

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université 8 Mai 1945 Guelma

Faculté Des Science et de La Technologie

Département de Génie des Procédés

Mémoire de Projet de Fin d'Etudes

2^{ème} Année Master

**Détermination du coefficient de diffusion de plusieurs composés
dans l'air**

Filière : Génie des Procédés

Spécialité :Génie des Procédés des matériaux

Présenté par :

BOUAROUA Cheyma

CHOUANA Amina

Sous la direction de :

Dr. NACEF Mouna

Juin 2022

REMERCIEMENTS

Nos profonds remerciements vont à Allah qui a éclairé notre chemin et qui nous a donné le courage, la patience et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

Toute notre gratitude va à notre encadreur Dr. Mouna Nacef, pour ses précieux conseils, son aide, ses orientations et ses encouragements durant toute la période de ce travail.

Nos vifs remerciements vont à l'ensemble des membres du jury qui ont bien voulu examiner notre travail.

Nous adressons nos chaleureux remerciements à tous les professeurs du département de génie des procédés de l'université 8 Mai 1945 de Guelma pour les connaissances acquises, et les conseils prodigués au cours de ces années

Un grand merci à nos parents et tous ceux qui ne sont pas cités ici et qui de près ou de loin ont contribué à l'aboutissement de ce projet.

Merci à tous

DEDICACES

Avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail à ceux qui, quelque soient les termes employés, je n'arriverais jamais à leur exprimer mon amour sincère.

A l'homme, à qui je dois ma vie, ma réussite et tout mon respect : mon très cher père **Ahcen**.

A la femme qui a souffert sans me laisser souffrir, qui n'a jamais épargné aucun effort pour me rendre heureuse : mon adorable mère **Salima**.

A mes très chers frères : **Mohamed, Abassi, Aissa, Youcef** et **Abdallah** en témoignage de l'attachement, de l'amour et de l'affection que je leur porte, qu'Allah vous protège et leur offre la chance et le bonheur.

A ma chère binôme : **Amina** pour sa patience, sa sympathie et sa compréhension tout au long de ce travail.

A ma meilleure collègue : **Sabrin** qui a tout fait pour moi et m'a rendu un grand service durant mon projet.

Sans oublier surtout ma chère « encadreur » Dr **Mouna NACEF** qui a été toujours à mes côtés en m'aidant dans mes études et dans la préparation de mon projet.

BOUAROUA CHEYMA

DEDICACES

En premier lieu, je remercie **ALLAH**, pour m'avoir donné la santé, le courage, la force et m'a accordé son soutien durant les périodes les plus difficiles.

Je dédie ce modeste travail à ceux qui, quelque soient les termes employés, je n'arriverai jamais à leur exprimer mon amour sincère.

A mes parents, et surtout **ma mère** pour ses sacrifices, son amour, son soutien et sa prière durant mon parcours scolaire, que dieu lui procure bonne santé et longue vie.

A ma sœur source de tendresse, de noblesse et d'affection **Lynda** et ma nièce **Maram**.

A mes frères **MohamedetAziz**

A mon binôme dans ce travail **Cheyma**

A tous mes chères amies sans exceptions.

Sans oublier surtout ma chère encadreur Dr **Mouna NACEF** qui a été toujours à mes côtés en m'aidant dans mes études et dans la préparation de mon projet.

Et enfin à ceux et celles qui m'ont aidé d'une façon ou d'une autre, de près ou de loin, je les remercie du fond du cœur.

CHOUANA AMINA

Sommaire

Liste des tableaux	I
Liste des figures	II
Introduction générale.....	2

Chapitre I : Généralités sur le transfert de matière et la diffusion

I.1. Introduction.....	5
I.2. Définition du flux de matière.....	5
I.3.Types de phénomènes de transfert de matière	6
I.4. Définition de la diffusion	6
I.4.1. Diffusion moléculaire	6
I.4.2. Diffusion turbulente	7
I.5. Application du transfert de matière.....	8
1.5.1. L'électrolyse.....	8
1.5.2. L'adsorption.....	8
1.5.3. Séchage.....	8
1.5.4. Extraction	8
I.6. Conclusion	9

Chapitre II : Estimation du coefficient de diffusion

II.1.Introduction	11
II.2. Coefficient de diffusion	11
II .2.1 Définition.....	11
II.2.2. Ordre grandeur du coefficient de diffusion	11
II. 3. Théorie cinétique des gaz	12
II.4. Estimation du coefficient de diffusion en phase gazeuse	13
II.4.1. Relation de Chapman-Enskog	14
II.4.2. Relation de Fuller, Schettler, et Giddings ;FSG	15
II.4.3. Relation de Slattery	16
II.4.4. Relation de Gilliland.....	16
II.4.5. Relation de Wilke-Lee.....	17
II.5. Conclusion	18

Chapitre III : Matériels et méthodes

III.1. Introduction	20
III.2. Partie expérimentale	20
III.2.1. Description de l'appareillage.....	20

III.2.2. Produits chimiques	21
III.2.3. Le mode opératoire.....	22
III.3.Détermination du coefficient de diffusion à partir de l'expérimental.....	22
III.3.1.Rappels théoriques	22
III.3.2.Mesures expérimentales	23
III.4.Détermination du coefficient de diffusion à partir des corrélations empiriques	25
III.4.1.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode F.S.G.....	25
III.4.2.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Gilliland.....	26
III.4.3.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Chapman-Enskog.....	26
III.4.4.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Wilke-Lee	27
III.4.5.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Slattery.....	28
III.4.5.Calcul de l'écart entre les valeurs du coefficient de diffusion.....	28
III.5.Influence de la température sur le coefficient de diffusion	28
III.5. 1. Introduction au langage de programmation FORTRAN 90.....	28
III.6.Conclusion.....	32
Chapitre IV : Résultats et discussions	
IV.1. Introduction	34
IV.2. Détermination du coefficient de diffusion de quelques espèces volatiles dans l'air ...	34
IV.3. Résultats des calculs du coefficient de diffusion	35
IV.3.1. Influence de la température sur le coefficient de diffusion des alcools dans l'air	36
IV.3.2. Influence de l'alcool en diffusion sur le coefficient de diffusion.....	38
IV.3.3. Influence de la température sur le coefficient de diffusion de l'acétone dans l'air	40
IV.3.4. Influence de la température sur le coefficient de diffusion des alcanes dans l'air	40
IV.3.5. Influence de l'alcanes en diffusion sur le coefficient de diffusion	42
IV.3.6. Coefficient de diffusion des isomères	45
IV.4. Conclusion	46
Conclusion générale	48
Références bibliographiques	

Liste des tableaux

Tableau II.1. Coefficient de diffusion de quelques systèmes des espèces chimiques.....	12
Tableau II.2. Volume atomique et moléculaire de certaines molécules.....	15
Tableau II.3. Récapitulatif des corrélations utilisées dans le calcul du coefficient de diffusion dans les gaz.....	18
Tableau III.1. Propriétés des produits chimiques utilisés.....	21
Tableau III.2. Propriétés physiques des alcools utilisés pour le calcul du coefficient de diffusion.....	25
Tableau IV.1. Estimation expérimentale du coefficient de diffusion.....	35
Tableau IV.2. Résultat de la régression linéaire au premier degré des courbes relatives à la variation du coefficient de diffusion en fonction de la température pour les alcools.....	37
Tableau IV.3. Résultat de l'ajustement polynomial des courbes relatives à la variation du coefficient de diffusion en fonction de la température pour les alcanes.....	42
Tableau IV.4. Relation entre les coefficients de diffusion des alcools dans l'air.....	44
Tableau IV.5. Relation entre les coefficients de diffusion des alcanes dans l'air.....	45

Liste des figures

Figure I.1. Flux de matière traversant une surface.....	5
Figure I.2. Principe de la diffusion moléculaire.....	7
Figure III.1. Schéma explicatif de l'appareil de suivi de la diffusion d'espèces volatiles dans l'air.....	20
Figure III.2. a) Evolution du niveau d'acétone en fonction du temps. b) Représentation de ΔL en fonction de $t/\Delta L$. L'encart représente la régression linéaire de la droite après l'atteinte de l'équilibre....	24
Figure III.3. Ajustement exponentiel des valeurs de l'intégrale de collision en fonction de T^* . Ajustement réalisé en utilisant les données de la littérature.....	26
Figure III.4. Organigramme suivi pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcools et de l'acétone en fonction de la température.....	30
Figure III.5. Organigramme suivi pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcanes en fonction de la température	31
Figure IV.1. Estimation du coefficient de diffusion du : A) Méthanol ; B) Ethanol ; C) Propanol; D) Butanol; E) Pentanol dans l'air en utilisant plusieurs corrélations.....	36
Figure IV.2. Comparaison des différentes corrélations pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcools: A) Méthanol ; B) Ethanol ; C) Propanol; D) Butanol et E) Pentanol dans l'air.....	39
Figure IV.3. Comparaison des différentes corrélations pour l'estimation du coefficient de diffusion de l'acétone dans l'air et valeur du D_{AB} mesuré expérimentalement à trois différentes températures.....	40
Figure IV.4. Variation du coefficient de diffusion du: A) Méthane ; B) Ethane ; C) Propane et D) Butane dans l'air en fonction de la température.....	41
Figure IV.5. Comparaison des différentes corrélations pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcanes: A) Méthane ; B) Ethane; C) Propane et D) Butane dans l'air.....	43
Figure IV.6. Variation du coefficient de diffusion du butanol, tert-butanol, propanol et 2-propanol dans l'air en fonction de la température en utilisant des corrélations : A) FSG, Gilliland et Slattery ; B) FSG, Gilliland et Slattery; C) Chapman-Enskog et Wilk-Lee.....	46

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Le transfert de matière entre les différentes phases est une étape essentielle en génie des procédés. Il conditionne directement les performances des contacteurs entre les différentes phases. Les opérations unitaires ; telles que l'extraction, le séchage, la cristallisation, l'adsorption, etc. sont toutes tributaires du transfert de matière. Le dimensionnement des unités industrielles nécessite une bonne connaissance des mécanismes et de la cinétique de transfert de matière. L'un des plus importants paramètres qui gouvernent la rapidité avec laquelle une espèce est transférée d'un milieu à un autre est le coefficient de diffusion. Il est nécessaire de le connaître car il conditionne directement les performances des procédés.

Le coefficient de diffusion est le facteur de proportionnalité entre le flux de matière et le gradient de composition de l'espèce en diffusion. Il a été démontré que ce paramètre est propre à la paire d'espèces concernées. Il est essentiellement influencé par la température et la pression.

Malgré l'importance du coefficient de diffusion dans les échanges de matière, seules quelques données sont répertoriées dans la littérature. On retrouve dans la bibliographie souvent le coefficient de diffusion d'une paire de gaz, par exemple, à la température ambiante et à la pression atmosphérique. C'est au vu du manque accru de données dans la littérature que ce travail a été motivé.

On se propose dans ce projet de mesurer le coefficient de diffusion de quelques espèces volatiles dans l'air expérimentalement en utilisant un appareil qui s'apparente au tube de Stefan. Puis, nous allons pousser l'investigation plus loin en essayant de prédire les valeurs du coefficient de diffusion des alcools, acétone et alcanes lorsque la température augmente en utilisant les corrélations empiriques existantes. La programmation à l'aide du Fortran 90 sera utilisée afin de permettre l'acquisition des données avec une grande précision.

A cet effet, Ce mémoire est organisé en quatre chapitres.

Le premier chapitre consistera à présenter des généralités sur le transfert de matière.

Le deuxième chapitre détaillera les corrélations théoriques destinées à l'estimation du coefficient de diffusion dans les gaz.

Le troisième chapitre est consacré à décrire le dispositif expérimental destiné à l'estimation du coefficient de diffusion ainsi que l'utilisation du Fortran 90 dans les calculs du coefficient de diffusion.

Dans le quatrième chapitre seront présentés les résultats obtenus et leurs discussions.

Enfin, une conclusion générale achèvera ce travail et portera sur une lecture attentive et succincte des résultats obtenus.

CHAPITRE I :
Généralités sur le transfert de matière
et la diffusion

I.1. Introduction

Le transfert de matière est observé lorsque des espèces sont en déplacement relatif les uns par rapport aux autres. Ce phénomène se produit, en particulier, lorsque les concentrations ne sont pas uniformes au sein d'un mélange. Il se produit à partir des régions où la concentration est la plus forte vers les régions où elle est la plus faible.

L'étude du transfert de matière se présente donc comme celle d'une cinétique physique dans des milieux où les potentiels chimiques sont variables d'un point à un autre.

Le transfert de matière dans la phase gazeuse est à la base des échanges en milieu industriel. Il est essentiel de connaître à quelle vitesse un gaz quelconque peut traverser un milieu gazeux afin d'optimiser les débits et les dimensions des enceintes d'échange.

I.2. Définition du flux de matière

Pour définir l'intensité du transfert de matière, considérons un élément de surface. Le transport de matière est quantifié par une densité de flux de matière, N , qui représente la masse (ou le nombre de moles) qui traverse la surface par unité de temps et unité de surface ($\text{kg.m}^{-2} . \text{s}^{-1}$ ou $\text{mol.m}^{-2} . \text{s}^{-1}$) [Bacchin].

$$N = \frac{m}{S . t} \quad (\text{I.1})$$

Avec :

N : Flux de matière ($\text{kg.m}^{-2} . \text{s}^{-1}$ ou $\text{mol.m}^{-2} . \text{s}^{-1}$)

m : Quantité de matière transférée (kg ou mol)

S : Surface traversée (m^2)

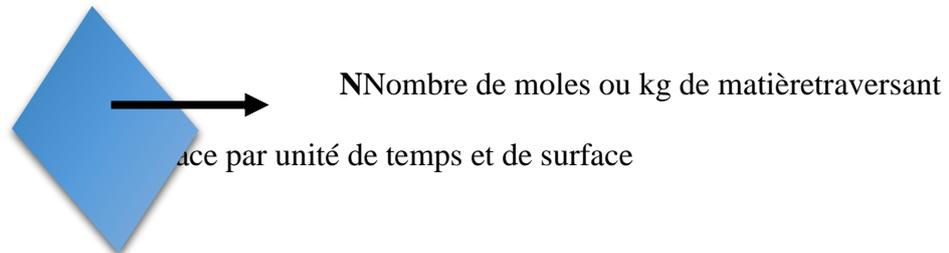


Figure I.1. Flux de matière traversant une surface.

I.3. Types de phénomènes de transfert de matière

Selon le mécanisme mis en jeu, on distingue deux types de transfert de matière :

- Transfert de matière par diffusion : C'est un phénomène moléculaire, considéré par rapport à un mouvement d'ensemble du système.
- Transfert de matière par convection : Il implique un transport macroscopique de la matière. Il se fait avec un apport d'énergie externe. En général, il s'agit d'un mouvement d'ensemble du fluide [Bird].

I.4. Définition de la diffusion

La diffusion est un mécanisme de transport de la matière sous l'effet d'un gradient de concentration, depuis les zones concentrées en matière vers les zones moins concentrées. La diffusion se caractérise par un transfert de matière, qui est la réponse d'un milieu à toute modification de la répartition des concentrations. Même à l'équilibre, les échanges de matière se poursuivent continuellement à l'échelle moléculaire : on parle alors d'auto-diffusion.

Dans les solides, la diffusion est un déplacement aléatoire d'atomes, d'ions, de molécules ou de lacunes, dans le réseau cristallin provoqué en général par agitation thermique.

Les phénomènes de diffusion sont extrêmement lents aux températures ordinaires ; ils peuvent cependant être considérablement activés par la température. Il convient de distinguer deux types de diffusion moléculaire et turbulente [Medjouti].

I.4.1. Diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire est le mécanisme de transfert d'un constituant au sein d'une phase par migration des molécules de ce constituant sous l'influence d'un gradient de concentration, figure I.2. Dès qu'il existe un gradient de concentration dans un fluide, celui-ci va spontanément évoluer par diffusion vers un état de concentrations uniformes correspondant à l'équilibre thermodynamique des phases liquides et gaz. La loi de Fick définit le flux de matière J_A d'une espèce A qui diffuse par rapport au mélange des deux constituants A et B, vers des zones à faible concentration en A.

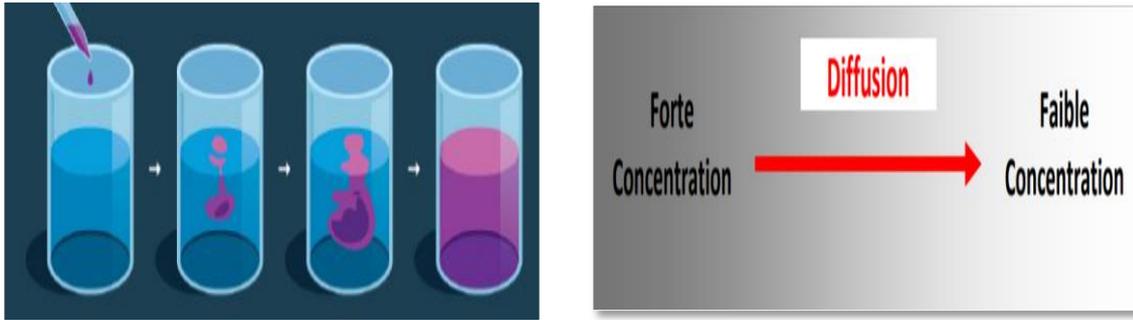


Figure I.2. Principe de la diffusion moléculaire

Selon la loi de Fick, le coefficient de diffusion lie le gradient de concentration le long d'un axe avec le flux de matière du soluté. Il est désigné par la lettre majuscule D et a comme unité le $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

Si on considère le phénomène de diffusion sur une petite distance et pendant un temps très court, on peut écrire la loi de Fick sous forme différentielle [Jomnongwong] :

$$J_A = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz} \quad (\text{I.2})$$

Avec :

J_A : le flux de matière

D_{AB} : Coefficient de diffusion

$\frac{dC_A}{dz}$: Gradient de concentration

Le signe (-) exprime le fait que la diffusion se fait du milieu le plus concentré vers le milieu le moins concentré.

I.4.2. Diffusion turbulente

Le déplacement des molécules d'un constituant A quelconque se fait non seulement grâce au flux diffusionnel mais aussi à cause des remous et le mouvement d'ensemble de la phase. Cette diffusion est accompagnée par un déplacement de matière à l'intérieur d'une phase et ne peut donc se produire que dans les fluides [Gunt].

I.5. Application du transfert de matière

En pratique, le transfert de la matière joue un rôle important dans de nombreux procédés. Ainsi, la diffusion peut par exemple relier les réactifs mis en jeu dans des réactions chimiques et, dans certains cas, constituer l'étape déterminante de la vitesse du procédé. Le transfert de matière intervient dans un certain nombre de procédés chimiques qu'ils soient de séparation ou de transformation, on cite à titre d'exemple les opérations suivantes :

1.5.1. L'électrolyse

L'électrolyse sert à récupérer un métal à partir de sa solution ionique. Une cellule électrolytique comporte deux électrodes plongées dans la solution métallique, caractérisée par sa conductivité ionique. Sous l'influence du champ électrique, les anions migrent vers l'anode tandis que les cations métalliques se dirigent vers la cathode. Cette migration dépend de la diffusivité des ions présents dans la solution [Soulimani].

1.5.2. L'adsorption

L'adsorption est un phénomène physico-chimique se traduisant en particulier par une modification de la concentration à l'interface gaz/solide ou liquide/solide. Cette adsorption passe par différentes étapes dont la diffusion interparticulaire qui est une étape limitante [Ferhat].

1.5.3. Séchage

C'est l'opération unitaire ayant pour but d'éliminer par évaporation un liquide imprégnant un solide ou un liquide. Il est courant de faire une distinction entre séchage par ébullition et séchage par entraînement mais les deux présentent un transfert de matière [Cherreau].

1.5.4. Extraction

Les opérations d'extraction concernent la dissolution sélective d'un soluté qui se trouve dans une phase vers une autre phase (solvant) où le transfert de matière joue un rôle essentiel dans la performance de cette opération unitaire.

Par ailleurs, le transfert de matière joue aussi un rôle essentiel dans la fabrication des céramiques, des semi-conducteurs (dopage), de cellules-solaires et dans la solidification des métaux (traitement au carbone et à la chaleur), car lorsque deux matériaux chauffés sont mis en contact, leurs atomes diffusent l'un dans l'autre [Moulin].

I.6. Conclusion

Le transfert de matière est un phénomène qui implique la plupart des opérations unitaires mais également beaucoup de phénomènes physiques dans notre quotidien. Il est alors impératif de bien le connaître et pouvoir ainsi le modéliser et le prédire.

CHAPITRE II :

Estimation du coefficient de diffusion

II.1.Introduction

La vitesse du phénomène de diffusion est quantifiée par la diffusivité ou le coefficient de diffusion. La valeur du coefficient de diffusion est parfois disponible dans la littérature [Perry] ; dans le cas contraire, elle peut être obtenue expérimentalement ou bien estimée par diverses méthodes [Debacq].

Dans ce chapitre, nous présenterons les différentes corrélations existantes pour prédire les valeurs du coefficient de diffusion et nous détaillerons leur utilisation.

II.2. Coefficient de diffusion

II .2.1 Définition

Le coefficient de diffusion est une propriété du système. Il caractérise l'aptitude d'une espèce à laisser migrer les molécules diffusantes. Généralement, ce coefficient est fixe pour deux espèces à une température et pression données. Ce coefficient s'exprime en m^2/s dans le système international SI, et en cm^2/s dans le système CGS. Il est analogue à la diffusivité thermique dans la loi de Fourier et la viscosité cinématique dans la loi de Newton[Menguy].

II.2.2. Ordre grandeur du coefficient de diffusion

Le coefficient de diffusion des gaz à faible densité est pratiquement indépendant de la concentration, il augmente avec la température et est inversement proportionnel à la pression totale. Par contre, pour les liquides et solides, le coefficient de diffusion dépend fortement de la concentration [Menguy].

Dans le tableau II.1, nous avons rassemblé des valeurs des coefficients de diffusion de certains composés chimiques dans quelques milieux, pris à titre d'exemple.

Tableau II.1. Coefficient de diffusion de quelques systèmes des espèces chimiques [Perry].

Système	T(K)	D (cm ² /s)
Coefficient de diffusion dans l'air		
CO ₂ – air	317,2	0,177
H ₂ O – air	273	0,219
O ₂ – air	273	0,178
Coefficient de diffusion dans les liquides		
NaCl – eau	298	1,9.10 ⁻⁵
Sucre - eau	298	0,52.10 ⁻⁵
Coefficient de diffusion solide-solide		
Al – Cu	298	1,9.10 ⁻²⁶
He - SiO ₂	293	2,4-5,5.10 ⁻¹⁰
H ₂ – Ni	298	1,30.10 ⁻²⁶
Coefficient de diffusion dans les polymères		
Butane –polyisobutylène	298	1,19.10 ⁻⁹
Propanol - polyacétate de vinyle	313	1,11.10 ⁻¹²
Ethanol - polyméthacrylate de méthyle	323	2,18.10 ⁻¹⁰

On remarque facilement que l'état physique des espèces en diffusion gouverne l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion. Dans les solides, où la matière est très dense, le coefficient de diffusion est très petit alors que dans les gaz, où les molécules composant le système sont très éloignées les unes des autres, ce qui justifie l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion dans ce cas [Soulimani].

II. 3. Théorie cinétique des gaz

Selon la théorie cinétique des gaz, les particules de gaz se déplacent en ligne droite et se heurtent fréquemment. De plus, elles entrent aussi en collision avec les parois du contenant dans lequel elles se trouvent.

La théorie cinétique des gaz permet de modéliser le phénomène de diffusion moléculaire pour un gaz parfait. Cette théorie implique que le coefficient de diffusion est proportionnel à la vitesse moléculaire moyenne multiplié par le libre parcours moyen ; λ (distance parcourue par une molécule avant collision)

$$D_{AB} = \frac{1}{3} \bar{V}_A \lambda \quad (\text{II.1})$$

Avec ; \bar{V}_A : la vitesse moléculaire moyenne, λ : le libre parcours moyen, T : la température, P : la pression.

Sachant que :

$$\bar{V}_A = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_A}} \quad (\text{II.2})$$

$$\lambda = \frac{KT}{\sqrt{2} \cdot Pt \cdot 4\pi \cdot R_A^2} \quad (\text{II.3})$$

Avec ; R_A : rayon moléculaire de A, K : constante de Boltzmann, Pt : pression totale du gaz, M_A : masse molaire de A, R : constante molaire des gaz parfaits ($8,314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$).

Il ressort de ces deux dernières équations que le coefficient de diffusion est proportionnel à la température portée à la puissance 3/2 et est inversement proportionnel à la pression [Poling].

II.4. Estimation du coefficient de diffusion en phase gazeuse

L'approche théorique déduite de la théorie cinétique des gaz permet de relier le coefficient de diffusion D_{AB} du composé A dans le mélange contenant le composé A et B à la masse molaire de ces deux composés, à la constante de Boltzmann, à l'intégrale de collision pour la diffusion (Ω_{DAB}) et la moyenne du diamètre de collision σ_{AB} calculée à partir de la taille de ces molécules. Cette approche fait appel à de nombreuses caractéristiques des molécules A et B considérées et nécessite des calculs assez lourds, notamment pour accéder à l'intégrale de collision (Ω_{DAB}).

Dans ce qui suit, il ne sera question dans ce chapitre que des corrélations empiriques proposées par Chapman-Enskog ; Fuller, Schettler et Giddings ; Slaterry; Gilliland et Wilke-Lee. Ces équations ont été toutes introduites au cours du siècle précédent et n'ont pas vu de progressions notables depuis.

Ces équations présentent les avantages d'être plus aisées à utiliser et de ne faire appel qu'à des caractéristiques des composés facilement accessibles [Poling].

II.4.1. Relation de Chapman-Enskog

L'expression du coefficient de diffusion découle de la théorie cinétique des gaz. Elle est donnée par l'équation suivante :

$$D_{AB} = 0,0018583 \frac{\left(T^{\left(\frac{3}{2}\right)} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0,5} \right)}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{DAB}} \quad (\text{II.4})$$

Avec,

D_{AB} : [cm²/s]

M_A, M_B : masses molaire [g/mol] de A et B, respectivement.

σ_{AB} : le diamètre de collision effectif (Å) c'est un facteur dépendant de la structure de la molécule.

Ω_{DAB} : découle de la fonction d'intégrale de collision, il est tabulé comme fonction de KT/ϵ_{AB} .

La valeur de Ω_{DAB} peut être calculée par l'approximation de Neufeld *et al.* [Neufeld] :

$$\Omega_{DAB} = \frac{1,6036}{(T^*)^{0,1561}} + \frac{0,193}{\exp(0,47635T^*)} + \frac{1,03587}{\exp(1,52996T^*)} + \frac{1,76474}{\exp(3,89411T^*)} \quad (\text{II.5})$$

Où : $T^* = KT/\epsilon_{AB}$, avec K la constante de Boltzmann et égale $1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$.

Les paramètres de Lennard-Jones σ_{AB} et ϵ_{AB} peuvent être estimés pour les éléments non polaires et pour les molécules qui ne réagissent pas après collision à partir des équations suivantes :

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \quad (\text{II.6})$$

$$\epsilon_{AB} = \frac{\epsilon_A + \epsilon_B}{2} \quad (\text{II.7})$$

II.4.2. Relation de Fuller, Schettler, et Giddings ;FSG

Une autre approche empirique pour l'estimation du coefficient de diffusion des gaz dans l'air est appelée la méthode de FSG. Cette relation admet que les diamètres de collision sont proportionnels à la racine cubique des volumes molaires à la température normale d'ébullition. Elle sera utilisée pour des pressions allant jusqu'à 10 atm (et même plus). Elle est donnée par la relation suivante :

$$D_{AB} = \frac{10^{-3} T^{1.75} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0.5}}{P \left(V_A^{\frac{1}{3}} + V_B^{\frac{1}{3}} \right)^2} \quad (II.8)$$

D_{AB} : [cm²/s]

P: [atm]

T : [K]

M_A et M_B sont les masses molaires de l'espèce A et B, respectivement [g/mol]. La masse molaire de l'air étant égale à 28,97 g/mol.

Les valeurs de V_A et V_B sont les volumes molaires du A et B, respectivement (le volume molaire de l'air étant égale à 20,1 cm³/mol). Ils sont obtenus à partir des valeurs des volumes de diffusion atomique du tableau (II.3).

L'estimation du volume molaire de gaz spécifiques nécessiterait des données sur la structure atomique. Le tableau suivant donne les valeurs des volumes atomiques permettant de calculer le volume molaire de nombreux composés organiques en faisant la somme des volumes de diffusion atomique.

Tableau II.2. Volume atomique et moléculaire de certaines molécules.

C	16,5	H	1,98	O	5,48	N	5,69	Cl	19,5
S	17,0	H₂	7,07	D₂	6,70	He	2,99	N₂	17,9
O₂	16,6	Air	20,1	Ar	16,1	Kr	22,8	Xe	37,9
CO	18,9	CO₂	26,9	N₂O	35,9	NH₃	14,9	H₂O	12,7
CCl₂F₂	114,8	SF₆	69,7	Cl₂	37,7	Br₂	67,2	SO₂	41,1

Source : E.N.Fuller ; P.D.Shettler, J.C.Giddings, Ind.Eng.Chem., 58(5), 19(1966).

Cette équation donne une bonne estimation du coefficient de diffusion et a été développée en minimisant l'erreur entre le coefficient de diffusion prédit et celui mesuré pour un grand nombre de gaz. La relation de FSG est plus adéquate pour les gaz non polaires à basse température jusqu'à températures modérées. En plus, elle donne une bonne estimation du coefficient de diffusion avec une erreur de $\pm 5\%$ pour les aromatiques, alcanes et cétones.

II.4.3. Relation de Slattery

A basse pression une équation est développée pour estimer le coefficient de diffusion D_{AB} , elle est notée équation de Slattery et donnée par la relation suivante :

$$D_{AB} = \frac{(P_{CA} P_{CB})^{1/3} (T_{CA} T_{CB})^{5/12} M_{AB}^{1/2} \cdot a \left[\frac{T}{(T_{CA} T_{CB})^{1/2}} \right]^b}{p} \quad (\text{III.9})$$

Pour les paires de gaz non polaires $a=2,745 \cdot 10^{-4}$ et $b=1,823$. (Cette équation ne peut pas être utilisée pour le cas de l'hélium et de l'hydrogène).

Cette équation s'applique si l'un des constituants est l'eau et l'autre un gaz non polaire avec :

$$a= 3,64 \cdot 10^{-4} \text{ et } b=2,334.$$

Où :

D_{AB} [cm^2/s], P [atm], T [K], M [g/mol],

T_{CA} et T_{CB} sont les températures critiques de A et B,

P_{CA} et P_{CB} sont les pressions critiques de A et B,

L'équation de Slattery est en accord avec les résultats expérimentaux à pression atmosphérique avec un écart moyen par rapport aux données expérimentales d'environ 80%.

II.4.4. Relation de Gilliland

Gilliland a développé une équation empirique semblable à celle de FSG. Elle est donnée par la relation suivante :

$$D_{AB} = 0,0043 \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{P \left[V^{\frac{1}{3}} + V^{\frac{1}{3}} \right]^2} \quad (\text{II.10})$$

Avec, D_{AB} [m^2/s], P [atm], T [K], V : volume molaire moléculaire [m^3/mol],

M_A et M_B : [kg/mol].

II.4.5. Relation de Wilke-Lee

La relation de Wilke-Lee s'écrit comme suit :

$$D_{AB} = \frac{\left[3,03 - \left(\frac{0,98}{M_{AB}^{\frac{1}{2}}} \right) \right] 10^{-3} T^{\frac{3}{2}}}{P M_{AB} \sigma_{AB}^2 \Omega_{DAB}} \quad (\text{II.11})$$

Le paramètre σ_{AB} est donné par l'équation (II.13) où pour chaque composant on utilise :

$$\sigma = 1,18 (V_b)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.12})$$

Avec V_b le volume molaire du liquide à la température normale d'ébullition.

$$M_{AB} = 2 \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} \quad (\text{II.13})$$

Ω_{DAB} est déterminé à partir de l'équation de Neufeld *et al.* Avec ;

$$\varepsilon/K = 1,15 T_b \quad (\text{II.14})$$

T_b est la température normale d'ébullition.

Cette équation ne peut pas être utilisée pour l'hélium et l'hydrogène.

Le tableau ci-dessous résume les différentes équations utilisées pour l'estimation du coefficient de diffusion.

Tableau II.3. Récapitulatif des corrélations utilisées dans le calcul du coefficient de diffusion dans les gaz

Equation	Formule	Limites
Chapman-Enskog	$D_{AB} = 0,0018583 \frac{\left(T^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0,5} \right)}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{DAB}}$	1 atm
FSG	$D_{AB} = \frac{10^{-3} T^{1,75} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0,5}}{P \left(V_A^{\frac{1}{3}} + V_B^{\frac{1}{3}} \right)^2}$	10 atm
Slattery	$D_{AB} = \frac{(P_{CA} P_{CB})^{1/3} (T_{CA} T_{CB})^{5/12} M_{AB}^{1/2} .a \left[\frac{T}{(T_{CA} T_{CB})^{1/2}} \right]^b}{p}$	1 atm
Gilliland	$D_{AB} = 0,0043 \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{P \left[V^{\frac{1}{3}} + V^{\frac{1}{3}} \right]^2}$	1 atm
Wilke-Lee	$D_{AB} = \frac{\left[3,03 - \left(\frac{0,98}{M_{AB}^{\frac{1}{2}}} \right) \right] 10^{-3} T^{\frac{3}{2}}}{P M_{AB}^{\frac{1}{2}} \sigma_{AB}^2 \Omega_{DAB}}$	1 atm

II.5. Conclusion

Dans ce chapitre, les différentes corrélations pour la détermination du coefficient de diffusion en phase gazeuse ont été introduites et les méthodes de calcul ont été détaillées. L'estimation du coefficient de diffusion paraît aisée si l'on a accès aux différents paramètres et propriétés physico-chimiques des systèmes en question

CHAPITRE III :

Matériels et méthodes

III.1. Introduction

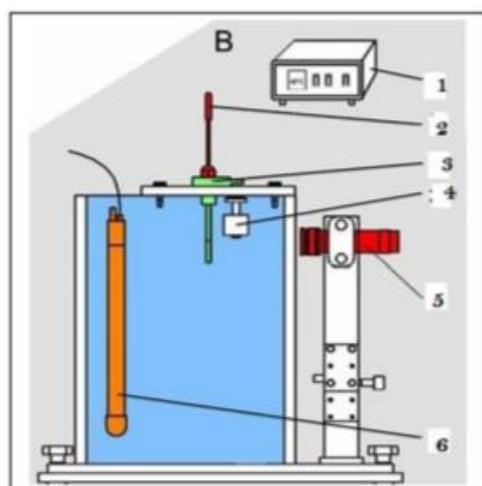
Dans ce chapitre, nous présenterons le matériel, les produits chimiques, les modes opératoires et les méthodes mises en œuvre pour le calcul du coefficient de diffusion de plusieurs composés organiques dans l'air. Le travail effectué est divisé en deux parties ; une partie expérimentale et une autre partie calcul. Dans ce qui suit, nous allons détailler chacune des deux parties.

III.2. Partie expérimentale

Cette partie concerne la réalisation d'expériences afin de mesurer le coefficient de diffusion de quelques espèces volatiles en utilisant le principe du tube de Stefan.

III.2.1. Description de l'appareillage

Les essais de diffusion ont été conduits sur un appareil destiné à la pédagogie. Il est de fabrication allemande [Gunt]. L'appareil d'essai de diffusion s'apparente à l'appareil de diffusion de Stefan. Il est constitué d'un tube capillaire de 3,4 mm de diamètre dans lequel un liquide volatile est placé. Le tube capillaire est plongé dans un bain marie dont la température est fixée. A l'extrémité supérieure du tube capillaire un flux d'air (à 1 atm) transporte les molécules du composé volatile, délivrant ainsi une concentration constante et nulle à l'extrémité supérieure du tube. Le niveau du liquide volatile baisse en fonction du temps. C'est cet abaissement qui est mesuré à des intervalles de temps réguliers. L'appareil est schématisé dans la figure III.1 [Gunt].



1. Appareil d'affichage et de commande
2. Capteur de température
3. Tube à diffusion
4. Interrupteur à flotteur
5. Microscope
6. Dispositif de chauffage du bain-marie

Figure III.1. Schéma explicatif de l'appareil de suivi de la diffusion d'espèces volatiles dans l'air.

Le niveau du liquide d'essai peut être visualisé à l'aide d'une lunette à déplacement verticale. Une échelle de graduation située sur la lunette coulissante permet de mesurer l'abaissement du niveau du liquide dans le tube due à la diffusion. Pour des mesures fiables, le bord inférieur du niveau du liquide doit se superposer avec la ligne du viseur.

Etant donné que le dispositif se trouve à l'air libre, les déperditions de chaleur du bain marie sont compensées par des ajouts de quantités d'eau chaude pour avoir enfin de compte une température opératoire qui ne s'éloigne que d'un demi degré de la température souhaitée.

Il est possible d'utiliser ce dispositif pour mesurer le coefficient de diffusion de quelques composés dans l'air à différentes températures. Cependant, le choix de ces composés est limité par un certain nombre de contraintes :

- Il faut que le composé soit volatil,
- Il faut que le composé ait une température d'évaporation basse (20-70°C),
- Il ne faut pas que le produit soit toxique pour éviter l'inhalation,
- Si le produit volatil est toxique, il vaut mieux opérer sous hôte aspirante.

III.2.2. Produits chimiques

Les produits chimiques utilisés dans ce travail pour le calcul de la diffusivité dans les gaz sont respectivement : l'acétone et les alcools ;méthanol, éthanol, propanol et butanol. Leurs propriétés sont rassemblées dans le tableau suivant.

Tableau III.1. Propriétés des produits chimiques utilisés.

Composé	Formule chimique	Densité (kg/m ³)	P _{sat} (Pa)	Pureté (%)	Fournisseur
Acétone	C ₃ H ₆ O	784	56000	99	Honeywell
Méthanol	CH ₃ OH	792	12300	99,5	Honeywell
Ethanol	C ₂ H ₅ OH	789	7950	96	Honeywell
Propanol	C ₃ H ₈ O	803	2000	99	Honeywell
Butanol	C ₄ H ₁₀ O	810	600	99,9	Fluka
Pentanol	C ₅ H ₁₁ OH	814	130	98	Fluka

III.2.3. Le mode opératoire

Avant tout, le réservoir est rempli avec l'eau distillée (environ 1,5 L). Lorsque la température désirée est différente de la température ambiante. L'eau distillée est chauffée préalablement au remplissage du réservoir. Ensuite, à l'aide d'une seringue, le tube capillaire (tube de Stefan) est rempli avec l'acétone ou l'un des alcools. Le niveau initial du liquide est noté 'L₀'. Il faut s'assurer que la partie du tube remplie ne contienne pas de bulles d'air et que les parois au-dessus de ce niveau soient propres et sèches. L'appareil de commande est relié à une sonde de température. L'appareil est aussi muni d'une pompe pour souffler de l'air à une pression de 1 atm.

Un chronomètre est déclenché à l'instant t=0, la valeur de la hauteur du liquide est mesurée à des intervalles de temps constants [Nacef].

III.3. Détermination du coefficient de diffusion à partir de l'expérimental

Dans ce qui suit, nous allons détailler la méthode de calcul qui permet d'estimer le coefficient de diffusion à partir des mesures expérimentales. Pour cela, l'acétone (CH₃COCH₃) a été utilisée comme espèce diffusante dans l'air.

III.3.1. Rappels théoriques

Le rapprochement entre l'équation de la vitesse de diffusion d'une vapeur dans une couche gazeuse stable ; équation III.1 et l'équation qui donne la description du processus d'évaporation équation III.2 donne après intégration, une relation qui relie la différence de niveau du liquide dans le tube capillaire (ΔL) et le quotient du niveau de liquide au temps (t/ΔL), équation (III.3) [Nacef].

$$n(t) = - \frac{D.P}{R.T.L(t)} \cdot \ln \left[\frac{1-y_0}{1-y_l} \right] \quad (III.1)$$

$$n(t) = \frac{\rho}{M} \cdot \frac{dL(t)}{dt} \quad (III.2)$$

Avec

D : Coefficient de diffusion de la vapeur d'acétone dans l'air.

ρ : Densité de l'acétone (789,8 Kg.m⁻³).

R : Constante des gaz parfaits (8,314 J mol⁻¹ K⁻¹)

T : Température (313K).

M : Masse molaire de l'acétone (0,0581 kg.mol⁻¹).

P : Pression dans le système (Pa).

Y : fraction molaire (proportion molaire) de la vapeur dans la phase gazeuse.

0 : Indice pour l'extrémité inférieure du chemin de diffusion.

L : Indice pour l'extrémité supérieure du chemin de diffusion.

$$\Delta L = a \frac{t}{\Delta L} - 2L_0 \quad (\text{III.3})$$

Où,

ΔL : La variation du niveau du liquide dans le tube capillaire,

a : La pente de la droite $\Delta L = f(t/\Delta L)$

Le coefficient de diffusion du composé volatile dans l'air est relié à la pente de la droite précédente comme suit :

$$D = \frac{\rho \cdot a \cdot R \cdot T}{2 \cdot M \cdot P \cdot \ln \left[\frac{1-y_0}{1-y_L} \right]} \quad (\text{III.4})$$

Avec :

$$y_L = 0$$

$y_0 = \frac{P_{sat}}{P}$; P_{sat} c'est la pression de vapeur saturante à la température de l'expérience.

III.3.2. Mesures expérimentales

La figure III.2 illustre la variation du niveau d'acétone en fonction du temps. Le tracé de la variation du niveau d'acétone (ΔL) en fonction du quotient du temps au niveau de la variation d'acétone ($t/\Delta L$) est représenté par la figure III.2

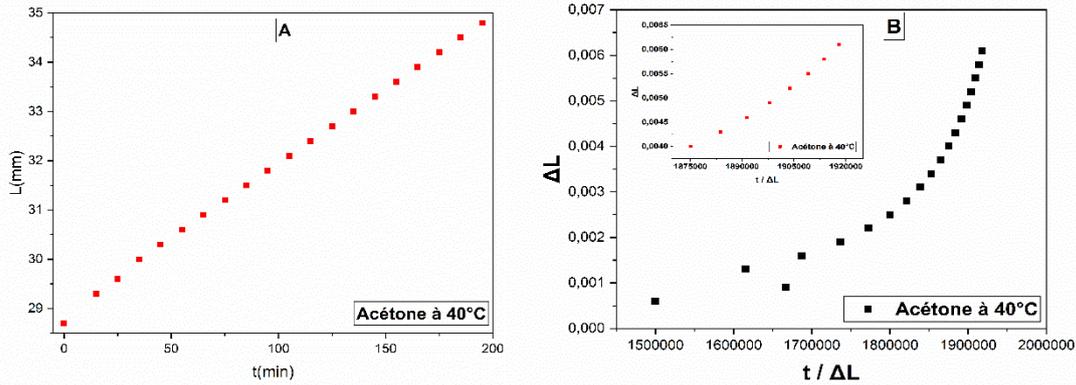


Figure III.2. A) Evolution du niveau d'acétone en fonction du temps. B) Représentation de ΔL en fonction de $t/\Delta L$. L'encart représente la régression linéaire de la droite après l'atteinte de l'équilibre.

L'allure de la courbe montre l'existence de deux régions ; la première (représentée par une forme curvilinéaire) relative au transfert de matière en régime transitoire et la seconde (représentée par une droite) relative au transfert de matière par diffusion après l'atteinte de l'équilibre ; encart de la figure III.2. C'est à partir de cette région qu'on peut effectuer le calcul du D_{AB} . La régression linéaire de cette région donne l'équation III.5 avec un coefficient de corrélation $R^2 = 0,9855$

$$\Delta L = 4,86178 \cdot 10^{-8} \frac{t}{\Delta L} - 0,08728 \quad (III.5)$$

A partir de la pente qui est donnée par la régression linéaire, on peut trouver le coefficient de diffusion de l'acétone en utilisant les données du tableau III.2.

$$D_{AB(\text{exp})} = - \frac{789,8 \cdot 2,43089 \cdot 10^{-8} \cdot 8,3145 \cdot 313}{0,0581 \cdot 101325 \cdot \ln \left[1 - \frac{56000}{101325} \right]} = 1,055 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} = 0,1055 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

En procédant de la même manière, il est facile de calculer le coefficient de diffusion des alcools en utilisant le même appareillage.

III.4. Détermination du coefficient de diffusion à partir des corrélations empiriques

Dans ce qui suit, nous allons donner des exemples de calcul du coefficient de diffusion en utilisant les corrélations introduites au chapitre précédent. Les corrélations suivantes ont besoin de quelques paramètres que nous résumons dans le tableau suivant :

Tableau III.2. Propriétés physiques des alcools utilisés pour le calcul du coefficient de diffusion

Le composé	M (g/mol)	V(cm ³ /g)	T _{eb} (K)	P _C (bar)	T _C (K)	σ (Å)	ε/k(K)
Air	28,97	20,1		37,21	132,4	3,711	78,6
Acétone	58,05	50,36	329	46,38	508,2	4,6	560,2
Méthanol	32,04	29,9	337,6 9	80,97	512,6 4	4,110	388,34
Ethanol	46,06	50,36	351,8	61,48	513,9 2	4,642	404,57
Propanol	60,09	70,82	370,9 3	51,75	536,7 8	5,102	426,57
Propan-2-ol	60,09	70,82	355,3 9	47,62	508,3 0	/	/
Tert-Butanol	74,12	91,28	355,5	39,73	506,2 1	5,678	313,8
Butanol	74,12	91,28	390,8 8	44,23	563,0 5	5,524	449,51
Pentanol	88,14	111,74	411,1 6	39,09	588,1 5	5,862	472,83

III.4.1. Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode F.S.G

Dans cette équation, il suffit de remplacer la pression et la température opératoire ainsi que les masses molaires et les volumes molaires de la paire de gaz dans l'équation (II.8) pour trouver le D_{AB}. Les propriétés des composés sont rassemblées dans le tableau III.2.

Dans le cas de la diffusion de l'acétone dans l'air à 40 °C et 1 atm, on trouve :

$$D_{AB(FSG)} = \frac{10^{-3} \cdot 313^{1,75} \cdot \sqrt{0,0517}}{1 \cdot (20,1^{\frac{1}{3}} + 50,36^{\frac{1}{3}})^2} = 0,1288 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

III.4.2.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Gilliland

De la même façon que pour l'équation de FSG, on remplace par la pression et la température opératoire ainsi que les masses molaires et les volumes molaires, issus du tableau III.2, dans l'équation (II.10). On trouve :

$$D_{AB(\text{Gilliland})} = 0,0043 \left(\frac{1}{58,05} + \frac{1}{28,97} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{(313)^{3/2}}{1[50,36^{1/3} + 20,1^{1/3}]^2} = 0,1317 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

III.4.3.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Chapman-Enskog

Pour le calcul du D_{AB} en utilisant la corrélation de Chapman-Enskog, les valeurs de la masse molaire et de diamètre de collision sont données par le tableau III.2. Alors que la valeur de Ω_{DAB} est calculée en utilisant l'ajustement exponentiel des valeurs tabulées dans la littérature. L'ajustement a été réalisé en utilisant le logiciel Origin 2018. La figure ci-dessous montre cet ajustement ainsi que l'équation fournie.

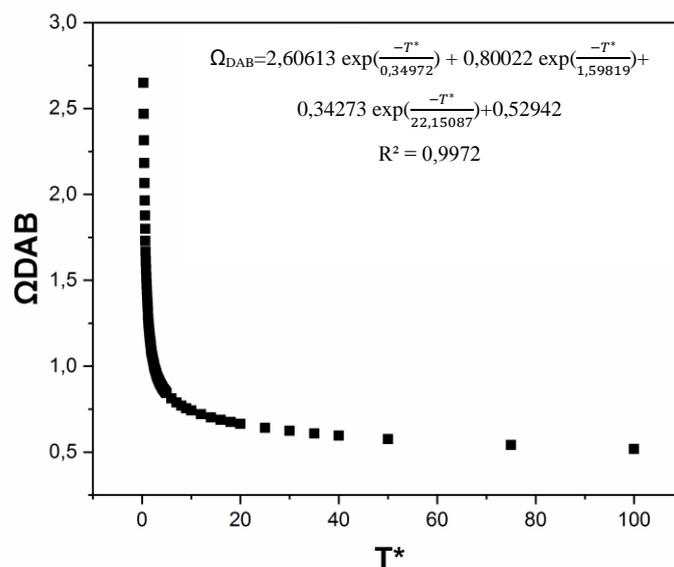


Figure III.3. Ajustement exponentiel des valeurs de l'intégrale de collision en fonction de T^* . Ajustement réalisé en utilisant les données de la littérature [Poling].

Calcul de T^*

$$T^* = 1,4916$$

Calcul de Ω_{DAB}

$$\Omega_{DAB} = 2,60613 \exp\left(\frac{-T^*}{0,34972}\right) + 0,80022 \exp\left(\frac{-T^*}{1,59819}\right) + 0,34273 \exp\left(\frac{-T^*}{22,15087}\right) + 0,52942$$

$$\Omega_{DAB} = 2,60613 \exp\left(\frac{-1,4916}{0,34972}\right) + 0,80022 \exp\left(\frac{-1,4916}{1,59819}\right) + 0,34273 \exp\left(\frac{-1,4916}{22,15087}\right) + 0,52942$$

$$\Omega_{DAB} = 1,2011$$

Calcul de σ_{AB} :

$$\sigma_{AB} = 4,1555$$

On remplace dans l'équation II.4, on trouve :

$$D_{AB(\text{Chapman-Enskog})} = 0,0018583 \frac{(313^{3/2} (\frac{1}{58,05} + \frac{1}{28,97}))^{0,5}}{1,4,1555^2 \cdot 1,2020564} = 0,1128 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

III.4.4. Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Wilke-Lee

Les paramètres oméga, sigma sont calculé comme dans le cas de l'équation de chapman et sont remplacés dans l'équation (II.11), on trouve :

$$D_{AB(\text{Wilke-Lee})} = \frac{(3,03 - (0,98 / 9,62^{\frac{1}{2}})) 10^{-3} 313^{\frac{3}{2}}}{1,9,62^{\frac{1}{2}} \cdot 4,1085^2 \cdot 1,2011} = 0,1233 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

III.4.5.Exemple de calcul du D_{AB} par la méthode de Slattery

La corrélation de Slattery repose sur l'utilisation de la pression critique et la température critique du système gazeux. Ces paramètres sont extraits du tableau III.2. il suffit de les remplacer dans l'équation (II.9), on trouve alors :

$$D_{AB}=(46,389 \cdot 37,215)^{\frac{1}{3}} (508,2 \cdot 132,4)^{\frac{5}{12}} \cdot 0,2274 \cdot (0,0002745 \left[\frac{313}{(508,2 \cdot 132,4)^{\frac{1}{2}}} \right]^{1,823})/1$$

$$D_{AB(\text{Slattery})}= 0,1083\text{cm}^2\text{s}^{-1}$$

III.4.5.Calcul de l'écart entre les valeurs du coefficient de diffusion

La meilleure façon de comparer les valeurs de D_{AB} trouvées à partir de l'expérimental, la littérature et les corrélations empiriques est de calculer l'écart (erreur) en utilisant l'équation suivante :

$$Er = \frac{|D_{AB(1)}-D_{AB(2)}|}{D_{AB(1)}} \cdot 100 \% \quad (\text{III.6})$$

A titre d'exemple, l'écart entre la valeur du D_{AB} trouvée expérimentalement et celle trouvée par la corrélation de FSG pour l'acétone est égale à 18,16 %. Cette valeur est tout à fait acceptable.

$$Er = \frac{|0,1054-0,1288|}{0,1288} \cdot 100 = 18,16 \%$$

III.5.Influence de la température sur le coefficient de diffusion

Pour chercher l'influence de la température sur la valeur du coefficient de diffusion, et vu la complexité des calculs, nous avons eu recours au programme Fortran 90 qui allait simplifier l'acquisition des D_{AB} .

III.5. 1. Introduction au langage de programmation FORTRAN 90

Le Fortran est depuis longtemps, le langage le plus utilisé dans la programmation relative aux calculs de l'ingénieur. Le Fortran 90 possède de nombreux avantages par rapport aux précédentes versions (FORTRAN 77) dont les principaux sont cités ci-après

[Youcef] :

- Les programmes en Fortran 90 sont écrits en format libre,
- On peut mélanger les caractères majuscules sans restriction,
- Plusieurs rapports (instructions) peuvent être placés dans une même ligne, séparés par «<< >>»,
- Les longues lignes peuvent être prolongées par le symbole «& » à la fin de la ligne,
- L'instruction «**IMPLICIT NONE**» exige la déclaration de toutes les variables et constantes;
- Les déclarations sont signalées par double deux point«<<::>>»

Le Fortran possède trois types de données (numérique, alphanumériques et logiques).

Après une familiarisation avec la programmation Fortran 90, nous avons établi un algorithme qui nous a permis de calculer le coefficient de diffusion en fonction de la température pour plusieurs composés que nous avons classé en deux groupes :

- Les alcools et l'acétone
- Les alcanes

Les organigrammes suivants (figures III.4 et III.5) décrivent la méthode de calcul utilisée par Fortran 90 pour calculer le D_{AB} . Il est à noter que l'incrément de température est de 1 K pour les alcools et l'acétone alors que pour les alcanes l'incrément de température est de 10 K. Cette différence d'incrément est due à la largeur de l'intervalle de température pour les alcanes.

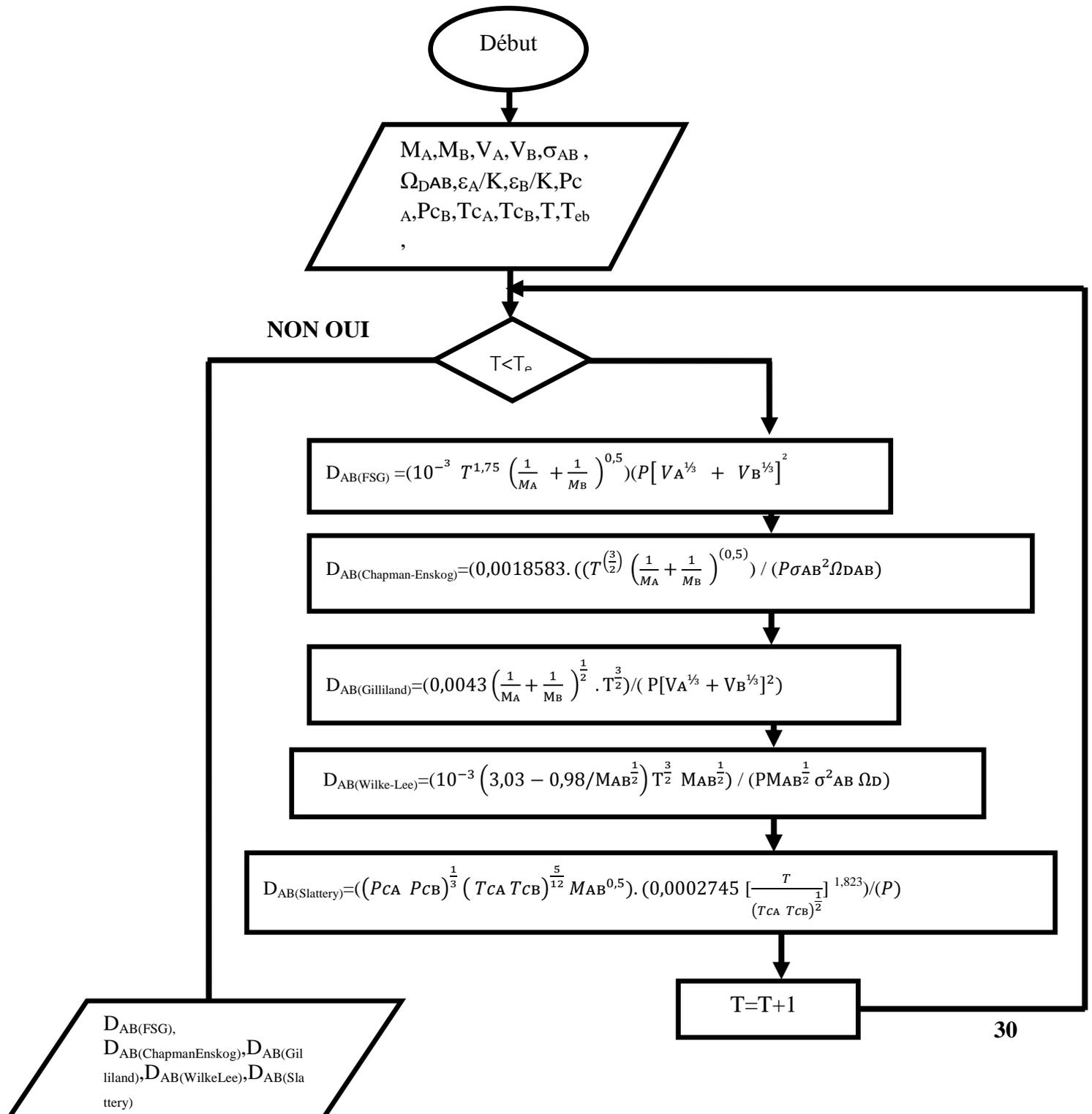
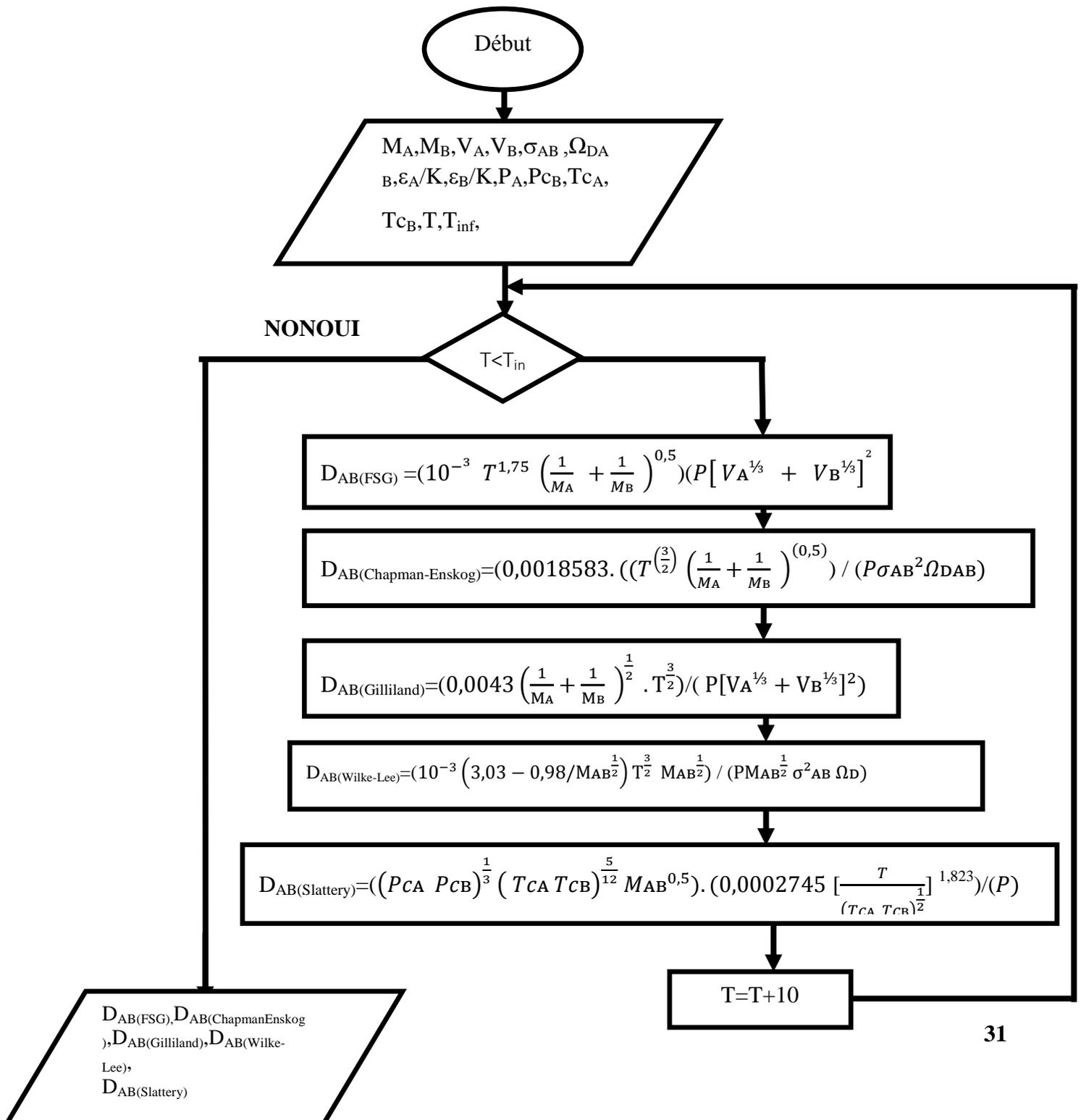




Figure III.4. Organigramme suivi pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcools et de l'acétone en fonction de la température



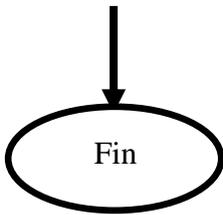


Figure III.5. Organigramme suivi pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcanes en fonction de la température

Après introduction des données nécessaires au calcul, l'algorithme construit en utilisant le Fortran 90 permet de calculer et afficher le coefficient de diffusion de chaque alcool en utilisant les corrélations empiriques, citées plus haut. La boucle « If », dans la figure III.4 permet d'incrémenter la température avec 1K. l'algorithme termine les calculs lorsque la température arrive à la température d'ébullition de l'alcool. Ainsi, l'intervalle de température s'étend de 273 K à la température d'ébullition de l'alcool. De la même façon, l'organigramme schématisé par la figure III.5 décrit l'algorithme utilisé pour le calcul du D_{AB} des alcanes. Ce dernier diffère de l'algorithme utilisé pour les alcanes par l'incrément de température qui est 10 K. cet incrément a été choisi en raison de la largesse de l'intervalle de température. Aussi, l'algorithme termine les calculs lorsque la température arrive à la température d'auto-inflammation de l'alcane. C'est à cette température que l'alcane prend feu spontanément.

III.6. Conclusion

Les méthodes expérimentales utilisées dans ce chapitre ont été quelque peu difficiles à mener à bien car influencées par beaucoup de paramètres qu'il était difficile de surmonter telle que la température et le temps de l'expérience qui ne pouvait pas excéder les huit heures. Cependant, le calcul des coefficients de diffusion a été beaucoup simplifié par le Fortran 90 qui nécessite une bonne formation quant à son utilisation.

CHAPITRE IV :

Résultats et discussions

IV.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous présenterons, les résultats des différentes expériences effectuées pour la détermination du coefficient de diffusion de quelques espèces organiques dans l'air ainsi que les résultats relatifs au calcul du coefficient de diffusion de plusieurs composés dans l'air en utilisant le Fortran 90.

IV.2. Détermination du coefficient de diffusion de quelques espèces volatiles dans l'air

Dans cette première partie, sont rapportés les résultats relatifs à la mesure du coefficient de diffusion du méthanol, éthanol, propanol, butanol et l'acétone dans l'air. Etant donné les conditions expérimentales défavorables, notamment l'instabilité du courant électrique dans le laboratoire pédagogique, l'estimation expérimentale du coefficient de diffusion s'est limitée à la température ambiante (20 ou 25°C).

Le tracé des courbes représentant la variation du niveau de liquide dans le tube de diffusion en fonction du quotient de la variation du niveau de liquide au temps a permis d'estimer le coefficient de diffusion des alcools primaires ainsi que celui de l'acétone à la température ambiante. Le tableau ci-dessous donne les valeurs calculées du coefficient de diffusion à partir des expériences réalisées au laboratoire $D_{AB (exp)}$ et comparé à la bibliographie. Une comparaison entre ces valeurs trouvées expérimentalement et le coefficient de diffusion estimé par les cinq corrélations utilisées dans la phase gazeuse a également été réalisée.

Il n'a pas été aisé de trouver dans la littérature les valeurs du coefficient de diffusion des systèmes étudiés pour les conditions opératoires des expériences réellement réalisées. Cependant, il est intéressant de noter d'après le tableau IV.1 que le coefficient de diffusion mesuré est proche des valeurs trouvées dans la bibliographie, notamment pour les cas des systèmes éthanol/air dont l'écart est 3,24 %.

Tableau IV.1. Estimation expérimentale du coefficient de diffusion.

Système (Température)	$D_{AB}^{(exp)}$ (cm^2s^{-1})	$D_{AB}^{(Lit)}$ (cm^2s^{-1})	$D_{AB}^{(estimé)} (cm^2s^{-1})$ 20 °C				
			Chapman- Enskog	FSG	Wilke- Lee	Gilliland	Slattery
Méthanol-air (20°C)	0,1040	0,1778	0,1359	0,1569	0,1475	0,1630	0,1298
Ecart (%)	/	41,51	23,47	33,71	29,49	36,19	19,87
Ethanol-air (25 °C)	0,1223	0,1264	0,1129	0,1232	0,1231	0,1275	0,1128
Ecart (%)	/	3,24	8,32	0,73	0,64	4,07	8,42
Propanol-air (20°C)	0,0877	0,0936	0,0928	0,0998	0,1015	0,1037	0,0964
Ecart (%)	/	6,30	5,49	12,12	13,59	15,42	9,02
Butanol-air (20°C)	0,0639	0,0689	0,0811	0,0871	0,0888	0,0906	0,0865
Ecart (%)	/	7,25	21,20	26,63	28,04	29,47	26,12
Acétone-air (20°C)	0,0687	0,1070	0,0995	0,1027	0,1088	0,1067	0,0960
Ecart (%)	/	35,80	30,95	33,10	36,85	35,61	28,44
Acétone-air (30°C)	0,0932	/	0,1061	0,1217	0,1159	0,1254	0,1021
Ecart (%)	/	/	12,15	23,41	19,58	25,68	8,71
Acétone-air (40°C)	0,1055	0,120	0,1128	0,1288	0,1233	0,1317	0,1083
Ecart (%)	/	12,08	6,47	18,09	14,43	19,89	2,58

Le butanol et le propanol sont moins volatiles que le méthanol et l'acétone. Ainsi, il a fallu attendre plus longtemps pour voir le niveau du liquide diminuer dans le tube de diffusion. L'expérience a duré 9 heures. Les résultats concernant le système Ethanol/air auraient été plus proches de la littérature si l'expérience avait duré plus de 8 h (idéalement 20h). Ce qui n'était pas réalisable dans le laboratoire pédagogique. Cependant, il est intéressant de remarquer que le dispositif expérimental permet d'obtenir des résultats globalement très satisfaisants.

IV.3. Résultats des calculs du coefficient de diffusion

Dans cette section, sont rapportés les résultats relatifs au calcul du coefficient de diffusion des cinq premiers alcools en plus de l'acétone et des quatre premiers alcanes dans l'air en utilisant le Fortran 90. Le calcul a été réalisé en utilisant les corrélations existantes relatives à l'estimation du coefficient de diffusion dans les gaz.

IV.3.1. Influence de la température sur le coefficient de diffusion des alcools dans l'air

Les figures ci-dessous, montrent comment varie le coefficient de diffusion des alcools primaires en fonction de la température en utilisant les corrélations de FSG, Chapman-Enskog, Gilliland, Wilke-Lee et Slattery.

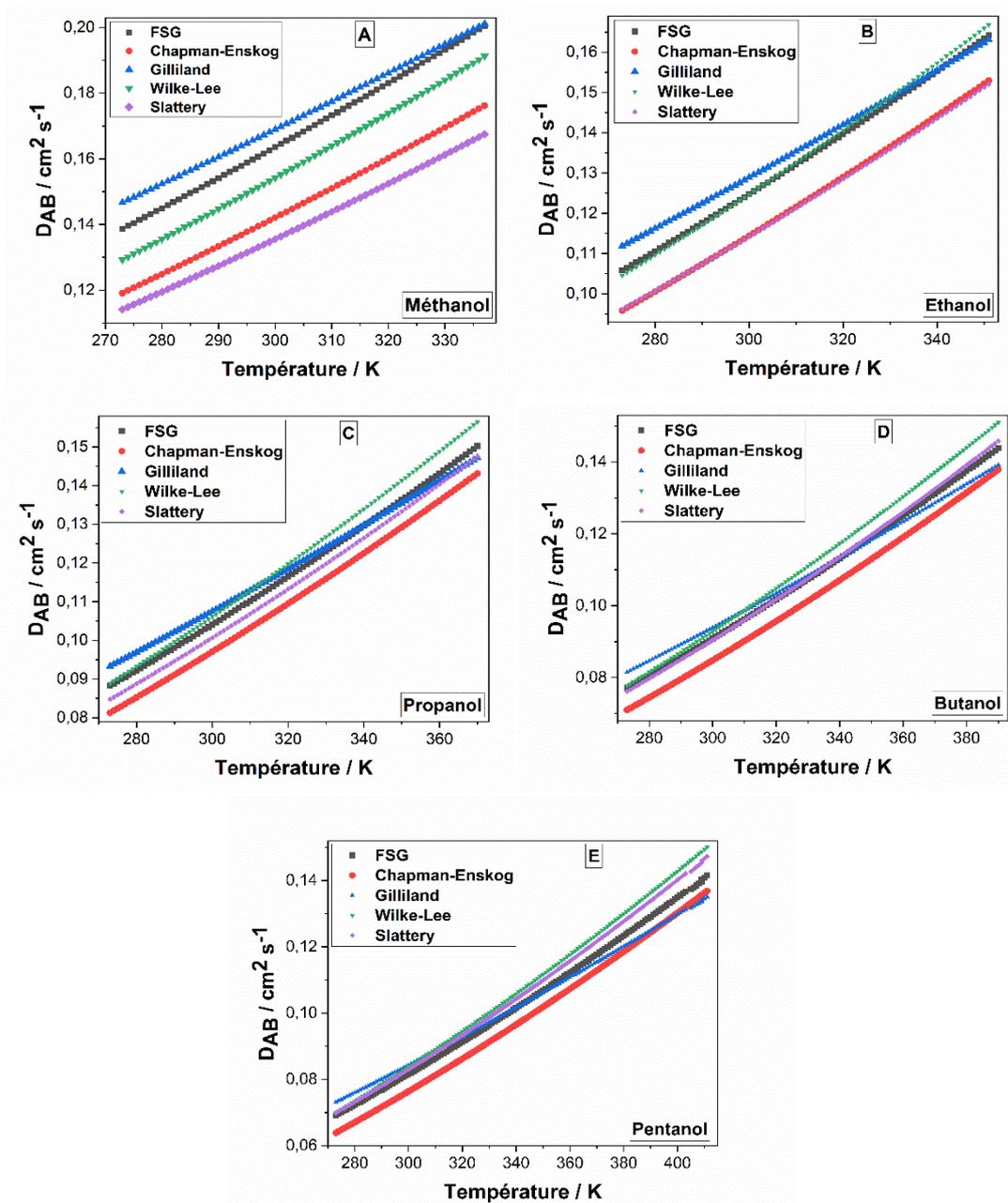


Figure IV.1. Estimation du coefficient de diffusion du : A) méthanol ; B) éthanol ; C) propanol; D) butanol; E) pentanol dans l'air en utilisant plusieurs corrélations.

La première remarque qui peut être faite est la tendance du coefficient de diffusion à augmenter en fonction de la température. Cette constatation est parfaitement logique puisque

la théorie cinétique des gaz prévoit une proportionnalité entre le coefficient de diffusion et la température. Généralement, les valeurs de D_{AB} calculées à l'aide des corrélations de Chapman-Enskog, FSG, Slattery, Gilliland et Wilke-Lee sont assez proches. De plus, on observe une même tendance pour les cinq corrélations : pour une même température, le coefficient de diffusion diminue dans cette ordre méthanol, éthanol, propanol, butanol, pentanol. Le calcul du coefficient de diffusion a une limite supérieure correspondant à la température d'ébullition.

Tableau IV.2. Résultat de la régression linéaire au premier degré des courbes relatives à la variation du coefficient de diffusion en fonction de la température pour les alcools.

Corrélation	Espèce	Expression du coefficient de diffusion	R²
FSG	Méthanol	$D_{AB}=9,6559 \cdot 10^{-4}T - 0,125$ (IV.1)	0,9995
	Ethanol	$D_{AB}=7,4908 \cdot 10^{-4}T - 0,09965$ (IV.2)	0,9994
	Propanol	$D_{AB}=6,3903 \cdot 10^{-4}T - 0,0874$ (IV.3)	0,9991
	Butanol	$D_{AB}=5,7089 \cdot 10^{-4}T - 0,08029$ (IV.4)	0,99881
	Pentanol	$D_{AB}=5,2375 \cdot 10^{-4}T - 0,07564$ (IV.5)	0,99855
Chapman-Enskog	Méthanol	$D_{AB}=8,8502 \cdot 10^{-4}T - 0,12431$ (IV.6)	0,99956
	Ethanol	$D_{AB}=7,3274 \cdot 10^{-4}T - 0,05823$ (IV.7)	0,99973
	Propanol	$D_{AB}=4,8431 \cdot 10^{-4}T - 0,10511$ (IV.8)	0,99938
	Butanol	$D_{AB}=6,3787 \cdot 10^{-4}T - 0,09405$ (IV.9)	0,99911
	Pentanol	$D_{AB}=5,7194 \cdot 10^{-4}T - 0,08668$ (IV.10)	0,99878
Gilliland	Méthanol	$D_{AB}=8,5154 \cdot 10^{-4}T - 0,08628$ (IV.11)	0,99981
	Ethanol	$D_{AB}=6,5685 \cdot 10^{-4}T - 0,06798$ (IV.12)	0,99973
	Propanol	$D_{AB}=5,5614 \cdot 10^{-4}T - 0,05918$ (IV.13)	0,99961
	Butanol	$D_{AB}=4,9302 \cdot 10^{-4}T - 0,05396$ (IV.14)	0,99947
	Pentanol	$D_{AB}=4,4876 \cdot 10^{-4}T - 0,05039$ (IV.15)	0,99937
Wilke-Lee	Méthanol	$D_{AB}=9,6911 \cdot 10^{-4}T - 0,13612$ (IV.16)	0,99956
	Ethanol	$D_{AB}=7,9900 \cdot 10^{-4}T - 0,11462$ (IV.17)	0,99938
	Propanol	$D_{AB}=6,9739 \cdot 10^{-4}T - 0,10282$ (IV.18)	0,99911
	Butanol	$D_{AB}=6,2637 \cdot 10^{-4}T - 0,09493$ (IV.19)	0,99878
	Pentanol	$D_{AB}=5,8012 \cdot 10^{-4}T - 0,09039$ (IV.20)	0,99841
Slattery	Méthanol	$D_{AB}=8,3465 \cdot 10^{-4}T - 0,11451$ (IV.21)	0,99949
	Ethanol	$D_{AB}=7,1660 \cdot 10^{-4}T - 0,10042$ (IV.22)	0,99928
	Propanol	$D_{AB}=6,4737 \cdot 10^{-4}T - 0,09326$ (IV.23)	0,99895
	Butanol	$D_{AB}=5,9601 \cdot 10^{-4}T - 0,08829$ (IV.24)	0,99857
	Pentanol	$D_{AB}=5,6046 \cdot 10^{-4}T - 0,08526$ (IV.25)	0,99825

On remarque que les valeurs des coefficients de diffusion calculées à l'aide de l'équation de Gilliland sont toujours supérieures à celles trouvées par les autres corrélations à basses températures. Alors que le D_{AB} calculé par l'équation de Chapman-Enskog est

généralement plus faible que celui estimé par les autres corrélations sur l'ensemble de l'intervalle de température.

Nous avons utilisé la régression linéaire pour trouver les équations qui décrivent la relation entre le coefficient de diffusion et la température pour chaque paire de gaz et pour chaque corrélation, Tableau IV.2.

L'ajustement linéaire au premier degré des différentes courbes donne les équations regroupées dans tableau ci-dessus.

Les équations obtenues avec un coefficient de corrélation supérieur à 0,998 montrent que les pentes des droites sont très proches pour un même système. Ceci montre que les différentes corrélations sont bien adaptées pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcools dans l'air.

IV.3.2. Influence de l'alcool en diffusion sur le coefficient de diffusion

Les figures ci-dessous regroupent les superpositions des courbes représentant la variation du coefficient de diffusion des systèmes alcool-air. Où l'alcool est le méthanol, éthanol, propanol butanol et pentanol.

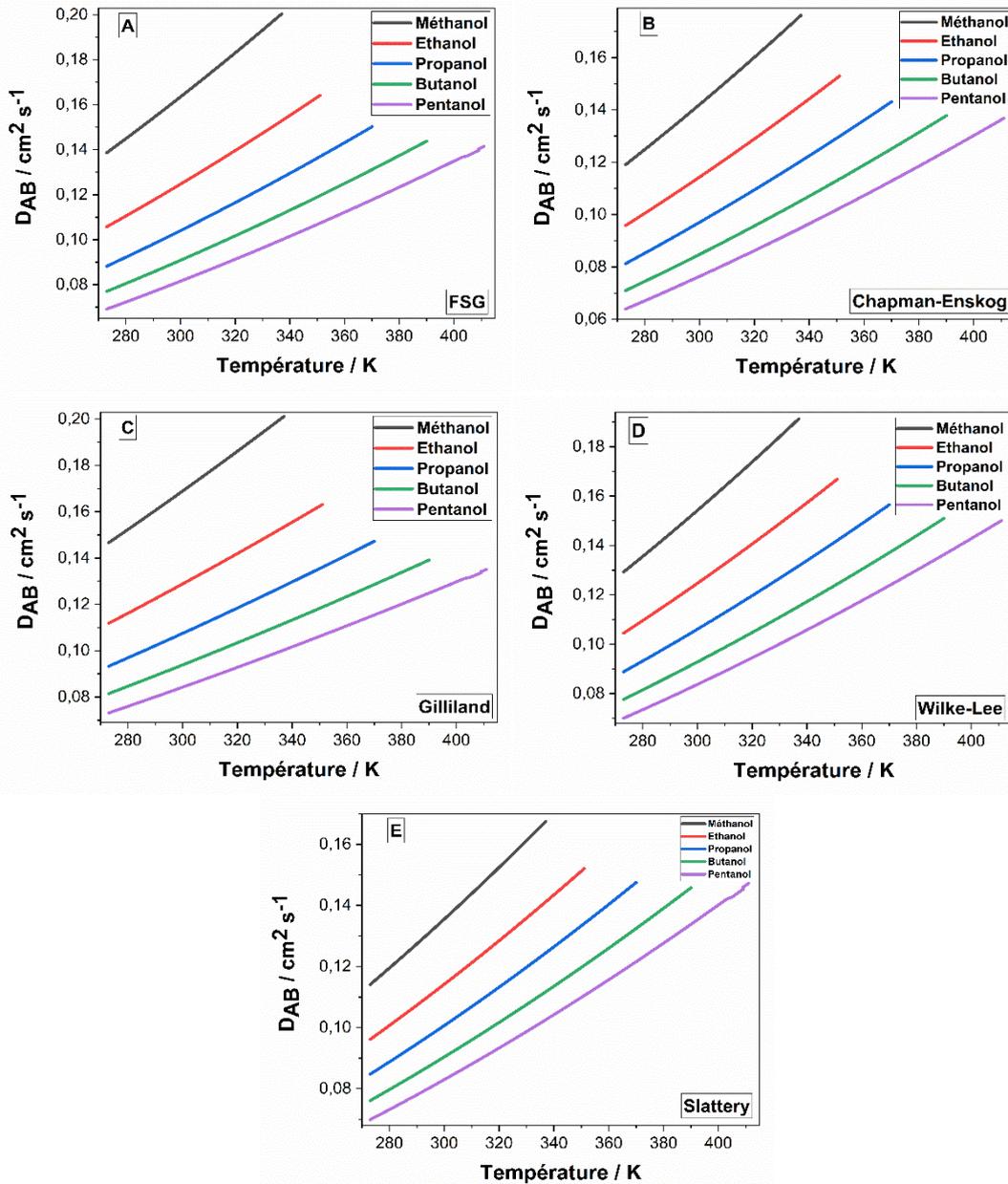


Figure IV.2. Comparaison des différentes corrélations pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcools: A) Méthanol ; B) Ethanol ; C) Propanol; D) Butanol et E) Pentanol dans l'air

Les résultats du calcul des coefficients de diffusion ; D_{AB} , montre que ce paramètre évolue de la même façon pour tous les alcools. On observe une augmentation du D_{AB} en fonction de la température. En effet, cette augmentation est observée pour toutes les corrélations utilisées. De plus, on observe une même tendance pour les cinq corrélations: pour une même température, le coefficient de diffusion diminue dans cet ordre méthanol, éthanol, propanol, butanol, pentanol. Le calcul du coefficient de diffusion a une limite supérieure correspondant à la température d'ébullition.

IV.3.3. Influence de la température sur le coefficient de diffusion de l'acétone dans l'air

Etant donné que le coefficient de diffusion de l'acétone a été recherché expérimentalement, nous avons jugé adéquat d'essayer de prédire sa valeur en fonction de la température. La figure IV.3 décrit la variation du D_{AB} de l'acétone dans l'air en fonction de la température.

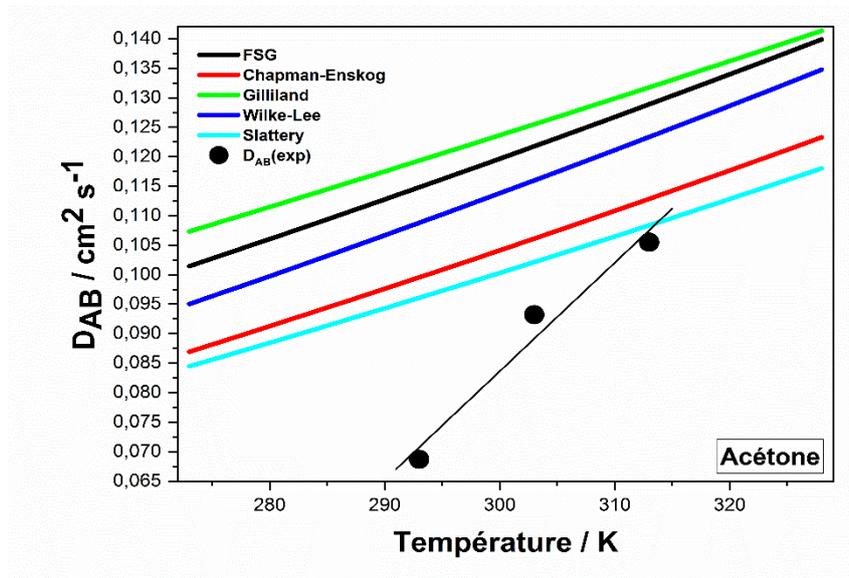


Figure IV.3. Comparaison des différentes corrélations pour l'estimation du coefficient de diffusion de l'acétone dans l'air et valeur du D_{AB} mesuré expérimentalement à trois différentes températures.

D'après La figure IV.3, on remarque que le coefficient de diffusion de l'acétone augmente en fonction de la température pour les cinq corrélations. Ce résultat est en accord avec celui des alcools. Cependant, les valeurs du coefficient de diffusion trouvé expérimentalement sont un peu éloignés des valeurs trouvées en utilisant les corrélations empiriques, notamment à 298 K. Par contre, le D_{AB} mesuré à 313 K est assez proche de celui estimé à l'aide des corrélations de Slattery et Chapman-Enskog. Il est clair, qu'une seule manipulation ne peut pas donner au premier coup les valeurs attendues. En toute rigueur, on peut dire que l'appareillage utilisé est assez performant pour la mesure du coefficient de diffusion des composés volatiles dans l'air.

IV.3.4. Influence de la température sur le coefficient de diffusion des alcanes dans l'air

Les figures IV.4. (A-D) montrent la variation du coefficient de diffusion des alcanes en fonction de la température en utilisant les corrélations de Chapman-Enskog, FSG, Gilliland, Wilke-Lee et Slattery.

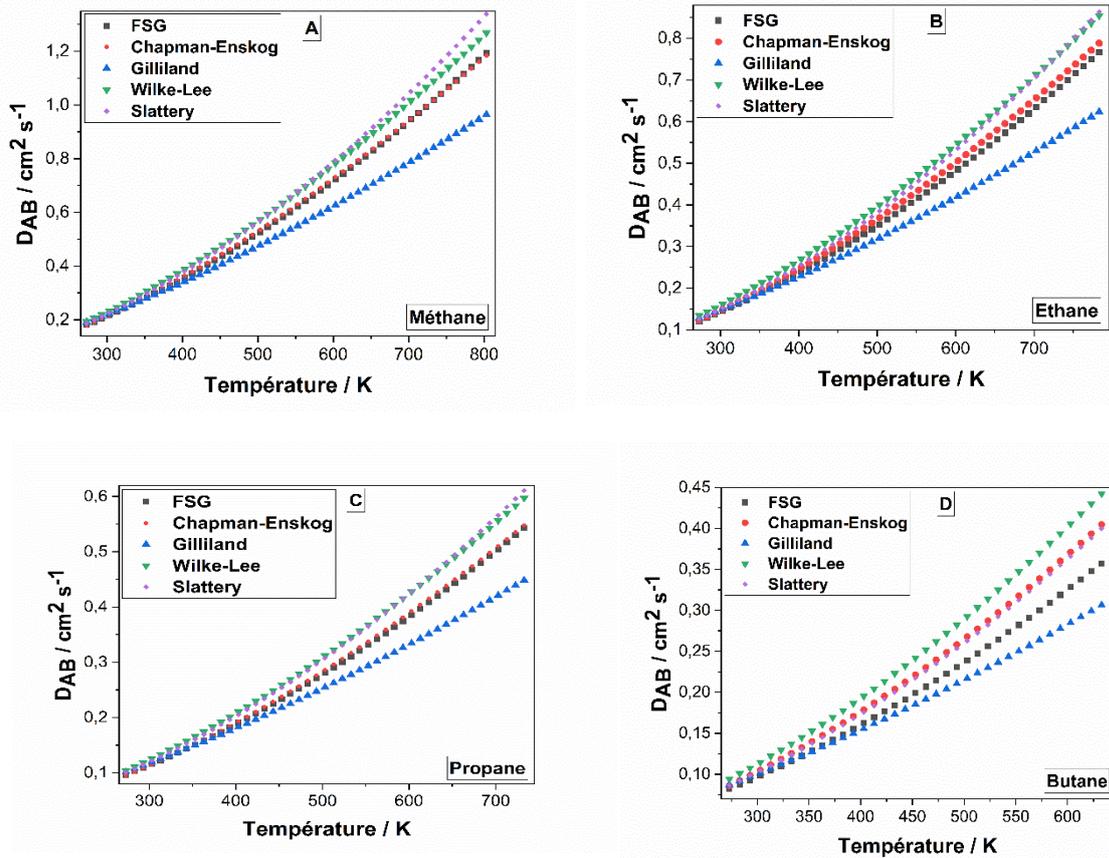


Figure IV.4. Variation du coefficient de diffusion du: A) méthane ; B) éthane ; C) propane et D) butane dans l'air en fonction de la température.

Après examen des différentes courbes, il s'avère que les valeurs du coefficient de diffusion calculé en utilisant les corrélations de Chapman-Enskog et la corrélation de FSG sont très proches. Parfois, ils se confondent comme dans le cas des trois premiers alcanes. Ce qui est prévisible en observant les équations (IV.26 et IV.30) extraites des ajustements polynomiaux des courbes de la figure IV.4, tableau IV.3.

En effet, la comparaison entre les valeurs de D_{AB} calculé sur tout l'intervalle de température donne un écart de moins de 11% entre ces deux corrélations. On remarque également, que pour des températures inférieures à 400 K, les valeurs de D_{AB} calculées à partir des cinq corrélations (FSG, Chapman-Enskog, Gilliland, Wilke-Lee et Slattery) sont très proches. Lors de l'augmentation de la température, l'écart entre ces valeurs commence à se creuser petit à petit pour atteindre -à titre d'exemple- 11%, 7%, 10%, 1,2% entre la corrélation de Wilk-Lee et Gilliland pour le méthane, éthane, propane et butane, respectivement.

Tableau IV.3. Résultat de l'ajustement polynomial des courbes relatives à la variation du coefficient de diffusion en fonction de la température pour les alcanes.

Corrélation	Espèce	Expression du coefficient de diffusion (cm ² /s)	R ²
FSG	Méthane	$D_{AB} = 1,3502.10^{-6}T^2 + 4,63985.10^{-4}T - 0,040833$ (IV.26)	1
	Ethane	$D_{AB} = 9,1072.10^{-7}T^2 + 3,07456.10^{-4}T - 0,03153$ (IV.27)	1
	Propane	$D_{AB} = 7,3178.10^{-7}T^2 + 2,36331.10^{-4}T - 0,02334$ (IV.28)	1
	Butane	$D_{AB} = 6,3892.10^{-7}T^2 + 1,8753.10^{-4}T - 0,01705$ (IV.29)	1
Chapman-Enskog	Méthane	$D_{AB} = 1,1459.10^{-6}T^2 + 6,7549.10^{-4}T - 0,09394$ (IV.30)	0,999
	Ethane	$D_{AB} = 8,2284.10^{-7}T^2 + 4,43061.10^{-4}T - 0,06131$ (IV.31)	0,999
	Propane	$D_{AB} = 6,7035.10^{-7}T^2 + 3,15429.10^{-4}T - 0,04229$ (IV.32)	0,999
	Butane	$D_{AB} = 7,4324.10^{-7}T^2 + 2,14115.10^{-4}T - 0,02815$ (IV.33)	1
Gilliland	Méthane	$D_{AB} = 6,9485.10^{-7}T^2 + 7,16844.10^{-4}T - 0,00119$ (IV.34)	0,999
	Ethane	$D_{AB} = 4,7073.10^{-7}T^2 + 4,77388.10^{-4}T - 0,03816$ (IV.35)	0,999
	Propane	$D_{AB} = 3,8242.10^{-7}T^2 + 3,71062.10^{-4}T - 0,0856$ (IV.36)	0,999
	Butane	$D_{AB} = 3,3830.10^{-7}T^2 + 2,98271.10^{-4}T - 0,02113$ (IV.37)	1
Wilke-Lee	Méthane	$D_{AB} = 6,9485.10^{-7}T^2 + 7,16844.10^{-4}T - 0,05814$ (IV.38)	0,999
	Ethane	$D_{AB} = 4,7072.10^{-7}T^2 + 4,77397.10^{-4}T - 0,03816$ (IV.39)	0,999
	Propane	$D_{AB} = 3,8242.10^{-7}T^2 + 3,71062.10^{-4}T - 0,02856$ (IV.40)	0,999
	Butane	$D_{AB} = 3,4213.10^{-7}T^2 + 3,01648.10^{-4}T - 0,02137$ (IV.41)	1
Slattery	Méthane	$D_{AB} = 1,6776.10^{-6}T^2 + 3,71408.10^{-4}T - 0,04069$ (IV.42)	1
	Ethane	$D_{AB} = 1,1365.10^{-6}T^2 + 2,47403.10^{-4}T - 0,02677$ (IV.43)	1
	Propane	$D_{AB} = 9,1460.10^{-7}T^2 + 1,90494.10^{-4}T - 0,01981$ (IV.44)	1
	Butane	$D_{AB} = 7,9630.10^{-7}T^2 + 1,5077.10^{-4}T - 0,0144$ (IV.45)	1

IV.3.5. Influence de l'alcane en diffusion sur le coefficient de diffusion

Les figures ci-dessous regroupent les superpositions des courbes représentant la variation du coefficient de diffusion des systèmes alcane-air. Où l'alcane est le méthane, éthane, propane et butane.

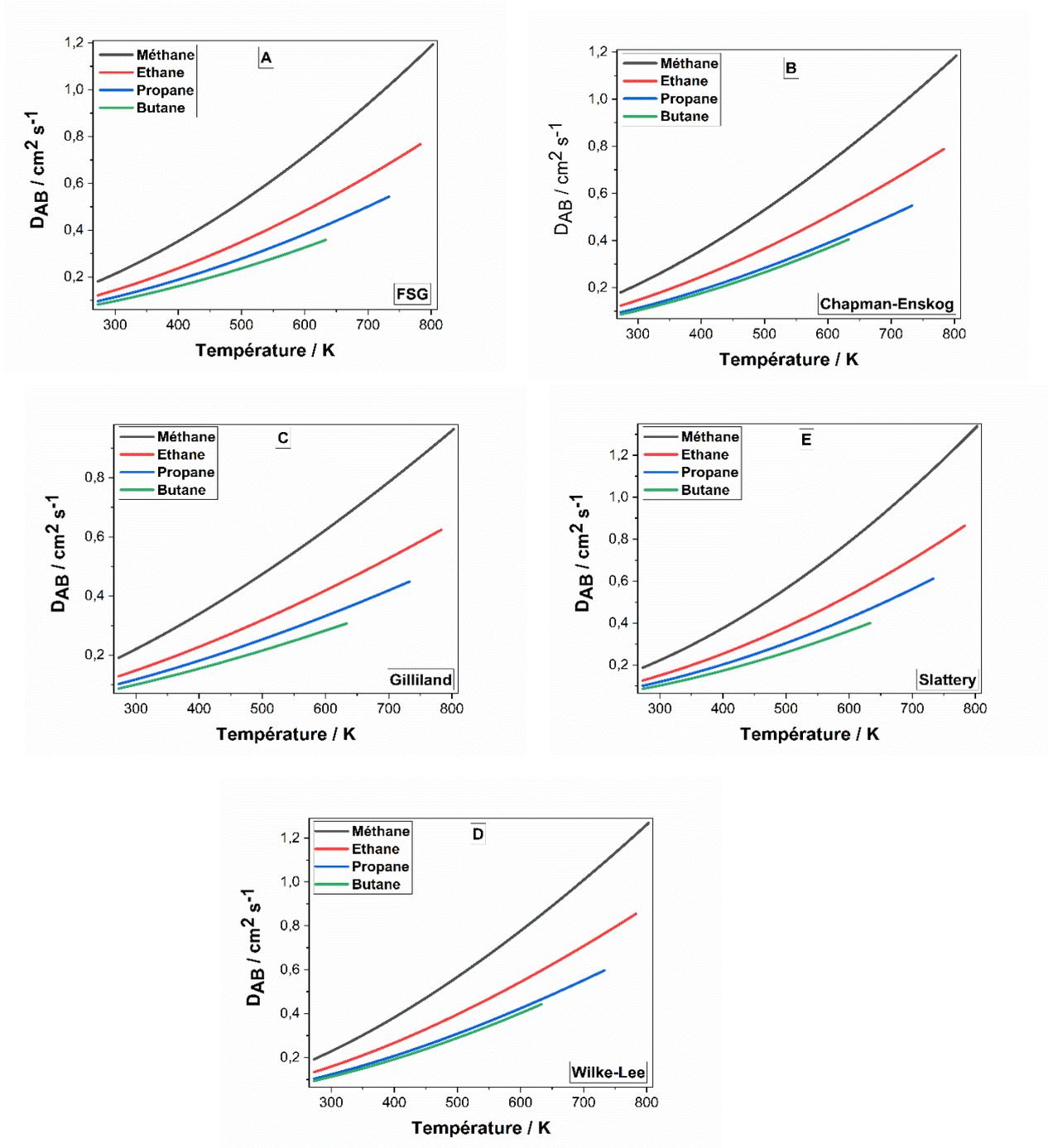


Figure IV.5. Comparaison des différentes corrélations pour l'estimation du coefficient de diffusion des alcanes: A) méthane ; B) éthane; C) propane et D) butane dans l'air

D'après les figures IV.5, on note que le coefficient de diffusion des alcanes dans l'air évolue de manière prévisible. En effet, on remarque que plus la masse molaire de l'alcane est petite, plus le D_{AB} sera grand. De plus, l'augmentation de la température a plus d'influence sur le coefficient de diffusion des espèces à faible poids moléculaire quelque soit la corrélation utilisée. L'ajustement polynomial au second degré effectué en utilisant le logiciel Origin

2018 montre que le facteur lié à la température portée à la puissance 2 diminue du méthane, éthane, propane et butane ; tableau IV.3. Aussi, on remarque que dans l'intervalle de température entre 273 et 633 K, le coefficient de diffusion augmente de 370%, 475%, 538% et 558% pour le butane, propane, éthane et méthane, respectivement. L'agitation thermique due à l'augmentation de la température permet aux petites molécules de se mouvoir plus rapidement.

Tableau IV.4. Relation entre les coefficients de diffusion des alcools dans l'air.

Espèce	Corrélation	Méthanol	Ethano l	Propanol	Butanol	Pentanol
Méthanol	FSG	/	1,3110	1,5716	1,7997	2,0050
	Chapman-Enskog	/	1,2422	1,4638	1,6756	1,8599
	Gilliland	/	1,3110	1,5716	1,7998	2,0050
	Wilke-Lee	/	1,2365	1,4532	1,6606	1,8411
	Slattery	/	1,1858	1,3462	1,4993	1,6334
Ethanol	FSG	0,7628	/	1,1987	1,3728	1,5293
	Chapman-Enskog	0,8050	/	1,1782	1,3486	1,4968
	Gilliland	0,7627	/	1,1987	1,3728	1,5293
	Wilke-Lee	0,8087	/	1,1751	1,3427	1,4885
	Slattery	0,8433	/	1,1345	1,2636	1,3765
Propanol	FSG	0,6363	0,8342	/	1,1452	1,2758
	Chapman-Enskog	0,6832	0,8488	/	1,1444	1,2699
	Gilliland	0,6363	0,8342	/	1,1452	1,2758
	Wilke-Lee	0,6881	0,8509	/	1,1425	1,2663
	Slattery	0,7428	0,8814	/	1,1138	1,2133
Butanol	FSG	0,5556	0,7284	0,8732	/	1,1140
	Chapman-Enskog	0,5968	0,7415	0,8738	/	1,1096
	Gilliland	0,5556	0,7284	0,8732	/	1,1140
	Wilke-Lee	0,6022	0,7448	0,8753	/	1,1083
	Slattery	0,6669	0,7914	0,8978	/	1,0894
Pentanol	FSG	0,4988	0,6539	0,7838	0,8977	/
	Chapman-Enskog	0,5377	0,6680	0,7875	0,9012	/
	Gilliland	0,4988	0,6539	0,7838	0,8977	/
	Wilke-Lee	0,5432	0,6718	0,7897	0,9023	/
	Slattery	0,6122	0,7265	0,8242	0,9179	/

A partir des valeurs calculées du coefficient de diffusion en fonction de la température, il s'est avéré qu'il existe une relation entre les D_{AB} des alcools entre eux et les D_{AB} des alcanes entre eux. Cette relation peut être résumée par les deux équations suivantes :

$$D_{AB}(\text{alcool 1}) = a \times D_{AB}(\text{alcool 2}) \quad (\text{IV.46})$$

Et,

$$D_{AB(\text{alcane1})} = a' \times D_{AB(\text{alcane2})} \quad (\text{IV.47})$$

Avec a et a' des constantes calculées et rassemblées dans les tableaux IV.4 et IV.5.

Tableau IV.5. Relation entre les coefficients de diffusion des alcanes dans l'air.

Espèce	Corrélation	Méthane	Ethane	Propane	Butane
Méthane	FSG	/	1,4892	1,8753	2,2022
	Chapman-Enskog	/	1,4482	1,8717	2,0167
	Gilliland	/	1,4302	1,8390	1,9760
	Wilke-Lee	/	1,4892	1,8753	2,2022
	Slattery	/	1,4808	1,8552	2,1689
Ethane	FSG	0,6715	/	1,2593	1,4787
	Chapman-Enskog	0,6905	/	1,2918	1,3904
	Gilliland	0,6992	/	1,2852	1,3794
	Wilke-Lee	0,6715	/	1,2593	1,4788
	Slattery	0,6753	/	1,2528	1,4646
Propane	FSG	0,5332	0,7940	/	1,1743
	Chapman-Enskog	0,5343	0,7741	/	1,0755
	Gilliland	0,5437	0,7781	/	1,0725
	Wilke-Lee	0,5332	0,7940	/	1,1743
	Slattery	0,5390	0,7982	/	1,1691
Butane	FSG	0,4541	0,6762	0,8516	/
	Chapman-Enskog	0,4958	0,7667	0,9297	/
	Gilliland	0,5060	0,72495	0,9324	/
	Wilke-Lee	0,4541	0,6762	0,8516	/
	Slattery	0,4610	0,6827	0,8553	/

IV.3.6. Coefficient de diffusion des isomères

Les isomères de position sont des composés qui ont la même fonction (alcane ou alcool) et la même masse molaire. Ils diffèrent, cependant, par la structure chimique ou la position de la fonction (cas de l'alcool). Les paramètres physico-chimiques peuvent également varier entre les isomères tels que la température d'évaporation, le point critique, etc. (tableau III.2). Dans cette partie, sont rapportés les variations du coefficient de diffusion des isomères en fonction de la température ; le butanol et le tert-butanol ainsi que le propanol et 2-propanol, figure IV.6. Il est à noter que nous n'avons pas pu trouver les paramètres de Lennard-Jones pour le 2-propanol, c'est pour cela que le calcul du D_{AB} pour les deux isomères du propanol s'est limité aux équations de FSG, Gilliland et Slattery. D'après la figure IV.6 C, on observe une superposition totale entre les courbes des deux isomères obtenues à partir d'une seule

corrélation. Ce résultat est tout à fait acceptable vu que les paramètres utilisés par ces corrélations sont très proches ou identiques. La même observation peut être faite pour les courbes des isomères du butanol obtenues à partir des corrélations précédentes. Les corrélations de Chapman-Enskog et celle de Gilliland donnent également des valeurs très proches d'un isomère à un autre. Ces résultats montrent en première conclusion que le coefficient de diffusion n'est pas influencé par la structure chimique du composé.

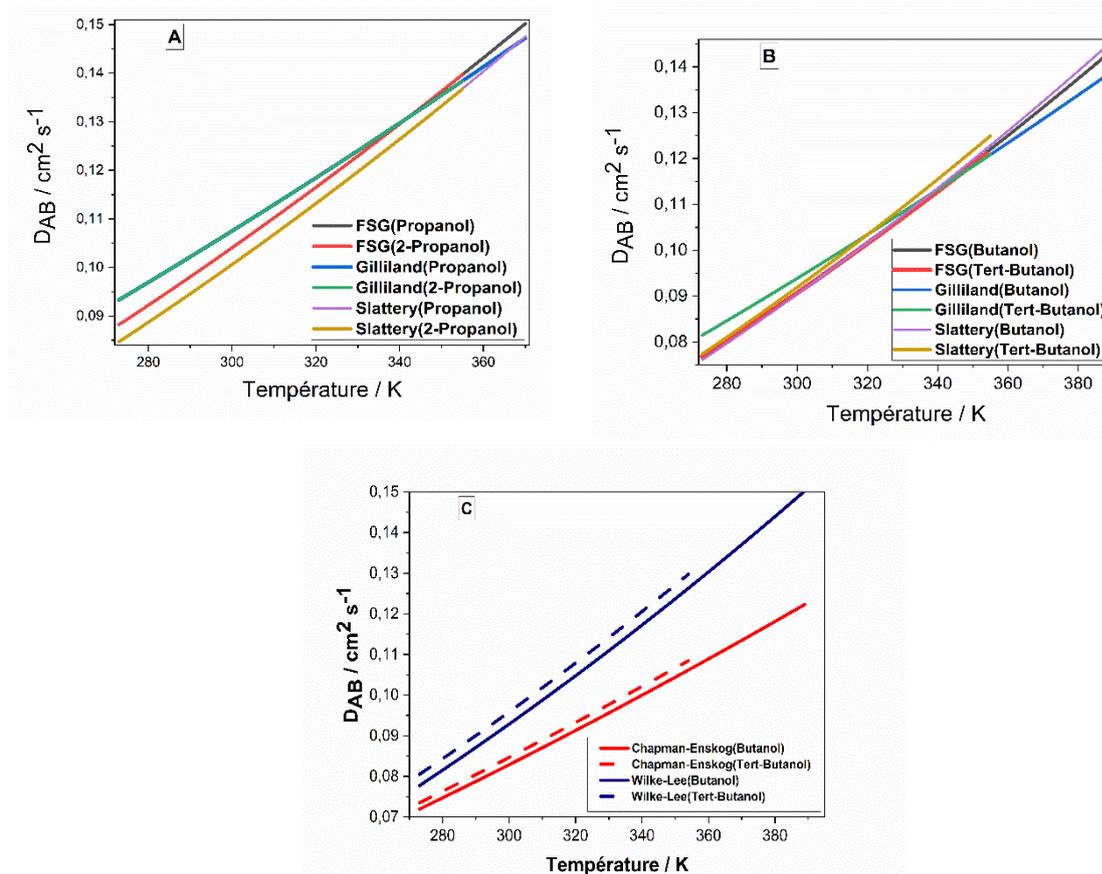


Figure IV.6. Variation du coefficient de diffusion du butanol, tert-butanol, propanol et 2-propanol dans l'air en fonction de la température en utilisant des corrélations :A) FSG, Gilliland et Slattery ;B) FSG, Gilliland et Slattery; C) Chapman-Enskog et Wilk-Lee.

IV.4. Conclusion

Les résultats obtenus ont montré que le dispositif expérimental disponible au niveau du laboratoire pédagogique est capable d'estimer avec une bonne précision le coefficient de diffusion des alcools et acétone dans l'air. Cependant, pour aller plus loin dans la prévision des D_{AB} , notamment pour explorer toutes les températures, il est plus judicieux de s'aider de la programmation informatique. Celle-ci permet de donner l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la température sur un large intervalle de température.

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

Le coefficient de diffusion est un paramètre important dans les phénomènes de transfert de matière. Il gouverne la rapidité avec laquelle une espèce se diffusera dans un milieu quelconque. C'est pourquoi il est primordial de connaître ce paramètre. Mais face au manque de données dans la littérature, il est devenu essentiel de le prédire. C'est ce qui a motivé ce travail.

L'objectif de ce travail était la détermination du coefficient de diffusion de plusieurs composés dans l'air en utilisant l'expérimental et des méthodes de calcul basées sur des corrélations empiriques. L'influence de la température sur les coefficients de diffusion a également été recherchée.

Ainsi, le coefficient de diffusion des alcools primaires ainsi que de l'acétone ont été cherchés expérimentalement et en utilisant les corrélations empiriques. Le coefficient de diffusion des alcanes a été calculé en utilisant les corrélations empiriques. La complexité des calculs a motivé l'utilisation du Fortran 90.

Les résultats des mesures expérimentales a montré que le coefficient de diffusion des alcools et de l'acétone est très proche de celui trouvé dans la littérature et calculé avec les corrélations empiriques. L'écart n'a pas dépassé 20 % dans la plupart des cas.

Nous avons montré que l'évolution du coefficient de diffusion des alcools, acétone et des alcanes dans l'air était attendue car ce dernier augmente avec la température grâce à l'agitation thermique et diminue lorsque le nombre de carbone dans l'alcool ou dans l'alcane augment. L'augmentation de la masse moléculaire constitue un frein dans le processus de diffusion. De plus, la plupart des corrélations empiriques donnent des valeurs du coefficient de diffusion assez proches sur tout l'intervalle de température choisi. A partir des données trouvées, nous avons pu extraire une relation qui relie le coefficient de diffusion d'un alcool ou alcane à celui d'un autre alcool ou alcane, respectivement pour une température donnée.

Les résultats obtenus constituent une nouvelle base de données qui vient combler une large lacune dans bibliographie des coefficients de diffusion. La relation qui lie les coefficients de diffusion entre eux, développée dans ce travail, est une nouveauté dans ce domaine.

REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

Références bibliographiques

Bird R, Stewart W, et Lightfoot E, Transport phenomena, Wiley International Edition, New York, London, 1960.

Cherreau A, Séchage théorie et calculs, Techniques de l'ingénieur, Traité Génie des procédés, J 2480.

Debacq M, Phénomènes de transferts de matière en génie des procédés, Licence, UTC107 Transferts appliqué, France, 2019.

Farhat M, Co-adsorption des métaux lourds sur bentonite modifié en présence de flocculants minérale et biologique mémoire de magister, Universités Mouloud Mammeri, TiziOuzou, 2012.

Gunt, :www.gunt.de/networks/gunt/sites/s1/mmcontent/produktbilder/08311000/Datenblatt.pdf

Jammongwong M, Transfert de matière, Dynamique de la fluide, énergétique et procédés spécialité : génie des procédés et de l'environnement, Thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Toulouse, 2013.

Medjouti H, Etude de la diffusion de la matière dans un canal Mémoire de master, Ecole nationale supérieure d'hydraulique Arbaoui Abdellah, 2016.

Menguy L, Diffusion des particules, lycée Montesquieu, Le Mans Septembre, 2008.

Moulin J, Extraction liquide-liquide, Techniques de l'ingénieur, Traité Génie des procédés J1073.

Nacef M, Brochure de travaux pratique de transfert de matière, Université 8 mai 1945, Guelma, 2018.

Perry et D W Green, Perry's Chemical Engineer's Handbook, McGraw-Hill Companies, Inc, 1999.

Poling, Prausnitz, O'Connell, The properties of gases and liquids, 5th edition, McGraw-Hill, (2001), ISBN: 0-07-149999-7.

Sayad Y, Modélisations des plaques de formes géométriques irrégulières par la méthode des éléments finis, Université de Biskra, 2012.

Bacchin: www.patricebacchin.fr/images/doc/teach/intro_tdm.pdf

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Solimani O, Mise en marche de l'appareil de diffusion dans les liquides et les gaz et mesure de la diffusivité de quelques composés organique Mémoire de master académique, Université KasdiMerbah- Ouargla, 2013.

Résumé

Dans ce travail, le coefficient de diffusion des alcools primaires ainsi que de l'acétone ont été cherchés expérimentalement et en utilisant les corrélations empiriques. Le coefficient de diffusion des alcanes a été calculé en utilisant les corrélations empiriques. Le Fortran 90 a été utilisé pour réaliser tous les calculs.

Les résultats des mesures expérimentales a montré que le coefficient de diffusion des alcools et de l'acétone est très proche de celui trouvé dans la littérature et calculé avec les corrélations empiriques avec un écart moyen inférieur à 20 %.

L'estimation du coefficient de diffusion en fonction de la température à l'aide des corrélations empiriques a montré que ce dernier augmente avec l'augmentation de la température et diminue avec l'augmentation du nombre de carbone dans l'alcool ou l'alcanes. De plus, une intéressante relation liant les coefficients de diffusion entre eux, a été développée dans ce travail.

Les résultats obtenus constitue une nouvelle base de données qui vient combler les lacunes dans bibliographie des coefficients de diffusion.

Abstract

In this work, the diffusion coefficient of primary alcohols as well as acetone were investigated experimentally and using empirical correlations. The diffusion coefficient of alkanes was calculated using empirical correlations. Fortran 90 was used to perform all calculations. The results of the experimental measurements showed that the diffusion coefficient of alcohols and acetone is very close to that found in the literature and calculated with the empirical correlations with an average deviation less than 20%. Estimation of the diffusion coefficient as a function of temperature using empirical correlations showed that this latter increases with increasing temperature and decreases with increasing carbon number in the alcohol as well as in the alkane. Moreover, an interesting relation linking the diffusion coefficients between them, was developed in this work. The results obtained constitute a new database which addresses a lack in the literature of diffusion coefficients.

ملخص

في هذا العمل ، تم بحث معامل الانتشار للكحوليات الأولية وكذلك الأسيتون بشكل تجريبي وباستخدام المعادلات التجريبية. تم حساب معامل انتشار الألكانات باستخدام المعادلات التجريبية. تم استخدام Fortran 90 لإجراء جميع الحسابات. أظهرت نتائج القياسات التجريبية أن معامل انتشار الكحول والأسيتون قريب جداً من ذلك الموجود في الببليوغرافيا ويحسب بالمعادلات التجريبية بمتوسط فرق أقل من 20٪.

أظهر تقدير معامل الانتشار كدالة لدرجة الحرارة باستخدام المعادلات التجريبية أن الأخير يزداد مع زيادة درجة الحرارة وينخفض مع زيادة عدد الكربون في الكحول أو الألكان. علاوة على ذلك ، تم تطوير علاقة مثيرة للاهتمام تربط معاملات الانتشار بينهما ، في هذا العمل.

تشكل النتائج التي تم الحصول عليها قاعدة بيانات جديدة تملأ الثغرات في ببليوغرافيا

معاملات الانتشار.

Annexe: Programme utilisé pour le calcul du coefficient de diffusion

```
!*****
```

```
!Ce programme permet de calculer le coefficient de diffusion des composés organiques en
fonction !de la température.
```

```
!Si le composé est un composé liquide à la température ambiante, on a besoin de connaître sa
!température d'évaporation.
```

```
!Si le composé est un composé gazeux à la température ambiante, on a besoin de connaître sa
!température d'autoinflammation
```

```
!*****
```

```
implicit none
```

```
real::
```

```
!*****
```

```
! Les données nécessaires au calcul du coefficient de diffusion sont fournies
```

```
!*****
```

```
MA,MB,VA,VB,T,P,MAB,VAB,Teb,DABfsg,sigmaa,sigmab,omegaDAB,epsa,epsb,moysigma,
Tt,sigmacarre,DABchap,DABgilli,eps,DABwilk,PCT,TCT,TC1,TCA,TCB,a,b,PCA,PCB,DABsl
att
```

```
print*, 'donner MA et MB'
```

```
read*,MA,MB
```

```
Print*, 'donner VA et VB'
```

```
read*, VA,VB
```

```
print*, 'donner T et P'
```

```
read*,T,P
```

```
print*, 'donner Teb'
```

```
read*,Teb
```

```
MAB=sqrt(1/MA+1/MB)
```

```
VAB= (VA**(0.3333333)+VB**(0.3333333))**2
print*,MAB=',MAB
print*,'VAB=',VAB

Print*, 'donner sigmaA et sigmaB'

read*, sigmaA,sigmaB

print*, 'donnerepsilonA/K et epsilonB/K'

read*,epsa,epsb

moysigma=(sigmaa+sigmab)/2

sigmacarre=(moysigma)**2

eps=(epsa*epsb)**(0.5)

Tt=T/eps

print*,'T*=',Tt

omegaDAB=2.60613*exp(-Tt/0.34972)+0.80022*exp(-Tt/1.59819)+0.34273*exp(-
Tt/22.15087)+0.52942

PRINT*,'omegaDAB=',omegaDAB

Print*, 'donner PCA ET PCB'

read*, PCA,PCB

print*, 'donner TCA et TCB'

read*,TCA,TCB

print*, 'donner a et b'

read*,a,b

PCT=(PCA*PCB)**0.33333333

TCT=(TCA*TCB)**0.41666666
```

```

TC1=sqrt(TCA*TCB)

print*,MAB=',MAB

print*,PCT=',PCT

print*,TCT=',TCT

print*,TC1',TC1

6 if (T.LT.Teb)then

!*****

!Le programme calcule le coefficient de diffusion à l'aide des corrélations de FSG, Chapman-
Enskog, !Gillilnd, Wilke-Lee et Slattery

!*****

DABfsg=0.001*(T**1.75*MAB)/(P*VAB)

DABchap=0.0018583*((T**1.5)*(MAB))/(P*sigmacarre*omegaDAB)

DABgilli=0.0043*(T**1.5*MAB)/(P*VAB)

DABwilk=((0.0027-0.0005*MAB)*T**1.5*MAB)/(P*sigmacarre*omegaDAB)

DABslatt((((PCT*TCT*MAB)*a*(T/TC1)**b))/(P)

!*****

!Le programme affiche dans un tableau, la température et le coefficient de diffusion calculé à
l'aide !des corrélations de FSG, Chapman-Enskog, Gillilnd, Wilke-Lee et Slattery

!*****

print*,T      DABfsgDABchapDABgilliDABwilk
DABslatt',T, '*****',DABfsg, '*****',DABchap, '*****',DABwilk, '*****',DABgilli,
'*****',DABslatt

!*****

!Le programme ajoute un incrément de température et revient en début de la boucle "If"

!*****

T=T+1

```

goto 6

endif

end program global