

وزارة التربية الوطنية
MINISTERE DE L'EDUCATION NATIONALE

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE
المكتبة — BIBLIOTHEQUE
Ecole Nationale Polytechnique

DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE

PROJET DE FIN D'ETUDES

SUJET

CONTRIBUTION A L'ELABORATION D'UN LOGICIEL
DE BANQUES DE DONNEES DE GENIE CHIMIQUE

Proposé par :

Mr BENIDDIR

Etudié par :

Melle Lamrani Nabila

Melle Abbas Chahrazad

Dirigé par :

Mr BENIDDIR

Promotion : Juin 1993

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التربية الوطنية
MINISTERE DE L'EDUCATION NATIONALE

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE
المكتبة - المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique
DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE

PROJET DE FIN D'ETUDES

SUJET

CONTRIBUTION A L'ELABORATION D'UN LOGICIEL
DE BANQUES DE DONNEES DE GENIE CHIMIQUE

Proposé par :

Mr BENIDDIR

Etudié par :

Melle Lamrani Nabila

Melle Abbas Chahrazad

Dirigé par :

Mr BENIDDIR

Promotion : Juin 1993

dedicaces

A mon pere

A ma mere

A ma soeur

A tout ceux qui m'ont aidée de près ou de loin dans la réalisation de ce travail

Je dedie ce modeste travail

NABILA

A mon pere

A ma mère

A mes soeurs

A mes freres

A ma belle soeur et mon beau frère

A mes nièces et neveux

A mes amies

Je dedie ce modeste travail

CHAHRAZAD

Remerciements

Nous remercions M^r BENIDDIR qui a suivi ce travail.

Nous remercions les membres de jury :

M^{lle} BENANI

M^r HADDOUM

M^r BENFEDHA

M^r BENYOUCEF

Qui nous font l'honneur de juger ce travail.

SOMMAIRE

I Introduction 1

II Apport de l'informatique dans le domaine scientifique . 2

 II.1 Généralités 2

 II.2 Notion de logiciel 3

 II.3 Exemples de logiciels 3

III Les logiciels de banques de données 12

 III.1 Notion de base de données et de banques de données 12

 III.2 Producteurs de banques de données 13

 III.3 Différents types de banques de données 14

 III.4 Réalisation d'une banque de données 16

 III.5 Les banques de données thermodynamiques 17

IV Eléments de nomographie 21

 IV.1 But de la nomographie 21

 IV.2 Abaques à points alignés 21

 IV.3 Abaques cartésiens 27

 IV.4 Les échelles 30

V Réalisation du logiciel 33

 V.1 Introduction 33

 V.2 La viscosité 34

 V.2.1 Théorie 34

 V.2.2 Présentation du problème 38

 V.2.3 Programme 43

 V.3 L'indice d'octane 45

 V.3.1 Théorie 45

 V.3.2 Présentation

 V.3.3 Programme 49

 V.4 La tension de vapeur 60

 V.4.1 Théorie 60

 V.4.2 Présentation du problème -65

 V.4.3 Programme 67

V.5 L'enthalpie de vaporisation	69
V.5.1 Théorie	69
V.5.2 Présentation du problème	71
V.5.3 Programme	72
V.5.4 Analyse dimensionnelle	73
V.6 La perte de charge	73
V.6.1 Théorie	73
V.6.2 Présentation du problème	82
V.6.3 Programme	82
VI Conclusion	84
Bibliographie	
Annexes	

I Introduction :

Le génie chimique étudie les transformations, les transports et les transferts de matière, d'énergie et de quantité de mouvement afin d'établir des lois et des corrélations utilisables lors de la conception, du dimensionnement et de l'exploitation, à l'échelle industrielle, d'appareillages dans lesquels s'effectuent les opérations chimiques.

La connaissance et l'estimation des données physico-chimiques s'avèrent fondamentales en conception, simulation et contrôle d'équipements ou d'unités de l'industrie chimique. Il apparait ainsi comme une nécessité économique croissante d'implanter sur ordinateur des systèmes de calculs de propriétés physico-chimiques pour les corps purs et les mélanges.

C'est dans cette perspective que vient s'insérer notre présente étude. Celle-ci consiste en la mise à la disposition de l'ingénieur en génie chimique, de moyens efficaces et rapides d'obtention de mesures de certaines caractéristiques essentielles et d'information concernant certains corps chimiques de manière rigoureuse et précise.

Ces moyens se présentant sous forme de banques de données associées à des programmes informatiques de détermination de propriétés chimiques.

Nous projetons de nous intéresser au :

- Calcul de la viscosité des corps purs
- Amélioration de l'indice d'octane des carburants auto
- Calcul de la tension de vapeur et de l'enthalpie de vaporisation des corps purs
- Estimation du coefficient de perte de charge dans les canalisations cylindriques.

II Apport de l'informatique dans le domaine scientifique

II.1 Généralités

Si l'histoire des inventions fourmille d'événements, plus édifiants les uns que les autres, il reste que, sans conteste, celle qui a permis à l'homme de faire un bond géant dans sa marche pour la conquête des connaissances universelles est la mise au point d'un outil de travail, qui aujourd'hui, accompagne l'homme tout au long de sa journée de travail et participe efficacement à toutes ses activités : Il s'agit de l'ordinateur.

L'avancement de la civilisation, dont la vitesse augmente de plus en plus, réclame l'utilisation d'outils soulageant le chercheur des tâches répétitives et longues, pour qu'il puisse se consacrer à la création.

L'information qui sort de l'ordinateur n'est autre que celle qui a été introduite après avoir subi des tris, des classements, des calculs (la validité des résultats obtenus est directement liée à celle des données fournies).

Ces informations pour qu'elles puissent être traitées, doivent être mises sous forme de programmes.

L'élaboration d'un programme passe d'abord par une phase d'analyse du problème à résoudre, dans laquelle nous l'exprimons sous une forme algorithmique, puis par une phase de programmation proprement dite, qui consiste à décomposer les algorithmes en une suite d'opérations élémentaires exécutables par l'ordinateur et à coder cette suite dans un langage de programmation . [1]

Parmi les grands types d'applications qui demandent des systèmes informatiques particuliers, nous distinguons : [2]

- Le travail scientifique qui nécessite des ordinateurs ayant des possibilités de calcul très perfectionnées.
- La gestion qui nécessite des capacités de stockage et de traitement d'un très grand nombre d'informations structurées en enregistrements.

- La conduite de processus qui requièrent généralement des ordinateurs ou des processeurs spécialisés dans l'acquisition de données et le contrôle en temps réel d'appareils plus ou moins complexes.

Les systèmes informatiques ne sont pas seulement les ordinateurs. Ceux ci représentent une partie, l'autre partie est l'ensemble des logiciels qui permettent le fonctionnement de l'ordinateur.

II.2 Notion de logiciel : [1]

Un logiciel est l'ensemble des programmes destinés à effectuer un traitement sur un ordinateur.

Un logiciel d'application est l'assemblage de programmes nécessaires à la résolution d'un problème donné par un ordinateur. Ces programmes sont de deux types :

- Les programmes standard (progiciels) : conçus pour une application commune à plusieurs utilisateurs.
- Les programmes spécifiques : écrits spécialement pour une application précise.

II.3 Exemples de logiciels :

Il existe de multiples logiciels commercialisés qui sont utilisés dans différents domaines. Nous pouvons citer : MATLAB, MICROSTAT, UNIFIT qui réalisent des opérations purement mathématiques, ou encore GRAPHER qui permet le tracé de courbes avec une grande précision. D'autres logiciels sont spécifiques à des structures bien définies telque : MAP et SLAM qui réalisent des simulations en gestion, SHAZAM qui est un outil très important de l'économétrie qui permet la conception de modèles prévisionnels.

Il en existe d'autres encore, à l'image du CODAS pour le dimensionnement des régulateurs en génie électrique et automatique ou bien ORCAD qui permet d'obtenir le tracé des cartes électroniques et des circuits intégrés.

Pour le calcul de structures, les logiciels utilisés sont SAP80 et SAP90.

Dans le domaine de la chimie, les logiciels s'étendent aux branches, les plus diverses, qui peuvent intéresser les chimistes physico-chimistes, biochimistes et biophysiciens sans oublier les ingénieurs en génie chimique, de même que beaucoup de physiciens. Les fonctions de ces logiciels s'étalent de la cristallographie au génie des procédés, de la simulation biomoléculaire à la physique quantique, de la cinétique chimique à l'étude des paramètres de processus industriels. [3]

Pour le génie chimique, il existe plusieurs logiciels, nous citerons :

ASPENPLUS, DESIGN II, CHEMCAD, Prosim, etc...

Ces logiciels, en plus des réalisations techniques qu'ils permettent, proposent des bases de données très développées. Dans ce qui suit, nous décrirons quelques logiciels.

II.3.1 Désign II : [4]

Chemshare est une société dont la fonction est la conception de logiciels de génie chimique. L'élaboration de ces logiciels se fait par la collaboration de spécialistes. Chemshare est spécialisée dans les opérations de simulation et d'optimisation des procédés de génie chimique.

Les logiciels conçus par cette société sont adaptés pour plusieurs systèmes tels que : IBM PC AT/370, Prime, DEC VAX, Amdahl, Apollo etc..

Et parmi ces logiciels, nous avons le DESIGN II qui est un logiciel de simulation. Il fournit des possibilités de dimensionnement avec un large choix et il utilise une banque de données regroupant 1200 composés chimiques.

Les trois grands axes que nous offre le DESIGN II sont :

- Simulation des flowsheet
- Etude des échangeurs de chaleur
- Etude des conduites

En plus de ces axes, nous avons des options telles que : Possibilités de rajout de programme FORTRAN ou de Subroutine. Ainsi que l'étude économique d'une unité.

Simulation des flowsheet :

Le simulateur peut traiter plus de 80 types d'équipements, sans limite de taille pour l'arrangement. Il permet le calcul des équilibres binaires, effectue toutes les opérations unitaires, prévoit la formation d'hydrate dans les conduites, analyse les dépressions (pas de limite dans les débits), il permet le calcul des propriétés physiques de transport, de plus, cette simulation du flowsheet est suivi de son optimisation. Il est possible aussi à l'utilisateur d'introduire ses propres programmes mais écrits en FORTRAN.

L'application de ces fonctions est retrouvée dans le dimensionnement et l'optimisation des unités ainsi que dans l'optimisation des énergies utilisées.

Ce type de simulateur peut être utilisé dans différentes industries telles que les industries pétrochimique, pharmaceutique, agrochimique et parachimique.

Etude des échangeurs de chaleur :

Cette partie du logiciel réalise l'étude du régime dans un échangeur, elle permet de donner toutes les caractéristiques de l'échangeur et une large sélection de matériaux de construction est offerte.

Cette étude peut porter sur des échangeurs en série ou en parallèle, Et elle nous donne les profils de quantité de chaleur et de température .

Ces possibilités sont appliquées dans l'évaluation de la performance d'un échangeur, dans l'optimisation du temps de lavage etc...

Etude des conduites :

U'étude est valable pour n'importe quelle conduite dans notre flowsheet, il suffit de rajouter quelques commandes supplémentaires pour chaque cas. Les possibilités offertes sont

- Calcul de pression (pour 2 phases en presence)
- Calcul de modèles intégrés

- Calcul de diamètres
- Détermination des phases et calcul des propriétés dans un réseau maillé.
- Etude de transfert de chaleur (Environnement-équipement)
- Les données de sortie sont tabulées ou sous forme de graphes.

Ce type d'étude est nécessaire dans les stations de forage et dans les stations de distribution du gaz.

Les options que nous offre le DESIGN II sont : une certaine accessibilité au logiciel par la possibilité de rajout de nos propres programmes (écrits en FORTRAN) qui peuvent être des modifications du logiciels ou des compléments pour certaines parties et ce en utilisant certains mots clés.

Il permet aussi de faire l'étude économique d'une unité, mais pas de manière rigoureuse, car il réalise l'optimisation des coûts seulement.

II.3.2 UNICHEM : [5]

UNICHEM est un logiciel pour les études et les recherches en chimie fine; il permet aux chercheurs d'étudier des systèmes chimiques complexes de façon détaillée. UNICHEM permet de modéliser des systèmes moléculaires complexes, tels que molécules de médicaments, protéines, produits agrochimiques, polymères, catalyseurs; substances de technologie de pointe dans les industries chimiques, pétrolière, automobile, électronique et aérospatiale. La première édition d'UNICHEM est destinée aux calculs de mécanique quantique moléculaire, qui constituent la base de toutes les simulations détaillées des sciences des molécules et des matières.

Le logiciel UNICHEM comprend deux composantes essentielles :

- Une série intégrée de programmes de mécanique quantique moléculaire de haute performance qui donnent différents niveaux de précision chimique et sont basés sur des méthodes semi-empiriques, des fonctions de densité et des méthodes élémentaires;
- Une interface utilisateur graphique perfectionnée et à manipulation directe.

II.3.3 ASPEN-PLUS [6]

ASPEN-PLUS est un outil que les ingénieurs utilisent dans toute modélisation d'un procédé qui est le siège d'une circulation continue de flux de matière et d'énergie d'une unité de développement à une autre .

Les domaines d'application du logiciel s'étendent de la pétrochimie à la biotechnologie.

Ce logiciel est exploité par des sociétés d'engineering, il permet de faire la simulation et l'étude économique d'un procédé industriel.

Pour les opérations techniques qu'il réalise, il manipule une banque de données très riche et basée sur un système de calcul de propriétés physiques.

Lors de la création d'une unité, les modèles de flow-sheet qu'il propose sont utilisés pendant toutes les étapes du procédé :

- le développement
- le dimensionnement
- l'ordonnancement des opérations.

L'application des modèles nécessite la connaissance d'informations normalisées du procédé. Et l'aboutissement est une complète représentation des performances des installations dans laquelle figurent les compositions, les flux et les propriétés de tous les produits (finis et intermédiaires).

Pendant le dimensionnement du procédé, le modèle d'ASPEN-PLUS utilisé, peut être adopté si des informations suffisantes sur le procédé sont obtenues. Ainsi une étude économique préliminaire est possible et ceci nous permettra de voir l'impact des changements technologiques du procédé sur le côté économique.

Tandis que pour le dimensionnement du procédé, nous pouvons utiliser les modèles proposés par ce logiciel pour examiner la flexibilité des installations en cas de remaniement des stocks d'alimentation.

Pour une unité existante déjà, les modèles d'ASPEN-PLUS représentent des outils efficaces pour les ingénieurs de l'unité dans le perfectionnement des opérations et la réduction des utilisations en énergie. De plus ils peuvent être utilisés pour déterminer :

- les changements, à apporter aux conditions opératoires, adéquats aux variations subies par les stocks d'alimentation;
- Les changements en besoin de production
- les changements dans les conditions environnantes.

II.3.4 ProSim [7]

ProSim est constitué d'une part d'un programme conversationnel ProPhy qui permet de calculer les propriétés thermodynamiques des corps purs et des mélanges ainsi que leurs propriétés de transfert et d'autre part du simulateur ProSim proprement dit et d'un logiciel Gest 17 qui est utilitaire de gestion de la base de données privée dont les constituants sont accessibles à ProPhy et à ProSim.

II.3.4.1 ProPhy :

Le logiciel ProPhy calcule les propriétés thermodynamiques et les propriétés de transfert des corps purs et des mélanges ainsi que les équilibres entre phases.

II.3.4.1.a Présentation générale de Prophy

a.1 Modèles thermodynamiques pour le calcul des équilibres liq-Vap :

L'utilisation de l'ordinateur pour la simulation et la conception de procédés chimiques impose d'avoir des expressions analytiques permettant d'accéder aux variables d'état thermodynamiques les plus importantes et aux variables de transfert (viscosité, conductivité thermique et coefficient de diffusion).

Un problème important en génie chimique réside dans le calcul des équilibres liq-Vap et des enthalpies pour les systèmes multiconstituants.

Un système de calcul efficace n'est capable de donner des résultats fiables que si des modèles appropriés sont disponibles. Ainsi un système avancé doit-il pouvoir offrir de nombreuses méthodes d'estimation, et plus encore être à même d'intégrer facilement de nouvelles méthodes.

Ces méthodes reposent sur des modèles thermodynamiques dont le choix doit être principalement dicté par le souci de rigueur, de fiabilité et de validité pour le nombre maximum de corps purs et des mélanges.

a.1.1 Traitement par équation d'état

Le jeu des équations d'état retenues, à savoir, Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson et Lee-Kesler avec les règles de mélanges de Plocker a été sélectionné selon les critères suivants: fiabilité, efficacité en terme de mise en oeuvre sur ordinateur, généralisation, validité pour le nombre maximum de corps purs et de mélanges et facilité d'obtention des différents paramètres nécessaires à leur application tant au niveau des données relatives aux corps purs que des paramètres d'interaction binaire.

a.1.2 Traitement classique :

Il apparait donc pour le calcul des équilibres liquide-vapeur deux méthodes distinctes : les expressions analytiques pour déterminer les constantes d'équilibre et les enthalpies avec les modèles disponibles.

Le choix du modèle thermodynamique de type traitement par équation d'état montre qu'il est nécessaire de préciser uniquement l'équation d'état applicable dans toute la zone fluide, soit les options SRR, PR ou LKL (Annexe2). Le choix du modèle traitement classique quant à lui nécessite de définir au niveau de chaque Branche (P°_i , γ°_i , ϕ_i et $F^{\circ L}_i$) l'option retenue; l'information étant alors suffisante pour fixer un chemin de calcul unique.

a.2 Structure générale du système

a.2.1 Bibliothèque thermo

Cette bibliothèque thermo contient l'ensemble des sous-programmes de calcul des propriétés physico-chimiques et des équilibres entre phases et sont écrits en FORTRAN 77. Ils sont de quatre types :

- Sous-programmes superviseurs
- Sous-programmes de calcul d'une propriété suivant un modèle donné.
- Sous-programmes d'initialisation
- Sous-programmes de méthodes numériques.

a.2.2 Base de données :

Partie importante du système, sert de répertoire de données des corps purs; chaque corps étant repéré par son nom et un numéro d'identification

Les données peuvent être subdivisées en deux catégories :

- Les propriétés fondamentales (poids moléculaire, coordonnées critiques,...)
- Les paramètres et intervalles de validité des corrélations de propriétés telles que : Chaleur spécifique, tension de vapeur, etc...

a.2.3 Fichier de résultats :

A la demande de l'utilisateur, les résultats d'un calcul peuvent être stockés dans un fichier. Lorsque l'exécution est terminée, l'utilisateur peut faire imprimer tous les résultats des calculs qu'il a effectués.

II.3.4.2 ProSim

ProSim est un logiciel de simulation des procédés continus de l'industrie chimique et parachimique.

Cet ensemble de programmes effectue le calcul des bilans matière et énergie pour des procédés très variés : il a été conçu pour permettre des extensions importantes sans nuire à sa facilité d'utilisation.

ProSim se caractérise par un langage d'entrée simple adaptable à l'utilisateur. des modules utilisateurs en FORTRAN et une organisation autour de bases de données qui confèrent au système une très grande souplesse.

Outre les possibilités offertes par les simulateurs traditionnels, ProSim permet le traitement simultané des boucles de recyclage et des contraintes.

II.3.4.2.a Architecture du système

Les différents logiciels ProSim utilisent une même bibliothèque de sous-programmes écrits en FORTRAN 77, et désignée par "Bibliothèque ProSim".

Les données de base sur les propriétés des corps purs sont réunies dans un fichier à accès direct.

Ces données peuvent être complétées (ou remplacées) pour certains constituants par les données personnelles de l'utilisateur par l'intermédiaire d'un fichier privé de données sur les corps purs. Pour le simulateur proprement dit, un fichier de données de base du simulateur, encore appelé "Base Sim" contient en particulier l'ensemble des mots clés et des valeurs par défaut pour le simulateur, ce fichier est du type "accès direct".

En cours d'exécution, une sauvegarde de l'ensemble des informations est effectuée sur un fichier structuré à accès direct qui permet d'échanger les informations nécessaires aux différentes parties du logiciel ou de redémarrer un calcul en utilisant les résultats d'une simulation précédente.

II.3.4.2.b Les modules du génie chimique.

ProSim simule tout procédé faisant appel à un échange d'énergie ou de matière, ainsi que tous les appareils classiques rencontrés dans le domaine du génie-chimique :

- colonne diphasique Liq-Vap
- Absorbeur-rebouilleur
- Stripper (condenseur partiel et condenseur total)
- Pompe, turbine, réacteur, etc...

Et à côté de ces simulations classiques, il traite les recyclages et les contraintes :

- Courants standard
- Alimentation

II.3.5 Comparaison

Parmi les trois logiciels de simulation précités (DESIGN II, ASPEN-PLUS et ProSim), ASPEN-PLUS touche à tout type d'industrie mettant en jeu des transferts de chaleur ou de matière, allant de la pétrochimie jusqu'à l'agroalimentaire, la pharmacologie et

autres; tandis que DESIGN II et ProSim ne couvrent que le domaine du génie-chimique. De plus ASPEN-PLUS réalise des études économiques rigoureuses par rapport aux deux autres logiciels qui n'offrent qu'un calcul de coût avec une optimisation de celui-ci.

Pour les langages utilisés par ces logiciels, bien que différents dans la forme, ils ont été tous conçus sur la base de deux critères essentiels :

- Simplicité : Cette notion détermine la facilité d'apprentissage

- Souplesse : renvoie à la notion de généralité qui dépend étroitement du créneau visé par le langage.

ASPEN-PLUS et DESIGN II offrent la possibilité d'extension et ce en permettant à l'utilisateur d'introduire ses propres sous-routines (sous-programmes écrits en FORTRAN) pour compléter ou modifier certaines parties du logiciel.

De son côté ProSim permet à l'utilisateur de compléter (ou de remplacer) les données de certains constituants par l'intermédiaire d'un fichier privé créé à sa demande.

En ce qui concerne les systèmes de calcul, sur lesquels sont basés ces logiciels, ils reposent sur les mêmes modèles thermodynamiques.

Toutefois, ASPEN-PLUS offre plus de possibilités de calcul. Le choix du modèle étant toujours dicté par un souci de rigueur, de fiabilité et de validité pour un nombre maximum de corps purs et de mélanges, plus le système de calcul est riche en modèles et plus la base de données est performante et permet ainsi de réaliser une large gamme d'opérations techniques.

III Les banques de données

III.1 Notion de base de données et de banque de données :

Une banque de données est un ensemble d'informations, généralement structuré en bases de données et recouvrant un domaine particulier des connaissances.

Une base de données est un ensemble d'informations exhaustives

nécessaires à une série d'applications automatisées et connues par un système logiciel qui en assure la gestion. [1]

Ainsi une banque de données peut être considérée comme un ensemble de bases de données relatives à un domaine définie. Chaque base de données traite de certaines informations de manière plus rigoureuse et approfondie.

III.2 Producteurs de banques de données :

L'importance du coût de réalisation de banques de données (ressources humaines et matérielles, coût d'investissement et de fonctionnement) exige, de plus en plus fréquemment, un effort collectif. C'est le cas pour les banques de données issues d'organismes qui ont déjà cette fonction coopérative : INIS produite par l'Agence Internationale de l'Energie Atomique rassemblant 62 pays. Agris produite par la Food and Agricultural Organisation (FAO), issue d'une centaine d'organismes de recherche agronomique dans le monde.

De même, dans le cas du développement des banques de données issues des laboratoires universitaires, la coproduction est une condition indispensable à une réelle utilisation des données : coopération international pour Thermodata (propriétés thermodynamiques en chimie minérale).

Même dans le cas de banques de données sous la responsabilité d'un seul producteur, la coopération nationale et internationale est maintenant très fréquente. Par exemple, la banque de données PASCAL de l'institut de l'information scientifique et technique du CNRS (centre National de Recherche Scientifique) fait intervenir 37 autres organismes de recherche (25 Français et 12 étrangers) pour la coproduction en particulier dans les domaines des sciences de la terre, du bâtiment, des travaux publics et de l'agronomie, etc [8].

Mais ce qui reste dans la possibilité de chacun, c'est la réalisation de modestes banques de données dont le domaine d'utilisation est bien sûr restreint, par exemple un grand nombre de chimistes organiciens, en particuliers ceux qui s'intéressent à la synthèse poursuivent la mise à jour de leurs connaissances au moyen de fichiers personnels qui prennent mieux en compte

leurs préoccupations particulières et ce en utilisant un micro-ordinateur et un logiciel courants où la saisie des données est rapide.

Le principe de ce système consiste à classer les fiches concernant les produits et leurs structures, ainsi que les concepts concernant les mécanismes réactionnels en utilisant des mots clés . [9]

III.3 Différents types de banques de données [10]

Nous pouvons classer les banques de données d'après le type d'informations qu'elles contiennent; information qui est, ou non directement exploitable.

III.3.a Banques de données bibliographiques :

Elles signalent les documents primaires (article de périodique, brevet, norme, ouvrage, rapport, thèse, etc...) et fournissent les références de ces documents accompagnés d'éléments d'indexation (descripteurs) et éventuellement d'analyse (résumé).

Elles correspondent fréquemment aux grandes bibliographies scientifiques. Sur ce type de banques, il est possible de faire des recherches rétrospectives d'information, de suivre l'évolution d'une question au fur et à mesure de la parution de nouvelles publications s'y rapportant, ou encore de trouver tous les travaux d'un auteur, postérieurs à l'une de ses publications, en repérant toutes les publications qui citent ce travail.

Exemples de banques de données bibliographiques : PASCAL (sciences et techniques), CA SEARCH (chimie)

III.3.b Banques de données texte intégral :

Ces banques de données contiennent le texte complet d'un article, d'un discours, d'un texte législatif. Les capacités croissantes des matériels modernes entraînent un développement important de ce type de banques surtout dans les domaines juridiques, politiques et de la presse.

Exemples de ces banques :

- domaine politique : LOGOS- déclaration
- domaine juridique : LEXIS

III.3.c Banques de données numériques :

Les données numériques stockées dans ces banques concernent souvent des propriétés physiques caractéristiques de matériaux ou de produits ainsi que des données économiques ou financières.

• Propriétés physiques :

Il s'agit, par exemple de caractéristiques thermodynamiques ou spectroscopiques de composés ou de mélanges de composés chimiques.

Ces données peuvent être directement valorisées grâce à des logiciels de traitement de données permettant par exemple :

- La conception ou la synthèse assistée par ordinateur
- La prévision de propriétés chimiques et physiques de produits nouveaux
- La Détermination de structures à partir de résultats d'expériences
- L'aide à la décision

Parmi les banques de ce type, nous pouvons citer :

- ThermodATA : Chimie minérale sèche (INP, Grenoble FRANCE)
- PPDS : Composés pétrochimiques (Institute of Chemical Engineers, Rugby, GB)
- C13 NMR : spectres RMN (BASF, RFA)

• Séries économiques :

L'intérêt de ces données numériques se trouve accrue par l'existence de logiciels de traitement de données, conduisant par exemple à :

- des prévisions
- des utilisations et des constructions de modèles
- des calculs de moyennes
- des lissages de courbes,...

De très nombreux exemples de banques, de cette nature, existent parmi lesquels nous citons :

- EN FRANCE : CHELEM du centre d'Etudes Prospectives et d'Informations Internationales.
- En Europe : l'ensemble des vingt-cinq banques CRONOS de l'office statistique des communautés Européennes.

III.4 Réalisation d'une banque de données : [10]

La réalisation d'une banque de donnée se base sur plusieurs opérations qui sont nécessaires à l'intégration des données dans la banque.

Trois étapes successives s'enchainent dans l'ordre suivant : Structuration, saisie et validation des données.

III.4.a Structuration des données :

Cette première étape est primordiale car elle conditionne l'ensemble des possibilités et des performances de la banque de données. Elle doit être adaptée au type de produits et de services attendus de la banque.

Nous déterminons ainsi la liste des éléments d'informations que nous désirons voir figurer dans la banque de données, leur nature, leur formulation ainsi que les relations existant entre ces informations.

III.4.b Saisie des données :

La saisie est le moyen de passer de l'information sous sa forme traditionnelle papier à une forme assimilable par l'ordinateur. Différents modes sont possibles.

Exemple :

- Saisie en mode différé : L'information est retranscrite sur des bordereaux où les données sont structurées en différentes zones. Ces bordereaux sont saisis sur un terminal qui génère un support directement lisible par ordinateur (cartes perforées, bandes magnétiques,...).

III.4.c- Validation des données :

Cette tâche conditionne directement la qualité du service offert par la banque de données; nous pouvons distinguer deux niveaux de validation :

- Avant saisie : la validation effectuée manuellement consiste à vérifier que les informations entrées dans la banque sont fiables et cohérents. Cette opération est essentielle pour les banques de données factuelles et tout particulièrement pour les banques numériques.

- Après saisie : Ces contrôles sont effectués automatiquement par l'ordinateur pour vérifier la forme de l'information, l'emplacement des données, la longueur des zones, l'appartenance des mots-clés à une liste déterminée etc...

Ce qui intéressent les ingénieurs et les chercheurs en géniechimique, ce sont les banques de données numériques. Parmi les branches qui sont le plus touchées par l'informatique, nous avons la thermodynamique. Ainsi nous avons vu naître beaucoup de banques de données relatives à cette branche. Dans ce qui suit, nous décrirons quelques unes de ces banques de données.

III.5 Les banques de données thermodynamiques : [11]

En thermodynamique, les notions de banques et de bases de données diffèrent de ce que nous avons explicité précédemment (III.1). Ainsi nous trouvons que les bases de données sont les banques de références bibliographiques qui contiennent les signalements, les indexations et parfois les résumés des articles et des ouvrages publiés.

Tandis que les banques de données sont des fichiers constitués de données expérimentales, calculées ou extraites de publications. Elles permettent donc d'avoir un accès rapide à un grand nombre de valeurs numériques ou factuelles et, grâce à différents logiciels et méthodes de calcul, de traiter ces données.

La thermodynamique, science des transformations, permet de décrire ou de prévoir les évolutions d'une propriété d'une substance ou d'un ensemble de substances (système en équilibre, mélange, etc,...) en fonction des facteurs physiques (température, pression, etc.) et des proportions des constituants dans le mélange.

Plutôt que d'accumuler des tableaux de valeurs numériques, comme on le fait dans les ouvrages encyclopédiques, il est plus efficace, dans une banque de données, de stocker une valeur particulière (état standard par exemple) d'une fonction thermodynamique, ainsi que les paramètres de l'équation décrivant les variations de cette fonction.

Il sera ainsi possible de calculer la grandeur thermodynamique, ou la propriété physico-chimique dans différentes conditions, voire de reconstituer des tableaux de valeur, et de l'évaluer dans des conditions difficiles à obtenir expérimentalement. (L'existence de relations thermodynamiques permet de ne stocker que les données essentielles au calcul de toutes les propriétés).

Il est également possible de faire des prévisions de propriétés pour de nouvelles substances, avant même de les synthétiser, en réalisant des corrélations entre données numériques et structures chimiques de composés voisins, ou bien en sommant les valeurs des constituants élémentaires (atomes, liaisons, groupes fonctionnels) et en introduisant des facteurs de correction pour tenir compte des interactions dans la molécule.

En principe, toutes les propriétés thermodynamiques peuvent être calculées à partir des propriétés moléculaires en utilisant les méthodes de la thermodynamique statistique ou à partir des équations d'état, mais en réalité, les ingénieurs utilisent pour leurs applications des équations semi-empiriques. C'est pourquoi une banque de données doit être associée à une bibliothèque de programmes (logiciels) qui propose, au choix de l'utilisateur, diverses méthodes pour calculer chaque propriété ainsi que pour déterminer le comportement d'un mélange à l'équilibre à partir des propriétés thermodynamiques de ses constituants.

Les banques de données sont ainsi des outils de plus en plus utilisés pour prévoir le comportement de systèmes complexes à partir d'extrapolations raisonnables de données fiables, obtenues pour des substances pures et des systèmes simples : mélanges binaires ou ternaires de substances organiques, alliages, optimisation de procédés de séparation, prévision de réactivité, etc...

III.5 a- Exemples de bases de données bibliographiques

III.5.a.1- bases de données spécialisées en thermodynamique

- Fichier THERMODOC

Cette base de données fait partie du système d'information THERMODATA sur les composés minéraux, particulièrement ceux de la métallurgie

- Fichier DETHERM-SDR

Ce fichier est le module bibliographique du système DETHERM

III.5.a.2 Bases de données signalant des travaux en thermodynamique

- Base PASCAL

Elle comprend plus de sept millions de références dans toutes les disciplines des sciences exactes

III.5.b Exemples de banques de données factuelles et numériques

Dans cette catégorie, nous avons plusieurs types de banques de données.

Elles diffèrent par leurs méthodes d'accès, par le type de service qu'elles offrent etc... Nous citons ci-dessous quelques unes de ces banques de données.

III.5.b.1 Banques de données accessibles par réseau télématique

- DIPPR : Cette banque de données contient les propriétés thermodynamiques des 1000 corps purs les plus importants sur le plan commercial. Les données proposées ont été extraites de la littérature puis sélectionnées et évaluées.

En plus des propriétés indépendantes de la température qu'elle met à notre disposition, des équations de calcul des propriétés dépendant de la température, avec leurs paramètres et leurs domaines de validité, sont incluses dans la banque.

III.5.b.2 Banques de données associées à des logiciels d'évaluation des grandeurs thermodynamiques.

Le nombre restreint des substances rassemblées en collection, pour lesquelles il a été possible de retrouver et valider les valeurs numériques de la plupart des propriétés physico-chimiques et thermodynamiques, a conduit les chercheurs à développer des méthodes de calcul et d'évaluation. Ces méthodes sont mises en oeuvre par des logiciels pour l'exploitation sur des micro-ordinateurs.

Parmi ces banques de données, nous avons :

- ProSim : Ce système, développé par l'Institut de Génie

chimique (IGC) de Toulouse, comporte :

- Une banque de données thermodynamiques de 468 corps purs
- Un ensemble de sous-programmes de calcul des propriétés des fluides.

- Un ensemble de sous-programmes de calcul d'équilibres de phases, d'équilibre liquide-vapeur et de systèmes multicomposants. Ce système s'inscrit dans la modélisation du comportement des réacteurs chimiques développée par l'IGC.

- CALSEP : c'est un programme de simulation de procédures de caractérisation et de modélisation thermodynamiques, pour les gaz légers et les huiles lourdes, développé par CALSEP A/S et Technical University of Denmark

Le système se compose de deux modules :

- SEPSIM : banque de données de 400 composés pétrochimiques et de programmes, basés sur les méthodes UNIFAC, UNICA et OILCAL, pour le calcul des grandeurs dépendant du volume de la pression et de la température.

- STATPACK : programmes de Détermination des conditions critiques de diverses applications

IV Elements de nomographie

IV.1 But de la nomographie . [12]

Au cours des applications pratiques, il arrive souvent que nous ayons à résoudre des équations de la forme : $F(x,y,z) = 0$ (1)
La résolution d'un tel problème est souvent fastidieuse et compliquée. Le technicien se contente souvent de valeurs approchées. Les mathématiciens, pour soulager l'utilisateur de ces calculs trop longs, ont indiqué une méthode qui donne, certes avec une précision limitée, mais rapidement la solution de certains problèmes. La méthode est graphique, la figure géométrique qui permet de résoudre le problème, s'appelle : un nomogramme (ou abaque).

Dans ce qui suit, nous allons étudier deux types de nomogrammes les abaques à points alignés et les abaques cartésiens.

IV.2 Abaques à points alignés . [12]

Un abaque à points alignés se compose de trois échelles. Ces trois échelles sont construites de façon que pour chaque ensemble de trois valeurs situées sur une même droite, l'équation (1) est vérifiée (Fig. IV.2.1)

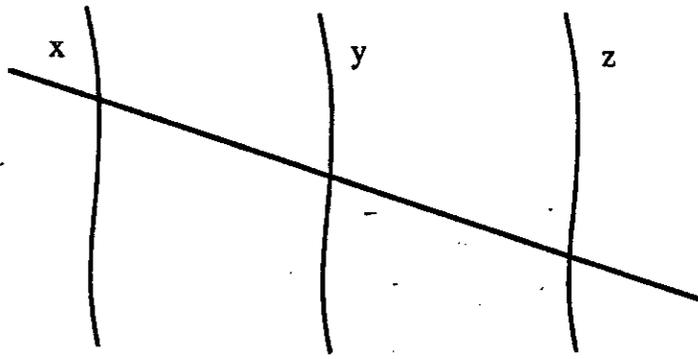


Fig. IV.2.1 : Abaque à points alignés

IV.2.a Nomogramme de $F(x, y, z) = \phi_3(z) = \phi_1(x) \cdot \phi_2(y) = 0$

Il est considéré comme un nomogramme de multiplication.

Il est constitué de deux droites rectilignes et d'une droite oblique (Fig. IV.2.a.1)

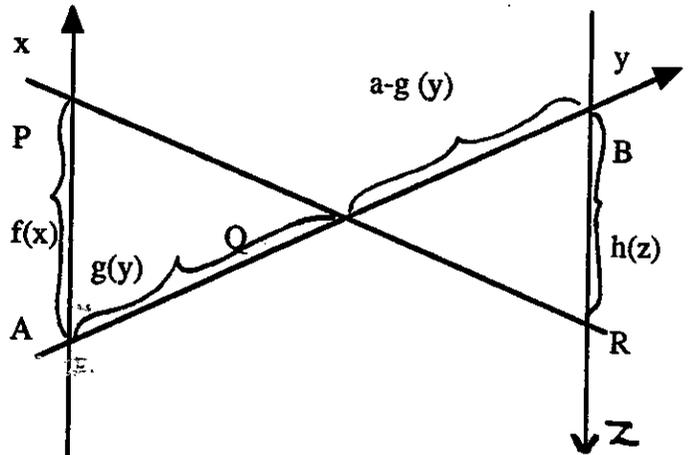


Fig. IV.2a.1 : Nomogramme de multiplication

$$\overline{AB} = a$$

La similitude des triangles APQ et BRQ donne :-

$$\frac{\overline{AP}}{\overline{AQ}} = \frac{\overline{BR}}{\overline{BQ}} \Leftrightarrow \frac{f(x)}{g(y)} = \frac{h(z)}{a-g(y)}$$

$$\text{d'où } h(z) = f(x) \cdot \frac{a-g(y)}{g(y)} \quad (2)$$

nous déduisons ainsi :

$$h(z) = \phi_3(z) ; g(y) = a \cdot \frac{1}{1 + \phi_2(y)}$$

$$f(x) = \phi_1(x)$$

h, g, f représentent les équations des graduations. Ainsi si nous connaissons la fonction $F(x, y, z)$, nous déduisons ces équations. Un nomogramme de multiplication peut devenir un nomogramme d'addition:

Si nous passons au logarithme :

$$\begin{aligned} \text{Log} [\phi_3(z)] &= \text{Log} [\phi_1(x) \cdot \phi_2(y)] \\ &= \text{Log} [\phi_1(x)] + \text{Log} [\phi_2(y)] \end{aligned}$$

en posant $\omega_1 = \text{Log} \phi_1$ nous aurons : $\omega_3(z) = \omega_1(x) + \omega_2(y)$

IV.2.b Nomogramme de $F(x, y, z) = \phi_3(z) - \phi_1(x) - \phi_2(y) = 0$

C'est un nomogramme d'addition. Il est constitué de trois échelles rectilignes (Fig. IV.2.b.1)

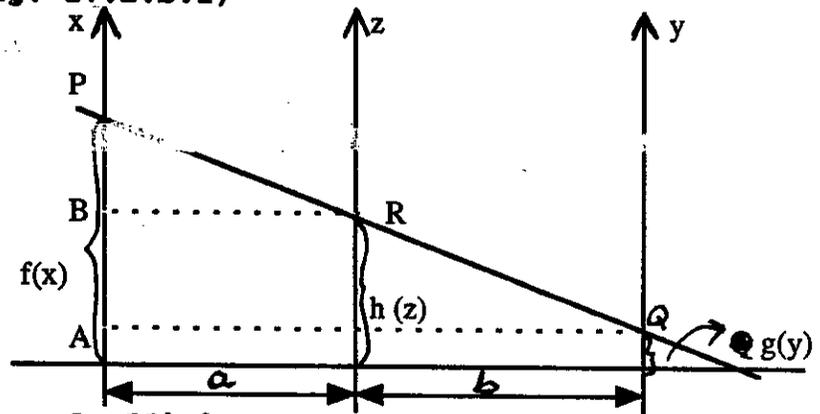


Fig. IV.2.b.1 : Nomogramme d'addition

Les triangles PBR et PAQ sont semblables parce que leurs côtés sont proportionnels d'où :

$$\frac{f(x) - h(z)}{a} = \frac{f(x) - g(y)}{a+b} \Rightarrow h(z) = \left(1 - \frac{a}{a+b}\right) f(x) + \frac{a}{a+b} g(y) \quad (3)$$

Qui est de la même forme que :

$$\phi_3(z) = \phi_1(x) + \phi_2(y)$$

$$\phi_1(x) = (1 - \lambda) f(x); \phi_2(y) = \lambda g(y); \phi_3(z) = h(z)$$

avec $a/b = \lambda$ ($\lambda < 1$)

IV.2.c Nomogramme de $\phi_1(x) \cdot \phi_2(z) + \phi_3(y) \cdot \omega(z) = 1$

Ce type d'abaque se rencontre souvent dans les applications pratiques de la chimie.

Le nomogramme comporte deux échelles rectilignes et une échelle courbe (Fig. IV.2.c.1)

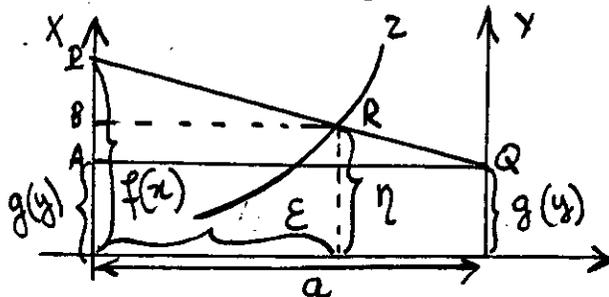


Fig. IV.2.c.1 : Nomogramme de $\phi_1(x) \cdot \phi_2(z) + \phi_3(y) \cdot \omega(z) = 1$

Supposons que :

$$\varepsilon = h(z) ; \eta = H(z)$$

La similitude des triangles APQ et BPR nous permet d'écrire :

$$\frac{f(x) - g(y)}{a} = \frac{f(x) - \eta}{\varepsilon} \Rightarrow \frac{f(x) - g(y)}{a} = \frac{f(x) - H(z)}{h(z)}$$

nous pouvons aussi écrire aussi : $f(x) \cdot \left[\frac{1}{a} - \frac{1}{h(z)} \right] - \frac{g(y)}{a} = \frac{-H(z)}{h(z)}$

en divisant par :

$$\left(- \frac{H(z)}{h(z)} \right)$$

nous obtenons :

$$f(x) \cdot \left[\frac{1}{H(z)} - \frac{h(z)}{a \cdot H(z)} \right] + g(y) \cdot \frac{h(z)}{a \cdot H(z)} = 1 \quad (4)$$

$$\phi_1 = f$$

$$\phi_2 = g \text{ d'où } \phi_3(z) = \frac{1}{H(z)} - \frac{h(z)}{a \cdot H(z)} = \frac{a - h(z)}{a \cdot H(z)}$$

$$\omega(z) = \frac{h(z)}{a \cdot H(z)}$$

Nous pouvons aussi déterminer à partir des équations trouvées le système d'équations paramétriques de l'échelle courbe :

$$\varepsilon = h(z) = \frac{a \omega(z)}{\phi_3(z) + \omega(z)}$$

$$\eta = \underline{H}(z) = \frac{1}{\phi_3(z) + \omega(z)}$$

IV.2.d Nomogramme de la relation fonctionnelle $\phi_3(z) = \frac{\phi_1(x) + \phi_2(y)}{\omega_1(x) + \omega_2(y)}$

Classe de fonctions représentables par des nomogrammes constitués par une échelle rectiligne et deux échelles courbes. (Fig. IV.2.d.1)

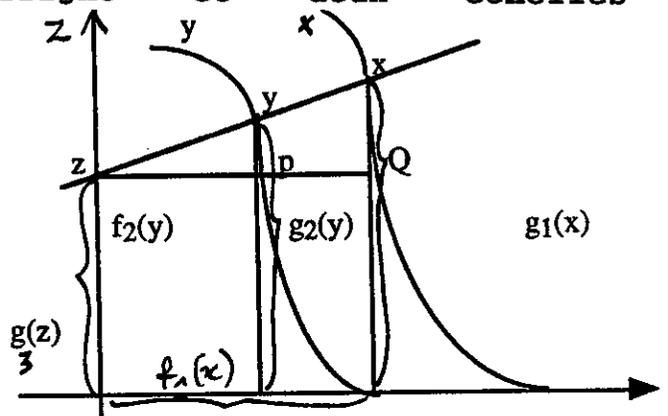


Fig IV.2.d.1 : Nomogramme de

$$\phi_3(z) = \frac{\phi_1(x) + \phi_2(y)}{\omega_1(x) + \omega_2(y)}$$

Représentations paramétriques :

$$\varepsilon_x = f_1; \eta_x = g_1$$

$$\varepsilon_y = f_2; \eta_y = g_2$$

Les triangles QZX et PZY sont semblables ce qui nous permet d'écrire :

$$\frac{f_1(x)}{g_1(x) - g_3(z)} = -\frac{f_2(y)}{g_2(y) - g_3(z)} \Rightarrow g_3(z) = \frac{f_1(x) \cdot g_2(y) - f_2(y) \cdot g_1(x)}{f_1(x) - f_2(y)}$$

$$g_3(z) = \frac{\frac{g_2(y)}{f_2(y)} - \frac{g_1(x)}{f_1(x)}}{\frac{1}{f_2(y)} - \frac{1}{f_1(x)}} \quad (5)$$

Ainsi nous avons :

$$\phi_1(x) = \frac{-g_1(x)}{f_1(x)} ; \phi_2(y) = \frac{g_2(y)}{f_2(y)}$$

$$\omega_1(x) = -\frac{1}{f_1(x)} ; \omega_2(y) = \frac{1}{f_2(y)}$$

$$g_3(z) = \phi_3(z)$$

IV.2.e Nomogramme de

$$\frac{\omega_1(x) + \omega_2(y)}{\phi_1(x) + \phi_2(y)} = \frac{\omega_1(x) + \omega_3(z)}{\phi_1(x) + \phi_3(z)}$$

Le cas le plus général : il ya 3 échelles courbes. (Fig.IV.2.e.1)

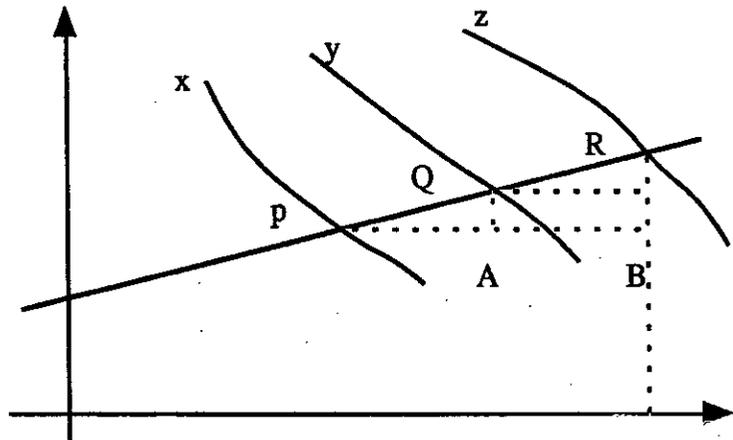


Fig IV.2.e.1 : Nomogramme de

$$\frac{\omega_1(x) + \omega_2(y)}{\phi_1(x) + \phi_2(y)} = \frac{\omega_1(x) + \omega_3(z)}{\phi_1(x) + \phi_3(z)}$$

$$\overline{PA} = f_2(y) - f_1(x)$$

$$\overline{PB} = f_3(z) - f_1(x)$$

$$\overline{AQ} = g_2(y) - g_1(x)$$

$$\overline{BR} = g_3(z) - g_1(x)$$

La similitude des triangles APQ et BPR nous permet d'écrire

$$\frac{f_2(y) - f_1(x)}{g_2(y) - g_1(x)} = \frac{f_3(z) - f_1(x)}{g_3(z) - g_1(x)} \quad (6) \text{ d'où } \omega_1(x) = -\frac{1}{f_1(x)} ; \phi_1(x) = -\frac{g_1(x)}{f_1(x)}$$

$$\omega_2(y) = \frac{1}{f_2(y)} ; \phi_2(y) = \frac{g_2(y)}{f_2(y)}$$

$$\omega_3(z) = \frac{1}{f_3(z)} ; \phi_3(z) = \frac{g_3(z)}{f_3(z)}$$

IV.3 Abaques cartésiens [12,13]

L'abaque cartésien se compose de trois faisceaux de courbes. A chaque courbe d'un faisceau correspond un nombre. Chaque faisceau représente les différentes valeurs d'une variable.

Lorsque les trois valeurs vérifient l'équation (1), les courbes correspondant à ces valeurs se rencontrent en un même point du plan.

Un inconvénient fréquent des abaques cartésiens provient de la difficulté de l'oeil de fixer un certain point, d'autant plus que des confusions peuvent se produire dans les faisceaux très resserrés.

D'autre part, les causes d'erreur sont assez grandes dans les interpolations à vue, souvent triples (elles se présentent dans la lecture des valeurs intermédiaires).

Pourtant les abaques cartésiens ont un grand avantage : si nous ne pouvons représenter avec les abaques à points alignés qu'une classe relativement restreinte de fonctions, nous pouvons toujours représenter graphiquement une relation de la forme de l'équation (1) au moyen d'un abaque cartésien.

Pour le montrer, donnons à une variable une valeur fixe : z_1, z_2, z_n .

A toute valeur z_x , correspond la fonction $F(x, y, z_x) = 0$. Si nous représentons graphiquement ces fonctions dans un système de coordonnées rectangulaires ou obliques, nous traçons un faisceau de courbes : à chaque courbe de ce faisceau correspond une valeur $z_1, z_2 \longrightarrow z_n$. Les deux autres faisceaux sont des droites parallèles aux axes de coordonnées : (Fig. IV.3.a)

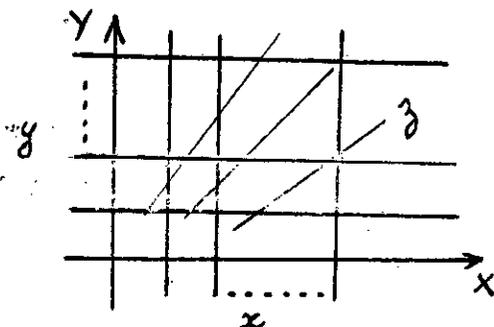


Fig. IV.3.a : Abaque cartésien

IV.3.1 Abaques cartésiens superposés.

Nous donnerons ci-dessous deux exemples d'abaques cartésiens superposés.

IV.3.1.1 Exemple d'abaques cartésiens superposés à trois variables

Nous voulons représenter les deux formules suivantes par un même abaque :

$$P = a \cdot \frac{d^3}{r} \quad a = \text{cste}$$

et

$$f = b \cdot \frac{r^2}{d} \quad b = \text{cste}$$

et ceci dans les limites : $r_0 < r < r_{\infty}$ et $d_0 < d < d_{\infty}$.

Comme les variables d et r se trouvent dans les deux formules, les axes des coordonnées porteront les échelles d et r .

Un réseau de lignes représentera les valeurs de P et un autre réseau de lignes représentera les valeurs de f .

$$P = a \cdot \frac{d^3}{r}$$

Premier abaque :

$$3 \text{ Log } d = \text{Log } r + \text{Log} \left(\frac{P}{a} \right) \quad (7)$$

analogue à $y = x + c$ $c = \text{cste}$

L'abaque sera donc construit avec un réseau de droites parallèles, à condition que les échelles d et r porteront des graduations logarithmiques.

$$f = b \cdot \frac{r^2}{d}$$

Deuxième abaque :

$$\text{Log } d = 2 \text{ Log } r - \text{Log} \left(\frac{f}{b} \right) \quad (8)$$

Soit $y = x + c$

Nous aurons un abaque à réseau de droites parallèles si les

échelles d et r portent des graduations logarithmiques. Or ces échelles sont déjà tracées, il suffit de mettre en place le réseau de droites représentant les diverses valeurs de f

(Fig. IV.3.1.1.a)

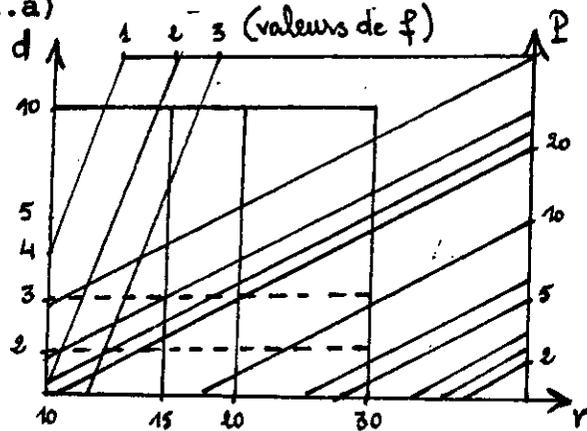


Fig. IV.3.1.1.a : Abaques cartésiens superposés à trois variables

IV.3.1.2 Exemple d'abaques cartésiens superposés à 4 variables

Soit à représenter la relation $F = a \cdot P/D \cdot N$ donnant la valeur de F en fonction de P, N et D où a est une constante avec les limites :

$$P_0 < P < P_\infty$$

$$D_0 < D < D_\infty$$

$$N_0 < N < N_\infty$$

L'abaque sera construit dans un système de coordonnées logarithmiques, parceque dans ce système toutes les courbes représentant le quotient ou le produit de deux grandeurs sont des droites.

Un abaque cartésien ne peut se construire qu'avec trois variables au plus. Il est donc nécessaire de scinder la formule de façon à n'avoir pas plus de trois variables. La relation donnée peut s'écrire :

$$F = \frac{P}{N} \cdot \frac{1}{D} \cdot a$$

$$\text{Posons } \frac{P}{N} = A \quad \text{d'où } F = (A/D) \cdot a \quad (9)$$

Nous aurons alors deux abaques à tracer représentant

respectivement $A = \frac{P}{N}$ et $F = \frac{A}{D} \cdot a$

Dans le premier abaque, les axes de coordonnées porteront les échelles P et N et le réseau de droites est relatif aux valeurs de A.

Dans le deuxième, les axes de coordonnées porteront les échelles D et F et le réseau de droites est relatif aux valeurs de A.

(Fig. IV.3.1.2.a)

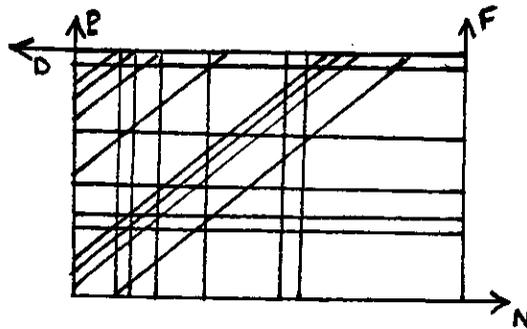


Fig. IV.3.1.2.a : Abaques cartésiens superposés à 4 variables

Toutes ces notions de construction des abaques sont valables dans le cas où nous avons la fonction $F(x,y,z)$ donc nous avons la relation entre les variables x,y et z . Mais dans certains cas, nous rencontrons des abaques construits et le problème se pose dans le fait que nous ne connaissons pas la fonction $F(x,y,z)$. Pour trouver les équations des graduations sans celle-ci, nous devons connaître d'autres notions qui sont relatives à la construction des échelles.

IV.4 Les échelles [13]

IV.4.1 Classification des échelles

Il existe deux catégories d'échelles : les échelles arithmétiques (appelées encore échelles métriques) et les échelles non-arithmétiques que nous appelons : échelles Fonctionnelles.

La construction d'une échelle est basée sur la détermination du module.

Définition d'un module : Le module de l'échelle noté μ est le rapport entre l'abscisse u du point gradué x et la valeur de la

fonction f en ce point :

$$\mu = \frac{U}{f(x)} \quad (10)$$

La connaissance du module μ nous permet de graduer toute l'échelle.

IV.4.1.1 Echelle arithmétique

Dans une telle échelle, les abscisses des points gradués de l'échelle sont proportionnelles aux valeurs de la variable représentée.

La connaissance de l'abscisse d'un point et de la graduation de ce point suffisent pour effectuer la graduation de toute l'échelle.

Nous appelons le rapport μ le module de l'échelle :

$$\mu = \frac{\text{abscisse du point gradué } x}{x} = \frac{U}{x} \quad (11)$$

IV.4.1.2 Echelles fonctionnelles

2.1 Echelle logarithmique :

C'est l'échelle des valeurs de la fonction $\text{Log } x$. Dans cette échelle les abscisses des points gradués x sont proportionnelles à $\text{Log } x$.

Le module μ d'une telle échelle est :

$$\mu = \frac{\text{abscisse du point gradué } x}{\text{Log } x} = \frac{U}{\text{Log } x} \quad (12)$$

2.2 Echelle d'élevation aux puissances :

C'est l'échelle des valeurs de la fonction x^n . Le module de cette échelle est le rapport entre l'abscisse du point gradué x et la valeur correspondante de x^n :

$$\mu = \frac{\text{abscisse du point gradué } x}{x^n} = \frac{U}{x^n} \quad (13)$$

2.3 Echelle homographique :

Une fonction homographique est de la forme :

$$y = \frac{A \cdot f(x) + B}{C \cdot f(x) + D}$$

où A,B,C,D sont des constantes.

Dans ce cas, les abscisses des points gradués x sont proportionnelles à y. Le module de l'échelle est :

$$\mu = \frac{\text{abscisse du point gradué } x}{y} \quad (14)$$

V Réalisation du logiciel

V.1 Introduction

Des travaux effectués par nos prédécesseurs nous ont épargnés pendant longtemps -l'utilisation d'équations et la manipulation de calculs fastidieux nécessaires à l'obtention de certains résultats et ce en réalisant des tables, des tableaux, des diagrammes, des abaques etc...

Mais actuellement, avec l'outil informatique, il est possible de transcrire ces abaques, ces équations et autres, en langage évolué sous forme de logiciels opérationnels.

Le logiciel, que nous avons conçu, réalise le calcul des propriétés physiques suivantes :

- La viscosité dynamique d'un corps pur
- L'indice d'octane d'une fraction pétrolière
- La tension de vapeur d'un corps pur
- L'enthalpie de vaporisation d'un coprs pur
- Le coefficient de perte de charge dans une canalisation.

V.2 La viscosité

La viscosité joue un rôle important dans de nombreux procédés industriels qui mettent en jeu des écoulements de fluides ou des transferts de quantités de mouvement.

V.2.1 Théorie

V.2.1.1 Définition [14]

Deux couches contigues de fluide, en mouvement parallèle, exercent l'une sur l'autre, par frottement intérieur, une force tangentielle.

La viscosité est la force nécessaire par unité de surface, pour maintenir entre deux plans parallèles, séparés par l'unité de distance, un gradient de vitesse égal à un :

$$\eta = \frac{dF}{dS} \cdot \frac{d_x}{d_v} \quad (15)$$

où

η : la viscosité dynamique

dS : L'élément de surface

dF : la force résistante

d_x : la distance entre deux couches

d_v : La vitesse

Le coefficient de viscosité cinématique est défini comme suit :

$$\mu = \frac{\eta}{\rho} \quad (16)$$

où

η : La viscosité dynamique

μ : La viscosité cinématique

ρ : La masse volumique du fluide

V.2.1.2 Méthodes de calcul de la viscosité [15]

De nombreuses méthodes pour le calcul de la viscosité pour les substances pures et pour les mélanges à différentes température et pression ont été suggérées. Pour l'élaboration de

ces méthodes, les chercheurs se sont basés sur plusieurs théories relatives à la structure des substances ainsi qu'à l'environnement de celles-ci. De ce fait, nous comprenons l'existence des marges d'erreurs dans bien des méthodes, car il n'est pas aisé de décrire de manière rigoureuse un phénomène physique.

Dans ce qui suit, nous citerons quelques unes de ces méthodes.

2.a Viscosité des liquides :

La viscosité des liquides diminue avec la température, mais cet effet varie suivant les liquides. Pour la pression, bien que la viscosité croît avec celle-ci, les variations ne sont pas trop importantes.

L'équation d'ANDRADE,

$$\eta = A \text{ EXP } (B/T) \quad (17)$$

où A et B sont des constantes, a été à la base de nombreuses autres formulations plus ou moins empiriques pour représenter l'évolution de la viscosité avec la température.

Le chercheur, pour mettre au point l'équation (17), s'est basé sur des données expérimentales, ainsi l'équation est valable pour un ensemble de composés bien défini.

Les méthodes d'estimation par contribution de groupes sont souvent utilisées, mais elles peuvent conduire à des erreurs importantes. Elles reviennent en général à déterminer les paramètres A et B de l'équation d'ANDRADE (17) à partir d'informations sur la structure de la molécule.

Ainsi, à basse température, VAN VELZEN et coll. ont suggéré de modifier l'équation d'ANDRADE de la façon suivante :

$$\text{Lg } (\eta) = B \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \quad (18)$$

avec B et T_0 , qui sont reliés à la structure du liquide.

A haute température, des relations fondées sur les états correspondants ont été proposées. Ainsi LETSOU et STIEL ont

représenté la viscosité en fonction d'un paramètre de réduction ξ et du facteur acentrique w , pour des températures réduites T_r comprises entre 0.76 et 0.98, suivant la relation :

$$\eta \xi = (\eta \xi)_1 + w(\eta \xi)_2 \quad (19)$$

$$\text{où } \xi = T_c^{1/6} / M^{1/2} P_c^{2/3} \quad (19.1)$$

$$(\eta \xi)_1 = 0.015174 - 0.02135 T_r + 0.0075 T_r^2 \quad (19.2)$$

$$(\eta \xi)_2 = 0.042552 - 0.07674 T_r + 0.034 T_r^2 \quad (19.3)$$

$T_r = T/T_c$ [T et T_c en kelvins (K)]

P_c en atmosphères (atm)

η en 10^{-3} Pa.s

2.b Viscosité des gaz :

Le modèle gazeux élémentaire suppose que toutes les molécules sont des sphères rigides sans interactions, de diamètre σ , de masse m , se déplaçant de façon aléatoire à la vitesse U . Dans ce cas, la viscosité est donnée par :

$$\eta = 2.669 (MT)^{1/2} / \sigma^2 \quad (20)$$

avec

η : (μ Pa.s) la viscosité,

M : (g) la masse moléculaire,

T : (K) la température

σ : (\AA) le diamètre de sphère dure.

Dans la réalité, les molécules sont soumises à des forces intermoléculaires, elles s'attirent et se repoussent. La viscosité est alors donnée par la formule de CHAPMAN-ANSKOG :

$$\eta = 2.669 (MT)^{1/2} / \Omega \sigma^2 \quad (21)$$

Cette équation est identique à l'équation (20) à l'exception de l'inclusion d'une intégrale de collision Ω . Ces intégrales de collision ont été calculées en fonction de la température pour

différents types de potentiels intermoléculaires, par exemple LENNARD-JONES ou STOCKMAYER

Par suite, la viscosité en fonction de la température est souvent exprimée en fonction de $T^{1/2}$, c'est à dire que nous calculons les coefficients d'un polynôme $F(T)$ tel que :

$$\frac{1}{F(T)} = \frac{\eta}{T^{1/2}} \quad (22)$$

Un lissage en fonction de la température réduite T_r donne l'expression suivante :

$$\eta_0 = A + BT_r + CT_r^2 + DT_r^3 \quad (23)$$

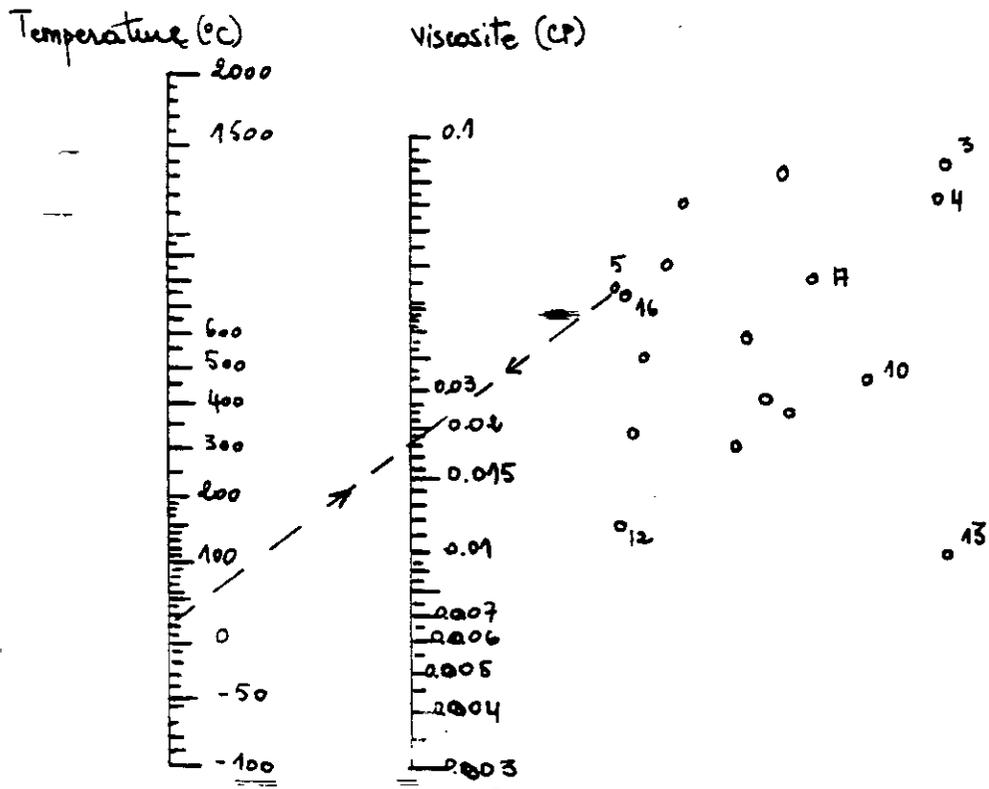
avec A,B,C,D les coefficients relatifs aux composés.

L'équation (23) est valable pour un ensemble défini de composés et pour chaque composé, nous avons un domaine de température (T_c et T) où l'équation est applicable.

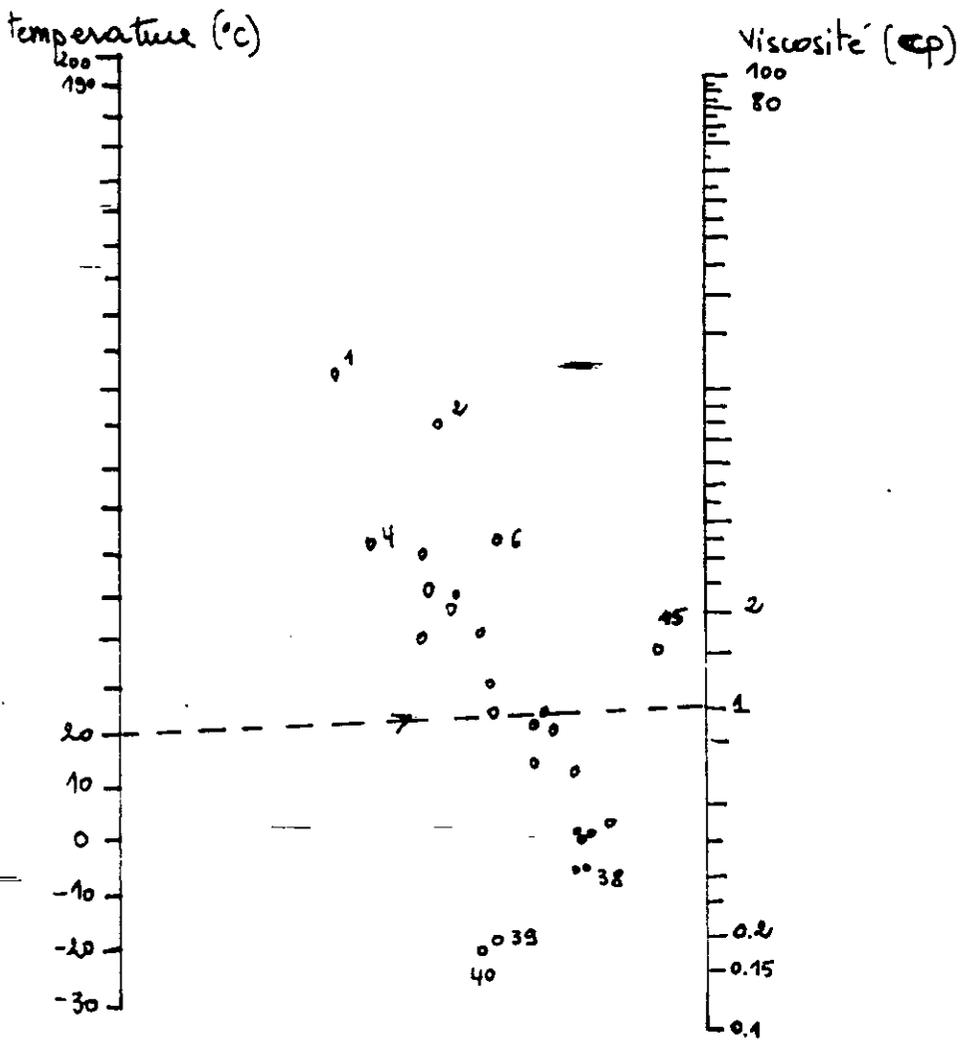
V.2.1.3 Méthodes de lecture de la viscosité : [16]

A côté de nombreuses équations et correlations permettant le calcul de viscosité, il existe des abaques qui, par lecture, donnent la valeur de la viscosité. Ces abaques sont nombreux et différents, mais il n'y a que quelque uns que l'ingénieur utilise fréquemment et cela est dû au fait qu'ils soient simples à manipuler.

Les abaques que nous avons considérés dans notre travail sont données ci-dessous; ils nous donnent la viscosité à une température donnée. Les abaques sont valables à une atmosphère.



Abaque des composés gazeux



Abaque des composés liquides

Ces abaques sont valables pour un ensemble de composés chimiques qui sont représentés par leurs numéros dans chaque abaque. La littérature nous donne les coordonnées de ces composés qui nous permettent de les positionner dans un repère.

V.2.2 Présentation du problème

Dans notre travail, la détermination de la viscosité est basée sur deux méthodes :

- La méthode de calcul (équations)
- La méthode de lecture (abaques)

V.2.2.1 Méthodes de calcul :

L'équation utilisée pour le calcul de la viscosité des liquides est celle d'ANDRADE. Dans la pratique l'expression de l'équation comporte la constante des gaz parfaits R :

$$\eta = A \text{ EXP } (B/RT) \quad (24)$$

$$R = 8.31441 \text{ (J.mole}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{)}$$

Le choix de cette équation se justifie par le très grand nombre de composés pour lesquels les coefficients A et B sont disponibles et donc pour lesquels le calcul est valable.

De plus les résultats que nous donne l'équation sont satisfaisants. Les valeurs des coefficients A et B sont données dans le tableau (V.2.2.1) (en annexe 4)

En ce qui concerne les gaz, les équations rencontrées, certaines sont valables pour des composés d'un nombre limité et elles sont applicables pour des domaines restreints de température (23). Et d'autres utilisent beaucoup de paramètres (21) dont les valeurs ne sont pas disponibles pour un nombre de composés important ce qui rend leur utilisation pas d'un grand apport.

V.2.2.2 Méthode de lecture

Les abaques considérées (V.2.1.3) pour la détermination de la viscosité sont des abaques à points alignés. Chaque abaque comporte deux échelles qui sont parallèles et une échelle qui est

d'un type particulier car elle est représentée par un repère de coordonnées rectangulaires. Ce repère nous permet de situer les composés, pour lesquels l'abaque est applicable, en connaissant leurs coordonnées. Celles-ci sont extraites de la littérature. Ces abaques ont été mis sous forme d'équation dans le but de les manipuler par ordinateur.

2.a Abaque des gaz :

2.a.1 Echelle : température

C'est une échelle logarithmique décrite par l'équation suivante:

$$y_1 = 16 + \mu_T(\text{Lg}(\text{temp}) - \text{Lg}(533)) \quad (25)$$

où y_1 représente l'ordonnée du point considéré de l'échelle

temp représente la température lue en ce point

μ_T représente le module de l'échelle.

Le module μ_T est obtenu par la méthode suivante :

nous considérons deux points de l'échelle, l'un de ces points sera considéré comme point de référence dans nos calculs.

$$\mu_T = \frac{U}{\text{Lg}(303) - \text{Lg}(533)} = \frac{13}{-0.2453}$$

$$\mu_T = -52.999$$

où 533 est la température en Kelvin lue au point de référence.

U est la différence des ordonnées des points considérés.

Les modules des autres échelles sont déterminés par la même méthode.

2.a.2 Echelle : Viscosité

C'est une échelle logarithmique décrite par l'équation suivante:

$$y_3 = ax_3 + b \quad (26)$$

Où

y_3 représente l'ordonnée du point où la valeur de la viscosité est lue.

x_3 représente l'abscisse de ce point.

a et b sont des paramètres déduits par la résolution du système de Cramer suivant :

$$\begin{cases} y_1 = ax_1 + b \\ y_2 = ax_2 + b \end{cases}$$

où

(x_1, y_1) représentent les coordonnées de la température de calcul
 (x_2, y_2) représentent les coordonnées du composé considéré.

Les valeurs des coordonnées des composés gazeux sont données dans le tableau (V.2.2.2) (en annexe 4).

$$\begin{cases} a = (y_1 - y_2) / (x_1 - x_2) \\ b = (x_1 y_2 - y_1 x_2) / (x_1 - x_2) \end{cases} \quad (27)$$

La valeur de la viscosité est donnée par l'équation :

$$\eta = 10^{\left[\frac{y_1}{T} + Lg(\eta_0) \right]} \quad (28)$$

où

μ_n représente le module de l'échelle

η_0 représente la viscosité lue au point pris comme point de référence dans l'échelle : $\eta_0 = 0.0065$ cp

$$\mu_n = \frac{U}{Lg(0.043) - Lg(0.0065)} = \frac{29}{0.8205}$$

$$\mu_n = 35.342$$

2.b Abaque des liquides

2.b.1 Echelle : température

C'est une échelle logarithmique décrite par l'équation :

$$y_1 = 25 + \mu_r [Lg(\text{temp}) - Lg(353)] \quad (29)$$

où

y_1 représente l'ordonnée du point considéré de l'échelle
temp représente la température lue en ce point.

μ_r représente le module de l'échelle.

La valeur du module μ_T est donnée par la relation suivante :

$$\mu_T = \frac{U}{Lg(373) - Lg(353)} = \frac{4}{0.0239}$$
$$\mu_T = 167.125$$

où

U représente la différence des ordonnées des points considérés de l'échelle.

La valeur 353 K représente la température lue au point de référence de l'échelle.

2.b.2 Echelle : Viscosité

C'est une échelle logarithmique décrite par l'équation :

$$y_3 = ax_3 + b \quad (30)$$

où

y_3 représente l'ordonnée du point où la valeur de la viscosité est lue.

x_3 représente l'abscisse de ce point.

a et b sont des paramètres donnés par la résolution du système de Cramer suivant :

$$\begin{cases} y_1 = ax_1 + b \\ y_2 = ax_2 + b \end{cases} \quad (31)$$

La valeur de la viscosité est donnée par l'équation :

$$\eta = 10^{\left[\frac{y_3}{K} + Lg(\eta_0) \right]} \quad (32)$$

où

μ_n représente le module de l'échelle

η_0 : représente la viscosité lue au point de référence de l'échelle : $\eta_0 = 0.6\text{cp}$

Le module μ_n est donné par la relation suivante :

$$\mu_n = \frac{U}{\text{Lg}(2.5) - \text{Lg}(0.6)} = \frac{10}{0.6198}$$

$$\mu_n = 16.134$$

2.c Principe de la méthode

Nous avons établi un repère de coordonnées rectangulaires (Fig.V.2.2.2.a) et (Fig.V.2.2.2.b) pour chaque abaque. Dans chaque repère, nous avons considéré certaines coordonnées constantes :

Abaque des gaz :

$$x_1 = -8.846 \text{ cm}$$

$$x_3 = 19.923 \text{ cm}$$

Abaque des liquides

$$x_1 = 20.441 \text{ cm}$$

$$x_3 = -9.265 \text{ cm}$$

Chaque abaque consiste à donner la viscosité d'un composé à une température donnée. Ainsi cette température doit être convertie en une coordonnée pour qu'elle soit utilisée dans les calculs et ce à l'aide du module μ_T :

$$y_1 = \mu_T [\text{Lg}(T_{\text{Temp}}) - \text{Lg}(T_0)]$$

où

T_0 représente la température lue au point de référence de l'échelle.

T_{Temp} représente la température à convertir.

Après le calcul des paramètres a et b , nous calculons y_3 .

Pour avoir la valeur de la viscosité, nous convertissons y_3 par l'intermédiaire de l'équation suivante :

$$\eta = 10^{\left(\frac{y_3}{\mu_n} + \text{Lg}(\eta_0)\right)}$$

où

η_0 représente la viscosité lue au point de référence

μ_n représente le module de l'échelle.

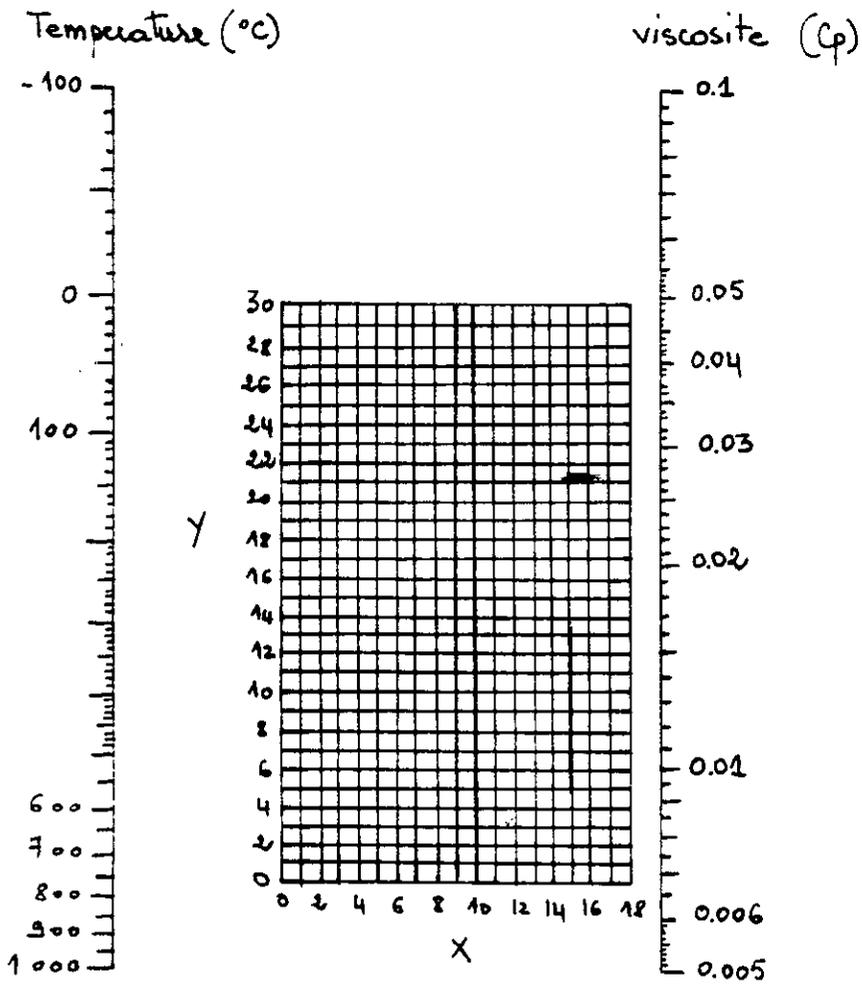


Fig. V. 2.2.2.a : Repère de L'abaque des gaz.

Temperature (°C)

viscosite (cp)

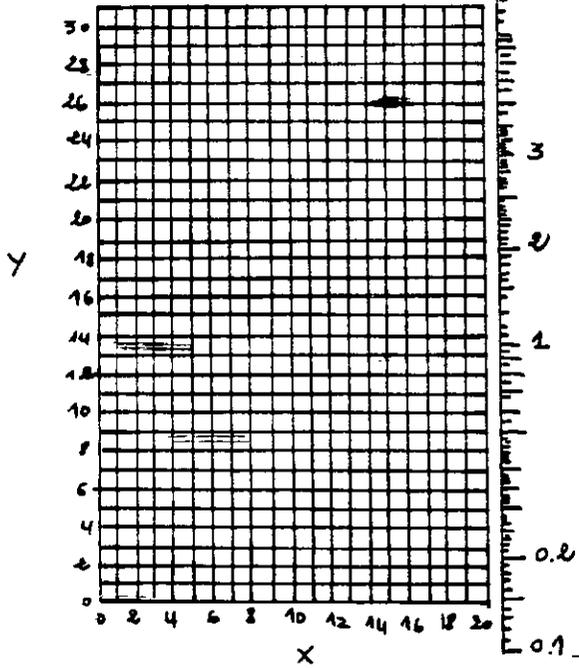
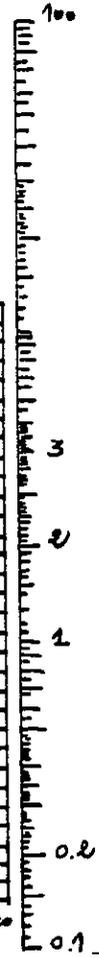
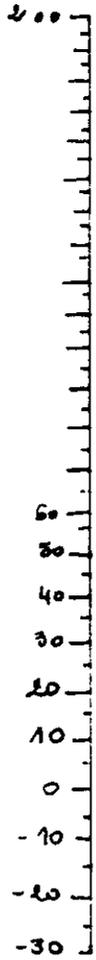


Fig. V.2.2.2.b : Repère de l'abaque des liquides

V.2.3 Programme

Le programme est constitué de deux parties :

- Partie des liquides
- Partie des gaz

Quelque soit la partie du programme et quelque soit la méthode choisie, le principe de fonctionnement est identique.

La différence réside dans les équations de calcul de la viscosité et aussi dans les informations puisées dans les fichiers de données.

Dans la partie des liquides; nous avons recours à deux fichiers de données : celui relatif à la méthode des abaques; les informations que nous y trouvons et qui sont nécessaires au calcul sont :

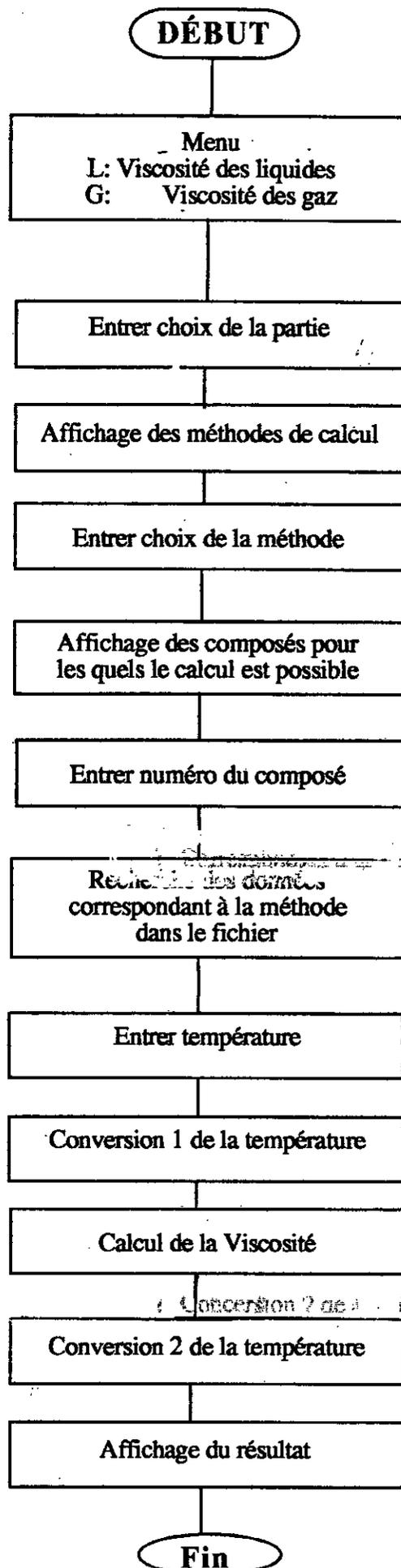
Les coordonnées (X,Y) du composé, la température d'ébullition et la température de congélation. Dans le fichier concernant la méthode d'ANDRADE, les informations consistent en : les coefficients de l'équation (spécifiques pour chaque composé), la température d'ébullition et la température de congélation.

Dans la partie des gaz, nous avons recours à un seul fichier de données qui contient les coordonnées (X,Y) du composé, sa température d'ébullition et sa température de congélation.

V.2.3.1 Principe de fonctionnement du programme

(organigramme voir page suivante)

Viscosité



V.2.3.2 Programme

```
PROGRAM viscosite (input,output);
uses crt;
```

```
label 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14;
type identification=record
  num:integer;
  ncomp:string[26];
  x,v,teb,tcong:real;
end;
identifica=record
  num:integer;
  ncomp:string[26];
  x,y,tep,tcong,tcr:real;
end;
```

```
var
  f1,f2,f3:text;
  identif:identification;
  identifl:identifica;
  m,f,j,answer,rep,reonse:char;
  unitet:string[20];
  temp,y3,y1,a,b,y2,x2,mu,mov,mot,x1,x3,r:real;
  ans,k,s,i,e,numc:integer;
```

```
procedure conversion;
begin
```

```
  case j of
```

```
    'r':begin
```

```
      temp:=temp+1.8;unitet:=' °R';
```

```
    end;
```

```
    'k':unitet:=' K';
```

```
    'f':begin
```

```
      temp:=temp*1.8-459.7;unitet:=' °F';
```

```
    end;
```

```
    'c':begin
```

```
      temp:=temp-273.0;unitet:=' °C';
```

```
    end;
```

```
  end;
```

```
end;
```

```
procedure temperature;
```

```
  label i;
```

```
  begin
```

```
    writeln;
```

```
i:writeln('          si votre température est en rankine: taper R');
```

```
writeln('          si c'est en kelvin: taper K');
```

```
writeln('          si c'est en farenheite: taper F');
```

```
writeln('          si c'est en celcius: taper C'); writeln;
```

```
  write('          '); readln(j);
```

```
  case j of
```

```
    'r':temp:=temp/1.8;
```

```
    'k':temp:=temp;
```

```
    'f':temp:=(temp+459.7)/1.8;
```

```
    'c':temp:=temp+273.0
```

```
  else
```

```
    begin
```

```
      writeln('          vous avez tapé un mauvais caractère');
```

```
      goto i;
```

```
    end;
```

```
  end;
```

```
end;
```

```
begin
```

```
clrscr;
```

```
(***** programme principal *****)
```

```

writeln('                                # calcul de viscosité dynamique #');
writeln('                                *****');
writeln;
writeln(' Pour le calcul de viscosite ,nous vous proposons différentes ');
writeln('                                méthodes pour des liquides et pour des gaz. ');
writeln('-----');
writeln;
repeat
write('voulez vous faire un calcul de viscosite ? (o/n) ');readln(answer);
  if answer='o'
  then
    begin
1:writeln('      pour consulter la partie des composés liquides:taper L');
  writeln;
  writeln('      pour consulter la partie des composés gazeux:taper G');
  write('      ');readln(rep);
  case rep of
    '1': begin
      writeln ('      ***** la partie des liquides ***** ');writeln;
2: writeln('      choisissez la methode de calcul:');writeln;
      writeln('      1:methode des abaqués');writeln;
      writeln('      2:methode d'andrada');writeln;
      write('      '); readln(k);
3:if k=1 then
      begin
writeln('      La liste des composés pour lesquels le calcul est valable. ');
      writeln('      Identifier votre (vos) composé(s) par son (leurs) numéro(s):');
      writeln;
      s:=0;
      assign(f2,'a:\coor1.dat');
      reset(f2);
      repeat
        i:=1;
        repeat
          with identif do
            begin
              readln(f2,num,ncomp);
              writeln(num,ncomp);
              i:=i+1;
            end;
          until(i>21);
          s:=s+21;write('      ##### taper return pour avoir la suite...');
          readln;
          until(s=147);
          repeat
            reset(f2);writeln;
          write('      donner le numéro de votre composé ');readln(numc);
          i:=1;
          repeat
            with identif do
              begin
                readln(f2,num,ncomp,x,y,teb,tcong);
                begin
                  writeln;
                  write('      votre composé est:',ncomp,'? (o/n) ');readln(f);
                  if f='o'
                  then
                    begin
                      x2:=x;
                      y2:=y;
                    end
                  else

```

```

begin
  writeln;
write('** erreur dans l'identification taper return pour revoir la liste');
  readln;
  goto 3;
end;
end
else
  i:=i+1;
  end;
until((identif.num=numc) or (i>147));
  if i>147
  then
    begin
      writeln;
      writeln('votre composé n'existe pas dans notre liste');writeln;
4:writeln('      pour revoir la liste : taper 1');
      writeln('      pour arreter le travail : taper 2');
      readln(ans);
      case ans of
        1:goto 3;
        2:goto 14
      else
        begin
          writeln('vous avez tapé un mauvais chiffre');goto 4;
          end;
        end;end
else
  begin
    writeln('          ***** le calcul *****'); writeln;
    repeat
      writeln('le calcul est possible dans le domaine suivant de temperature:');
      writeln(' ] ',identif.tcong:4:1,' - ',identif.teb:4:1,' [ °c');
      write('donner la température à laquelle vous voulez la viscosité ');
      5:readln(temp);
      temperature;
      if (temp-273)>identif.tcong
        then
          begin
            if (temp-273)<identif.teb
              then
                begin
                  x3:=34.75/1.7;
                  x1:=-15.75/1.7;
                  mot:=4*ln(10)/(ln(373)-ln(353));
                  y1:=25+mot*(ln(temp)-ln(353))/ln(10);
                  a:=(y1-y2)/(x1-x2);
                  b:=(x1*y2-x2*y1)/(x1-x2);
                  y3:=a*x3+b;
                  mov:=10*ln(10)/(ln(2.5)-ln(0.6));
                  mu:=exp((y3-10)/mov*ln(10)+ln(0.6));
                  conversion;
                  writeln('la viscosité à T=',temp:4:1,' ',unitet,' est:');
                  writeln(mu:6:2,' centipoise');writeln;
                  writeln(mu:4:2,' 10e-3 pa.s');writeln;
                  writeln(mu:4:2,' 10e-3 poiseuille ');writeln;
                  writeln(mu:4:2,' 10e-3 ns/m2');writeln;
                  writeln('le calcul a été fait par la methode des abaqués');
                  end
                else
                  begin
                    writeln('votre composé est gazeux à cette température. ');writeln;
                    6:writeln('***** pour changement de température taper 1');writeln;
                      writeln('***** pour consulter la partie des gaz taper 2');
                      write(' '); readln(e);
                      case e of

```

```

begin
  write('          donner une autre température '); goto 5;
  end;
2: goto 10
else
  begin
  writeln('          vous avez tapé un mauvais chiffre'); goto 6;
  end;
end;
end;
end
else
  begin
writeln('          votre composé est solide et la viscosité n''a pas de');
writeln('          signification physique. ');
  end;
writeln;
write('          voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé? (o/n) ');
  readln(f);
  until f='n';
  end;
write('          voulez-vous calculer la viscosité pour un autre composé ? (o/n) ');
  readln(m);
  until m='n';
  close(f2);
  end
else
  begin
  if k=2
  then
  begin
writeln('La liste des composés pour lesquels le calcul est ');
writeln('possible . Identifier votre composé par son numéro: ');
s:=0;
assign(f3, 'a:\andr.dat');
reset(f3);
repeat
i:=1;
repeat
with identif do
begin
readln(f3, num, ncomp);
writeln(num, ncomp);
i:=i+1;
end;
until (i=21);
s:=s+20; write('          #####          taper return pour avoir la suite... ');
readln;
until (s=200);
repeat
reset(f3);
writeln;
write('          donner le numéro de votre composé ');
readln(numc);
i:=1;
repeat
with identif do
begin
readln(f3, num, ncomp, x, y, teb, tcong);
if num=numc
then
begin
write('          votre composé est : ', ncomp, '? (o/n) '); readln(f);
if f='o'
then
begin

```



```

end;
end
else
begin
writeln('      votre composé est solide et la viscosité n''a pas de');
writeln('      signification physique. ');
end;
write('      voulez-vous faire un autre calcul pour ce compose? (o/n) ');
readln(f);
until f='n';
end;
write('voulez-vous faire un calcul de viscosite pour un autre compose? ');
write('(o/n) '); readln(m);
until m='n';
close(f3);

end
else
begin
writeln('      vous avez tapé un mauvais chiffre');goto 1;
end;
end;
writeln;
writeln('      **** fin de calcul de viscosité pour les liquides ****');
writeln('-----');
end;

'g':begin
writeln('***** partie calcul de viscosité pour les gaz *****');
writeln;
writeln('la methode de calcul est celle des abaques');
10:writeln('voici la liste des composés pour lesquels ');
writeln(' le calcul est possible.identifier votre composé:');
s:=0;
assign(f1,'a:\coorg.dat');
reset(f1);
repeat
i:=1;
repeat
with identifi do
begin
readln(f1,num,ncomp);
writeln(num,ncomp);
i:=i+1;
end;
until (i>14);
s:=s+14;
write('      ##### taper return pour avoir la page suivante');
readln;
until(s=56);
repeat
reset(f1);
write('      donner le numéro de votre composé ');readln(numc);
i:=1;
repeat;
with identifi, do
begin
readln(f1,num,ncomp,x,y,teb,tcong,tcr);
if num=numc
then
begin
write('      le composé est ',ncomp,'? (o/n) ');readln(f);
if f='o'
then
begin

```

```

x2:=x;
y2:=y;
end
else
begin
writeln;
write('** erreur dans l'identification taper return pour revoir la liste');
readln;goto 10;
end ;
end
else
i:=i+1;
end;
until((identif1.num=numc) or (i>56));

if i>56
then
begin
writeln(' votre composé n'existe pas dans notre liste');
writeln;
11:writeln(' pour revoir la liste taper 1');
writeln(' pour arreter le calcul taper 2');
readln(ans);
case ans of
1:goto 10;
2:goto 14;
else
begin
writeln('vous avez tapé un mauvais chiffre');goto 11;
end;
end
else
begin
repeat
writeln('le calcul est possible dans le domaine suivant de temperature');
writeln(' [',identif1.teb:4:1,' - ',identif1.tcr:4:1,' [ °c');
write('donner la temperature a laquelle vous voulez la viscosite ');
12:readln(temp);
temperature;
if((temp-273)>identif1.teb)and((temp-273)<identif1.tcr)
then
begin
x1:=-11.5/1.3;
x3:=25.9/1.3;
mot:=13*ln(10)/(ln(303)-ln(533));
y1:=16+mot*(ln(temp)-ln(533))/ln(10);
a:=(y1-y2)/(x1-x2);
b:=(x1*y2-x2*y1)/(x1-x2);
y3:=a*x3+b;
mov:=29*ln(10)/(ln(0.043)-ln(0.0065));
mu:=exp(y3*ln(10)/mov+ln(0.0065));
conversion;
writeln(' la viscosité A T=',temp:4:1, unitet , 'est: ');
writeln('mu=0;mu:6:3, centipoise');writeln;
writeln('mu=',mu:4:2, '10E-3 Poise');writeln;
writeln('mu=',mu:4:2, '10E-3 Poiseuille');writeln;
writeln('mu=',mu:4:2, '10E-3 N.s/m2');writeln;
writeln(' le calcul a été fait par la methode des abaques ');
end
else
begin
if (temp-273)>identif1.tcong
then
begin
if (temp-273)<identif1.tcr

```

```

when
begin
  writeln('
13:writeln('          votre composé est liquide. ');
  writeln('          pour consulter la partie des liquides:taper 2');
  write('          pour changer de température:taper 1');
  write('          ');readln(e);
  case e of
  1:begin
    write(' donner la nouvelle valeur de la temperature ');
    goto 12;
  end;
  2:goto 2
  else
    begin
      writeln('vous avez tapé un mauvais chiffre');goto 13;
    end;
  end;
end
else
begin
  writeln('          vous avez dépassé le point critique');
  writeln('          la viscosité ne peut etre calculée');
  end;
end
else
begin
  writeln('          à cette température votre composé est solide');
  writeln('          la viscosité n''a pas de signification physique');
  end;
end;
write('voulez-vous faire un autre calcul pour ce compose? (o/n)');
readln(f);
until f='n';
end;
write('voulez-vous faire un calcul pour un autre composé? (o/n) ');
readln(m);
until m='n';
close(f1);
writeln('-----fin de calcul pour les gaz -----');
end
else
begin
writeln('          vous avez tapé une mauvaise lettre ');
write('* * * * taper return pour avoir la suite...');readln;
goto 1;
end;
end;
end;
until answer='n';
14:writeln('----- fin de calcul -----');
readln;
end.

```

V.3 L'indice d'octane

V.3.1 Théorie [17, 18]

V.3.1.1 Définition

L'indice d'octane est une mesure de la valeur anti-détonante du carburant, ou encore de son aptitude à supporter la compression.

Les carburants commerciaux étant composés par un mélange d'un grand nombre d'hydrocarbures, chacun de ces hydrocarbures réagissant différemment aux paramètres influençant la détonation (pression, température,...), il ne pouvait être question de caractériser la valeur anti-détonante par une grandeur absolue dépendant uniquement du carburant. Il s'agit de mesures comparatives où le comportement du carburant s'exprime par un nombre sans dimension compris entre 0 et 100 avec une possibilité d'extrapolation jusqu'à 120.

Une échelle de référence est établie à partir de deux hydrocarbures, l'un propice au cliquetis, l'autre au contraire très résistant qui sont respectivement : l'heptane et l'iso-octane (triméthyl-2,2,4 pentane)

V.3.1.2 Les indices d'octanes "Research" et "Motor"

Il existe deux procédés normalisés (NFM07-026), la méthode "Research" ou F_1 (ASTMD2699) et la méthode "MOTOR" ou F_2 (ASTM D2700).

Les indices correspondants sont désignés par les symboles RON (Research octane Number) et MON (Motor Octane Number).

Chaque méthode se caractérise par des conditions expérimentales spécifiques, tandis que la technique de détermination, proprement dite, est rigoureusement la même dans les deux cas.

V.3.1.3 Amélioration des indices d'octane des carburants :

Trois méthodes sont pratiquement utilisées pour élever l'indice d'octane des carburants :

1- Par traitement en raffinerie en agissant sur la constitution de manière que l'octane soit "bien placé" dans la distillation du produit final.

2- Par mélange avec des produits d'additions à forte valeur antidétonante.

3- Par addition de dopes antidétonants

Jusqu'à ces dernières années, l'addition de dopes antidétonants tels que les Alkyles de plomb sont restés le seul moyen efficace et économique pour élever l'indice d'octane et satisfaire les spécifications. Dès leur découverte, ces additifs ont connu un très large essor qui n'a pas été remis en cause par le développement, pourtant spectaculaire, de procédés nouveaux de raffinage fournissant des essences à haut indice d'octane. En effet, les alkyles de plomb constituent toujours, pour le raffineur, le moyen le plus souple et le plus économique de produire un carburant conforme aux spécifications et de caractéristiques constantes. Ce sont finalement les projets et réglementations liés à la lutte contre la pollution atmosphérique qui ont provoqué, à partir de 1975, la décision de certains pays de supprimer l'incorporation d'alkyles de plomb dans les carburants.

V.3.1.3 Les alkyles de plomb :

Ces produits ont été utilisés comme additifs, depuis 1920, pour accroître commodément et à un coût acceptable, les indices d'octane des carburants; il s'agit plus précisément de plomb tétraétyle [Pb (C₂H₅)₄ ou PTE], ou plomb tétraméthyle [Pb(CH₃)₄ ou PTM] ou des mélanges mixtes renfermant diverses combinaisons possibles, de groupements C₂H₅ et CH₃ : Pb(C₂H₅)₂ (CH₃)₂

Pb (C₂H₅)₃, Pb(C₂H₅) (CH₃)₃.

Les produits de base PTE et PTM sont des liquides présentant respectivement des points d'ébullition de 205°C et 110°C. Les quantités d'additifs utilisées sont généralement exprimées en gramme de plomb par litre de carburant et correspondent à des concentrations en plomb comprises entre 0.15 et 0.85 g/l.

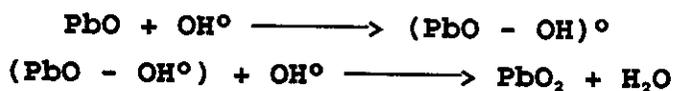
1.a Caractéristiques générales et mode d'action :

- Mécanisme d'inhibition de l'auto-inflammation

Les alkyles de plomb exercent un effet inhibiteur sur les réactions d'oxydation des composés organiques et contribuent ainsi à allonger le délai d'auto-inflammation.

Le mode d'action précis des alkyles de plomb n'est pas complètement élucidé, on pense pourtant que la substance active est l'un des oxydes de plomb (PbO , PbO_2), (Pb_3O_4), plus vraisemblablement PbO , résultant de la décomposition chimique du composé organo-métallique. PbO provoque la désactivation des radicaux libres, principalement du type OH° , qui interviennent dans la propagation et la ramification des chaînes lors de l'oxydation précédant l'auto-inflammation.

Le mécanisme global de désactivation peut être résumé par des réactions du type :



Il convient de noter que divers oxydes de métaux autres que Pb pourraient exercer globalement le même type d'inhibition.

- Les agents de balayage ou scavengers :

Pour éviter que les oxydes de plomb se déposent sur les parois de la chambre de combustion et sur divers organes (soupapes, bougies, pistons), il est nécessaire de favoriser leur évacuation. On incorpore donc, dans le carburant, associés aux alkyles de plomb, des produits appelés agents de balayage ou scavengers qui transforment les oxydes et autres composés réfractaires de plomb, en combinaisons plus volatiles évacuées avec les gaz d'échappement.

1.b Les divers effets du plomb sur les carburants :

L'accroissement des indices d'octane en fonction de la teneur en plomb dépend de multiples paramètres : composition du produit, nature de l'alkyle de plomb, action inhibitrice de certains composés. On exprime fréquemment l'efficacité des alkyles de plomb par le terme "susceptibilité".

V.3.1.3.2 Autres additifs :

Il semble très peu probable que l'on puisse encore découvrir puis développer de nouveaux additifs exerçant le même type d'action que le PTE et PTM. A l'image de ce que nous connaissons aux Etats unis, au Canada, au Japon et tout récemment en Allemagne, les essences sans plomb présenteront des indices d'octane plus faibles que ceux des supercarburants actuels. En effet, l'amélioration des techniques de raffinage et d'adjonction de composés organiques oxygénés ne permettront pas de compenser entièrement les pertes de RON et de MON entraînées par la suppression du plomb

V.3.1.4 Influence de la composition et des caractéristiques de base :

Lorsque nous examinons l'influence du plomb-PTE ou PTM sur les indices d'octane RON et MON de différentes fractions pétrolières, nous constatons que les composés paraffiniques présentent une susceptibilité élevée (Fig V.3.1.4.a et Fig V.3.1.4.b); tandis que les produits oléfiniques ou aromatiques sont au contraire assez peu susceptible au plomb (Fig V.3.1.4.c et Fig V.3.1.4.d)

De façon générale, la susceptibilité diminue lorsque le niveau d'octane initial croit. En pratique, les effluents de raffinerie de niveau d'octane élevé sont presque toujours riches en oléfines et aromatiques.

L'influence de la composition s'ajoute donc à celle du seuil pour aboutir finalement à une susceptibilité très modérée.

Nous citerons ici quelques valeurs repérées sur lesquelles s'établit un consensus de l'ensemble de la profession pétrolière :

- Pour le supercarburant (RON = 97), les alkyles de plomb apportent en moyenne un gain de 3 points avec 0.15 g pb/l et 6 points avec 0.4 g pb/l.

- Pour l'essence ordinaire (RON = 90), les accroissements sont un peu plus importants :

4 points avec 0.15 g Pb/l et 7 points avec 0.4 g pb/l

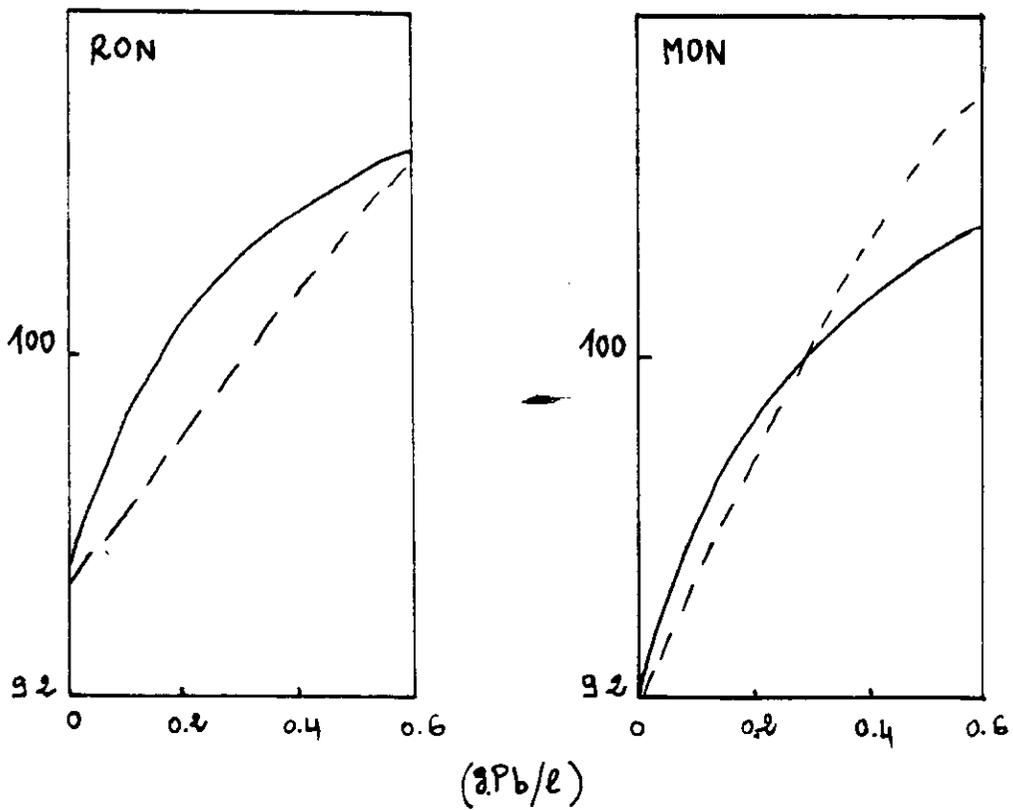
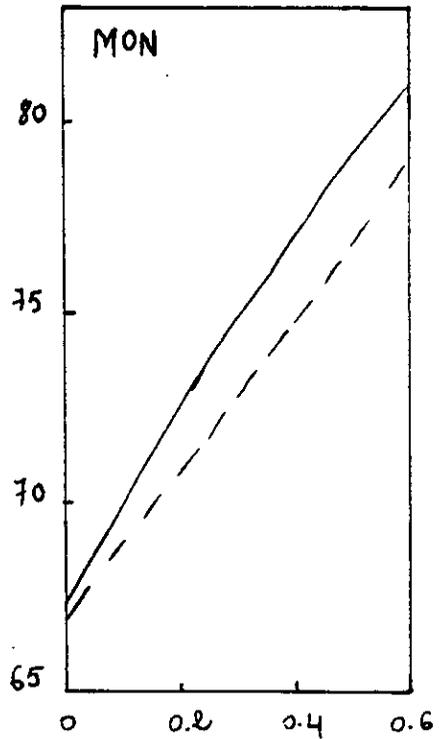
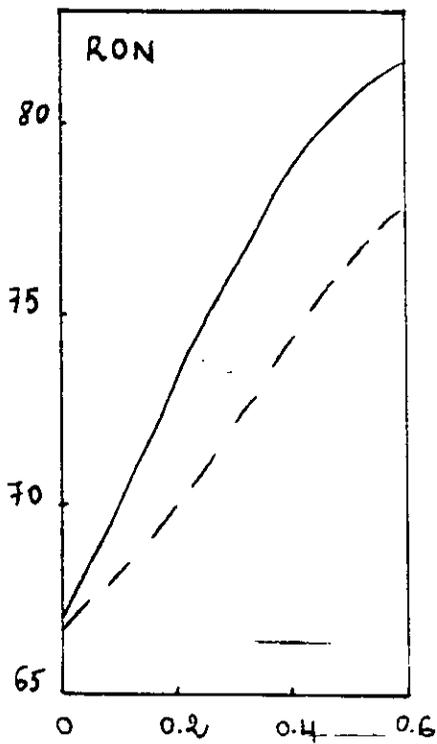


Fig. V.3.1.4.a : Alky Lat: 95% isoparaffines
4% paraffines

PTM : - - - -

PTE : _____



(g.Pb/l)

Fig. V.3.1.4.b :

Essence légère (SR): 51% paraffines
 40% isoparaffines
 7% naptènes

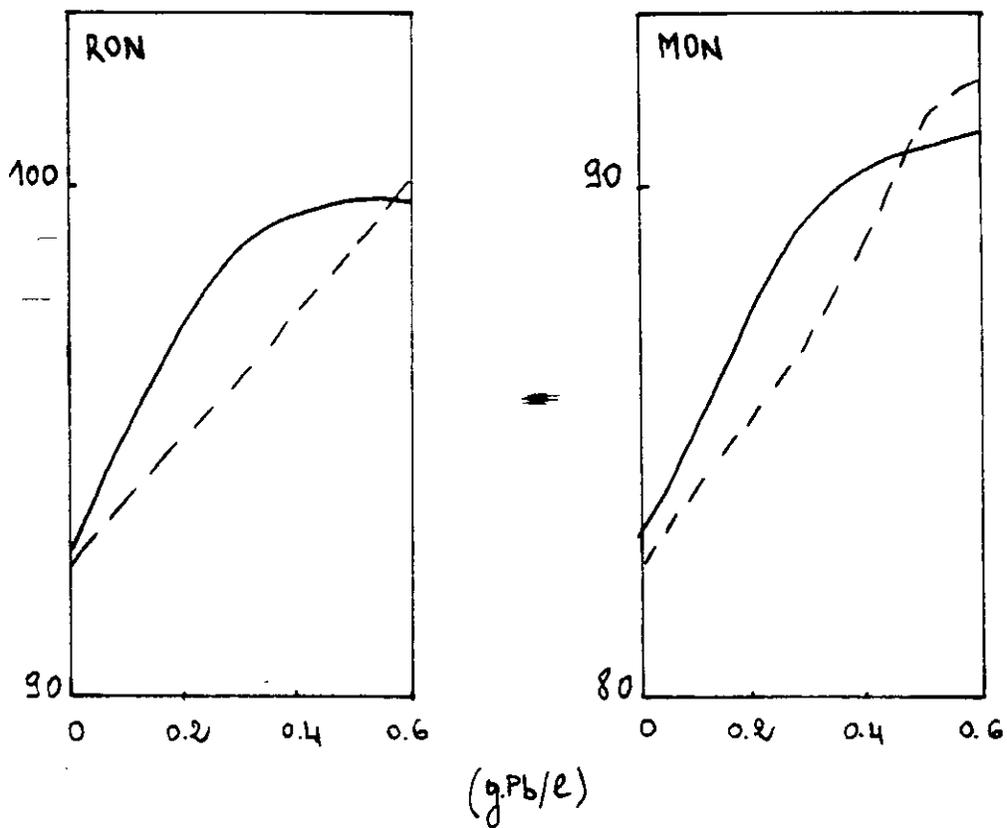


Fig. V. 3. 1. 4. c :

Reformat : 54% aromatiques

16% paraffines

28% isoparaffines

2% naphthenes

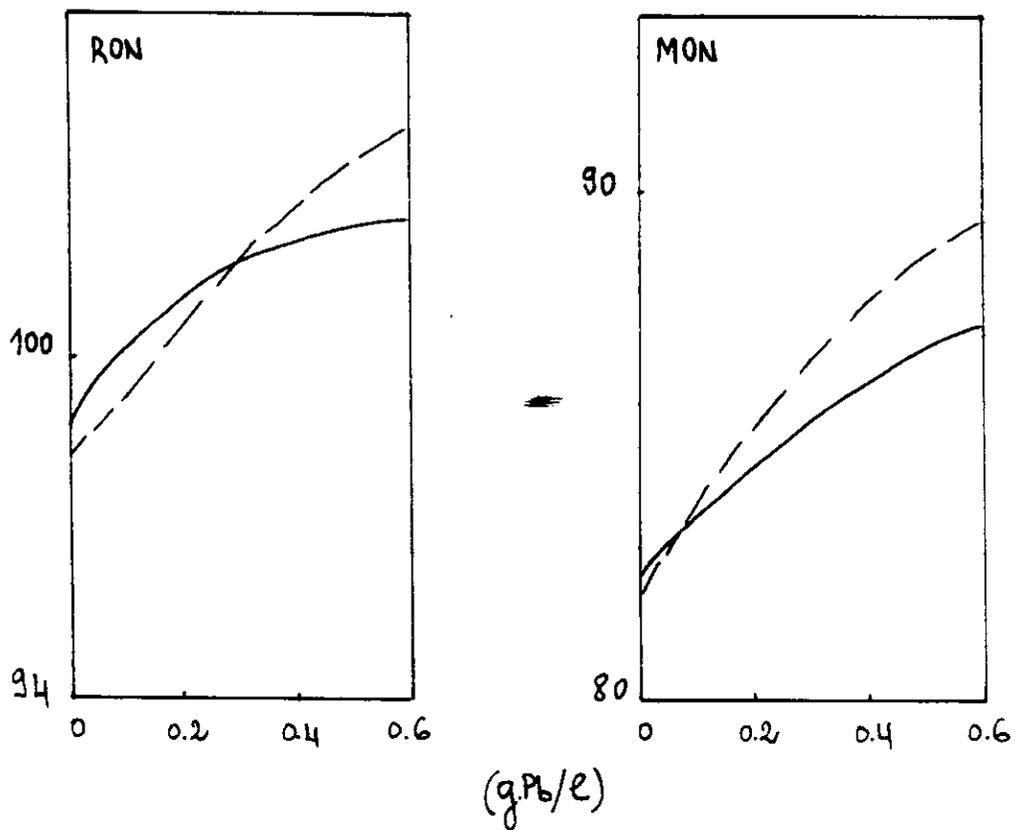


Fig. V 3. 1. 4. d :

Vapocraquage : 58% aromatiques
 15% oléfines
 10% cydo oléfines
 7% paraffines
 5% iso paraffines
 5% naphthenes

Les valeurs s'appliquent à quelques nuances près aussi bien au RON qu'au MON.

Si nous examinons le RON, l'efficacité relative des deux alkyles de plomb, dépend des caractéristiques de la base réceptrice. Généralement, à teneurs en plomb égales, le PTE est plus efficace que le PTM dans les essences paraffiniques ou à teneur modérée en oléfines et aromatiques. Dans des produits très oléfiniques ou très aromatiques (essence de vapocraquage, polmérisat), nous obtenons des gains plus importants avec le PTM (Fig V.3.1.4.e, Fig V.3.1.4.f) et Fig V.3.1.4.g)

V.3.2 Présentation du problème

A la raffinerie d'Alger, l'éthylation, qui consiste à rajouter de petites quantités de PTE, est réalisé sur des mélanges contenant de l'essence légère ou straight-run (SR) qui provient de la distillation atmosphérique du pétrole brut algérien et du platformat qui provient du reformage catalytique. Le but de cette opération est l'obtention des carburants auto normal et super d'indice d'octane 90 et 96 respectivement. Pour arriver à cette opération, le raffineur doit passer par des étapes de calculs. Et pendant ces étapes, il manipule des abaques qui lui permettent d'obtenir des paramètres nécessaires à l'aboutissement des calculs.

Deux types de situation peuvent se présenter pour le raffineur:

- Type 1 : Il peut fixer dès le départ, le taux d'éthylation et le résultat recherché serait les pourcentages en essence et en platformat à mettre en mélange.
- Type 2 : L'autre cas est : que disposant de certaines quantités d'essence et de platformat et voulant produire un type de carburant, il cherche le taux d'éthylation nécessaire à l'opération.

Dans les deux cas, la connaissance de certaines caractéristiques de l'essence et du platformat est nécessaire pour les calculs.

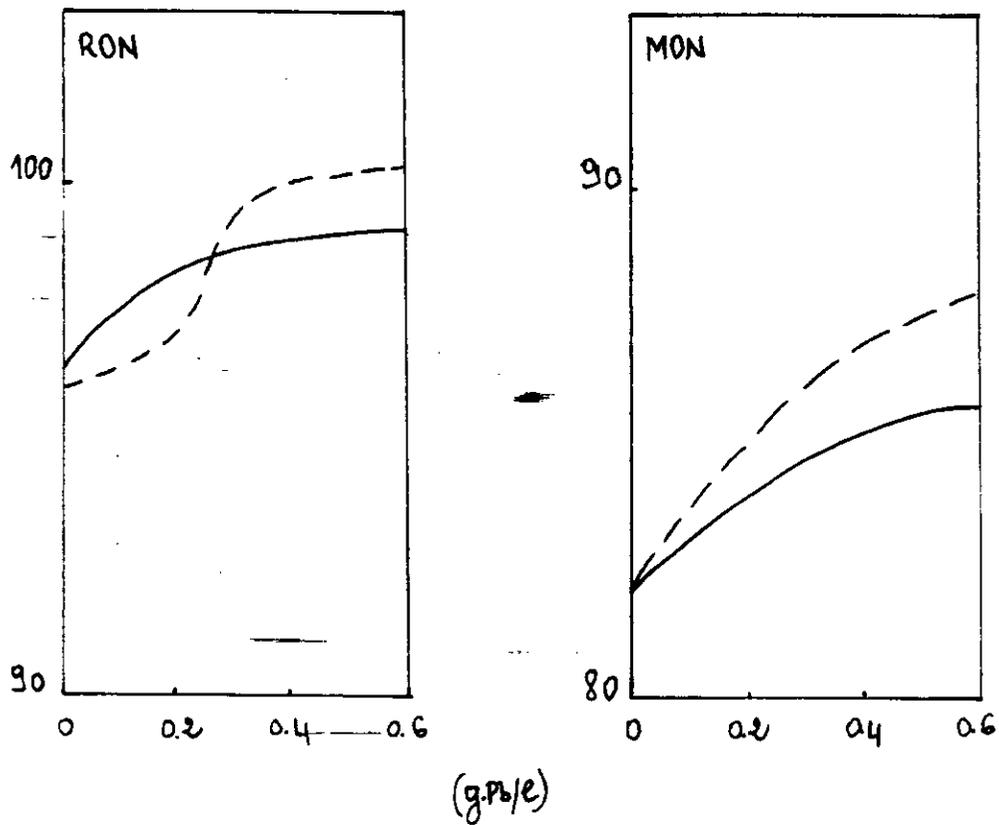
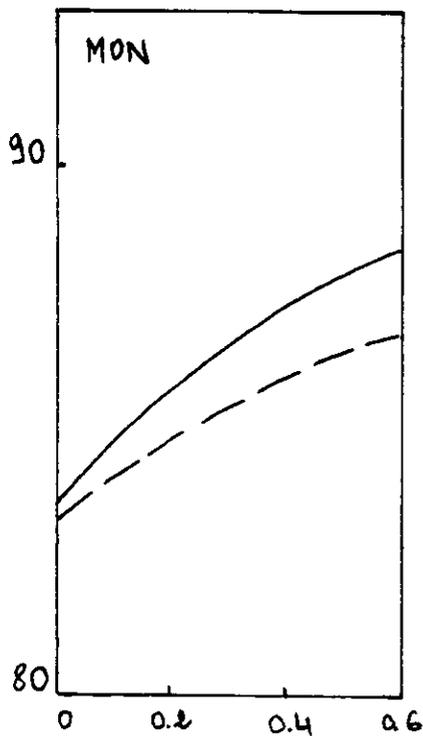
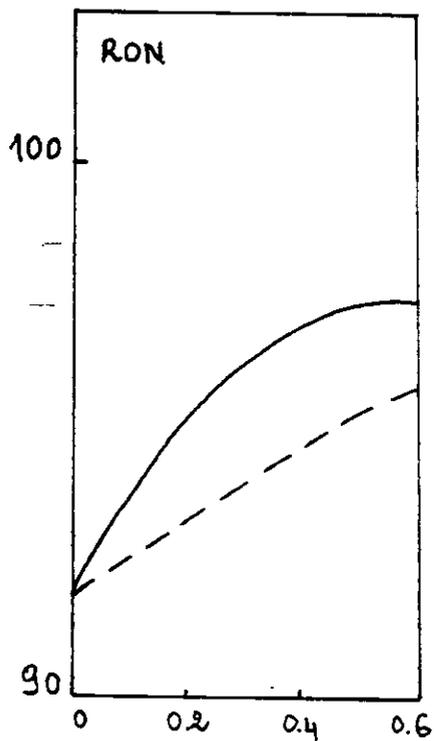


Fig. V.3.1.4.e:

polymerisat: 95% olefines

5% isoparaffines



(g. Pb/l)

Fig. V.3.1.4.f:

Essence totale F.C.C : 36% isoparaffines

4% paraffines

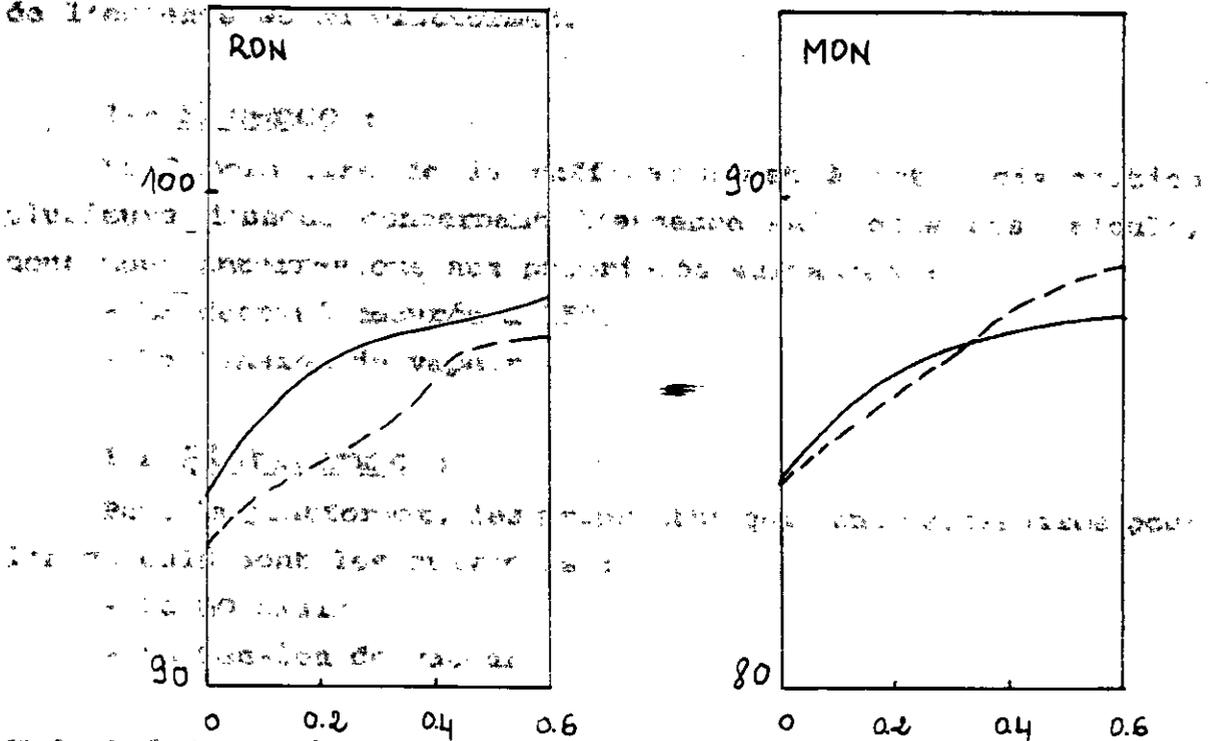
8% naphtenes

29% aromatiques

20% oléfines

V.3.1.2.1. Données de base

Les données de base sont les caractéristiques des moteurs de l'étape de l'étude de la combustion.

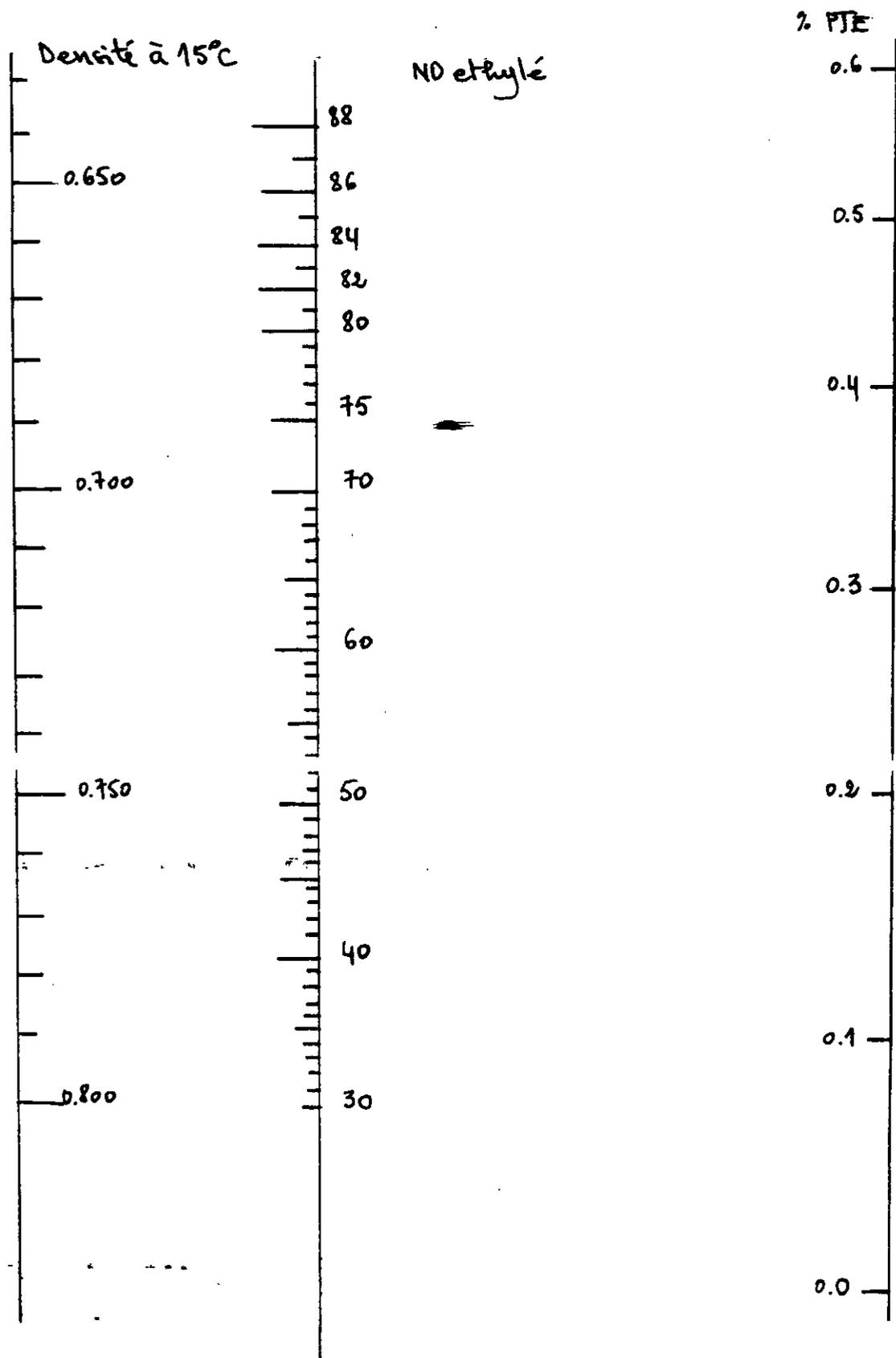


V.3.1.3 Caractéristiques de l'essence

La composition chimique de l'essence est déterminée par le rendement, la teneur en plomb, etc.

- Fig. V.3.1.4.g: Essence lourde F.C.C : 57% aromatiques
 15% iso paraffines
 3% paraffines
 6% naphthènes
 10% oléfines

Le rendement de combustion est déterminé par le rendement, la teneur en plomb, etc. Le rendement de combustion est déterminé par le rendement, la teneur en plomb, etc. Le rendement de combustion est déterminé par le rendement, la teneur en plomb, etc.



TV Limite : 850 g/cm²

Essence Straight Run HASSI MESSAOU
susceptibilité au plomb

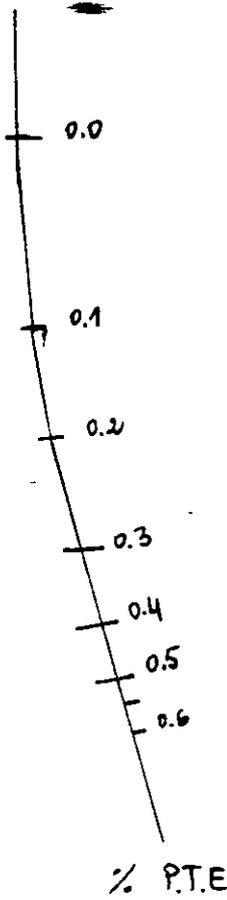
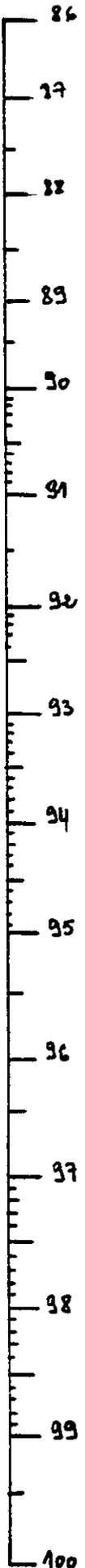
Fig. V. 3. 2. 2. a.

Noctau

Noctylé

Essences platforming avec charge.

HASSI MESSAOUD



susceptibilité au P.T.E. variable pour des T.V

comprises entre 300 et 500 Gf/cm²

Fig. V. 3. 2. 2. b

principe

nous posons : $X + Y = 1$ (33)

où X représente le pourcentage en essence

Y représente le pourcentage en platformat.

Pour déterminer ces pourcentages, nous devons résoudre l'équation suivante :

$$X(RBN)_1 + Y(RBN)_2 = 1 (RBN)_3 \quad (34)$$

où

$(RBN)_i$: est un facteur correctif : Research Blending Number

i = 1,2,3 : 1 essence

2 platformat

3 Carburant voulu

Les valeurs du RBN sont tabulés (Tableau V.3.2.1 en annexe 4)

nous pouvons réécrire l'équation (34) de la manière suivante

$$X (RBN)_1 + (1 - X) (RBN)_2 = (RBN)_3$$

$$X [(RBN)_1 - (RBN)_2] = (RBN)_3 - (RBN)_2$$

$$d'où X = \frac{(RBN)_3 - (RBN)_2}{(RBN)_1 - (RBN)_2}$$

La lecture des $(RBN)_i$ se fait de la manière suivante :

Une fois que nous avons déterminé le NO ethylé que ce soit de l'essence ou du platformat, et connaissant le NO du carburant voulu, nous posons : (NOethylé ou NO du carburant voulu)

$$NO_{\text{ethylé}} = I.J \quad (36)$$

où

I représente la partie entière de la valeur du NO ethylé

J représente la partie décimale de la valeur du NO ethylé

Les valeurs du RBN sont disposées dans le tableau (V.3.2.1)

comme suit :

	J_1	J_2	J_3	J_n
I_1	RBN	RBN			
.	RBN	RBN			
.
I_n

Ainsi connaissant I et J, nous déduisons le RBN correspondant

V.3.2.3 Mise en équation du principe

Le raffineur, lors de ces calculs, tirait certaines données des abaques par lecture. Maintenant pour lui éviter ceci, nous avons mis sous forme d'équation ces abaques. Et ainsi tout le principe de calcul est mis en équation.

Pour réaliser les équations des abaques, nous nous sommes basées sur la technique de construction des échelles (IV.4)

Comme dans la partie de la viscosité (V.2.2.2) nous avons établi un repère de coordonnées rectangulaires dans chaque abaque pour situer les échelles. Puis nous avons déterminé les modules des échelles.

Ces modules nous permettent de passer de la valeur de la propriété à l'ordonnée qui lui correspond ou vice-versa.

Dans ce qui suit nous décrirons les équations des échelles de chaque abaque.

V.3.2.3.1 Abaque de l'essence SR :

C'est un abaque à points alignés à échelles parallèles (Fig,V.3.2.2.a)

1.a échelle : densité de l'essence

C'est une échelle arithmétique, décrite par l'équation :

$$y_1 = (d_{10} - d_1) \cdot 100 \quad (37)$$

où

y_1 ordonnée du point considéré de l'échelle

d_1 densité lue en ce point

d_{10} densité du point pris comme point de référence de l'échelle ($d_{10} = 0.831$)

1.b échelle : taux d'éthylation (% PTE)

C'est une échelle homographique représentée par l'équation :

$$y_2 = U_2 \left[\frac{\% PTE}{1.6 + \%PTE} \right]$$

où

y_2 ordonnée du point considéré de l'échelle

%PTE taux d'éthylation lu en ce point.

U_2 module de l'échelle, déterminé par la méthode suivante :

Nous considérons deux points de l'échelle : 0 et 0.6 d'ordonnées respectivement y_0 et $y_{0.6}$, nous posons l'équation suivante :

$$y_{0.6} - y_0 = 20.15 = U_2 = \frac{0.6}{1.6 + 0.6}$$

nous trouvons $U_2 = 73.883$

d'où l'expression de y_2
$$y_2 = 73.883 \left[\frac{\%PTE}{1.6 + \%PTE} \right] \quad (38)$$

1.c Echelle : NO éthylé de l'essence (SR)

Cette échelle est plus complexe que les deux précédentes. De ce fait, nous l'avons divisée en plusieurs régions. Pour chaque région, nous avons trouvé le module et l'équation qui la décrit: nous posons : y_3 comme ordonnée du point considéré sur l'échelle et NOE comme le NO éthylé lu en ce point.

Dans le tableau (V.3.2.2) sont données les différentes équations et les différents domaines d'application ainsi que les modules respectifs.

Tableau V.3.2.2 : équations du NO ethyle de l'essence (SR)

Domaine de y_3	Module U_{3i}	Expression du NO
2.9 - 7.9	$U_{31} = 3.137$	$NOE = [(y_3 - 2.9) / U_{31} + \sqrt{30}]^2$
7.9 - 10.45	$U_{32} = 3.778$	$NOE = [(y_3 - 7.9) / U_{32} + \sqrt{50}]^2$
10.45 - 13.05	$U_{33} = 2.05 \cdot 10^{-5}$	$NOE = [(y_3 - 10.45) / U_{33} + (60)^3]^{1/3}$
13.05 - 15.70	$U_{34} = 1.563 \cdot 10^{-7}$	$NOE = [(y_3 - 13.05) / U_{34} + (70)^4]^{1/4}$
15.70 et plus	$U_{35} = 1.772 \cdot 10^{-15}$	$NOE = [(y_3 - 15.70) / U_{35} + (80)^8]^{1/8}$

y_3 est une fonction dont les paramètres sont déterminés par la résolution du système de cramer formé par les équations suivantes

$$\begin{cases} y_1 = ax_1 + b \\ y_2 = ax_2 + b \end{cases} \quad (39)$$

où

(x_1, y_1) représentent les coordonnées de la densité dans le repère fixé.

(x_2, y_2) représentent les coordonnées du taux d'éthylation dans le repère fixé.

Les paramètres sont a et b et y_3 est de la forme :

$$y_3 = ax_3 + b \quad (40)$$

(x_3, y_3) représentent les coordonnées du NO ethylé dans le repère fixé.

Dans notre travail, nous avons considéré, constantes, les variables suivantes : x_1, x_2, x_3 dont les valeurs sont respectivement 0, 18.60, 4.95 (cm) et ce suivant le repère fixé.

En résolvant le système de Cramer (39) nous trouvons :

$$a = (y_2 - y_1)/x_2 \quad (41)$$

$$b = y_1 \quad (42)$$

l'équation (39) devient : $y_3 = (y_2 - y_1) \cdot x_3/x_2 + y_1 \quad (43)$

En connaissant donc les valeurs de y_1 et de y_2 nous pouvons déterminer celle de y_3 puis calculer la valeur du NO ethylé correspondant à y_3 .

V.3.2.3.2 Abaque du platformat :

C'est un abaque à points alignés de multiplication (en forme de N) (Fig. V.3.2.2.b)

2.a Echelle : NOclair du platformat

C'est une échelle arithmétique décrite par plusieurs équations selon le domaine du NOclair.

Nous posons : NO, le NOclair du platformat, et y_1 l'ordonnée correspondant à la valeur du NO considéré dans l'échelle.

Dans le tableau (V.3.2.3) nous dressons les domaines du NOclair, les modules respectifs ainsi que les expressions respectives des ordonnées.

Tableau V.3.2.3 : équations des ordonnées y_1

Domaine du NO	Module U_{4i}	Expression de y_1
80 - 83	$U_{41} = 1.25$	$y_1 = (NO-80) U_{41}$
83 - 88	$U_{42} = 1.45$	$y_1 = (NO-83)U_{42} + 3.75$
88 - 89	$U_{43} = 1.7$	$y_1 = (NO-88)U_{43} + 11$
89 - 90	$U_{44} = 1.5$	$y_1 = (NO-89)U_{44} + 12.7$
90 - 91	$U_{45} = 1.9$	$y_1 = (NO-90)U_{45} + 14.6$
91 - 95	$U_{46} = 1.8$	$y_1 = (NO-91)U_{46} + 16.1$

2.b Echelle : taux d'éthylation (% PTE)

C'est une échelle fonctionnelle (échelle en puissance) oblique que nous avons représentée par deux équations et ce suivant le domaine du taux d'éthylation. Ces équations sont représentées dans le tableau (V.3.2.4) avec leurs domaines respectifs, ainsi que leurs modules.

Nous avons considéré y_2 comme étant l'ordonnée correspondant au taux d'éthylations (%PTE) repéré dans l'échelle.

Tableau V.3.2.4 : équations des ordonnées y_2

Domaine du (%PTE)	Module U_{5i}	Expression de y_2
0 - 0.2	$U_{51} = 11.2442$	$y_2 = 16.8 - U_{51} (\%PTE)^{0.65}$
0.2 - 0.6	$U_{52} = 39.45$	$y_2 = 12.85 - U_{52} [(\%PTE)^{0.1} - (0.2)^{0.1}]$

2.c Echelle : NO ethylé du platformat

Cette échelle regroupe deux types d'échelles. Ainsi le NO ethylé est donné par plusieurs équations et ce suivant les valeurs de l'ordonnée qui lui correspond dans l'échelle.

Pour des valeurs de l'ordonnée y_2 variant de 25.4 à 19.4 nous avons une échelle fonctionnelle (échelle en puissance) et pour des valeurs variant de 19.4 à 0 nous avons une échelle arithmétique.

Dans le tableau (V.3.2.5) nous donnons l'ensemble des équations donnant le NO ethylé avec leurs modules respectifs.

Tableau V.3.2.5 : équations du NO ethylé du platformat

Domaine de y_3	Module U_{6i}	Expression NO ethylé
25.4 - 20.8	$U_{61} = 6.234 \cdot 10^{-27}$	$NOP = [(25.36 - y_3) / U_{65} + (86)^{14}]^{1/14}$
20.8 - 19.4	$U_{62} = 5.789 \cdot 10^{-39}$	$NOP = [(20.71 - y_3) / U_{62} + (89)^{20}]^{1/20}$
19.4 - 10.5	$U_{63} = 1.8$	$NOP = 95 - (y_3 - 10.45) / U_{63}$
10.5 - 6.5	$U_{64} = 2$	$NOP = 97 - (y_3 - 6.45) / U_{64}$
6.5 - 0	$U_{65} = 2.15$	$NOP = 100 - y_3 / U_{65}$

Pour la détermination de l'expression de y_3 , le principe est toujours le même, il consiste en la résolution d'un système de Cramer. Ce système est formé par les équations suivantes :

$$\begin{cases} y_1 = ax_1 + b \\ y_2 = ax_2 + b \end{cases} \quad (44)$$

où

(x_1, y_1) représentent les coordonnées du NOclair dans le repère fixé.

(x_2, y_2) représentent les coordonnées du taux d'éthylation dans le repère fixé.

La résolution du système (4) nous donne $a = (y_2 - y_1) / x_2$ (45)

$$b = y_1 \quad (46)$$

$$y_3 = ax_3 + b$$

qui devient :

$$y_3 = (y_2 - y_1) \cdot \frac{x_3}{x_2} + y_1 \quad (47)$$

où (x_3, y_3) représente les coordonnées du NOéthylé dans le repère fixé.

Dans nos calculs, nous avons considéré :

$$x_1 = 0 \text{ cm}$$

$$x_2 = 19.3 \text{ cm}$$

et ce suivant le repère établi

Mais x_2 n'est pas constante, cette variable suit une évolution précise dans chaque domaine du taux d'éthylation en fonction de y_2 . Dans le tableau (V.3.26) nous donnons les équations correspondant à ces évolutions avec les domaines du taux d'éthylation.

Tableau V.3.2.6 : équations des abscisses x_2

Domaine du (%PTE)	Expression de x_2
0 - 0.1	$x_2 = 95 + (16.8 - y_2)/14$
0.1 - 0.2	$x_2 = 9.68 + (14.28 - y_2)/6$
0.2 - 0.6	$x_2 = 9.9 + (12.85 - y_2)/3.5$

Ainsi en déterminant les valeurs de y_1 , y_2 et x_2 nous déduisons la valeur de y_3 . Ce qui nous permet de calculer la valeur du NO ethylé correspondant.

Le raffineur, disposant de toutes ces équations relatives aux abaques, peut effectuer les calculs nécessaires à son travail sans faire de lecture sur les abaques.

V.3.3 Programme

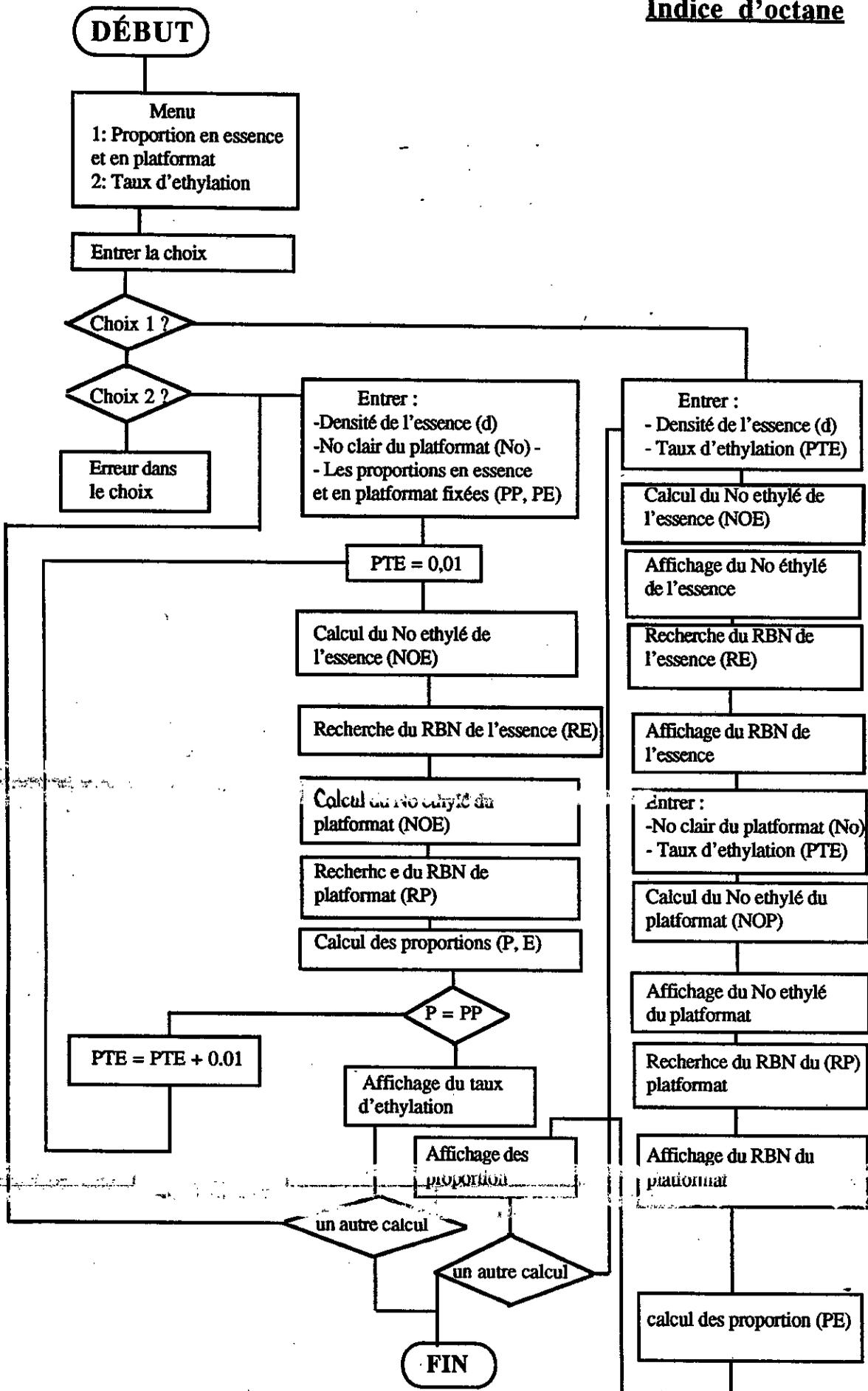
Le programme comporte deux parties :

- Partie effectuant le calcul des proportions en essence et en platformat
- Partie effectuant le calcul du taux d'éthylation.

Dans les deux parties, nous faisons appel aux mêmes procédures et nous utilisons un même fichier contenant les valeurs du RBN.

V.3.3.1 Principe de fonctionnement (organigramme) (voir page suivante)

Indice d'octane



V.3.3.2. programme:

```
program sidircine(input,output);
uses crt;
label 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10;
type raffinerie=record
  num:integer;
  x0,x1,x2,x3,x4,x5,x6,x7,x8,x9:real;
end;
var ethylation:text;
    ethyl:raffinerie;
a,b,y3,noc,pad,noe,nop,no,d,PTE,re,rp,rc,r,p,e,mud,y1,y2,d10,x20,x30:real;
pp,pe:real;
rep,i:integer;
f,answer:char;

procédure recherche;
label 1;
begin
  assign(ethylation,'a:\rbn.dat');
  reset(ethylation);
  repeat
    with ethyl do
    begin
      readln(ethylation,num,x0,x1,x2,x3,x4,x5,x6,x7,x8,x9);
      if num=i then
        1:if(pad>=0.0) and (pad<=0.05) then
          r:=x0
        else
          if (pad>0.05) and (pad<=0.15)
            then
              r:=x1
            else
              if(pad>0.15) and (pad<=0.25)
                then
                  r:=x2
              else
                if (pad>0.25) and (pad<=0.35)
                  then
                    r:=x4
                else
                  if (pad>0.35) and (pad<=0.45)
                    then
                      r:=x4
                  else
                    if (pad>0.45) and (pad<=0.55)
                      then
                        r:=x5
                    else
                      if (pad>0.55) and (pad<=0.65)
                        then
                          r:=x6
                      else
                        if (pad>0.65) and (pad<=0.75)
                          then
                            r:=x7
                          else
                            if (pad>0.75) and (pad<=0.85)
                              then
```

```

n:=x9
else
if(pad>0.85) and (pad<=0.95)
then
n:=x9

```

```

else
begin
i:=i+1;
pad:=0.0;goto i;
end;

```

```
end;
```

```
until(ethyl.num=i);
close(ethylation);
end;
```

```
procedure essence;
```

```
begin
```

```
d10:=0.831;
```

```
x20:=18.6;
```

```
x30:=4.95;
```

```
y1:=(d10-d)*100;
```

```
mud:=20.15*(1.6+0.6)/0.6;
```

```
y2:=mud*pte/(1.6+pte);
```

```
a:=(y2-y1)/x20;
```

```
b:=y1;
```

```
y3:=a*x30+b;
```

```
if(y3>=2.9)and(y3<=7.9)
```

```
then
```

```
noe:=sqr((y3-2.9)/3.137+sqrt(30))
```

```
else
```

```
if(y3>7.9)and(y3<=10.45)
```

```
then
```

```
noe:=sqr((y3-7.9)/3.778+sqrt(50))
```

```
else
```

```
if(y3>10.45)and(y3<=13.05)
```

```
then
```

```
noe:=exp(1/3*ln((y3-10.45)/2.05e-5+exp(3*ln(60))))
```

```
else
```

```
if(y3>13.05)and(y3<=15.7)
```

```
then
```

```
noe:=exp(1/4*ln((y3-13.05)/1.563e-7+exp(4*ln(70))))
```

```
else
```

```
noe:=exp(1/8*ln((y3-15.7)/1.772e-15+exp(8*ln(80))));
```

```
i:=trunc(noe);
```

```
pad:=noe-i;
```

```
end;
```

```
procedure platformat;
```

```
begin
```

```
if(no>=80) and (no<=83) then
```

```
y1:=(no-80)*1.25
```

```
else
```

```
if(no>=83) and (no<=88)
```

```
y1:=3.75+(no-83)*1.35
```

```
else
```

```
if(no>=88) and (no<=89)
```

```
then
```

```
y1:=11+(no-88)*1.7
```

```
else
```

```
if(no>=89) and (no<=90)
```

```
then
```

```
y1:=12.7+(no-89)*1.5
```

```
else
```

```
if(no>90) and (no<=91)
```

```

                                y1:=14.6+(no-90)*1.9
else
if (no>=91) and (no<=95)
then
y1:=16.1+1.8*(no-91);
if (pte>=0.0) and (pte<=0.1)
then
begin
y2:=16.8-11.2442*(exp(0.65*ln(pte)));
x20:=9.5+(16.8-y2)/14;
end
else
if (pte>=0.1)and (pte<=0.2)
then
begin
y2:=16.8-11.2442*(exp(0.65*ln(pte)));
x20:=9.68+(14.28-y2)/6;
end
else
if (pte>=0.2)and (pte<=0.6)
then
begin
y2:=12.85-39.45*(exp(0.1*ln(pte))-exp(0.1*ln(0.2)));
x20:=9.9+(12.85-y2)/3.5;
end;
a:=(y2-y1)/x20;
b:=y1;
x30:=19.3;
y3:=A*x30+b;
if (y3>=0.0) and (y3<=6.45) then
nop:=100-y3/2.15
else
if (y3>=6.45) and (y3<=10.45)
then
nop:=97-(y3-6.45)/2
else
if (y3>=10.45) and (y3<=17.65)
then
nop:=95-(y3-10.45)/1.8
else
if (y3>=17.65) and (y3<=20.71)
then
nop:=exp(1/18*ln((20.71-y3)/5.271e-34+exp(18*ln(89))))
else
nop:=exp(1/14*ln((25.36-y3)/6.234e-27+exp(14*ln(86))));

i:=trunc(nop);
pad:=nop-i;
end;
begin
(*****programme principal*****)

clrscr;
writeln;
writeln('-----ETHYLATION-----');
write('***De programme regard le probleme d'ethylation en ses deux ');
writeln('versions***');
writeln('1: En fixant le taux d'ethylation , vous cherchez les ');
writeln('compositions en essence et en platformat de votre carburant');
writeln;
writeln('2: En fixant à l'avance la composition du carburant, ');
writeln('vous voulez determiner la quantité de pte necessaire');
writeln;
repeat
i:writeln(' pour le calcul des proportions taper 1');
writeln(' pour le calcul du taux d'ethylation taper 2');

```

```

readln(re);
case rep of
1:begin
writeln('-----');
writeln('****calcul des proportions en essence et en platformat****');
writeln('-----');
writeln;
repeat

writeln(' la densité de l'essence à 15°c est comprise entre: ');
writeln(' [ 0.5 - 0.831 ] ');
2:write('donner la densite à 15°c de l'essence ');readln(d); writeln;
if ((d<=0.831)and(d>=0.5))
then
begin
writeln(' le taux d'ethylation est compris entre : ');
writeln(' [ 0.0 - 0.6 ] ');
3:write('donner le taux d'ethylation ');readln(pte);writeln;
if ((pte>=0.0)and(pte<=0.6))
then
begin
essence;
recherche;
re:=r;
end
else
begin
writeln('votre pte ne convient pas aux calculs');writeln;
goto 3;
end;
end
else
begin
writeln('votre valeur de densité ne convient pas aux calculs');writeln;
goto 2;
end;
writeln;
writeln('le NOclair du platformat est compris entre: ');
writeln(' [ 80 - 95 ] ');
4:writeln('donner le NO clair du platformat');readln(no);writeln;
if((no<=95)and(no>=80))
then
begin
platformat;
recherche;
rp:=r;
writeln;
end
else
begin
writeln('votre valeur de NO ne convient pas aux calculs');
goto 4;
end;
writeln('donner l'indice d'octane du carburant voulu');
readln(noc);writeln;
write('le NOclair du platformat est ');
writeln(noc);
pad:=noc-1;
recherche;
rc:=r;
p:=(rc-re)/(rp-re);
e:=1-p;
if (p<0)or(p>1)
then
begin
writeln('le calcul ne peut etre fait avec ces données'); writeln;
goto 9;

```

```

end;
writeln(' les proportions en essence et en platformat sont: ');
writeln('          essence: ',100*e:4:2, ' %');writeln;
writeln('          platformat: ',100*p:4:2, ' %');writeln;
writeln(' le NO ethylé de l'essence est: ',noe:4:2, '');
writeln(' le RBN de l'essence est: ',re:4:2, '');
writeln(' le NO ethylé du platformat est: ',nop:4:2, '');
writeln(' le RBN du platformat est: ',rp:4:2, '');writeln;
9:write('voulez-vous faire un autre calcul de proportions? (o/n) ');
readln(f);writeln;
until f='n';
writeln('-----fin de calcul des proportions-----'); writeln;
end;
2:begin
writeln('-----');
writeln('***** calcul du pourcentage d'ethylation ****');
writeln('-----');writeln;
repeat
5:write('donner le pourcentage en platformat ');readln(pp);writeln;
if (pp>=0) and (pp<=100)
then
begin
writeln(' la densité de l'essence est comprise entre: ');
writeln(' [ 0.5 - 0.831 ]');
6:write('donner la densite à 15°c de l'essence ');readln(d);writeln;
if ((d>=0.5)and(d<=0.831))
then
begin
writeln('le NO clair du platformat est compris entre: ');
writeln(' [ 80 - 95 ] ');
7:write('donner le NO clair du platformat ');readln(no);writeln;
if ((no>=80)and(no<=95))
then
begin
write('donner le NO du carburant voulu ');readln(noc); writeln;
writeln('----- Patientez svp:recherche en cours');writeln;
pte:=0.6;
repeat
essence;
recherche;
re:=r;
platformat;
recherche;
rp:=r;
i:=trunc(noc);
pad:=noc-i;
recherche;rc:=r;
if rp=re
then goto 8;
p:=(rc-re)/(rp-re);
e:=1-p;
8:pte:=pte-0.01;
until ((abs(p*100-pp)<0.1)or(pte<0));
if pte<0
then
begin
writeln('le probleme d'ethylation ne peut etre resolu avec ces donnees');
writeln;goto 10;
end;
writeln('le taux d'ethylation recherché est: pte=',pte+0.01:4:2, '');
writeln;
writeln(' le NO ethylé de l'essence est ',noe:4:2, '');
writeln(' le NO ethylé du platformat est ',nop:4:2, '');
writeln(' le RBN de l'essence est ',re:4:2, '');
writeln(' le RBN du platformat est ',rp:4:2, '');
writeln(' le NO du carburant est ',noc:4:2, '');

```

```

writeln(' le pourcentage en essence est de ',e*100:4:2, '%');
writeln(' le pourcentage en platformat est de ',p*100:4:2, '%');
writeln;
end
else
begin
  writeln('votre valeur de NO ne convient pas aux calculs');writeln;
  goto 7; writeln;
end;
end
else
begin
  writeln('votre valeur de la densité ne convient pas aux calculs');
  goto 6; writeln;
end;
end
else
begin
  writeln('votre valeur du pourcentage n''a pas un sens physique');
  goto 5;writeln
end;
10:writeln('voulez-vous faire un autre calcul de pte? (o/n)');
readln(f);
until f='n';
writeln('-----fin de calcul du pte-----');
end
else
begin
  writeln('vous avez tapé un mauvais chiffre');writeln;goto 1;
end;
end;
writeln('voulez-vous faire un autre calcul ? (o/n) ');
  readln(answer);
  until answer='n';
  writeln('-----FIN DE CALCUL-----');

readln;
end.

```

V.4 La tension de vapeur des corps purs

V.4.1 Théorie

V.4.1.1 Définition [19]

La tension de vapeur d'un corps pur mesure la tendance des molécules à s'échapper d'une phase liquide pour engendrer une phase vapeur en équilibre thermodynamique avec la phase liquide.

La tension de vapeur est une fonction croissante de la température et est spécifique à chaque corps pur.

A son point d'ébullition dans l'atmosphère, la tension de vapeur d'un corps pur est égale à la pression atmosphérique.

V.4.1.2 Calcul de la tension de vapeur [20]

2.1 Equation de Clausius - Clapeyron :

Lorsque la phase liquide et la phase vapeur d'un fluide pur sont en équilibre, l'égalité des potentiels chimiques, pression et température des deux phases, entraîne l'équation suivante :

$$d(\ln(P)) = \frac{-\Delta H_v}{R \cdot \Delta Z_v} \cdot d\left(\frac{1}{T}\right) \quad (48)$$

où :

P : tension de vapeur du liquide ou pression du gaz saturé

$\Delta H_v / \Delta Z_v$: chaleur de vaporisation molaire du liquide.

R : constante des gaz parfaits

T : température absolue en Kelvin

L'équation (48) est connue sous le nom de l'équation de Clausius-Clapeyron.

La plupart des corrélations donnant la tension de vapeur découlent de l'intégration de cette équation.

Quand ceci est fait, une hypothèse doit être émise concernant la dépendance de ΔH_v et de ΔZ_v en fonction de la température.

La plus simple approche est de considérer le terme $\Delta H_v / (R \cdot \Delta Z_v)$ constant et indépendant de la température.

La constante d'intégration étant A, l'équation (48) devient :

$$\ln P_v = A - \frac{B}{T} \quad (49)$$

$$\text{où : } \bar{B} = \frac{\Delta H_v}{R\Delta Z_v} \quad (49.1)$$

ΔH_v : enthalpie de vaporisation

$$\Delta Z_v = Z_g - Z_l = P/RT (V_{sv} - V_{sl}) \quad (49.2)$$

V_{sv} : volume de la vapeur saturée

V_{sl} : volume du liquide saturé

Cette équation est parfois appelée équation de Clapeyron, c'est une bonne approximation de la tension de vapeur mais dans des intervalles de températures restreints

2.2 Diagramme de Cox :

L'équation (49) montre que nous pouvons obtenir une représentation linéaire de la tension de vapeur en utilisant une échelle logarithmique de pression en ordonnée et une échelle hyperbolique de température en abscisse.

En choisissant l'hexane comme hydrocarbure de référence, il suffit de préparer l'échelle logarithmique de pression, puis de tracer sur le diagramme une droite de pente positive correcte, nous utilisons ensuite les données de tension de vapeur de l'hexane pour faire correspondre aux pressions en ordonnée, les valeurs des températures sur l'axe des abscisses, ce qui définira l'échelle horizontale.

Le report des données de tension de vapeur des autres hydrocarbures conduit finalement à tracer un réseau de droite connu sous le nom de Cox Chart.

CALINGAERT et DAVIS ont montré que l'échelle de température dans la "Cox Chart" est équivalente à la fonction $(T + C)^{-1}$, où C est approximativement égale à -43K pour un grand nombre de composés dont la température d'ébullition est comprise entre 0 et 100°C et ceci lorsque la substance de référence est l'eau.

2.3 L'équation d'Antoine

Antoine propose une simple modification de l'équation (49) :

$$\ln Pv = A - \frac{B}{T + C} \quad (50)$$

- Quand $C = 0$, nous identifions cette équation à celle de Clapeyron.
 - Plusieurs lois et hypothèses ont été émises pour relier la constante C à la température d'ébullition de plusieurs classes de composés, mais ces lois sont restées très approximatives, et le seul moyen sûr d'estimer C est de consulter les données expérimentales.

Les valeurs de A, B et C sont tabulées pour P_v en mmHg et T en Kelvin (Tableau V.4.1.1 en Annexe 4)

- Bien que précise, l'équation d'Antoine ne peut couvrir qu'un domaine de pression allant de 10 à quelques 1500 mmHg.

Au delà de cet intervalle, l'équation d'Antoine ne doit pas être utilisée.

2.4 L'équation de Pitzer :

Une autre corrélation donnant des résultats très satisfaisants et dans un domaine de température beaucoup plus large, est l'équation de Pitzer :

$$\ln(Pr)_r = f^{(0)}(Tr) + w f^{(1)}(Tr) \quad (51)$$

où : P_r et T_r : pression et température réduites

W : facteur acentrique du corps en question.

Les fonctions $f^{(0)}$ et $f^{(1)}$ sont données en fonction de la température réduite, sous formes analytiques par Lee et Kesler :

$$f^{(0)} = 5.92714 - \frac{6.09648}{Tr} - 1.28862 \cdot \ln(Tr) + 0.169347 \cdot Tr^6 \quad (51.1)$$

$$f^{(1)} = 15.2518 - \frac{15.6875}{Tr} - 13.4721 \cdot \ln(Tr) + 0.43577 \cdot Tr^6 \quad (51.2)$$

Quand l'équation (51) est utilisée, il est recommandé de calculer le facteur acentrique w avec l'équation suivante :

$$w = - \log (Pv) \Big|_{Tr = 0.7} - 1.0 \quad (51.3)$$

L'équation (51) donne la tension de vapeur avec une erreur de 1 à 2% par rapport à l'expérience pour $T \leq T_{ob}$

Pour $T > T_{ob}$, l'erreur peut atteindre quelques unités.

2.5 Intégration de l'équation de Clapeyron.

Les corrélations résultant de l'intégration de l'équation de Clapeyron ne diffèrent que par leurs termes correctifs introduits par chaque auteur pour décrire les relations $\Delta H_v = f(t)$ et $\Delta Z_v = f(T)$ avec plus de précision.

ΔZ_v est pris en général égal à l'unité, cependant l'une des corrélations les plus connues pour l'avoir estimé avec précision est due à HAGGENMACHER

$$\Delta Z_v = \left[1 - \left(\frac{P_r}{T_r^3} \right) \right]^{1/2} \quad (52)$$

Quant à ΔH_v , nous pouvons l'assimiler à une fonction linéaire de la température, mais ceci n'est pas valable aux températures très élevées.

$$\Delta H_v = a + bT \quad (53)$$

En remplaçant ΔH_v par $(a + bT)$ dans l'équation de CLAUSIUS-CLAPEYRON (48), nous obtenons une nouvelle équation attribuée à KIRCHOFF et RANKINE

$$\ln (Pr) = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln (T) \quad (54)$$

2.6 La corrélation de Reidel :

Reidel modifie l'équation précédente en lui ajoutant un terme en T^6 , et ceci pour tenir compte du fait que ΔZ_v ne peut être assimilé à l'unité aux températures très élevées.

$$\ln P_v = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln (T) + D \cdot T^6 \quad (55)$$

Pour déterminer les constantes A, B, C et D, Reidel définit un paramètre α tel que :

$$\alpha = \frac{d \ln (Pv_r)}{d \ln (Tr)} \quad (56)$$

RIEDEL et PLANCK ont montré à partir de l'examen des données expérimentales que :

$$\frac{d\alpha}{dT_r} = 0 \text{ pour } T_r = 1 \quad (57)$$

Soit $\alpha = \alpha_c$ au point critique, en reliant D à α_c , REIDEL trouve :

$$\ln P_{vr} = A^* - \frac{B^*}{Tr} + C^* \cdot \ln(Tr) + D^* \cdot Tr^6 \quad (58)$$

où

$$A^* = -35 Q \quad (58.1)$$

$$B^* = -36 Q \quad (58.2)$$

$$C^* = 42 Q + \alpha c \quad (58.3)$$

$$D^* = -Q \quad (58.4)$$

Q étant donné par l'équation suivante :

$$Q = 0.0838 (3.758 - \alpha_c) \quad (58.5)$$

Connaissant les valeurs de α_c , P_c et T_c , nous pouvons utiliser l'équation (58), mais comme il est difficile d'avoir α à partir de l'équation (56), REIDEL propose de le déterminer avec une équation tirée à partir de la combinaison des équations (58.4) et (56) prises pour $P = 1 \text{ atm}$ et $T = T_{eb}$

nous obtenons alors :

$$\alpha_c = \frac{0.315 \cdot \psi_b + \ln (Pc)}{0.0838 \cdot \psi_b - \ln (T_{rb})} \quad (59)$$

où

$$\psi_b = -35 + \frac{36}{T_{br}} + 42 \cdot \ln(T_{br}) \cdot (T_{br})^6 \quad (59.1)$$

$$T_{br} = \frac{T_{eb}}{T_c} \quad (59.2)$$

T_{eb} : température d'ébullition

2.7 Corrélation de FROST-KALKWARF et THODOS :

FROST et KALKWARF ont intégré l'équation de CLAPEYRON, en prenant $\Delta H_v = a + bT$ et en estimant ΔZ_1 avec l'équation d'état de VAN DER WAALS, ils aboutissent à :

$$\ln P_v = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln (T) + \frac{D \cdot P_v}{T^2} \quad (60)$$

où

$$D = \frac{27 T_c^2}{64 P_c} \quad (60.1)$$

$$C = 0.7816 \cdot B + 2.67 \quad (60.2)$$

En utilisant les données du point critique, l'équation (60) devient :

$$\ln (P_v)_r = B \left(\frac{1}{T_r} - 1 \right) + C \cdot \ln (T_r) + \frac{27}{64} \left(\frac{(P_v)_r}{T_r^2} - 1 \right) \quad (61)$$

où :

$(P_v)_r$: pression de vapeur réduite

$$(P_v)_r = P_v / P_c \quad (61.1)$$

$$B = \frac{\ln (P_c) + 2.67 \cdot \ln (T_{br}) + (27/64) \cdot ((1/(P_c \cdot T_{br}^2)) - 1)}{1 - 1/T_{br} - 0.7816 \ln (T_{br})} \quad (61.2)$$

HARLACHER et BRAUN explicitent toutes les constantes apparaissant dans l'équation (60) et ceci pour chaque corps pur en utilisant ses données expérimentales, ce qui donne des résultats conformes à la réalité. Quand cette approximation est faite, P est en mmHg et T en Kelvin.

V.4.2 Présentation du problème

V.4.2.1 Comparaison des corrélations : [20]

La plupart des corrélations donnant la tension de vapeur exigent la connaissance des température et pression critiques (PITZER, FROST-THODOS, RIEDEL...). Quelques unes nécessitent en plus la connaissance du point d'ébullition normal (FROST-THODOS, RIEDEL,...).

D'autres équations comme celles d'Antoine et Harlacher-Braun emploient des constantes spécifiques pour chaque corps et sont donc plus lourdes à manipuler.

Pour ce qui est de la précision, l'équation d'Antoine est recommandée lorsque ses constantes A,B,C sont connues, mais elle ne doit pas être utilisée au delà de son domaine d'application ($P \leq 1500$ mmHg).

Pour les autres corrélations, il est difficile de préférer une équation à une autre du fait des résultats très voisins qu'elles fournissent. Toutes les corrélations cités (V.4.1.2) ne demandent que des calculs très simples en utilisant un ordinateur; il suffit de réunir toutes les données nécessaires.

Les équations de HARLACHER-BRAUN et FROST-THODOS n'étant pas explicite en P_v , nécessitent des solutions itératives.

V.4.2.2 Recommandations d'utilisation

- $P_v < 10$ mmHg, aucune des corrélations précédentes (V.4.1.2) n'est à recommander.
- $P_v < 1500$ mmHg, quand ses constantes sont connues, l'équation d'Antoine est la plus conseillée.
- $10 < P_v < P_c$ (mmHg), si les constantes de Harlacher-Braun (A,B,C,D) sont connues, cette équation est recommandée.
- Pour les fluides non-polaires, les équations de PITZER, RIEDEL et FROST-THODOS donnent toutes de bons résultats, mais exigent la connaissance de P_c , T_c et T_{ob} . Pour les liquides polaires, la précision est moins bonne.

V.4.2.3 Equations utilisées.

Dans le programme informatique que nous avons réalisé, les équations utilisées sont les suivantes :

- Equation d'ANTOINE (50)
- Equation de PITZER (51)
- Equation de FROST-THODOS (61)
- Equation de RIEDEL (58)
- Equation d'HARLACHER-BRAUN (60)

Pour le choix de ces équations, nous nous sommes basées sur les résultats qu'elles fournissent et avec quelle précision ils sont donnés. Aussi un autre paramètre important qui nous a aidé dans le choix est le nombre de composés pour lesquels le calcul est possible. Ce paramètre est bien sûr relatif à la disponibilité des données expérimentales, de ces composés qui sont essentielles dans les calculs. Sans oublier l'étendu du domaine d'application de ces équations. Les paramètres des équations utilisées ainsi que les données nécessaires dans les calculs sont tabulés (Tableau V.5.2.1 en annexe 4)

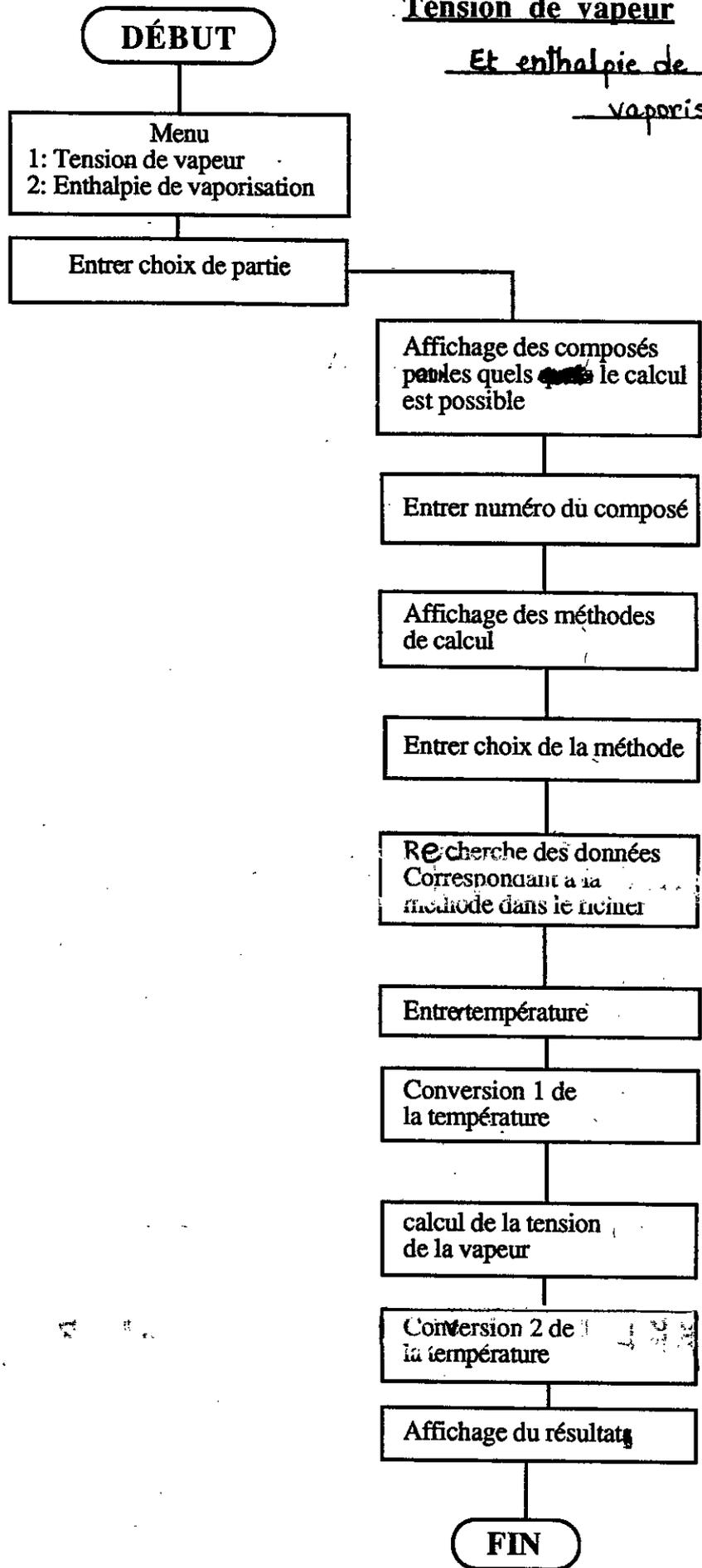
V.4.3 Programme

Le programme, en plus des différentes méthodes de calcul de la tension de vapeur qu'il propose à l'utilisateur, permet à celui-ci de faire entrer la température de calcul dans différentes unités. Le résultat est aussi donné dans différentes unités. Les données expérimentales nécessaires dans les équations sont regroupées dans un fichier que l'utilisateur appelle dans le programme.

V.4.3.1 Principe de fonctionnement du programme (organigramme, voir page suivante)

Tension de vapeur

Et enthalpie de
vaporisation



V.4.3.2 Programme

```

program pression (input,output);
uses crt;
label 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12;
type
  identification=record
    num:integer;
    ncomp:string[27];
    a,b,c,ts,ti:real;
  end;
  resolution=record
    num:integer;
    ncomp:string[27];
    omega,tcr,tcong,teb,pcr:real;
  end;
  equation=record
    num:integer;
    a,b,c,d,tcong,tcr:real;
  end;
var
  f1,f2,f3:text;
  identif1:identification;
  identif2:resolution;
  identif3:equation;
  unitet:string[20];
  j,answer,l,f,k,w:char;
  aa,ba,ca,ah,bh,ch,dh,pv1,pv2,pv3,pv4,om,tc,tr,pv,p,rh,temp:real;
  dz,deltahv,hv1,hv2,n,fn,alpha,q,ar,br,cr,dr,tb,pc,bf1,bf2,bf,cf,rf:real;
  i,numc,s,rep,ans,m,n:integer;
procedure conversion;
begin
  case j of
    'r':begin
      temp:=temp*1.8;unitet:=' rankine';
      end;
    'k':begin
      temp:=temp;unitet:=' kelvin';
      end;
    'f':begin
      temp:=temp*1.8-459.7;unitet:=' farenheite';
      end;
    'c':begin
      temp:=temp-273.0;unitet:=' degrés celcius';
      end;
  end;
end;
procedure temperature;
label 1;
begin
1:writeln('si l' unite de votre temperature est le rankine taper r');
  writeln('si c' est le farenheit taper f');
  writeln('si c' est le kelvin taper k');
  writeln('si c' est le celcius taper c');
  readln(j);
  case j of
    'r':temp:=temp/1.8;
    'k':temp:=temp;
    'f':temp:=(temp+459.7)/1.8;
    'c':temp:=temp+273
  else
    begin
      writeln('vous avez tape une mauvaise lettre');
      goto 1;
    end;
  end;
end;

```

```

end;
end;
procedure recherche2;
begin
i:=1;
repeat
with identif2 do
begin
readln(f2,num,ncomp,omega,tcr,tcong,teb,pcr);
if num=numc
then
begin
om:=omega;tc:=tcr;tb:=teb;pc:=pcr;
end;
end;
until (identif2.num=numc);
end;
procedure recherche1;
begin
i:=1;
repeat with identif1 do
begin
readln(f1,num,ncomp,a,b,c,ts,ti);
if num=numc
then
begin
aa:=a;ba:=b;ca:=c;
end;
end;
until (identif1.num=numc);
end;

begin
clrscr;
      (*****programme principal*****)
  writeln;
  writeln('**ce programme calcule la Tension de Vapeur des corps figurant**');
  writeln(' **dans la listeainsi que leurs enthalpies de **');
  writeln(' **Vaporisation à la pression atmosphérique**');
  writeln;
  repeat
  write('voulez vous faire un calcul ? (o/n) ');readln(answer);
    if answer='o'
    then
    begin
      writeln('          pour un calcul de tension de vapeur : taper 1');
      writeln('          pour un calcul d'enthalpie de vaporisation : taper 2');
      write('          '); readln(rep);
      case rep of
      1:begin
      writeln('partie calcul de la tension de vapeur');
      1:writeln('la liste des composes pour lesquels le calcul est possible. ');
      writeln('Identifier le (ou les) compose(s) par son (ou leurs) numero(s)');
      assign(f1:='vent.dat'); reset(f1);
      repeat
      i:=1;
      repeat
      with identif1 do
      begin
      readln(f1,num,ncomp);
      writeln(num,ncomp);
      i:=i+1;
      end;
      until (i=21);

```

```

s:=s+20;readln;
until(s=120); close(f1);

2:write('donner le numero de votre compose '); readln(numc);
assign(f1,'a:\ant.dat');reset(f1);
i:=1;
repeat with identif1 do
begin
readln(f1,num,ncomp,a,b,c,ts,ti);
if num=numc
then
begin
write('votre compose est le :',ncomp,'?(o/n) ');
readln(f);
if f='n'
then
begin
write('Erreur dans l'identification.Taper return pour revoir la liste');
readln;goto 1;
end;
end
else i:=i+1;
end;
until((identif1.num=numc)or(i>120)); close(f1);
if i>120
then
begin
writeln('votre compose n'existe pas dans notre liste');
3:writeln(' pour revoir la liste :taper 1');
writeln('si vous connaissez deja le numero d'un autre compose :taper 2');
writeln('pour arreter le travail :taper 3');readln(ans);
case ans of
1:goto 1;
2:goto 2;
3:goto 7;
else
begin
writeln('vous avez tapé un mauvais chiffre');goto 3;
end;
end;
else
begin
4:writeln('***** choisissez la methode de calcul *****'); writeln;
writeln('equation d'ANTOINE taper a');writeln;
writeln('equation de FITZER taper p');writeln;
writeln('equation de HARLACHER-BRAUN taper h');writeln;
writeln('equation de REIDEL taper r');writeln;
writeln('equation de FROST-THODOS taper f');
write(' '); readln(l);
case l of
a':begin
assign(f1,'a:\ant.dat');reset(f1);
recherche1;
repeat
writeln('Le domaine d'application de cette corrélation est:');
writeln('[',identif1.ts:4:1,' ',identif1.ti:4:1,' ] k');
write('donner la temperature à laquelle vous voulez la TV ');
readln(temp);
temperature;
if(temp>=identif1.ti)and(temp<=identif1.ts)
then
begin

```

```

pv1:=pv/760;
pv2:=pv*14.696/760;
pv3:=pv*1.0332/760;
pv4:=pv*1.0133/760;conversion;
writeln('la Tension de Vapeur à t=',temp:6:1, unitet,' est:');
writeln('          pv=',pv1:6:2,' atm');
writeln('          pv=',pv2:6:2,' psi');
writeln('          pv=',pv3:6:2,' kg/cm2');
writeln('          pv=',pv4:6:2,' bars');
writeln('          pv=',pv:6:2,' mmhg');
writeln('le calcul a été fait par la methode d''ANTOINE'); writeln;
end
else
begin
  writeln('cette temperature est hors du domaine d''application de');
  writeln('l''equation d''ANTOINE ');
  writeln;
end;
writeln('voulez-vous faire un autre calcul pour ce compose avec');
writeln('cette meme correlation o/n?');
readln(f);
until f='n';
  close(f1);
  end;
  'p': begin
    assign(f2,'a:\pitz.dat');
    reset(f2);
    recherche2;
    repeat
      writeln('Le domaine d''application de cette corrélation est:');
      writeln(' [',identif2.tcong:4:1,' ',identif2.tcr:4:1,' ] k');
      write('donner la temperature à laquelle vous voulez la TV ');
      readln(temp);temperature;
      if (temp>=identif2.tcong)and(temp<=identif2.tcr)
      then
        begin
          tr:=temp/tc;
          pv1:=15.2518-15.6848/tr-1.28862*ln(tr)+0.16934/exp(6*ln(tr));
          pv2:=15.2518-15.6875/tr-13.4721*ln(tr)+0.43577*exp(6*ln(tr));
          pv:=pc*exp(pv1+om*(pv2)); conversion;
          writeln('la Tension de Vapeur à t=',temp:6:1, unitet,' est:');
          writeln('          pv=',pv:6:2,' atm');
          pv1:=pv*760;
          pv2:=pv*14.696;
          pv3:=pv*1.0332;
          pv4:=pv*1.0133;
          writeln('          pv=',pv1:6:2,' mmhg');
          writeln('          pv=',pv2:6:2,' psi');
          writeln('          pv=',pv3:6:2,' kg/cm2');
          writeln('          pv=',pv4:6:2,' bars');
          writeln('le calcul a été fait par la methode de PITZER');writeln;
          end
        else
          begin
            writeln('votre composé est Solide');
            writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée');writeln;
            end
          else
            begin
              writeln('vous avez dépassé le Point Critique');
              writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée'); writeln;
            end;
          end;

```

```

write('voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé avec ');
write(' la meme corrélation ? (o/n) '); readln(f);
until f='n';
close(f2);
end;
'h':begin
  assign(f3,'a:\har.dat');
  reset(f3);
  i:=1;
  repeat with identif3 do
  begin
    readln(f3,num,a,b,c,d,tcong,tcrc);
    if num=numc
    then
    begin
      ah:=a;bh:=b;ch:=c;dh:=d;
    end
    else i:=i+1;
    end;
  until(identif3.num=numc);
  repeat
  writeln('Le domaine d'application de cette corrélation est:');
  writeln(' [',identif3.tcong:4:1,' ',identif3.tcr:4:1,'] k');
  writeln('donner la temperature à laquelle vous voulez la TV ');
  readln(temp);
  temperature;
  if (temp>=identif3.tcong)and(temp<=identif3.tcr)
  then
  begin
    p:=760.0;
    repeat
    pv:=exp(ah+bh/temp+ch*ln(temp)+dh*p/sqr(temp));
    rh:=abs(p-pv);
    p:=pv;
    until rh<0.001; conversion;
    writeln('la Tension de Vapeur à ',temp:6:1, ' unitet, ' est):
    writeln('          pv=',pv:6:2, ' mmhg');
    pv1:=pv/760;
    pv2:=pv*14.696/760;
    pv3:=pv*1.0332/760;
    pv4:=pv*1.0133/760;
    writeln('          pv=',pv1:6:2, ' atm');
    writeln('          pv=',pv2:6:2, ' psi');
    writeln('          pv=',pv3:6:2, ' kg/cm2');
    writeln('          pv=',pv4:6:2, ' bars');
    writeln('le calcul a été fait par la methode de HARLACHER-BRAUN');writeln;
    end
  else
  begin
    if (temp<identif3.tcong)
    then
    begin
      writeln('à cette temperature votre compose est Solide');
      writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée');writeln;
    end
    else
    begin
      writeln('          vous avez dépassé le Point Critique');
      writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée');writeln;
    end;
  end;
  writeln('voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé avec');
  write(' la meme corrélation ? (o/n) '); readln(f);
  until f='n';
  close (f3);

```

```

'n':begin
assign(f2,'a:\pitz.dat');reset(f2);
recherche2;
repeat
writeln(' Le domaine d'application de cette corrélation est: ');
writeln(' [',identif2.tcong:4:1,' ',identif2.tcr:4:1,'] k');
write('donner la température à laquelle vous voulez la TV ');
readln(temp);temperature;
if (temp>=identif2.tcong)and(temp<=identif2.tcr)
then
begin
tr:=temp/tc;
fr:=-35+36*(tc/tb)+42*ln(tb/tc)-exp(6*ln(tb/tc));
alpha:=(0.315*fr+ln(pc))/(0.0838*fr-ln(tb/tc));
q:=0.0838*(3.758-alpha);
ar:=-35*q;
br:=-36*q;
cr:=42*q+alpha;
dr:=-q;
pv:=pc*exp(ar-br/tr+cr*ln(tr)+dr*exp(6*ln(tr)));conversion;
writeln('la Tension de Vapeur à t=',temp:6:1,' unitet, ' est');
writeln('          pv=',pv:6:2,' atm');
pv1:=pv*760;
pv2:=pv*14.696;
pv3:=pv*1.0332;
pv4:=pv*1.0133;
writeln('          pv=',pv1:6:2,' mmhg');
writeln('          pv=',pv2:6:2,' psi');
writeln('          pv=',pv3:6:2,' kg/cm2');
writeln('          pv=',pv4:6:2,' bars');
writeln('le calcul a été fait par la methode de REIDEL');writeln;
end
else
begin
if temp<identif2.tcong
then
begin
writeln('cette température est en dessous de la température de votre composé sous solide');
writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée');writeln;
end
else
begin
writeln('vous avez dépassé le Point Critique');
writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée');writeln;
end;
end;
writeln('voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé avec');
writeln('la meme corrélation ? (o/n)');
readln(f);
until f='n';
close(f2);
end;
'f':begin
assign(f2,'a:\pitz.dat');reset(f2);
recherche2;
repeat
writeln(' Le domaine d'application de cette corrélation est: ');
writeln(' [',identif2.tcong:4:1,' ',identif2.tcr:4:1,'] k');
writeln('donner la température');
readln(temp);
temperature;
if (temp>=identif2.tcong)and(temp<=identif2.tcr)
then
begin
tr:=temp/tc;

```

```

bf2:=1-(tc/tb)-0.7816*ln(tb/tc);
bf:=bf1/bf2;
cf:=0.7816*bf+2.67;
p:=1.0;
repeat
pv:=pc*exp(bf*(1/tr-1)+cf*ln(tr)+27*(p/(pc*sqr(tr))-1)/64);
rf:=abs(p-pv);
p:=pv;
until rf<0.001;conversion;
writeln('la Tension de Vapeur à t=',temp:6:1, unitet,' est:');
writeln('          pv=',pv:6:2,' atm');
  pv1:=pv*760;
  pv2:=pv*14.696;
  pv3:=pv*1.0332;
  pv4:=pv*1.0133;
  writeln('          pv=',pv1:6:2,' mmhg');
  writeln('          pv=',pv2:6:2,' psi');
  writeln('          pv=',pv3:6:2,' kg/cm2');
  writeln('          pv=',pv4:6:2,' bars');
writeln('le calcul a été fait par la methode de FROST');writeln;
end
else
begin
if (temp<identif2.tcong)
  then
  begin
  writeln('      votre compose est Solide');
  writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée');writeln;
  end
  else
  begin
  writeln('      vous avez dépassé le Point Critique');
  writeln('la Tension de Vapeur ne peut etre calculée');writeln;
  end;
end;
writeln('voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé avec');
writeln('la meme corrélation ? (o/n)');
readln(f);
until f='n';
close(f2);
end
else
begin
  writeln('vous avez tapé une mauvaise lettre'); writeln;
goto 4;
end;
end;
5:writeln('      pour changer de correlation : taper 1');
writeln('      pour changer de compose : taper 2');
writeln('      pour arreter le calcul : taper 3');
readln(ans);
case ans of
1:goto 4;
2:begin
  writeln('pour avoir la liste des composés taper n');
  writeln('si vous connaissez deja le numero de votre composé : taper n');
  readln(w);
  case w of
  'n':goto 1;
  'n':goto 2
  else
  begin
  writeln('vous avez tapé une mauvaise lettre'); writeln;
  goto 6;
  end;
end;

```

```

end;
3:goto 7
else
begin
writeln('vous avez tapé un mauvais chiffre');goto 5;writeln;
end;
end;
end;
7: writeln('-----fin de calcul de la tension de vapeur-----');
writeln;
end;

2:begin
writeln('##### calcul de l'enthalpie de vaporisation #####');

repeat

8:writeln('voici la liste des composés ainsi que leurs numéros');
writeln;
s:=0;
assign(f2,'a:\pitz.dat');
reset(f2);
repeat
i:=1;
repeat with identif2 do
begin
readln(f2,num,ncomp);
writeln(num,ncomp);
i:=i+1;
end;
until i=21;
writeln('*****taper return pour avoir la suite');
s:=s+20;
readln;
until s=120;
close(f2);
?write('donner le numero de votre composé ');
readln(f2);
assign(f2,'a:\pitz.dat');reset(f2);
i:=1;
repeat with identif2 do
begin
readln(f2,num,ncomp,omega,tcr,tcong,teb,pcr);
if num=numc
then
begin
write('votre composé est ',ncomp,'? (o/n) ');
readln(f);
if f='n'
then goto 8
else
begin
om:=omega;tc:=tcr;tb:=teb;pc:=pcr;
end;
end;
else
i:=i+1;
end;
until((identif2.num=numc)or(i>120));close(f2);
if i>120
then
begin
writeln('votre composé ne figure pas sur la liste');
writeln('***Taper return pour revoir la liste');readln;
goto 8;

```

```

else
begin
10:writeln('***CHOIX DE LA METHODE DE CALCUL***');writeln;
writeln('      equation de PITZER taper p');writeln;
writeln('      equation de LEE-KESLER taper l');writeln;
writeln('      equation de REIDEL taper r');writeln;
writeln('      equation de FROST taper f');writeln;
readln(k);
case k of

'p':begin
assign(f2,'a:\pitz.dat');reset(f2);
recherche2;
repeat
writeln(' Le domaine d'application de cette corrélation est: ');
writeln(' [ ',identif2.teb:4:1,'      ',identif2.tcr:4:1,' ] k');
write('      donner la temperature      ');
readln(temp);temperature;
if (temp<identif2.tcr) and (temp>=identif2.teb)
then
begin
r:=1.987;
tr:=temp/tc;
hv1:=7.08*exp(0.354*ln(1-tr));
hv2:=10.95*om*exp(0.456*ln(1-tr));
deltahv:=(hv1+hv2)*r*tc; conversion;
writeln('1'Enthalpie de Vaporisation à t=',temp:6:1, unitet,' est:');
writeln('      deltahv=',deltahv:6:2,' cal/gmol');
hv1:=deltahv*4.184;
writeln('      deltahv=',hv1:6:2,' j/gmol');
writeln('le calcul a été fait par la methode de PITZER');writeln;
end
else
begin
if (abs(temp-tc)<0.5)
then
begin
writeln('      Propriétés au Point Critique');
writeln('1'Enthalpie de Vaporisation est nulle');writeln;
end
else
begin
if temp<=identif2.tcong
then
begin
writeln('      votre composé est Solide');
writeln('1'Enthalpie de Vaporisation ne peut etre calculée');
end
else
begin
writeln('cette temperature est hors du domaine d'application');
writeln('de l'equation de PITZER');writeln;
end;
end;
end;
writeln('      voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé avec');
write('      la meme corrélation ? (o/n) ');
readln(f);
until f='n';
close(f2);
end;

'l':begin
assign(f2,'a:\pitz.dat');reset(f2);
recherche2;
repeat

```

```

writeln(' J',identif2.tcong:4:1,' ',identif2.tcr*0.95:4:2,' J k ');
write(' donner la temperature ');readln(temp);temperature;
if (temp>=identif2.tcong)and((temp/identif2.tcr)<=0.95)
then
begin
  r:=1.987;
  tr:=temp/tc;
  dz:=sqrt(1-1/(pc*exp(3*ln(tr))));
  hv1:=6.09648-1.28862*(tr)+1.016*exp(7*ln(tr));
  hv2:=15.6875-13.4721*(tr)+2.615*exp(7*ln(tr));
  deltahv:=(hv1+om*hv2)*r*tc*dz; conversion;
  writeln('          deltahv=',deltahv:6:2,' cal/gmol');
  hv1:=deltahv*4.184;
  writeln('          deltahv=',hv1:6:2,' j/gmol');
  writeln('le calcul a été fait par la methode de LEE-KESLER');
end
else
begin
  if temp<identif2.tcong
  then
  begin
    writeln('      votre composé est Solide ');
    writeln('1'Enthalpie de Vaporisation ne peut etre calculée');
  end
  else
  begin
    if (abs(temp-tc)<0.5)
    then
    begin
      writeln('      vous etes au Point Critique');
      writeln('1'Enthalpie de Vaporisation est nulle');writeln;
    end
    else
    begin
      writeln('cette temperature est hors du domaine d'application');
      writeln('de l'equation de LEE-KESLER'); writeln;
    end;
  end;
end;
writeln('      voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé ');
write('      la meme corrélation ? (o/n) ');
readln(f);
until f='n';
close(f2);
end;
r':begin
assign(f2,'a:\pitz.dat');reset(f2);
recherche2;
  repeat
    writeln(' Le domaine d'application de cette corrélation est:');
    writeln(' J',identif2.tcong:4:1,' ',identif2.tcr*0.95:4:1,' J k ');
    writeln('donner la temperature');readln(temp);temperature;
    if (temp>=identif2.tcong)and((temp/identif2.tcr)<=0.95)
    then
    begin
      r:=1.987;
      tr:=temp/tc;
      dz:=sqrt(1-1/(pc*exp(3*ln(tr))));
      fr:=-35+36*tc/tb+42*ln(tb/tc)-exp(6*ln(tb/tc));
      alpha:=(0.315*fr+ln(pc))/(0.0838*fr-ln(tb/tc));
      q:=0.0838*(3.758-alpha);
      br:=-36*q;
      cr:=42*q+alpha;
      dr:=-q;
      deltahv:=(br+cr*(tr)+6*dr*exp(7*ln(tr)))*dz*r*tc; conversion;
    end;
  end;
end;

```

```

writeln('          deltahv=',deltahv:6:2,' cal/gmol');
hv1:=deltahv*4.184;
writeln('          deltahv=',hv1:6:2,' j/gmol');
writeln('le calcul a été fait par la methode de REIDEL');writeln;
end
else
begin
if (temp<identif2.tcong)
then
begin
writeln('          votre compose est Solide');
writeln('1''Enthalpie de Vaporisation ne peut etre calculée');writeln;
end
else
begin
if (abs(temp-tc)<0.5)
then
begin
writeln('          vous etes au Point Critique');
writeln('1''Enthalpie de Vaporisation est nulle');writeln;
end
else
begin
write('cette temperature est hors du domaine d''application');
writeln('de l''equation de REIDEL'); writeln;
end;
end;
end;
writeln('voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé');
write(' la meme corrélation ? (o/n) ');
readln(f);
until f='n';
close(f2);
end;

```

```

f':begin
assign(f2,'a:\pitz.dat');read(f2);
recherche2;
repeat
writeln('Le domaine d''application de cette corrélation est:');
writeln(' J ',identif2.tcong:4:1,'          ',identif2.tcr*0.95:4:1,' J k ');
write('donner la temperature ');
readln(temp);temperature;
if (temp>=identif2.tcong)and((temp/identif2.tcr)<0.95)
then
begin
n:=1.987;
tr:=temp/tc;
dz:=sqrt(1-1/(pc*exp(3*ln(tr))));
bf1:=ln(pc)+2.67*ln(tb/tc);
bf2:=1-1/(tb/tc)-0.7816*ln(tb/tc);
bf:=bf1/bf2;
cf:=0.7816*bf+2.67;
hv1:=bf1*tr*(tr)^27/(pc*(tr)^3);
hv2:=1-27/(64*pc*sqrt(tr));
deltahv:=n*dz*tr*hv1/hv2;conversion;
writeln('1''Enthalpie de Vaporisation à t=',temp:6:1,unitet,' est:');
writeln('          deltahv=',deltahv:6:2,' cal/gmol');
hv1:=deltahv*4.184;
writeln('          deltahv=',hv1:6:2,' j/gmol');
writeln('le calcul a été fait par la methode de FROST');writeln;
end
else
begin
if (temp<identif2.tcong)

```

```

begin
  writeln('          votre compose est Solide');
writeln('1' 'Enthalpie de Vaporisation ne peut etre calculée');writeln;
end
else
begin
  if (abs(temp-tc)<0.5)
  then
  begin
  writeln('          vous etes au Point Critique');
  writeln('1' 'Enthalpie de Vaporisation est nulle');writeln;
  end
  else
  begin
  writeln('cette temperature est hors du domaine d''application');
  writeln('          de la corrélation de FROST'); writeln;
  end;
  end;
  end;
writeln('          voulez-vous faire un autre calcul pour ce composé avec');
write('          la meme corrélation ? (o/n)');
readln(f)
until f='n';
close(f2);
end
  else
  begin
  writeln('vous avez tapé une mauvaise lettre');writeln;
  goto 10;
  end;

end;
end;

11:writeln(' pour changer de correlation taper 1');
writeln(' pour changer de compose taper 2');
writeln(' pour arrêter la calcul taper 3'); readln(m);
case m of
1:goto 10;
2:begin
  writeln('pour revoir la liste taper 4');
  writeln('si vous avez deja le numero de votre compose taper 5');
  readln(n);
  case n of
  4:goto 8;
  5:goto 9;
  end;
  end;
3:goto 12;
else
begin
  writeln(' vous avez tapé un mauvais chiffre ');goto 11;writeln;
end;
end;
write('voulez-vous faire un autre calcul d''Enthalpie de Vaporisation');
write(' (o/n)'); readln(f);
until f='n';
12:writeln('-----fin de calcul de l''Enthalpie de Vaporisation-----');
writeln;
end;
end;
  end;
until answer='n';
read;

```

V.5 L'enthalpie de vaporisation

V.5.1 Théorie [20]

V.5.1.1 Définition :

Appelée aussi chaleur latente de vaporisation, l'enthalpie de vaporisation est la quantité de chaleur fournie à l'unité de poids pour la transformer en vapeur.

Dans le cas des corps purs, cette opération s'effectue à pression et température constantes.

L'enthalpie de vaporisation est la différence des enthalpies du liquide saturé et de la vapeur saturée à la même température.

V.5.1.2 Estimation et calcul de l'enthalpie de vaporisation

2.1 Equation réduite de CLAUSIUS-CLAPEYRON :

L'enthalpie de vaporisation ΔH_v est reliée à la température et la pression. Plusieurs corrélations donnant ΔH_v découlent directement de l'équation CLANSIUS- CLAPEYRON réduite (62) :

$$d \ln (P_v)_r = \frac{-\Delta H_v}{RT_c \cdot \Delta Z_v} \cdot d \left(\frac{1}{T} \right) \quad (62)$$

L'enthalpie de vaporisation réduite $-\Delta H_v/RT_c$ est une fonction de

$$\frac{d \ln (P_v)_r}{d (1/T)} \text{ et de } \Delta Z_v$$

ΔZ_v est relié à P_r et T_r , et peut être déterminé avec une équation d'état (VIRIEL, VAN DER WAALS...)

2.2 Corrélation de RIEDEL :

RIEDEL donne $\Delta H_v/RT_c$ comme une fonction de T_r et de α_c , α_c étant déterminé avec l'équation (59).

La corrélation de RIEDEL fournit des résultats exacts pour les liquides non polaires.

RIEDEL a estimé l'enthalpie de vaporisation de 33 corps organiques à 478 températures différentes avec sa corrélation, et l'erreur moyenne

n'a pas dépassé 1.8%.

$$\frac{\Delta H_v}{RT_c \cdot \Delta Z_v} = B^* + C^* Tr + 6 D^* \cdot Tr^7 \quad (63)$$

B*, C* et D* sont données par les équations
(58.2) (58.3) (58.4) respectivement

2.3 Corrélation de PITZER :

PITZER relie l'enthalpie de vaporisation ΔH_v à la température absolue T, température réduite Tr et au facteur acentrique w.

$$\frac{\Delta H_v}{T} = \Delta S_v^{(0)} + w \cdot \Delta S_v^{(1)} \quad (64)$$

$\Delta S_v^{(0)}$ et $\Delta S_v^{(1)}$ ont l'unité d'une entropie soit cal/gmol.K, et sont fonction de Tr.

Multipliée par Tr/R, l'équation (64) devient :

$$\frac{\Delta H_v}{RT_c} = \frac{Tr}{R} (\Delta S_v^{(0)} + w \Delta S_v^{(1)}) \quad (65)$$

$\Delta H_v/RT_c$ est donc une fonction de Tr et de w seulement.

Une expression analytique de l'équation précédente a été trouvée par PITZER, dans un domaine de température réduite compris entre 0.6 et 1.

$$\frac{\Delta H_v}{RT_c} = 7.08 (1 - Tr)^{0.356} + 10.95 \cdot w (1 - Tr)^{0.456} \quad (66)$$

2.4 Autres corrélations :

Les équations $P_v - T$ citées dans la partie tension de vapeur (V.4) peuvent être et sont utilisées pour le calcul de l'enthalpie de vaporisation.

Soit le paramètre adimensionnel Ψ :

Pour chaque équation $P_v - T$ déjà vue, nous pouvons obtenir une

$$\psi = \frac{\Delta H_v}{RT_o \cdot \Delta Z_v} = \frac{-d \ln (Pv)_r}{d (1/T_r)}$$

expression de

- Equation LEE-KESLER (ou PITZER modifiée) :

$$\psi = 6.09648 - 1.28862 \cdot T_r + 1.016 \cdot T_r^7 + w (15.6875 - 13.4721 \cdot T_r + 2.615 \cdot T_r^7) \quad (67)$$

- Equation d'ANTOINE :

$$\psi = \frac{B}{T_o} \cdot \left(\frac{T_r}{T_r - C/T_o} \right)^2 \quad (68)$$

B, C sont les constantes d'Antoine.

- Equation de RIEDEL :

$$\psi = B^* + C^* \cdot T_r + 6 \cdot D^* \cdot T_r^7 \quad (69)$$

B*, C*, D* : paramètres définies par RIEDEL (V.4.1.2.6)

- Equation de FROST-THODOS :

$$\psi = \frac{-B + C \cdot T_r - (27/32) (Pr/T_r)}{1 - 27/64 \cdot (Pr/tr^2)} \quad (70)$$

B, C : paramètres des équations (61.2) et (60.2)

V.5.2 Présentation du problème

V.5.2.1 Comparaison des corrélations [20]

Dans toutes les équations (sauf celle de PITZER), il est recommandé de calculer ΔZ_v avant l'obtention de ΔH_v .

ΔZ_v peut être estimé à partir d'une équation d'état P.V.T quelconque (VIRIAL, VAN DER WAALS, ...)

Les équations de LEE-KESLER, RIEDEL ou FROST-THODOS sont faciles à résoudre dès que ΔZ_v est calculé, elles fournissent de bons résultats dans un vaste domaine de température. Toute fois la précision est

moindre autour du point de congélation et du point critique; La corrélation de PITZER reste la meilleure et beaucoup d'auteurs l'ont recommandée, mais elle ne peut être utilisée sans la connaissance du facteur acentrique w et de la température critique T_c .

L'équation d'Antoine fournit également des résultats satisfaisants quand elle est employée dans son domaine d'application ($P < 1500$ mmHg). Finalement, toutes ces corrélations sont des fonctions explicites en ΔH_v , ce qui leur réfère une grande facilité dans la résolution.

D'un autre côté, la plupart des corrélations n'exigent que la connaissance des valeurs des coordonnées du point critique (P_c, T_c) qui sont disponibles pour un grand nombre de corps chimiques.

V.5.2.2 Equations utilisées :

Dans le programme informatique, que nous avons établi, les équations utilisées sont les suivantes :

- Equation de LEE-KESLER (67)
- Equation de PITZER (66)
- Equation de FROST-THODOS (70)
- Equation de RIEDEL (69)

Les critères de choix sont toujours la qualité du résultat, la disponibilité des paramètres des équations, l'étendu des domaines d'application de ces équations et le nombre de composés chimiques pour lesquels elles sont valables.

Les paramètres des équations utilisées sont tabulés (Tableau V.5.2.1 Annexe 4)

V.5.3 Programme :

Le programme établi, pour le calcul de l'enthalpie de vaporisation, est inclus dans celui de la tension de vapeur. Car les deux programmes utilisent les mêmes données expérimentales ainsi ils nécessitent la manipulation d'un même fichier de données, et ce pour quelques équations.

l'écoulement et de la rugosité des parois de la canalisation :

$\lambda = f(R_e, \text{rugosité})$

le nombre de R_e donnée par la formule :

$$R_e = u \cdot \frac{d}{\nu} \quad (72)$$

représente le rapport des forces d'inertie et de turbulence aux forces de viscosité.

ν = viscosité cinématique du fluide.

V.6.1.3 Forme de la fonction $\lambda = f(R_e, \text{rugosité})$:

Les études modernes ont eu pour objet de préciser la forme de la fonction $\lambda = f(R_e, \text{rugosité})$.

On donne de cette fonction, une représentation classique en portant en ordonnée, le coefficient de résistance λ et en abscisse le nombre de Reynolds R_e .

En raison de la grande amplitude de variation de R_e , on utilise généralement des graduations logarithmiques sur les deux axes.

On définit ainsi le diagramme universel $\lambda = f(R_e)$ (Fig.V.6.1.2.1).

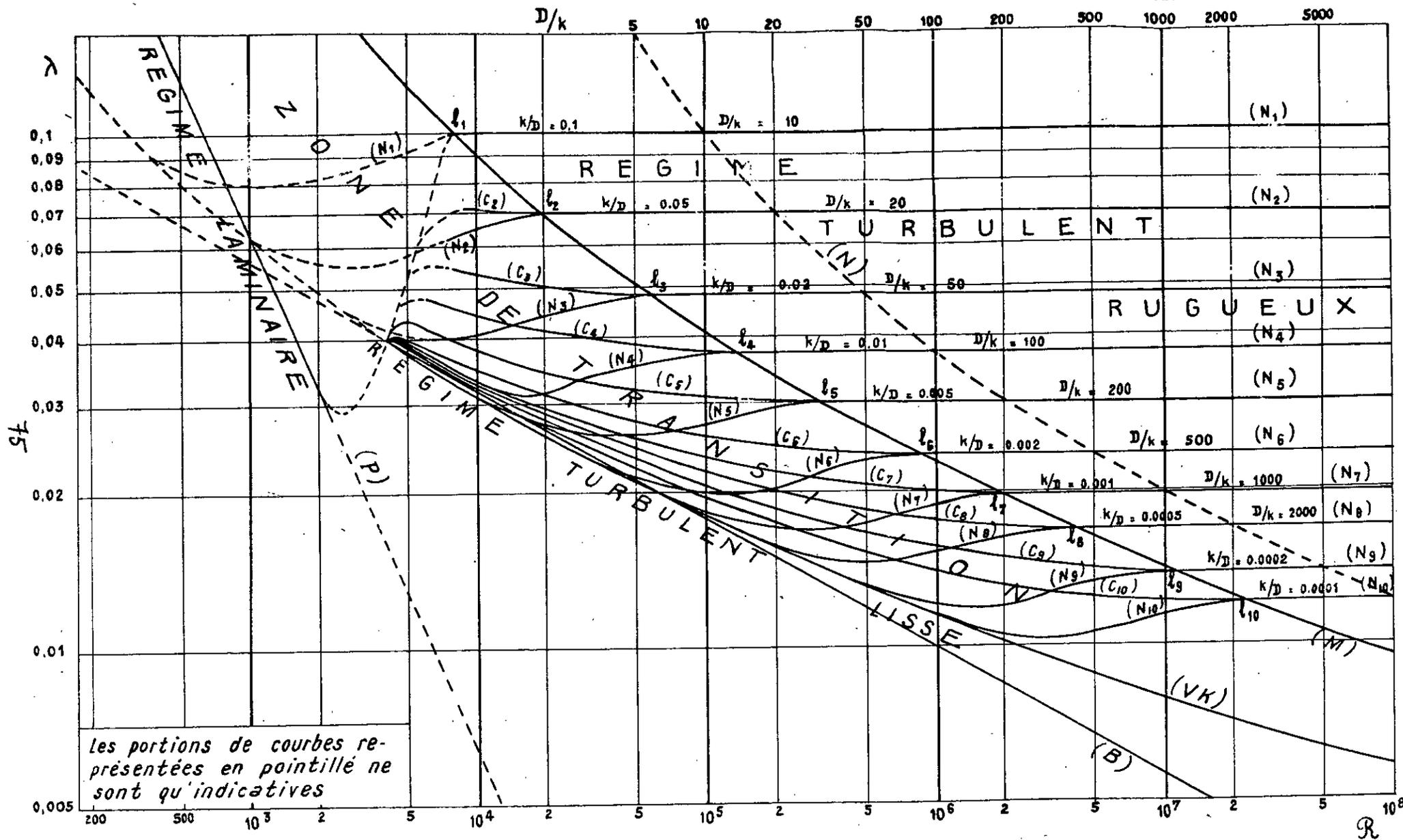


Fig. V.6.1.2.A: ~~Diagramme~~ - Diagramme universel $\lambda = f(R)$

(P) Droite de Poiseuille	(N ₁), (N ₂), (N ₃)... Courbes (Harpe) de Nikuradse
(VK) Courbe de Prandtl-Von Karman	(C ₂), (C ₃), (C ₄)... Courbes de Colebrook
(B) Droite de Blasius	(N) Courbe de Nikuradse (D/k est lu sur l'échelle supérieure horizontale)
(M) Courbe de Moody	

3.1 Régime laminaire

En régime laminaire, la relation $\lambda = f(R_e)$ est de la forme $\lambda = A/R$, représentée par une droite (P) dans le diagramme universel. En effet, en régime laminaire la perte de pression Δp est proportionnelle à la vitesse moyenne U , donc la perte de charge unitaire :

$$J = \frac{\Delta p}{w \cdot l} = \frac{\lambda \cdot u^2}{D \cdot 2g} \quad (73)$$

est de la forme : $\frac{\lambda}{D} \cdot \frac{u^2}{2g} = a \cdot u$

d'où

$$\lambda = \frac{2a \cdot g \cdot D}{u} = \frac{2a \cdot g D^2}{R \cdot v} = \frac{A}{R} \quad (74)$$

En portant cette valeur dans l'expression générale

$$J = \frac{\lambda}{D} \cdot \frac{u^2}{2g}$$

nous obtenons : $\lambda = \frac{64}{R_e} \dots \dots (75)$

appelée formule de Hagen-Poiseuille

Le régime laminaire n'est stable que jusqu'à une valeur du nombre de Reynolds de l'ordre de 2300.

3.2 Régime turbulent :

Nous distinguons le cas des tuyaux lisses de celui des tuyaux rugueux.

3.2.1 Cas des tuyaux lisses : régime turbulent lisse

3.2.1.a Formule de PRANDTL-VON KARMAN.

Pour décrire ce régime, on adopte généralement la formule

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = 2 \text{ Log } R \cdot \sqrt{\lambda} - 0.80 \quad (76)$$

qui vérifie bien les résultats expérimentaux et qui peut s'écrire également :

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -2 \text{ Log } \frac{2.51}{R \cdot \sqrt{\lambda}} \quad (77)$$

connue sous le nom de formule de PRANDTL-VON KARMAN, traduite par la courbe (VK) sur le diagramme universel.

3.2.1.b Formule du type A/Rⁿ :

λ n'étant pas explicite dans la formule précédente, celle-ci est d'un usage difficile et ne peut être résolue que par voie graphique ou itérative. Aussi lui préfère-t-on des formules plus simples de la forme $\lambda = A/R^n$

représentée par une droite dans le diagramme universel $\lambda = f(R)$.

L'allemand BLASIUS a ainsi proposé en 1913 la formule :

$$\lambda = \frac{0.3164}{R^{0.25}} \quad (78)$$

représentée par la droite (B) sur le diagramme universel.

Cette "droite de BLASIUS" se confond pratiquement avec la courbe VON KARMAN pour $R \leq 10^5$.

A cette catégorie générale $\lambda = A/R^n$ appartiennent également les formules empiriques :

$$J = \frac{K}{g \cdot R_0^{2-n}} \cdot \frac{u^2}{D} \quad (79)$$

REYNOLDS :

où

$$\lambda = 2 \frac{K}{R_0^{2-n}} \quad \text{avec } 1.82 < n < 2$$

FLAMANT :
$$J = K \cdot \frac{U^{1/6}}{D^{5/4}} \quad (80)$$

$$J = K \cdot \frac{U^2}{D^{1.35}} \quad (81)$$

MOUGNÉ :

avec $620 < K \cdot 10^6 < 2.000$

$$1.75 < n < 2$$

BETZ :
$$J = K \cdot \frac{0.3164}{R_0^{0.25}} \cdot \frac{u^2}{2gD} \quad (82)$$

$$1.1 < k < 1.5$$

3.2.1.c Formule du type $\lambda = \alpha + \beta/R^n$

L'approximation des formules précédentes du type $\lambda = A/R^n$ n'est satisfaisante que pour des valeurs de R inférieures à 10^5 .

Au delà de cette limite, l'expression s'en écarte progressivement, et il faut alors recourir à des formules du type binôme

$$\lambda = \alpha + \frac{\beta}{R^n}$$

A ce groupe, se rattachent les formules de :

Lang :
$$\lambda = 8 g \left(\alpha + \frac{\beta}{\sqrt{R}} \right) \quad (83)$$

Lees :
$$\lambda = 0.00714 + \frac{0.61}{R^{0.35}} \quad (84)$$

SCHILLER et HERMANN :

$$\lambda = 0.0054 + \frac{0.396}{R_0^{0.3}} \quad (85)$$

NIKURADSE :

$$\lambda = 0.0032 + \frac{0.221}{R_0^{0.237}} \quad (86)$$

$$\text{LAZARD: } \lambda = 0.00372 + \frac{0.247}{R_0^{0.25}} \quad (87)$$

Ces dernières formules et surtout celle de NIKURADSE se confondent sensiblement avec la formule théorique de PRANDTL-VON KARMAN pour des valeurs de R_0 allant jusqu'à 3.10^6

Plus récemment (1954-58) FILONENKO et ALTSCHOUL ont proposé la formule suivante, explicite en λ donc d'un emploi plus commode que celle de PRANDTL-VON KARMAN et dont les résultats ne diffèrent de cette dernière que de 2 à 3% au maximum

$$\lambda = (1.8 \text{ Log} R_0 - 1.64)^{-2} \quad (88)$$

3.2.2 Cas des tuyaux rugueux :

3.2.2.a Notion de rugosité :

Contrairement à ce qui se passe dans le cas de surfaces lisses, une surface rugueuse implique un état de surface tel que ses irrégularités ont une action directe sur les forces de frottement, c'est à dire qu'au delà d'un certain degré de rugosité, la configuration mécanique de la surface exerce une influence bien déterminée sur ce qu'on appelle "l'intensité de l'agitation de turbulence"

- Une surface rugueuse peut être considérée comme étant constituée par une série de protubérances élémentaires, caractérisées par une hauteur K , quoique très petite, quelquefois de l'ordre d'une fraction de millimètre, c'est cette hauteur qui constitue le premier paramètre caractéristique.

Le point suivant consiste à évaluer la rugosité par rapport au diamètre de la conduite.

Par exemple dans un tuyau, il est logique de comparer K au diamètre D (ou au rayon r). On introduit ainsi la notion de rugosité relative K/D (ou K/r) et de poli relatif D/K (ou r/K).

3.2.2.b. Régime de faible turbulence dans les conduites rugueuses

Lorsque R_e est inférieur à 2300, les tuyaux rugueux se comportent comme les tuyaux lisses.

Lorsque le nombre de Reynolds augmente, l'épaisseur de la couche limite diminue et les aspérités commencent à réagir sur l'écoulement, le point figuratif du diagramme universel $\lambda = f(R)$ quitte la courbe de VON-KARMAN et aborde une zone de transition jusqu'à ce que, le nombre de Reynolds continuant de croître, la couche limite soit complètement arrachée, l'écoulement présentant alors le caractère de pleine turbulence.

La transition est essentiellement caractérisée par le fait que, la hauteur des aspérités étant de l'ordre de grandeur de l'épaisseur de la couche-limite laminaire, on voit intervenir simultanément les caractéristiques géométriques de la rugosité et le nombre de Reynolds. La zone de transition est limitée dans le diagramme universel par :

- La courbe de VON KARMAN d'équation

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -2 \text{ Log } \frac{2.51}{R_e \sqrt{\lambda}}$$

- Les extrémités l_1, l_2, \dots, l_n des droites de NIKURADSE dont le lieu est une courbe (M) dite courbe de MOODY, du nom de l'expérimentateur américain qui, en 1944, en a établi l'équation :

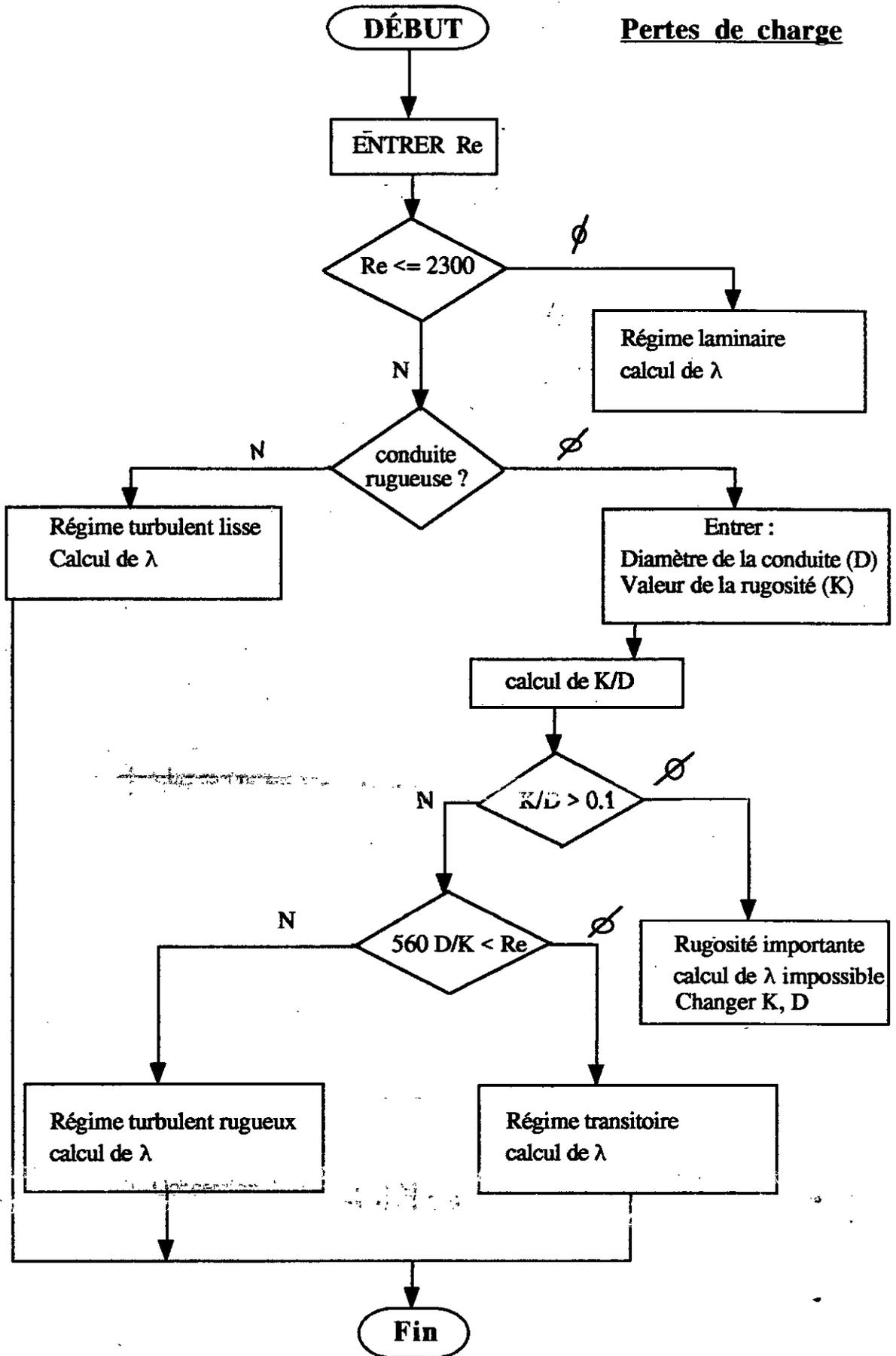
$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = \frac{\rho}{260} \cdot \frac{K}{D} \quad (89)$$

Cette zone de transition est très importante car très fréquemment utilisée en pratique.

En 1938-39, l'Anglais Colebrook présenta le premier une formule rendant compte de l'écoulement dans cette zone :

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -2 \text{ Log } \left[\frac{K}{3.7 D} + \frac{2.51}{R_e \sqrt{\lambda}} \right] \quad (90)$$

Pertes de charge



V.6.3.2 Programme

```

program reynolds (input,output);
uses crt;
label 1,2;
var
r,x,x1,k,d,re,lamda,delta,alpha,lamda1:real;
rep,ans:char;

procedure coolbrock;
begin
lamda:=54.0e-4+0.395*exp(0.3*ln(re));
x:=1/sqrt(lamda);
repeat
x1:=-2*ln(k/(d*3.71)+2.51*x/re)/ln(10);
delta:=(-2*ln(k/(d*3.71)+2.51*x1/re)/ln(10)-x1)/(x1-x);
alpha:=1/(1-delta);
r:=abs(x1-x);
x:=x1+alpha*(-2*ln(k/(d*3.71)+2.51*x1/re)/ln(10)-x1);
until r<=2.e-3;
lamda:=1/sqr(x);
end;

      (*****programme principal*****)
begin
clrscr;
writeln;
writeln('$$ ce programme calcule le coefficient de perte de
charge $$');
writeln('  $$ lineaire pour les conduites lisses et rugueuses
$$ ');
writeln('          $$ pour divers regimes d'ecoulement $$ ');
writeln;
repeat
write('voulez-vous faire un calcul du coefficient de perte de
charge ? ');
writeln('(o/n) ');readln(ans);
if ans='o'
then
begin
write('donner la valeur du nombre de reynolds
');readln(re);writeln;
if re<=2300
then
begin
writeln('          Le regime est laminaire');
writeln('le coefficient lamda peut etre calculé avec
l'equation');
writeln('de HAGEN-POISEUILLE');
lamda:=64/re;
writeln('lamda=',lamda:5:3,'');writeln;
end
else
begin
write('est-ce que votre conduite est rugueuse ? (o/n)
');readln(rep);
if rep='o'
then
begin
1:write(' donner la valeur du coefficient de rugosité en mm
');readln(k);

```

```
writeln('      lamda=',lamda:5:3,' ');
k:=0.0;
coolbrock:
writeln('l'equation de COOLBROCK donne :');
writeln('      lamda=',lamda:4:2,'');  writeln;
end;
end;
end;
until ans='n';
writeln('-----fin de calcul-----');
readln;
end.
```

Conclusion

Notre travail qui a abouti à l'élaboration d'un logiciel touchant à des aspects variés mais restreints du génie chimiques, se veut être un moyen d'enrichir le potentiel scientifique de notre département surtout en matière de conception de banques de données et de calcul des propriétés des corps purs.

Le logiciel comporte quatre programmes permettant les réalisations suivantes :

- Calcul de la viscosité dynamique d'un corps pur par deux méthodes différentes (Méthode des abaques et méthode d'ANDRADE pour les composés liquides; méthode des abaques pour les composés gazeux.)
- Amélioration de l'indice d'octane de carburant auto, par addition d'alkyle de plomb (pte). Ce programme offre deux possibilités de calcul :

- Détermination des pourcentages en essence et en platformat lorsque le taux d'éthylation est fixé.

- Calcul de la quantité de plomb à injecter lorsque la composition du carburant est connue.

- Calcul de la tension de vapeur et de l'enthalpie de vaporisation pour des corps purs avec plusieurs méthodes, choisies sur les critères de rigueur, de souplesse et de disponibilité de donnée expérimentale pour un grand nombre de corps purs.

- Calcul du coefficient de perte de charge pour divers types d'écoulements dans des conduites lisse et rugueuse.

Etant un premier pas, ce travail peut être amélioré tant au niveau de l'enrichissement des banques de données qu'au niveau du nombre de propriétés ou des méthodes de détermination de ces propriétés.

Bibliographie

BIBLIOGRAPHIE

- [1]. Dictionnaire de l'informatique (Pierre MORVAN)
ed : Larousse (1981)
- [2]. P.ZANELLA, Y.LIGIER
"Architecture et technologie des ordinateurs"
ed : Dunod (1989)
- [3]. L'Architecture chimique N°6. 454. (1991)
" Logiciels pour la chimie"
- [4]. Notice de DESIGN II
- [5]. L'actualité chimique N°2.152. (1991)
" Un progiciel pour les études et recherches en chimie fine "
- [6]. Notice d'ASPEN-PLUS
- [7]. Notice de ProSim
- [8]. B.MARX
technique de l'ingénieur R120
(Banques de données scientifiques et techniques)
ed : technique de l'ingénieur (1989)
- [9]. L'actualité chimique N°6 422-429 (1991)
J. WEIL-RAYNAL "Gestion sur micro-ordinateur d'un fichier
personnel de réactions en chimie organique".
- [10]. D. BRETELLE - DESMAZIERES
Technique de l'ingénieur T7101
(Utilisation des banques de données)
ed: Technique de l'ingénieur (1991).

- [11]. A. DEROULEDE , CH. DUTHEUIL
Technique de l'ingénieur K 530
(Banques et bases de données en thermodynamiques)
ed: Technique de l'ingénieur (1989).
- [12]. A. FENYO
"Les méthodes mathématiques en chimie"
ed: Masson et C^{ie} (1969).
- [13]. A. GIET
"Abaque ou nomogramme"
ed: Dunod (1965).
- [14]. F. BOUDJELLALI
"Contribution à la détermination des propriétés physiques
et chimiques des fractions pétrolières lourdes"
Génie chimique (ENP) (1991). Thèse de magister.
- [15]. B. LENEINDRE
Technique de l'ingénieur k 480
(Constantes mécaniques: viscosité).
ed: Technique de l'ingénieur (1988)
- [16]. K.F. PAVLOV , P.G. ROMANOV , A.A. NOSKOV
*"Examples and problems To the course of unit operations
of chemical engineering"* ed: Mir (Moscou: 1979)
- [17]. J.C. GUIBET
"Carburant et moteurs" (Tome 1)
ed: Technique (1987).
- [18]. H. BOUACHA
"Amélioration de l'indice d'octane par différentes méthodes
hors PTE".
Génie chimique (ENP) (1991) Projet de fin d'études.
- [19]. P. WUTHIER
"Raffinage et génie chimique".
ed: Technique (1965).

- [20]. REID PRAUSNITZ - SHERWOOD
"The properties of gases and liquids"
ed: Mc GRAW-HILL (1977).
- [21]. M. CARLIER
"Hydraulique générale et appliquée"
ed: Eyrolles (1980).
- [22]. A. GOURDIN, M. BOUMHRAT
"Méthodes numériques appliqués"
ed: OPU (1991)
- [23]. L. CLARKE, R.L. DAVIDSON
Manual for
Process Engineering Calculations
ed: Mc. GRAW-HILL (1975).
- [24]. R. PERRY
Perry's chemical engineers hand book
ed: Mc. GRAW-HILL (1984).

Annexes

Annexe 2 : Modèles de calcul des propriétés physiques des logiciels ASPEN.PLUS et ProSim

Equations d'états

- 1967 ASME correlation : Tables de correlation de la vapeur
- BWR-Lee-Starling
- Hayden-O'Connell (avec association de la phase vapeur)
- Gaz idéal
- *- Lee-Kesler
- Nothnagel (avec association de la phase vapeur)
- *- Peng-Robinson (Eau-Hydrocarbure)
- Peng- Robinson [PR]
- Perturbed-Hard-Chain (non-polaire)
- Perturbed-Hard-Chain (polaire)
- *- Redlich-Kwong
- Redlich-Kwong-Aspen
- *- Redlich-Kwong-Soave [SRK]
- Redlich-Kwong-UNIFAE

Correlations du coefficient de fugacité

- *- Chao-Seader
- Chao-Seader/Pransnitz-Shair
- *- Grayson-Streed
- Table de données d'entrée
- * A partir des lois de tension de vapeur

Pression de vapeur

- | | |
|-----------------------------|------------------------|
| *- Antoine Solid | * Harlacher-Braun |
| - Cavett liquide | * Lee-Kesler |
| - Extended Antoine liquid | * Riedel-Planck-miller |
| - Polynome modifié | |
| - Table de données d'entrée | |

Complex solids density

- | | |
|-----------------------------|----------------------|
| - Generalized Density Model | * Racket |
| - IGT Dry solids Model | * Gunn-Yamada |
| | * Peng-Robinson |
| | * Lee-Kesler-Plocker |

Conductivité thermique

- Chung-lee-starling liquid and vapor
- IAPS liquid and Vapor for water
- Polynomial solid
- Sato-Riedel liquid
- Stiel-Thodos (High Pressure Vapor)
- Tabular Data Entry
- Trapp liquid and Vapor
- Wassiljewa-Mason-Saxena Low (Pressure Vapor)
- * Modèle de Ely-Hanly

Viscosité

- Chapman-Enskog-Brokaw (Low Pressure Vapor)
- Chung-Lee-Starling (liquid and Vapor)
- Dean-Stiel (High pressure Vapor)
- IAPS liquid and vapor for water
- Letsou-stiel (high température liquid)
- Lucas vapor
- Modified Andrade liquid
- *- Tabular Data Entry
- *- TRAPP liquid and Vapor
- * méthode de Ely-Hanly

Enthalpie, énergie libre, Entropie :

- Cavett liquide saturé
- Cavett/Steam table liquid
- Criss-Cobble liquid Enthalpy for Electrolytes
- DIPPR liquid Heat capacity
- Generalized solid sublimation
- *- Modified Wastan équation, Vaporization Enthalpy
- Polynomial solid
- Polynomial solid sublimation
- *- Tableau data Entry (Table de données d'entrée)
- Yen-Alexander liquid and Vapor
- Yen-Alexander/Steam table Vapor
- * Clausius-Clapeyron

Vapor liquid Equilibrium Ratio

- API-SOUR
- KENT-Eisenberg for Amines
- Modified Polynomial
- Tabular Data Entry

Complex solids Enthalpy

- Boie correlation
- Chang-Jirapongphan-Boston Correlation
- Cubic temperature Equation
- Dulong correlation
- Généralized Enthalpy Model
- Grummel and Davis correlation
- Heat-of-Combustion-Based correlation
- Kirov corrélation

Coefficients d'activité

- *- Extended scatchard-Hildebrand
- liquide ideal
- local composition Electrolyte
- MSA Electrolyte
- *- NRTL
- L'électrolyte de Pitzer
- VAN LAAR
- *- Wilson
- UNIFAC
- *- UNIQUAC
- * Margules
- * Uniquac modifié

Volume molaire

- API liquid volume for Petroleum fractions
- Brelvi-O'Connell Partial molar liquid
- Campbell-Thodos Saturated liquid (liquid saturé)
- Cavett Saturated liquid
- Chuch-Pransuitz/Rackett liquide comprimé
- Clarck liquid volume for electrolytes
- COSTALD liquide comprimé et saturé
- Debye-Huckel liquid volume for electrolytes
- Polynomial solid

- *- Rachett liquide saturé
- Table de données d'entrée
- * Grun-Yamada (1971).

Constantes d'Henry

- Modified Polynomial
- Table de données d'entrée

Surface-tension

- API for Petroleum fractions
- Hakim-steinberg-Stiel
- IAPS for water
- Tabular Data Entry

Diffusion Coefficient

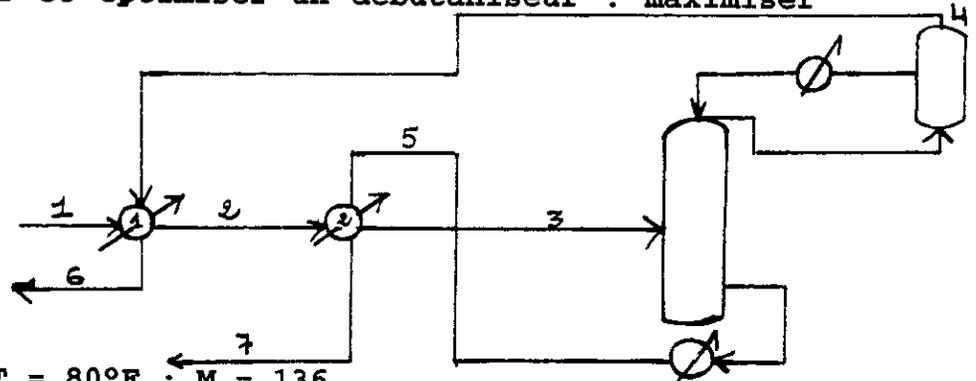
- Chapman-Enskog/Wilke-Lee (Low Pressure Vapor)
- Dawson-Khoury-Kobayashi (High Pressure Vapor)
- Tabular Data Entry
- Wilke-Chang liquid

- * : moèles ProSim
- : Modèles Aspen-Plus

Annexe 3 : Les exemples de simulation

1- Exemple sur DESIGN II :

Nous voulons simuler et optimiser un débutaniseur : maximiser l'économie en fuel.



Données d'entrée : $T = 80^{\circ}\text{F}$; $M = 136$

$^{\circ}\text{API} = 40$; $T_{\text{max}} = 350$

Feed		Flow (lbmol/h)
C_3	4	2000
IC_4	5	400
nC_4	6	600
iC_5	7	150.3
nC_5	8	200
C_6	10	50.8
C_{7+}	100	250

Ces données seront introduit dans l'ordinateur par l'intermediaire d'un programme.

Ce programme est un ensemble d'instructions que l'utilisateur doit suivre pour introduire ses données.

Le programme est le suivant :

```
Account Number          AB 123
Title Command  Debutanizer Design
                    HEA EXC 1 = OVHD, 4,1,-6,-2
                    TEMP APP = 10
Equipement             HEA EXC 2 = BOTS, 5,2,-7,-3
                    TEMP APP = 20

Module                 SH3 = DEC 4,3,-4,-5
                    PRETOP = 200
```

Commandes REC TOP6 = .98, RECBOT7 = .95
PAR

GEN COM = 4,5,6,7,8,10,100
API 100 = 40
AMB 100 = 350
AMW 100 = 136

General NAM 100 = C₇,

Commandes TEP1 = 80,210

FLO1 = 2000,400,600,150.3,50.8,250

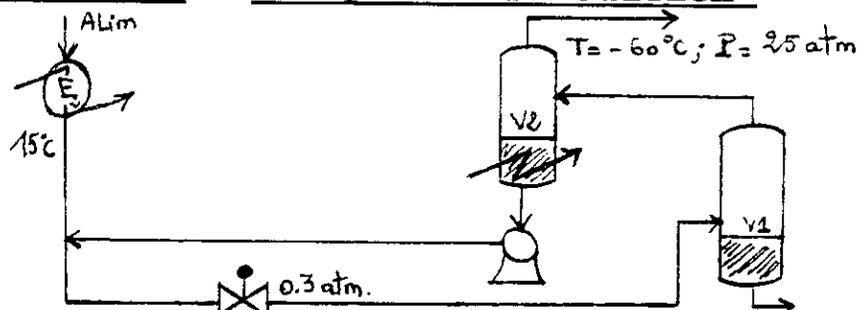
CHECK input, PENGH, PENDG, PENGK

END command

END.

Le résultat sera sous forme de plusieurs tableaux suivant le nombre de composé, donnant les caractéristiques telles que : enthalpie, débit, composition...à chaque étape du procédé.

2- Exemples sur ProSim : Exemple de simulation



Un mélange d'hydrocarbures (courant alimentation) est refroidi jusqu'à 15°C, puis mélangé au courant de recyclage. Il est ensuite détendu de 0.3 atm dans une vanne avant d'être envoyé dans un ballon de séparation de phases.

La phase vapeur sortant du ballon de séparation est dirigée vers un condenseur où elle est refroidie jusqu'à -60°C et détendue jusqu'à 25 atm.

Les condensats sont repris par une pompe qui les porte à 75 atm pour les recycler à la sortie du premier échangeur. Les produits sont la phase liquide du ballon et la phase non-condensée dans le condenseur.

Débit : 100 kmoles/h
 Température : 45°C
 Pression : 75 atm
 Composition molaire : Azote 9%, méthane 41.7%, Ethane 11.2%
 Propane 6.2%, butane 5.4%, Pentane 3%
 Hexane 8.1%, Heptane 13.3%, Octane 2.1%

Language d'entrée

Titre exemple de simulation simple

CONSTITUANTS

29	61	100	132	181	223	271	308	354
! N2	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8

UNITés

* Données C

! la température est donnée en celsius

! elle sera exprimée en Kevin dans les sorties

THERmodynamique

* SRK

! équation d'état de Soave-Redlich-Kwong

Modules

* TCONS E₂ EN = ALIM 50=C₁
 PAR : T = 15 ! température fixée à 15°C

* Mel M₁ EN = C₁ recycle 50 = C₂

* Flash V₁ EN = C₂ 50 = C₃ LOURDS
 PAR : TYPE = QP ! flash adiabatique
 ΔP = 0.3 ! la vanne est simulée avec le ballon

* FLASH V₂ EN = C3 50 = LEGERS C4
 PAR : TYPE TP ! flash isotherme
 T = -60°C ! Température fixée à -60°C
 P = 25 ! Pression fixée à 25 atm

* pompe POMPE EN C4 50 = RECYCLE
 PAR : P = 75 atm ! pression fixée à 75 atm

COUraints

ALIM TEMP = 40°C P = 75' atm
 DPM = 9.0 41.7 11.2 6.2 5.4 3.0 8.1 13.3 2.1

IMPressions

* Données sans : MODUTHER

* Courants ALPHA IMP3 : RECYCLE

FIN

Les résultats sont données sous forme de tableaux suivants les composés.-

Exemple :

numéro	29
masse mol (G)	28.0130
Temp fusion (K)	63.30
TEB (1 atm) (K)	77.40
TC	126.2
PC	33.50
VC	89.50
ZC	0.2900
Facteur acentrique	0.400E - 01

(densité à Tref, moment dipolaire, les coefficients de la capacité calorifique, ...)

Les caractéristiques des courants fluides à chaque branche du procédé sont données aussi :

Les résultats comportent aussi les caractéristiques de la pompe

- Rendement volumétrique = 0.6500
- Rendement mécanique = 1.0000
- Pression de refoulement = 75.000 atm
- Puissance calculée = 278.133 Kcal/HR
- Hauteur théorique de refoulement = 949.478 (M)

Annexe 4 : Tableaux

- Tableau des coordonnées des composés gazeux
- Tableau des coordonnées des composés liquides
- Tableau des coefficients de l'équation d'ANDRADE
- Tableau des valeurs du RBN
- Tableau des paramètres des équations
 - ANTOINE
 - PITZER
 - FROST-THODOS
 - RIEDEL
 - HARLACHER-BRAUN
 - LEE-KESLER

Tableau V.2.2.1: coordonnées des composés gazeux

Nc	Gaz	X	Y	N	Gas	X	Y
1	Acetic acid	7.7	14.3	29	Freon-113	11.3	14.0
2	Acetone	8.9	13.0	30	Helium	10.9	20.5
3	Acetylene	9.8	14.9	31	Hexane	8.6	11.8
4	Air	11.0	20.0	32	Hydrogen	11.2	12.4
5	Ammonia	8.4	16.0	33	3H ₂ + 1N ₂	11.2	17.2
6	Argon	10.5	22.4	34	Hydrogen bromide	8.8	20.9
7	Benzene	8.5	13.2	35	Hydrogen Chloride	8.8	18.7
8	Bromine	8.9	19.2	36	Hydrogen cyanide	9.8	14.9
9	Butane	9.2	13.7	37	Hydrogen iodide	9.0	21.3
10	Butylene	8.9	13.0	38	Hydrogen sulphide	8.6	18.0
11	Carbon dioxyde	9.5	18.7	39	Iodine	9.0	18.4
12	Carbon disulfide	8.0	16.0	40	Mercury	5.3	22.9
13	Carbon monoxide	11.0	20.0	41	Methane	9.9	15.5
14	Chlorine	9.0	18.4	42	Methyl alcohol	8.5	15.6
15	Chloroform	8.9	15.7	43	Nitric oxide	10.9	20.5
16	Cyanogen	9.2	15.2	44	Nitrogen	10.6	20.0
17	Cyclohexane	9.2	12.0	45	Nitrosyl chloride	8.0	17.6
18	Ethane	9.1	14.5	46	Nitrous oxide	8.8	19.0
19	Ethyl acetate	8.5	13.2	47	Oxygen	11.0	21.3
20	Ethyl alcohol	9.2	14.2	48	Pentane	7.0	12.8
21	Ethyl chloride	8.5	15.6	49	Propane	9.7	12.9
22	Ethyl ether	8.9	13.0	50	Propyl alcohol	8.4	13.4
23	Ethylene	9.5	15.1	51	Propylène	9.0	13.8
24	Fluorine	7.3	23.8	52	Sulphur dioxide	9.6	17.0
25	Freon-11	10.6	15.1	53	Toluene	8.6	12.4
26	Freon-12	11.1	16.0	54	2,3,3- Trimethylbutane	9.5	10.5
27	Freon-21	10.8	15.3	55	Water	8.0	16.0
28	Freon-22	10.1	17.0	56	Xenon	9.3	23.0

Tableau V.2.2.2.2 : coordonnées des composés liquides

Liquid	X	Y	Liquid	X	Y
Acetaldehyde	15.2	4.8	Freon-113	12.5	11.4
Acetic acid, 100%	12.1	14.2	Glycerol, 100%	2.0	30.0
Acetic acid, 70%	9.5	17.0	Glycérol, 50%	6.9	19.6
Acetic anhydride	12.7	12.8	Heptane	14.1	8.4
Acetone, 35%	14.5	7.2	Hexane	14.7	7.0
Acetone, 35%	7.9	15.0	Hydrochloric acid, 31.5%	13.0	16.6
Acetonitrile	14.4	7.4	Lodobensène	12.8	15.9
Acrylic acid	12.3	13.9	Isobutyl alcohol	7.1	18.0
Allyl alcohol	10.2	14.3	Isobutyric acid	12.2	14.4
Allyl bromide	14.4	9.6	Isopropyl alcohol	8.2	16.0
Allyl iodide	14.0	11.7	Isopropyl bromide	14.1	9.2
Ammonia, 100%	12.6	2.0	Isopropyl chloride	13.9	7.1
Ammonia, 26%	10.1	13.9	Isopropyl iodide	13.7	11.2
Amyl acétate	11.8	12.5	Kerosène	10.2	16.9
Amyl alcohol	7.5	18.4	Linseed oil, raw	7.5	27.2
Anisole	8.1	18.7	Mercury	18.4	16.4
Arsenic trichloride	12.3	13.5	Methanol, 100%	12.4	10.5
Bensène	13.9	14.5	Methanol, 90%	12.3	11.8
Bride, CaCl ₂ , 25%	12.5	10.9	Methanol, 40%	7.8	15.5
Bride, NaCl, 25%	6.6	15.9	Methyl acetate	4.2	8.2
Bromine	10.2	16.6	Methyl acrylate	13.0	9.5
Bromotoluène	14.2	13.2	Methyl i-butyarte	12.3	9.7
Butyl acétate	20.0	15.9	Methyl n-butyarte	13.2	10.3
Butyl acrylate	12.3	11.0	Methyl chloride	15.0	3.8
Buty alcohol	11.5	12.6	Methyl ethyl ketone	13.9	8.6
Butyric acid	8.6	17.2	Methyl formate	14.2	7.5
Carbon dioxyde	12.1	15.3	Methyl iodide	14.3	9.3
Carbon disulfide	11.6	0.3	Methyl propionate	13.5	9.0
Carbon tetrachloride	16.1	7.5	Methyl propyl ketone	14.3	9.5
Clorobenzène	12.7	13.1	Methyl sulfide	15.3	6.4
Chloroform	12.3	10.2	Naphtalène	7.9	18.1

Liquid	X	Y	Liquid	X	Y
Chlorosulfonic acid	11.2	18.1	Nitric acid 95%	12.8	13.8
Chlorotoluène, ortho	13.0	13.3	Nitric acid 60%	10.8	17.0
Chlorotoluène, méta	13.3	12.6	Nitrobenzene	10.6	16.2
Chlorotoluène, para	13.3	12.5	Nitrogen dioxide	12.9	8.6
Crésol, méta	2.5	20.5	Octane	11.0	17.0
Cycexanol	2.9	24.3	Octyl alcohol	13.7	10.0
Cyclohexane	9.8	12.9	Pentachloroethene	6.6	21.1
Dibromomethane	12.7	15.7	Pentane	10.9	17.3
Dichloroethane	13.2	12.2	Phenol	14.9	5.2
Dichloromethane	14.6	8.9	Phosphorus tribromide	6.9	20.8
Diethyl ketone	13.5	9.2	Phosphorus trichloride	13.8	16.7
Diethyl oxalate	11.0	16.4	Propionic acid	16.2	10.9
Diethyl glycol	5.0	24.7	Propyl acetate	12.8	13.8
Diethyl	12.0	18.7	Propyl alcohol	13.1	10.3
Diethylene ether	13.2	8.6	Propyl bromide	9.1	16.5
Diethyl oxalate	10.3	17.7	Propyl chloride	14.1	9.6
Ethyl acetate	13.7	9.1	Propyl formate	14.4	7.5
Ethyl acrylate	12.7	10.4	Propyl iodide	13.1	9.7
Ethyl alcohol 100%	10.5	13.8	Sodium	14.1	11.6
Ethyl alcohol 95%	9.8	14.3	Sodium hydroxide 50%	16.4	13.9
Ethyl alcohol 45%	6.5	16.6	Stannic chloride	3.2	25.8
Ethyl benzene	13.2	11.5	Succinonitrile	10.1	12.8
Ethyl bromide	14.5	8.1	Sulfur dioxide	15.2	20.8
2 Ethyl butyl acrylate	11.2	14.0	Sulfure acid 110%	7.2	7.1
Ethyl chloride	14.8	6.0	Sulfure acid 100%	8.0	27.4
Ethyl ether	14.5	5.3	Sulfure acid 98%	7.0	25.1
2 Ethyl hexyl acrylate	14.2	8.4	Sulfure acid 60%	10.2	24.8
Ethyl iodide	9.0	15.0	Sulfuryl chloride	15.2	21.3
Ethyl propionate	14.7	10.3	Tetrachloroethane	11.9	12.4
Ethyl propyl ether	13.2	9.9	Thiophene	13.2	15.7
Ethyl sulfide	14.0	7.0	Titanium tetrachloride	14.4	11.0
Ethylene bromide	13.8	8.9	Toluene	13.7	12.3
Ethylene chloride	11.9	15.7	Trichloroethylene	14.8	10.4
Ethylene glycol	12.7	12.2	Triethylene glycol	4.7	10.5
Ethylene chloride	6.0	23.6	Turpentine	11.5	24.8
Fuorobenzene	14.1	8.7	Vinyl acetate	14.0	14.9
Formic acid	13.7	10.4	Vinyl toluene	13.4	8.8
Freon-11	10.7	15.8	Water	10.2	12.0
Freon-12	14.4	9.0	Xylene, ortho	13.5	13.0
Freon-21	16.8	5.6	Xylene, meta	13.9	12.1
Freon-22	15.7	7.5	Xylene, para	13.9	10.6
	17.2	4.7			10.9

. Tableau V.2.2.1 : Les coefficients A et B de l'équation d'ANDRADE

N°	Nom	A	B
1	Acétal dehyde	$1.247 \cdot 10^{-5}$	7028.02
2	Acétamide	$4.198 \cdot 10^{-6}$	18080.9
3	Acétate den-amyle	$2.873 \cdot 10^{-6}$	14908.2
4	Acetate de n-butyle	$1.068 \cdot 10^{-5}$	10280.7
5	Acétate d'éthyle	$1.330 \cdot 10^{-5}$	8591.32
6	Acetate d'isobutyle	$1.072 \cdot 10^{-5}$	10203.8
7	Acetate de methyle	$1.621 \cdot 10^{-5}$	7867
8	Acetate de propyle	$1.330 \cdot 10^{-5}$	9216.75
9	Acetate de vinyle	$1.588 \cdot 10^{-5}$	8766.25
10	Acetone	$1.582 \cdot 10^{-5}$	7344.9
11	Acetonitrile	$2.573 \cdot 10^{-5}$	6397.4
12	Acide acétique	$1.408 \cdot 10^{-5}$	10796.8
13	Acide acrylique	$4.107 \cdot 10^{-6}$	14033.1
14	Acide benzoique	$3.819 \cdot 10^{-10}$	50116.6
15	Aciden-butyrrique	$1.104 \cdot 10^{-5}$	12109.3
16	Acide maganique	$3.269 \cdot 10^{-7}$	22491.2
17	Acide formique	$1.958 \cdot 10^{-6}$	18805.3
18	Acide heptanoique	$1.958 \cdot 10^{-6}$	18805.3
19	Acide isobutyrique	$1.286 \cdot 10^{-5}$	11260.0
20	Acide nitrique	$1.861 \cdot 10^{-6}$	16144.6
21	Acide propionique	$1.630 \cdot 10^{-5}$	10263.0
22	Acide sulfurique	$1.459 \cdot 10^{-6}$	23645.9

N°	Nom	A	B
23	Acrylate d'éthyle	$1.67.10^{-5}$	8386.2
24	Acrylonitrile	$2.336.10^{-5}$	6572.6
25	Alcool allylique	$2.671.0^{-6}$	15156.7
26	Alcool amylique	$2.371.10^{-7}$	23898.8
27	Alcool benzylique	$1.036.10^{-6}$	21039.1
28	Alcool n-butylique	$1.158.10^{-6}$	19092.5
29	Alcool éthylique	$5.703.10^{-6}$	13009.8
30	Alcool heptylique	$8.823.10^{-8}$	27501.9
31	Alcool hexylique	$4.754.10^{-7}$	22579.9
32	Alcool i-amylique	$1.074.10^{-7}$	25747.2
33	Alcool i-butyrique	$3.227.10^{-7}$	22974.5
34	Alcool i-Propylique	$3.169 .10^{-7}$	21724
35	Alcool méthylique	$6.602.10^{-6}$	10950.1
36	Alcool n-octylique	$1.427.10^{-7}$	26896.7
37	Alcool n- propylique	$1.221.10^{-6}$	18265.5
38	Aldéhyde n-butylique	$9.473.10^{-6}$	9042.3
39	Aldéhyde formique	$1.36.10^{-5}$	6123.0
40	Aldehique i- butyrque	$1.480.10^{-5}$	8884.6
41	Aldehyde propionique	$1.717.10^{-5}$	6575.2
42	Ammoniaque	$7.180.10^{-6}$	7351.1
43	Anhydride acétique	$1.928.10^{-5}$	9422.7
44	Anhydride maléique	$2.49.10^{-6}$	18234.8

N°	Nom	A	B
45	Aniline	$1.071.10^{-6}$	20436.4
46	anisole	$6.347.10^{-5}$	7472.2
47	Anthracène	$5.472.10^{-5}$	9858.3
48	Argon	$1.52.10^{-5}$	2064.7
49	Azote	$1.030.10^{-5}$	1773.4
50	Benzène	$8.783.10^{-6}$	10446
51	Benzoate de butyle	$3.03.10^{-6}$	16892.2
52	Benzoate d'éthyle	$6.03.10^{-6}$	14329.4
53	Benzoate de méthyle	$4.904.10^{-6}$	14695.4
54	Benzo nitrile	$7.796.10^{-6}$	12527.1
55	Benzylaniline	$1.323.10^{-4}$	6315.9
56	Bismuth	$4.275.10^{-4}$	6392.6
57	Brome	$4.835.10^{-5}$	7377.8
58	Bromobenzène	$2.287.10^{-5}$	9520.67
59	Bromoforme	$3.171.10^{-5}$	10111.1
60	Bromure d'allyle	2650.10^{-5}	7181.83
61	Bromure de nbutyle	2361.10^{-5}	8004.7
62	Bromure d'i-butyle	$1.945.10^{-5}$	8519.4
63	Bromure d'éthyle	$2.11.10^{-5}$	7079.7
64	Bromure d'éthylène	$1.85.10^{-5}$	11087.3
65	Bromure de méthyle	$3.872.10^{-5}$	5707.9
66	Bromure de méthylène	$3.54.10^{-5}$	8211.2
67	1,3-Butadiène	$1.436.10^{-5}$	5754.7

N°	Nom	A	B
68	n-butane	$1.695.10^{-5}$	5586.26
69	n-butylamine	$1.225.10^{-5}$	9039
70	n-butylbenzène	$1.245.10^{-5}$	10794
71	n-butyrate d'éthyle	$1.431.10^{-5}$	9346.8
72	n-butyrate de méthyle	$1.474.10^{-5}$	8955.2
73	n-butyronitrile	$1.928.10^{-5}$	8441.7
74	Caprate d'éthyle	$2.881.10^{-6}$	16325.6
75	Caproate d'éthyle	$9.692.10^{-6}$	11327
76	Caprylate d'éthyle	$8.108.10^{-6}$	12837.7
77	Chlore	$7.581.10^{-5}$	3700.7
78	chlorobenzene	$2.015.10^{-5}$	8994.5
79	Chloroforme	$3.367.10^{-5}$	6860.7
80	o-chlorophenol	$3.655.10^{-7}$	23116.3
81	m-chlorophenol	$7.647.10^{-9}$	35270.2
82	p-chlorophénol	$3.341.10^{-8}$	32010.6
83	o-chlorotoluène	$4.405.10^{-5}$	7567.9
84	p-chlorotoluène	$2.044.10^{-5}$	9201.6
85	chlorure d'allyle	$1.976.10^{-5}$	6882.7
86	chlorure de benzyle	$1.099.10^{-5}$	11782.8
87	chlorure d'éthyle	$2.081.10^{-5}$	6144.3
88	chlorure d'hydrogène	$1.307.10^{-4}$	1961.7
89	chlorure d'i-butyle	$1.653.10^{-5}$	8111.9
90	chlorure d'i-propyle	$3.605.10^{-5}$	5863.5
91	chlorure de méthyle	$7.184.10^{-5}$	3088.5

N°	Nom	A	B
92	chlorure de méthylène	$2.706 \cdot 10^{-5}$	10190
93	chlorure de propyle	$1.892 \cdot 10^{-5}$	7097.9
94	chlorure de vinyle	$2.199 \cdot 10^{-5}$	5301.2
95	o-crésol	$8.056 \cdot 10^{-8}$	28617.1
96	m-crésol	$1.307 \cdot 10^{-8}$	34613
97	p-crésol	$1.95 \cdot 10^{-8}$	33516.6
98	cuivre	$1.294 \cdot 10^{-3}$	10784.8
99	cyanure d'hydrogène	$4.659 \cdot 10^{-5}$	3695.9
100	cyclohexane	$6.058 \cdot 10^{-6}$	12360.9
101	cyclohexanol	$1.593 \cdot 10^{-9}$	42890.8
102	cyclohexanone	$4.57 \cdot 10^{-6}$	15074.2
103	cyclohexène	$1.256 \cdot 10^{-5}$	9647.8
104	cyclopentane	$1.81 \cdot 10^{-5}$	7734.3
105	cyclopentanol	$5.389 \cdot 10^{-8}$	29883.9
106	n-décane	$1.157 \cdot 10^{-6}$	10692.5
107	Di-n-amylether	$7.077 \cdot 10^{-6}$	12274.1
108	Di-n-butylether	$1.113 \cdot 10^{-5}$	10059.3
109	Dibutylamine	$9.351 \cdot 10^{-6}$	11131.3
110	o-dichlorobenzène	$1.829 \cdot 10^{-5}$	10613.6
111	m-dichlorobenzène	$4.606 \cdot 10^{-5}$	7700
112	p-dichlorobenzène	$2.815 \cdot 10^{-5}$	9262.5
113	1.2 dichloroéthane	$1.972 \cdot 10^{-5}$	9073.8
114	diéthylamine	$8.573 \cdot 10^{-6}$	9072.9

N°	Nom	A	B
115	diéthylcétone	$1.866.10^{-5}$	7833.6
116	diméthylamine	$5.639.10^{-6}$	8661.6
117	dioxyde de carbone	$3.763.10^{-6}$	7390.8
118	dioxyde de soufre	$3.483.10^{-5}$	5496.9
119	diphenile	$1.034.10^{-5}$	14049.6
120	disulfure de carbone	$4.277.10^{-5}$	5247.1
121	n-dodécane	$1.044.10^{-5}$	12092.6
122	n-Eicosane	$-9.553.10^{-6}$	15532.4
123	éthane	$2.074.10^{-5}$	3145.4
124	ether ethylique	$5.223.10^{-6}$	13145.4
125	Ethylamine	$1.403.10^{-5}$	6760
126	Ethylbénzène	$1.7.10^{-5}$	6519.7
127	Ethylcyclohexane	$1.69.10^{-5}$	8988
128	Ethylène	$1.571.10^{-5}$	9695.4
129	Ethylèneglycol	$1.657.10^{-5}$	3226.2
130	n-engénol	$4.069.10^{-7}$	26189.2
131	fluor	$4.763.10^{-9}$	35415.8
132	fluorobenzène	$1.929.10^{-5}$	1598.2
133	Formamide	$2.958.10^{-6}$	17494.1
134	formiate d'éthyle	$1.732.10^{-5}$	7659
135	formiate de méthyle	$2.086.10^{-5}$	6860.2
136	formiate de vinyle	$1.243.10^{-5}$	7458
137	furfural	$9.173.10^{-8}$	24444.2
138	glycerine	$2.472.10^{-20}$	10506.3
139	n-heptane	$1.324.10^{-5}$	8361.0

N°	Nom	A	B
140	1-heptanol	$2.774 \cdot 10^{-7}$	24639.2
141	1-heptène	$1.904 \cdot 10^{-5}$	7058.4
142	n-hexane	$1.771 \cdot 10^{-5}$	6945.7
143	1-hexène	$1.822 \cdot 10^{-5}$	6592.1
144	Hydrogène	$3.122 \cdot 10^{-6}$	246.733
145	Iode	$8.454 \cdot 10^{-5}$	10696.1
146	Iodobenzène	$2.148 \cdot 10^{-5}$	10630.1
147	Iodure d'éthyle	$3.54 \cdot 10^{-5}$	6861.7
148	Iodure de méthyle	$4.138 \cdot 10^{-5}$	6064.1
149	Isobutane	$1.099 \cdot 10^{-5}$	6668.6
150	Isoheptane	$1.75 \cdot 10^{-5}$	7525.7
151	Isohexane	$1.748 \cdot 10^{-5}$	6970.1
152	Isopentane	$1.408 \cdot 10^{-5}$	6733.9
153	Isoprène	$8.29 \cdot 10^{-5}$	59857.6
154	mercure	$5.571 \cdot 10^{-4}$	2499.5
155	méthane	$1.032 \cdot 10^{-5}$	2244
156	méthanol	$7.404 \cdot 10^{-6}$	10681
157	méthylamine	$1.704 \cdot 10^{-5}$	5969.3
158	oxygène	$2.083 \cdot 10^{-5}$	1671.6
159	n-pentane	$1.91 \cdot 10^{-5}$	6004.9
160	1-pentène	$1.789 \cdot 10^{-5}$	5843.9
161	phénol	$1.3 \cdot 10^{-7}$	27499
162	phosphore	$4.427 \cdot 10^{-5}$	9675.5
163	plomb	$4.05 \cdot 10^{-4}$	9672.6
164	propane	$2.0 \cdot 10^{-5}$	4339.6
165	styrène	$1.229 \cdot 10^{-5}$	10120.8

N°	Nom	A	B
166	sulfure d'hydrogène	$7.048 \cdot 10^{-5}$	3181.5
167	2-methyl heptane	$3.311 \cdot 10^{-6}$	12321.7
168	2-methyl hexane	$1.408 \cdot 10^{-5}$	7982.0
169	3-methyl pentane	$1.864 \cdot 10^{-5}$	6882.6
170	naphtalène	$3.294 \cdot 10^{-6}$	16770.3
171	néon	$6.125 \cdot 10^{-5}$	683.0
172	nitrobenzene	$4719 \cdot 10^{-6}$	14779.7
173	nitrométhane	$1.881 \cdot 10^{-5}$	8637.8
174	o-nitrotoluène	$9.173 \cdot 10^{-6}$	13574.9
175	m- nitrotoluène	$1.562 \cdot 10^{-6}$	17736.6
176	p- nitrotoluène	$1.014 \cdot 10^{-5}$	13231.4
177	n-nonane	$8.249 \cdot 10^{-5}$	10798.2
178	octadécane	$9667 \cdot 10^{-6}$	14846
179	octane	$1.312 \cdot 10^{-5}$	9068.9
180	1-octanol	$2.841 \cdot 10^{-7}$	25119.6
181	oxyde de carbone	$1.193 \cdot 10^{-5}$	1800.6
182	oxyde d'éthylène	$1.775 \cdot 10^{-5}$	6505.1
183	pyridine	$9.04 \cdot 10^{-6}$	11430.4
184	tétraline	$8.006 \cdot 10^{-6}$	13886.3
185	thiophène	$1.416 \cdot 10^{-5}$	9379.7
186	toluène	$1.476 \cdot 10^{-5}$	8946.9
187	o- toluidine	$9.019 \cdot 10^{-7}$	20760.8
188	m-toluidine	$2.3315 \cdot 10^{-6}$	17841.6
189	p-toluidine	$8.455 \cdot 10^{-6}$	14155.5

190	n-tridécane	$1.001 \cdot 10^{-5}$	12714.1
191	triméthylanique	$2.295 \cdot 10^{-5}$	6748.2
192	u-undécane	$1.035 \cdot 10^{-5}$	11592.2
193	o-xylène	$1.471 \cdot 10^{-5}$	9776.3
194	m-xylène	$1.706 \cdot 10^{-5}$	8753.3
195	p-xylène	$1.612 \cdot 10^{-5}$	8992
196	o-fluorotoluène	$1.633 \cdot 10^{-5}$	9088.9
197	m-fluorotoluène	$1.997 \cdot 10^{-5}$	8310.6
198	benzoate d'éthyle	$6.032 \cdot 10^{-6}$	14329.4
199	acide laurique	$4.125 \cdot 10^{-6}$	19869.5
200	acide salicylique	$7.898 \cdot 10^{-6}$	14171.5

Tableau V.3.2.1: les valeurs du RBN

N.O.R M	RESEARCH BLENDING NUMBER										NO. RM
	X0	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	
61	52,2	52,2	52,2	52,2	52,3	52,3	52,3	52,3	52,4	52,4	61
62	52,4	52,4	52,4	52,5	52,5	52,5	52,5	52,6	52,6	52,6	62
63	52,6	52,7	52,7	52,7	52,7	52,8	52,8	52,8	52,8	52,9	63
64	52,9	52,9	52,9	52,9	53,0	53,0	53,0	52,0	53,1	53,1	64
65	53,1	53,1	53,1	53,2	53,2	53,2	53,2	53,3	53,3	53,3	65
66	53,3	53,4	53,4	53,4	53,4	53,5	53,5	53,5	53,6	53,6	66
67	53,6	53,6	53,7	53,7	53,7	53,7	53,8	53,8	53,8	53,8	67
68	53,9	53,9	53,9	53,9	54	54	54	54	54,1	54,1	68
69	54,1	54,1	54,2	54,2	54,2	54,2	54,3	54,3	54,3	54,3	69
70	54,4	54,4	54,4	54,4	54,4	54,5	54,5	54,6	54,6	54,6	70
71	54,7	54,7	54,7	54,8	54,8	54,8	54,8	54,9	54,9	54,9	71
72	55,0	55,0	55,0	55,0	55,1	54,1	55,1	55,1	55,2	55,2	72
73	55,2	55,3	55,3	55,3	55,3	55,4	55,4	55,4	55,5	55,5	73
74	55,5	55,6	55,6	55,6	55,7	55,7	55,7	55,8	55,8	55,8	74
75	55,9	55,9	55,9	55,9	56,0	56,0	56,0	56,1	56,1	56,1	75
76	56,1	56,2	56,2	56,2	56,3	56,3	56,3	56,4	56,4	56,5	76
77	56,5	56,5	56,6	56,2	56,6	56,7	56,7	56,7	56,8	56,8	77
78	56,8	56,9	56,9	56,9	57,0	57,0	57,0	57,1	57,1	57,1	78
79	56,2	57,2	57,2	57,3	57,3	57,3	57,4	57,4	57,5	57,5	79
80	57,5	57,6	57,6	57,6	57,7	57,7	57,8	57,8	57,8	57,9	80
81	57,9	57,9	58,0	58,0	58,1	58,1	58,1	58,2	58,2	58,3	81

82	58.3	58.3	58.4	58.4	58.5	58.5	58.6	58.6	58.6	58.7	82
83	58.7	58.7	58.8	58.8	58.9	58.9	59.0	59.0	59.0	59.1	83
84	59.1	59.2	59.2	59.3	59.3	59.4	59.4	59.5	59.5	59.5	84
85	59.6	59.6	59.7	59.7	59.8	59.8	59.9	59.9	60.0	60.0	85
86	60	60.1	60.1	60.2	60.2	60.3	60.3	60.4	60.4	60.5	86
87	60.5	60.5	60.6	60.7	60.7	60.8	60.8	60.9	61	61	87
88	61	61	61.1	61.2	61.2	61.3	61.3	61.4	61.5	61.5	88
89	61.5	61.5	61.6	61.7	61.7	61.8	61.9	61.9	62.0	62.0	89
90	62.1	62.1	62.2	62.2	62.3	62.4	62.4	62.5	62.5	62.6	90
91	62.7	62.7	62.8	62.9	62.9	63.0	63.0	63.1	63.1	63.2	91
92	63.3	63.3	63.4	63.5	63.5	63.6	63.7	63.7	63.8	63.9	92
93	63.9	64	64.1	64.2	64.3	64.3	64.4	64.5	64.6	64.6	93
94	64.7	64.8	64.9	65.0	65.0	65.0	65.2	65.3	65.4	65.5	94
95	65.5	65.6	65.7	65.7	65.8	65.9	66.0	66.1	66.2	66.3	95
96	66.4	66.5	66.6	66.7	66.8	66.9	67.0	67.1	67.2	67.3	96
97	67.4	67.5	67.6	67.7	67.8	67.9	68.0	68.1	68.3	68.3	97
98	68.4	68.5	68.6	68.7	68.8	68.9	69.0	69.1	69.3	69.3	98
99	69.5	69.6	69.7	69.8	69.9	70.0	70.1	70.4	70.5	70.5	99
100	70.6	70.7	70.8	71.0	71.1	71.2	71.3	71.4	71.5	71.7	100

101	71.8	71.9	72.0	72.1	72.3	72.4	72.5	72.7	72.8	72.9	101
102	73.1	73.2	73.3	73.4	73.6	73.8	74.0	74.1	74.3	74.4	102
103	74.6	74.8	74.9	75.1	75.3	75.5	75.6	75.8	76.0	76.2	103
104	76.4	76.6	76.8	77.0	77.2	77.5	77.7	77.9	78.2	78.4	104
105	78.7	79.0	79.2	79.5	79.8	80.1	80.4	80.8	81.1	81.5	105
106	81.8	82.2	82.6	83	83.4	83.9	84.3	84.8	85.5	86.0	106
107	86.6	87.3	87.9								107

Tableau : V.5.2.1 Les paramètres des équations utilisées

AA, BA, CA : constantes l'équation d'Antoine, Ts, TI : limites d'utilisation de cette équation

AH, BH, CH, DH : constantes de l'équation d' Harlacher-Braun

Num	Nom du composé	AA	BA	CA	TS _x	TI _x	AH	BH	CH	DH
1	Argon	15.233	700.51	-5.84	94	81	31.173	-1039.64	-2.832	0.264
2	chlorure de nitrosyle	16.9505	2520.7	-23.46	285	210	36.38	-3748.6	-2.819	1.2
3	chlore	15.961	1978.32	-27.01	264	172	42.217	-3412.28	-3.894	1.27
4	fluor	15.67	714.1	-6	91	59	30.772	-1040.27	-2.683	0.21
5	trifluorure d'azote	15.6107	1155.69	-15.37	155	103	39.219	-1970.37	-3.81	0.679
6	bromure d'hydrogène	14.4687	1242.53	-47.86	221	184	28.102	-2394.35	-1.843	0.871
7	chlorure d'hydrogène	16.504	1714.25	-14.45	200	137	38.614	-2626.67	-3.443	0.717
8	fluorure d'hydrogène	17.6958	3404.49	15.06	313	206	26.16	-3496.5	-1.338	1.84
9	iodure d'hydrogène	12.9149	957.96	-85.06	256	215	33.884	-3013.08	-2.673	1.23
10	hydrogène	13.633	164.9	3.19	25	14	12.05	-114.95	0.048	0.048
11	eau	18.3036	3816.4	-46.13	441	284	55.336	-6869.5	1.05	1.05
12	sulfure d'hydrogène	16.104	1768.69	-26.06	230	190	42.687	3132.3	0.871	0.871
13	ammoniac	16.9481	2132.5	-32.98	261	179	51.947	-4104.67	0.82	0.82

Num	Nom du composé	AA	BA	CA	TS _K	TI _K	AH	BH	CH	DH
14	Krypton	15.2677	958.75	-8.71	129	113	30.717	-1408.8	-2.579	0.448
15	oxyde d'azote	20.1314	1572.52	-4.88	140	95	61.514	-2465.78	-7.211	0.279
16	dioxyde d'azote	20.5324	4141.29	3.65	320	230	61.862	-6073.34	-6.094	1.04
17	azote	14.9542	588.72	-6.6	90	54	31.927	-924.86	-3.075	0.264
18	oxyde nitreux	16.1271	1506.49	-25.99	200	144	46.444	-2867.98	-4.655	0.743
19	néon	14.0099	180.47	-261	29	24	26.181	-295.44	-2.645	0.041
20	oxygène	15.4075	734.55	-6.45	100	63	31.041	-1082.52	-2.761	0.265
21	dioxyde de soufre	16.768	2302.35	-35.97	28	195	55.502	-455.5	-5.666	1.32
22	trioxyde de soufre	20.8403	3995.7	-36.66	332	290	139.56	-10420.1	-17.38	1.6
23	tetrachlorure de carbone	15.8742	2808.2	-45.99	374	253	51.009	-5386.5	-4.953	3.82
24	monoxyde de carbone	14.3686	530.22	-13.15	108	63	32.981	-997.2	-3.216	0.284
25	disulfure de carbone	15.9844	2690.85	-31.62	342	228	37.401	-4255.99	-3.027	2.21
26	Fréon 22	15.5602	1704.8	-41.3	240	225	52.663	52.663	-3768.03	-5.47
27	dioxyde de carbone	22.5898	3103.39	-0.16	204	154	52.703	-3146.6	-5.572	0.705
28	chloroforme	15.9732	2696.8	-46.16	370	260	52.872	-5359.5	-5.2	2.96
29	cyanure d'hydrogène	16.5138	2585.8	-37.15	330	234	37.742	-4183.37	-3.004	2.18

Num	Nom du composé	AA	BA	CA	TS _K	TI _K	AH	BH	CH	DH
30	dichlorométhane	16.3029	2622.44	-41.7	332	229	53.767	-5110.2	-5.364	2.41
31	formaldehyde	16.4775	2204.13	-30.15	271	185	45.118	-3873.26	-4.2	3.41
32	bromure de méthyle	16.0252	2077.97	-29.55	266	180	55.295	-4467.46	-5.788	2.35
33	chlorure de méthyle	16.3428	1704.41	-19.27	209	141	43.66	-3642.21	-4.064	1.46
34	fluorure de méthyle	16.0905	2639.55	-36.5	325	260	43.063	-2890.54	-4.102	0.906
35	iodure de méthyle	16.1052	2271.71	-34.38	326	215	47.781	-4686.9	-4.577	2.84
36	nitrométhane	16.2193	2972.64	-64.15	409	278	50.133	-5996.3	-4.641	3.08
37	méthane	15.2243	597.84	-7.16	120	93	30.715	-1300.61	-2.641	0.442
38	méthanol	18.5875	3626.55	-34.29	364	257	72.268	-7064.2	-7.68	186
39	méthylamine	17.2622	2484.83	-32.92	311	212	62.306	-4954.32	-6.642	1.4
40	Fréon 113	15.8424	2532.61	-45.67	360	250	57.097	-5249.75	-5.913	3.91
41	Acétylène	16.3481	1637.14	-19.77	202	194	46.122	-2891.04	-4.612	0.863
42	Chlorure de vinyle	14.9601	1803.84	-43.15	290	185	48.672	-3955.89	-4.823	1.85
43	Xénon	15.2958	1303.92	-14.5	178	158	31.429	-1951.76	-2.544	0.804
44	acétonitrile	16.2874	2945.47	-49.15	390	260	47.394	-5392.43	-4.357	3.49
45	Ethylène	15.5368	1347.01	-18.15	182	120	38.961	-2282.37	-3.678	0.881
46	acide acétique	16.808	3405.57	-56.37	430	290	57.834	-6841.98	-5.647	3.44
47	formiate de méthyle	16.5104	2590.87	-42.6	324	225	57.84	-5258.9	-5.939	2.23

Num	Nom du composé	AA	BA	CA	TS _K	TI _K	AH	BH	CH	DH
48	Bromure d'éthyle	15.9338	2511.68	-41.44	333	226	37.985	-4246.3	-3.09	2.29
49	chlorure d'éthyle	15.98	2332.01	-36.48	310	200	48.665	-4364.03	-4.733	2.26
50	éthane	15.6637	1511.42	-17.16	199	130	38.759	-2460.42	-3.601	1.073
51	diméthylether	16.8467	2361.44	-17.1	265	179	48.857	-3840.2	-4.856	1.71
52	ethanol	18.9119	3803.98	-41.68	369	270	83.319	-7994.9	-9.201	2.35
53	éthylamine	17.0073	2618.73	-37.3	316	215	64.056	-5352	-6.875	2.08
54	diméthylamine	16.2653	2358.77	-35.15	310	218	67.611	-5350.4	-7.435	2.03
55	propionitrile	15.9571	2940.86	-55.15	405	270	53.398	-5935.4	-5.2	4.28
56	propylène	15.7027	1807.53	-26.15	240	160	44.792	-3260.3	-4.379	1.63
57	acide propionique	17.3789	3723.42	-64.48	450	315	76.49	-8619.5	-8.139	3.93
58	formiate d'éthyle	16.1611	2603.3	-54.15	360	240	60.604	-5724.26	-6.305	3.07
59	acétate de méthyle	16.1295	2601.92	-56.15	360	245	61.268	-5840.56	-6.374	3.08
60	propane	15.726	1872.46	-25.16	249	164	43.492	-3266.9	-4.179	1.81
61	1-propanol	17.5439	3166.38	-80.15	400	285	101.82	-9416.25	-11.79	3.13
62	méthyl ethylether	13.5435	1161.63	-112.4	310	205	74.838	-5631.8	-8.549	2.45
63	triméthylamine	16.0499	2230.51	-39.15	305	215	50.869	-4261.5	-5.127	2.59
64	butynonitrile	16.2092	3202.21	-56.16	433	307	56.805	-6476.7	-5.599	5.03
65	Isobutène	15.7528	2125.75	-33.15	290	190	50.832	-4104.56	-5.157	2.46
66	méthyléthylcétone	16.5986	3150.42	-36.65	376	257	47.683	-5328.2	-4.426	3.88

Num	Nom du composé	AA	BA	CA	TS _x	TI _x	AH	BH	CH	DH
67	acide n-butyrique	17.924	4130.93	-70.55	470	335	73.806	-9015.33	-7.651	4.22
68	acetate d'éthyle	16.1516	2790.5	-57.15	385	260	65.669	-6394.77	-6.965	4.01
69	acide isobutyrique	16.7792	3385.49	-94.15	465	330	82.657	-9222.72	-8.986	5.15
70	propionate de n-méthyle	16.1693	2804.06	-85.92	385	260	65.367	-6419.79	-6.915	3.98
71	formiate de n-propyl	15.7671	2593.95	-69.69	360	280	63.318	-6292.56	-6.635	4.01
72	n-butane	15.6782	2154.9	-34.42	290	195	48.334	-4065.57	-4.781	2.68
73	isobutane	15.5381	2032.73	-33.15	280	187	46.141	-3771.21	-4.509	2.57
74	éthylether	16.0828	2511.29	-41.95	340	225	57.26	-5105.9	-5.945	3.4
75	diéthylamine	16.0545	2595.01	-53.15	350	242	64.89	-5912.65	-6.955	3.73
76	1-pentène	15.7646	2405.96	-39.63	325	220	51.816	-4694.26	-5.202	3.42
77	diéthylcétone	16.8138	3410.51	-40.15	400	275	111.2	-9773.63	-13.26	4.73
78	formiate d'i-butyle	16.2292	2980.47	-64.15	410	280	58.42	-6314.51	-5.879	4.41
79	acétate de propyle	16.2291	2980.47	-64.16	396	276	69.656	-7028.88	-7.475	5.1
80	propionate d'éthyle	16.162	2935.11	-39.94	330	220	67.631	-6869.83	-7.193	4.98
81	n-pentane	15.8333	2977.07	-40.05	322	216	52.682	-4827.08	-5.313	3.68
82	2-méthylbutane	15.6338	2348.67	-62.28	360	246	50.428	-4565.64	-5.021	3.55
83	ethyl propyl ether	15.4539	2423.41	-62.28	360	246	58.911	-4213.21	-4.977	3.31
84	Bromobenzene	15.7972	3313.0	-67.71	450	320	56.566	-7005.23	-5.548	5.59
85	chlorobenzène	16.0676	3295.12	-55.6	420	320	57.251	-6684.47	-5.686	4.98
86	fluorobenzène	16.5487	3181.78	-37.59	370	250	48.333	-3996.8	-4.788	2.46

Num	Nom du composé	AA	BA	CA	TS _K	TI _K	AH	BH	CH	DH
87	1-butène	15.7564	2132.42	-33.15	295	190	48.333	-3996.8	-4.788	2.46
88	iodobenzène	15.1454	3776.53	-64.38	470	290	57.691	-7589.5	-5.646	6.46
89	benzène	15.9008	2788.51	-52.36	377	280	52.1	-5557.61	-5.072	3.61
90	phénol	16.4279	3490.89	-98.59	481	345	72.558	-9072.6	-7.516	4.42
91	aniline	16.6748	3857.52	-73.15	500	340	65.881	-8442.37	-6.661	5.18
92	cyclohexane	15.7525	2766.63	-50.5	380	280	53.451	-5562.12	-5.303	4.22
93	1-hexène	15.8089	2654.81	-47.3	360	240	55.909	-5423.07	-5.705	4.57
94	Toluène	16.0137	3096.52	-53.67	410	280	56.785	-6283.5	-5.681	4.84
95	n-Hexane	15.8366	2697.55	-48.78	370	245	57.279	-5587.42	-5.885	4.778
96	2-méthylpentane	15.7476	2614.38	-46.58	370	240	55.352	-5301.22	-5.65	4.911
97	3-méthylpentane	15.7701	2653.43	-46.02	365	240	54.479	-5323.33	-5.509	4.379
98	p-crésol	16.1989	3479.39	-111.3	480	370	64.083	-8825.19	-6.316	5.42
99	o-crésol	15.915	3305.4	-108	480	370	75.616	-9341.6	-7.959	5.47
100	m-crésol	17.2878	4274.4	-74.09	480	370	79.796	-9855.8	-8.509	6.14
101	méthylcyclohexane	15.705	2926.04	-51.75	400	270	52.902	-5797.19	-5.199	5.23
102	1-heptène	15.8894	2895.51	-53.97	400	265	60.035	-6147.41	-6.211	5.70
103	n-heptane	15.8737	2911.32	-56.51	400	270	61.276	-6303.87	-6.373	6.00
104	3-méthyl hexane	15.8133	2855.66	-53.93	390	265	59.325	-6059.25	-6.123	5.72

Num	Nom du composé	AA	BA	CA	TS _K	TI _K	AH	BH	CH	DH
105	o-xylène	16.1156	3395.57	-59.46	445	305	61.763	-7149.21	-6.302	6.11
106	m-xylène	16.139	3366.99	-58.04	440	300	55.493	-6666.23	-5.436	6.08
107	p-xylène	16.0963	3346.65	-57.84	440	300	56.175	-6673.7	-5.543	6.19
108	Ethyl benzène	16.0195	3279.47	-59.95	450	300	58.10	-6792.54	-5.802	5.75
109	1-octène	15.963	3116.52	-60.39	420	289	64.487	-6883.34	-6.765	6.98
110	n-octane	15.9426	3120.29	-63.63	425	292	66.639	-7100.69	-7.053	7.31
111	2-methylheptane	15.9278	3079.63	-59.46	417	285	65.685	-6865.4	-6.957	7.12
112	3-methylheptane	15.8865	3065.96	-60.74	418	286	64.371	-6817.44	-6.763	7.02
113	4-methylheptane	15.8893	3057.05	-60.59	417	285	64.394	-6799.54	-6.769	6.86
114	isopropylbenzène	15.9722	3363.6	-63.37	454	311	46.941	-6285.25	-4.227	6.98
115	1-nonène	16.0118	3305.03	-67.61	448	308	69.085	-7626.91	-7.339	8.38
116	n-nonane	15.9671	3291.45	-71.33	452	312	73.938	-7969.42	-7.89	8.69
117	1-décène	16.0129	3448.18	-76.09	460	352	75.475	-8380.48	-7.95	9.9
118	n-décane	16.0114	3456.8	-78.67	476	330	105.9	-8563.64	-8.149	10.2
119	1-hexadécène	16.2203	4245.00	-115.2	592	420	95.68	-13117.0	-11.99	21.68
120	n-hexadécane	16.1841	4214.91	-118.7	594	423	52.902	-12411.3	-10.58	20.27