

# Table des matières

<b>Avant-propos</b> . . . . .	1
<b>Introduction</b> . . . . .	3
<b>Chapitre 1. Détermination des données physiques.</b> . . . . .	5
1.1. Introduction. . . . .	5
1.2. Estimation des propriétés critiques . . . . .	6
1.2.1. Estimation de la température critique . . . . .	6
1.2.1.1. Corrélation d'Eduljee . . . . .	6
1.2.1.2. Corrélation de Nokay . . . . .	8
1.2.1.3. Règle de Guldberg-Guye : pour les composés non organiques . . . . .	8
1.2.1.4. Corrélation de Gates et Thodos : pour les éléments métalliques . . . . .	8
1.2.1.5. Corrélation pour les mélanges : les températures pseudocritiques. . . . .	9
1.2.1.6. Corrélation pour les mélanges d'hydrocarbures . . . . .	9
1.2.1.7. Corrélation pour les mélanges de gaz naturels. . . . .	9
1.2.2. Estimation de la pression critique . . . . .	10
1.2.2.1. Corrélation d'Eduljee . . . . .	10
1.2.2.2. Corrélation de Herzog . . . . .	11
1.2.2.3. Corrélation pour les mélanges . . . . .	12
1.2.2.4. Corrélation pour les mélanges de gaz naturels. . . . .	12
1.2.3. Estimation du volume critique : corrélation de Benson. . . . .	13

---

1.2.4. Estimation du facteur de compressibilité critique . . . . .	15
1.2.4.1. Corrélation de Lydersen . . . . .	15
1.2.4.2. Corrélation d'Edmister . . . . .	15
1.3. Méthodes d'estimation de la température d'ébullition. . . . .	15
1.4. Méthodes d'estimation de la masse volumique . . . . .	18
1.4.1. Estimation des masses volumiques des liquides . . . . .	19
1.4.1.1. Corrélation de Benson . . . . .	19
1.4.1.2. Corrélation de Goyal. . . . .	19
1.4.1.3. Estimation des masses volumiques des gaz . . . . .	19
1.5. Méthodes d'estimation de la viscosité . . . . .	20
1.5.1. Estimation des viscosités des liquides purs . . . . .	20
1.5.1.1. Relation d'Arrhénius modifiée . . . . .	20
1.5.1.2. Corrélation de Thomas . . . . .	20
1.5.2. Corrélations pour la viscosité des mélanges liquides . . . . .	22
1.5.2.1. Pour des mélanges liquides miscibles. . . . .	22
1.5.2.2. Pour des mélanges liquides immiscibles . . . . .	22
1.5.3. Estimation des viscosités des gaz. . . . .	23
1.5.3.1. Relation de Bromley et Wilke . . . . .	23
1.5.3.2. Relation d'Arnold . . . . .	23
1.5.3.3. Relations pour les mélanges gazeux. . . . .	24
1.6. Méthodes d'estimation de la chaleur spécifique . . . . .	24
1.6.1. Capacités calorifiques des huiles de pétrole . . . . .	25
1.6.2. Capacités calorifiques des vapeurs de pétrole . . . . .	25
1.6.3. Estimations pour l'anhracite et les charbons bitumeux . . . . .	26
1.6.4. Capacités calorifiques pour le ciment, le mortier, le sable . . . . .	26
1.6.5. Capacités calorifiques des liquides organiques. . . . .	26
1.7. Estimation de la chaleur latente de vaporisation . . . . .	28
1.7.1. Estimations rapides . . . . .	28
1.7.2. Calcul de la chaleur latente à partir des données critiques . . . . .	28
1.7.3. Corrélation de Chen . . . . .	29
1.7.4. Calculs à différentes températures . . . . .	29
1.8. Estimation des coefficients d'expansion $\beta$ . . . . .	30
1.9. Méthodes d'estimation de la conductivité thermique . . . . .	30
1.9.1. Conductivité thermique des métaux et des alliages . . . . .	31
1.9.2. Conductivité thermique du bois. . . . .	31
1.9.2.1. Bois à taux d'humidité inférieurs à 40 %. . . . .	31
1.9.2.2. Bois à taux d'humidité supérieurs à 40 % . . . . .	32
1.9.3. Conductivité des chaînes d'hydrocarbures liquides . . . . .	32
1.9.4. Conductivité des gaz et des vapeurs . . . . .	33

1.9.5. Conductivité des gaz monoatomiques . . . . .	33
1.9.6. Conductivité des gaz non polaires à molécules linéaires . . . . .	34
1.10. Propriétés physiques de l'eau . . . . .	34
1.10.1. Corrélation de la masse volumique . . . . .	34
1.10.2. Capacité calorifique . . . . .	35
1.10.3. Corrélation de la conductivité thermique . . . . .	35
1.10.4. Corrélation de la viscosité . . . . .	35
1.10.5. Corrélation de la diffusivité thermique . . . . .	35
1.10.6. Corrélation du nombre de Prandtl . . . . .	35
1.10.7. Corrélation pour le calcul du coefficient d'expansion . . . . .	36
1.10.8. Corrélation pour le calcul de la pression saturante . . . . .	36
1.10.9. Corrélation pour le calcul de la chaleur latente . . . . .	36
1.11. Propriétés physiques de l'air . . . . .	37
1.11.1. Propriétés de l'air à 1 atm . . . . .	37
1.11.2. Corrélation de la masse volumique . . . . .	38
1.11.3. Capacité calorifique . . . . .	38
1.11.4. Corrélation de la conductivité thermique . . . . .	38
1.11.5. Corrélation de la viscosité . . . . .	38
1.11.6. Corrélation de la diffusivité thermique . . . . .	38
1.11.7. Corrélation du nombre de Prandtl . . . . .	39
1.11.8. Corrélation pour le calcul du coefficient d'expansion . . . . .	39
<b>Chapitre 2. Déterminants et paramètres du transfert de matière . . . . .</b>	<b>41</b>
2.1. Introduction . . . . .	41
2.2. Les vitesses relatives de transfert . . . . .	42
2.2.1. Vitesse relative à la vitesse moyenne massique . . . . .	42
2.2.2. Vitesse relative à la vitesse moyenne molaire . . . . .	43
2.3. La quantité de matière transférée . . . . .	44
2.4. Expressions de la densité de flux . . . . .	45
2.4.1. Le flux total . . . . .	45
2.4.1.1. Densité du flux massique total par rapport à un repère fixe : $f$ . . . . .	45
2.4.1.2. Densité du flux molaire total par rapport à un repère fixe : $F$ . . . . .	46
2.4.2. Les flux spécifiques . . . . .	46
2.4.2.1. Densité du flux massique de l'espèce $i$ par rapport à un repère fixe : $f_i$ . . . . .	47
2.4.2.2. Densité du flux molaire de l'espèce $i$ par rapport à un repère fixe : $F_i$ . . . . .	47

2.4.2.3. Densité du flux massique de l'espèce $i$ par rapport à $v$ : $j_i$ . . .	48
2.4.2.4. Densité du flux molaire de l'espèce $i$ par rapport à $v$ : $J_i$ . . .	48
2.4.2.5. Densité du flux massique de l'espèce $i$ par rapport à $v^*$ : $j_i^*$ . . .	49
2.4.2.6. Densité du flux molaire de l'espèce $i$ par rapport à $v^*$ : $J_i^*$ . . .	49
2.5. Opérations sur les densités de flux de diffusion . . . . .	50
2.5.1. Densité totale en fonction des densités spécifiques . . . . .	50
2.5.2. Somme des densités massiques par rapport à $v$ . . . . .	51
2.5.3. Somme des densités des flux molaires par rapport à $v^*$ . . . . .	51
2.5.4. Somme des densités des flux massiques par rapport à un repère mobile à $v^*$ . . . . .	52
2.6. Relations entre les densités de flux $f_i$ et $j_i$ . . . . .	53
2.7. Relations entre les densités de flux $F_i$ et $J_i^*$ . . . . .	53

### **Chapitre 3. Première loi de Fick : coefficients de diffusion . . . . . 55**

3.1. Introduction . . . . .	55
3.2. Première loi de Fick . . . . .	56
3.2.1. Expression du vecteur densité de flux . . . . .	56
3.2.2. Similarités aux lois de transfert de l'énergie et de la quantité de mouvement . . . . .	57
3.2.2.1. Similarité à la loi de Fourier . . . . .	57
3.2.2.2. Similarité à la loi de Newton pour le transfert de la quantité de mouvement . . . . .	58
3.2.3. Analogie convective . . . . .	58
3.3. Première loi de Fick sous différentes formes . . . . .	59
3.4. Détermination des coefficients de diffusion à partir des données tabulées . . . . .	59
3.4.1. Coefficients de diffusion des binaires gazeux . . . . .	60
3.4.2. Illustration : coefficients de diffusion du $\text{CO}_2$ dans l'air et dans la vapeur d'eau . . . . .	61
3.4.3. Coefficients de diffusion pour les binaires liquides . . . . .	65
3.5. Estimation des coefficients de diffusion à partir des corrélations . . . . .	67
3.5.1. Estimation des coefficients de diffusion des binaires gazeux . . . . .	67
3.5.1.1. Modélisation des interactions entre molécules . . . . .	67
3.5.1.2. Corrélation d'Hirschfelder, Bird et Spatz (gaz) . . . . .	72
3.5.1.3. Corrélation de Fuller, Schettler et Giddings (gaz) . . . . .	72
3.5.1.4. Illustration : calcul du volume diffusionnel du $\text{CS}_2$ . . . . .	74
3.5.1.5. Choix de la corrélation à utiliser pour les gaz . . . . .	74
3.5.1.6. Illustration : coefficient de diffusion du $\text{CO}_2$ dans l'air . . . . .	75

3.5.2. Estimation des coefficients de diffusion des binaires liquides . . .	79
3.5.2.1. Équation de Scheibel (liquides) . . . . .	79
3.5.2.2. Équation de Wilke et Chang (liquides non électrolytiques) .	79
3.5.2.3. Corrélation de Hayduk et Laudie . . . . .	80
3.5.2.4. Relation de Nernst (solutions électrolytiques) . . . . .	80
3.5.2.5. Équation de Reid-Sherwood (solutions aqueuses) . . . . .	82
3.5.2.6. Extension aux solutions réelles. . . . .	83
3.5.2.7. Illustration : estimation du coefficient de diffusion de l'acide acétique dans l'eau . . . . .	83
3.5.2.8. Illustration : paramètres de diffusion d'un électrodialyseur .	85
3.6. Coefficients de diffusion pour les mélanges multiconstitués . . . . .	89
3.6.1. Équation de Steffan-Maxwell . . . . .	89
3.6.2. Coefficient de diffusion effectif pour les mélanges complexes . .	90

## **Chapitre 4. Deuxième loi de Fick : bilans macroscopiques . . . . . 93**

4.1. Introduction . . . . .	93
4.2. Équation de continuité globale . . . . .	93
4.2.1. Le terme accumulation . . . . .	94
4.2.2. Le terme génération. . . . .	95
4.2.3. Le terme $E - S$ . . . . .	95
4.2.4. L'équation du bilan . . . . .	95
4.2.5. L'équation du bilan en coordonnées cartésiennes . . . . .	96
4.3. Équations de continuité particulières . . . . .	97
4.3.1. Le terme $E_i - S_i$ . . . . .	97
4.3.2. Le terme accumulation. . . . .	97
4.3.3. Le terme génération. . . . .	97
4.3.4. Équations de continuité en termes molaires . . . . .	99
4.3.4.1. Le terme $A_i$ . . . . .	99
4.3.4.2. Le terme génération . . . . .	99
4.3.4.3. Le terme $E_i - S_i$ . . . . .	100
4.4. Illustration : diffusion avec réaction chimique . . . . .	101
4.5. Illustration : diffusion d'un constituant dans un mélange stagnant . . .	104
4.6. Lecture : historique des lois de Fick . . . . .	107

## **Chapitre 5. Exercices et solutions . . . . . 109**

<b>Annexe 1. Base de données . . . . .</b>	<b>161</b>
<b>Annexe 2. Développement d'estimateurs par régression . . . . .</b>	<b>191</b>
<b>Bibliographie . . . . .</b>	<b>195</b>
<b>Index . . . . .</b>	<b>209</b>