.4519	0.90	1.4489	0.69	1.4026	2.53	1.453	0.97	1.449	0.69	1.4457	0.47
300	1.372	1.3794	0.54	1.3741	0.15	1.3817	0.71	1.3807	0.63	1.3409	2.27	1.3831	0.81	1.3808	0.64	1.3806	0.63
310	1.309	1.3159	0.53	1.3136	0.35	1.3167	0.59	1.317	0.61	1.283	1.99	1.3182	0.70	1.3172	0.63	1.3196	0.81
320	1.249	1.2565	0.60	1.2567	0.62	1.2563	0.58	1.2575	0.68	1.2286	1.63	1.2578	0.70	1.2577	0.70	1.2622	1.06
330	1.194	1.2007	0.56	1.203	0.75	1.1999	0.49	1.2015	0.63	1.1773	1.40	1.2013	0.61	1.2019	0.66	1.208	1.17
340	1.14	1.1482	0.72	1.1522	1.07	1.1471	0.62	1.1489	0.78	1.1286	1.00	1.1483	0.73	1.1494	0.82	1.1568	1.47
350	1.091	1.0986	0.70	1.104	1.19	1.0975	0.60	1.0991	0.74	1.0824	0.79	1.0984	0.68	1.0998	0.81	1.1081	1.57
360	1.044	1.0516	0.73	1.058	1.34	1.0506	0.63	1.0519	0.76	1.0384	0.54	1.0511	0.68	1.0528	0.84	1.0618	1.70
370	0.999	1.0069	0.79	1.0141	1.51	1.0062	0.72	1.007	0.80	0.9963	0.27	1.0063	0.73	1.0081	0.91	1.0187	1.97
380	0.955	0.9643	0.97	0.9719	1.77	0.9639	0.93	0.9641	0.95	0.9558	0.08	0.9635	0.89	0.9654	1.09	0.975	2.09
390	0.913	0.9234	1.14	0.9314	2.02	0.9235	1.15	0.923	1.10	0.9169	0.43	0.9226	1.05	0.9245	1.26	0.9341	2.31
400	0.874	0.8841	1.16	0.8922	2.08	0.8847	1.22	0.8835	1.09	0.8792	0.59	0.8832	1.05	0.8851	1.27	0.8946	2.36
420	0.798	0.8094	1.43	0.8172	2.41	0.8109	1.62	0.8083	1.29	0.8071	1.14	0.8085	1.32	0.8104	1.55	0.8191	2.64
440	0.727	0.7388	1.62	0.7456	2.56	0.741	1.93	0.7371	1.39	0.7381	1.53	0.7376	1.46	0.7398	1.76	0.7471	2.76
460	0.659	0.6709	1.81	0.6762	2.61	0.6734	2.19	0.6685	1.44	0.6709	1.81	0.6692	1.55	0.6718	1.94	0.6772	2.76
480	0.595	0.6043	1.56	0.6075	2.10	0.6067	1.97	0.6012	1.04	0.6043	1.56	0.6018	1.14	0.6052	1.71	0.6081	2.20
500	0.532	0.5374	1.02	0.5381	1.15	0.539	1.32	0.5337	0.32	0.5368	0.90	0.5338	0.34	0.5383	1.18	0.5384	1.20
520	0.473	0.4683	0.99	0.4661	1.46	0.4685	0.95	0.4639	1.92	0.4663	1.42	0.4631	2.09	0.4692	0.80	0.4661	1.46
540	0.411	0.3938	4.18	0.3884	5.50	0.3918	4.67	0.3889	5.38	0.3898	5.16	0.3867	5.91	0.3947	3.97	0.3882	5.55
560	0.338	0.3076	8.99	0.2993	11.45	0.3028	10.41	0.3023	10.56	0.3012	10.89	0.2983	11.75	0.3084	8.76	0.2987	11.63
MOY			1.46		1.94		1.67		1.56		1.99		1.71		1.53		2.19

Volume spécifique vapeur (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%	EOS	%	S-VDW	%
270	34.9	33.4483	4.16	33.555	3.85	33.6596	3.55	33.6327	3.63	30.1273	13.68	33.7163	3.39	33.65	3.58	34.33	1.63
280	19.1	18.4769	3.26	18.6532	2.34	18.5301	2.98	18.5685	2.78	16.9878	11.06	18.56	2.83	18.58	2.72	19.02	0.42
290	10.6	10.7301	1.23	10.8789	2.63	10.7382	1.30	10.7776	1.68	10.0363	5.32	10.7519	1.43	10.78	1.70	11.07	4.43
310	4.1	4.1128	0.31	4.1871	2.12	4.1089	0.22	4.127	0.66	3.9496	3.67	4.1098	0.24	4.13	0.73	4.239	3.39
320	2.67	2.6897	0.74	2.7395	2.60	2.6869	0.63	2.6978	1.04	2.6087	2.30	2.6857	0.59	2.7	1.12	2.768	3.67
330	1.8	1.815	0.83	1.8479	2.66	1.8133	0.74	1.8196	1.09	1.7747	1.41	1.8114	0.63	1.822	1.22	1.864	3.56
340	1.25	1.2594	0.75	1.2811	2.49	1.2587	0.70	1.2622	0.98	1.2397	0.82	1.2566	0.53	1.264	1.12	1.29	3.20

350	0.891	0.8961	0.57	0.9103	2.17	0.8959	0.55	0.8977	0.75	0.8868	0.47	0.8939	0.33	0.8991	0.91	0.9157	2.77
360	0.648	0.6521	0.63	0.6613	2.05	0.6521	0.63	0.6529	0.76	0.648	0.00	0.6503	0.35	0.6542	0.96	0.6645	2.55
370	0.481	0.4841	0.64	0.49	1.87	0.4843	0.69	0.4845	0.73	0.4827	0.35	0.4827	0.35	0.4857	0.98	0.4986	3.66
380	0.364	0.366	0.55	0.3696	1.54	0.3662	0.60	0.3661	0.58	0.3658	0.49	0.3648	0.22	0.3672	0.88	0.3709	1.90
390	0.279	0.2812	0.79	0.2833	1.54	0.2813	0.82	0.2811	0.75	0.2815	0.90	0.2801	0.39	0.2822	1.15	0.2842	1.86
400	0.218	0.2192	0.55	0.2203	1.06	0.2193	0.60	0.219	0.46	0.2196	0.73	0.2182	0.09	0.22	0.92	0.221	1.38
420	0.137	0.1383	0.95	0.1384	1.02	0.1382	0.88	0.138	0.73	0.1386	1.17	0.1375	0.36	0.139	1.46	0.1388	1.31
440	0.09	0.0909	1.00	0.0906	0.67	0.0908	0.89	0.0906	0.67	0.091	1.11	0.0902	0.22	0.09156	1.73	0.09099	1.10
460	0.0611	0.0618	1.15	0.0613	0.33	0.0616	0.82	0.0614	0.49	0.0617	0.98	0.0611	0.00	0.0624	2.13	0.06173	1.03
480	0.0426	0.0431	1.17	0.0426	0.00	0.0429	0.70	0.0427	0.23	0.0428	0.47	0.0424	0.47	0.04365	2.46	0.04302	0.99
500	0.0303	0.0306	0.99	0.0301	0.66	0.0303	0.00	0.0301	0.66	0.0302	0.33	0.0299	1.32	0.03113	2.74	0.03059	0.96
520	0.0219	0.0219	0.00	0.0215	1.83	0.0217	0.91	0.0215	1.83	0.0214	2.28	0.0213	2.74	0.02247	2.60	0.02203	0.59
540	0.0158	0.0157	0.63	0.0154	2.53	0.0155	1.90	0.0153	3.16	0.0152	3.80	0.0151	4.43	0.01626	2.91	0.01593	0.82
560	0.0113	0.0111	1.77	0.0109	3.54	0.0109	3.54	0.0106	6.19	0.0106	6.19	0.0105	7.08	0.01162	2.83	0.0114	0.88
580	0.00759	0.0073	3.82	0.0072	5.14	0.0072	5.14	0.0069	9.09	0.0069	9.09	0.0068	10.41	0.007846	3.37	0.007736	1.92
590	0.00528	0.0052	1.52	0.0052	1.52	0.0052	1.52	0.0049	7.20	0.0049	7.20	0.0049	7.20	0.005782	9.51	0.005747	8.84
MOY			1.22		2.01		1.32		2.01		3.21		1.98		2.16		2.30

Volume spécifique liquide (m3/kg)

T(K)	Exp.	RKG	%	SRK	%	TRK	%	PRG	%	PR	%	TPR	%
270	0.001127	0.001281	13.66	0.001281	13.66	0.001281	13.66	0.001139	1.06	0.001141	1.24	0.001139	1.06
280	0.001138	0.001292	13.53	0.001292	13.53	0.001292	13.53	0.001148	0.88	0.001149	0.97	0.001148	0.88
290	0.00115	0.001303	13.30	0.001303	13.30	0.001303	13.30	0.001157	0.61	0.001158	0.70	0.001157	0.61
300	0.001162	0.001315	13.17	0.001314	13.08	0.001315	13.17	0.001167	0.43	0.001168	0.52	0.001167	0.43
310	0.001175	0.001327	12.94	0.001327	12.94	0.001327	12.94	0.001177	0.17	0.001178	0.26	0.001177	0.17
320	0.001188	0.00134	12.79	0.001339	12.71	0.00134	12.79	0.001188	0.00	0.001189	0.08	0.001188	0.00
330	0.001201	0.001354	12.74	0.001353	12.66	0.001354	12.74	0.0012	0.08	0.001201	0.00	0.0012	0.08
340	0.001215	0.001368	12.59	0.001368	12.59	0.001368	12.59	0.001212	0.25	0.001213	0.16	0.001212	0.25
350	0.00123	0.001384	12.52	0.001383	12.44	0.001384	12.52	0.001225	0.41	0.001226	0.33	0.001225	0.41
360	0.001245	0.0014	12.45	0.001399	12.37	0.0014	12.45	0.001239	0.48	0.00124	0.40	0.001239	0.48
370	0.001261	0.001418	12.45	0.001417	12.37	0.001418	12.45	0.001254	0.56	0.001254	0.56	0.001254	0.56
380	0.001277	0.001436	12.45	0.001436	12.45	0.001436	12.45	0.00127	0.55	0.00127	0.55	0.00127	0.55
390	0.001294	0.001456	12.52	0.001455	12.44	0.001456	12.52	0.001287	0.54	0.001287	0.54	0.001288	0.46
400	0.001312	0.001477	12.58	0.001477	12.58	0.001477	12.58	0.001306	0.46	0.001305	0.53	0.001306	0.46
420	0.00135	0.001525	12.96	0.001525	12.96	0.001525	12.96	0.001347	0.22	0.001346	0.30	0.001347	0.22
440	0.001393	0.001581	13.50	0.001581	13.50	0.001581	13.50	0.001396	0.22	0.001395	0.14	0.001396	0.22
460	0.001443	0.001647	14.14	0.001649	14.28	0.001648	14.21	0.001454	0.76	0.001453	0.69	0.001455	0.83
480	0.001499	0.001727	15.21	0.00173	15.41	0.001729	15.34	0.001525	1.73	0.001524	1.67	0.001526	1.80
500	0.001567	0.001827	16.59	0.001833	16.98	0.00183	16.78	0.001615	3.06	0.001615	3.06	0.001617	3.19
520	0.001651	0.001957	18.53	0.001965	19.02	0.001961	18.78	0.001732	4.91	0.001733	4.97	0.001736	5.15
540	0.001761	0.002135	21.24	0.002147	21.92	0.002142	21.64	0.001895	7.61	0.001898	7.78	0.001901	7.95
560	0.001919	0.002406	25.38	0.002424	26.32	0.002418	26.00	0.002147	11.88	0.002152	12.14	0.002156	12.35

Annexe H

Corrélations sur les propriétés des fractions pétrolières

Température critique (Riazi et Daubert, 1980)

$$T_C = 24.278T_b^{0.58848} SG^{0.3596} \quad (H.1)$$

Pression critique (Riazi et Daubert, 1980)

$$P_C = 3.12281 \cdot 10^9 T_b^{-2.3125} SG^{2.320} \quad (H.2)$$

Facteur acentrique (Lee et Kesler, 1975, 1976)

$$T_{br} \leq 0.8 \quad \omega = \frac{\ln Pb_r - 5.92714 + 6.09648T_b^{-1} + 1.28862 \ln T_b - 0.169347T_b^6}{15.2518 - 15.6875T_b^{-1} - 13.4720 \ln T_b + 0.43577T_b^6} \quad (H.3)$$

$$T_{br} > 0.8 \quad \omega = -7.904 + 0.1352Kuop - 0.007465Kuop^2 + 8.359T_b + (1.408 - 0.01063Kuop)T_b^{-1} \quad (H.4)$$

Masse molaire (Riazi et Daubert, 1980)

$$M = 204.38T_b^{0.118} SG^{1.88} \text{Exp}(0.00218T_b) \text{Exp}(-3.07SG) \quad (H.5)$$

Nombre équivalent d'atomes de carbone (Pedersen et coll., 1988)

$$N' = \left(\frac{M + 4}{14} \right) \quad (H.6)$$

Composition PNA des fractions pétrolières (Riazi et Daubert, 1987)

$$M < 200 \quad X_p = 257 - 287.7SG + 2.876C/H \quad (H.7)$$

$$X_N = 52.641 - 0.7494X_p - 2.1811m_{RD} \quad (H.8)$$

$$C/H = 17.22 \cdot \exp(8.25 \cdot 10^{-3} T_b + 16.94SG - 6.94 \cdot 10^{-3} \cdot T_b SG) \cdot T_b^{-2.725} SG^{-6.798} \quad (H.9)$$

$$R_I = 0.02266 \cdot \exp(3.905 \cdot 10^{-4} T_b + 2.468SG - 5.704 \cdot 10^{-4} \cdot T_b SG) \cdot T_b^{-0.05721} SG^{-0.7} \quad (H.10)$$

$$M > 200 \quad X_p = 198.42 + 0.74855R_I - 19.966C/H \quad (H.11)$$

$$X_N = 59.77 - 76.1745R_I + 6.8048C/H \quad (H.12)$$

$$R_I = 2.341 \cdot 10^{-2} \exp(6.464T_b + 5.1445SG - 3.289 \cdot 10^{-4} \cdot T_b SG) \cdot T_b^{-0.407} SG^{-3.333} \quad (H.13)$$

$$C/H = 3.408 \cdot 10^{-22} \cdot \exp(4.68 \cdot 10^{-3} T_b + 103.12R_I - 0.0152 \cdot T_b R_I) \cdot T_b^{-0.789} R_I^{-21.567} \quad (H.14)$$

$$X_A = 100 - (X_p + X_N) \quad (H.15)$$

$$m_{RD} = (n_R - 1.4750)M \quad (H.16)$$

$$n_R = \sqrt{\frac{1 + 2R_I}{1 - R_I}} \quad (H.17)$$

- T_b température d'ébullition ($^{\circ}\text{R}$);
 T_C température critique ($^{\circ}\text{R}$);
 $T_{br} = T_b/T_C$ température d'ébullition réduite;
 P_C pression critique (psia);
 P_b pression à laquelle est mesurée T_b (psia);
 $P_{br} = P_b/P_C$ pression d'ébullition réduite;
 SG densité 60 $^{\circ}\text{F}/60^{\circ}\text{F}$ (Specific gravity);
 $K = T_b^{1/3}/SG$ facteur de caractérisation de WATSON;
 M masse molaire;
 N nombre équivalent d'atomes de carbone;
 n_R indice de réfraction;
 R_f refractivity intercept;