

THÈSE

présentée en vue de
l'obtention du titre de

DOCTEUR

de

**L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE
DE L'AÉRONAUTIQUE ET DE L'ESPACE**

ÉCOLE DOCTORALE : Energétique et Dynamique des Fluides

SPECIALITE : Energétique et Transferts

par

Nicolas DOUÉ

Modélisation de l'évaporation de gouttes multi-composants

Soutenue le 10 novembre 2005 devant le jury :

MM.	A. BERLEMONT	Président / Directeur de thèse
	M. CAZALENS	
	F. GRISCH	
	G. LAVERGNE	Co-directeur de thèse
	F. LEMOINE	Rapporteur
	J.C. ROLON	Rapporteur

Remerciements

Ce travail n'aurait pu être effectué sans l'accord, le soutien et l'aide de plusieurs personnes.

Je tiens à remercier Jean Cousteix, chef du Département Modèles en Aérodynamique et Energétique, ainsi qu'à Robert Foucaud, responsable de l'unité Multiphasique Hétérogène, qui m'ont accueilli et fourni le cadre nécessaire à la réalisation de cette thèse.

J'exprime ma plus vive gratitude à Gérard Lavergne, ingénieur de recherche à L'ONERA de Toulouse, à Alain Berlemont, directeur de recherche au CORIA de Rouen, ainsi qu'à Yves Biscos, ingénieur de recherche à L'ONERA de Toulouse, pour la confiance qu'ils m'ont accordé, pour leur accueil et leur encadrement durant toute la durée de cette thèse, en me faisant partager leur enthousiasme pour la recherche et leur grande expérience et se rendant toujours disponible malgré leur travail.

J'adresse évidemment mes sincères remerciements à l'ensemble du jury : son président Alain Berlemont (CORIA de Rouen), ses deux rapporteurs Fabrice Lemoine (LEMTA de Nancy) et Juan Carlos Rolon (Centrale Paris), Michel Cazalens (SNECMA Moteurs Villaroche), Frederic Grisch (ONERA Palaiseau) et Gérard Lavergne (ONERA Toulouse).

Je n'oublierai évidemment pas Fabrice Lemoine (Professeur à l'ENSEM), Christophe Maqua (doctorant au LEMTA de Nancy) et Guillaume Castanet (à l'époque ATER à l'IUT de l'Université Henry Poincaré, Université de Nancy I) pour m'avoir accueilli au LEMTA pendant 6 semaines afin de me faire partager leur technique de mesure novatrice ainsi que leur expérience qui ont beaucoup apporté à cette thèse.

Comment ne pas citer les doctorants de la « Rainbow Team » qui ont partagé mon bureau durant ces années et qui ont apporté beaucoup de ... bonne humeur. Par ordre d'apparition :

- *Anurak alias Paulo, le sympathique Thaïlandais qui parle avec l'accent du midi et qui m'a beaucoup appris lors de mon arrivée;*
- *Bruno alias Docteur Fraskowiak (à prononcer avec l'accent Polonais), montagnard pâtissier toujours à l'arrache et totalement indescriptible (tout comme ses tartes et ses gâteaux) et que on l'on est pas prêt d'oublier après l'avoir connu;*

- *Nicolás alias Gato, notre sympathique pilote toujours de bonne humeur, toujours joyeux, toujours en train de rire, toujours en train de déménager (ma voiture s'en souvient encore);*
- *Claire, la sympathique montagnarde qui aura tenté, en vain, de me faire découvrir les joies de la montagne (ma voiture s'en souvient également) et qui a du subir, pendant plusieurs mois, mes propos machistes. Je lui souhaite bon courage pour poursuivre mes travaux.*

Je pense également à tout ceux du personnel de l'ONERA qui m'ont apporté leur aide ou qui ont contribué à créer une ambiance agréable aussi bien durant le travail qu'en dehors. Je n'oublierai pas Cédric (doctorant DCSD - Airbus), Clément (doctorant DCSD) que je ne snoberai pas cette fois-ci et Sylvain (doctorant DCSD).

Je salue la section course à pied / raid multisports de l'ONERA avec qui j'ai couru de nombreux kilomètres, crevé des pneus en VTT ou tourné en rond (et sur place) en kayak. C'est promis je prendrai des cours.

Je félicite mon Pentium II 233MHz que j'ai fait souffrir durant toutes ces années. J'espère qu'il repose en paix aujourd'hui.

Je n'oublierai évidemment pas les élèves de Supaéro que j'ai côtoyé durant ces années :

- *Pawarej Chomdej alias Por (directeur de recherche de sa chambre). Merci pour tous ces très bons moments et pour m'avoir accompagné au stade pour supporter le Stade Toulousain et à Carrefour pour pousser mon chariot;*
- *les peintres du XV de Supaéro et ses entraîneurs avec qui j'ai pris beaucoup de plaisir à souffrir sur le terrain. C'étaient incontestablement mes plus belles années rugby. Je vous souhaite bon vent, bonne boue, bons plaquages, bons caramels et j'espère que vous conserverez notre titre acquis si difficilement l'an dernier.*

Merci à tous ceux qui, durant toutes ces années, m'ont tant apporté !!!

Je ne terminerai pas sans adresser un immense merci à mes parents pour tout ce qu'ils ont fait et pour le soutien qu'ils m'ont apporté durant toutes mes études, et à qui je dois tout.

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERES	5
NOMENCLATURE	9
Symboles latins	9
Symboles grecs	12
Indices et exposants	13
INTRODUCTION	15
CHAPITRE 1 ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	19
1.1 Modèles d'évaporation d'une goutte multi-composants	20
1.1.1 Modèle à composants discrets	22
1.1.2 Modèle dit à "thermodynamique continue"	30
1.1.3 Modèle à courbe de distillation	38
1.2 Comparaison avec les mesures expérimentales	39
1.2.1 Evaporation à température et pression ambiantes	39
1.2.2 Evaporation à température modérée	45
1.2.3 Evaporation à pression élevée	46
1.3 Conclusion	49
CHAPITRE 2 MOYENS EXPERIMENTAUX	53
2.1 Banc expérimental de l'ONERA – DMAE	54
2.1.1 Présentation générale	54
2.1.2 Dispositif de génération de gouttes	55
2.1.3 Techniques de mesure	61
2.2 Banc expérimental du LEMTA	72
2.2.1 Présentation générale	72
2.2.2 Le dispositif de chauffage	74
2.2.3 Techniques de mesure	76
2.3 Conclusion	87
CHAPITRE 3 RESULTATS EXPERIMENTAUX	89
3.1 Mesure de la taille de la goutte	90
3.1.1 Etude d'un mélange d'éthanol et de 1-butanol	90
3.1.2 Etude d'un mélange d'acétone et d'éthanol	95
3.2 Mesure de la température et de la composition moyennes de la goutte	101
3.2.1 Injection dans un milieu à faible température	101

3.2.2	Injection dans le panache d'air chaud	109
3.3	Conclusion	114
CHAPITRE 4 MODELISATION NUMERIQUE		115
4.1	Généralités	116
4.1.1	Modèles développés	116
4.1.2	Discretisation	126
4.1.3	Grandeurs physiques	126
4.1.4	Méthode itérative entre t et $t+\Delta t$	127
4.2	Calcul de l'évaporation	129
4.2.1	Calcul des coefficients de transfert de masse	129
4.2.2	Calcul de coefficient de transfert d'énergie	130
4.2.3	Calcul du nouveau rayon et des nouveaux profils de température et des fractions massiques	130
4.3	Discretisation du temps et de l'espace	134
4.3.1	Discretisation du temps	134
4.3.2	Discretisation de l'espace	135
4.4	Conclusion	140
CHAPITRE 5 VALIDATIONS EXPERIMENTALES		141
5.1	Comparaison de l'évolution du diamètre des gouttes	142
5.1.1	Etude des mélanges éthanol / 1-butanol	142
5.1.2	Etude des mélanges acétone / éthanol	146
5.1.3	Influence des propriétés physiques sur la constante d'évaporation	149
5.2	Comparaison de l'évolution de la température moyenne	152
5.2.1	Injection dans un milieu à faible température	152
5.2.2	Injection dans le panache d'air chaud	158
5.3	Conclusion	162
CHAPITRE 6 EVAPORATION DE CARBURANTS		163
6.1	Conditions initiales et conditions au loin	164
6.1.1	Composition initiale des carburants	164
6.1.2	Conditions initiales de la goutte et conditions à l'infini	169
6.2	Comparaison entre les différents modèles	170
6.2.1	Evaporation à faible température ambiante	170
6.2.2	Evaporation à forte température ambiante	178
6.3	Réduction du temps de calcul	188
6.3.1	Simplification des modèles à thermodynamique continue	188
6.3.2	Résultats obtenus avec les modèles simplifiés	190
6.3.3	Temps de calcul	192
6.4	Conclusion	194
CHAPITRE 7 COMBUSTION D'UN BROUILLARD DE GOUTTES MULTI-COMPOSANTS		197

7.1	Modélisation de la combustion d'un brouillard de gouttes	198
7.1.1	Configuration du nuage de gouttes	198
7.1.2	Modélisation de la phase liquide	199
7.1.3	Modélisation de la phase gazeuse	200
7.2	Auto-allumage d'un brouillard de gouttes multi-composants	205
7.2.1	Influence de la composition	205
7.2.2	Influence du modèle d'évaporation	208
7.2.3	Influence du diamètre initial de la goutte	210
7.2.4	Influence de la température initiale du gaz	214
7.2.5	Influence de la richesse	216
7.3	Allumage et propagation de la flamme dans un brouillard de gouttes multi-composants	218
7.3.1	Allumage au sol	218
7.3.2	Allumage en altitude	220
7.4	Conclusion	222
CONCLUSION GENERALE & PERSPECTIVES		225
Perspectives		227
ANNEXE A : PROPRIETES PHYSIQUES		229
A.1	Détermination des propriétés physiques	229
A.1.1	Coefficients de diffusion	229
A.1.2	Viscosité	230
A.1.3	Conductivité thermique	232
A.1.4	Pression de vapeur de saturation	233
A.1.5	Enthalpie de vaporisation	234
A.1.6	Chaleur spécifique	234
A.1.6	Masse volumique	235
A.2	Corrélations pour le modèle à thermodynamique Continue	237
A.2.1	Hypothèse de calcul	237
A.2.2	Propriétés pondérées par les flux molaires	237
A.2.3	Corrélations utilisées	238
A.3	Propriétés physiques	241
A.3.1	Composants discrets	242
A.3.2	Modèles à thermodynamique continue	271
ANNEXE B : MODELISATION		287
B.1	Processus du calcul	287
B.2	Algorithmes de calcul	289
B.2.1	Nombres de transfert de masse de Spalding	289
B.2.2	Nombre de transfert d'énergie de Spalding	290
B.2.3	Calcul des différents profils dans la goutte	290

ANNEXE C : COMPOSITION DES CARBURANTS	293
C.1 Définitions des différents hydrocarbures	293
C.1.1 Paraffines	293
C.1.2 Oléfines	294
C.1.3 Naphtènes	294
C.1.4 Aromatiques	294
C.1.5 Autres hydrocarbures particuliers	295
C.2 Composition des carburants	297
C.2.1 Classification des carburants	297
C.2.2 Les carburéacteurs	297
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	305

NOMENCLATURE

Symboles latins

a_O	exposant de la concentration d'oxydant du taux de réaction	[1]
a_v	exposant de la concentration de vapeur du taux de réaction	[1]
B	facteur pré-exponentiel	$[m^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}]$
B_M	nombre de <i>Spalding</i> de transfert de masse pour l'ensemble des espèces	[1]
$B_{m,i}$	nombre de <i>Spalding</i> de transfert de masse de l'espèce i	[1]
$B_{m,j}$	nombre de <i>Spalding</i> de transfert de masse du groupe j de composants	[1]
B_T	nombre de <i>Spalding</i> de transfert d'énergie	[1]
B_{T0}	nombre de <i>Spalding</i> de transfert d'énergie sans chauffage de la goutte	[1]
C	paramètre de distance	[1]
c	densité molaire	$[mol \cdot m^{-3}]$
Cd	coefficient de traînée de la goutte	[1]
CF	coefficient de friction	[1]
Cp	chaleur spécifique	$[J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$
$c_{traceur}$	densité molaire du traceur	$[mol \cdot m^{-3}]$
$[C]$	concentration (pourcentage) volumique	[1]
Dg	diamètre de la goutte	[m]
Dg_0	diamètre initial de la goutte	[m]
$D_{i,g}$	coefficient de diffusion de l'espèce i dans la phase gazeuse	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$D_{i,l}$	coefficient de diffusion de l'espèce i dans la phase liquide	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
Dj	diamètre du jet liquide	[m]
$D_{i,g}$	coefficient de diffusion du groupe j de composants dans la phase gazeuse	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$D_{i,l}$	coefficient de diffusion du groupe j de composants dans la phase liquide	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
F	facteur de correction de la variation relative de l'épaisseur du film	[1]
f	fonction de distribution	[1]
f_D	fréquence <i>Doppler</i>	$[s^{-1}]$
f_{ex}	fréquence d'excitation de la céramique piézo-électrique	$[s^{-1}]$
f_{opt}	fréquence d'excitation de la céramique piézo-électrique pour une désintégration optimale du jet liquide	$[s^{-1}]$
g	gravité	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
Gr	nombre de <i>Gradshoff</i>	[1]
h	hauteur de la goutte	[m]

$h_{i,v}$	enthalpie de l'espèce i de la vapeur	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
I	variable de distribution (masse molaire)	[mol.m ⁻³]
I	variable de distribution (température d'ébullition)	[K]
I_{fluo}	intensité de fluorescence	[Cd]
I_0	intensité laser	[Cd]
K	constante d'évaporation	[m ² .s ⁻¹]
K_{opt}	constante optique	[1]
K_{spec}	constante spectrale	[1]
Le	nombre de <i>Lewis</i>	[1]
L_j	longueur du jet liquide	[m]
l_v	chaleur latente d'évaporation du liquide	[J.kg ⁻¹]
m	indice de réfraction de la goutte	[1]
\dot{m}	débit total de masse évaporée	[kg.s ⁻¹]
M_{air}	masse molaire de l'air	[kg.mol ⁻¹]
M_i	masse molaire de l'espèce i	[kg.mol ⁻¹]
\dot{m}_i	débit de masse évaporée de l'espèce i	[kg.s ⁻¹]
N	nombre de nœuds pour la discrétisation du rayon de la goutte	[1]
n_{bg}	densité de gouttes	[m ⁻³]
NC	nombre de nœuds pour la discrétisation du rayon de la goutte pour le calcul du profil de composition	[1]
NT	nombre de nœuds pour la discrétisation du rayon de la goutte pour le calcul du profil de température	[1]
\dot{n}	débit total de moles évaporées	[mol.s ⁻¹]
\dot{n}_i	débit de moles évaporées pour l'espèce i	[mol.s ⁻¹]
\dot{n}_j	débit de moles évaporées pour l'espèce j	[mol.s ⁻¹]
Nu^*	nombre de <i>Nusselt</i> modifié de la goutte	[1]
Nu_o	nombre de <i>Nusselt</i> sans écoulement de Stefan	[1]
Pr	nombre de <i>Prandtl</i>	[1]
P	pression	[Pa]
P_{ATM}	pression atmosphérique standard	[Pa]
Pe	nombre de Peclet	[1]
P_{sat}	pression de saturation	[Pa]
\dot{Q}	variation spatiale du flux total d'énergie dans le film gazeux	[W]
Q_c	chaleur de combustion	[J.kg ⁻¹]
Q_l	débit volumique du liquide en sortie d'injecteur	[m ³ .s ⁻¹]
\dot{Q}_l	flux de chaleur servant à chauffer la goutte	[W]
\dot{Q}_s	variation spatiale du flux total d'énergie à la surface	[W]

R	constante universelle du gaz parfait	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
Re	nombre de Reynolds particulaire	[1]
r	coordonnée radiale	[m]
$r_{fm,i}$	rayon du film de diffusion de masse de l'espèce i	[m]
r_{fT}	rayon du film de diffusion d'énergie	[m]
$r_{m,i}^{\infty}$	rayon de la sphère pour lequel la fraction massique de l'espèce i à la surface est égale à celle du milieu ambiant	[m]
r_s	rayon de la goutte	[m]
r_T^{∞}	rayon de la sphère pour lequel la température à la surface est égale à celle du milieu ambiant	[m]
Sc_i	nombre de <i>Schmidt</i> de l'espèce i	[1]
s_{fg}	entropie de vaporisation standard	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
Sg	distance entre les centres de deux gouttes	[m]
Sh_i^*	nombre de <i>Sherwood</i> modifié de l'espèce i	[1]
Sh_{io}	nombre de <i>Sherwood</i> de l'espèce i sans écoulement de Stefan	[1]
t	temps	[s]
T	température	[K]
T_a	température d'activation	[K]
Tg	température de la goutte	[K]
T_{max}	température maximale du gaz dans la zone de réaction	[K]
T_{moy}	température moyenne de la goutte entre deux pas de temps	[K]
u	vitesse engendrée par les variations de masse volumique dans la goutte	[m.s ⁻¹]
u_g	vitesse du gaz	[m.s ⁻¹]
u_g^s	vitesse radiale du gaz à la surface de la goutte	[m.s ⁻¹]
u_l^s	vitesse radiale du liquide à la surface de la goutte	[m.s ⁻¹]
U_s	vitesse tangentielle maximale du liquide à la surface de la goutte	[m.s ⁻¹]
U_x	composante de la vitesse des particules perpendiculaire aux franges générées lors des mesures LDA	[m.s ⁻¹]
V	volume molaire	[m ³ .mol ⁻¹]
v	vitesse radiale	[m.s ⁻¹]
V_c	volume de collection	[m ³]
Vg	vitesse de la goutte	[m.s ⁻¹]
V_{inj}	vitesse d'injection de la goutte	[m.s ⁻¹]
\vec{V}_p	vitesse du $p^{ième}$ groupe de gouttes dans le nuage de gouttes	[m.s ⁻¹]
\vec{V}^{∞}	vitesse de l'air du milieu ambiant	[m.s ⁻¹]
x	fraction molaire	[1]
x_{air}	fraction molaire de l'air dans le mélange gazeux	[1]
x_g	fraction molaire totale de vapeur dans le mélange gazeux	[1]

$x_{i,g}$	fraction molaire de l'espèce i dans le mélange gazeux	[1]
$x_{i,l}$	fraction molaire de l'espèce i dans la phase liquide	[1]
$x_{i,g}$	fraction molaire globale du groupe j de composants dans le mélange gazeux	[1]
$x_{i,l}$	fraction molaire globale du groupe j de composants dans le mélange liquide	[1]
\bar{x}_p	position du $p^{\text{ième}}$ groupe de gouttes dans le nuage de gouttes	[m]
Y	fraction massique	[1]
Y_e	fraction massique d'éthanol liquide dans la goutte	[1]
Y_e^0	fraction massique initiale d'éthanol liquide dans la goutte	[1]
Y_g	fraction massique de vapeur dans le mélange gazeux	[1]
$Y_{i,g}$	fraction massique de l'espèce i dans le mélange gazeux	[1]
$Y_{i,l}$	fraction massique de l'espèce i de la phase liquide	[1]
Y_{moy}	fraction massique moyenne entre deux pas de temps	[1]

Symboles grecs

$\chi_{i,Y}$	facteur de correction pour le calcul de la fraction de composant i dans la goutte pour le modèle à diffusion effective	[1]
χ_T	facteur de correction pour le calcul de la température dans la goutte pour le modèle à diffusion effective	[1]
ϕ_0	diamètre de l'orifice de l'injecteur	[m]
ΔI	pas de la variable de distribution I (I : masse molaire)	[kg.mol ⁻¹]
ΔI	pas de la variable de distribution I (I : température d'ébullition)	[K]
Δr	pas d'espacement pour la discrétisation des équations	[m]
Δt	pas de temps	[s]
$\Delta \Theta_m$	interfrange angulaire	[rad]
Δx	pas d'espacement adimensionné pour la discrétisation des équations	[1]
δ_f	distance entre deux franges pour la mesure par LDA	[m]
Γ	fonction gamma (I : masse molaire)	[mol.kg ⁻¹]
Γ	fonction gamma (I : température d'ébullition)	[K ⁻¹]
γ	origine de la distribution (I : masse molaire)	[kg.mol ⁻¹]
γ	origine de la distribution (I : température d'ébullition)	[K]
η	coefficient de correction pour tenir compte des effets d'interactions dans le jet de gouttes	[1]
ϕ	coefficient de fugacité	[1]
λ_g	conductivité thermique du gaz	[W.m ⁻¹ .K ⁻¹]

λ_l	conductivité thermique du liquide	$[\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
λ_{laser}	longueur d'onde du faisceau laser	$[\text{m}]$
λ_{onde}	longueur d'onde	$[\text{m}]$
λ_{opt}	longueur d'onde correspondant à la désintégration optimale du jet liquide	$[\text{m}]$
μ_g	viscosité dynamique de la phase gazeuse	$[\text{kg.s}^{-1}.\text{m}^{-1}]$
μ_l	viscosité dynamique de la phase liquide	$[\text{kg.s}^{-1}.\text{m}^{-1}]$
μ_g^∞	viscosité dynamique du milieu ambiant	$[\text{kg.s}^{-1}.\text{m}^{-1}]$
$\mu_{c,i,g}$	potentiel chimique de l'espèce i dans la phase gazeuse	$[\text{J.mol}^{-1}]$
$\mu_{c,i,l}$	potentiel chimique de l'espèce i dans la phase liquide	$[\text{J.mol}^{-1}]$
θ	distribution moyenne (I : masse molaire)	$[\text{kg.mol}^{-1}]$
θ	distribution moyenne (I : température d'ébullition)	$[\text{K}]$
θ_{aw}	angle d'Airy-Walker	$[\text{rad}]$
θ_{rg}	angle de diffusion correspondant au maximum d'intensité lumineuse	$[\text{rad}]$
ρ	masse volumique	$[\text{kg.m}^{-3}]$
ρ_g^∞	masse volumique du milieu ambiant	$[\text{kg.m}^{-3}]$
σ	écart-type (I : masse molaire)	$[\text{kg.mol}^{-1}]$
σ	écart-type (I : température d'ébullition)	$[\text{kg.mol}^{-1}]$
τ_{rg}	angle d'incidence correspondant au maximum d'intensité lumineuse	$[\text{rad}]$
ν	coefficient stœchiométrique	$[1]$
$\dot{\omega}$	taux de réaction	$[\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}]$
ξ_i	$\xi_i = \dot{m}_i / \dot{m}$, rapport entre le débit massique de l'espèce i et le débit	$[1]$
ψ	second moment central de distribution (I : masse molaire)	$[\text{kg}^2.\text{mol}^{-2}]$
ψ	second moment central de distribution (I : température d'ébullition)	$[\text{K}^2]$
	massique total	

Indices et exposants

air	air
b	relatif aux conditions d'ébullition
c	relatif aux conditions critiques
g	relatif au mélange gazeux (= vapeur + air)
i	relatif à l'espèce i de la phase liquide ou gazeuse
j	relatif au groupe j de composants de la phase liquide ou gazeuse
l	relatif au liquide
nb	relatif aux conditions normales d'ébullition
o	sans écoulement de <i>Stefan</i>
p	relatif au $p^{\text{ième}}$ groupe de gouttes dans le nuage de gouttes

<i>r</i>	relatif aux conditions réduites (adimensionnement en divisant par la valeur critique)
<i>ref</i>	relatif aux conditions de référence
<i>v</i>	relatif à la vapeur

INTRODUCTION

Afin de diminuer les émissions polluantes et la consommation de carburant des systèmes propulsifs, de nombreuses recherches sont actuellement menées afin d'optimiser les modules d'injection dans les chambres de combustion. La forme, l'angle et la position de l'injecteur sont en effet des paramètres influant sur la qualité de la combustion. Les études paramétriques expérimentales sur les dispositifs complets s'avèrent coûteuses en raison de la mise en œuvre difficile des essais : maquettes à fabriquer, techniques de mesures pointues. Ainsi, les industriels font de plus en plus appel aux simulations numériques pour développer les architectures des chambres de combustion. Cependant, les phénomènes physiques mis en jeu sont nombreux et complexes. Il s'avère alors nécessaire de développer des modèles simples mais réalistes afin de garder des temps de calcul raisonnables. De plus, ces modèles nécessitent des validations expérimentales dans un large spectre, de l'expérience de base en laboratoire jusqu'à la validation dans des conditions proches du point de fonctionnement du moteur.

Le Département Modèles pour l'Aérodynamique et l'Energétique (DMAE) de l'ONERA étudie depuis plus d'une dizaine d'années la modélisation des phénomènes régissant les écoulements internes ainsi que l'évaporation et la combustion de nuages de gouttes dans les chambres de combustion. Ces perspectives intéressent aussi bien l'industrie aéronautique que l'industrie automobile.

Dans les chambres de combustion actuelles, le carburant est injecté sous forme d'un brouillard de gouttes les plus fines possibles. Lors de l'injection de ce carburant liquide, plusieurs phénomènes interviennent comme la désintégration d'une nappe liquide et la dispersion turbulente. Durant cette étape qui précède la combustion, des transferts de chaleur et de masse entre les gouttes et leur environnement gazeux entrent en jeu.

Les phénomènes sont extrêmement nombreux et variés rendant l'étude de l'ensemble très complexe. Des expériences simples sont alors définies et permettent d'isoler chacun des phénomènes afin de les modéliser. La simulation numérique des écoulements diphasiques denses dans une chambre de combustion de turbomachine doit prendre en compte la modélisation de nombreux processus physiques difficiles à appréhender. Le schéma suivant (Figure 1) représente une chambre de combustion d'un moteur aéronautique dans lequel est injecté un carburant liquide sous la forme d'un spray à l'aide d'un injecteur assisté par air.

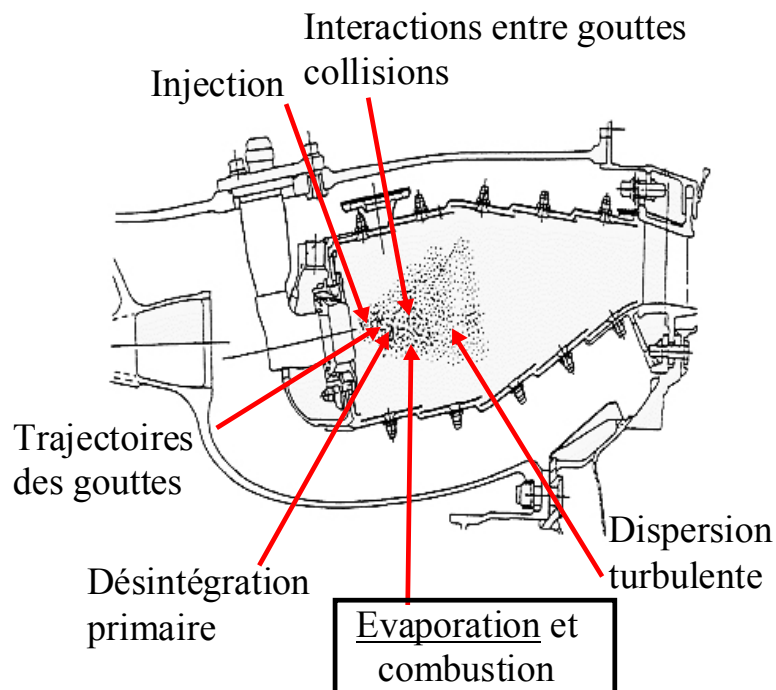


Figure 1 : Phénomènes physiques liés à l'injection et à la combustion d'un carburant liquide.

Parmi ces nombreux phénomènes, la modélisation de l'évaporation des gouttes permet de quantifier la quantité de vapeur de carburant fournie à la phase gazeuse afin de simuler la combustion du spray. Afin de garder des temps de calcul raisonnables, le carburant est toujours représenté par un liquide composé d'une seule espèce (par exemple le n-décane pour le kérosène ou l'iso-octane pour l'essence). Toutefois, ces carburants sont en réalité composés de plusieurs centaines de composants présentant tous des caractéristiques physico-chimiques différentes.

L'une des propriétés les plus importantes est la volatilité qui varie considérablement d'une espèce à l'autre et les différents composants d'un carburant peuvent ainsi balayer une large plage de température d'ébullition, supérieure à une centaine de degrés. La dynamique de l'évaporation s'en retrouve donc affectée puisque certaines espèces se vaporisent plus vite que d'autres. La goutte voit alors sa composition évoluer durant toute sa trajectoire dans la chambre de combustion où la vapeur n'est donc pas uniforme. Les différentes espèces réagissent différemment et les phénomènes de combustion tels que l'allumage, la propagation de flamme, la stabilité de flamme ou les émissions polluantes peuvent être affectées.

Représenter la composition d'un carburant par un seul composant dans les modèles d'évaporation peut s'avérer insuffisant et il est primordial de considérer le caractère multi-composants de tels liquides. Ces modèles d'évaporation existent déjà, mais leur validation expérimentale reste très limitée. De plus, il est évidemment nécessaire de connaître précisément les propriétés physiques des différents composants pour simuler le plus

fidèlement possible l'évaporation des différents carburants, ce qui n'est malheureusement pas toujours le cas.

L'objectif de ce travail est multiple. Tout d'abord, il est primordial de compléter la validation expérimentale des modèles d'évaporation de gouttes multi-composants puisque seule l'évolution de la taille des gouttes pour de faibles températures ambiantes a été comparée. Ensuite, il faut compléter la base de données des propriétés physiques extrêmement pauvre. En effet, il est nécessaire de les connaître précisément pour simuler correctement l'évaporation de carburants réels. Or ces propriétés demeurent complexes à trouver ou à déterminer. Finalement, il s'avère intéressant d'étudier l'influence de la composition des gouttes sur les phénomènes de combustion afin de vérifier s'il est nécessaire de tenir compte de tous les composants. Cette composition pourrait ainsi être simplifiée en supprimant certains composants sans modifier le comportement en combustion.

CHAPITRE 1 ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

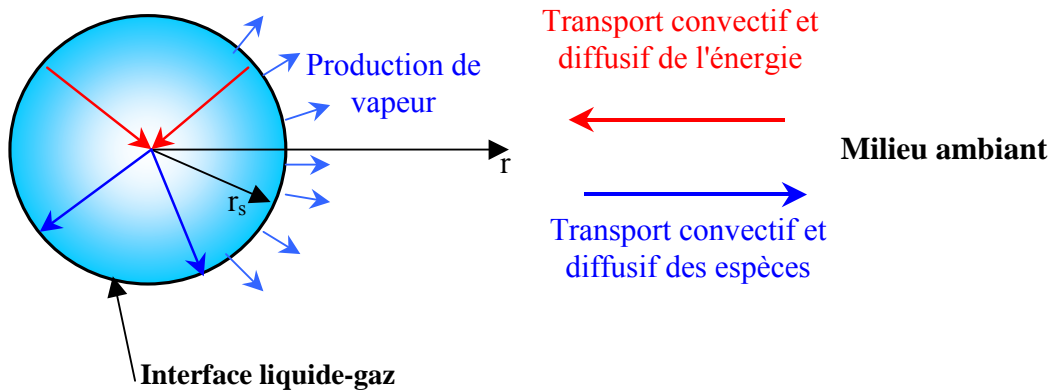
Ce chapitre présente tout d'abord les modèles d'évaporation de gouttes multi-composants existants dans la littérature, puis les résultats des quelques travaux expérimentaux déjà publiés sur l'évaporation de gouttes multi-composants. Il s'agit des différents modèles d'évaporation de gouttes isolées mono-composant qui ont ainsi été adaptés pour pouvoir intégrer plusieurs composants.

L'ajout du calcul des propriétés physiques des mélanges (liquide et gazeux), du débit de vapeur de chaque composant et du changement de la composition de la goutte fait que le temps de calcul pour une goutte multi-composants est plus important et devient extrêmement long lorsque le nombre de composants devient élevé. Il s'avère donc nécessaire de représenter différemment la composition du liquide. Plutôt que de considérer chaque composant comme c'est le cas dans le "modèle à composants discrets", chaque groupe de composant de même nature (n-alcanes, alkylbenzènes ...) est représenté par une fonction de distribution dans le "modèle à thermodynamique continue". Ce dernier a l'avantage de diminuer considérablement le temps de calcul.

Dans la deuxième partie, les comparaisons entre les mesures expérimentales et les résultats numériques existant dans la littérature sont présentées. Ces comparaisons restent toutefois limitées car l'aspect multi-composants et donc le changement de composition de la goutte compliquent ou rendent impossible l'utilisation de certaines méthodes de mesure applicables au cas de la goutte mono-composant. Il s'agit donc essentiellement de mesures de l'évolution de la taille de gouttes. Le phénomène de « distillation », propre à l'évaporation de gouttes multi-composants pour de faibles températures ambiantes, sera également mis en évidence.

1.1 Modèles d'évaporation d'une goutte multi-composants

Description du phénomène d'évaporation d'une goutte multi-composants :



Une goutte composée de plusieurs espèces liquides est placée dans un environnement gazeux dont la pression et la température sont suffisamment éloignées du point critique. Le milieu au loin est dépourvu de vapeur. Des transferts massique et thermique s'établissent alors entre les phases liquide et gazeuse.

Un équilibre thermodynamique liquide-vapeur, dépendant des conditions de température et de pression, s'établit à l'interface où les composants de la goutte sont à la fois présents sous forme liquide et gazeuse. Comme la fraction des espèces de vapeur à la surface est supérieure à celle du milieu ambiant, un gradient de concentration s'établit et ces espèces sont alors transportées par diffusion vers le milieu au loin, provoquant ainsi l'évaporation de la goutte. Cette éjection de vapeur à l'interface génère un flux convectif, appelé *écoulement de Stefan*, de la surface de la goutte vers le milieu au loin. La pression de vapeur saturante variant d'un composant à l'autre, l'équilibre thermodynamique liquide-vapeur diffère pour chaque espèce. Certains composants s'évaporent donc plus que d'autres et le départ des différentes espèces liquides modifie la composition de la goutte à l'interface. Des gradients de concentration liquide sont ainsi générés à la surface de la goutte et permettent le transport des composants par diffusion dans le liquide.

Ce phénomène d'évaporation est associé à un transfert thermique. Si la température de surface de la goutte est inférieure à celle du milieu au loin, un transfert thermique s'effectue par conduction du milieu au loin vers la surface de la goutte. L'évaporation de la goutte nécessite toutefois de l'énergie (chaleur latente d'évaporation) et une partie de ce transfert thermique est consommée pour la vaporisation. L'autre partie sert à chauffer la goutte, à condition que

l'énergie apportée par ce transfert thermique soit plus importante que celle nécessaire à la vaporisation. Dans le cas contraire, la goutte refroidit.

Si la température de surface de la goutte est supérieure à celle du milieu au loin, le transfert thermique a alors lieu de la surface de la goutte vers le milieu au loin. Ce transfert thermique et la consommation d'énergie pour l'évaporation (chaleur latente d'évaporation) refroidissent alors la goutte.

Hypothèses :

Les hypothèses présentées ci-dessous sont celles considérées par *Nje Nje* [1].

1. Le diamètre des gouttes est suffisamment faible (de 25 à 235 μm dans ces travaux) pour rester sphériques et le liquide est suffisamment loin de son point critique. De plus, en l'absence de convection forcée à l'extérieur de la goutte et pour des gouttes suffisamment petites pour négliger les effets de la gravité, les processus de transport de masse et d'énergie sont à symétrie sphérique.
2. La diffusion de la masse est représentée par une loi de diffusion binaire (loi de *Fick*) et la loi de diffusion de la chaleur, par la loi de *Fourrier*.
3. L'interface liquide-vapeur est en équilibre thermodynamique.
4. La phase gazeuse est constituée d'un mélange idéal de gaz parfaits. Il n'y a donc pas de réaction chimique dans le gaz.
5. La solubilité du gaz ambiant dans le liquide est négligeable.
6. La phase liquide est constituée d'un mélange de liquides idéaux. Il n'y a donc pas de réaction chimique entre les différentes espèces du liquide.
7. Il y a continuité de la pression à l'interface.

Il résulte des hypothèses 3 à 7 que la pression partielle de vapeur dans le gaz au voisinage de l'interface est prise égale à la pression de vapeur saturante du liquide (loi de *Raoult*).

8. La pression est uniforme dans le gaz.
9. Les transferts radiatifs entre la goutte et son entourage sont négligés.
10. La phase gazeuse est quasi-stationnaire, ce qui implique que l'écoulement et les transferts de masse et d'énergie s'adaptent instantanément aux conditions limites locales et aux dimensions de la goutte.
11. Les propriétés physiques de la phase gazeuse sont calculées à un état de référence.

Il existe des méthodes bien distinctes pour modéliser l'évaporation de gouttes multi-composants. La première utilise des "composants discrets" et considère chaque composant de la goutte, la seconde applique une technique dite de "thermodynamique continue" qui représente la composition du mélange par des fonctions de distribution. Il existe une troisième

méthode, appelée modèle à courbe de distillation, qui comme son nom l'indique utilise une courbe distillation pour représenter la composition de la goutte.

1.1.1 Modèle à composants discrets

Cette représentation du liquide est très courante [1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11]. Elle considère chaque espèce dont la fraction (massique ou molaire) est calculée à chaque instant de la durée de vie de la goutte. La théorie et les équations présentées dans cette partie sont celles définies plus en détail et utilisées par *Nje Nje* [1] dans ces travaux.

Equations de la phase gazeuse

- **Conservation de la masse**

L'hypothèse de quasi-stationnarité de la phase gazeuse permet de simplifier l'équation de conservation de la masse et d'affirmer que, si la pression du gaz est loin du point critique, le débit de vapeur diffusant vers le milieu au loin est égal à la quantité de liquide évaporé par unité de temps :

$$\dot{m} = -4\pi\rho_l r_s^2 \frac{dr_s}{dt} \quad (1.1)$$

où \dot{m} est le débit de vapeur diffusant au loin, ρ_l la masse volumique du mélange liquide, r_s le rayon de la goutte et t le temps.

- **Conservation des espèces**

L'équation de conservation des espèces est également réduite avec l'hypothèse de quasi-stationnarité de la phase gazeuse :

$$\frac{d}{dr} \left[r^2 \left(\rho_g v Y_{i,g} - \rho_g D_{i,g} \frac{dY_{i,g}}{dr} \right) \right] = 0 \quad (1.2)$$

où r est la coordonnée radiale, ρ_g la masse volumique du mélange gazeux, v la vitesse radiale du gaz, $Y_{i,g}$ est la fraction massique de l'espèce i dans le mélange gazeux, $D_{i,g}$ le coefficient de diffusion de l'espèce i dans le mélange gazeux.

Cette dernière équation est intégrée à deux reprises. Les conditions aux limites sont les suivantes :

□ à la surface de la goutte $r = r_s; \quad Y_{i,g} = Y_{i,g}^s \quad (1.3)$

□ à l'infini $r = r_{m,i}^\infty; \quad Y_{i,g} = Y_{i,g}^\infty \quad (1.4)$

où $r_{m,i}^\infty$ est le rayon de la sphère à l'intérieur de laquelle diffusent les espèces de la phase gazeuse. Ce rayon ne tend pas forcément vers l'infini. Le résultat de cette double intégration donne :

$$\dot{m} = 2\pi r_s \rho_g D_{i,g} Sh_i^* \ln(1 + B_{m,i}) \quad (1.5)$$

$B_{m,i}$ est le nombre de transfert (également appelé nombre de *Spalding*) de masse de l'espèce i et s'écrit :

$$B_{m,i} = \frac{Y_{i,g}^s - Y_{i,g}^\infty}{\xi_i - Y_{i,g}^s} \quad (1.6)$$

avec $\xi_i = \dot{m}_i / \dot{m}$ où \dot{m}_i est le débit massique de vapeur pour l'espèce i .

Sh_i^* est le nombre de *Sherwood* modifié de l'espèce i . Bien que la première hypothèse suppose que les effets convectifs dans la phase gazeuse soient négligés, ce nombre de *Sherwood* modifié permet de considérer ces effets convectifs tout en gardant un système à symétrie sphérique. Pour cela, Sh_i^* est déterminé à partir du nombre de *Sherwood* Sh_{i0} sans écoulement de *Stefan* (soufflage de la couche limite par le dégagement de vapeur à la surface de la goutte) à l'aide d'une fonction $F(B)$ établie par *Abramzon et al.* [12]. Ces derniers ont étudié une goutte en évaporation dans un milieu convectif avec développement d'une couche limite laminaire autour de la goutte. Le nombre de *Sherwood* modifié Sh_i^* est alors déterminé de la manière suivante :

$$Sh_i^* = 2 + \frac{Sh_{i0} - 2}{F(B_{m,i})} \quad (1.7)$$

$$\text{avec } F(B) = (1 + B)^{0.7} \frac{\ln(1 + B)}{B} \quad (1.8)$$

Le nombre de *Sherwood* sans écoulement de *Stefan* Sh_{i0} peut être calculé avec la corrélation de *Ranz-Marshall* [13] :

$$Sh_{i0} = 2 + 0.6 Re_e^{1/2} Sc_i^{1/3} \quad (1.9)$$

avec Re le nombre de *Reynolds* particulaire et Sc_i le nombre de *Schmidt* de l'espèce i .

- **Conservation de l'énergie**

Pour déterminer le chauffage de la goutte, le bilan d'enthalpie dans le gaz est également réduit grâce à l'hypothèse de quasi-stationnarité de la phase gazeuse et s'écrit après calcul [1] :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{4\pi r^2} \sum_i \dot{m}_i C_{p_{i,v}} T - \lambda_g \frac{dT}{dr} \right] = 0 \quad (1.10)$$

où $C_{p_{i,v}}$ est la chaleur spécifique de l'espèce i sous forme vapeur, T la température et λ_g la conductivité thermique du mélange gazeux.

Une première intégration donne :

$$\frac{1}{4\pi r^2} \sum_i \dot{m}_i C_{p_{i,v}} T - \lambda_g \frac{dT}{dr} = cste \quad (1.11)$$

où $cste$ est une constante. A la surface de la goutte, le flux d'énergie perçue par la goutte sert à la chauffer et à la vaporiser. Ceci qui permet d'écrire :

$$4\pi r_s^2 \lambda_g \left. \frac{dT}{dr} \right|_{r=r_s} = \sum_i \dot{m}_i l_{v,i} + \dot{Q}_l \quad (1.12)$$

où $l_{v,i}$ est la chaleur latente d'évaporation de l'espèce i et \dot{Q}_l est le flux de chaleur transféré par conduction à la goutte. Il est alors possible de déterminer la constante $cste$:

$$cste = \sum_i \dot{m}_i C_{p_{i,v}} T^s - \sum_i \dot{m}_i l_{v,i} - \dot{Q}_l \quad (1.13)$$

L'équation (1.11) s'écrit maintenant :

$$\sum_i \dot{m}_i C_{p_{i,v}} T - 4\pi r^2 \lambda_g \frac{dT}{dr} = \sum_i \dot{m}_i C_{p_{i,v}} T^s - \sum_i \dot{m}_i l_{v,i} - \dot{Q}_l \quad (1.14)$$

Cette dernière équation est alors intégrée entre les conditions aux limites suivantes :

$$\square \text{ à la surface de la goutte } \quad r = r_s; \quad T = T^s \quad (1.15)$$

$$\square \text{ au loin } \quad r = r_T^\infty; \quad T = T^\infty \quad (1.16)$$

Comme pour la diffusion des espèces dans la phase gazeuse, la température se diffuse dans une sphère de rayon r_T^∞ . En intégrant l'équation (1.14) entre le rayon de la goutte et le rayon du film de diffusion d'énergie r_T^∞ , on obtient :

$$\dot{m} = 4\pi \left(\frac{\lambda_g}{\sum_i \xi_i C_{p_{i,v}}} \right) \frac{r_s \cdot r_T^\infty}{r_T^\infty - r_s} \ln \left[1 + \frac{\sum_i \xi_i C_{p_{i,v}} (T^\infty - T^s)}{\sum_i \xi_i l_{v,i} (T^s) + \dot{Q}_l / \dot{m}} \right] \quad (1.17)$$

Le nombre de transfert de chaleur de *Spalding* B_T s'écrit alors :

$$B_T = \frac{\sum_i \xi_i C_{p_{i,v}} (T^\infty - T^s)}{\sum_i \xi_i l_{v,i} (T^s) + \dot{Q}_l / \dot{m}} = \frac{C_{p_v} (T^\infty - T^s)}{l_v + \dot{Q}_l / \dot{m}} \quad (1.18)$$

L'équation (1.17) s'écrit définitivement :

$$\dot{m} = 2\pi r_s \frac{\lambda_g}{C_{p_v}} Nu^* \ln(1 + B_T) \quad (1.19)$$

Nu^* est le nombre de *Nusselt* modifié. Il est calculé à partir d'un nombre de *Nusselt* Nu_o sans écoulement de *Stefan* :

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu_o - 2}{F(B_T)} \quad (1.20)$$

Nu_o est également déterminé d'après *Ranz-Marshall* [13] :

$$Nu_o = 2 + 0.6Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (1.21)$$

où Pr est le nombre de *Prandtl*

- **Propriétés physiques**

Les expressions rappelées précédemment varient linéairement avec les propriétés physiques du mélange gazeux. Il est donc primordial de connaître précisément les propriétés de chaque espèce et les lois de mélange. Cependant, pour déterminer les solutions analytiques dans les parties précédentes, *Nje Nje* [1] n'a pas considéré les gradients de propriétés physiques du mélange gazeux, malgré que la composition et la température de la phase gazeuse ne soient pas uniformes. *Abramzon et al.* [12] ont approuvé la règle du « tiers » qui consiste à calculer les propriétés de la phase gazeuse à partir d'une température et d'une composition dite de « référence » :

$$T_{ref} = \frac{2}{3}T^s + \frac{1}{3}T^\infty \quad (1.22)$$

$$Y_{ref} = \frac{2}{3}Y^s + \frac{1}{3}Y^\infty \quad (1.23)$$

Modèles de la phase liquide

Il existe plusieurs modélisations des transferts des espèces et de la température dans la goutte :

Pour le **modèle à diffusion infinie**, il est supposé que, pour des nombres de *Reynolds* particuliers importants, le cisaillement de l'air à la surface de la goutte génèrent des effets de recirculation interne dans la goutte si intenses que les profils de température et de composition peuvent être considérés comme uniformes dans le liquide, mais varient tout de même au cours du temps.

A l'inverse, pour le **modèle à diffusion limitée**, aucun effet convectif dans la goutte n'est considéré. Les profils de température et de composition dans le liquide ne sont plus uniformes mais restent à symétrie sphérique et sont gouvernés par les équations instationnaires de diffusion pure des espèces et de l'énergie. Une extension de ce modèle, appelée **modèle à diffusion effective** [2], simule la recirculation interne en augmentant les coefficients de diffusion des espèces et de l'énergie par un facteur dont la valeur est comprise entre 1 et 2,72.

Ces deux premiers modèles (diffusion infinie et diffusion limitée) représentent les cas limites des conditions réelles de mélange.

Remarque : l'interprétation du modèle à diffusion infinie est contestée par *Lara-Urbaneja* et *Sirignano* [3] qui ont montré que, pour des nombres de *Reynolds* élevés, les gradients de température et des fractions massiques perpendiculaires aux lignes de courant ne peuvent être négligés. Il serait plus correct d'interpréter le modèle à diffusion infinie comme le cas limite pour lequel la durée de vie de la goutte est infinie comparée au temps caractéristique de diffusion des espèces liquides.

Le **modèle de vortex de Hill** est complexe et souvent exigeant en temps de calcul, puisqu'il modélise les effets de recirculation interne dans la goutte. Il n'existe pas de modèle « conventionnel », les modèles présentés dans la littérature diffèrent totalement [3,4].

Le **modèle "thin skin"** [5] est une extension de la loi en D^2 pour une goutte mono-composant au cas multi-composants et s'avère donc très simple. Il suppose que le nombre de *Lewis* et le taux de vaporisation sont élevés et que les transferts de masse sont très faibles comparés aux transferts de chaleur. Il est alors possible de supposer que la température de surface de la goutte et les profils de composition du liquide restent constants durant toute la durée de vie de la goutte.

- **Modèle à diffusion infinie**

Le bilan de masse totale pour la phase liquide permet de calculer l'évolution de la composition de la goutte.

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3 \rho_l \frac{dY_{i,l}}{dt} = \dot{m}(Y_{i,l} - \xi_i) \quad (1.24)$$

L'évolution de la température au cours du temps est donnée par l'équation de bilan d'énergie dans la goutte :

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3 \rho_l C_{p_l} \frac{dT_l}{dt} = \dot{Q}_l \quad (1.25)$$

où C_{p_l} est la chaleur spécifique du liquide.

D'après l'équation (1.18), l'expression de \dot{Q}_l est définie par :

$$\dot{Q}_l = \dot{m} \left[\frac{C_{p_v}(T^\infty - T^s)}{B_T} - l_v \right] \quad (1.26)$$

- **Modèle à diffusion limitée**

La conservation de la masse dans la phase liquide permet de déterminer la vitesse u engendrée par les variations de la masse volumique dans l'espace et dans le temps :

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_l u) = 0 \quad (1.27)$$

Les profils de fractions massiques de chaque espèce i et de température sont respectivement calculés à partir des équations de conservation des espèces et de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_l Y_{i,l}) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_l u Y_{i,l}) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_l D_{i,l} \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial r} \right) = 0 \quad (1.28)$$

$$\rho_l C p_l \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda_l \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (1.29)$$

A la surface de la goutte, le gradient des fractions massiques est donné par :

$$\dot{m} Y_{i,l}^s - 4\pi r_s^2 \rho_l D_{i,l} \left. \frac{dY_{i,l}}{dr} \right|_{r=r_s} = \dot{m}_i \quad (1.30)$$

Le chauffage de la goutte permet de déterminer le gradient de température à la surface de la goutte :

$$\dot{Q}_l = 4\pi r_s^2 \lambda_l \left. \frac{dT}{dr} \right|_{r=r_s} \quad (1.31)$$

- **Modèle à diffusion effective [2]**

Ce modèle est identique au modèle à diffusion limitée sauf que le coefficient de diffusion des espèces $D_{i,l}$ et la conductivité thermique du liquide λ_l sont respectivement multipliés par un coefficient $\chi_{i,Y}$ et χ_T dont la valeur est comprise entre 1 et 2,72. Des études numériques ont montré qu'ils pouvaient être approximés par :

$$\chi_{i,Y} = 1,86 + 0,86 \tanh \left[2,225 \log \left(\frac{Re_l Sc_{i,l}}{30} \right) \right] \quad (1.32)$$

$$\chi_T = 1,86 + 0,86 \tanh \left[2,225 \log \left(\frac{Re_l Pr_l}{30} \right) \right] \quad (1.33)$$

Re_l , $Sc_{i,l}$ et Pr_l sont respectivement les nombres de *Reynolds*, de *Schmidt* de l'espèce i et de *Prandtl* du liquide et sont définis de la manière suivante :

$$Re_l = \frac{2\rho_l U_s r_s}{\mu_l} \quad (1.34)$$

$$Sc_{i,l} = \frac{\mu_l}{\rho_l D_{i,l}} \quad (1.35)$$

$$Pr_l = \frac{\mu_l C_{p,l}}{\lambda_l} \quad (1.36)$$

avec μ_l la viscosité dynamique du liquide.

U_s est la vitesse tangentielle maximale du liquide à la surface de la goutte :

$$U_s = \frac{\mu_g}{\mu_l} \frac{\|\vec{V}^\infty - \vec{V}_g\| Re}{32} CF \quad (1.37)$$

où CF est le coefficient de friction. Il est déterminé par :

$$CF = \frac{12,69}{Re^{2/3}(1+B_M)} \quad (1.38)$$

$$\text{avec } B_M = \frac{Y_g^s - Y_g^\infty}{1 - Y_g^s} = \frac{\sum Y_{i,g}^s - \sum Y_{i,g}^\infty}{1 - \sum Y_{i,g}^s} \quad (1.39)$$

- **Modèle "thin skin" [5]**

Les profils de concentration sont donnés par :

$$Y_{i,l}\left(\frac{r}{r_s}, T^s\right) = Y_{i,l}^0 \left\{ 1 + \left[\frac{1/x_{i,l}}{\sum_{j=1}^n Y_{j,l}^0/x_{j,l}^0} - 1 \right] \exp\left[-C_k m / Le_l \left(1 - \frac{r}{r_s}\right)\right] \right\} \quad (1.40)$$

où C_k est le rapport des conductivités thermiques du gaz et du liquide.

Equilibre thermodynamique à l'interface :

- **Equilibre à basse pression**

Les conditions d'équilibre thermodynamique suivantes, entièrement détaillées par *Nje Nje* dans ses travaux [1], sont utilisées à l'interface :

$$\square T_l = T_g \text{ pour la température} \quad (1.41)$$

$$\square P_l = P_g \text{ pour la pression} \quad (1.42)$$

$$\square \mu_{c,i,l} = \mu_{c,i,g} \text{ pour le potentiel chimique de l'espèce } i \quad (1.43)$$

D'après les hypothèses 3 à 7, la loi de *Raoult* peut être appliquée :

$$x_{i,g}^s P^\infty = x_{i,l}^s P_{sat,i}(T, P) \quad (1.44)$$

où $x_{i,g}^s$ et $x_{i,l}^s$ sont les fractions molaires respectivement de la vapeur et du liquide pour l'espèce i à la surface de la goutte, $P_{sat,i}$ la pression de vapeur saturante de l'espèce i et P^∞ la pression du milieu au loin.

Finalement x_i est lié à Y_i par :

$$Y_i = x_i M_i / \left\{ x_{air} M_{air} + \sum_{i=1}^n x_i M_i \right\} \quad (1.45)$$

où M_i est la masse molaire de l'espèce i , M_{air} celle de l'air et x_{air} la fraction molaire de l'air.

- **Equilibre à haute pression**

Aggarwal et *Shu* [6] ont montré que, lorsque la pression augmente (à partir de 15 ou 20bars), il est nécessaire d'utiliser l'équation d'état de *Peng-Robinson* dont le facteur est compression est déterminé par :

$$Z = \frac{PV}{RT} = \frac{V}{V-b} - \frac{c/RT + d - 2\sqrt{cd/RT}}{(V+b) + (b/V)(V-b)} \quad (1.46)$$

Pour un fluide pur, b , c et d sont donnés par :

$$b = 0,0778 RT/P_c T_c \quad (1.47)$$

$$c = a(T_c)(1+k)^2 \quad (1.48)$$

$$d = a(T_c)k^2 / RT_c \quad (1.49)$$

$$a(T_c) = 0,45724 R^2 T_c^2 / P_c \quad (1.50)$$

L'indice c désigne les conditions critiques. Pour un mélange, b , c et d s'écrivent :

$$b = \sum_i^n \sum_j^n x_i x_j b_{ij} \quad (1.51)$$

$$b_{ij} = \left[\frac{b_i^{1/3} + b_j^{1/3}}{2} \right]^3 \quad (1.52)$$

$$c = \sum_i^n \sum_j^n x_i x_j c_{ij} \quad (1.53)$$

$$c_{ij} = \left(\frac{c_i c_j}{b_i b_j} \right)^{1/2} b_{ij} \quad (1.54)$$

$$d = \sum_i^n \sum_j^n x_i x_j d_{ij} \quad (1.55)$$

$$d_{ij} = \left[\frac{d_i^{1/3} + d_j^{1/3}}{2} \right]^3 \quad (1.56)$$

L'égalité des potentiels chimiques à la surface permet d'écrire :

$$x_{i,v}^s \phi_{i,v}^s = x_{i,l}^s \phi_{i,l}^s \quad (1.57)$$

où les coefficients de fugacité ϕ pour les deux phases peuvent s'écrire :

$$RT \ln \phi_i = \int_V^{\infty} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,V,n_j} - (RT/V) \right] dV - RT \ln Z \quad (1.58)$$

L'expression de ϕ_i dépend de l'équation d'état utilisé. *Aggarwal* et *Shu* [6] emploient l'équation d'état de *Peng-Robinson* et les lois de mélange de *Van der Waals*. Les coefficients de fugacité sont déterminés de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \ln \phi_i = & \left((2 \sum x_j b_{ij} - b) / b \right) (Z - 1) - \ln(Z - b) - \left(A / (2\sqrt{2}B) \right) \\ & \left\{ 2 \sum x_j c_{ij} + 2RT \sum x_j d_{ij} - 2\sqrt{RT} (c \sum x_j d_{ij} + d \sum x_j c_{ij}) / \sqrt{cd} \right\} / C \\ & - (2 \sum x_j b_{ij} - b) / b \left\{ \ln \left[\frac{Z + (1 + \sqrt{2})B}{Z - (1 - \sqrt{2})B} \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.59)$$

avec :

$$\begin{aligned} A &= CP / (RT)^2 \\ B &= bP / RT \\ C &= c + RTd - 2\sqrt{cdRT} \end{aligned} \quad (1.60)$$

La chaleur latente d'évaporation dans un système haute pression est obtenue (en J/mol) en utilisant la relation suivante :

$$h_i = h_i^o - RT^2 \left(\frac{\partial \ln \phi_i}{\partial T} \right)_{P,x_i} \quad (1.61)$$

La vapeur et le liquide ont le même état de référence o . La chaleur latente d'évaporation est donc obtenue par la différence d'enthalpie entre la phase de vapeur et de liquide.

1.1.2 Modèle dit à "thermodynamique continue"

Le modèle à thermodynamique continue, présenté dans cette partie, a été développé par *Hallett* et al. [14,15,16,17] qui représentent la composition du mélange par des fonctions de distribution (une fonction pour chaque groupe de composants de même nature) plutôt que de considérer chaque composant, comme c'est le cas dans le modèle à composants discrets présenté précédemment.

En fait, ce modèle fonctionne comme le modèle à composants discrets dans lequel un composant est remplacé par un groupe de composants de même nature. La fraction du composant devient donc la fraction globale pour l'ensemble du groupe de composants dont la composition est décrite par une fonction de distribution.

Pour que cette approche soit valable, il est nécessaire que le nombre de composants dans chaque groupe soit assez important pour supposer que les concentrations des espèces varient continuellement avec la variable de distribution plutôt qu'avec des pas discrets, ce qui n'est pas envisageable avec quelques composants.

Dans cette partie toutes les grandeurs massiques présentées précédemment sont remplacées par des grandeurs molaires.

Fonction de distribution

La composition d'un groupe j de composants est représentée par les fonctions de distribution $f_{j,v}(I)$ et $f_{j,l}(I)$ respectivement pour les phases de vapeur de fuel et de liquide. Les fractions molaires de la vapeur et du liquide pour une espèce i d'un groupe j s'écrivent donc respectivement :

$$x_{i,g} = x_{j,g} \cdot f_{j,v}(I) \Delta I \quad ; \quad x_{i,l} = x_{j,l} \cdot f_{j,l}(I) \Delta I \quad (1.62)$$

où I est la variable de distribution, ΔI est le pas de la variable de distribution, $x_{j,g}$ est la fraction molaire totale de vapeur pour le mélange j de composants et $x_{j,l}$ est la fraction molaire totale pour le groupe j de composants pour la phase liquide. Ces deux dernières fractions molaires ont pour définition :

$$x_{j,g} = \sum_{i \in j} x_{i,g} \quad ; \quad x_{j,l} = \sum_{i \in j} x_{i,l} \quad (1.63)$$

La variable de distribution I peut être n'importe quelle propriété. La masse molaire est souvent utilisée [14,15,16,17], mais I peut également être le nombre d'atomes de carbone [18]. Dans la modélisation présentée ici, la masse molaire est choisie. Les fonctions $f_{j,v}(I)$ et $f_{j,l}(I)$ sont caractérisées par valeurs moyennes $\theta_{j,v}$ et $\theta_{j,l}$ ainsi que les variances $\sigma_{j,v}^2$ et $\sigma_{j,l}^2$. La fonction de distribution choisie par *Hallett* et al. [14,15,16,17] pour décrire les deux phases est la distribution Γ :

$$f(I) = \frac{(I - \gamma)^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \exp \left[- \left(\frac{I - \gamma}{\beta} \right) \right] \quad (1.64)$$

$$\theta = \alpha\beta + \gamma \quad ; \quad \sigma^2 = \alpha\beta^2 \quad (1.65)$$

$$\text{et } \Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} t^{\alpha-1} \exp(-t) dt \quad (1.66)$$

Les paramètres α et β sont différents pour le liquide et la vapeur, mais l'origine de la distribution γ , dont la valeur peut être ajustée arbitrairement pour que la fonction de distribution corresponde au mieux à la composition du groupe, est supposée être la même pour les deux phases.

La fonction de distribution f présente les caractéristiques suivantes :

$$\int_{\gamma}^{\infty} f(I) dI = 1 \quad (1.67)$$

$$\int_{\gamma}^{\infty} f(I) I dI = \theta \quad (1.68)$$

$$\int_{\gamma}^{\infty} f(I) I^2 dI = \Psi = \theta^2 + \sigma^2 \quad (1.69)$$

où Ψ est le second moment central de la distribution.

Voici un exemple de composition pour l'essence et le gasoil [16] présenté dans le Tableau 1.1 et le Tableau 1.2 ainsi que sur la Figure 1.1.

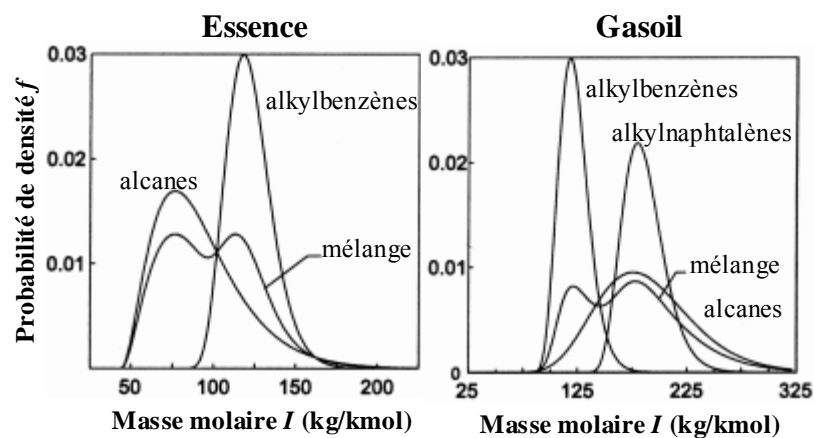


Figure 1.1 : Distribution des groupes de composants et des mélanges de carburants [16]

% masse - % moles	Essence	Gasoil
Alcanes	70 – 75,5	75 – 69,2
Alkylbenzènes	30 – 24,5	15 – 21,4
Alkylnaphtalènes	0	10 – 9,4

Tableau 1.1 : Exemple de composition des mélanges liquides [16]

	θ_i	σ_i	γ
Alcanes (pour l'essence)	92,3	27,6	44
Alcanes (pour le gasoil)	188,9	43,7	44
Alkylbenzènes	122,2	13,9	78,2
Alkylnaphtalènes	186	19,2	128,2

Tableau 1.2 : Distribution (en kg/kmol) des groupes de composants [16]

Equations de la phase gazeuse :

- **Conservation du nombre de moles**

Le bilan molaire de la phase gazeuse permet de déterminer la vitesse d'éjection de la vapeur à la coordonnée radiale r :

$$4\pi r^2 c_g v = \dot{n} \quad (1.70)$$

où c_g est la densité molaire de la phase gazeuse, v est la vitesse radiale des gaz à la surface de la sphère de rayon r et \dot{n} est le débit molaire global de vapeur.

- **Conservation des espèces et de l'énergie**

Hallett et al. [14,15,16,17] déterminent les équations de transport en insérant $x_{i,g}$ de l'équation (1.62) dans l'équation de diffusion pour une seule espèce i du modèle à composants discrets (équation (1.2)) et en intégrant sur l'intervalle de distribution en pondérant par I^n ($n = 0, 1, 2$) :

$$c_g v \frac{\partial x_{j,g}}{\partial r} = \frac{c_g \bar{D}_{j,g}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial x_{j,g}}{\partial r} \right) \quad (1.71)$$

$$c_g v \frac{\partial (x_{j,g} \theta_{j,v})}{\partial r} = \frac{c_g \tilde{D}_{j,g}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial (x_{j,g} \theta_{j,v})}{\partial r} \right) \quad (1.72)$$

$$c_g v \frac{\partial (x_{j,g} \Psi_{j,v})}{\partial r} = \frac{c_g \hat{D}_{j,g}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial (x_{j,g} \Psi_{j,v})}{\partial r} \right) \quad (1.73)$$

où les diffusivités moyennes du groupe j dans le mélange gazeux $\bar{D}_{j,g}$, $\tilde{D}_{j,g}$ et $\hat{D}_{j,g}$ sont définies de la manière suivante :

$$\bar{D}_{j,g} = \int_{\gamma}^{\infty} D_{j,g}(I) f_{j,g}(I) dI \quad (1.74)$$

$$\tilde{D}_{j,g} \theta_{j,v} = \int_{\gamma}^{\infty} D_{j,g}(I) f_{j,g}(I) I dI \quad (1.75)$$

$$\hat{D}_{j,g} \Psi_{j,v} = \int_{\gamma}^{\infty} D_{j,g}(I) f_{j,g}(I) I^2 dI \quad (1.76)$$

Hallett [14] affirme que ces trois diffusivités sont très proches les unes des autres et peuvent être considérées comme égales.

L'équation de conservation de l'énergie du mélange gazeux s'écrit comme pour le modèle à composants discrets :

$$c_{g,v} C p_v \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\lambda_g}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (1.77)$$

Les conditions limites sont :

□ A la surface de la goutte :

$$x_{j,g} = x_{j,g}^s \quad (1.78)$$

$$x_{j,g} \theta_{j,v} = x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s \quad (1.79)$$

$$x_{j,g} \Psi_{j,v} = x_{j,g}^s \Psi_{j,v}^s \quad (1.80)$$

$$T = T^s \quad (1.81)$$

□ Au loin :

$$x_{j,g} = x_{j,g}^{\infty} \quad (1.82)$$

$$x_{j,g} \theta_{j,v} = x_{j,g}^{\infty} \theta_{j,v}^{\infty} \quad (1.83)$$

$$x_{j,g} \Psi_{j,v} = x_{j,g}^{\infty} \Psi_{j,v}^{\infty} \quad (1.84)$$

$$T = T^{\infty} \quad (1.85)$$

La solution des Equations (1.70), (1.71) et (1.77) est identique à celle des modèles à composants discrets :

$$\dot{n} = 2\pi r_s c_g \bar{D}_{j,g} Sh_j^* \ln(1 + B_{m,j}) = \frac{2\pi r_s \lambda_g Nu^*}{C p_v} \ln(1 + B_T) \quad (1.86)$$

$$B_{m,j} = \frac{x_{j,g}^s - x_{j,g}^{\infty}}{\xi_j - x_{j,g}^s} ; \quad B_T = \frac{C p_v (T^{\infty} - T^s)}{l_v + \dot{Q}_l / \dot{n}} \quad (1.87)$$

Ici, $\xi_j = \dot{n}_j / \dot{n}$. L'intégration de l'équation (1.71) donne :

$$x_{j,g} = \xi_j - (\xi_j - x_{j,g}^{\infty}) (1 + B_{m,j})^{-Z} ; \quad Z = 1 + (Sh_j^* / 2) [(r_s / r) - 1] \quad (1.88)$$

et celle des équations (1.72) et (1.73) :

$$x_{j,g} \theta_{j,v}(r) = x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s - \frac{1}{B_{m,j}} (x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s - x_{j,g}^{\infty} \theta_{j,v}^{\infty}) [(1 + B_{m,j})^{(1-Z)} - 1] \quad (1.89)$$

avec une équation semblable pour $x_{j,g}\Psi_{j,v}$.

La division de cette dernière équation par (1.88) donne $\theta_{j,v}(r)$ et $\Psi_{j,v}(r)$ décrivant les profils de composition de la vapeur. Pour $x_{j,g}^\infty = 0$, l'équation (1.89) est réduite à :

$$\theta_{j,v}(r) = cste = \theta_{j,v}^s \quad ; \quad \Psi_{j,v}(r) = cste = \Psi_{j,v}^s \quad (1.90)$$

Hallett [15] fait remarquer que l'uniformité de la composition de la vapeur prévue par cette dernière équation est une conséquence de l'hypothèse de quasi-stationnarité de la phase gazeuse qui s'adapte instantanément aux changements de conditions à la surface de la goutte et du milieu au loin.

Equations de la phase liquide :

Le débit de vapeur est égal à la quantité de liquide évaporée par unité de temps :

$$\dot{n} = -\frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi r_s^3 c_l \right) \quad (1.91)$$

où c_l est la densité molaire du liquide.

- **Modèle à diffusion infinie (*Hallett et Grimwood* [16]) :**

D'après le bilan de flux molaire à l'interface et le bilan molaire de la phase liquide pour le modèle à composants discrets permettent d'écrire pour un composant i :

$$\dot{n} x_{i,g}^s - \dot{n} c_g D_{i,g} \frac{dx_{i,g}}{dr} \Big|_{r=r_s} = -\frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi r_s^3 c_l x_{i,l} \right) \quad (1.92)$$

En remplaçant les fractions molaires par leur valeur (équation (1.62)) et en intégrant sur l'intervalle de distribution en pondérant par r^n ($n = 0, 1, 2$), on obtient après calcul :

$$\frac{dx_{j,l}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{4\pi r_s^3 c_l} \left[(x_{j,l} - x_{j,g}^s) + \frac{4\pi r_s^2 c_g \bar{D}_{j,g}}{\dot{n}} \frac{\partial x_{j,g}}{\partial r} \Big|_{r=r_s} \right] \quad (1.93)$$

$$\frac{d\theta_{j,l}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{4\pi r_s^3 x_{j,l} c_l} \left[(\xi_j \theta_{j,l} - x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s) + \frac{4\pi r_s^2 c_g \tilde{D}_{j,g}}{\dot{n}} \frac{\partial (x_{j,g} \theta_{j,v})}{\partial r} \Big|_{r=r_s} \right] \quad (1.94)$$

avec une équation semblable pour $\Psi_{j,l}$.

Les équations (1.88) et (1.89) permettent donc de trouver :

$$\frac{dx_{j,l}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{4\pi r_s^3 c_l} [x_{j,l} - \xi_j] \quad (1.95)$$

$$\frac{d\theta_{j,l}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{4\pi r_s^3 x_{j,l} c_l} \left[\xi_j \theta_{j,l} + \frac{x_{j,g}^\infty \theta_{j,v}^\infty - x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s (1 + B_{m,j})}{B_{m,j}} \right] \quad (1.96)$$

avec une équation semblable pour $\Psi_{j,l}$.

Si $x_{j,g}^\infty = 0$, cette dernière équation peut être simplifiée :

$$\frac{d\theta_{j,l}}{dt} = \frac{3\dot{n}\xi_j}{4\pi r_s^3 x_{j,l} c_l} [\theta_{j,l} - \theta_{j,v}^s] \quad (1.97)$$

Pour une température du liquide uniforme, le bilan d'énergie dans la goutte permet d'écrire :

$$\frac{dT_l}{dt} = \frac{3\dot{n}}{4\pi r_s^3 c_l C_{p_l}} \left[C_{p_v} \frac{(T^\infty - T^s)}{B_r} - l_v \right] \quad (1.98)$$

- **Modèle à diffusion limitée (Abdel-Qader et Hallett [17]) :**

Comme pour la phase gazeuse, $x_{i,l}$ est inséré dans l'équation de diffusion des espèces pour une seule espèce et en intégrant sur l'intervalle de distribution en pondérant par r^n :

$$\frac{\partial}{\partial t} (c_l x_{j,l}) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 c_l u x_{j,l}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 c_l \bar{D}_{j,l} \frac{\partial x_{j,l}}{\partial r} \right) \quad (1.99)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (c_l x_{j,l} \theta_{j,l}) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 c_l u x_{j,l} \theta_{j,l}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 c_l \tilde{D}_{j,l} \frac{\partial (x_{j,l} \theta_{j,l})}{\partial r} \right) \quad (1.100)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (c_l x_{j,l} \psi_{j,l}) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 c_l u x_{j,l} \psi_{j,l}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 c_l \hat{D}_{j,l} \frac{\partial (x_{j,l} \psi_{j,l})}{\partial r} \right) \quad (1.101)$$

où u est la vitesse dans le liquide due aux variations de densité molaires. Elle peut être déterminée par :

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 c_l u) = 0 \quad (1.102)$$

On procède de la même manière avec l'équation de continuité du flux molaire à l'interface pour une seule espèce pour connaître la composition et la distribution à la surface de la goutte :

$$\dot{n} x_{j,l}^s - 4\pi r_s^2 c_l \bar{D}_{j,l} \frac{\partial x_{j,l}}{\partial r} \Big|_{r=r_s} = \dot{n} x_{j,g}^s - 4\pi r_s^2 c_g \bar{D}_{j,g} \frac{\partial x_{j,g}}{\partial r} \Big|_{r=r_s} \quad (1.103)$$

$$\dot{n} x_{j,l}^s \theta_{j,l}^s - 4\pi r_s^2 c_l \tilde{D}_{j,l} \frac{\partial x_{j,l} \theta_{j,l}}{\partial r} \Big|_{r=r_s} = \dot{n} x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s - 4\pi r_s^2 c_g \tilde{D}_{j,g} \frac{\partial x_{j,g} \theta_{j,v}}{\partial r} \Big|_{r=r_s} \quad (1.104)$$

Ces dernières peuvent être simplifiées d'après les équations (1.88) et (1.89) :

$$\dot{n}x_{j,l}^s - 4\pi r_s^2 c_l \bar{D}_{j,l} \left. \frac{\partial x_{j,l}}{\partial r} \right|_{r=r_s} = \dot{n}_j \quad (1.105)$$

$$\dot{n}x_{j,l}^s \theta_{j,l}^s - 4\pi r_s^2 c_l \tilde{D}_{j,l} \left. \frac{\partial (x_{j,l} \theta_{j,l})}{\partial r} \right|_{r=r_s} = \dot{n} \left[\frac{x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s (1 + B_{m,j}) - x_{j,g}^\infty \theta_{j,v}^\infty}{B_{m,j}} \right] \quad (1.106)$$

avec une équation analogue pour $\Psi_{j,l}$. Si $x_{j,g}^\infty = 0$, cette dernière équation peut être simplifiée :

$$\dot{n}x_{j,l}^s \theta_{j,l}^s - 4\pi r_s^2 c_l \tilde{D}_{j,l} \left. \frac{\partial (x_{j,l} \theta_{j,l})}{\partial r} \right|_{r=r_s} = \dot{n}_j \theta_{j,v}^s \quad (1.107)$$

Remarque : lorsque le mélange liquide n'est représenté que par une seule fonction de distribution $f_l(I)$, le modèle à diffusion limitée ne peut être utilisé car la diffusion d'un groupe de composants dans ce même groupe de composants pose problème.

La température est déterminée par l'équation de diffusion de l'énergie :

$$c_l C p_l \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_l}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (1.108)$$

Pour obtenir le modèle à diffusion effective, il suffit de multiplier $\bar{D}_{j,l}$, $\tilde{D}_{j,l}$, $\hat{D}_{j,l}$ par $\chi_{j,Y}$ (équation (1.32)) et λ_l par χ_T (équation (1.33)).

Equilibre thermodynamique à l'interface

Hallett et al. [14,15,16,17] déterminent les valeurs de pressions de vapeur saturante à partir de l'équation de *Clausius-Clapeyron* avec la loi de *Trouton* pour l'entropie de vaporisation s_{fg} :

$$P_{sat,j}(I) = P_{ATM} \exp \left[\left(s_{fg} / RT \right) (T - T_{b,j}) \right] \quad (1.109)$$

où P_{ATM} est la pression atmosphérique standard et $T_{b,j}$ est la température d'ébullition du mélange j . Les points d'ébullition pour chaque espèce i ont été corrélés en fonction de la masse molaire :

$$T_{b,j}(I) = a_{b,j} + b_{b,j} I \quad (1.110)$$

Comme pour le modèle à composants discrets, la loi de *Raoult* est utilisée afin de déterminer la composition de la vapeur à la surface de la goutte :

$$x_{j,g} P^\infty f_{j,v}(I) dI = x_{j,l} P_{sat,j}(I) f_{j,l}(I) dI \quad (1.111)$$

En substituant la fonction de distribution f et en intégrant tout en pondérant avec I^n ($n=0, 1$, et 2), il est possible de déterminer la fraction molaire et la distribution de la phase de vapeur à la surface de la goutte :

$$x_{j,g}^s = x_{j,l}^s \frac{P_{ATM}}{P^\infty} \frac{\exp\left[\left(s_{fg}/RT^s\right)\left(T^s - a_{b,j} - \gamma_j b_{b,j}\right)\right]}{\left(1 + \left(s_{fg}/RT^s\right)b_{b,j}\beta_{j,l}\right)^{\alpha_{j,l}}} \quad (1.112)$$

$$\theta_{j,v}^s - \gamma_j = \frac{\theta_{j,l}^s - \gamma_j}{1 + \left(s_{fg} b_{b,j}/RT^s\right)\sigma_{j,l}^2 / \left(\theta_{j,l}^s - \gamma_j\right)} \quad (1.113)$$

$$\sigma_{j,v}^s{}^2 = \sigma_{j,l}^s{}^2 \left[\frac{\theta_{j,v}^s - \gamma_j}{\theta_{j,l}^s - \gamma_j} \right]^2 \quad (1.114)$$

1.1.3 Modèle à courbe de distillation

Cette modélisation, développée à l'université de Karlsruhe [19], représente la composition de la goutte par la courbe de distillation, c'est à dire l'évolution de la température d'ébullition en fonction de la fraction de volume de liquide évaporée.

Si ce modèle s'avère très intéressant en terme de temps de calcul, il n'est toutefois pas en mesure de prédire une composition détaillée de la vapeur. Comme seule la masse molaire est calculée pour l'ensemble des espèces de vapeur, aucune distinction n'est alors effectuée entre les différentes natures de composants (n-alcanes, aromatiques, naphtènes ...). Cette modélisation n'a pas été retenue dans ces travaux, puisque ces différents composants réagissent différemment en régime de combustion.

1.2 Comparaison avec les mesures expérimentales

L'évaporation de gouttes multi-composants a souvent été étudiée expérimentalement. Cependant ces études se limitent souvent au diamètre, les mesures de température et de composition (aussi bien en phase liquide que gazeuse) étant délicates. De plus, la température ambiante de ces expériences est souvent faible (entre 20 et 30°C). Ces mesures ont ensuite été confrontées aux résultats numériques des modèles à composants discrets.

1.2.1 Evaporation à température et pression ambiantes

Gartung et al [7] ont étudié l'évaporation d'un mélange binaire à faible température ambiante et à la pression atmosphérique. Des gouttes en lévitation laser et de diamètre initial compris entre 13 et 18 μm sont placées dans une chambre d'observation où deux caméras linéaires CCD enregistrent les rayons réfractés par la goutte.

L'interaction entre la goutte et le faisceau laser crée un réseau d'interfranges en diffusion avant et un arc-en-ciel monochromatique en diffusion arrière. Ces deux phénomènes optiques sont expliqués en détail dans le Chapitre 2. La mesure de l'interfrange angulaire dans le réseau d'interfranges permet de déterminer le diamètre (voir Chapitre 2), ce qui est aussi possible avec la fréquence des oscillations (appelées ripples) observées sur le signal de l'arc-en-ciel monochromatique [20].

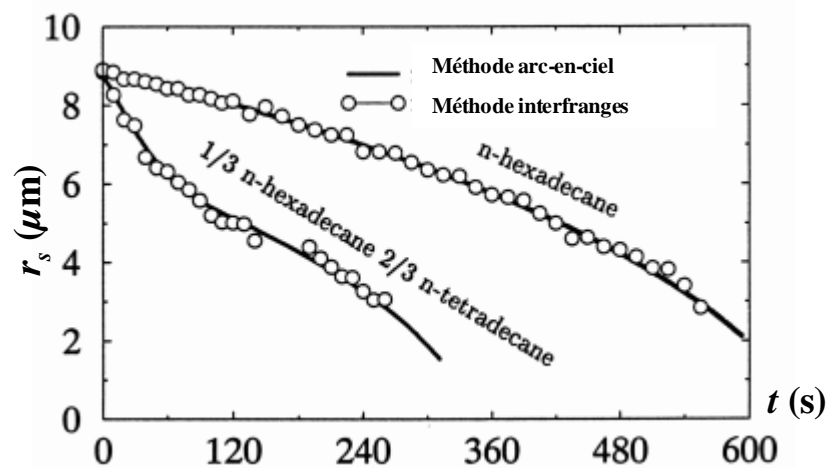


Figure 1.2 : Evolution du rayon de la goutte en fonction du temps [7]

Sur la Figure 1.2, les résultats obtenus par Gartung et al [7] avec du n-hexadecane pur et un mélange de n-tetradecane et de n-hexadecane montrent que les deux méthodes sont en parfait accord. De plus, il apparaît que la présence de n-tetradecane (dont la température d'ébullition est plus faible que celle du n-hexadecane) réduit de moitié la durée de vie de la goutte.

Sur la Figure 1.3, les mesures expérimentales sont cette fois ci confrontées aux prévisions numériques données par le modèle à diffusion infinie. Les liquides purs suivent bien la loi en D^2 :

$$\left(r_s / r_s^0\right)^2 = 1 - Kt / \left(r_s^0\right)^2 \quad (1.115)$$

où K est la constante d'évaporation (en $m^2 \cdot s^{-1}$). Pour le n-hexadecane pur, cette constante est 8 fois plus faible que celle du n-tetradecane pur.

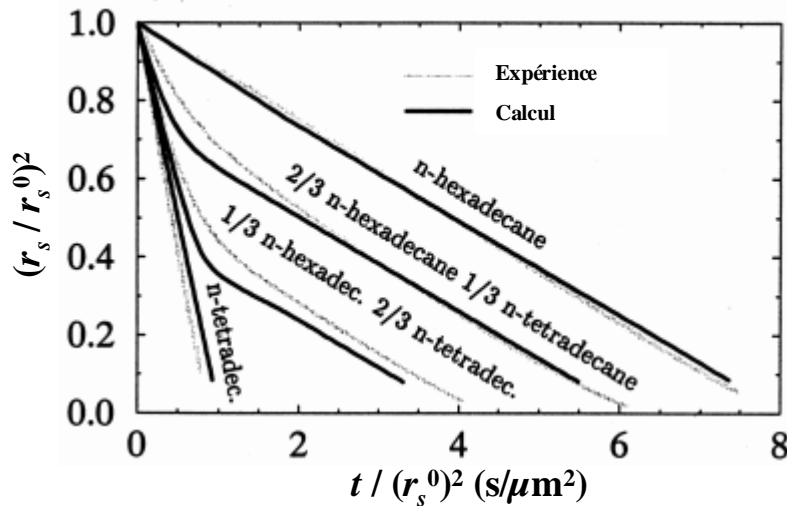


Figure 1.3 : Evolution de la taille des gouttes en fonction du temps [7]

Pour les mélanges, le comportement est bien différent puisque deux phases apparaissent. Lors de la première phase, les deux composants s'évaporent. Or la pente initiale pour les deux mélanges diffère puisqu'elle diminue avec la proportion initiale de n-tetradecane. Ce qui implique que, durant cette première phase, le n-tetradecane s'évapore plus que le n-hexadecane. Ceci explique la seconde phase où la pente de décroissance de la taille de la goutte est égale à celle du n-hexadecane pur. En effet, comme le n-tetradecane s'est évaporé plus rapidement que le n-hexadecane lors de la première phase, il a été entièrement consommé et la goutte devient mono-composant et n'est alors composée que de n-hexadecane durant la seconde phase.

Gartung et al [7] font bien apparaître ce comportement sur la Figure 1.4 où, dans un premier temps, la constante d'évaporation K est élevée mais diminue avec la proportion de n-tetradecane. Une fois tout le n-tetradecane consommé, cette constante d'évaporation est rigoureusement égale à celle d'une goutte de n-hexadecane pur.

Ce phénomène d'évaporation sélective du composant le plus volatil au composant le moins volatil (phénomène appelé l'évaporation séquentielle ou la distillation) a été possible car l'évaporation a été suffisamment lente pour que le n-tetradecane liquide consommé ait le

temps de se renouveler par diffusion du centre de la goutte vers la surface, ce qui n'aurait pas été le cas si la durée de vie de la goutte avait été bien plus courte.

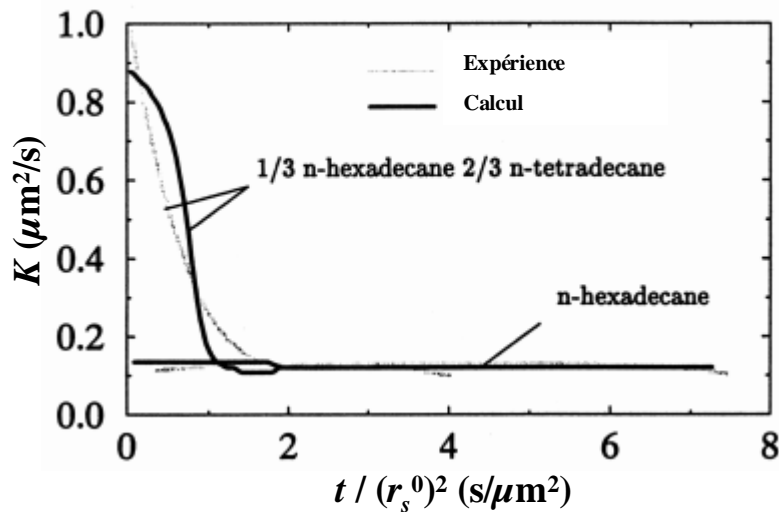


Figure 1.4 : Evolution de la constante d'évaporation en fonction du temps [7]

La légère différence entre les mesures et le calcul (modèle à diffusion infinie) pourrait être due à l'hypothèse de la composition uniforme à l'intérieur de la goutte. Même si la durée de vie de la goutte est élevée, la diffusion du n-tetradecane liquide serait trop faible pour homogénéiser la goutte. La quantité de n-tetradecane évaporée à la surface de la goutte ne serait donc pas totalement renouvelée.

D'autres mesures à une température ambiante de 20°C ont été effectuées par *Brenn* et al [8] qui ont mesuré par ombroscopie le diamètre de gouttes maintenues en suspension grâce à un champ acoustique. Les résultats pour des mélanges de méthanol et d'eau (a) ainsi que des mélanges d'éthanol et d'eau (b) sont présentés sur la Figure 1.5. Les pourcentages donnés dans la légende sont ceux de l'eau. Là aussi, les résultats numériques (modèle à diffusion infinie) sont en accord avec les mesures expérimentales. Le processus de distillation observé précédemment se retrouve à nouveau.

Brenn et al [9] ont ensuite augmenté le nombre de composants et pour une température ambiante d'environ 30°C . La Figure 1.6 fait apparaître ces mesures avec les conditions initiales suivantes (composition donnée en pourcentage volumique) :

3 composants (méthanol 30%, éthanol 20%, 1-butanol 50%), diamètre initial de 1,67mm.

(a) 4 composants (méthanol 25%, éthanol 25%, 1-butanol 25%, n-heptane 25%), diamètre initial de 1,53mm.

(b) 5 composants (méthanol 20%, éthanol 20%, 1-butanol 20%, n-heptane 20%, n-decane 20%), diamètre initial de 1,72mm.

Là encore, le diamètre donné par le calcul (modèle à diffusion infinie) corrèle avec les mesures expérimentales. Il est à noter ici que le nombre de changements de pente augmente avec le nombre de composants.

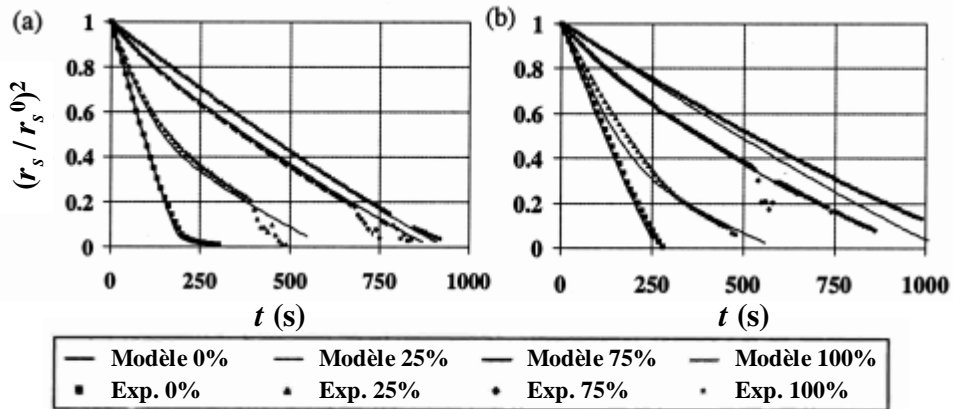


Figure 1.5 : Evolution de la taille des gouttes en fonction du temps [8]

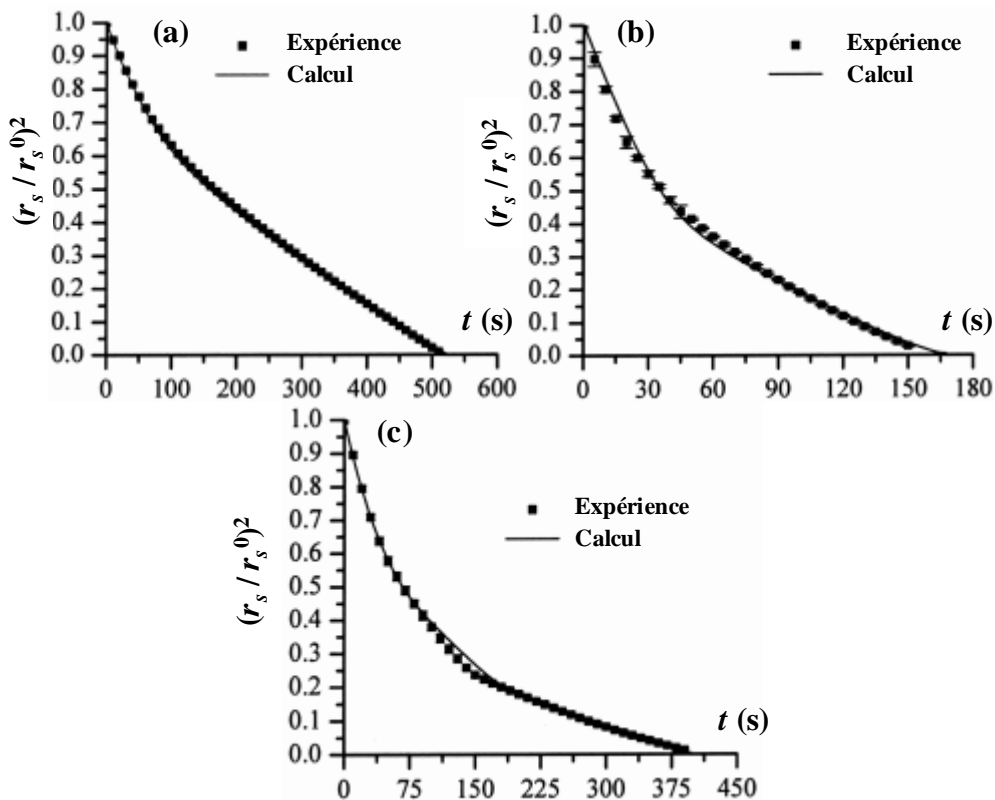


Figure 1.6 : Evolution de la taille des gouttes en fonction du temps [9]

Gartung, Arndt et Seibel [10] ont réussi à mesurer la masse de chaque composant présent dans une goutte. Pour cela, les gouttes sont récupérées dans un récipient contenant un solvant peu

volatile (n-hexadecane) pour "geler" l'évaporation. Toutes les mesures ont été effectuées pour une température ambiante de 23°C.

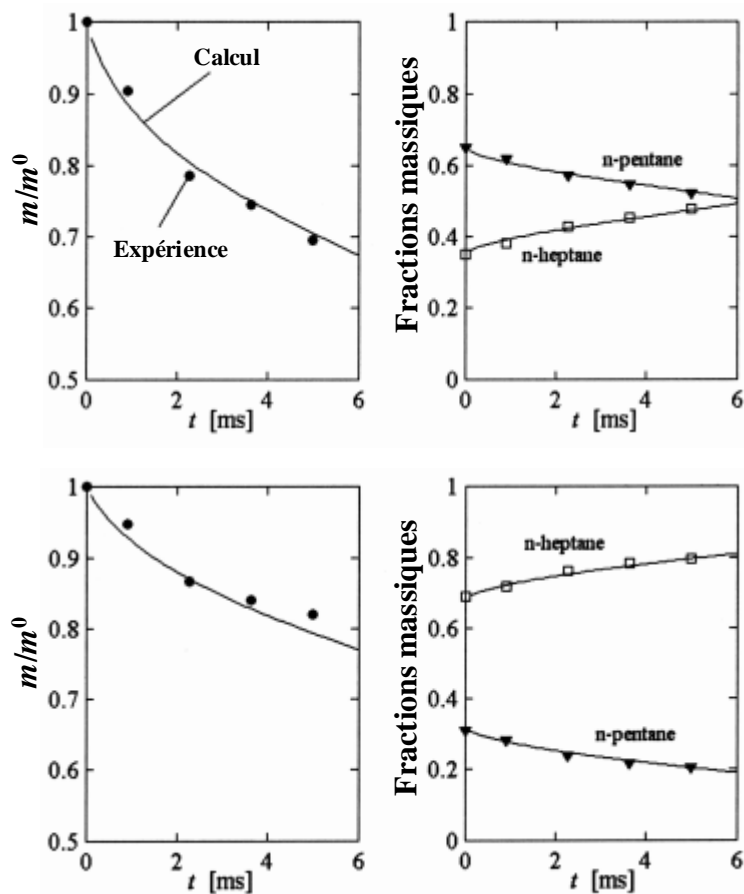


Figure 1.7 : Evolution de la masse adimensionnée (à gauche) et des fractions massiques liquides (à droite) en fonction du temps pour un mélange binaire [10]

La Figure 1.7 montre les résultats obtenus pour un mélange binaire (n-pentane et n-heptane) pour différentes concentrations initiales. Bien que la température ambiante soit faible, l'évaporation n'est pas aussi lente que lors des cas précédents, car la température d'ébullition du n-pentane est faible (de l'ordre de 36°C). Le modèle à diffusion effective est donc choisi puisqu'il n'est pas sûr que les gradients de concentration dans la goutte soient négligeables. Sont tracés à gauche le rapport m/m^0 (rapport de la masse de la goutte sur sa masse initiale) et à droite les fractions massiques moyennes pour chaque espèce. Les résultats expérimentaux et numériques sont en parfait accord.

Gartung, Arndt et Seibel [10] ont ensuite étudié un liquide constitué de quatre composants (n-pentane, n-hexane, n-heptane et n-octane). Les résultats (Figure 1.8) sont toujours en bon accord, malgré l'ajout de nouveaux composants qui rend plus délicat le calcul des coefficients de diffusion des espèces dans le mélange liquide. Dans ces conditions, le modèle à diffusion

effective est toujours adapté pour prédire l'évolution de la masse et du changement de composition du liquide.

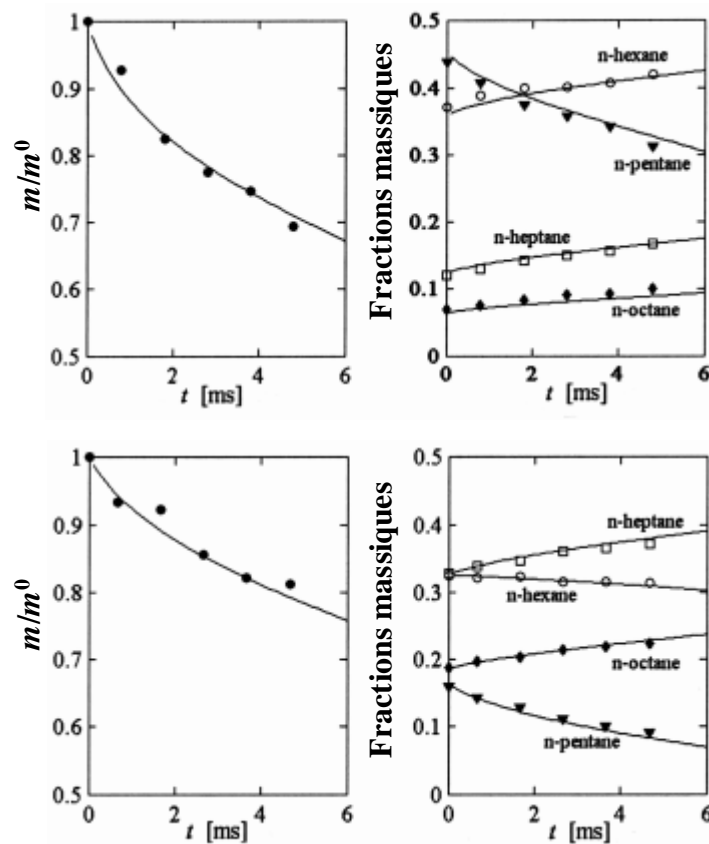


Figure 1.8 : Evolution de la masse adimensionnée (à gauche) et des fractions massiques liquides (à droite) en fonction du temps pour un mélange à quatre composants [10]

D'après les fractions massiques initiales et finales, nous avons estimé la masse évaporée pour chaque composant (Tableau 1.3 en supposant que la goutte a une masse initiale de $1\mu\text{g}$). Il apparaît que plus de la moitié de n-pentane et un quart de n-hexane se sont évaporés, alors la quantité de n-heptane et de n-octane n'a pas changé.

Composants	Masse initiale (en μg)	Fraction massique initiale	Estimation de la quantité de masse évaporée (en μg)	Masse finale (en μg)	Fraction massique finale
n-pentane	0,44	0,44	0,24 (54,5% du n-pentane s'est évaporé)	0,2	0,3
n-hexane	0,37	0,37	0,09 (25% du n-hexane s'est évaporé)	0,28	0,42
n-heptane	0,12	0,12	0	0,12	0,18
n-octane	0,07	0,07	0	0,07	0,1
total	1	1	0,33	0,67	1

Tableau 1.3 : Estimation de la quantité massique évaporée pour chaque composant

Ces différentes expériences effectuées pour de faibles températures ambiantes mettent en évidence l'importance de considérer le caractère multi-composants des gouttes. Un liquide pur, quelle que soit l'espèce choisie, ne peut reproduire le phénomène de distillation d'un carburant réel.

1.2.2 Evaporation à température modérée

Chen et al [5] ont étudié l'évaporation de gouttes bi-composants (mélange à 50% de n-hexane et 50% de n-decane) de diamètre initial d'environ $70\mu\text{m}$ se déplaçant dans une chambre de section carrée. La température de l'air le long de la trajectoire de la goutte est comprise entre 371 et 409K et la vitesse relative entre la goutte et l'air est faible (entre 0,12 et 1,08m/s). Les diamètres, mesurés par PDA [21], sont comparés sur la Figure 1.9 aux résultats prédits par différents modèles : "thin skin", diffusion infinie et diffusion limitée.

Ces mesures expérimentales font apparaître une nouvelle fois une rupture de pente (Figure 1.9). Ceci laisse donc supposer que, comme dans le cas de l'évaporation en faible température ambiante, tout le composant présentant une température d'ébullition plus faible (le n-hexane) est consommé et la goutte devient mono-composant. C'est d'ailleurs ce que prévoient les calculs de *Chen et al* [5] sur la Figure 1.10, où la fraction massique de n-hexane à la surface de la goutte devient très faible lorsque cette rupture de pente apparaît.

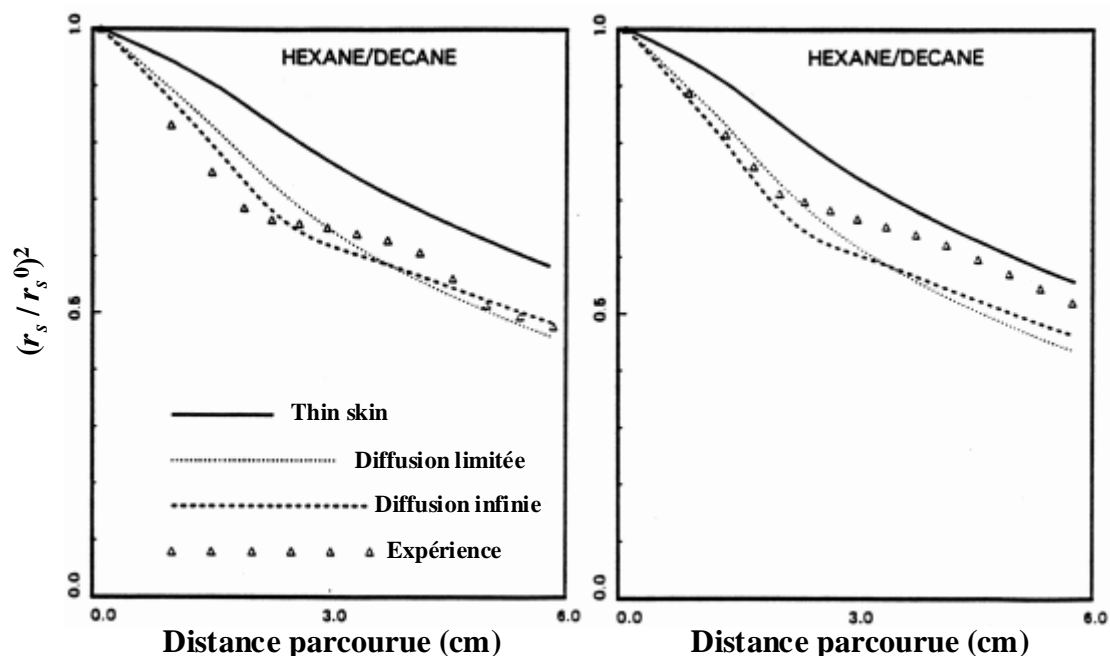


Figure 1.9 : Evolution du carré du rayon adimensionné en fonction de la distance [5]

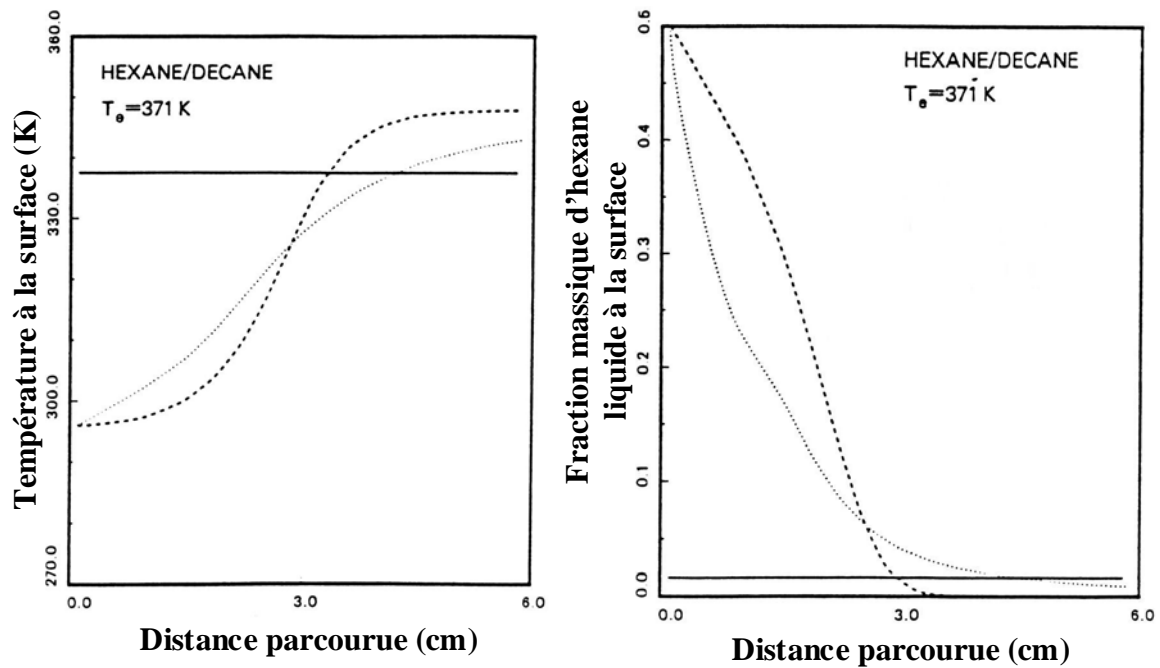


Figure 1.10 : Evolution de la température de surface (à gauche) et de la fraction massique de n-hexane liquide à la surface (à droite) calculés en fonction de la distance [5]

Il apparaît clairement que le modèle "thin skin" utilisé par *Chen* et al [5] n'est pas adapté dans ces conditions puisqu'il présente en général des valeurs éloignées des mesures. De plus, aucune rupture de pente dans la décroissance du diamètre (marquant le passage vers une goutte de n-decane pur) n'est visible puisque ce modèle suppose que la composition et la température à la surface de la goutte sont constants. Les modèles à diffusion limitée et à diffusion infinie donnent quant à eux des résultats assez proches et sont bien adaptés pour prédire l'évolution du diamètre dans ces conditions.

1.2.3 Evaporation à pression élevée

Strengle et al. [11] ont effectué des mesures de diamètre de gouttes bi-composants (n-pentane et n-nonane) à des températures modérées (550 ou 650K) et pour des pressions élevées (entre 20 et 40 bars). La température initiale des gouttes est comprise entre 370K et 400K. Comme la vitesse relative entre le gaz et la goutte est faible (inférieure à 1m/s), le modèle à diffusion limitée est utilisé.

Les Figures 1.11, 1.12 et 1.13 font apparaître en fonction de la distance parcourue (et non en fonction du temps) l'évolution du diamètre respectivement pour différentes pressions, températures de l'air et compositions initiales de la goutte. Il est difficile de comparer l'évolution des diamètres entre eux car les vitesses des gouttes sont bien différentes (pouvant aller du simple au triple). En effet, l'air est plus dense lorsque sa pression augmente et la résistance à la pénétration de la goutte dans l'air (autrement dit la traînée) est alors plus forte.

Cela implique une diminution plus rapide de la vitesse de la goutte quand la pression augmente.

Non seulement le temps écoulé pour une distance parcourue est différent pour chaque goutte, mais, de plus, la constante d'évaporation varie avec la vitesse. Il n'est alors pas possible d'effectuer une étude paramétrique et de comparer les vitesses d'évaporation des gouttes entre les différentes mesures. Il faut juste remarquer que les résultats numériques de *Strengle* et al. [11] sont en accord avec leurs mesures expérimentales.

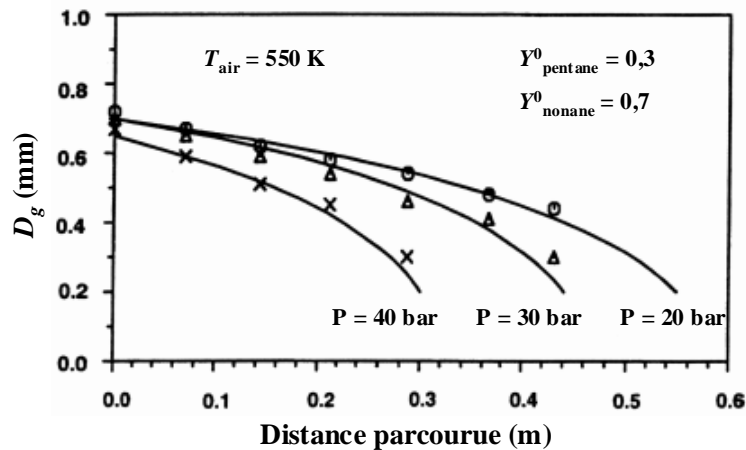


Figure 1.11 : Evolution du diamètre en fonction de la distance pour différentes pressions [11]

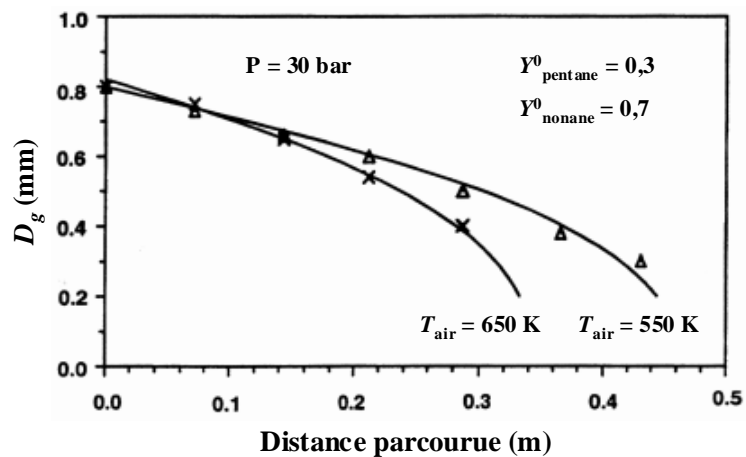


Figure 1.12 : Evolution du diamètre en fonction de la distance pour différentes températures ambiantes [11]

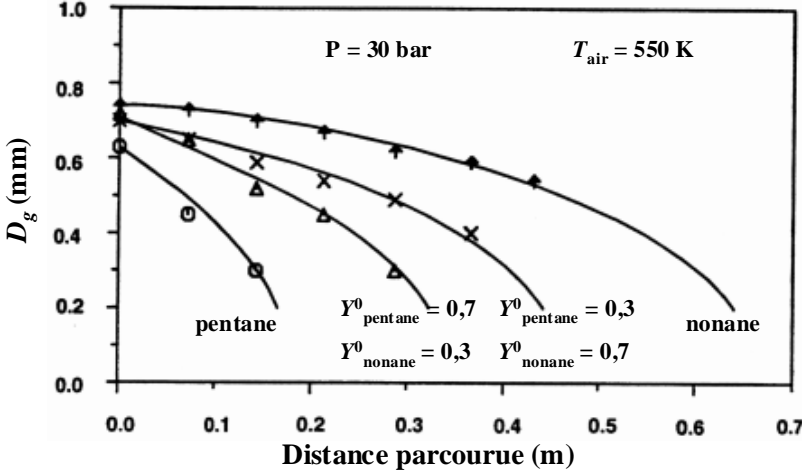


Figure 1.13 : Evolution du diamètre en fonction de la distance pour différentes compositions initiales de la goutte [11]

1.3 Conclusion

Différentes modélisations de l'évaporation de gouttes multi-composants, existant dans la littérature, ont été décrites dans ce chapitre. Le mélange liquide ou gazeux peut être représenté suivant deux approches. La première, la modélisation par composants discrets, considère chaque composant présent dans la goutte. Dans ce cas, il est nécessaire de calculer les propriétés physiques du mélange (aussi bien dans la phase liquide que dans la phase gazeuse), le débit de vapeur pour chaque composant et l'évolution de sa fraction massique (ou molaire) dans la goutte. Ce modèle devient donc vite très exigeant en temps de calcul avec un grand nombre de composants. Pour remédier à ce problème, la seconde modélisation, la modélisation à thermodynamique continue, représente l'ensemble des fractions molaires d'un groupe de composants de même nature par une fonction de distribution. Cette fois, les propriétés physiques et les débits de vapeur ne sont pas calculés pour chaque composant mais pour chaque groupe de composants de même nature. De plus, au lieu de calculer l'évolution de la fraction de chaque composant dans la goutte, il faut juste prédire la fraction totale du groupe de composants et les paramètres de distribution. Avec un grand nombre de composants, le gain en temps de calcul est considérable. Cependant, cette modélisation utilise des corrélations pour les propriétés physiques dépendant de la variable de distribution et perdent en précision. De plus, les fonctions de distribution ne représentent pas toujours correctement la composition réelle du mélange liquide. Il est donc nécessaire de comparer les prédictions de cette dernière modélisation avec celles de la modélisation par composants discrets.

Différentes modélisations existantes pour le transport de l'énergie et des espèces dans la goutte ont aussi été présentées. Le modèle « thin skin », le plus simple, considère que la température de surface et les profils de composition dans la goutte sont constants durant toute la durée de vie de la goutte. Ensuite, le modèle à diffusion infinie où la température et la composition de la goutte sont uniformes mais varient au cours du temps. Ce modèle est adapté pour les cas où la durée de vie de la goutte est largement supérieure au temps de diffusion des espèces liquides. Dans le modèle à diffusion limitée, la répartition de la température et de la composition est à symétrie sphérique et est gouvernée par les équations de diffusion pure sans tenir compte des effets convectifs. Il est donc utilisable dans le cas où le nombre de *Reynolds* particulaire est faible (de l'ordre de l'unité). Une extension de ce modèle, le modèle à diffusion effective, multiplie les coefficients de diffusion de l'énergie et des espèces par des facteurs correctifs pour tenir compte des effets convectifs à l'intérieur de la goutte lorsque le nombre de *Reynolds* particulaire augmente. Enfin, le modèle à « vortex de Hill », à symétrie axiale, modélise entièrement les effets convectifs mais est très exigeants en temps de calcul et donc, n'est pas intéressant pour prédire l'évaporation d'un brouillard de gouttes.

Afin de valider ces différentes modélisations, certaines mesures expérimentales ont été effectuées. La plupart d'entre elles sont réalisées pour des faibles températures de l'air (20 à 30°C) où un effet de distillation est observé. C'est à dire que pour une goutte bi-composants, le composant le plus volatile s'évapore bien plus vite que le second composant. Comme l'évaporation est suffisamment lente, les effets de diffusion dans le liquide renouvellent à la surface de la goutte l'espèce la plus volatile. Après un certain temps, cette espèce est totalement évaporée et le liquide à l'origine bi-composants devient alors mono-composant. Ce passage se traduit par une rupture de pente dans la décroissance de la surface de la goutte. Ce phénomène de distillation est propre au caractère multi-composants des gouttes et ne peut être reproduit par un liquide mono-composant.

Dans ces conditions, le modèle à diffusion infinie, supposant des profils de température et de composition uniformes, est capable de prédire une bonne décroissance de la taille des gouttes, tout comme le modèle à diffusion effective qui, de plus, prévoit une bonne évolution des fractions volumiques dans des mélanges de 2 ou 4 composants.

A température ambiante modérée (400K), le phénomène de distillation est aussi observé et les modèles à diffusion infinie et limitée prévoient encore une bonne décroissance du diamètre des gouttes, contrairement au modèle « thin skin ».

A pression élevée (20, 30 et 40 bars) et température plus élevée (550 et 650K), le modèle à diffusion limitée est encore capable de prédire une bonne décroissance de la taille des gouttes. Cependant, il ne faut plus utiliser la loi de Raoult et il est nécessaire de considérer les effets de gaz réels.

L'objectif de ce travail est multiple. Tout d'abord, il est primordial de compléter la base de données expérimentale puisque seule l'évolution de la taille des gouttes pour de faibles températures ambiantes a été validée. Des moyens expérimentaux présentés dans le Chapitre 2 seront alors exploités pour mesurer l'évolution de la taille et de la température moyenne de gouttes bi-composants (acétone et alcools) en évaporation dans un milieu à température élevée. Ces mesures seront alors analysées dans le Chapitre 3 et l'influence de la composition des gouttes sera alors mise en évidence.

Ensuite, le développement des modèles sera détaillé dans le Chapitre 4. Certaines améliorations seront aussi apportées au modèle à thermodynamique continue concernant la composition de la vapeur à la surface. La littérature présente rarement les propriétés physiques des différents composants. Pour les composants discrets, il est tout de même possible de trouver quelques propriétés pour les n-alcanes ou quelques rares composants comme le benzène ou le cyclohexane. Pour les groupes de composants dans les modèles à thermodynamique continue, certaines corrélations existent uniquement pour les n-alcanes, les alkylbenzènes et les alkylnaphtalènes. Ces dernières restent toutefois incomplètes et imprécises ou inadaptées pour certains carburants. Des propriétés physiques précises seront

donc proposées pour de nombreux composants ou groupes de composants afin de pouvoir simuler l'évaporation de carburants réels.

Dans le Chapitre 5, les mesures expérimentales présentées dans le Chapitre 3 seront comparées aux résultats numériques et serviront à valider partiellement les modèles développés.

Les performances (résultats et temps de calcul) des différents modèles seront ensuite confrontées pour des carburants réels dans le Chapitre 6. Des simplifications des modèles seront ensuite proposées pour tenter de réduire le temps de calcul tout en gardant des résultats satisfaisants.

Le septième et dernier Chapitre mettra en évidence l'intérêt de considérer l'aspect multi-composants des carburants en étudiant l'influence de la composition du liquide sur la combustion d'un nuage de gouttes.

CHAPITRE 2 MOYENS EXPERIMENTAUX

Les modèles d'évaporation de gouttes multi-composants manquent cruellement de validations expérimentales. Les mesures concernent principalement la décroissance du diamètre pour des températures ambiantes faibles ou modérées. Il reste donc à valider cette décroissance pour des environnements à haute température. De plus, les techniques habituellement utilisées pour mesurer la température des gouttes mono-composant ne peuvent plus être utilisées pour des gouttes multi-composants si l'évolution de la composition du liquide n'est pas connue.

Des bancs de mesure existants ont donc été exploités pour valider les prévisions numériques des différents modèles existants. Le premier banc (ONERA-DMAE) est constitué d'un générateur de gouttes calibrées, d'un déviateur électrostatique de gouttes pour augmenter la distance entre les gouttes (et ainsi atteindre le cas de la goutte isolée) et d'un système de mesure du diamètre par interférométrie laser. Cette dernière technique permet aussi de connaître la température moyenne de gouttes mono-composants. Cependant l'addition d'un deuxième composant ajoute une inconnue (la fraction d'un des deux composants) et ne permet pas de remonter à la mesure de la température. Une plaque chauffante a été ajoutée afin d'effectuer les mesures à des températures ambiantes élevées.

Le banc du LEMTA (CNRS UMR 7563) a été utilisé lors d'une étude de faisabilité à Nancy. Il est lui aussi constitué d'un générateur de gouttes calibrées. Il dispose également d'un système de mesure de température moyenne des gouttes mono-composants par Fluorescence Induite par Laser (FIL) appliquée sur la phase liquide [22]. Ce dernier a dû être modifié lors de cette étude de faisabilité pour tenter de mesurer pour la première fois l'évolution de la température de gouttes bi-composants.

Ce chapitre présente donc les bancs utilisés durant ces travaux, c'est à dire le système de génération de gouttes monodisperses, les différents systèmes de chauffage de l'air ambiant ainsi que les différentes techniques de mesure employées.

2.1 Banc expérimental de l'ONERA - DMAE

2.1.1 Présentation générale

Le banc de combustion de gouttes de l'ONERA–DMAE a permis de mesurer l'évolution du diamètre de gouttes bi-composants isolées en évaporation dans un environnement à haute température. Pour générer les gouttes, l'injecteur de gouttes monodisperses (1 sur la Figure 2.1 et la Figure 2.2) a été utilisé. Cependant les gouttes sont trop proches les unes des autres pour être considérées comme isolées et le déviateur électrostatique de gouttes (2 sur la Figure 2.2) a dû être ajouté pour augmenter la distance entre elles. Une plaque chauffante (3 sur la Figure 2.2) a aussi été installée afin de permettre une évaporation importante des gouttes.

Pour mesurer la taille des gouttes, l'interfrange angulaire et l'arc-en-ciel monochromatique générés par l'intersection entre le faisceau laser et les gouttes sont enregistrés par des caméras linéaires CCD (respectivement 4 et 5 sur la Figure 2.1) puis exploités. L'espacement entre les gouttes et leur vitesse sont obtenus par ombroscopie. C'est à dire que l'ombre des gouttes, générée par leur passage devant la source de lumière blanche (6 sur la Figure 2.1), est visualisée à l'aide du binoculaire et de la caméra intensifiée (respectivement 7 et 8 sur la Figure 2.1).

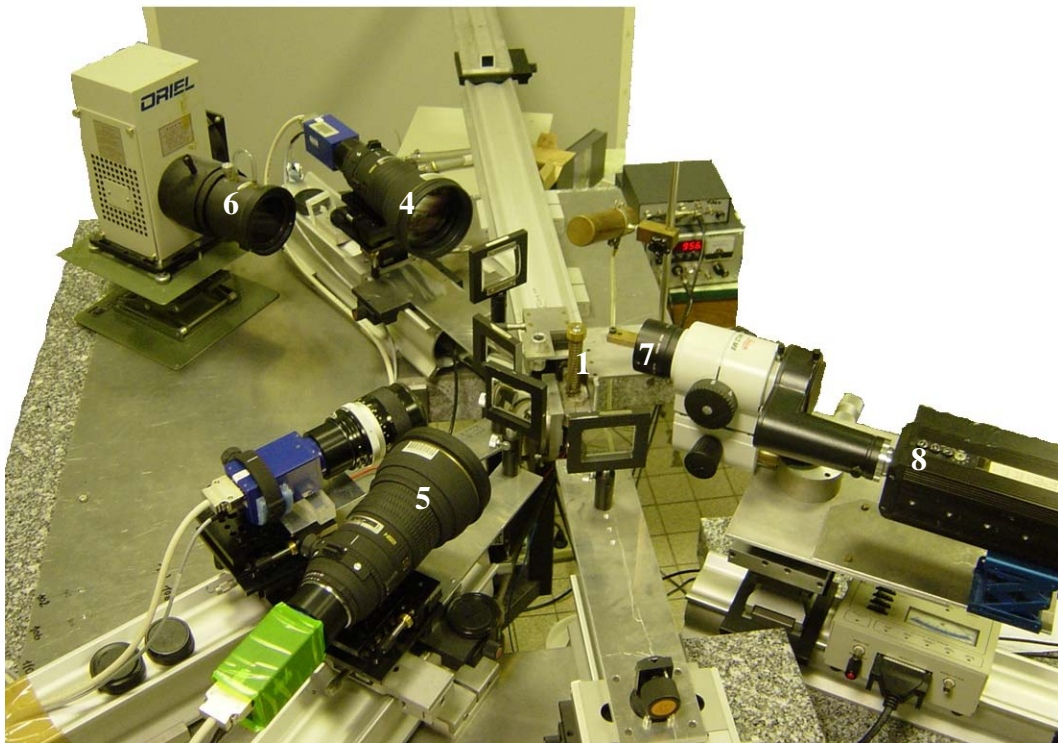


Figure 2.1 : Banc expérimental de l'ONERA – DMAE, dépourvu du déviateur et de la plaque chauffante

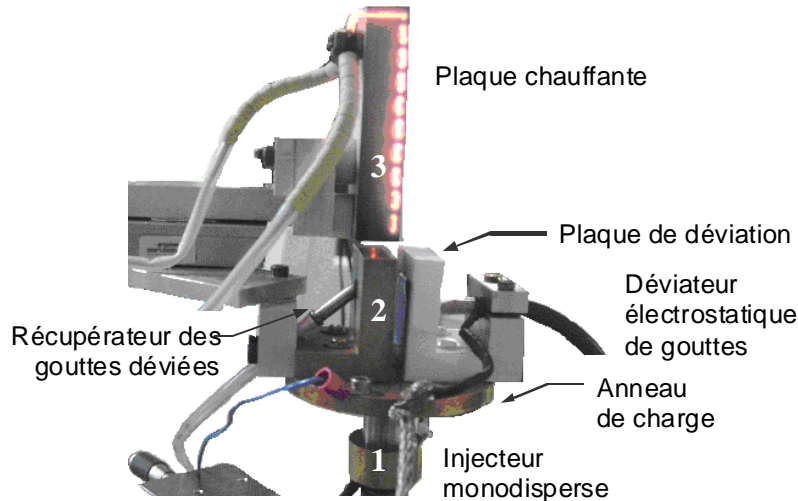


Figure 2.2 : Déviateur électrostatique de gouttes et plaque chauffante

2.1.2 Dispositif de génération de gouttes

L'injecteur de gouttes monodisperses

- **Génération du jet de gouttes monodisperses**

Un jet de gouttes est dit monodisperse si toutes les gouttes ont la même taille, la même vitesse et le même espacement à l'injection. De ce fait, toutes les gouttes auront des grandeurs physiques identiques (vitesse, champ de température, diamètre) lors de leur passage à une position donnée. Ainsi, expérimentalement des moyennes très précises peuvent être réalisées rapidement. D'autre part, pour suivre l'évolution temporelle d'une grandeur physique, il suffit de se déplacer par rapport à la sortie de l'injecteur. Les difficultés liées au suivi de gouttes sont supprimées par une simple exploration spatiale du jet de gouttes. On évalue le temps Δt séparant deux points de mesure consécutifs aux hauteurs h_i et h_{i+1} , respectivement aux instants t_i et t_{i+1} , à partir de la mesure de la vitesse $Vg(h)$ des gouttes :

$$\Delta t = t_{i+1} - t_i = \int_{h_i}^{h_{i+1}} \frac{dh}{Vg(h)} \quad (2.1)$$

L'avantage d'un injecteur monodisperse réside dans la possibilité de fixer, avec précision, les conditions initiales d'injection (taille, vitesse et température d'injection des gouttes).

Le principe du fonctionnement de l'injecteur [23,24] est le suivant : une céramique piézo-électrique, alimentée par un générateur de fréquence, crée une instabilité mécanique dite de *Rayleigh* à la fréquence d'excitation du générateur [25]. Cette perturbation se propage le long du corps de l'injecteur puis est transmise au jet liquide sortant d'un orifice calibré. Elle croît ensuite jusqu'à la désintégration du jet liquide en un jet de gouttes monodisperses. Chaque

impulsion électrique sur la céramique crée une goutte. On connaît donc exactement la fréquence de création des gouttes à partir de celle du générateur. La cassure du jet liquide en gouttes s'accompagne quelquefois de l'apparition de satellites mais ceux-ci souvent coalescent rapidement avec la goutte suivante et n'ont donc pas trop d'influence sur le jet.

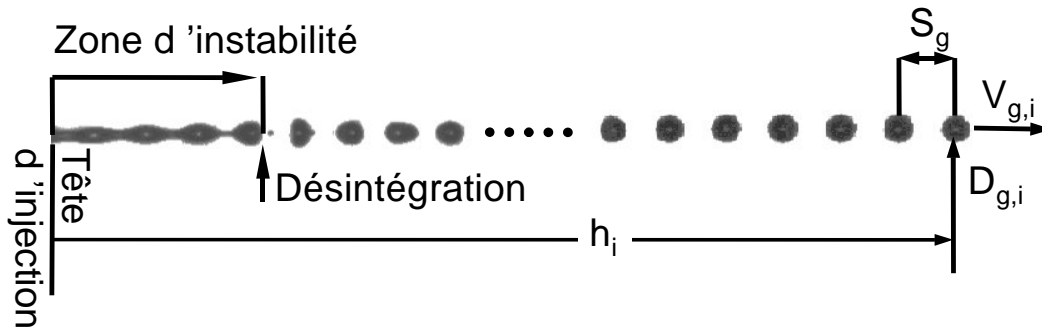


Figure 2.3 : Schéma de désintégration d'un jet monodisperse

Il est à noter que le jet de gouttes monodisperses est obtenu à un débit donné pour certaines plages de fréquence d'excitation de la céramique. Dans ce cas une goutte est produite à chaque période d'excitation. Le jet de gouttes est alors régulier (Figure 2.3). Pour assurer un débit de liquide constant et stable pendant la durée des expériences, une différence de pression est établie entre un réservoir d'air comprimé de grande capacité et la sortie de l'injecteur. Cela permet de s'affranchir des variations de pression du réseau d'air comprimé ou d'un mécanisme de régulation.

La régulation en température du générateur est assurée par un serpentin bobiné autour du corps de l'injecteur dans lequel circule un fluide thermostaté. Le serpentin permet de chauffer ou de refroidir l'injecteur suivant la consigne du bain thermostaté. La température d'injection est mesurée par un thermocouple de faible diamètre, plongé dans le liquide, et placé à proximité de l'orifice de sortie.

- **Caractéristiques d'un jet de gouttes monodisperses**

Les caractéristiques des gouttes, c'est à dire le diamètre D_g , la vitesse V_g et la distance entre gouttes S_g , peuvent être ajustées en fonction du débit d'injection Q_i , du diamètre de l'orifice ϕ_0 et de la fréquence f de génération des gouttes (Figure 2.4).

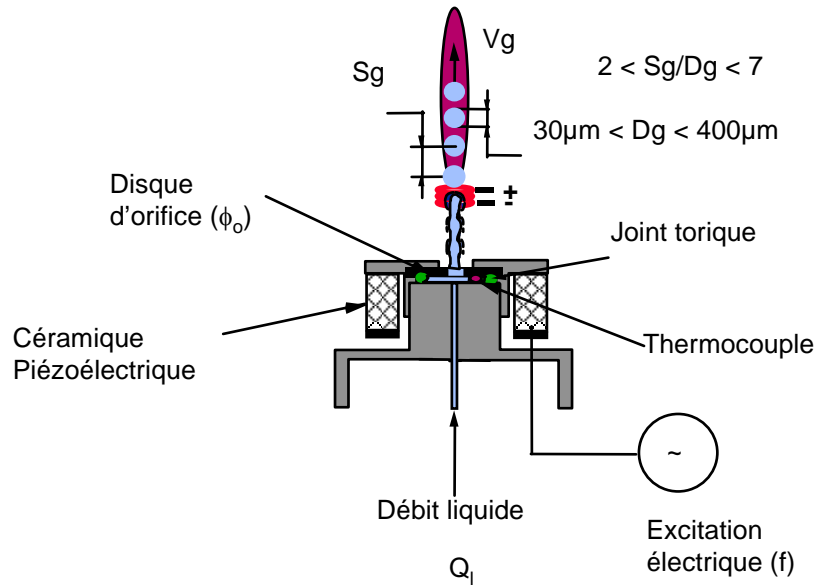


Figure 2.4 : Schéma du générateur de gouttes

L'équation de conservation de la masse permet d'exprimer le débit liquide Q_l sortant :

$$Q_l = \frac{4\pi}{3} \frac{Dg^3}{8} f_{ex} \quad (2.2)$$

soit

$$Dg = \sqrt[3]{\frac{6 Q_l}{\pi f_{ex}}} \quad (2.3)$$

L'équation de conservation du débit permet d'exprimer la vitesse d'injection du liquide en sortie de l'orifice calibré :

$$Q_l = \frac{\pi}{4} \phi_o^2 V_{inj} \quad (2.4)$$

En négligeant la perte de quantité de mouvement au cours de la formation du jet et durant le processus de désintégration du jet, la vitesse des gouttes V_g est égale à la vitesse débitante V_{inj} .

$$V_g = \frac{4Q_l}{\pi \phi_o^2} \quad (2.5)$$

La distance entre gouttes S_g est :

$$S_g = \frac{V_{inj}}{f_{ex}} = \frac{V_g}{f_{ex}} \quad (2.6)$$

La fréquence d'excitation de la céramique doit être choisie dans une plage définie par la théorie de *Rayleigh* [25]. En effet, il existe une longueur d'onde optimale pour laquelle la désintégration du jet est la plus efficace :

$$\lambda_{opt} \approx 4,51 \phi_o \quad (2.7)$$

Le diamètre d'une goutte correspondant à la longueur d'onde optimale est alors :

$$Dg = 1,9 \phi_o \quad (2.8)$$

La fréquence optimale pour laquelle le jet de gouttes a sa plus longue structure cohérente est fonction du diamètre de l'orifice de sortie et de la vitesse d'injection :

$$f_{opt} \approx 0,198 \frac{V_{inj}}{\phi_o} \quad (2.9)$$

Des gouttes monodisperses peuvent aussi être générées avec des couples débit fréquence différents de cette valeur. Dans ce cas, il convient de vérifier que le jet de gouttes est bien monodisperse. Le rapport $C = Sg/Dg$ définit le rapport de la distance entre les gouttes sur le diamètre des gouttes. La plage de variation de ce dernier est comprise entre 2 et 7. Elle représente la principale limitation de ce dispositif de génération de gouttes. Pour pouvoir obtenir le cas de la goutte isolée, il a été nécessaire d'utiliser un système permettant d'augmenter la distance entre gouttes.

Le déviateur électrostatique de gouttes

Pour augmenter la distance entre les gouttes sans perturber le jet et ainsi atteindre le cas de la goutte isolée, le déviateur électrostatique de gouttes est utilisé [26].

Le déviateur est constitué de deux éléments distincts : l'anneau de charge et les plaques de déviation (Figure 2.5).

L'anneau en cuivre est employé pour charger les gouttes. C'est un anneau d'un diamètre de $600\mu\text{m}$. Il est placé à l'endroit où les gouttes se détachent du jet liquide. Des impulsions électriques positives sont envoyées en phase avec le détachement des gouttes, avec la possibilité de régler la tension de 0 à 2000 volts. La forme particulière du jet liquide à cet endroit crée un effet de pointe qui facilite l'échange de charges électriques entre l'anneau de charge et le liquide porté à la masse par l'intermédiaire du corps de l'injecteur. Les gouttes ont alors une charge négative par rapport au potentiel de référence.

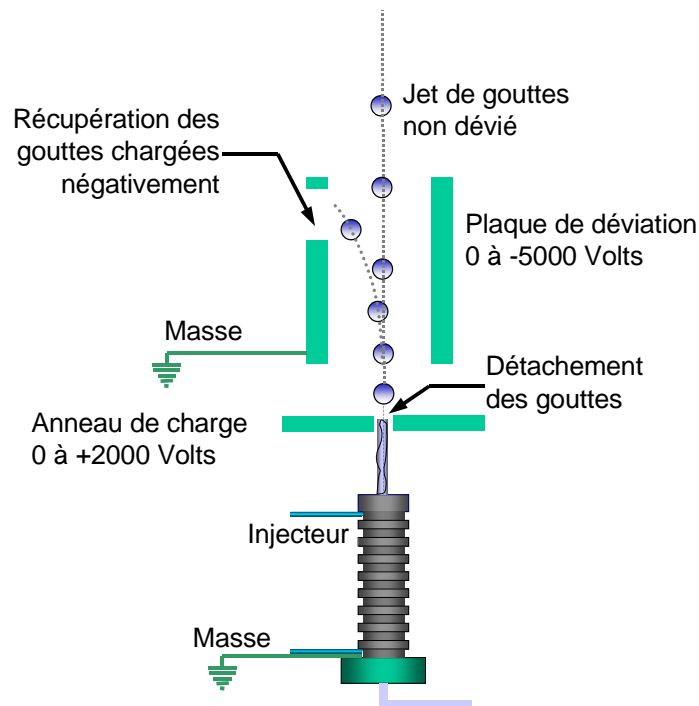


Figure 2.5 : Principe du déviateur électrostatique de gouttes [26]

Le jet de gouttes traverse ensuite la seconde partie du système constituée par les plaques déviateuses. En imposant une différence de potentiel constante (~ 5000 Volts) entre deux plaques parallèles, on établit un champ négatif de force électrostatique entre ces deux plaques. Les gouttes chargées négativement sont alors déviées de leur trajectoire initiale. En sortie du champ électrique, les gouttes reprennent une trajectoire rectiligne et sont récupérées dans un tube pour éviter de perturber les systèmes de mesure.



Figure 2.6: déviation de 2 gouttes sur 3

Sur l'anneau de charge, l'impulsion électrique positive est contrôlée par un diviseur de fréquence pour régler le nombre de gouttes chargées. Il est synchronisé par le signal appliqué à la céramique qui est synchronisée de la formation des gouttes. Un système de commutateurs permet de choisir le nombre de gouttes à charger (1 goutte sur 2, 2 gouttes sur 3 (voir la Figure 2.6), ..., jusqu'à 64 gouttes sur 65). Il est ensuite possible d'ajuster précisément grâce

à un déphaseur le départ des impulsions de l'anneau pour être parfaitement en phase avec le détachement de gouttes.

Il est nécessaire d'augmenter la conductivité du liquide et sa faculté à se polariser pour pouvoir charger convenablement les gouttes. Cela a été réalisé en ajoutant 0.03% d'une solution d'eau et de soude (13,3g de soude par litre d'eau) à l'éthanol pour toutes les expériences.

La plaque chauffante et la couche limite thermique

Dans le cadre de cette étude, nous avons mis au point une plaque chauffante pour évaporer au maximum des gouttes isolées. Cette plaque est placée verticalement au dessus de l'injecteur et du déviateur de gouttes (Figure 2.2).

Il s'agit d'une plaque en céramique, matériau qui peut supporter des hautes températures, dans laquelle passe un fil résistif alimenté par un courant électrique qui provoque un chauffage par effet Joule. Le flux de chaleur dégagé par la surface de la plaque est rendu à peu près uniforme en multipliant les passages du fil dans la céramique.

La plaque réalisée a une largeur de 2,5cm et une hauteur de 10cm. Dans cette étude, le générateur de courant délivre 9A et la résistance totale du fil résistif est de $3,7 \Omega$. La distance entre le jet et la plaque est fixée à 0,8mm.

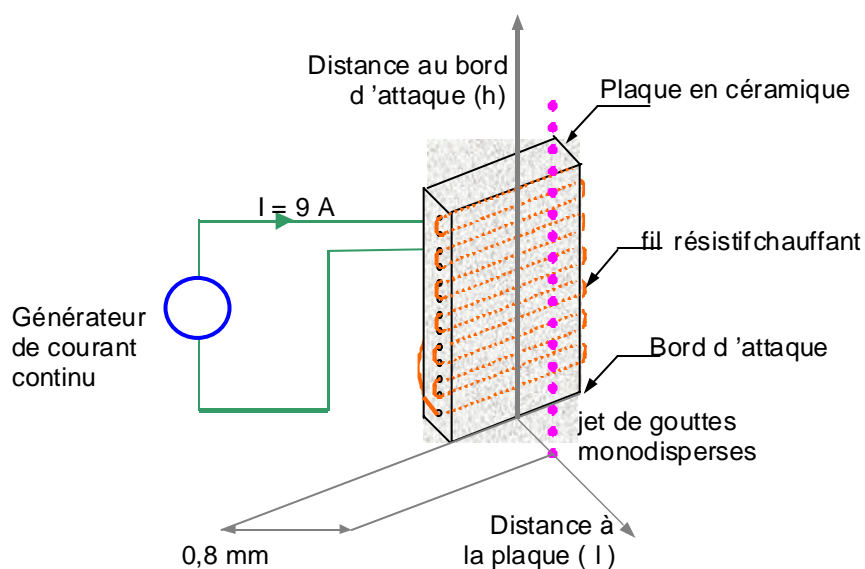


Figure 2.7 : Schéma de la plaque chauffante

La connaissance de la température de l'air est nécessaire pour évaluer le taux d'évaporation des gouttes. La mesure de la température dans la couche limite de la plaque se fait grâce à un thermocouple de type K. Le déplacement du thermocouple disposé parallèlement à la plaque est assuré dans la direction perpendiculaire à la plaque chaude par une vis micrométrique.

Nous avons mesuré la température à différentes hauteurs h (tous les 5mm) par rapport au bord d'attaque. Le profil de température mesuré est donné sur la Figure 2.8. Un pallier compris entre 550 et 650°C est rapidement atteint.

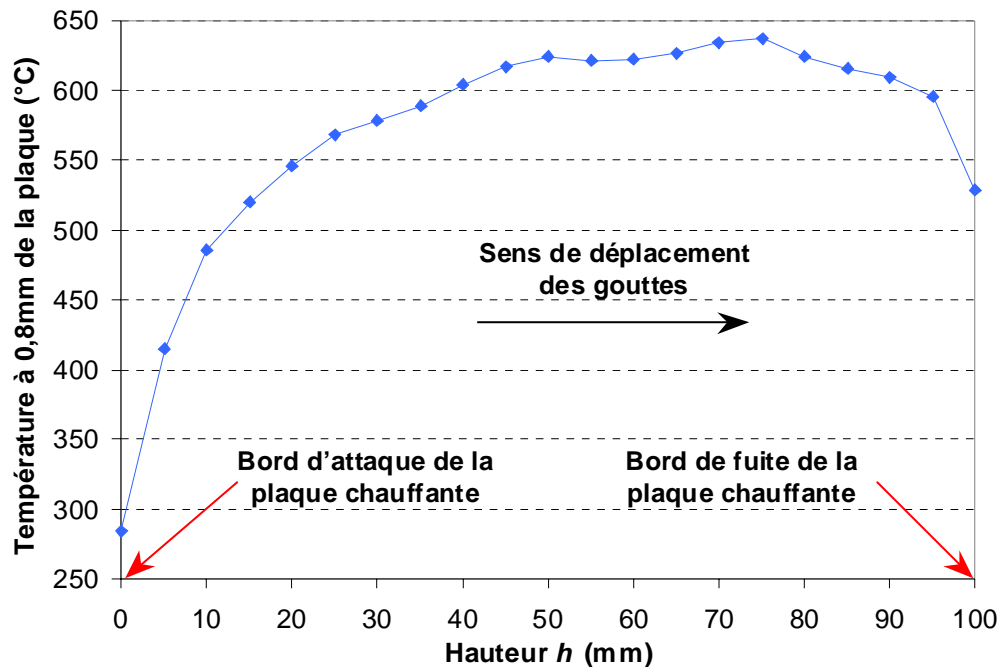


Figure 2.8 : Profil de température de l'air à 0,8 mm de la plaque chauffante

2.1.3 Techniques de mesure

Mesure de la vitesse des gouttes

La technique est basée sur le traitement d'image. Le jet est visualisé par ombroscopie. Une source de lumière blanche, continue et cohérente est dirigée vers les gouttes. Un système de visualisation est placé en diffusion avant à 180° du dispositif d'éclairage. Il est constitué d'un binoculaire pour agrandir jusqu'à cinquante fois l'image obtenue et d'une caméra intensifiée. L'obturateur de la caméra est synchronisé par rapport au signal du diviseur de fréquence. Le jet étant monodisperse, les gouttes apparaissent alors figées sur le moniteur, noires sur fond clair. La présence d'un point blanc au centre de l'image de la goutte témoigne de la bonne focalisation du binoculaire par rapport aux gouttes.

Un système de traitement d'image permet de déterminer la distance entre deux gouttes au point de mesure. Elle est reliée à la vitesse par :

$$Vg = Sg \cdot f_{ex} \quad (2.10)$$

où f_{ex} est la fréquence de génération des gouttes.

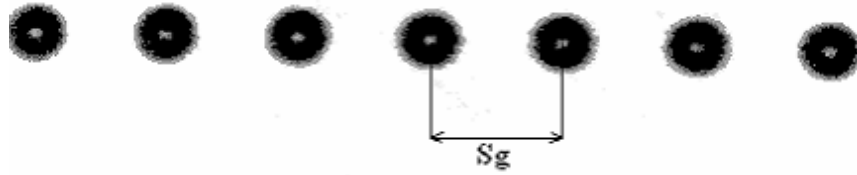


Figure 2.9 : Mesure de la distance entre deux gouttes par traitement vidéo

L'écart type le plus important obtenu sur 500 images est de 1,5%, ce qui correspond aux mesures les plus hautes dans le jet.

Mesures optiques du diamètre

- **Phénomènes d'interactions entre une goutte et un faisceau laser**

Pour mesurer la taille et la température des gouttes sans pour autant modifier leur comportement et le milieu environnant, des techniques de mesure optiques non intrusives basées sur l'interférométrie laser ont été utilisées sur ce type de jet. Lorsqu'un rayon lumineux rencontre une particule d'indice homogène sphérique, il se produit des interactions entre ce rayon et la surface de la goutte. A chacune de ces interactions, une partie du rayon est réfléchi et une partie est transmise. Il est possible de distinguer deux phénomènes de diffusion de rayons lumineux traversant une goutte transparente :

- diffusion avant
- diffusion arrière ou rétro-diffusion

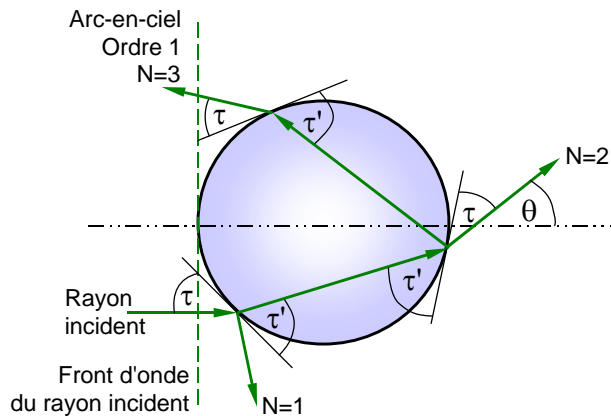


Figure 2.10 : Rayons lumineux traversant une goutte d'indice de réfraction constant

Lorsqu'un faisceau laser traverse une goutte, la superposition de tous les rayons ' $N=1$ ' et ' $N=2$ ' (Figure 2.10) crée un réseau d'interférences en diffusion avant. N correspond au nombre d'interactions entre le rayon et la surface de diffusion de lumière. Ce réseau d'interférences est compris entre 30° et 80° par rapport au faisceau incident. L'angle correspondant entre deux franges brillantes ou sombres dépend du diamètre des gouttes et de leur indice de réfraction. En diffusion arrière, un arc-en-ciel peut être observé pour un angle

compris entre 120° et 170° . La position arrière de cet arc-en-ciel est aussi fonction de l'indice de réfraction et du diamètre de la goutte. En pratique, l'arc-en-ciel du premier ordre peut facilement être détecté. Lorsque l'ordre de l'arc-en-ciel augmente, l'intensité de ces arcs-en-ciel diminue. La lumière diffusée par une particule sphérique en fonction de l'angle de diffusion est tracée sur la Figure 2.11.

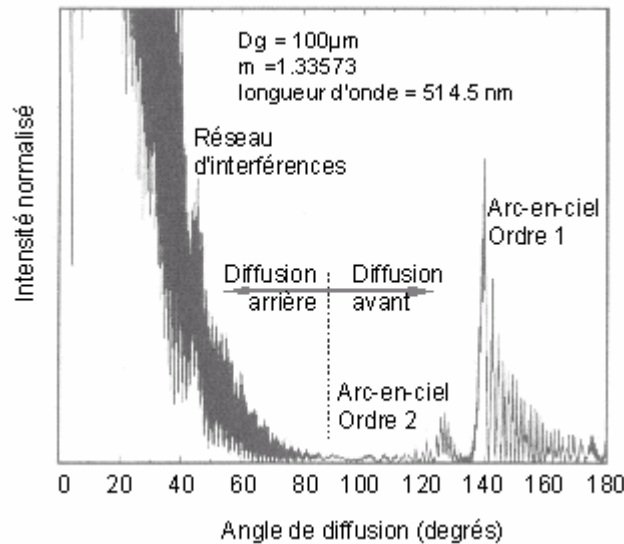


Figure 2.11 : Diffusion angulaire dans le champ lointain autour de particule sphérique calculée par théorie de Lorenz-Mie [27,28]

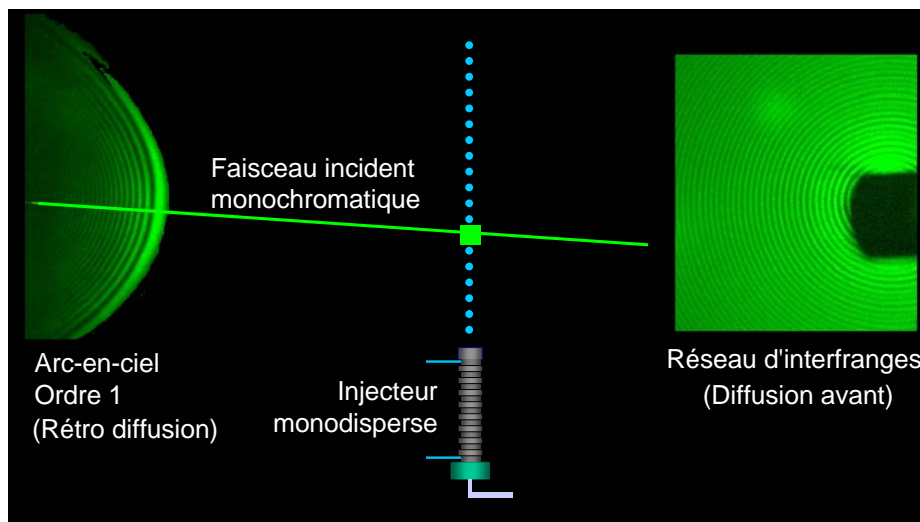


Figure 2.12 : visualisation des différents phénomènes optiques

La photographie de ces deux phénomènes est représentée sur la Figure 2.12. Un rayon laser venant de la gauche est focalisé sur un jet de gouttes vertical au centre de la photographie. Dans notre cas un laser Argon a été employé (longueur d'onde $\lambda_{laser} = 514,5$ nm) en raison de sa puissance (2 Watts). Cette puissance était nécessaire pour obtenir suffisamment de lumière

diffusée vers les capteurs des caméras. Les interfranges apparaissent sur la droite en diffusion avant. L'arc-en-ciel d'ordre 1 se retrouve en diffusion arrière.

L'interprétation de ces deux phénomènes de diffusion (Réseau d'interfranges et arc-en-ciel) va permettre de déterminer le diamètre et l'indice de réfraction moyen des gouttes. Dans le cas de gouttes mono-composant, l'indice de réfraction est fonction de sa température. Pour des gouttes multi-composants, il est nécessaire de vérifier que l'indice de réfraction ne dépend pas de la composition du liquide. Dans ce cas, il ne se serait plus possible de remonter à la valeur de la température de la goutte en mesurant la valeur de l'indice de réfraction, puisque la composition de la goutte varie au cours de l'évaporation et serait donc inconnue.

- **Diffusion avant : Réseau d'interfranges**

La diffusion d'une onde plane par une particule sphérique homogène et isotrope a été étudiée par *Mie* [27]. La distribution de l'intensité de la lumière diffusée suivant l'angle de diffusion θ et de l'angle de polarisation dépend de l'indice de réfraction complexe du liquide $\bar{m} = m + in$ ainsi que du paramètre de taille α défini par :

$$\alpha = \frac{\pi Dg}{\lambda_{laser}} \quad (2.11)$$

où λ_{laser} est la longueur d'onde du faisceau laser (= 514,5 nm)

Le réseau d'interférences a été étudié par *Massoli* [29]. Il a calculé la diffusion de la lumière par une particule sphérique pour différents diamètres ($5\mu\text{m} < Dg < 100\mu\text{m}$) et pour trois indices de réfraction complexes du liquide ($m=1,3+i0,0$, $1,5+i0,0$ et $1,6+i0,0$). La plage de l'indice de réfraction étudiée est suffisamment large, en pratique, pour correspondre à tous les liquides présents dans la nature. Sur la Figure 2.13, il apparaît que la valeur de l'interfrange angulaire $\Delta\theta$ ne varie pas avec l'angle de diffusion θ compris entre 30° et 80° .

Massoli [29] montre sur la Figure 2.13 que le diamètre des gouttes influe sur la détermination de la valeur de l'interfrange angulaire en comparaison avec l'indice de réfraction. Il remarque qu'un angle de diffusion de soixante degrés donne un résultat indépendant de l'indice dans la goutte. Dans cette région, Il propose une relation entre l'interfrange angulaire et le diamètre par la corrélation suivante :

$$\Delta\theta \approx \frac{180^\circ}{\alpha} \quad (2.12)$$

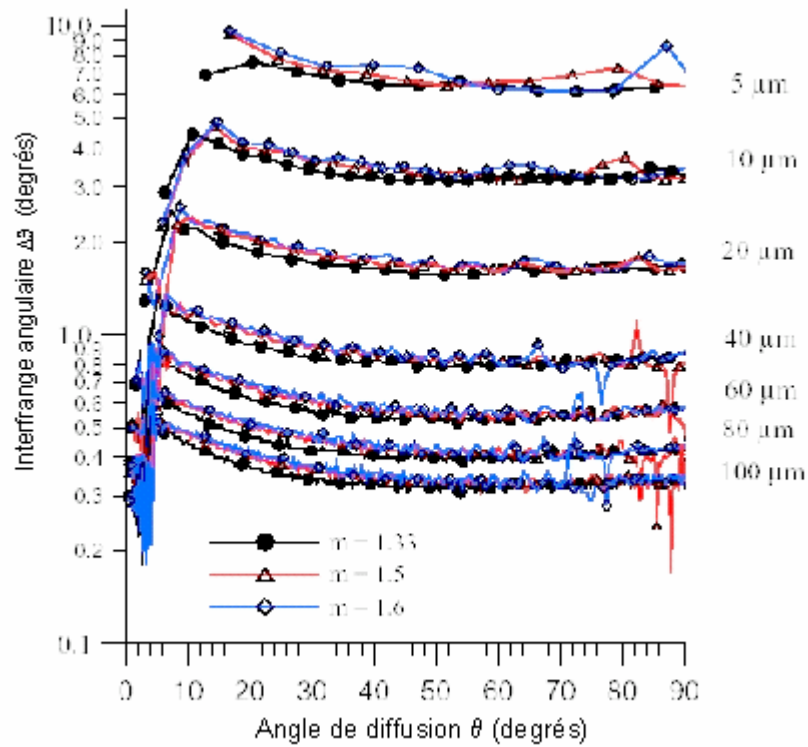


Figure 2.13 : Variation de l'interfrange angulaire en fonction de l'angle de diffusion pour différents diamètres de gouttes [29]

Sur ce même principe, la technique de mesure de la taille de gouttes basée sur le phénomène de diffusion avant a d'abord été développée par *König* [23]. Pour $\alpha \gg 1$, la répartition de l'intensité de la lumière peut être décrite par les lois de l'optique géométrique. Cette condition est pleinement remplie dans notre cas puisque le diamètre des gouttes est voisin de $100\mu\text{m}$ tandis que la longueur d'onde λ_{laser} du laser est de $514,5\text{ nm}$.

La distribution de la lumière dans la direction avant peut être exprimée par la théorie de l'optique géométrique donnant l'expression du diamètre de la goutte en fonction de l'interfrange angulaire $\Delta\theta$:

$$Dg = \frac{2\lambda_{laser}}{\Delta\theta \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{m \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sqrt{1 - 2m \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + m^2}} \right]} \quad (2.13)$$

où λ_{laser} est la longueur d'onde de la lumière incidente ($= 514,5\text{ nm}$), θ est l'angle d'observation par rapport à la direction du faisceau laser incident, $\Delta\theta$ est l'interfrange angulaire et m est l'indice de réfraction.

• **Incertitudes sur la mesure du diamètre**

A partir de la relation (2.13) qui relie le diamètre des gouttes aux différentes grandeurs mesurables ($\theta, \Delta\theta$), il est possible, en appliquant la méthode de la dérivée logarithmique d'estimer, l'incertitude sur la mesure du diamètre des gouttes, comme présenté dans la thèse d'Adam [30] :

$$\frac{\Delta Dg}{Dg} = \frac{\Delta \lambda_{laser}}{\lambda_{laser}} + \frac{\Delta L}{L} + \frac{\Delta I}{I} + \frac{\Delta m}{m} \left| \frac{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(m \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - 1 \right)}{\left(m^2 + 1 - 2m \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \right)^{\frac{3}{2}}} \right| + \frac{\Delta \theta}{2\theta} \left| \frac{m \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sqrt{1 + m^2 - 2m \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}} - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(1 + \frac{m \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\left(m^2 + 1 - 2m \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \right)^{\frac{3}{2}}} \right) \right| \quad (2.14)$$

avec $\Delta\theta \approx \frac{I}{L}$ d'où L désigne la distance entre le capteur CCD et le jet de gouttes, I la mesure de l'interfrange toujours au niveau du capteur.

L'incertitude relative sur le diamètre des gouttes est calculée en considérant :

$L = 375\text{mm}$, $\Delta L = 1\text{mm}$, $\lambda_{laser} = 514,5\text{nm}$, $\Delta \lambda_{laser} = 0,1 \cdot 10^{-9}\text{nm}$, $m = 1,36$, $\Delta m = 16 \cdot 10^{-5}$, $\theta = 30^\circ$ et $\Delta \theta = 0,5^\circ$. Pour finir, $\frac{\Delta I}{I} = \frac{5}{2000}$ en considérant une erreur de 5 pixels sur la position du dernier maximum vers le 2000^{ème} pixels de la barrette CCD.

On obtient alors $\frac{\Delta Dg}{Dg} \approx 1,5\%$.

La mesure du diamètre des gouttes est assez précise. La précision est encore meilleure si on s'intéresse seulement aux variations relatives de diamètre comme c'est le cas dans cette étude.

• **Dispositifs optiques et traitement des grandeurs mesurées**

Lorsque le jet de gouttes est monodisperse, les réseaux d'interférences et l'arc-en-ciel sont alors stationnaires. L'acquisition de ces deux phénomènes est effectuée par deux caméras CCD linéaires. Elles disposent d'une résolution de 2048 pixels dont la surface est de $14\mu\text{m} \times 14\mu\text{m}$.

Massoli [31] a montré à partir de simulations numériques que la mesure du diamètre est peu sensible à la présence d'un gradient d'indice qui pourrait être engendré par un gradient de température, à condition de réaliser les observations sous un angle de diffusion proche de 30° . Ceci est effectivement le cas du dispositif expérimental. Le signal ainsi perçu se présente sous la forme d'une sinusoïde bruitée (Figure 2.14).

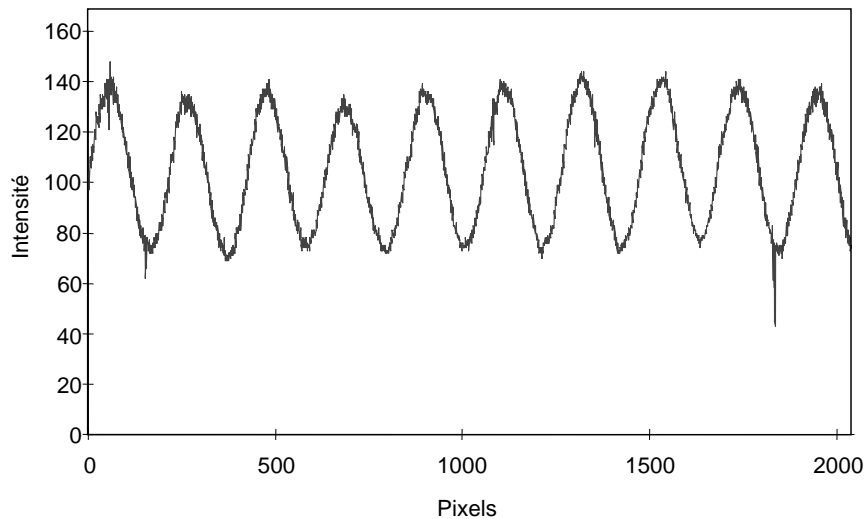


Figure 2.14 : Signal brut du réseau d'interférences vu par la caméra linéaire CCD

Le traitement, par une fonction d'auto-corrélation, de ce signal numérisé permet de déterminer $\Delta\Theta$. Il est en effet intéressant de travailler sur la fonction d'auto-corrélation, car elle filtre le signal qui est bruité, ce qui rend difficile la détermination précise des maxima sur le signal brut.

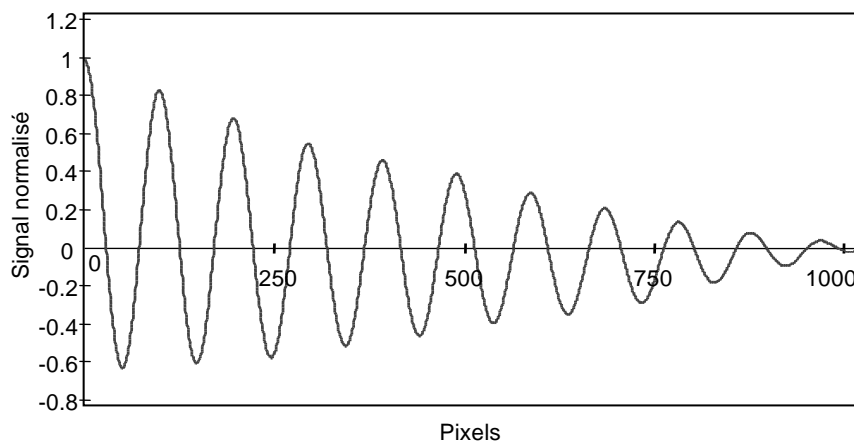


Figure 2.15 : Signal auto-corrélé du réseau d'interférence

En repérant le nombre de maxima du signal ainsi obtenu (Figure 2.15), on peut déterminer la période du signal et donc l'interfrange angulaire $\Delta\Theta$.

- **Fixation de la valeur de l'indice de réfraction**

Nous avons mesuré les indices de réfraction pour les mélanges étudiés expérimentalement durant ces travaux. Tout d'abord, les indices obtenus pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol (Figure 2.16 et Figure 2.17) montrent clairement que l'indice dépend de la composition du liquide. Une expression de l'indice de réfraction variant linéairement avec la température T en ($^{\circ}\text{C}$) et la fraction massique d'éthanol liquide $Y_{etha,l}$ est alors définie :

$$m(T, Y_{etha,l}) = 1,409718 - (3,7976T + 368,49Y_{etha,l}) \cdot 10^{-4} \quad (2.15)$$

Le pourcentage d'erreur maximal de cette corrélation est de 0,05%.

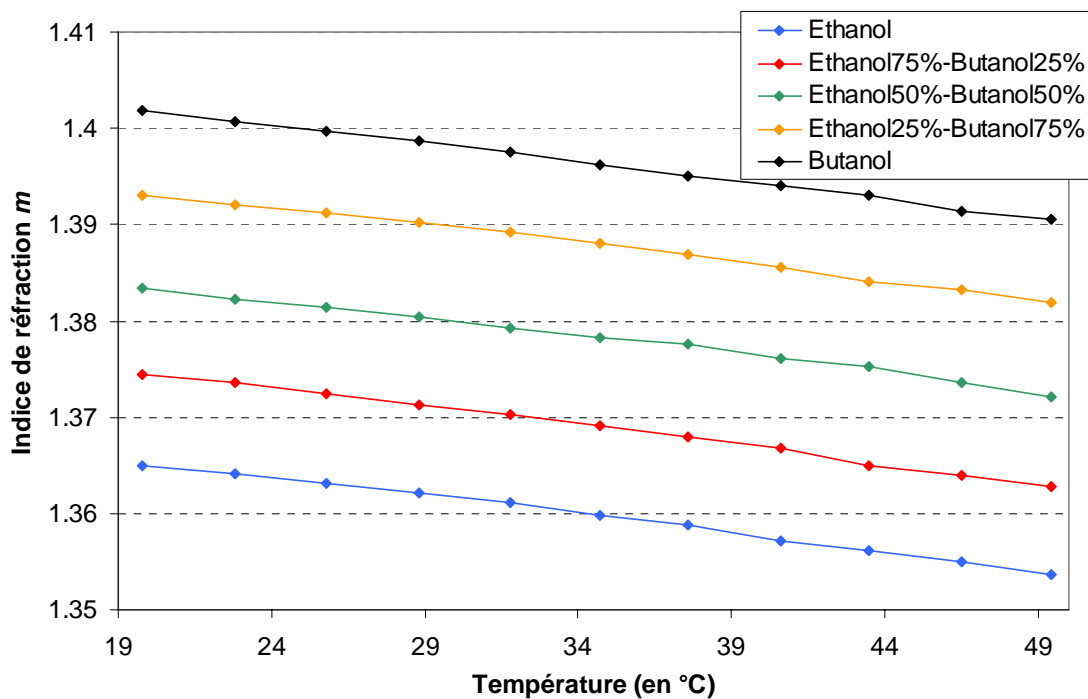


Figure 2.16 : Evolution de l'indice de réfraction des mélanges d'éthanol et de 1-butanol en fonction de la température

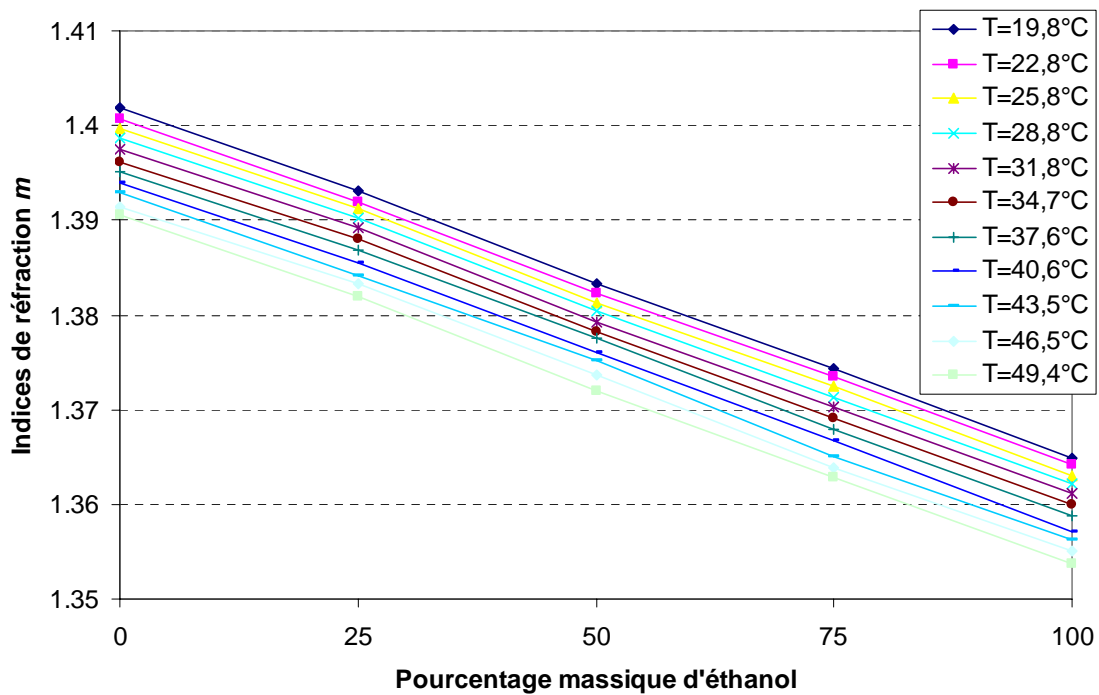


Figure 2.17 : Evolution de l'indice de réfraction des mélanges d'éthanol et de 1-butanol en fonction de la fraction massique d'éthanol

Comme il a été expliqué plus tôt, il ne sera plus possible de remonter à la température de la goutte, car la composition de cette dernière varie au cours de l'évaporation. On obtient alors une équation (2.15) avec deux inconnues T et $Y_{etha,l}$.

Il est toutefois nécessaire de connaître l'indice de réfraction pour pouvoir déterminer le diamètre de la goutte (2.13). Pour un liquide mono-composant, l'indice de réfraction moyen était déterminé en mesurant la position angulaire où l'intensité de l'arc-en-ciel était maximale. *Massoli* [31] a toutefois remarqué que la mesure de cet indice moyen est faussée par la présence de gradients d'indice de réfraction causés les gradients de température. Pour une goutte multi-composants, il faut ajouter les gradients de composition qui sont plus intenses, la diffusion des espèces liquides étant plus faible que le diffusivité thermique. Or la différence d'indice de réfraction entre l'éthanol et le 1-butanol (Figure 2.16 et Figure 2.17) s'avère importante et l'erreur sur la mesure de l'indice devient alors conséquente. A cela, il faut ajouter les réflexions parasites sur la plaque chauffante qui perturbent le signal de l'arc-en-ciel qui n'est plus exploitable. Il devient donc nécessaire d'utiliser une valeur fixe de l'indice de réfraction. Or l'équation (2.13) montre qu'une erreur sur la valeur de l'indice de réfraction peut induire une erreur sur la mesure du diamètre.

Lors de l'évaporation d'une goutte de fraction massique initiale d'éthanol $Y_{etha,l}^0$ à la température initiale T^0 , la valeur de l'indice de réfraction de la goutte $m(T, Y_{etha,l}^0)$ sera comprise entre $m(T, Y_{etha,l}^0)$ et $m(T, 0)$ (avec T supérieure ou égale à T^0 à cause du chauffage de la goutte) car l'évaporation préférentielle de l'éthanol fera diminuer sa fraction massique et donc augmenter l'indice de réfraction de la goutte. Cette zone de variation de m est représentée en jaune sur la Figure 2.18.

La valeur de l'indice de réfraction fixée pour le calcul du diamètre de la goutte correspond à la valeur moyenne de m , appelée m_{moy} , calculée sur sa zone de variation possible (en jaune sur la Figure 2.18).

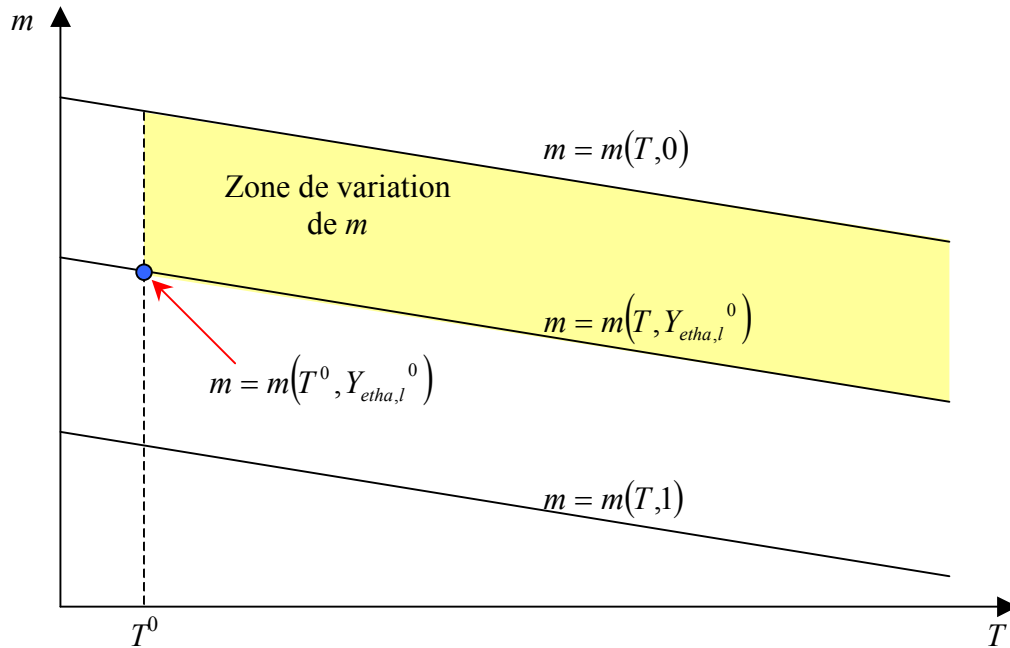


Figure 2.18 : Représentation de la variation de l'indice de réfraction m pour un mélange d'éthanol et de 1-butanol en évaporation dans une phase de chauffage

Pour le cas extrême, c'est un mélange très proche de l'éthanol pur, avec une température initiale T^0 de la goutte égale à 20°C, la valeur moyenne m_{moy} est alors égale à 1,3702. L'erreur maximale relevée sur le calcul du diamètre sur la zone de variation possible de m (en jaune sur la Figure 2.18) est de 1,39%. Il s'agit toutefois d'un cas extrême, cette erreur a été relevée pour une température égale à la température initiale et une fraction massique d'éthanol nulle (alors qu'il s'agit d'une goutte proche de l'éthanol pur à l'instant initial). Ce cas de figure est donc improbable pour une goutte en évaporation dans la couche limite thermique de la plaque chauffante. Pour une goutte composée à 50% d'éthanol et à 50% de 1-butanol, l'erreur maximale pour le même cas de figure est de 1,11%.

Nous avons également mesuré les indices de réfraction pour des mélanges d'acétone et d'éthanol. Les valeurs entre les différents mélanges sont cette fois relativement proches (Figure 2.19). Cependant, les réflexions parasites de la plaque chauffante empêchent toujours de mesurer l'indice de réfraction. Sa valeur est donc fixée comme précédemment. L'erreur est beaucoup plus faible pour ces mélanges puisque les indices de réfraction pour les composants purs sont plus proches.

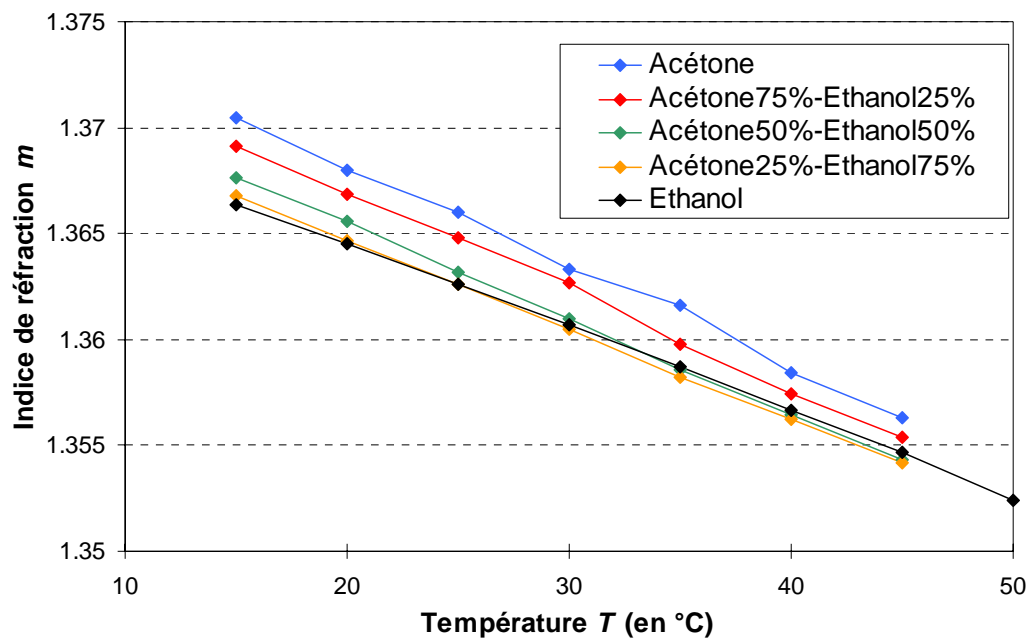


Figure 2.19 : Evolution de l'indice de réfraction des mélanges d'acétone et d'éthanol en fonction de la température

2.2 Banc expérimental du LEMTA

Le Laboratoire d’Energétique et de Mécanique Théorique Appliquée (LEMTA) dispose d’une technique novatrice pour mesurer la température de gouttes mono-composants en évaporation. Cette technique développée par *Lavieille* et al [32, 33] est basée sur la Fluorescence Induite par Laser appliquée sur la phase liquide. Elle a ensuite été étendue au cas de gouttes bi-composants lors de la thèse de Christophe Maqua, sous la responsabilité de Fabrice Lemoine. Dans le cadre d’une coopération entre le LEMTA et l’ONERA – DMAE, des premières mesures de température moyenne de gouttes bi-composants et des premières comparaisons avec les prévisions numériques ont été effectuées lors d’un stage pour une étude de faisabilité.

2.2.1 Présentation générale

L’injecteur de gouttes monodisperses (1 sur la Figure 2.20 et la Figure 2.21) est identique à celui de l’ONERA – DMAE. Cependant, les gouttes sont cette fois-ci injectées vers le bas. Le panache d’air chaud est généré grâce à deux appareils de chauffage montés en parallèle (2 sur la Figure 2.20 et la Figure 2.21 et description sur la Figure 2.22). Les deux flux d’air sont mélangés à l’intérieur d’un Y (3 sur la Figure 2.20 et la Figure 2.21). Les gouttes sont donc injectées à contre-courant du panache d’air chaud. L’injecteur est placé à 61mm de la sortie du Y du système de chauffage.

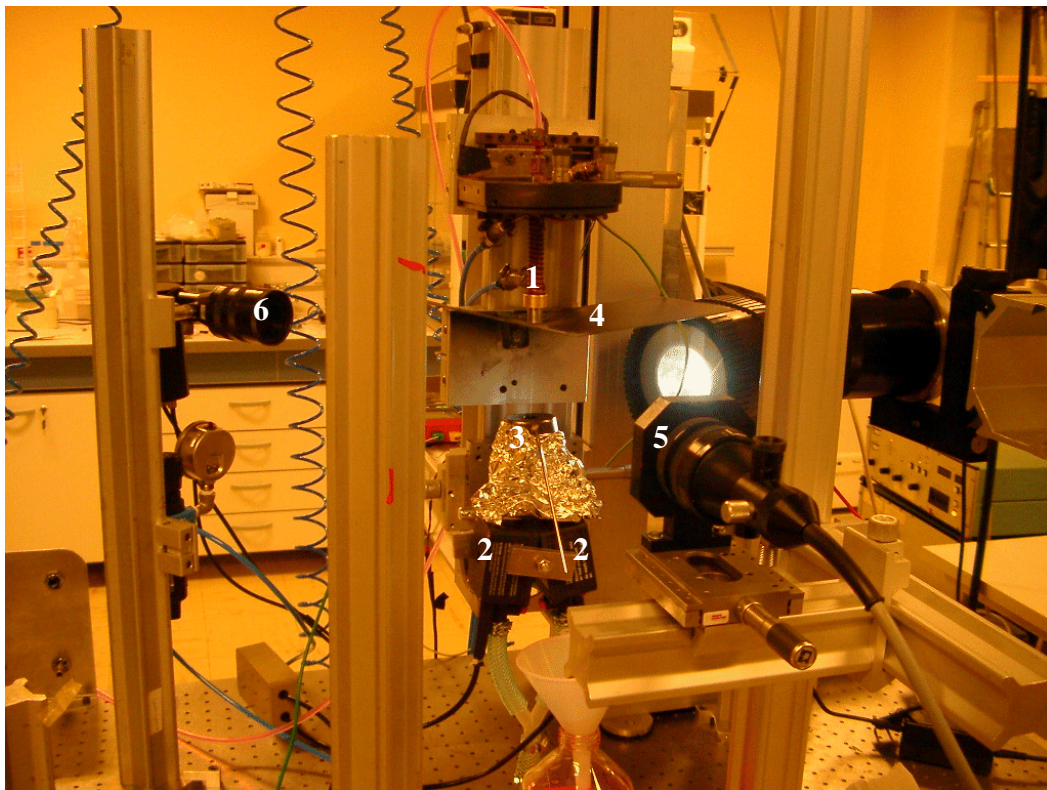


Figure 2.20 : Banc expérimental du LEMTA de Nancy vu de face

La régulation en température en faisant circuler un liquide froid dans un serpentin enroulé autour de l'injecteur est insuffisante pour éviter l'échauffement de l'injecteur. Un écran thermique, large plaque de tôle percée d'un trou de 1 mm de diamètre pour permettre le passage du jet (4 sur la Figure 2.20 et la Figure 2.21), est placée à quelques millimètres de la sortie de l'injecteur.

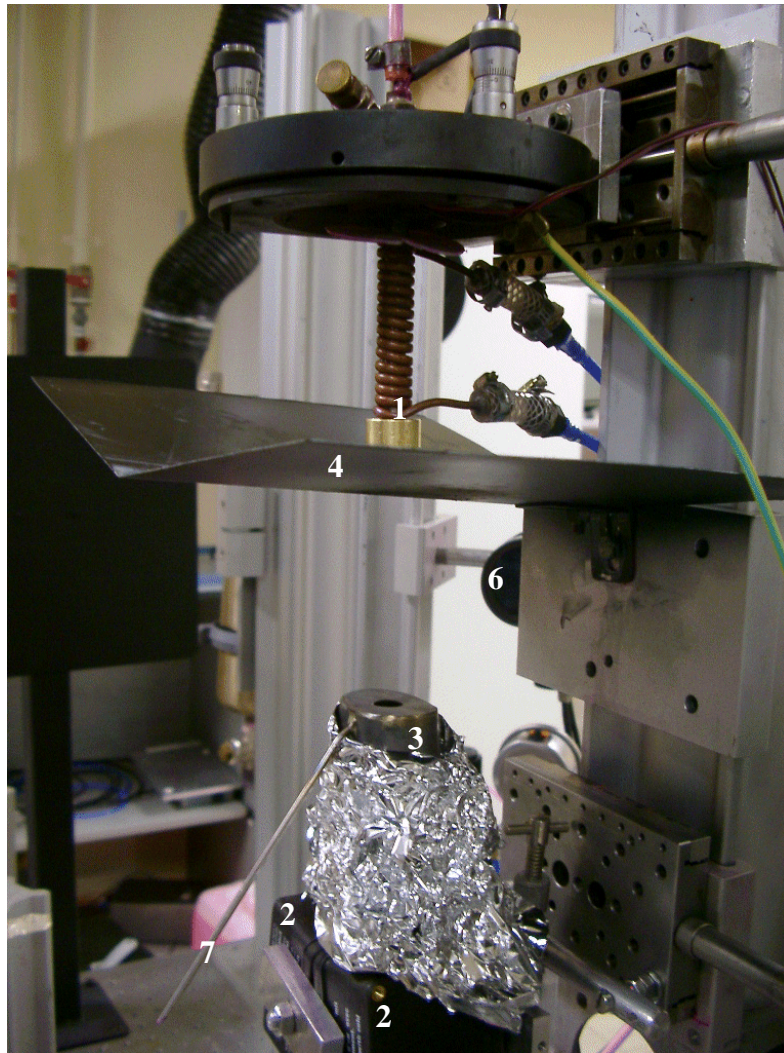


Figure 2.21 : Banc expérimental du LEMTA de Nancy vu de droite

La mesure de la température moyenne des gouttes est obtenue par la technique LIF appliquée sur la phase liquide. Le signal de fluorescence émis par les gouttes est récupéré par une optique de collection (5 sur la Figure 2.20) constituée d'une lentille achromatique de 180mm de distance focale suivie d'une fibre optique. La vitesse des gouttes est obtenue par anémométrie Doppler (LDA) dont le signal est récupéré par le photomultiplicateur (6 sur la Figure 2.20 et la Figure 2.21). Ainsi un séparateur transforme le faisceau issu du laser en deux faisceaux cohérents et parallèles. Ces deux faisceaux sont ensuite focalisés à l'aide d'une

lentille convergente achromatique pour former à leur intersection le volume de mesure de l'anémométrie laser qui est aussi le volume d'excitation de la fluorescence induite.

Un récupérateur de gouttes est aménagé dans la partie centrale du Y (7 sur la Figure 2.21), afin d'éviter que les gouttes qui ne sont pas entièrement vaporisées n'entrent dans les appareils de chauffage, ce qui entraînerait la combustion et la détérioration du dispositif de chauffage.

2.2.2 Le dispositif de chauffage

Cette fois, pour évaporer les gouttes, deux appareils de chauffage Leister 700 sont montés symétriquement en forme de Y. L'intérêt par rapport à la plaque chauffante est de réduire les gradients de température dans la direction perpendiculaire au jet. Afin de conserver une certaine symétrie en température et en vitesse dans le jet d'air ainsi généré, il est nécessaire de régler les deux appareils séparément.



Figure 2.22 : Appareil de chauffage Leister 700

L'inconvénient avec ce type d'appareil est qu'il nécessite d'être alimenté avec un débit d'air minimal pour fonctionner, c'est à dire 80 litres/min par appareil selon le constructeur. Cependant, la vitesse du panache d'air chaud ainsi généré est bien trop importante et perturbe considérablement le jet de gouttes qui devient très instable et perd alors son caractère monodisperse. Nous avons donc été contraints de réduire le débit d'air et le meilleur compromis (pour les profils de température et de vitesse d'air) a été obtenu pour un débit total de 20 litres/min pour les deux appareils (soit 10 litres/min pour chaque appareil). Ces

appareils ne sont toutefois pas conçus pour fonctionner avec un débit d'air aussi faible. Il faut donc s'assurer que le chauffage des appareils ne coupe pas durant les mesures.

Nous avons mesuré, par LDA, le profil de vitesse du panache d'air chaud dans l'axe de l'injecteur (et donc dans l'axe de sortie du Y) sans le jet de gouttes. Pour cela, l'air sous le système de chauffage a étéensemencé avec de l'encens. Le profil ainsi obtenu est tracé sur la Figure 2.23 où la hauteur 0 correspond à la sortie de l'injecteur, et la hauteur 61mm à la sortie du système de chauffage (sortie du Y). La vitesse de l'air reste supérieure à 1,5m/s durant toute la distance de mesure et devient même supérieure à 2m/s durant les 20 derniers millimètres.

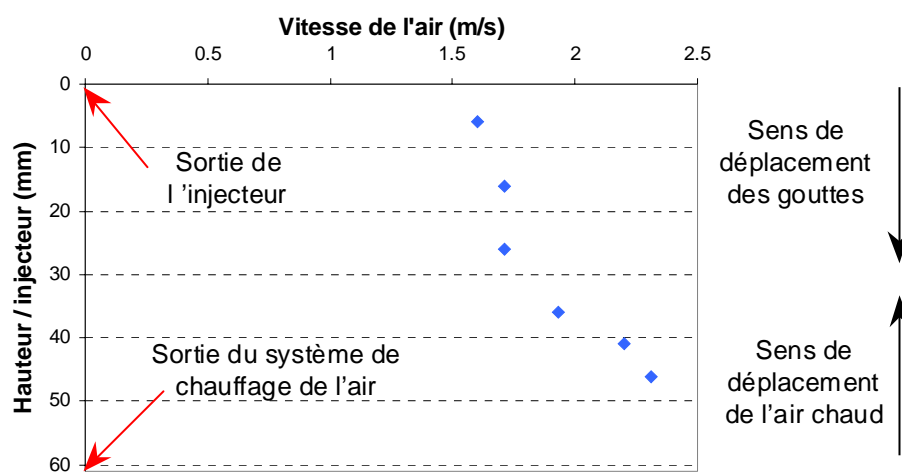


Figure 2.23 : Profil de vitesse du panache d'air chaud sans le jet de gouttes

Les profils de température à gauche et à droite du jet de gouttes sont présentés sur la Figure 2.24. Ici, à gauche et à droite se rapporte à la vue de face de la Figure 2.20. Contrairement à la plaque chauffante, aucun palier de température n'apparaît. De plus, les températures atteintes sont plus faibles, puisqu'elles varient entre 200 et 520°C. Malgré notre réglage séparé des deux appareils de chauffage et le souci de monter symétriquement ces appareils dans le Y, les profils à gauche et à droite du jet sont différents. Des changements de réglage individuel de débit ou de température (vis de réglage visibles sur la Figure 2.22) n'ont pas donné une meilleur symétrie.

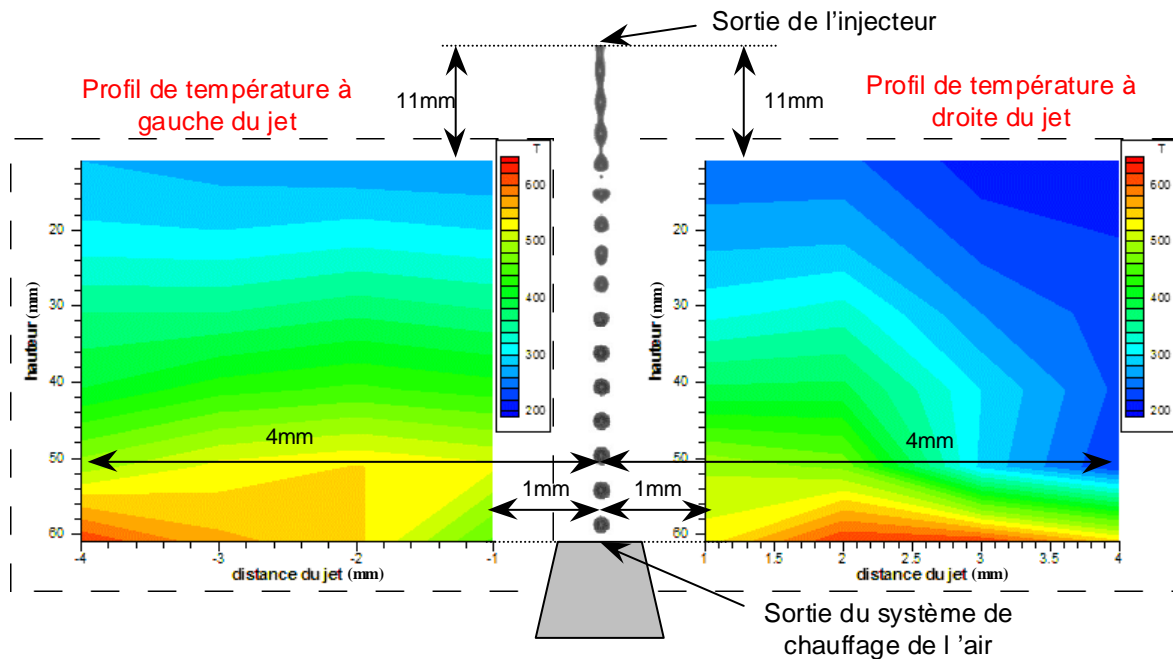


Figure 2.24 : Profils de température (en K) du panache d'air chaud avec le jet de gouttes, à gauche et à droite du jet.

2.2.3 Techniques de mesure

Mesure de la température par fluorescence induite par laser à 3 couleurs

- **Méthode de mesure**

Le principe de la technique FIL à trois couleurs consiste à mesurer simultanément sur trois voies de mesure, le signal de fluorescence correspondant à trois bandes spectrales distinctes notées avec les indices 1, 2 et 3.

Castanet [34] a expliqué que le passage d'une goutte,ensemencée d'un traceur fluorescent, dans un faisceau laser, génère un signal de fluorescence dont l'évolution temporelle décrit une courbe en forme de cloche (Figure 2.25). En effet, au fur et à mesure que la goutte pénètre dans le volume de mesure (intersection des deux faisceaux laser), l'intensité de fluorescence croît proportionnellement avec le volume fluorescent collecté (intersection du volume de la goutte et du volume de mesure, en jaune sur la Figure 2.25). Cette intensité peut éventuellement être modifiée par les gradients de température et de composition à l'intérieur de la goutte. Elle est maximale lorsque la goutte est parfaitement centrée sur le volume de réception.

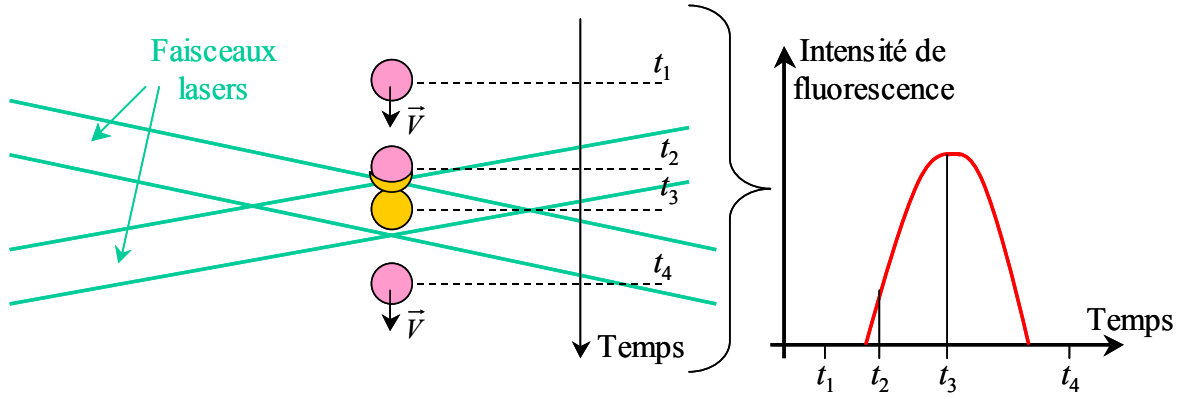


Figure 2.25 : Evolution du signal de fluorescence lors du passage d'une goutte dans le volume d'excitation laser [34]

L'intensité de fluorescence dépend alors de plusieurs paramètres comme le volume de collection V_c (en jaune sur la Figure 2.25), l'intensité laser locale I_0 ou la concentration en traceur fluorescent $c_{traceur}$ qui varie puisque la goutte s'évapore. D'après *Lavieille* et al. [33], cette intensité de fluorescence sur une bande spectrale i pour une goutte mono-composant peut s'écrire sous la forme suivante :

$$I_{f_i}(T) = K_{opt_i} K_{spect_i} V_c I_0 c_{traceur} e^{\frac{A_i + B_i}{T^2 + T}} \quad (2.16)$$

où A_i et B_i sont deux constantes fonction de la bande spectrale tout comme K_{opt} et K_{spec} . A et B caractérisent la sensibilité du traceur à la température et dépendent fortement de la longueur d'onde d'après *Lavieille* et al. [32]. K_{opt} est la constante optique associée à la géométrie du banc de mesure et K_{spec} est la constante spectrale.

Or les coefficients A_i et B_i dépendent de la composition du liquide. Pour des gouttes bi-composants, ils dépendent de la concentration volumique $[C]$ d'un des composants. La calibration de ces coefficients montrera qu'il est aussi nécessaire d'ajouter un coefficient $\gamma_i([C])$ à l'équation (2.16) car l'intensité de fluorescence varie avec la concentration $[C]$. L'expression devient alors :

$$I_{f_i}(T, [C]) = K_{opt_i} K_{spect_i} V_c I_0 c_{traceur} \gamma_i([C]) e^{\frac{A_i([C]) + B_i([C])}{T^2 + T}} \quad (2.17)$$

Les rapports d'intensité de fluorescence R permettent de supprimer les termes de concentration en traceur $c_{traceur}$, d'intensité laser incidente I_0 et de volume fluorescent collecté V_c . Ces rapports s'écrivent :

$$R_{12}(T, [C]) = \frac{I_{f_1}(T, [C])}{I_{f_2}(T, [C])} = \frac{K_{opt_1} K_{spect_1} \gamma_1([C])}{K_{opt_2} K_{spect_2} \gamma_2([C])} e^{\frac{A_1([C]) - A_2([C]) + B_1([C]) - B_2([C])}{T^2 + T}} \quad (2.18)$$

$$R_{13}(T, [C]) = \frac{I_{f_1}(T, [C])}{I_{f_3}(T, [C])} = \frac{K_{opt_1} K_{spect_1} \gamma_1([C])}{K_{opt_3} K_{spect_3} \gamma_3([C])} e^{\frac{A_1([C]) - A_3([C]) + B_1([C]) - B_3([C])}{T^2 + T}} \quad (2.19)$$

Pour éliminer les constantes $\frac{K_{opt_1} K_{spec_1}}{K_{opt_2} K_{spec_2}}$ et $\frac{K_{opt_1} K_{spec_1}}{K_{opt_3} K_{spec_3}}$, les rapports de fluorescence R sont mesurés en un point de référence où la température T_{ref} et la composition $[C_{ref}]$ sont connues. Les rapports de fluorescence s'expriment alors de la manière suivante :

$$\frac{R_{12}(T, [C])}{R_{12}(T_{ref}, [C_{ref}])} = \gamma_{12}([C], [C_{ref}]) e^{\left(\frac{A_{12}([C])}{T^2} - \frac{A_{12}([C_{ref}])}{T_{ref}^2} \right) + \left(\frac{B_{12}([C])}{T} - \frac{B_{12}([C_{ref}])}{T_{ref}} \right)} \quad (2.20)$$

$$\frac{R_{13}(T, [C])}{R_{13}(T_{ref}, [C_{ref}])} = \gamma_{13}([C], [C_{ref}]) e^{\left(\frac{A_{13}([C])}{T^2} - \frac{A_{13}([C_{ref}])}{T_{ref}^2} \right) + \left(\frac{B_{13}([C])}{T} - \frac{B_{13}([C_{ref}])}{T_{ref}} \right)} \quad (2.21)$$

avec :

$$\gamma_{12}([C], [C_{ref}]) = \frac{\gamma_1([C])\gamma_2([C_{ref}])}{\gamma_2([C])\gamma_1([C_{ref}])} \quad (2.22)$$

$$\gamma_{13}([C], [C_{ref}]) = \frac{\gamma_1([C])\gamma_3([C_{ref}])}{\gamma_3([C])\gamma_1([C_{ref}])} \quad (2.23)$$

$$A_{12}([C]) = A_1([C]) - A_2([C]) \quad (2.24)$$

$$B_{12}([C]) = B_1([C]) - B_2([C]) \quad (2.25)$$

$$A_{13}([C]) = A_1([C]) - A_3([C]) \quad (2.26)$$

$$B_{13}([C]) = B_1([C]) - B_3([C]) \quad (2.27)$$

Les plages de détection des voies 1, 2 et 3 doivent être choisies afin d'offrir la plus grande sensibilité possible pour obtenir une grande précision sur la mesure de température T et de la concentration $[C]$ d'un des deux composants. L'une des voies retenues correspond alors à une bande spectrale très sensible à la température, une autre à la concentration tandis que la dernière doit au contraire dépendre le moins possible de ces deux variables.

Sélection des bandes spectrales pour une solution de rhodamine B dans un mélange acétone/éthanol

Les mélanges bi-composants étudiés sont composés d'éthanol et d'acétone. Le Tableau 2.1 donne les différentes compositions utilisées. Comme les deux composants présentent la même densité à 20°C, la fraction volumique revient à la fraction massique. L'ajout d'acide à une concentration de 10^{-2} mol/l permet de stabiliser les rapports de fluorescence à une valeur constante pour une température donnée [34]. La concentration en rhodamine B dans les mélanges est de $7,5 \cdot 10^{-6}$ mol/l. En dessous de 30% d'éthanol, l'intensité de fluorescence devient trop faible et les mesures sont alors difficilement exploitables. C'est pour cette raison qu'aucune calibration n'a été effectuée en dessous de cette concentration.

% vol. éthanol [C_{etha}]	Volume éthanol (ml)	Volume acétone (ml)	Volume acide (ml)
30	14	35	1
40	19	30	1
50	24	25	1
60	29	20	1
70	34	15	1
80	39	10	1
90	44	5	1

Tableau 2.1 : Composition des mélanges bi-composants

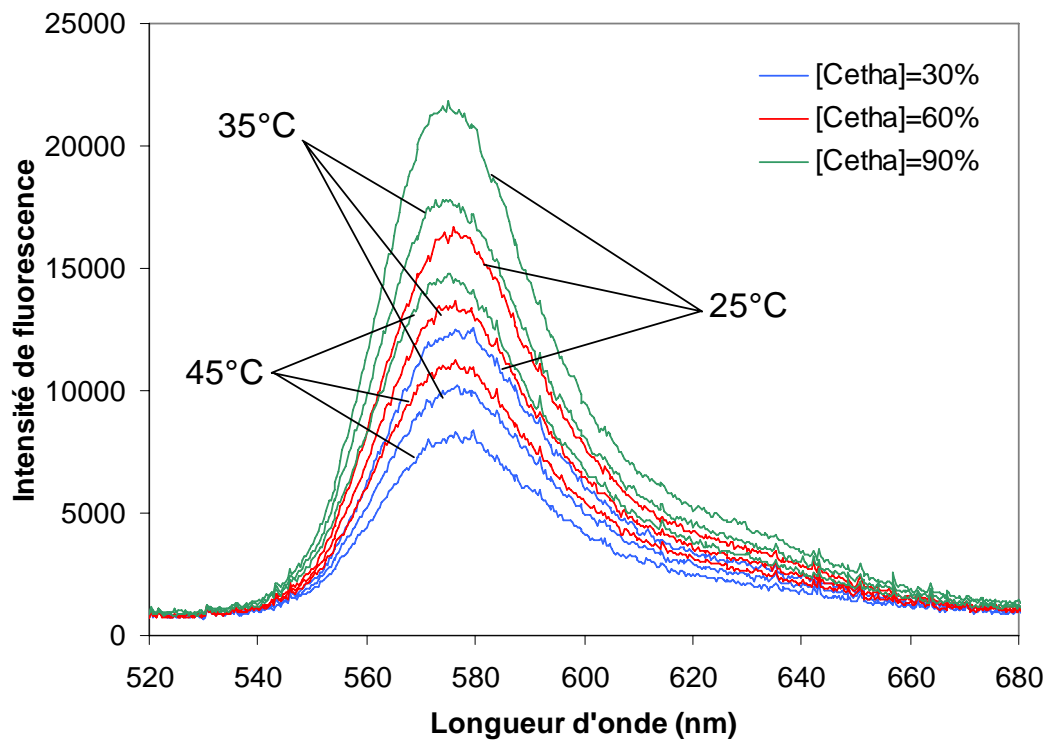


Figure 2.26 : Influence de la température et de la composition du liquide sur le spectre d'émission de la rhodamine B dans les différents mélanges d'acétone/éthanol

Les spectres d'émission de la rhodamine B dissoute dans les mélanges dépendent de la température et de la composition du liquide. En effet, l'intensité de fluorescence augmente avec la diminution de la température et de la concentration d'acétone (Figure 2.26). Pour sélectionner les bandes spectrales, la sensibilité du spectre d'émission à la température est étudiée à l'aide d'un coefficient $\beta(\lambda_{onde})$. Le rapport des intensités de fluorescence s'exprime par :

$$\frac{I_{fluo}(T_1, [C_{etha}], \lambda_{onde})}{I_{fluo}(T_2, [C_{etha}], \lambda_{onde})} = e^{\left(\frac{A}{T_1^2 + T_1}\right) - \left(\frac{A}{T_2^2 + T_2}\right)} \quad (2.28)$$

Or le logarithme de ce rapport varie presque linéairement avec $\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}$, ce qui permet d'écrire :

$$\ln \left[\frac{I_{fluo}(T_1, [C_{etha}], \lambda_{onde})}{I_{fluo}(T_2, [C_{etha}], \lambda_{onde})} \right] = \beta([C_{etha}], \lambda_{onde}) \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \quad (2.29)$$

L'évolution de $\beta([C_{etha}], \lambda_{onde})$ en fonction de la longueur d'onde λ_{onde} est tracée pour chaque mélange sur la Figure 2.27 pour T^1 et T^2 respectivement égal à 35°C et 25°C. La grande sensibilité en température des émissions de fluorescence est nettement mise en évidence pour une longueur d'onde voisine de 580nm, tandis que les émissions autour de 530nm sont moins affectées par la température.

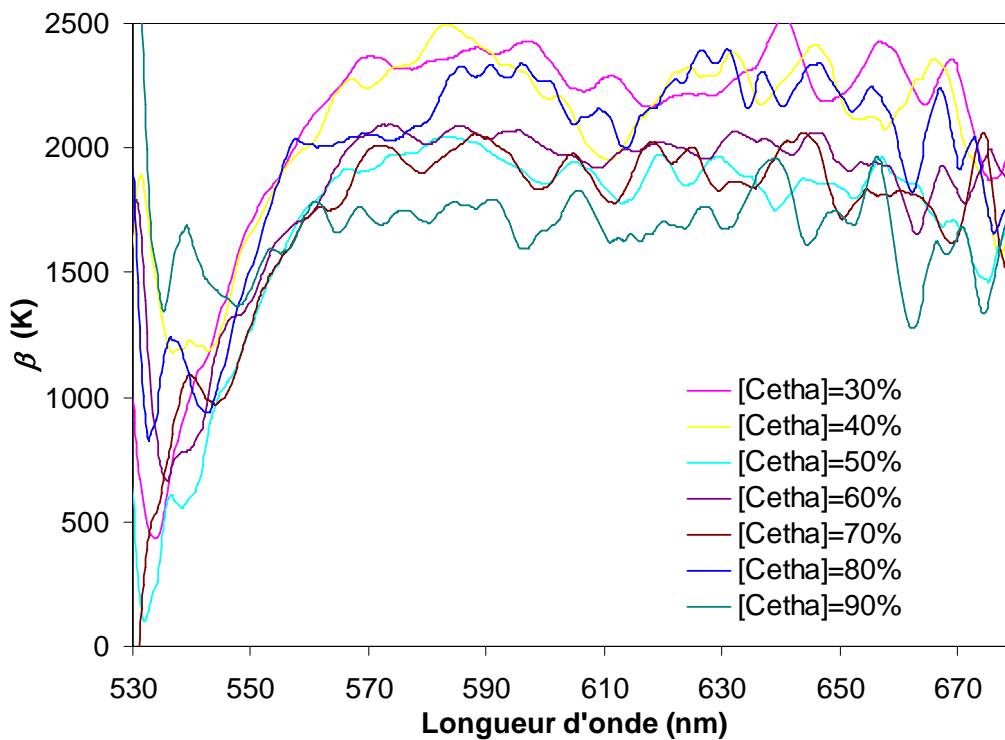


Figure 2.27 : Evolution de β en fonction de la longueur d'onde λ_{onde} pour les différents mélanges d'acétone et d'éthanol

Une troisième bande spectrale doit être choisie afin de mesurer également la concentration d'éthanol $[C_{etha}]$. La sensibilité du spectre de fluorescence à la composition du liquide est déterminée grâce à la fonction $\gamma / \gamma^* = \chi([C_{etha}], \lambda_{onde}) / \chi([C_{etha}]^*, \lambda_{onde})$ qui est déterminée par :

$$\ln \left[\frac{I_{fluo}(T, [C_{etha}], \lambda_{onde})}{I_{fluo}(T, [C_{etha}]^*, \lambda_{onde})} \right] = \ln \left[\frac{\gamma([C_{etha}], \lambda_{onde})}{\gamma([C_{etha}]^*, \lambda_{onde})} \right] + \frac{\beta([C_{etha}], \lambda_{onde}) - \beta([C_{etha}]^*, \lambda_{onde})}{T}$$

L'évolution de γ / γ^* en fonction de la longueur d'onde λ_{onde} est tracée pour chaque mélange sur la Figure 2.28 pour $[C_{etha}]^*$ égal à 60% et pour une température de 25°C. Pour une longueur d'onde voisine de 540nm, la sensibilité à la température reste faible (Figure 2.27) alors que celle pour la concentration $[C_{etha}]$ apparaît.

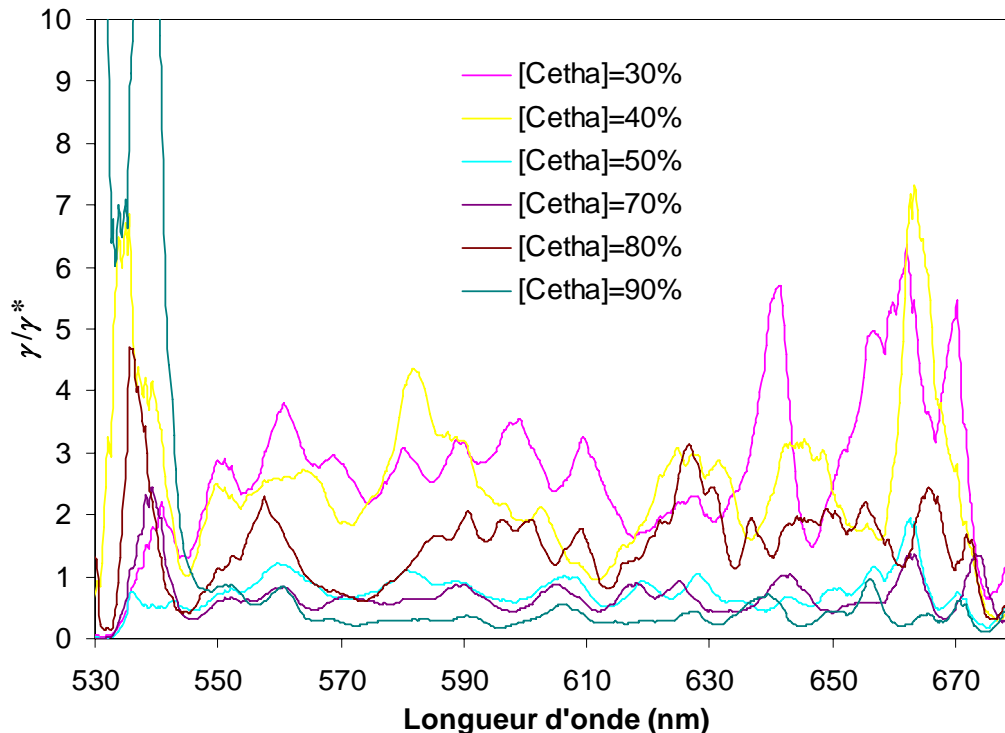


Figure 2.28 : Evolution de γ / γ^* en fonction de la longueur d'onde λ_{onde} pour les différents mélanges d'acétone et d'éthanol

Finalement, les trois bandes spectrales sont définies de la manière suivante :

- Filtre passe-bande centré sur 530nm et de largeur de bande égale à 10nm
- Filtre passe-bande centré sur 540nm et de largeur de bande égale à 10nm
- Filtre passe-bande centré sur 580nm et de largeur de bande égale à 20nm

Suppression de la composante lumineuse à la fréquence du laser argon

Le signal recueilli est constitué à la fois de la fluorescence émise par les gouttes ainsi que de la lumière issue de la diffusion de l'émission laser par les gouttes. Même minimisée en plaçant la détection perpendiculairement au plan des faisceaux, cette dernière contribution est majoritaire devant la fluorescence. Le signal lumineux traverse donc un filtre holographique coupe-bande (Super notch Plus, Kayser Optical) pour supprimer cette composante lumineuse à la fréquence du laser argon (514,5nm) due à la diffusion dans la goutte.

Séparation optique des bandes spectrales

Afin d'optimiser le niveau des signaux de fluorescence sur chacune des bandes spectrales, le choix s'est porté sur une lame séparatrice et un séparateur dichroïque des bandes spectrales.

La lame séparatrice ne réfléchissant que 8% de l'intensité du faisceau incident, le signal de la 3^e bande spectrale (où l'intensité du signal de fluorescence est la plus importante) est acquis sur ce faisceau réfléchi. Quant au séparateur dichroïque, il transmet et réfléchit équitablement le signal incident.

Chacune des voies est ensuite associée à un filtre interférentiel pour sélectionner la bande spectrale. Des tubes photomultiplicateurs (Hamamatsu R2066) sont ensuite placés derrière les filtres interférentiels afin d'assurer la conversion du signal optique en courant électrique.

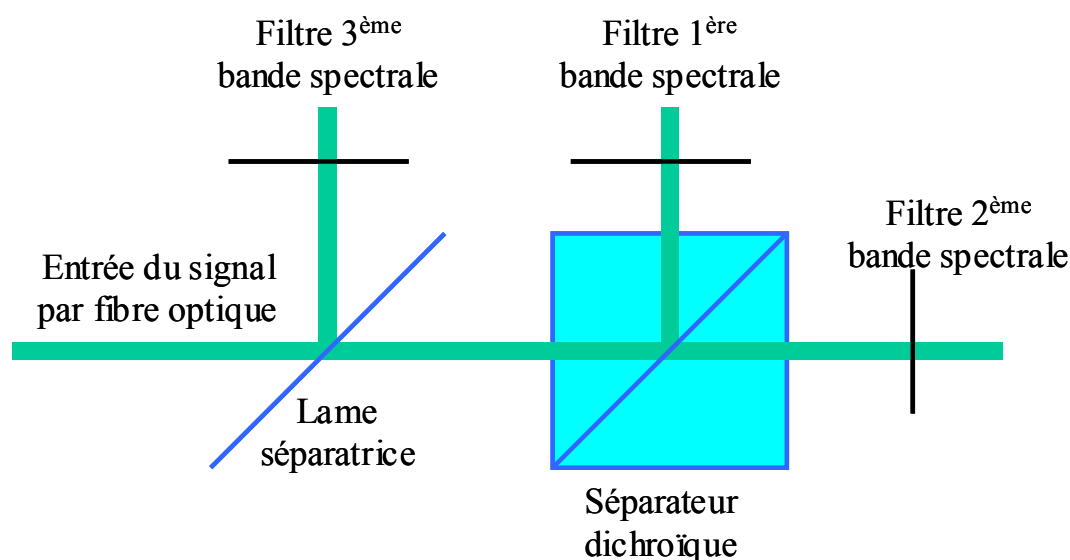


Figure 2.29 : Schéma de la séparation optique des bandes spectrales

Calibration des solutions fluorescentes

Pour effectuer les mesures, il est nécessaire d'effectuer une calibration afin de déterminer les coefficients A_{12} , A_{13} , B_{12} et B_{13} ainsi que les fonctions γ_{12} et γ_{13} . Cette calibration sera valable seulement pour un couple de solvants spécifique et un traceur donné, à condition de rester en faible concentration pour éviter le phénomène de self-quenching. Cependant pour des gouttes bi-composants en évaporation, la concentration des composants varie au cours du temps. Il est donc nécessaire lors de la calibration de déterminer des coefficients dépendant de la concentration $[C_{etha}]$ (pourcentage d'éthanol) afin de tenir compte du changement de composition sur la mesure de la température.

Les mélanges pour différentes concentrations $[C_{etha}]$ ensemencés de rhodamine B sont placés dans une cuve aux parois transparentes. Le liquide est chauffé par effet Peltier sur la gamme de température requise. Un agitateur magnétique uniformise la température du liquide qui est mesurée parallèlement par un thermocouple. L'agitation évite également le photoblanchissement du traceur de fluorescence. Les intensités du signal de fluorescence sont relevées sur les 3 voies. Le faisceau laser passe au ras de la paroi de la cuve pour réduire au

maximum les chemins optiques dans le liquide. Cela permet de négliger la réabsorption de l'émission fluorescente.

Pour la calibration, il faut tout d'abord déterminer les coefficients A_{12} , A_{13} , B_{12} et B_{13} pour chaque mélange. Cela est possible en utilisant les équations (2.18) et (2.19) en fixant une température T_0 :

$$\frac{R_{12}(T, [C_{etha}])}{R_{12}(T_0, [C_{etha}])} = e^{A_{12}([C_{etha}])\left(\frac{1}{T^2} - \frac{1}{T_0^2}\right) + B_{12}([C_{etha}])\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)} \quad (2.30)$$

$$\frac{R_{13}(T, [C_{etha}])}{R_{13}(T_0, [C_{etha}])} = e^{A_{13}([C_{etha}])\left(\frac{1}{T^2} - \frac{1}{T_0^2}\right) + B_{13}([C_{etha}])\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)} \quad (2.31)$$

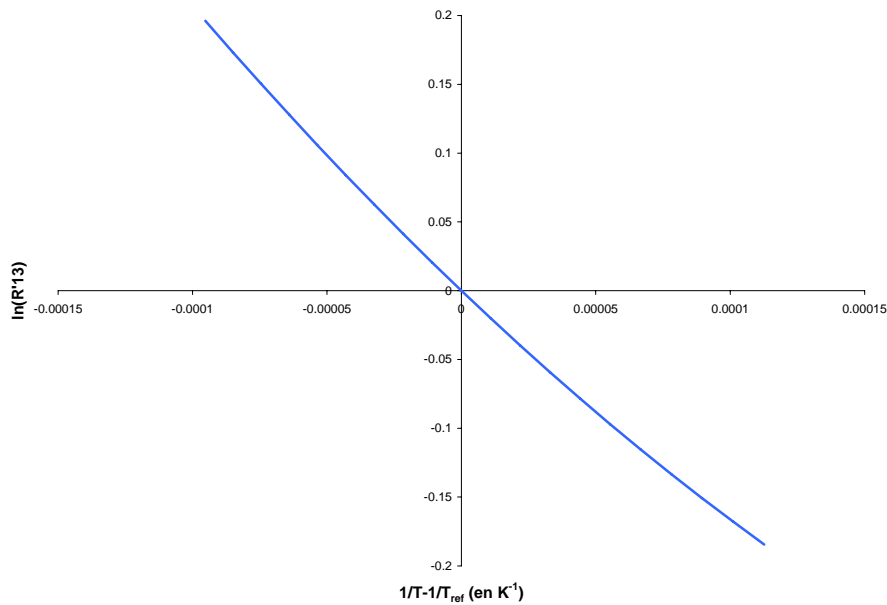


Figure 2.30 : Courbe de calibration de R'13 pour un mélange à $[C_{etha}] = 60\%$

Le tracé du logarithme du rapport de fluorescence en fonction de l'inverse de la température est quasiment linéaire (exemple sur la Figure 2.30). Les équations (2.30) et (2.31) permettent lors de la calibration de déterminer les coefficients A_{12} , A_{13} , B_{12} et B_{13} pour chaque composition. Les résultats montrent que A_{12} et A_{13} peuvent être considérées comme indépendantes de la concentration $[C_{etha}]$:

$$A_{12} = 764646 \text{ K}^2 \quad (2.32)$$

$$A_{13} = 1882879 \text{ K}^2 \quad (2.33)$$

Par contre, B_{12} et B_{13} dépendent bien de la concentration $[C_{etha}]$ (Figure 2.31) et des corrélations du second ordre sont ainsi utilisées (en K) :

$$B_{12}([C_{etha}]) = 2,6190 \cdot 10^{-3} [C_{etha}]^2 + 1,6286 [C_{etha}] - 5,6961 \cdot 10^3 \quad (2.34)$$

$$B_{13}([C_{etha}]) = -5,4762 \cdot 10^{-3} [C_{etha}]^2 + 7,4 [C_{etha}] - 1,4763 \cdot 10^4 \quad (2.35)$$

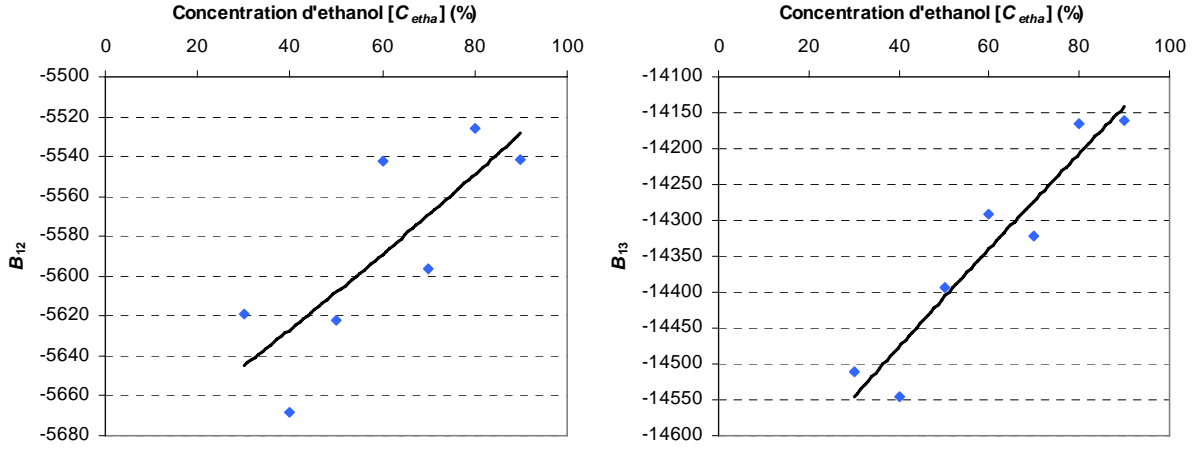


Figure 2.31 : Coefficients B_{12} et B_{13} en fonction de la concentration en éthanol $[C_{etha}]$

Les équations (2.30) et (2.31) sont cette fois-ci utilisées mais en fixant une concentration $[C_{etha0}]$:

$$\frac{R_{12}(T, [C_{etha}])}{R_{12}(T, [C_{etha0}])} = \gamma_{12}([C_{etha}], [C_{etha0}]) e^{\frac{A_{12}([C_{etha}]) - A_{12}([C_{etha0}])}{T^2} + \frac{B_{12}([C_{etha}]) - B_{12}([C_{etha0}])}{T}} \quad (2.36)$$

$$\frac{R_{13}(T, [C_{etha}])}{R_{13}(T, [C_{etha0}])} = \gamma_{13}([C_{etha}], [C_{etha0}]) e^{\frac{A_{13}([C_{etha}]) - A_{13}([C_{etha0}])}{T^2} + \frac{B_{13}([C_{etha}]) - B_{13}([C_{etha0}])}{T}} \quad (2.37)$$

Il est maintenant possible d'estimer les coefficients $\gamma_{12}([C_{etha}], [C_{etha0}])$ et $\gamma_{13}([C_{etha}], [C_{etha0}])$. Cependant ces coefficients dépendent de la concentration $[C_{etha0}]$ choisie. Il faut donc garder cette concentration pour toutes les mesures. Or les équations (2.20) et (2.21) utilisent la concentration $[C_{etha,ref}]$ prise à la référence qui n'est pas forcément égale à $[C_{etha0}]$. Dans ces équations, il faut donc transformer les coefficients $\gamma_{12}([C_{etha}], [C_{etha,ref}])$ et $\gamma_{13}([C_{etha}], [C_{etha,ref}])$ de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \gamma_{12}([C_{etha}], [C_{etha,ref}]) &= \frac{\gamma_1([C_{etha}])\gamma_2([C_{etha0}])\gamma_2([C_{etha,ref}])\gamma_1([C_{etha0}])}{\gamma_2([C_{etha}])\gamma_1([C_{etha0}])\gamma_1([C_{etha,ref}])\gamma_2([C_{etha0}])} \\ &= \frac{\gamma_{12}([C_{etha}], [C_{etha0}])}{\gamma_{12}([C_{etha,ref}], [C_{etha0}])} \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{13}([C_{etha}], [C_{etha,ref}]) &= \frac{\gamma_1([C_{etha}])\gamma_3([C_{etha0}])\gamma_3([C_{etha,ref}])\gamma_1([C_{etha0}])}{\gamma_3([C_{etha}])\gamma_1([C_{etha0}])\gamma_1([C_{etha,ref}])\gamma_3([C_{etha0}])} \\ &= \frac{\gamma_{13}([C_{etha}], [C_{etha0}])}{\gamma_{13}([C_{etha,ref}], [C_{etha0}])} \end{aligned} \quad (2.39)$$

La calibration des coefficients $\gamma_{12}([C_{etha}], [C_{etha0}])$ et $\gamma_{13}([C_{etha}], [C_{etha0}])$ pour $[C_{etha0}] = 50\%$ est effectuée pour plusieurs températures (Figure 2.32). Les valeurs trouvées pour ces différentes températures coïncident entre elles et une corrélation du second ordre peut ainsi être déterminée :

$$\gamma_{12}([C_{etha}], [C_{etha0}]) = 4,8222 \cdot 10^{-5} [C_{etha}]^2 - 1,4889 \cdot 10^{-2} [C_{etha}] + 1,6225 \quad (2.40)$$

$$\gamma_{13}([C_{etha}], [C_{etha0}]) = 3,428 \cdot 10^{-4} [C_{etha}]^2 - 6,3441 \cdot 10^{-2} [C_{etha}] + 3,3278 \quad (2.41)$$

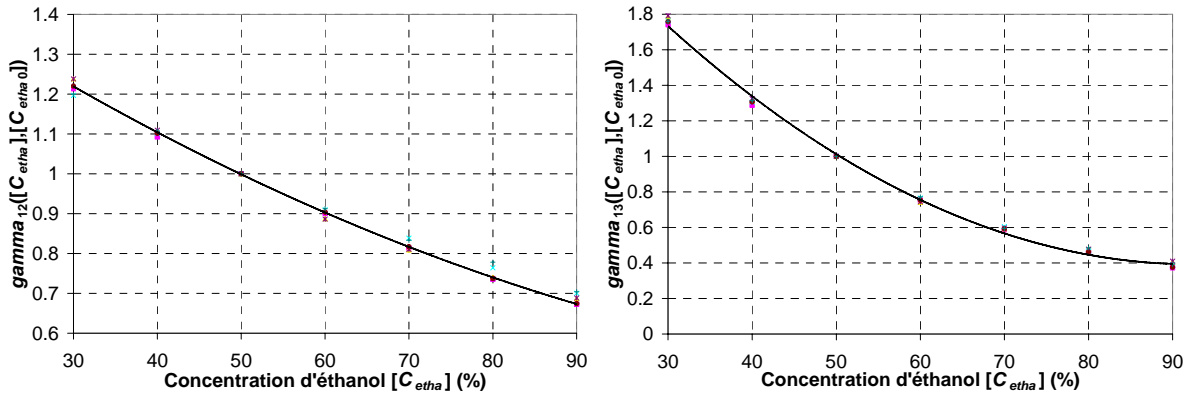


Figure 2.32 : Coefficients γ_{12} et γ_{13} en fonction de la concentration d'éthanol $[C_{etha}]$ pour $[C_{etha0}] = 50\%$

Une solution d'acétone pure est aussi étudiée. La concentration d'acide est la même, par contre celle en rhodamine B a du être augmentée (10^{-5} mol/l) car l'intensité de fluorescence était trop faible. L'utilisation de la voie 2 n'est plus nécessaire puisque la concentration d'éthanol $[C_{etha}]$ reste égale à 0. La calibration donne :

$$A_{13} = 887241 \text{ K}^2 \quad (2.42)$$

$$B_{13} = -8268,3 \text{ K} \quad (2.43)$$

Traitement du signal et détermination de la température moyenne

Lorsque la valeur moyenne du signal de fluorescence sur la voie 1 est supérieure à un certain seuil ajusté pour distinguer les gouttes traversant de manière optimale le volume de mesure, l'intégrale A_{i1} du signal pour la voie 1 (A_{i2} pour la voie 2 et A_{i3} pour la voie 3) est calculée sur une durée correspondant au passage de la $i^{\text{ème}}$ goutte, ainsi que les rapports :

$$R_{i12} = \frac{A_{i1}}{A_{i2}} \text{ et } R_{i13} = \frac{A_{i1}}{A_{i3}} \quad (2.44)$$

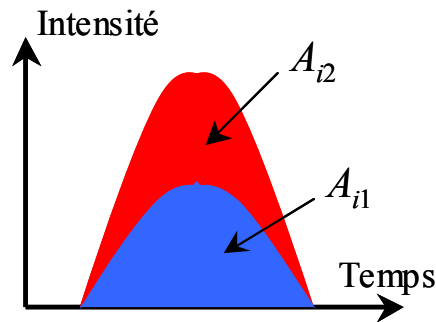


Figure 2.33 : Intégrales des signaux des voies 1 et 2 de la $i^{\text{ème}}$ goutte

Les rapports moyens de fluorescence $R_{12} = \frac{1}{nbg} \sum_{i=1}^{nbg} R_{i12}$ et $R_{13} = \frac{1}{nbg} \sum_{i=1}^{nbg} R_{i13}$ convergent à mesure que le nombre nbg de gouttes passées dans le volume augmente. Ce nombre a été fixé à 50000 gouttes afin d'obtenir une moyenne sur un très grand nombre de gouttes.

Des rapports R_{12} et R_{13} de référence ont été mesurés au ras de l'injecteur où la température est supposée égale à la température d'injection et la composition est égale à la composition initiale. Ainsi grâce aux équations (2.20) et (2.21), la température et la composition moyennes des gouttes peuvent ainsi être déterminées.

Grâce à la calibration, des rapports de signaux ont pu être associés à différents couples de température et de composition. Il est donc possible de choisir au hasard un couple de valeurs comme référence et les rapports de signaux associés. A partir d'autres rapports de signaux, un couple de température et de composition est alors calculé, et les valeurs ainsi calculées sont comparées aux valeurs réelles. En moyenne, un écart de 2°C en température et de 4% en concentration a été observé.

2.3 Conclusion

Sur le banc de mesure de l'ONERA–DMAE, un jet de gouttes monodisperse est injecté dans la couche limite thermique d'une plaque chauffée par effet Joule. Les gouttes étant trop proches les unes des autres, un déviateur de gouttes est monté entre l'injecteur et la plaque chauffante pour supprimer certaines gouttes du jet. L'espacement entre les gouttes croît alors considérablement et le cas de la goutte isolée est atteint. L'intersection entre le faisceau laser et le jet de gouttes génère un réseau d'interfranges en diffusion avant et un arc-en-ciel monochromatique en rétro-diffusion. La distance entre les maximums d'intensité du réseau d'interfranges permet de déterminer le diamètre des gouttes.

Le LEMTA a développé par le passé une nouvelle technique de mesure de température moyenne de gouttes mono-composant. Cette méthode a été récemment étendue pour des gouttes bi-composants et des premières mesures ont été donc possibles. Elle nécessite cependant de connaître la composition de la goutte. Le signal de fluorescence est donc collecté sur une troisième bande spectrale sensible à la concentration d'un composant. Cette méthode pourrait éventuellement mesurer la composition moyenne de la goutte.

CHAPITRE 3 RESULTATS EXPERIMENTAUX

Cette partie est dédiée à l'analyse des résultats expérimentaux obtenus durant ces travaux. Deux paramètres ont été analysés.

Tout d'abord la décroissance de la taille de gouttes bi-composants en évaporation dans la couche limite thermique de la plaque chauffante a été étudiée. Les liquides utilisés sont des mélanges d'éthanol et de 1-butanol ainsi que des mélanges d'acétone et d'éthanol. Il sera donc possible de comparer les pentes de décroissance de diamètre pour différents composants et pour plusieurs fractions massiques. De plus, le manque de mesures pour des températures de l'air élevées sera ainsi complété.

La deuxième partie est consacrée aux mesures de température et de composition moyennes de gouttes bi-composants (acétone et éthanol) en évaporation. Elles seront effectuées pour des gouttes en refroidissement dans le milieu ambiant et pour des gouttes injectées dans le panache d'air chaud généré par le système de chauffage décrit dans le Chapitre précédent. L'influence sur le chauffage ou le refroidissement de la goutte par l'ajout d'un second composant pourra ainsi être mise en évidence. D'après la bibliographie, aucune mesure de température de gouttes multi-composants n'a encore été effectuée auparavant.

Cette banque de données expérimentales pourra aussi être utilisée ultérieurement dans ces travaux (Chapitre 5) pour valider les prévisions numériques des modèles développés.

3.1 Mesure de la taille de la goutte

Dans cette partie, l'évolution du diamètre de gouttes bi-composants en évaporation dans la couche limite de la plaque chauffante est mesurée sur le banc de l'ONERA – DMAE.

3.1.1 Etude d'un mélange d'éthanol et de 1-butanol

Conditions expérimentales

L'évaporation des gouttes va être étudiée dans la couche limite thermique à 0,8mm de la plaque chauffante (décrite dans le Chapitre 2) en fonction de la hauteur h . L'origine de cette hauteur h ou du temps t est prise au niveau du bord d'attaque de la plaque.

Les liquides utilisés sont deux alcools, l'éthanol ($T_b=78,5^\circ\text{C}$) et le 1-butanol ($T_b=117,9^\circ\text{C}$). L'évaporation pour plusieurs fractions massiques de ces deux alcools (75%-25%, 50%-50% et 25%-75%) ainsi pour que les liquides purs sera analysée.

La vitesse initiale des gouttes est définie comme la vitesse au bord d'attaque de la plaque chauffante et non à la sortie de l'injecteur. Plus elle est faible, plus le temps de passage de la goutte devant la plaque est long et donc plus la masse de liquide évaporé est importante. Cependant, lorsque la vitesse de la goutte devient trop faible, le jet devient instable et perd son caractère monodisperse. Il est donc nécessaire de générer des gouttes avec une vitesse initiale suffisamment élevée (de l'ordre de 6 m/s).

Pour obtenir la configuration de la goutte isolée, il est nécessaire que le paramètre de distance soit élevé pour toutes les hauteurs de mesure. *Atthasit* et al. [35] ont montré que les effets d'interaction étaient toujours présents pour un paramètre de distance initial (au bord d'attaque de la plaque chauffante) de l'ordre de 18. Il doit donc être suffisamment important et 32 gouttes sur 33 sont donc déviées pour atteindre un paramètre un paramètre de distance initial d'environ 60.

Comme il a été précisé auparavant, la température d'injection des gouttes peut être contrôlée. Pour que le volume de liquide évaporé soit plus important, il serait possible d'injecter les gouttes à une température élevée pour atteindre le plus rapidement possible un taux d'évaporation maximal. Or, la distance entre l'injecteur et le bord d'attaque de la plaque chauffante est d'environ 40 mm. Dans ce cas, l'évaporation de la goutte sur cette distance serait conséquente. Les fractions massiques de chaque alcool au bord d'attaque seraient alors différentes de celles à l'injection et seraient donc inconnues. De plus, il serait impossible d'étudier la phase de chauffage de la goutte qui est d'autant plus longue que la fraction

massique initiale de 1-butanol est élevée. Lors de l'expérience, les gouttes seront donc injectées à une température de 23°C.

Résultats

Les mesures de vitesse effectuées pour les différents mélanges sont d'abord présentées sur la Figure 3.1. L'évolution de la vitesse en fonction de la hauteur est une fonction linéaire sur la portion de trajectoire considérée [36]. Pour certaines hauteurs proches du bord d'attaque, la mesure par ombroscopie n'a pas été possible car l'espacement entre les gouttes étaient trop grand et il était impossible d'avoir deux gouttes à la fois sur l'écran lors de l'acquisition vidéo.

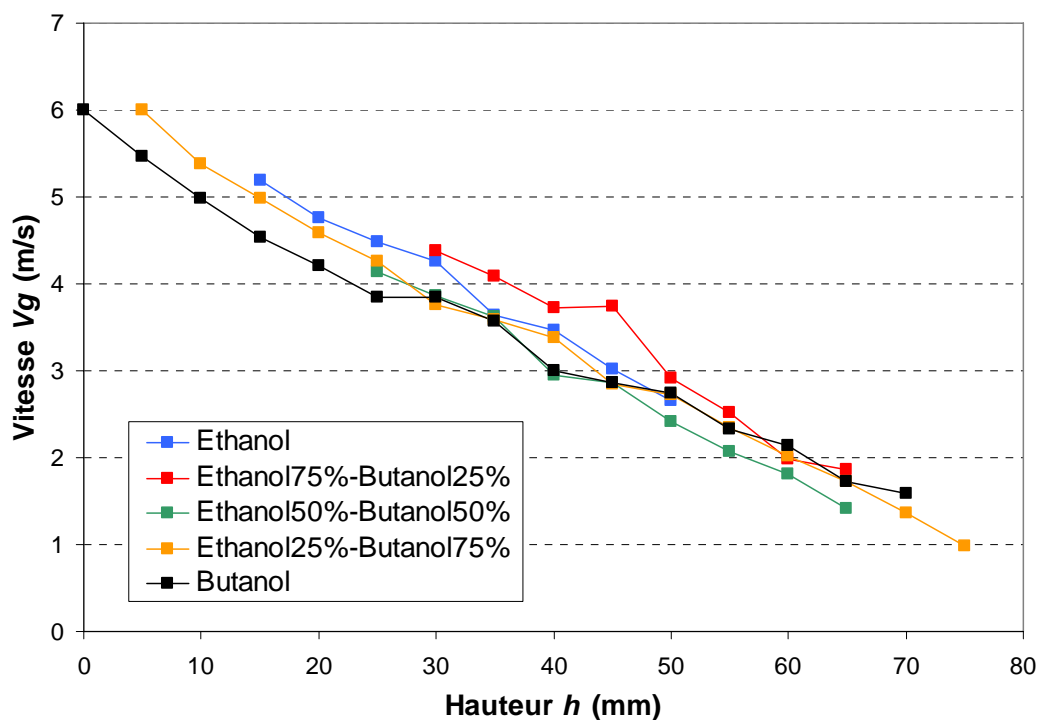


Figure 3.1 : Evolution de la vitesse de la goutte en fonction de la hauteur pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol

Des corrélations linéaires de la vitesse dépendant de la hauteur h (exprimée en mètres), ainsi que l'expression de ces vitesses adimensionnées par la vitesse initiale V_{g0} , sont déduites et présentées dans le Tableau 3.1.

Composition initiale du liquide	V_g (en m/s)	V_g/ V_{g0}
Ethanol	6,2569 - 71,5h	1-11,43h
Ethanol 75% - Butanol 25%	6,8451 - 77,8h	1-11,37h
Ethanol 50% - Butanol 50%	5,8950 - 68,9h	1-11,69h
Ethanol 25% - Butanol 75%	6,0204 - 67,3h	1-11,18h
Butanol	5,6087 - 59,7h	1-10,64h

Tableau 3.1 : Corrélations des vitesses et des vitesses adimensionnées en fonction de la hauteur pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol

La Figure 3.2 fait apparaître le paramètre de distance pour chaque mélange. Son calcul n'a été possible que lorsque la vitesse et le diamètre de la goutte ont été mesurés. Il reste suffisamment élevé pour considérer que la goutte est isolée sur la plage de mesure sauf à partir de 60mm où des interactions pourraient faire leur apparition.

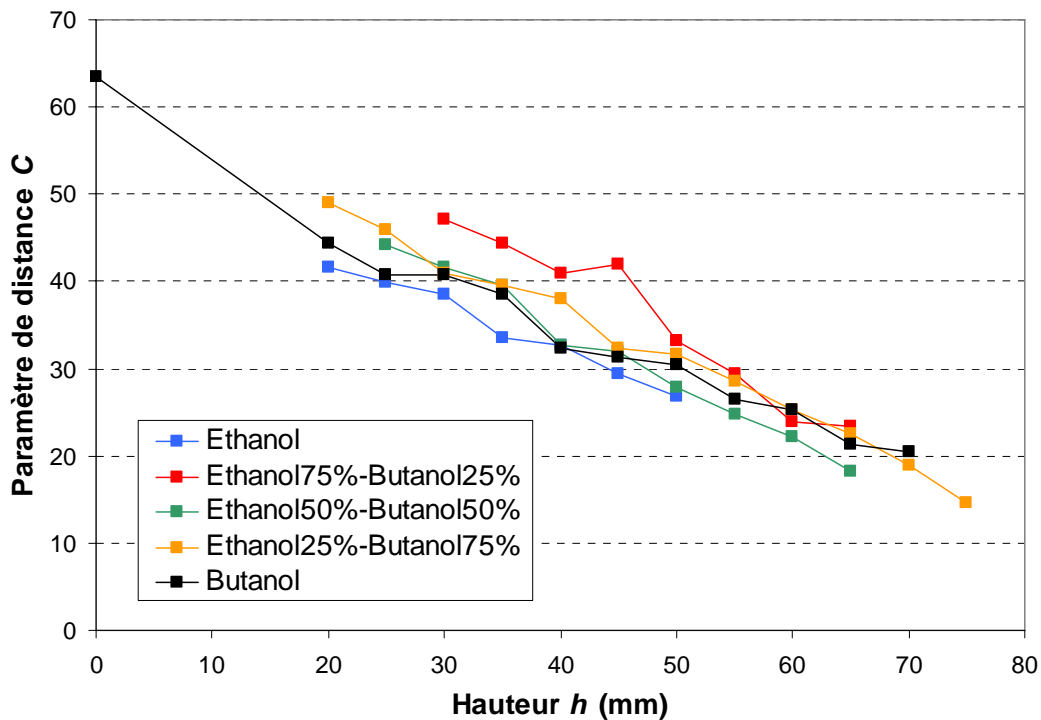


Figure 3.2 : Evolution du paramètre de distance en fonction de la hauteur pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol

En utilisant, les corrélations de la vitesse de la goutte (Tableau 3.1), il est possible de déterminer les paramètres de distance initiaux :

$$C = 33 \frac{V_g}{f_{ex} \cdot Dg} \quad (3.1)$$

où f_{ex} est la fréquence d'excitation de l'injecteur. L'expression de C est multipliée par 33 car 32 gouttes sur 33 sont déviées, d'où une multiplication par 33 de la distance entre les gouttes. Les paramètres de distance initiaux sont donc compris entre 53,8 et 71,4.

Pour calculer le temps écoulé t pour atteindre la hauteur h , il est nécessaire d'utiliser les corrélations de la vitesse de la goutte (Tableau 3.1) :

$$Vg = Vg_0 - A_0 h \quad (3.2)$$

où Vg_0 est la vitesse initiale de la goutte et A_0 une constante (exprimée en s^{-1}). Le temps écoulé t pour atteindre la hauteur h s'exprime alors :

$$t = \frac{-1}{A_0} \ln \left(\frac{Vg}{Vg_0} \right) \quad (3.3)$$

$$\text{car } Vg = \frac{dh}{dt} \quad (3.4)$$

La loi en D^2 exprime le diamètre Dg en fonction du diamètre initial Dg_0 et du temps t de la manière suivante :

$$\left(\frac{Dg}{Dg_0} \right)^2 = 1 - K \frac{t}{Dg_0^2} \quad (3.5)$$

où K est la constante instantanée d'évaporation (en m^2/s). En traçant $(Dg/Dg_0)^2$ en fonction de t/Dg_0^2 (Figure 3.3), la pente de la courbe est égale à cette constante d'évaporation K . Après un lissage de la variation du diamètre, l'évolution de K en fonction de t/Dg_0^2 est estimée sur la Figure 3.4 en utilisant une discrétisation par différence finie centrée sur le temps :

$$\begin{aligned} K &= \frac{\left[\left(\frac{Dg^{n+1}}{Dg_0} \right)^2 - \left(\frac{Dg^n}{Dg_0} \right)^2 \right] + \left[\left(\frac{Dg^n}{Dg_0} \right)^2 - \left(\frac{Dg^{n-1}}{Dg_0} \right)^2 \right]}{\left[\frac{t^{n+1}}{Dg_0^2} - \frac{t^n}{Dg_0^2} \right] + \left[\frac{t^n}{Dg_0^2} - \frac{t^{n-1}}{Dg_0^2} \right]} \\ &= \frac{\left(\frac{Dg^{n+1}}{Dg_0} \right)^2 - \left(\frac{Dg^{n-1}}{Dg_0} \right)^2}{t^{n+1} - t^{n-1}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

La Figure 3.3 et la Figure 3.4 montrent bien que la présence du 1-butanol dans la goutte diminue le débit massique en début d'évaporation. En effet, la pression de vapeur saturante du butanol, à une température et à une pression données, est plus faible que celle de l'éthanol (Figure 3.5). Ce qui implique que, plus le 1-butanol liquide est présent à la surface de la goutte, plus la somme des fractions massiques de vapeur à la surface est faible, et donc plus le débit massique de vapeur est faible. La goutte doit donc atteindre une température plus élevée pour obtenir une constante d'évaporation comparable à celle de l'éthanol pur.

D'ailleurs ce chauffage plus important est visible sur les deux derniers liquides pour lesquels la taille de la goutte augmente pendant la phase de chauffage. En effet, la dilatation de la goutte est plus importante pour ces liquides et l'évaporation est insuffisante pour compenser cette augmentation de taille.

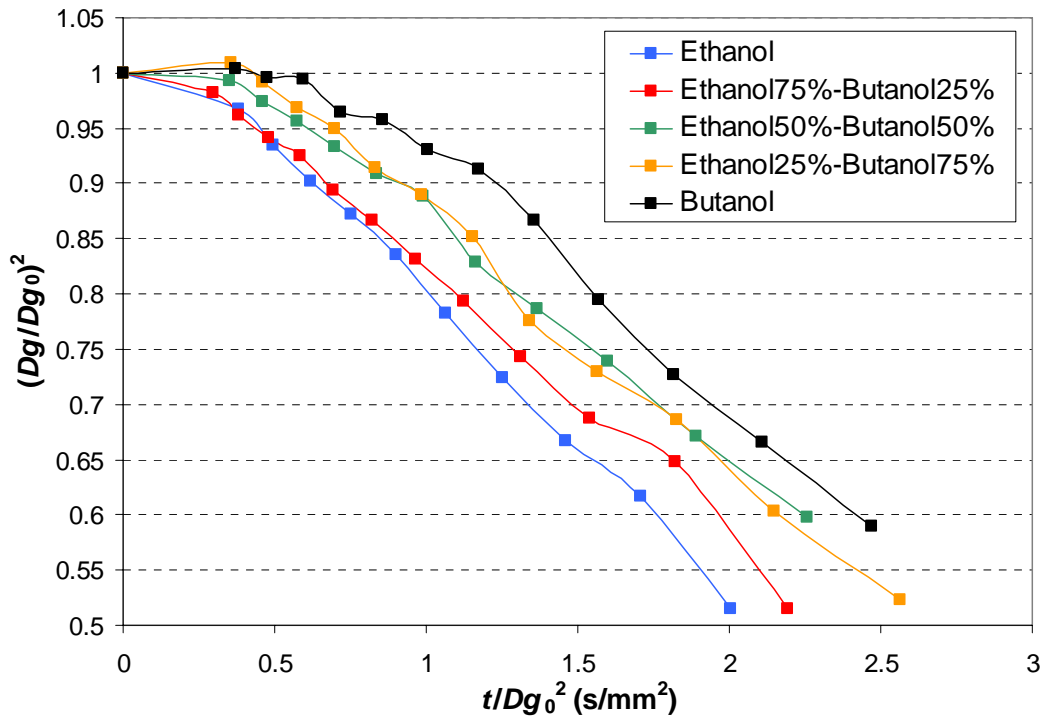


Figure 3.3 : Evolution de la taille de la goutte en fonction du temps pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol

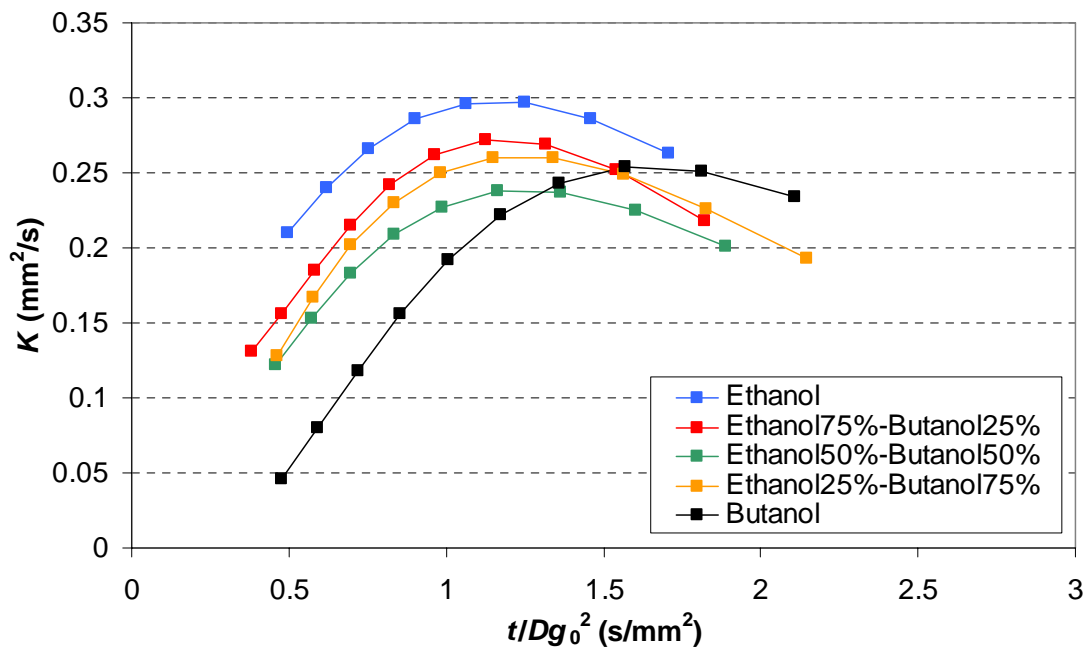


Figure 3.4 : Evolution de la constante d'évaporation K en fonction du temps pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol

Il est aussi intéressant de noter que, sur la Figure 3.4, les mélanges se comportent comme l'éthanol pur avec toutefois des constantes d'évaporation K plus faibles, alors que le 1-butanol atteint un maximum plus tard. Comme seulement la première moitié de la durée de vie de la

goutte est étudiée, l'éthanol reste très présent dans les mélanges et s'évapore bien plus que le 1-butanol, d'où un comportement proche de celui de celui de l'éthanol pur pour les mélanges. La constante d'évaporation K atteint un maximum pour tous les liquides sur la Figure 3.4, puis diminue. Cette baisse s'explique par la diminution de la vitesse et éventuellement par l'apparition d'interactions entre gouttes puisque le paramètre de distance C baisse aussi.

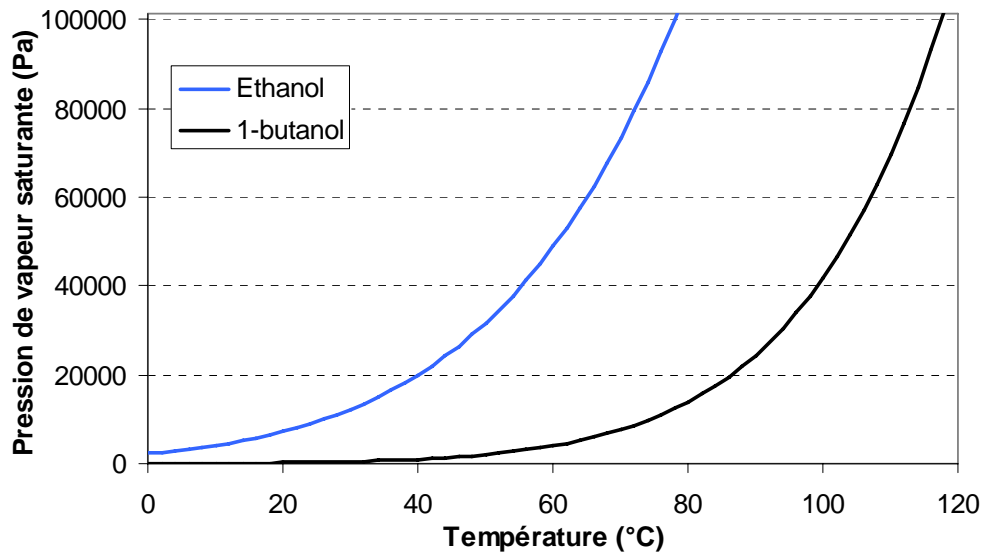


Figure 3.5 : Evolution de la pression de vapeur saturante en fonction de la température pour l'éthanol et le 1-butanol

3.1.2 Etude d'un mélange d'acétone et d'éthanol

Conditions expérimentales

Afin d'obtenir une évaporation plus importante, le 1-butanol est remplacé par de l'acétone ($T_b=56,2^\circ\text{C}$) et l'éthanol est conservé ($T_b=78,5^\circ\text{C}$). L'évolution de la pression de vapeur saturante en fonction de la température pour ces deux composants est donnée sur la Figure 3.6. Cette fois, 34 gouttes sur 35 sont déviées au lieu de 32 sur 33 afin d'augmenter encore le paramètre de distance. Quant aux vitesses initiales, elles sont de l'ordre de 7m/s au lieu de 6m/s. La température d'injection des gouttes passe à 24 ou 25°C au lieu de 23°C.

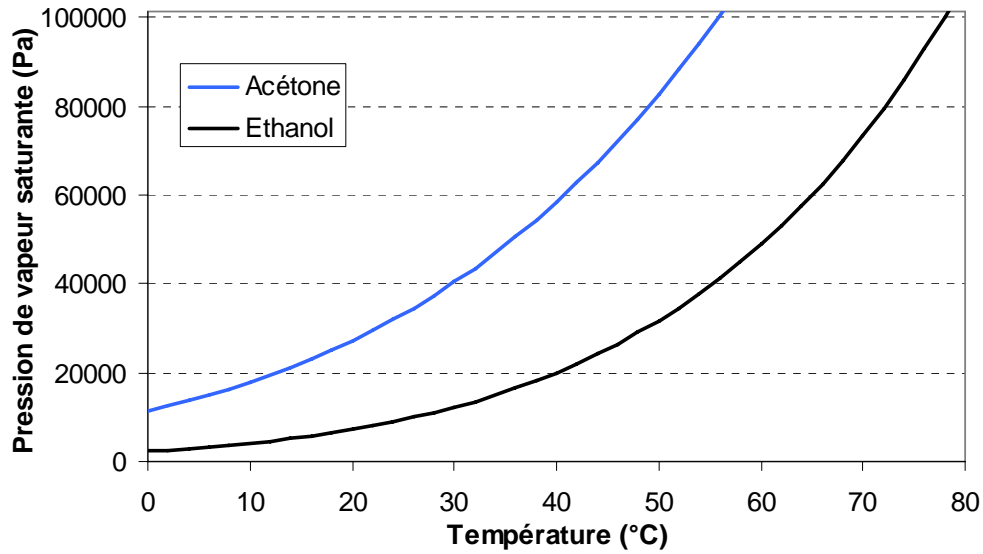


Figure 3.6 : Evolution de la pression de vapeur saturante en fonction de la température pour l'acétone et l'éthanol

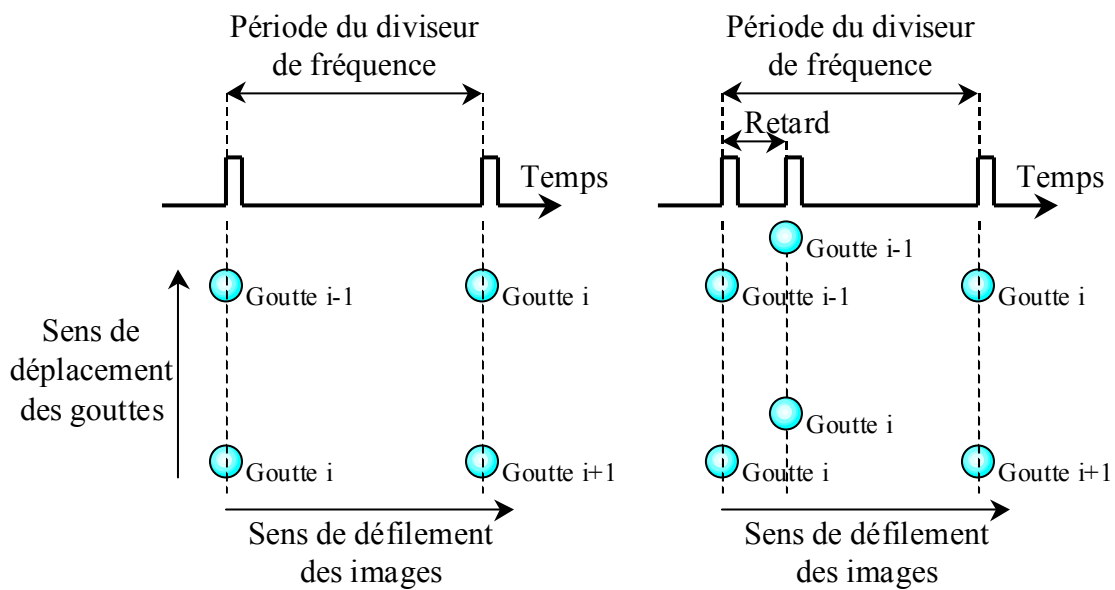


Figure 3.7 : Principe de l'ombroscopie

Afin de pouvoir mesurer la vitesse des gouttes lors des premières hauteurs près du bord d'attaque, une modification est apportée à la mesure de la vitesse par ombroscopie. Normalement, l'obturateur de la caméra est synchronisé sur la période du diviseur de fréquence correspondant à la fréquence de génération des gouttes non déviées. Sur la Figure 3.7 à gauche, lorsqu'une période du diviseur de fréquence s'écoule, une goutte i se trouve à la position de la goutte qui la précédait (goutte $i-1$) sur l'image suivante. C'est pour cette raison que les gouttes apparaissent figées sur l'acquisition vidéo.

Maintenant, l'obturateur de la caméra n'est plus seulement synchronisé par rapport au signal du diviseur de fréquence. Il s'ouvre également avec un certain retard inférieur à cette période.

Ainsi sur l'acquisition vidéo, la goutte i est visible à deux endroits différents. La distance parcourue par la goutte pendant ce retard est alors plus faible et devient mesurable. En connaissant le retard d'ouverture de l'obturateur, la vitesse peut être déterminée.

Résultats

L'évolution de la vitesse des gouttes est tracée sur la Figure 3.8. Il apparaît clairement que la vitesse décroît linéairement avec la hauteur. Les corrélations trouvées sont données dans le Tableau 3.1 avec la hauteur h (exprimée en mètres).

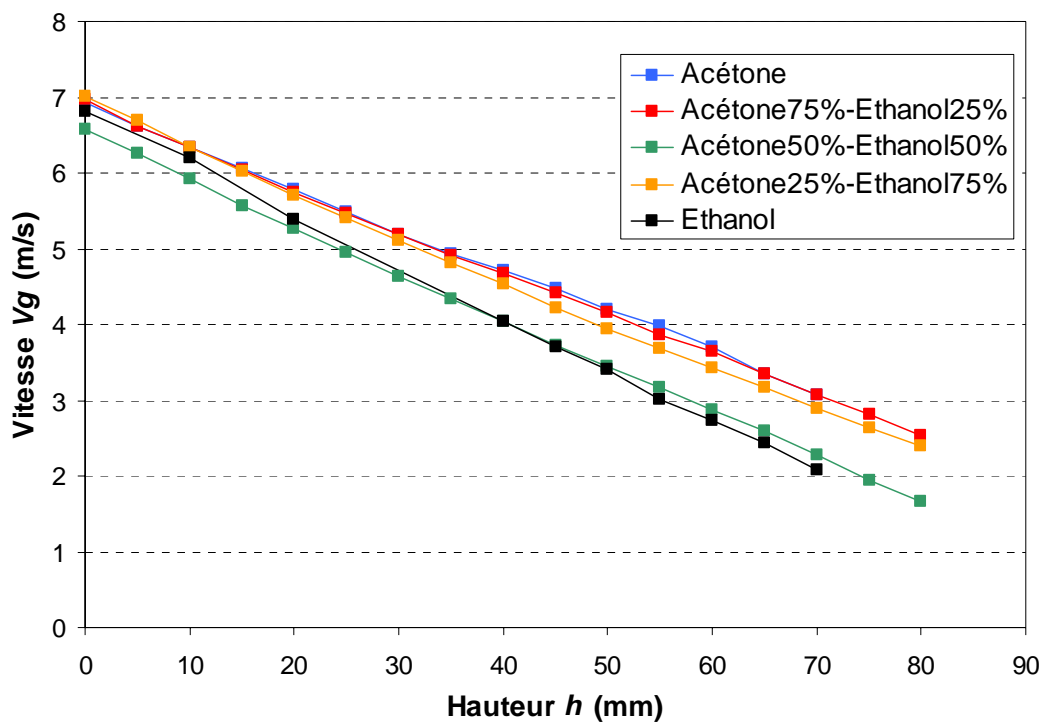


Figure 3.8 : Evolution de la vitesse de la goutte en fonction de la hauteur pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Composition initiale du liquide	V_g (en m/s)	V_g / V_{g0}
Acétone	$6,8705 - 53,77h$	$1 - 7,83h$
Acétone 75% - Ethanol 25%	$6,8695 - 58,18h$	$1 - 8,47h$
Acétone 50% - Ethanol 50%	$6,5090 - 60,90h$	$1 - 9,36h$
Acétone 25% - Ethanol 75%	$6,8856 - 57,49h$	$1 - 8,35h$
Ethanol	$6,8028 - 67,99h$	$1 - 9,99h$

Tableau 3.2 : Corrélations des vitesses et des vitesses adimensionnées en fonction de la hauteur pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Les paramètres de distance (Figure 3.9) sont encore plus importants que ceux trouvés précédemment (Figure 3.2), puisque le nombre de gouttes déviées a été augmenté et, de plus,

la fréquence d'excitation de l'injecteur est plus faible (de l'ordre de 18kHz contre 30kHz auparavant), ce qui augmente la période de génération des gouttes.

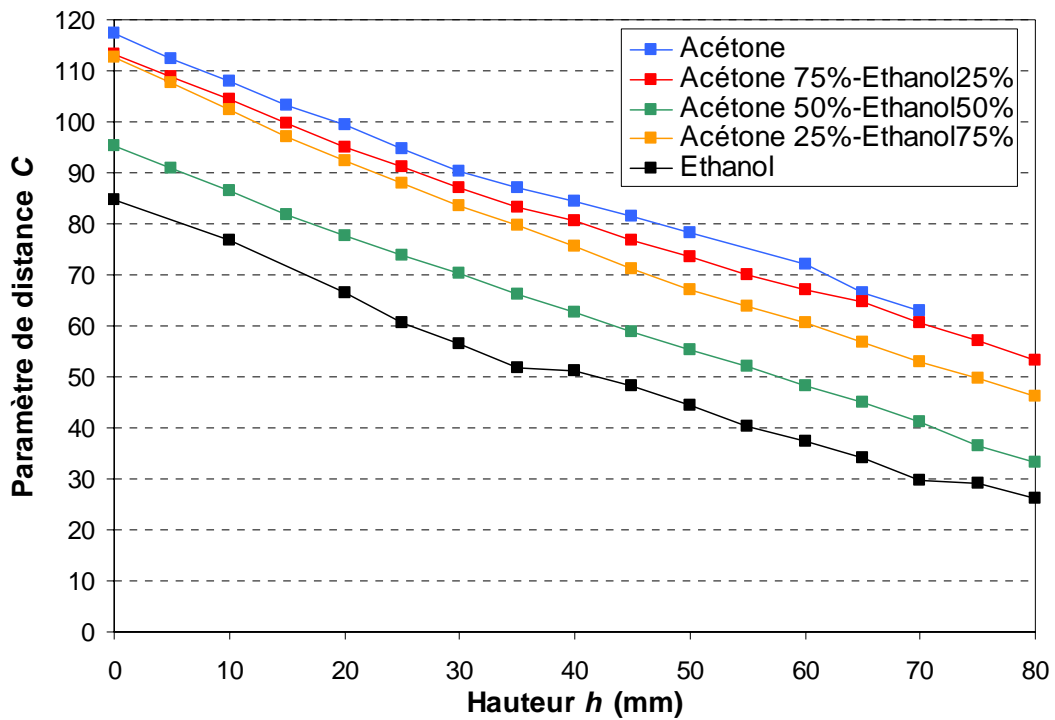


Figure 3.9 : Evolution du paramètre de distance en fonction de la hauteur pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

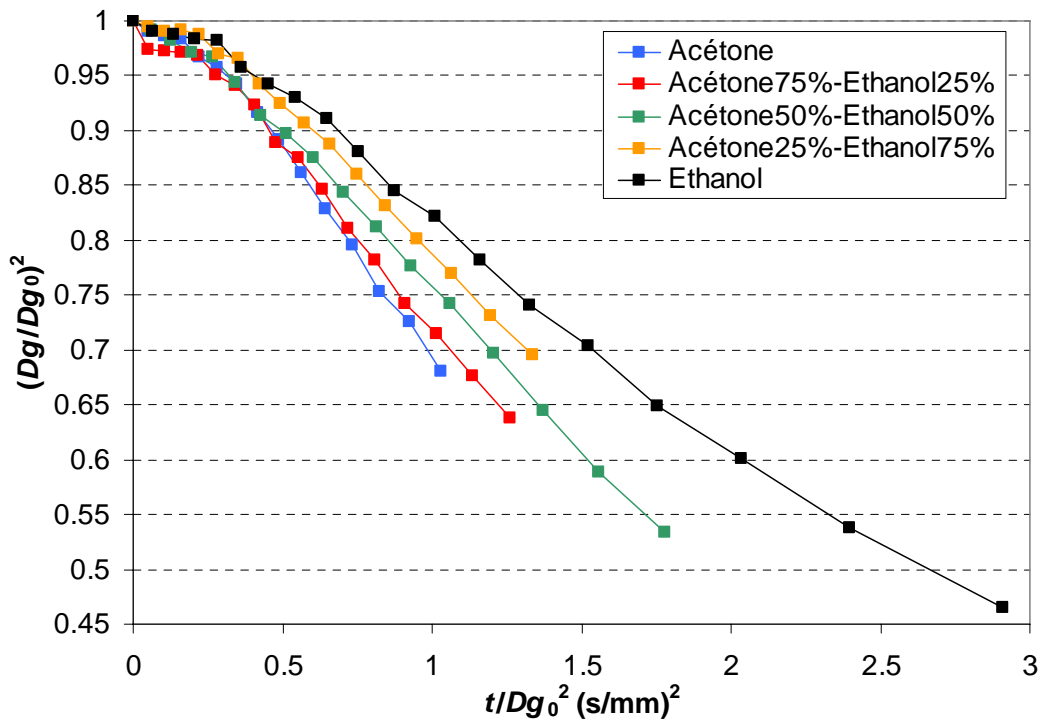


Figure 3.10 : Evolution de la taille de la goutte en fonction du temps pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

L'évolution de la taille des gouttes est tracée suivant la loi en D^2 sur la Figure 3.10 et celle de la constante d'évaporation K (après lissage de la variation du diamètre) sur la Figure 3.11. Par rapport aux mélanges d'éthanol/1-butanol, la phase de chauffage pour ces liquides est plus courte et aucune dilatation de la goutte n'apparaît. D'ailleurs la durée de la phase de chauffage est si faible qu'elle semble très proche pour tous les mélanges.

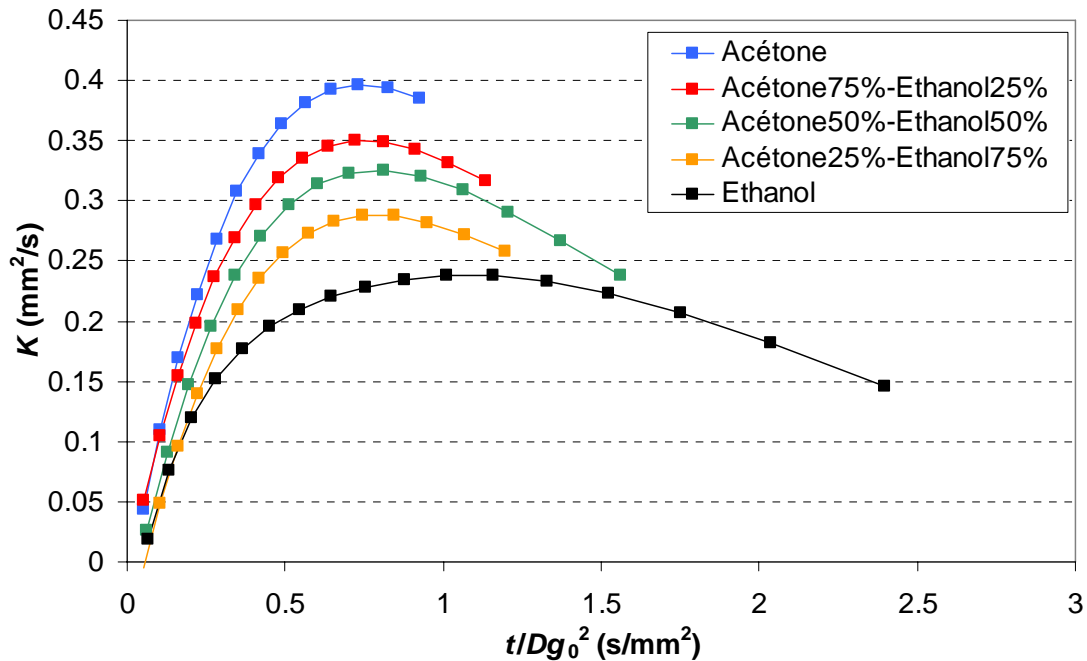


Figure 3.11 : Evolution de la constante d'évaporation K en fonction du temps pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Comme pour les mélanges éthanol/1-butanol (Figure 3.4), la constante d'évaporation K des mélanges acétone/éthanol (Figure 3.11) se comporte comme celle du composant pur le plus volatile (l'acétone ici) avec toutefois des valeurs plus faibles. De même, le composant le moins volatile pur (l'éthanol ici) atteint un maximum plus tard que les autres liquides.

Si la constante d'évaporation K variait peu avec la composition initiale pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol précédents, elle diminue avec l'augmentation de la concentration initiale d'éthanol dans la goutte (Figure 3.11). En effet, la présence d'acétone dans la goutte augmente considérablement cette constante d'évaporation. Pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol étudiés précédemment, cette constante d'évaporation se stabilise aux alentours de $0,25 \text{ mm}^2/\text{s}$ pour tous les liquides. C'est également le cas ici avec l'éthanol pur dont la constante d'évaporation atteint un palier à une valeur de $0,25 \text{ mm}^2/\text{s}$, puis décroît puisque la vitesse de la goutte diminue. Mais lorsque la concentration initiale d'acétone augmente, cette constante d'évaporation K atteint un palier dont la valeur croît également. Pour l'acétone pure, elle atteint $0,4 \text{ mm}^2/\text{s}$.

Ces écarts de constante d'évaporation ne doivent pas seulement s'expliquer par la différence de température d'ébullition, car des comportements différents sont observés pour les mélanges acétone/éthanol et les mélanges éthanol/1-butanol. Une ou plusieurs autres propriétés physiques doivent donc influencer l'évaporation des gouttes et il est difficile de savoir de laquelle ou desquelles il s'agit. L'analyse des constantes d'évaporation pour tous les liquides sera donc plus détaillée lors de leur confrontation aux résultats des modèles d'évaporation, car il sera possible d'analyser numériquement quelles propriétés physiques influent sur la constante d'évaporation.

3.2 Mesure de la température et de la composition moyennes de la goutte

Dans cette partie, le banc de mesure du LEMTA de Nancy a été utilisé durant un stage de six semaines pour mesurer l'évolution de la température et de la composition moyennes de gouttes bi-composants composées d'acétone et d'éthanol. Les gouttes ont tout d'abord été injectées dans le milieu ambiant, puis dans le panache d'air chaud généré par le système de chauffage par la suite.

3.2.1 Injection dans un milieu à faible température

Conditions expérimentales

L'évaporation des gouttes est cette fois-ci étudiée en refroidissement dans le milieu ambiant (température ambiante de l'ordre de 20°C). L'origine de cette hauteur h ou du temps t est prise à la sortie de l'injecteur.

Le déviateur de gouttes n'ayant pas été utilisé, le paramètre de distance initial C_0 (compris entre 6,2 et 6,4) est beaucoup trop faible pour considérer que les gouttes sont isolées. *Atthasit* et al. [35] ont déterminé une corrélation pour corriger la décroissance de la taille et le chauffage ou le refroidissement de la goutte en multipliant le débit massique de vapeur par le coefficient suivant :

$$\eta = 1 - 0,57 \left[1 - \frac{1 - \exp(-0,13(C_0 - 6))}{1 + \exp(-0,13(C_0 - 6))} \right] \quad (3.7)$$

pour $2,5 < C_0 < 16$ et un nombre de *Reynolds* particulière $12 < Re_p < 25$.

Les diamètres initiaux sont de l'ordre de 110µm. Les liquides utilisés sont l'acétone ($T_b=56,2^\circ\text{C}$) et l'éthanol ($T_b=78,5^\circ\text{C}$). La vitesse d'injection est de l'ordre de 7,5m/s et la température d'injection d'environ 45°C. Cette dernière doit être importante car le refroidissement des gouttes, malgré les interactions, est conséquent et la calibration des coefficients pour la technique FIL trois couleurs n'a pas été effectuée pour des températures du liquide inférieures à 20°C. Même si la température ambiante est d'environ 20°C, les gouttes peuvent atteindre des températures bien plus faibles car, pour s'évaporer, les gouttes consomment de l'énergie (enthalpie de vaporisation). Ceci implique que la température de gouttes en évaporation se stabilise toujours à une valeur plus faible que la température ambiante. Cette « température d'équilibre » diminue avec la température d'ébullition du liquide.

Faible évaporation des gouttes dans le milieu ambiant

Pour la suite, il est important de remarquer que, dans ces conditions, les gouttes s'évaporent très peu, même en les injectant à une température élevée. La Figure 3.12 présente des mesures de diamètre de gouttes d'éthanol effectuées sur le banc de l'ONERA-DMAE. Elles sont injectées à des températures de 22°C, 44°C et 54°C dans un milieu à 23°C. Les mesures n'ont pu être effectuées pour les premières hauteurs car la non-sphéricité des gouttes après leur injection ne permet pas de déterminer correctement la valeur du diamètre. Ces résultats montrent clairement que le diamètre diminue très peu. De plus, cette diminution n'est pas seulement due à l'évaporation. En effet, comme les gouttes refroidissent, leur masse volumique augmente ce qui réduit la taille des gouttes (phénomène inverse de la dilatation). Les réductions de diamètre visibles sur la Figure 3.12 sont donc à la fois due à l'évaporation et au changement de masse volumique. Dans ces conditions, l'évaporation des gouttes d'éthanol est donc extrêmement faible. Les gouttes d'acétone par leur température d'ébullition plus faible s'évaporeront plus, mais la réduction de diamètre restera du même ordre de grandeur.

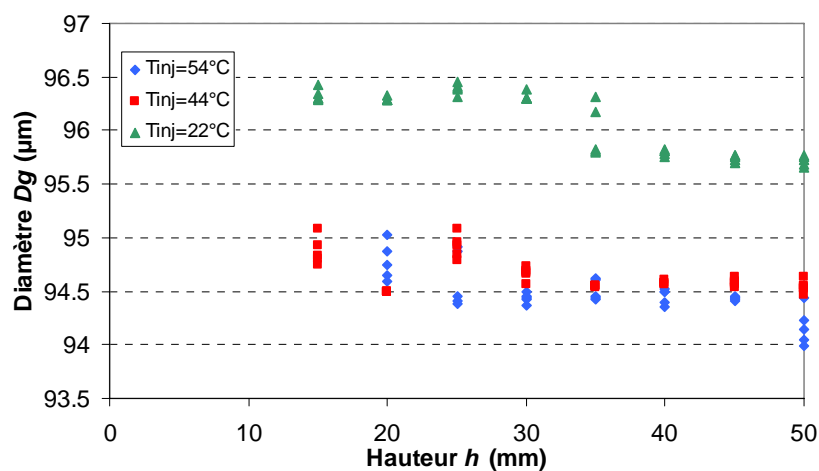


Figure 3.12 : Evolution du diamètre de gouttes d'éthanol injectées dans le milieu ambiant

Résultats

Le refroidissement de l'acétone pur et de deux mélanges, initialement composés en masse de 60% d'acétone et 40% d'éthanol puis 40% d'acétone et 60% d'éthanol, est étudié. Le diamètre des gouttes n'a pu être mesuré sur toute la hauteur de mesure. Seul le diamètre initial a pu être déterminé par débitmétrie. C'est à dire que la température d'injection est diminuée jusqu'à environ 20°C pour que l'évaporation des gouttes après l'injection soit encore plus faible. Les gouttes sont récupérées dans un bêcher de 5ml gradué pendant 60 à 90 secondes. En connaissant le volume de liquide Vol , le temps t_l pendant lequel il a été recueilli et la fréquence de génération des gouttes f_{ex} , il est possible de remonter au diamètre des gouttes :

$$Dg = \left(\frac{6Vol}{\pi f_{ex} t_l} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.8)$$

Le volume évaporé entre l'injection et la fin de la récupération du liquide peut être négligé car il a été montré précédemment que le liquide s'évaporait lorsqu'il est injecté dans un milieu à faible température ambiante. C'est aussi le cas dans le récipient, car en y laissant le liquide pendant deux jours et demi, le volume est passé de 1,4ml à 1,2ml. L'estimation du diamètre initial par cette méthode s'avère donc correcte et tous les mélanges ont donc des diamètres initiaux proches. Les conditions initiales des gouttes et la température ambiante pour chaque liquide étudié sont présentées dans le Tableau 3.3.

Composition initiale du liquide	Dg_0 (en μm)	Tg_0 (en $^{\circ}\text{C}$)	C_0	T^{∞} (en $^{\circ}\text{C}$)
Acétone	111,8	45,9	6,4	19,4
Acétone 60% - Ethanol 40%	106,2	45,6	6,2	20,4
Acétone 40% - Ethanol 60%	107,1	44,9	6,4	19,4

Tableau 3.3 : Diamètre, température et paramètre de distance initiaux et température ambiante pour chaque liquide

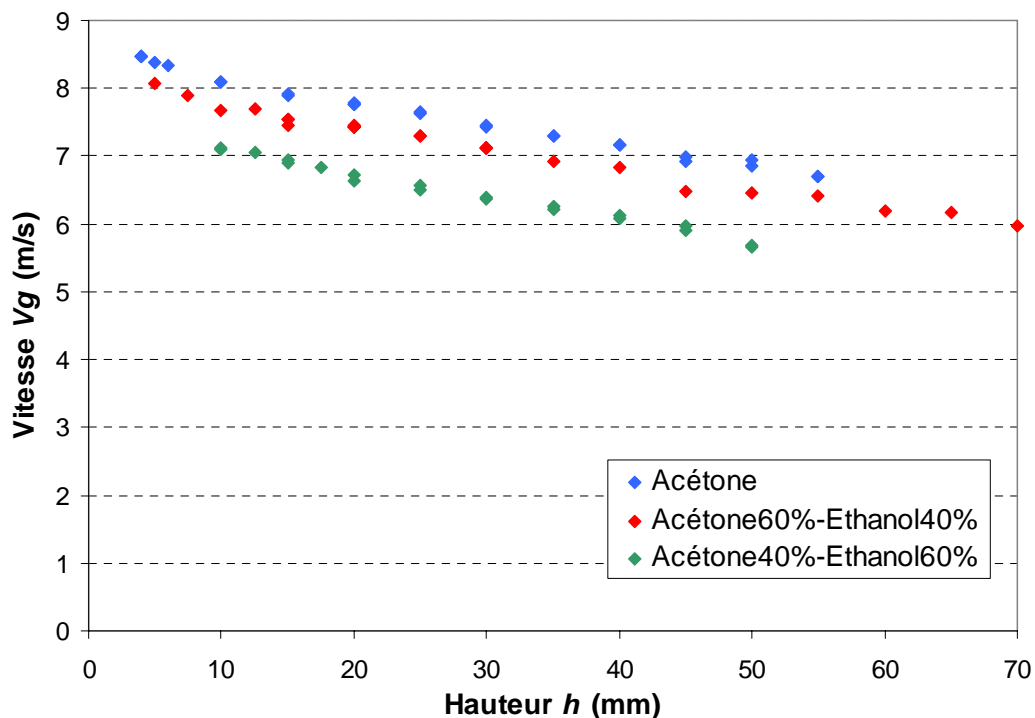


Figure 3.13 : Evolution de la vitesse de la goutte en fonction de la hauteur pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Les mesures de vitesse sur les premières hauteurs n'ont pu être réalisées à cause de la présence de gouttes satellites qui fausse la mesure par LDA. Malgré que les gouttes soient injectées vers le bas sur ce banc de mesure, l'évolution des profils de vitesse (Figure 3.13)

reste quasiment linéaire et la courbure reste très faible. Des corrélations du second ordre (h est toujours exprimées en mètres) sont tout de même déterminées pour calculer le temps écoulé (Tableau 3.4).

Composition initiale du liquide	V_g (en m/s)	V_g/V_{g0}
Acétone	$8,5831 - 43,89h + 189,9h^2$	$1 - 5,11h + 22,13h^2$
Acétone 60% - Ethanol 40%	$8,184 - 41,23h + 144h^2$	$1 - 5,04h + 17,6h^2$
Acétone 40% - Ethanol 60%	$7,4884 - 38,96h + 76,9h^2$	$1 - 5,2h + 10,27h^2$

Tableau 3.4 : Corrélations des vitesses et des vitesses adimensionnées en fonction de la hauteur pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Avant de comparer les températures mesurées, l'évolution du pourcentage moyen d'éthanol [C_{etha}] dans les gouttes est présentée sur la Figure 3.14. Comme la température d'ébullition de l'acétone est plus faible que celle de l'éthanol, l'acétone s'évapore plus vite et donc le pourcentage d'éthanol devrait logiquement augmenter. De plus, la composition ne devrait quasiment pas varier vue la très faible évaporation des gouttes. Les mesures (Figure 3.14) ne confirment absolument pas ce comportement car le pourcentage d'éthanol a diminué et, de plus, les valeurs trouvées sont très dispersées. Les valeurs égales 30% peuvent en fait être plus faibles car, lors du processus de calcul de la température et de la concentration, le pourcentage déterminé ne peut être inférieur à 30% ou supérieur à 90% (pourcentages limites de la calibration présentée dans le Chapitre précédent).

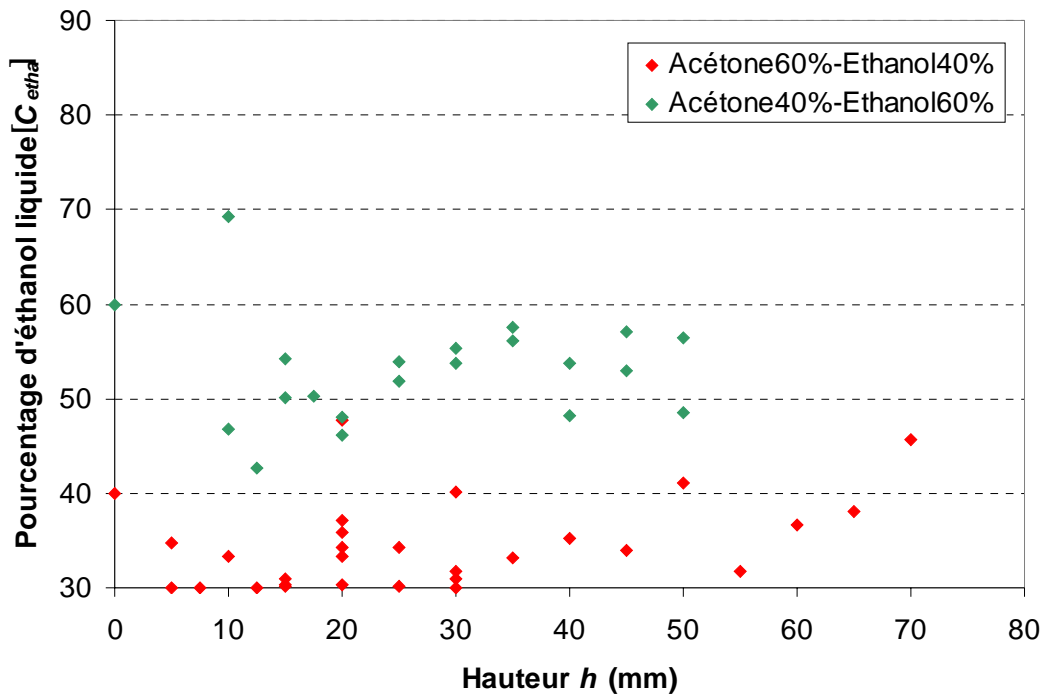


Figure 3.14 : Evolution du pourcentage moyen d'éthanol dans la goutte pour les deux mélanges d'acétone et d'éthanol

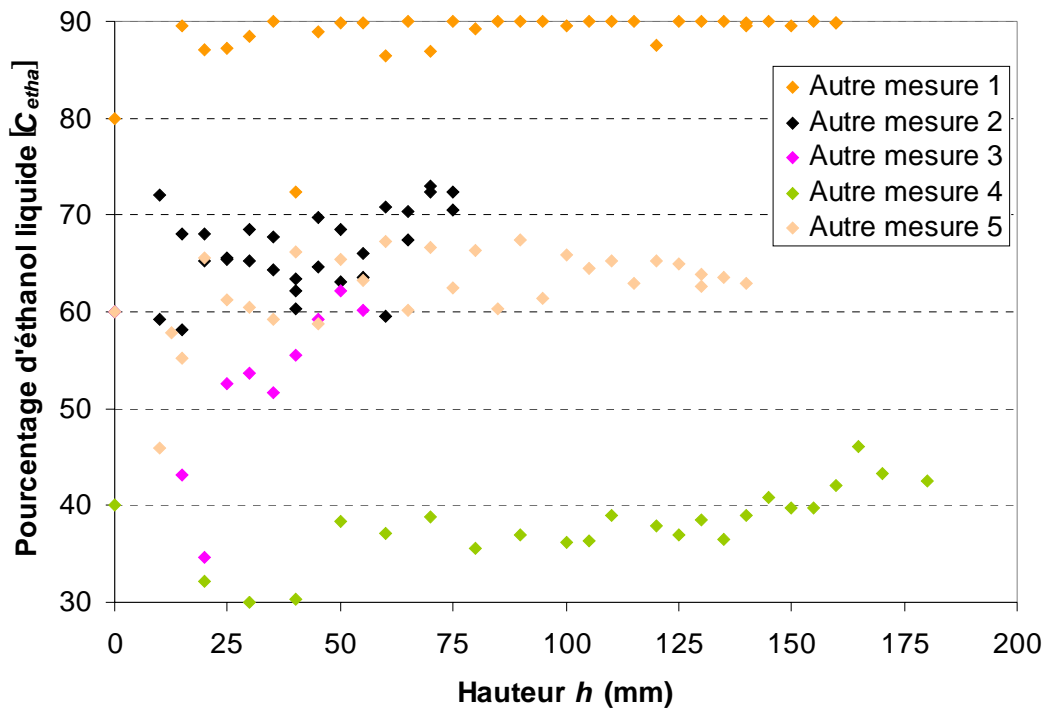


Figure 3.15 : Evolution du pourcentage moyen d'éthanol dans la goutte pour d'autres mesures

Ce comportement ne se retrouve pas sur toutes les mesures. Des résultats pour d'autres mesures de pourcentage d'éthanol liquide sont présentés sur la Figure 3.15. Il s'agit de mesures effectuées pour d'autres conditions expérimentales. Les gouttes sont toujours injectées dans un milieu à environ 20°C, mais leur taille, leur vitesse et leur température d'injection diffèrent. Le pourcentage initial d'éthanol des mesures 2, 3 et 5 est de 60%. Des comportements différents sont observés. Le pourcentage augmente ou diminue puis augmente. De plus, ces variations ou la dispersion de composition moyennes peuvent être considérables comme c'est le cas sur les séries de mesure n°2 et 3. Or ces variations impliqueraient qu'un composant s'est beaucoup plus évaporé que l'autre composant, ce qui se traduirait par une évaporation importante de la goutte, ce qui n'est pas le cas dans cette configuration expérimentale. Les mesures de composition de goutte s'avèrent donc très douteuses.

La sensibilité du rapport de la voie 1 sur la voie 2 est donc analysée. Pour cela, des intensités de signaux pour un point de mesure existant sont choisies. Un pourcentage de 1% d'erreur est appliqué sur les intensités de la voie 2, aussi bien sur la mesure que sur la référence. Les signaux des autres voies ne sont pas modifiés. Les résultats des cas les plus défavorables sont présentés dans le Tableau 3.5 et la Figure 3.16. Sur cette dernière, les courbes bleues (respectivement la courbe rouge) décrivent l'ensemble des couples de valeurs de la température T et de la concentration $[C_{etha}]$ qui sont solutions du rapport d'intensité des voies 1 et 2 (respectivement 1 et 3). La solution des intensités mesurées est le cas n°1, mais une

erreur de 1% peut engendrer des écarts de l'ordre 10% sur le pourcentage d'éthanol, ce qui est considérable. La bande spectrale n°2 n'est donc pas assez sensible à la composition pour donner des résultats satisfaisants.

Cas	I_2	I_{2ref}	T (°C)	$[C_{etha}]$ (%)
Cas 1 (intensités mesurées)	1330	3155,3	23,2	52,3
Cas 2	1343,3	3123,7	27,2	63,7
Cas 3	1316,7	3186,9	20,8	43,7

Tableau 3.5 : Cas étudiés pour l'analyse de la sensibilité sur la mesure de la concentration d'éthanol

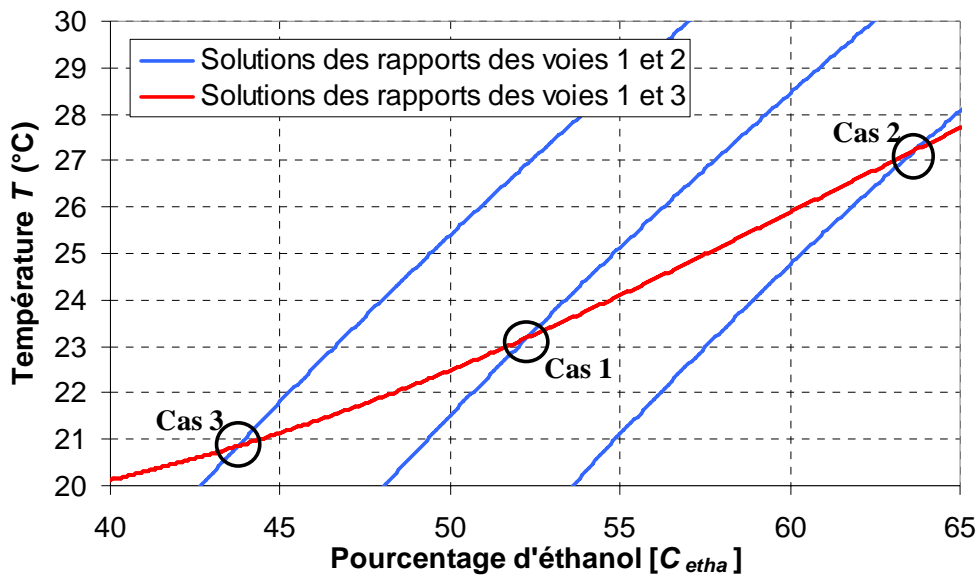


Figure 3.16 : Tracé des solutions des cas présentés dans le Tableau 3.5

L'inconvénient est qu'il est nécessaire de connaître la composition de la goutte pour déterminer la température moyenne. Dans le Tableau 3.5 et sur la Figure 3.16, l'erreur sur la composition entraîne des écarts de l'ordre de 3 ou 4°C. La température des deux mélanges étudiés est alors recalculée en considérant que la composition de la goutte ne varie pas et reste égale à la composition initiale. Comme les gouttes s'évaporent peu, cette approximation est tout à fait correcte. La Figure 3.17 présente les températures moyennes obtenues en considérant que:

- la concentration d'éthanol dans les gouttes est celle mesurée (losanges pleins)
- la concentration d'éthanol dans les gouttes est imposée et est égale à sa valeur initiale (losanges vides).

Des différences apparaissent entre les deux cas, surtout pour le cas acétone 40% - éthanol 60%, puisque dans l'autre cas l'erreur sur la composition est atténuée en imposant que le pourcentage d'éthanol mesuré ne doit pas être inférieur à 30% (Figure 3.14). Ces écarts de

température peuvent être 5°C, ce qui est loin d'être négligeable. C'est pour cette raison qu'à partir de maintenant, les températures mesurées seront déterminées en considérant que la composition reste égale à la composition initiale. Comme, il a été précisé auparavant, comme la goutte s'évapore très peu, cette approximation est tout à fait acceptable et donnera des résultats bien plus convenables.

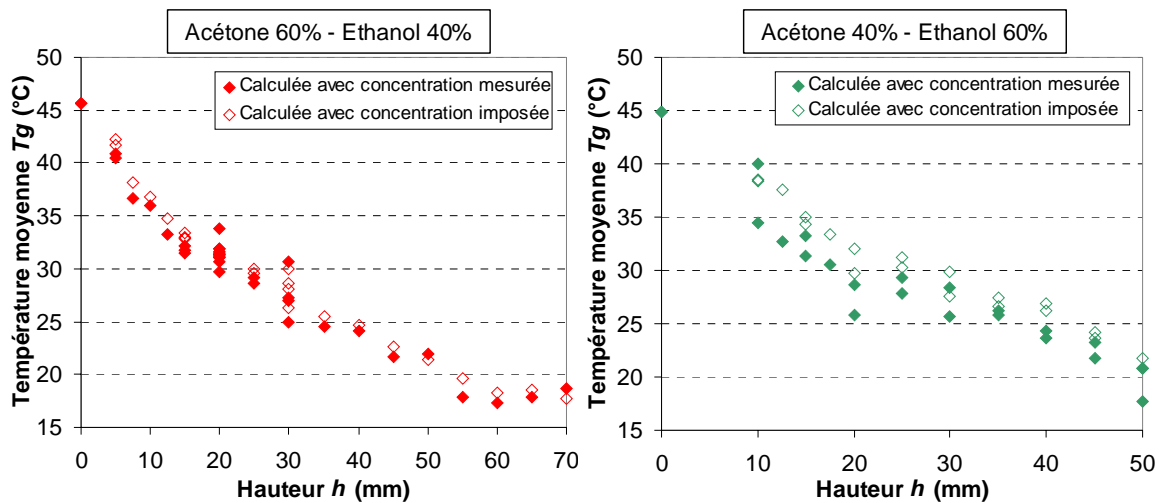


Figure 3.17 : Evolution de la température moyenne des gouttes en fonction de la hauteur pour les deux mélanges avec la composition mesurée et la composition imposée

Les températures obtenues pour les trois liquides sont maintenant comparées. Comme les profils de vitesses ne sont pas rigoureusement identiques (Figure 3.13), il est nécessaire de tracer l'évolution de ces températures en fonction du temps et non de la hauteur. Malgré le peu de temps écoulé et les interactions entre gouttes, le refroidissement des gouttes est important puisque moins de dix millisecondes sont nécessaires pour que leur température diminue sous la température ambiante (Figure 3.18). Cette chute de température n'est pas uniquement due aux échanges de chaleur entre la goutte et le milieu ambiant par conduction et convection, car si c'était le cas, tous les liquides se refroidiraient de façon similaire et seuls de faibles écarts apparaîtraient à cause des propriétés physiques (masse volumique, chaleur spécifique et conductivité thermique) et de la vitesse des gouttes qui diffèrent légèrement. Il faut donc tenir compte de l'évaporation de la goutte qui, même si elle est faible, consomme une quantité considérable d'énergie puisque les chaleurs latentes d'évaporation sont importantes ($5,0091 \cdot 10^5$ J/kg pour l'acétone et $8,4017 \cdot 10^5$ J/kg pour l'éthanol à la température normale d'ébullition). Comme à une température donnée, l'acétone s'évapore plus que l'éthanol, elle consomme plus d'énergie, d'où un refroidissement plus important pour l'acétone pur que pour les mélanges (Figure 3.18), malgré une chaleur latente d'évaporation plus faible. Une légère différence est visible entre les deux mélanges qui s'explique par le plus grand pourcentage d'acétone qui refroidit plus la goutte, ce composant s'évaporant plus que l'éthanol.

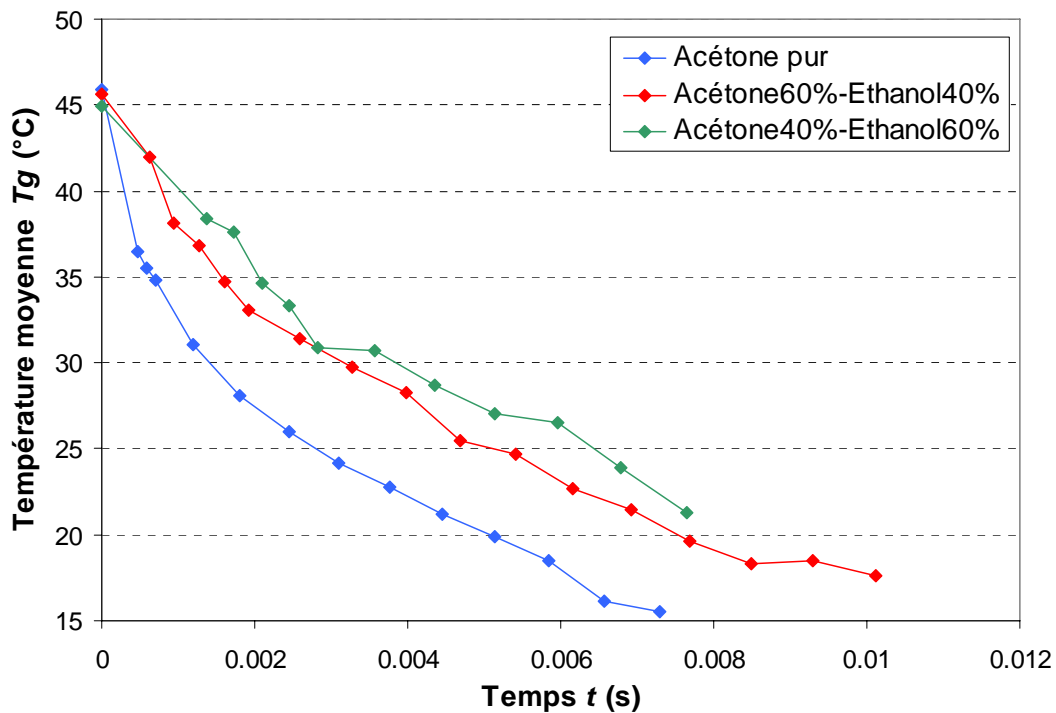


Figure 3.18 : Evolution de la température moyenne des gouttes en fonction du temps pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Le chauffage ou le refroidissement de la goutte a été défini dans le premier Chapitre par la puissance \dot{Q}_l qui est égale à :

$$\dot{Q}_l = \frac{\pi}{6} Dg^3 \rho_l C_{p_l} \frac{dTg}{dt} \quad (3.9)$$

Cette puissance est évaluée en discrétisant la dérivée de la température par rapport au temps par la méthode des différences finies. La dérivée de la température Tg_i à l'instant t_i s'écrit donc en différence centrée sur le temps :

$$\frac{dTg^n}{dt} = \frac{(Tg^{n+1} - Tg^n) + (Tg^n - Tg^{n-1})}{(t^{n+1} - t^n) + (t^n - t^{n-1})} = \frac{Tg^{n+1} - Tg^{n-1}}{t^{n+1} - t^{n-1}} \quad (3.10)$$

$n+1$ (respectivement $n-1$) est relatif à la mesure suivante (respectivement précédente) dans le temps.

La masse de la goutte est déterminée à partir du diamètre initial de la goutte (puisque l'évaporation est très faible) et à partir de la masse volumique des liquides ρ_l qui est connue pour chaque composant, tout comme la chaleur spécifique C_{p_l} .

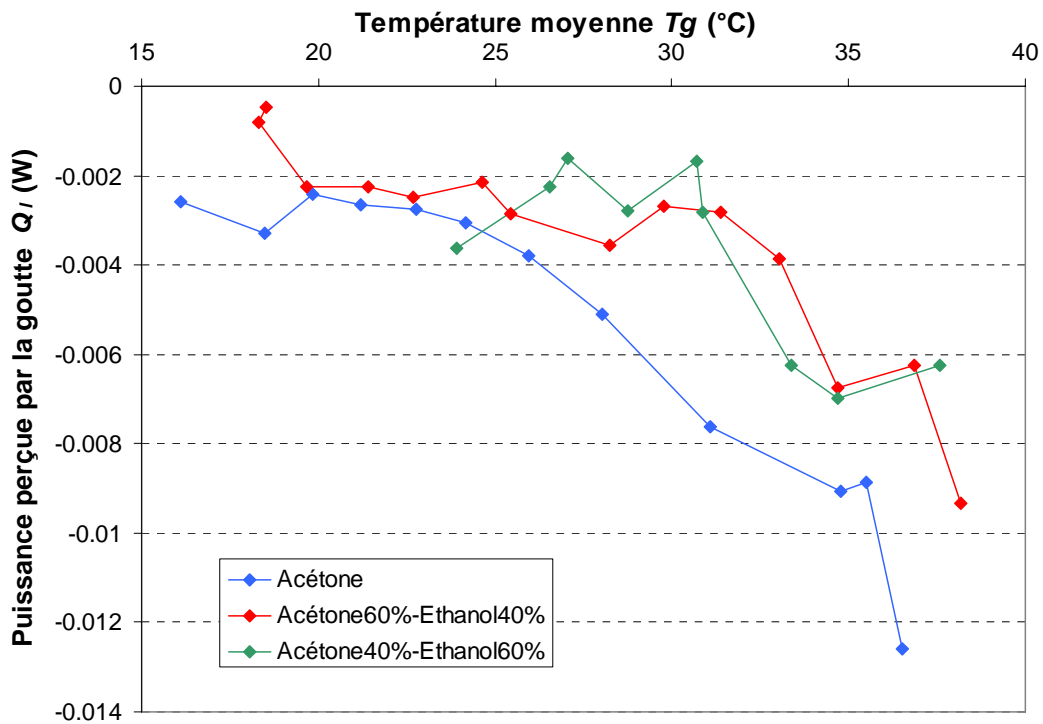


Figure 3.19 : Evolution de la puissance servant à chauffer ou à refroidir la goutte en fonction de la température de la goutte

L'évaporation et donc le refroidissement des gouttes dépend de la température ambiante, qui est quasiment la même pour tous les liquides, ainsi que de la température à la surface. Cette dernière n'étant pas connue, \dot{Q}_l est tracée en fonction de la température moyenne de la goutte T_g (Figure 3.19). A une température du liquide donnée, les gouttes d'acétone pure refroidissent bien plus que les deux mélanges. Ces derniers donnent des résultats assez proches puisque leur chute de température est presque identique (Figure 3.18), leur composition étant très proche. Il faut noter que, même lorsque les gouttes ont atteint une température inférieure à 20°C (approximativement la température ambiante), \dot{Q}_l est encore négatif ce qui implique que les gouttes vont continuer à refroidir.

3.2.2 Injection dans le panache d'air chaud

Pour étudier l'influence de la composition sur le processus de chauffage, les gouttes sont maintenant injectées dans le panache d'air chaud généré par le système de chauffage. Les compositions étudiées sont l'acétone pure et un mélange composé d'acétone à 40% et d'éthanol à 60%. Le diamètre initial est de l'ordre de 135 μ m, le paramètre de distance initial est d'environ 8 et deux températures d'injection sont exploitées : 25°C et 40°C. Quant aux profils de vitesse des gouttes, leur évolutions sont toutes très proches (Figure 3.20). Le Tableau 3.6 présente les quatre expériences.

Composition initiale du liquide	Dg_0 (μm)	Tg_0 ($^{\circ}\text{C}$)	C_0
Acétone	138,8	26,8	8,0
Acétone	138,8	40,7	8,3
Acétone 40% - Ethanol 60%	132,4	23,7	6,9
Acétone 40% - Ethanol 60%	137,0	42,5	8,0

Tableau 3.6 : Diamètre, température et paramètre de distance initiaux pour chaque liquide

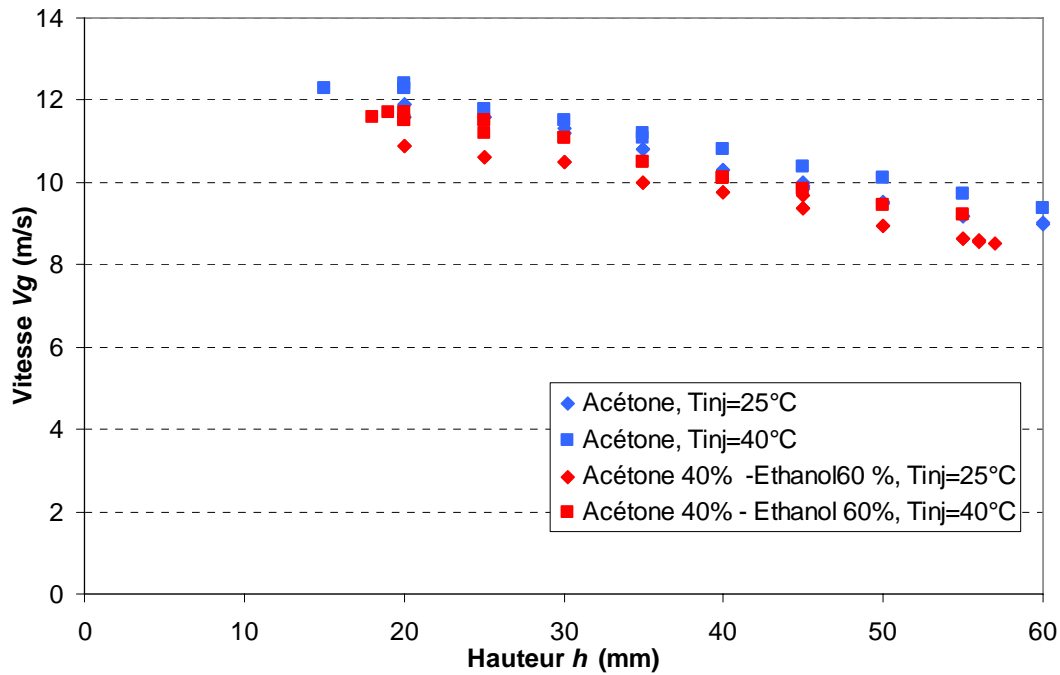


Figure 3.20 : Evolution du profil de vitesse des gouttes en fonction de la hauteur pour chaque liquide

Composition initiale du liquide	Vg (en m/s)	Vg/ Vg_0
Acétone	$13,622 - 89,09h + 169,3h^2$	$1 - 6,54h + 12,43h^2$
Acétone	$13,475 - 61,52h - 122,1h^2$	$1 - 4,57h - 9,06h^2$
Acétone 40% - Ethanol 60%	$11,658 - 28,01h - 488,7h^2$	$1 - 2,40h - 41,92h^2$
Acétone 40% - Ethanol 60%	$13,060 - 72,14h + 10,7h^2$	$1 - 5,52h - 0,82h^2$

Tableau 3.7 : Corrélations des vitesses et des vitesses adimensionnées en fonction de la hauteur pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Pour le mélange, le problème rencontré lors de l'injection dans le milieu ambiant se pose également ici pour la mesure de la concentration $[C_{etha}]$. Cependant, les gouttes sont cette fois-ci injectées dans le panache d'air chaud et l'évaporation est alors plus importante. Or les mesures de concentration d'éthanol liquide s'avèrent là aussi douteuses puisque des dispersions de 10%, voir même 15%, font leur apparition pour une même hauteur (Figure 3.21). La température moyenne des gouttes est à nouveau déterminée pour la composition mesurée et une composition imposée (égale à la composition initiale). Là encore,

les résultats pour ces deux conditions diffèrent considérablement et les écarts observés peuvent atteindre 5°C (Figure 3.22).

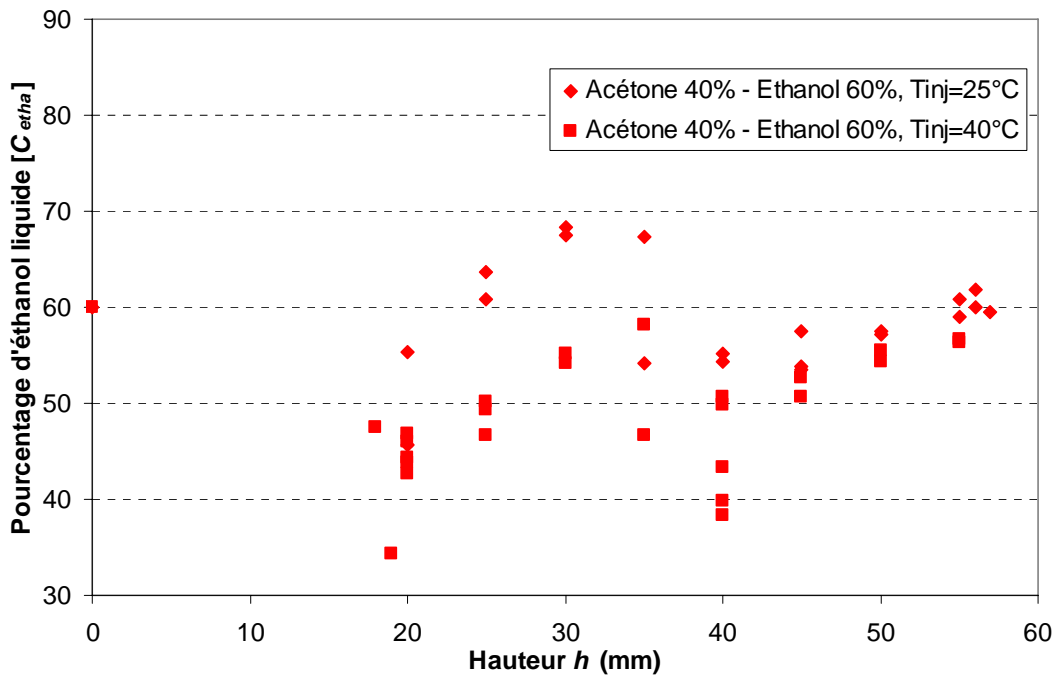


Figure 3.21 : Evolution du pourcentage moyen d'éthanol liquide en fonction de la hauteur pour le mélange d'acétone et d'éthanol pour les deux températures d'injection

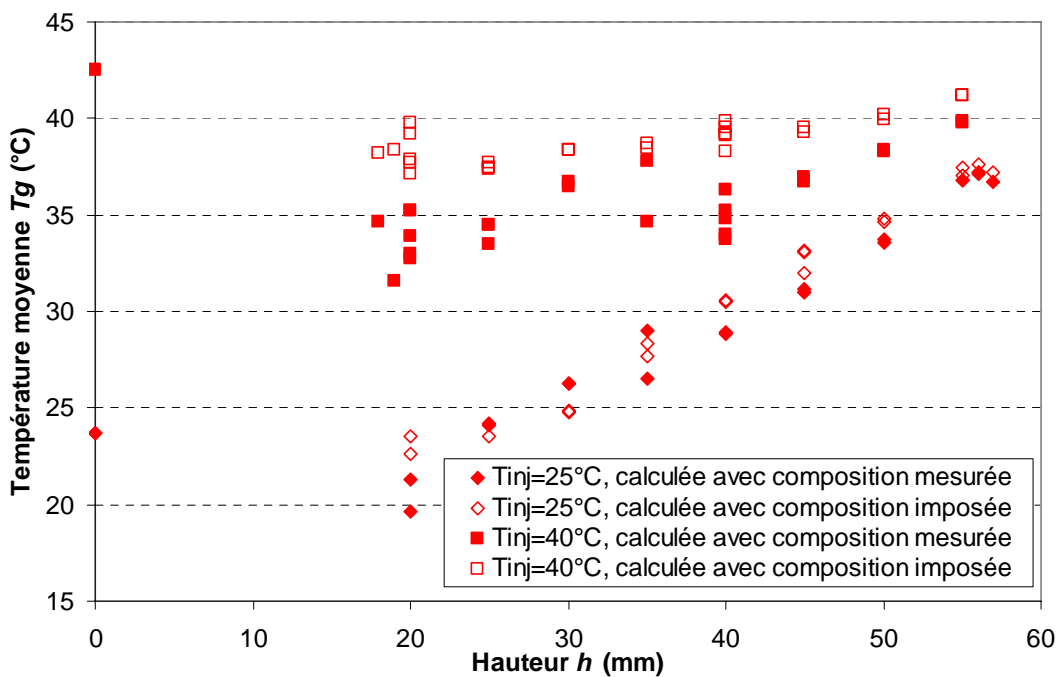


Figure 3.22 : Evolution de la température moyenne des gouttes en fonction de la hauteur pour les mélanges avec la composition mesurée et la composition imposée pour les mélanges d'acétone et d'éthanol

Si imposer une concentration égale à sa valeur initiale pour déterminer les températures mesurées ne posait pas de problèmes pour le cas des gouttes injectées dans le milieu à faible température ambiante, cela paraît plus délicat dans la configuration actuelle car l'évaporation est plus intense et il n'est pas sûr que la composition des gouttes reste proche de la composition initiale, malgré les fortes interactions qui limitent l'évaporation. Cependant, cette approximation reste toutefois plus correcte que d'utiliser les compositions mesurées dont le comportement est, en général, contraire à celui attendu. En effet, le pourcentage d'éthanol mesuré est souvent très inférieur au pourcentage initial alors qu'il devrait augmenter au cours du temps, puisqu'il s'évapore moins vite que l'acétone, la température d'ébullition de l'éthanol étant inférieure à celle de l'acétone. Il sera donc nécessaire de vérifier numériquement, si les modèles sont capables de prédire correctement la quantité de liquide évaporé, que les gouttes s'évaporent peu dans cette configuration et donc que la composition varie peu.

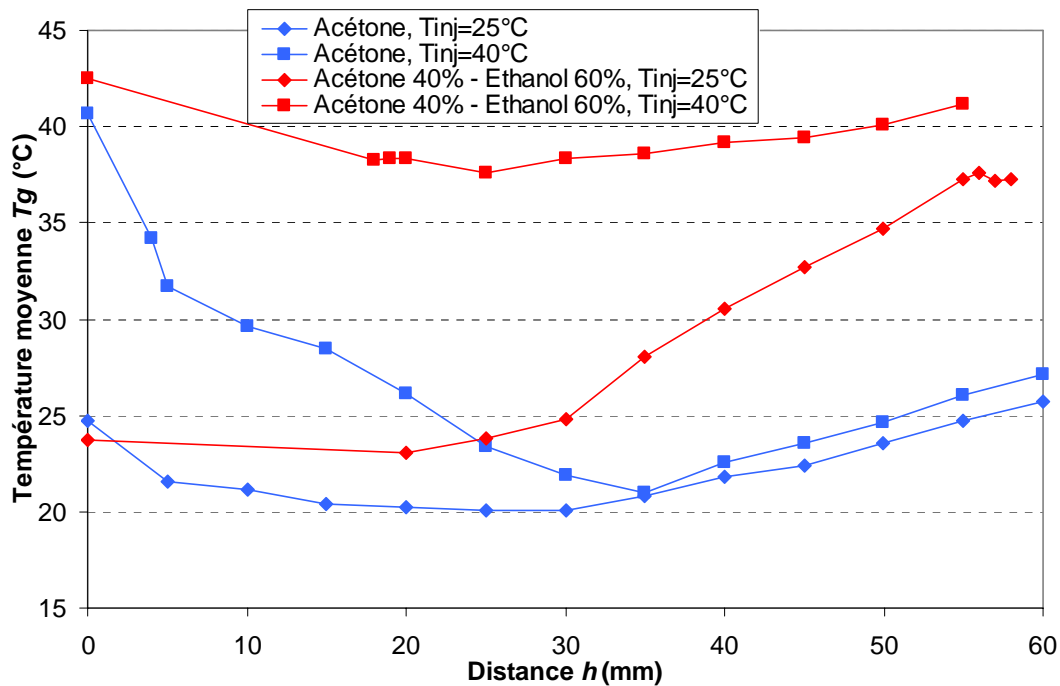


Figure 3.23 : Evolution de la température moyenne des gouttes en fonction du temps pour les différents mélanges d'acétone et d'éthanol

La comparaison de l'évolution de la température moyenne des gouttes en fonction du temps (Figure 3.23) montre clairement que la présence de l'éthanol implique des températures plus élevées de la goutte.

Tout d'abord pour les liquides injectés à environ 25°C , les gouttes d'acétone pure tendent d'abord à se stabiliser aux alentours de 20°C avant de voir leur température s'élever, puisque la température du panache d'air chaud augmente lorsqu'on se rapproche de la sortie du Y du système de chauffage. Une température d'environ 25°C est finalement atteinte. Par contre, la

température du mélange aussi injecté à environ 25°C tend au début à se stabiliser entre 23 et 24°C. De plus, la phase de montée en température s'amorce plus tôt que pour l'acétone pure et le chauffage est bien plus conséquent. Cela s'explique par la pression de vapeur saturante plus faible pour l'éthanol à une température donnée (Figure 3.6), ce qui nécessite d'atteindre des températures plus élevées avec le mélange pour évaporer une quantité de liquide comparable à celle obtenue avec l'acétone pure.

Concernant les gouttes injectées à une température d'environ 40°C, la différence est encore plus notable, car les gouttes d'acétone pure voient leur température chuter à environ 22°C après avoir parcouru 35mm (ce qui correspond à 2,9 millisecondes), pour ensuite atteindre des températures très proches de celles obtenues avec l'acétone pure injectée à 25°C. Par contre, la température du mélange bi-composants baisse peu (de 5°C seulement contre 20°C avec l'acétone pure), puis remonte légèrement par la suite quand la température du panache d'air chaud augmente. Cette faible montée en température laisse supposer que ce mélange tendrait à se stabiliser à une température comprise entre 40 et 45°C.

3.3 Conclusion

L'influence de la composition des gouttes sur le phénomène d'évaporation a pu être mesurée et analysée. Tout d'abord, lors de l'évaporation dans la couche limite thermique de la plaque chauffante, l'ajout du 1-butanol (composant peu volatile) dans l'éthanol augmente la durée de la phase de chauffage et atteindre une constante d'évaporation comparable à celle de l'éthanol pur requiert plus de temps. Lorsque la proportion de 1-butanol devient importante, l'évaporation au début de la durée de vie de la goutte est même insuffisante pour compenser la dilatation de la goutte qui voit alors son diamètre augmenter. Ensuite de l'acétone (composant très volatile) a été ajoutée à l'éthanol. Cette fois, la durée de chauffage est assez similaire pour tous les mélanges car elle est très courte. Cependant, l'ajout de l'acétone augmente nettement la constante d'évaporation alors qu'elle variait peu pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol. Ces constantes d'évaporation seront plus longuement analysées lorsque ces résultats expérimentaux seront comparés aux prévisions numériques.

La composition du liquide affecte également l'évolution de la température de la goutte. L'ajout d'éthanol dans l'acétone atténue le refroidissement de la goutte lorsqu'elles sont injectées dans une ambiance à faible température car, l'éthanol s'évaporant moins que l'acétone à une température donnée, la quantité d'énergie consommée par l'évaporation (chaleur latente d'évaporation) est moindre. Lorsqu'elles sont injectées dans le panache d'air chaud, les gouttes d'acétone pure tendent à se stabiliser à une température légèrement supérieure à 20°C puis chauffe doucement lorsqu'elles atteignent la partie chaude du panache d'air chaud. Par contre, pour des gouttes composées à 40% d'acétone et 60% d'éthanol, les températures mesurées sont bien plus importantes et semblent vouloir se stabiliser entre 40 et 45 °C dans la partie chaude du panache d'air chaud.

CHAPITRE 4 MODELISATION NUMERIQUE

Ce chapitre est dédié à la présentation des différents modèles d'évaporation de gouttes multi-composants développés et utilisés dans ces travaux. Il peut se diviser en trois parties :

- Tout d'abord, la présentation des modèles en général, c'est à dire les modèles développés avec les améliorations apportées par rapport aux modèles présentés dans le Chapitre 1, les composants pouvant être utilisés avec ces modèles, la méthode de discrétisation utilisée, le calcul des grandeurs physiques (propriétés physiques, température moyenne entre deux pas de temps ...) et le processus itératif entre 2 pas temps pour obtenir la convergence.
- Ensuite, la résolution des équations régissant l'évaporation (calcul de débits, de chauffage, de changement de composition ...) faisant intervenir des systèmes d'équations dont la résolution nécessite des processus itératifs et/ou des algorithmes.
- Finalement, l'influence de la valeur des pas de temps et d'espace sur la précision ou la stabilité du calcul sera étudiée afin de réduire les temps de calcul.

4.1 Généralités

4.1.1 Modèles développés

Les modèles à composants discrets

Pour les modèles à composants discrets, 4 modèles ont été développés :

- Le modèle à diffusion infinie
- Le modèle à diffusion limitée
- Le modèle à diffusion effective
- Le modèle à vortex de *Hill*

Tous ces modèles peuvent être utilisés pour n'importe quel nombre de composants.

La connaissance des propriétés physiques est primordiale pour simuler l'évaporation des différents mélanges liquides. Or, la littérature en procure très peu hormis celles des n-alcane les plus couramment utilisés. Ces propriétés, données en Annexe A, ont donc été déterminées pour de nombreux hydrocarbures grâce aux corrélations présentées dans le chapitre 1 et dans l'annexe A. La température normale d'ébullition de ces composants est présentée sur la Figure 4.1 où le nombre au bout des lignes en pointillés indique le nombre d'atomes de carbone des ces espèces. Pour limiter le nombre de composants dans les gouttes, les isomères ont été regroupés en « composants de substitution » car ils présentent des propriétés physiques proches. Les différents carburants peuvent ainsi être représentés par les composants suivants :

- 22 n-alcane (ou n-paraffines), du C_4H_{10} au $C_{25}H_{52}$
- 13 iso-alcane (ou iso-paraffines), du C_4H_{10} au $C_{16}H_{34}$
- 22 oléfines, du C_4H_8 au $C_{25}H_{50}$
- 20 alkylbenzènes, du C_6H_6 au $C_{25}H_{44}$
- 13 alkylnaphtalènes, du $C_{10}H_8$ au $C_{22}H_{34}$
- 21 cyclopentanes, du C_5H_{10} au $C_{25}H_{50}$
- 20 cyclohexanes, du C_6H_{12} au $C_{25}H_{50}$.

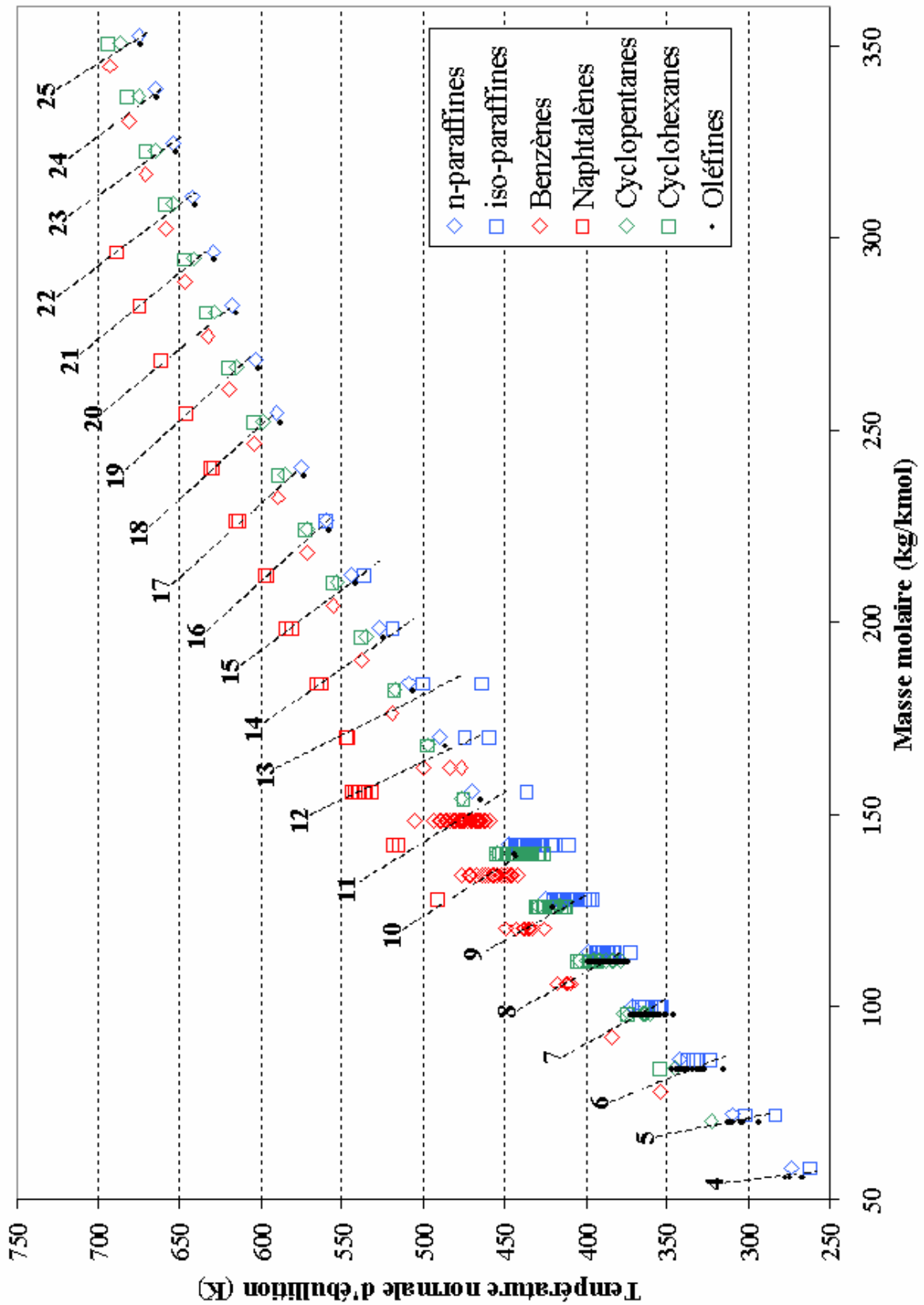


Figure 4.1 : Température normale d'ébullition pour plusieurs hydrocarbures purs

Les modèles à thermodynamique continue

Pour les modèles à thermodynamique continue, 3 modèles ont été développés :

- Le modèle à diffusion infinie
- Le modèle à diffusion limitée
- Le modèle à diffusion effective

Tous ces modèles peuvent être utilisés avec n'importe quel nombre de groupes de composants. Cependant, il faut distinguer le cas où le mélange n'est représenté que par une seule fonction de distribution. En effet, la diffusion d'un groupe de composants liquides dans ce même groupe de composants pose problème. Dans ce cas, il faut considérer que la composition (c'est à dire les paramètres de distribution) est uniforme dans la goutte pour les modèles à diffusion limitée et effective, contrairement au profil de température.

La pression de vapeur saturante est une donnée importante car elle détermine la composition de la vapeur à la surface de la goutte et donc le débit de vapeur de chaque espèce. Dans les modèles à composants discrets, elle peut être déterminée précisément par l'expression de *Clausius-Clapeyron* ou la loi d'*Antoine* [37] qui s'écrivent respectivement :

$$P_{sat} = P^\infty \exp\left[\frac{l_v M}{R} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T}\right)\right] \text{ avec } T_b = \frac{l_{vb} M / R}{l_{vb} M / R T_{nb} - \ln(P^\infty)} \quad (4.1)$$

$$\ln(P_{sat}) = A - \frac{B}{T + C} \quad (4.2)$$

où R est la constante universelle des gaz parfaits, P^∞ est la pression au loin (en atm). T_{nb} est la température normale d'ébullition à la pression atmosphérique (1atm) et T_b est la température d'ébullition à la pression P^∞ . A , B et C sont les coefficients de l'équation de pression de vapeur d'Antoine déterminés expérimentalement.

Ces deux équations sont des expressions discrètes pour chaque composant. Dans le modèle à thermodynamique continue, elles ne peuvent être appliquées car l'expression de la pression de vapeur saturante doit être intégrée sur la distribution avec la loi de *Raoult* :

$$\int_{\gamma} x_{j,v}^s f_{j,v}(I) I^n dI = \int_{\gamma} x_{j,l}^s \left(P_{sat,j}(I) / P^\infty \right) f_{j,l}^s(I) I^n dI \quad (4.3)$$

La pression de vapeur saturante doit alors être écrite sous une forme continue en fonction de la variable de distribution I . Son expression doit rester simple pour calculer une solution analytique lors de son intégration dans l'équation (4.3) car elle sera pondérée par $f_{j,l}^s(I) I^n$.

Hallett et al. [14,15,16,17] proposent l'expression de *Clausius-Clapeyron* avec la loi de *Trouton* pour l'entropie de vaporisation s_{fg} :

$$P_{sat,j}(I) = P^\infty \exp\left[\left(s_{fg}/RT\right)\left(T - T_{b,j}(I)\right)\right] \quad (4.4)$$

- **Masse molaire comme variable de distribution I**

Les modèles à thermodynamique continue peuvent utiliser différentes variables de distribution I . La plus couramment utilisée est la masse molaire [14,15,16,17,10,38]. L'équation (4.4) est alors appliquée avec une corrélation de la température d'ébullition $T_{b,j}(I)$ dépendant linéairement de la masse molaire I :

$$T_{b,j}(I) = T_{b,j,a} + T_{b,j,b}I \quad (4.5)$$

La Figure 4.1 montre que la température d'ébullition ne varie pas linéairement avec la masse molaire. Une corrélation du second ordre pour $T_{b,j}(I)$ serait suffisamment précise mais l'expression $P_{sat,j}(I)f_{j,l}^s(I)I^n$ deviendrait trop complexe pour trouver une solution analytique lors de son intégration dans l'équation (4.3). L'approximation d'une variation linéaire de la température d'ébullition en fonction de la masse molaire I induit donc une première erreur sur le calcul de la pression de vapeur saturante. Il faut ajouter à cela, la loi de *Trouton* pour l'entropie de vaporisation s_{fg} dont la valeur reste fixe, alors qu'elle devrait varier en fonction de la masse molaire I et de la température T pour correspondre aux corrélations de *Clausius-Clapeyron* et d'*Antoine* bien plus précises.

Ces deux approximations ont des conséquences sur le calcul de la pression de vapeur saturante. Sur la Figure 4.2, chaque couleur représente un composant. Elle fait bien apparaître la différence entre la relation de *Clausius-Clapeyron* pour les composants discrets (équation (4.1) et lignes continues sur la Figure 4.2) et celle utilisant la loi de *Trouton* pour le modèle à thermodynamique continue (équation (4.4) et lignes en pointillés sur la Figure 4.2). Ces écarts peuvent être encore plus importants suivant les composants utilisés ou la pression au loin P^∞ .

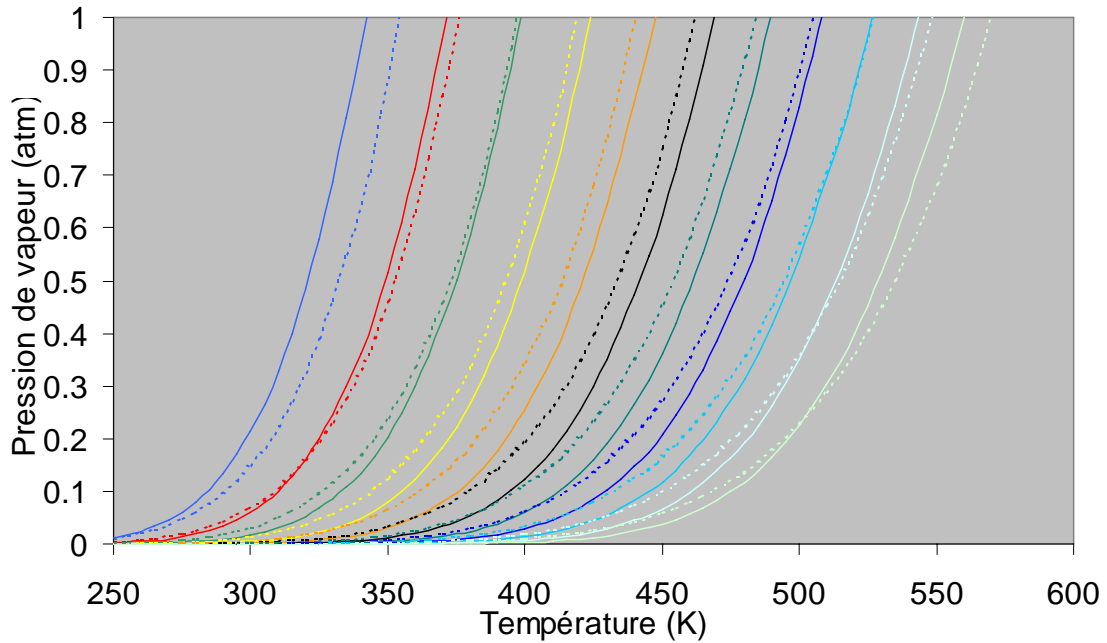


Figure 4.2 : Evolution de la pression de vapeur saturante pour des n-alcanes (du n-hexane au n-hexadecane) à une pression de 1 atm donnée par Clausius-Clapeyron (lignes pleines) et Clausius Clapeyron avec la loi de Trouton (lignes pleines en pointillées)

Pour évaluer l'impact de cette erreur sur le calcul d'une goutte en évaporation, le modèle à composants discrets et le modèle à thermodynamique continue sont comparés. Pour des gouttes de carburants s'évaporant dans une ambiance à haute température les résultats sont relativement proches. Par contre, lorsqu'elles s'évaporent à faible température ambiante, les écarts deviennent conséquents.

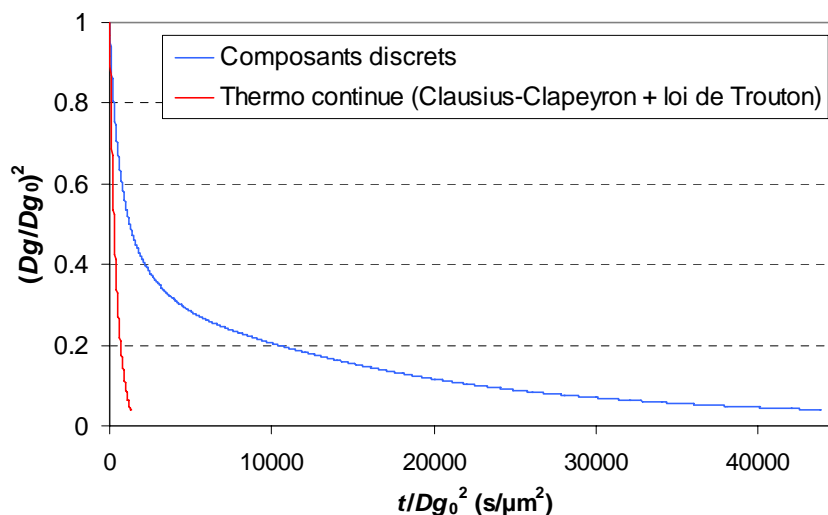


Figure 4.3 : Evolution de la taille d'une goutte de kérosène s'évaporant dans une ambiance à 300K et 1atm

Sur la Figure 4.3, un exemple de calcul est donné pour la taille d'une goutte de kérosène (composée de 36 composants de substitution) de 100 μm de diamètre s'évaporant dans une ambiance à 300K et à 1atm. Le modèle de diffusion utilisé est le modèle à diffusion limitée. Le modèle à thermodynamique continue utilisant la corrélation de *Clausius-Clapeyron* avec la loi de *Trouton* surestime très nettement l'évaporation de la goutte. sa durée de vie est de 437,8s avec le modèle à composants discrets et de 12,8s avec le modèle à thermodynamique continue. Comme la goutte s'évapore peu, la pression de vapeur saturante est faible. C'est justement pour ces faibles valeurs que le pourcentage d'erreur sur la pression de vapeur saturante est le plus important (Figure 4.2). Une corrélation plus précise pour déterminer la pression de vapeur saturante est alors nécessaire.

Remarque : ce premier calcul met bien en évidence le phénomène de distillation (changement de pente de la constante d'évaporation) propre au liquide multi-composants.

Nous avons alors cherché une nouvelle corrélation bien plus précise, dont le terme dans l'exponentiel dépend linéairement de la masse molaire I . Pour un groupe j de composants, nous avons retenu une expression de la forme suivante :

$$P_{sat,j}(I) = P^\infty \exp\left[\frac{A_j(T, P^\infty) + B_j(T, P^\infty)I}{T}\right] \quad (4.6)$$

Nous avons déterminé les expressions des polynômes A_j et B_j afin qu'ils correspondent au mieux aux corrélations de *Clausius-Clapeyron* (équation (4.1)), ce qui est le cas comme le prouve la Figure 4.4 (les symboles représentent les valeurs de cette nouvelle corrélation). La valeur de ces coefficients est donnée en annexe A.

Le calcul de la composition de la vapeur à la surface de la goutte (équation (4.3) avec $n = 0, 1$ ou 2) donne :

$$x_{j,v}^s = x_{j,l}^s \frac{\exp[(A_j + B_j \gamma_j)/T^s]}{(1 - B_j \beta_{j,l}^s / T^s)^{\alpha_{j,l}^s}} \quad (4.7)$$

$$\theta_{j,v}^s = \gamma_j + \frac{\theta_{j,l}^s - \gamma_j}{1 - B_j \sigma_{j,l}^s / (T^s (\theta_{j,l}^s - \gamma_j))} \quad (4.8)$$

$$\Psi_{j,v}^s = \theta_{j,v}^s{}^2 + \left[\sigma_{j,l}^s \frac{\theta_{j,v}^s - \gamma_j}{\theta_{j,l}^s - \gamma_j} \right]^2 \quad (4.9)$$

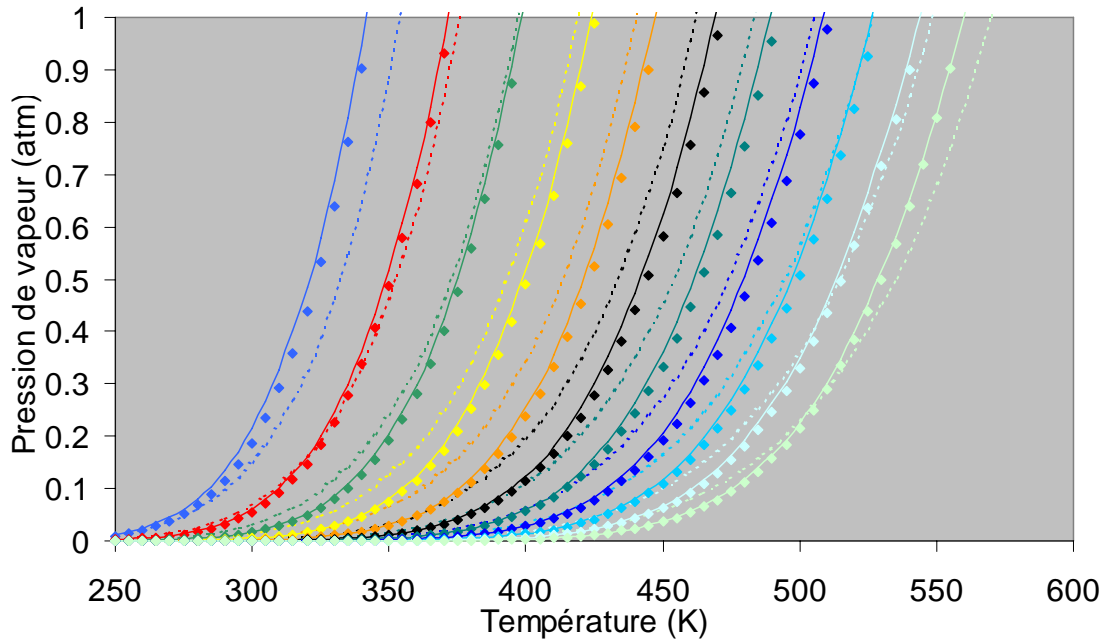


Figure 4.4 : Evolution de la pression de vapeur saturante pour des n-alcanes (du n-hexane au n-hexadécane) à une pression de 1 atm donnée par Clausius-Clapeyron (lignes pleines), Clausius-Clapeyron avec la loi de Trouton (lignes pleines en pointillées) et la nouvelle corrélation (symboles)

Le calcul de l'évaporation de la goutte de kérosène est à nouveau effectué avec cette nouvelle corrélation (Figure 4.5). Notre nouvelle corrélation prévoit très nettement de bien meilleurs résultats. A part des écarts qui apparaissent lorsque la taille de la goutte devient faible ($(Dg/Dg_0)^2=0,2$), les taux d'évaporation restent proches entre le modèle à composants discrets et le modèle à thermodynamique continue utilisant cette nouvelle corrélation.

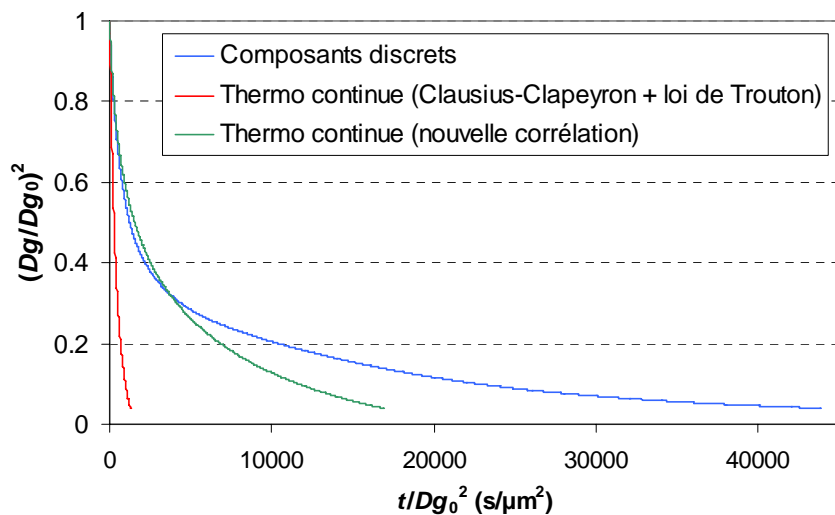


Figure 4.5 : Evolution de la taille d'une goutte de kérosène s'évaporant dans une ambiance à 300K et 1atm

L'étude et la comparaison de ces modèles pour l'évaporation de carburants réels seront plus amplement détaillées dans le Chapitre 6.

- **Température d'ébullition comme variable de distribution I**

Nous proposons une modélisation avec une nouvelle variable de distribution I : la température d'ébullition. L'utilisation d'une telle variable peut s'avérer très pratique si seulement la courbe de distillation d'un mélange est connue.

Avec cette variable, L'équation (4.4) devient alors :

$$P_{sat,j}(I) = P^\infty \exp\left[\left(s_{fg}/RT\right)(T - I)\right] \quad (4.10)$$

La température d'ébullition $T_{b,j}(I)$ de l'équation (4.4) est remplacée par I dans cette dernière équation. Le problème de non-linéarité de $T_{b,j}(I)$ avec I n'apparaît donc plus ici. Il reste tout de même la valeur fixe de s_{fg} qui surestime les faibles valeurs de la pression de vapeur saturante surtout pour les composants les moins volatiles. Pour corriger cela (Figure 4.6), il suffit juste de multiplier ce terme pour chaque groupe j de composants par un coefficient correctif τ_j ne dépend que de la pression au loin P^∞ :

$$P_{sat,j}(I) = P^\infty \exp\left[\tau_j \left(s_{fg}/RT\right)(T - I)\right] \quad (4.11)$$

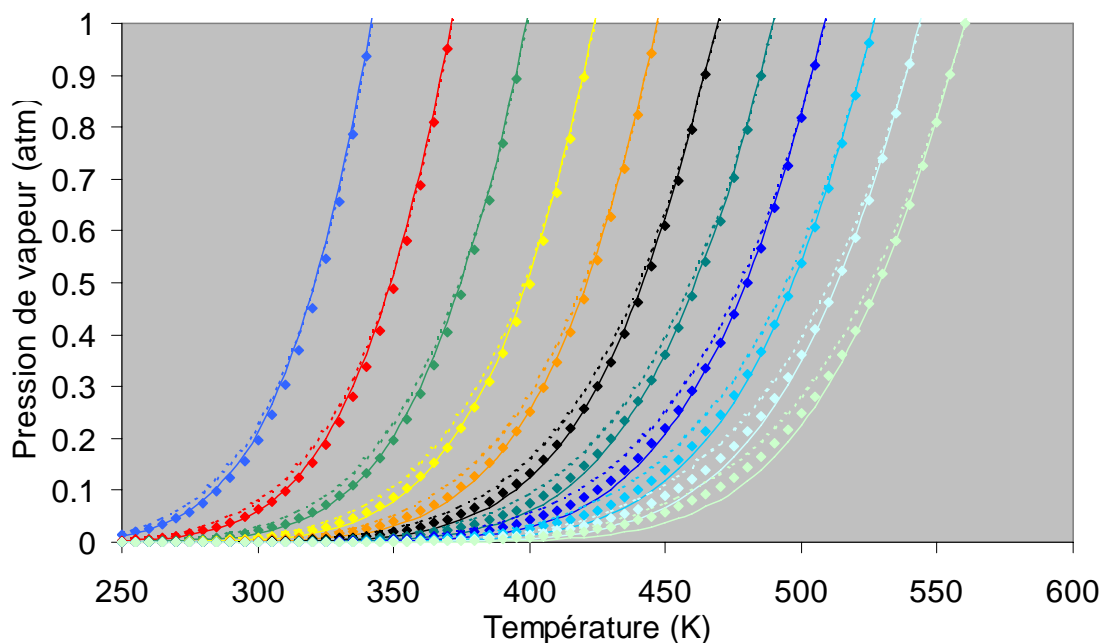


Figure 4.6 : Evolution de la pression de vapeur saturante pour des n-alcane (du n-hexane au n-hexadécane) à une pression de 1 atm donnée par Clausius-Clapeyron (lignes pleines), Clausius Clapeyron avec la loi de Trouton (lignes pleines en pointillées) et Clausius Clapeyron avec la loi de Trouton et le coefficient correctif τ (symboles)

Le calcul de la composition de la vapeur à la surface de la goutte (équation (4.3) avec $n = 0, 1$ ou 2) donne :

$$x_{j,g}^s = x_{j,l}^s \frac{\exp\left[\tau_j \left(s_{fg} / RT^s\right) (T^s - \gamma_j)\right]}{\left[1 + \tau_j \left(s_{fg} / RT^s\right) \beta_{j,l}^s\right]^{\alpha_{j,l}^s}} \quad (4.12)$$

$$\theta_{j,v}^s = \gamma_j + \frac{\theta_{j,l}^s - \gamma_j}{1 + \tau_j \left(s_{fg} / RT^s\right) \sigma_{j,l}^s / (\theta_{j,l}^s - \gamma_j)} \quad (4.13)$$

$$\Psi_{j,v}^s = \theta_{j,v}^s{}^2 + \left[\sigma_{j,l}^s \frac{\theta_{j,v}^s - \gamma_j}{\theta_{j,l}^s - \gamma_j} \right]^2 \quad (4.14)$$

Le calcul pour une goutte de kérosène s'évaporant dans une ambiance à 300K et 1atm est à nouveau effectué avec la température d'ébullition comme variable de distribution pour le modèle à thermodynamique continue (Figure 4.7). Malgré la correction apportée à la pression de vapeur saturante, le modèle à thermodynamique continue surestime toujours très nettement l'évaporation de la goutte. L'utilisation d'autres coefficients τ_j ne donne pas de résultats plus satisfaisants.

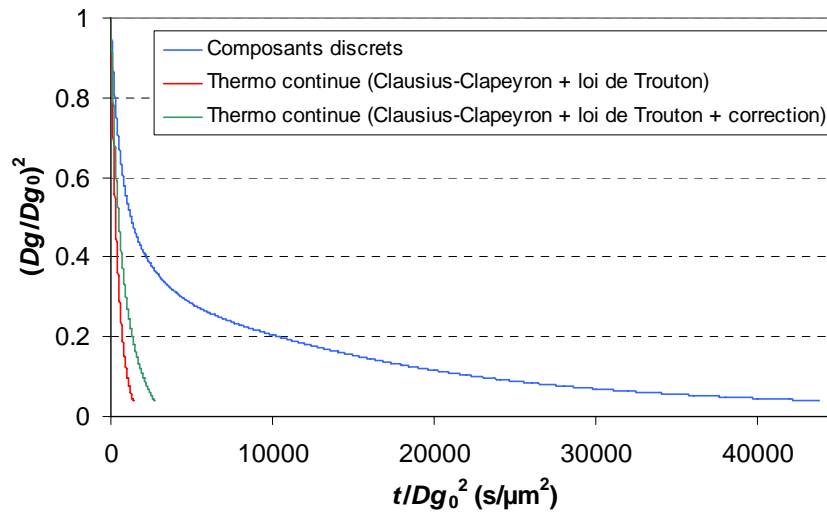


Figure 4.7 : Evolution de la taille d'une goutte de kérosène s'évaporant dans une ambiance à 300K et 1atm

Pour des températures ambiantes plus élevées, les modèles sont en bon accord. Si le modèle à thermodynamique continue est utilisé, il est préférable de choisir la masse molaire comme variable de distribution I , car elle prévoit de bien meilleurs résultats à faible température ambiante grâce à notre nouvelle corrélation (équation (4.6)).

Malgré les mauvais résultats obtenus pour une évaporation à faible température ambiante, le Chapitre 6 montrera que l'utilisation de la température d'ébullition comme variable de

distribution peut réduire le temps de calcul en simplifiant l'utilisation de ce modèle (2^{ème} simplification dans le Chapitre 6) lors d'une évaporation à forte température ambiante.

- **Propriétés physiques**

Pour les modèles à thermodynamique continue, les corrélations de propriétés physiques présentes dans la littérature sont rares, imprécises et non adaptées à tous types de carburants. De nouvelles corrélations sont donc proposées.

Il est nécessaire de limiter au maximum la plage de variation de la variable de distribution I pour obtenir des corrélations relativement précises. Pour chaque groupe de composants, des corrélations ont été déterminées pour plusieurs plages de valeurs de la variable de distribution I :

- Pour les n-alcane :

- du C_4H_{10} au $C_{10}H_{22}$
- du C_6H_{14} au $C_{16}H_{34}$
- du $C_{10}H_{22}$ au $C_{20}H_{42}$
- du C_8H_{18} au $C_{25}H_{52}$

- Pour les iso-alcane :

- du C_4H_{10} au $C_{10}H_{22}$
- du C_6H_{14} au $C_{16}H_{34}$
- aucune propriété physique n'a pu être trouvée pour un iso-alcane avec plus de 16 atomes de carbone

- Pour les alcène :

- du C_4H_8 au $C_{10}H_{20}$
- du C_6H_{12} au $C_{16}H_{32}$
- du $C_{10}H_{20}$ au $C_{20}H_{40}$
- du C_8H_{16} au $C_{25}H_{50}$

- Pour les alkylbenzène :

- du C_6H_6 au $C_{10}H_{14}$
- du C_6H_6 au $C_{16}H_{26}$
- du $C_{10}H_{14}$ au $C_{20}H_{34}$
- du C_8H_{10} au $C_{25}H_{44}$

- Pour les alkylnaphtalène :

- du $C_{10}H_8$ au $C_{16}H_{20}$
- du $C_{10}H_8$ au $C_{22}H_{32}$

- Pour les cyclopentane :

- du C_5H_{10} au $C_{10}H_{20}$
- du C_6H_{12} au $C_{16}H_{32}$
- du $C_{10}H_{20}$ au $C_{20}H_{40}$
- du C_8H_{16} au $C_{25}H_{50}$

- Pour les cyclohexanes :
 - du C_6H_{12} au $C_{10}H_{20}$
 - du C_6H_{12} au $C_{16}H_{32}$
 - du $C_{10}H_{20}$ au $C_{20}H_{40}$
 - du C_8H_{16} au $C_{25}H_{50}$

Ces propriétés ont été déterminées pour les deux variables de distribution I : la masse molaire et la température d'ébullition. Elles sont également données en Annexe A.

4.1.2 Discrétisation

Les équations faisant intervenir des dérivées ne pouvant être résolues analytiquement, une discrétisation par la méthode de *Crank-Nicholson* est utilisée. Cette méthode présente l'avantage d'être inconditionnellement stable et précise au second ordre en espace. Les dérivées d'une variable g (étant soit la température, soit une fraction molaire ou massique, soit un paramètre de distribution) s'écrivent donc :

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{G_k^{n+1} - G_k^n}{\Delta t} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial g}{\partial r} = \frac{G_{k+1}^{n+1} - G_{k-1}^{n+1}}{4\Delta r} + \frac{G_{k+1}^n - G_{k-1}^n}{4\Delta r} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial r^2} = \frac{G_{k+1}^{n+1} - 2G_k^{n+1} + G_{k-1}^{n+1}}{2\Delta r^2} + \frac{G_{k+1}^n - 2G_k^n + G_{k-1}^n}{2\Delta r^2} \quad (4.3)$$

avec :

- Δt : pas de discrétisation du temps ($t = n\Delta t$)
- Δr : pas de discrétisation de l'espace ($r = (k-1)\Delta r$).

n ($n+1$ respectivement) est relatif à l'instant t (à l'instant $t+\Delta t$ respectivement). Quant à k ($k+1$ respectivement), il est relatif à la coordonnée radiale r ($r+\Delta r$ respectivement).

4.1.3 Grandeurs physiques

Durant le calcul, les propriétés physiques du mélange liquide sont calculées pour une température et une composition moyennes. C'est à dire, pour le modèle à diffusion infinie, en effectuant la moyenne de la valeur prise au temps t et de celle prise au temps $t+\Delta t$. Ce qui donne pour une variable G :

$$G_{moy} = \frac{G^n + G^{n+1}}{2} \quad (4.4)$$

Quant aux modèles à diffusion limitée et effective, la même méthode est appliquée sauf, que cette fois ci, G^n (respectivement G^{n+1}) est la valeur moyenne calculée sur le volume de la goutte à l'instant t (respectivement à l'instant $t+\Delta t$) :

$$G_{moy} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N G \Delta V = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N \frac{(G_k^n + G_{k+1}^n + G_k^{n+1} + G_{k+1}^{n+1})}{4} \frac{4}{3} \pi \frac{[k^3 - (k-1)^3]}{N^3} r_s^3 \quad (4.5)$$

$$\text{donc } G_{moy} = \sum_{j=1}^N \frac{(G_k^n + G_{k+1}^n + G_k^{n+1} + G_{k+1}^{n+1})}{4N^3} [1 - 3k + 3k^2] \quad (4.6)$$

$N+1$ étant le nombre de nœuds de discrétisation du rayon de la goutte ($\Delta r = r_s/N$).

Cependant, G_{moy} est très proche de la valeur moyenne de G entre le centre et la surface :

$$G_{moy} = \frac{G_1^n + G_1^{n+1} + G_{N+1}^n + G_{N+1}^{n+1}}{4} \quad (4.7)$$

L'utilisation des équations (4.6) et (4.7) donne les mêmes résultats. Il est donc plus judicieux d'utiliser cette dernière pour calculer les propriétés physiques afin réduire le temps de calcul. Les propriétés physiques du mélange gazeux sont calculées pour une température et une composition de référence (règle du tiers).

Le rayon de la goutte est la moyenne du rayon pris au temps t et de celui pris au temps $t+\Delta t$.

4.1.4 Méthode itérative entre t et $t+\Delta t$

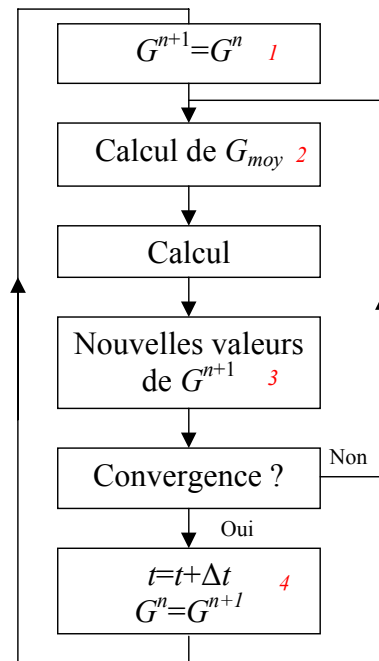


Figure 4.8 : Méthode de résolution entre t et $t+\Delta t$

La Figure 4.8 permet de mieux comprendre la méthode de résolution pour une itération entre l'instant t et l'instant $t+\Delta t$.

Lors de la première itération, la température, la composition, le rayon et la hauteur à l'instant $t+\Delta t$ sont inconnues. Pour calculer les moyennes de ces grandeurs appelées G (2 sur la Figure 4.8), leurs valeurs à l'instant $t+\Delta t$ (c'est à dire G^{n+1}) sont prises égales à G^n à l'instant t (1 sur la Figure 4.8). Après la première itération, une nouvelle valeur pour chaque grandeur G^{n+1} est calculée (3 sur la Figure 4.8). Ces valeurs remplaceront les anciennes pour une nouvelle itération pour laquelle on trouvera encore de nouvelles valeurs pour G^{n+1} . Ces itérations sont effectuées jusqu'à convergence, c'est à dire que la différence entre les nouvelles valeurs et les anciennes valeurs G^{n+1} soit inférieure à 0,01%. Lorsqu'il y a convergence, le temps est incrémenté de Δt , les valeurs à l'instant t sont remplacées par celles à l'instant $t+\Delta t$ (4 sur la Figure 4.8) et le processus itératif peut reprendre.

Au minimum, deux itérations sont effectuées (même s'il y a convergence dès la première) afin d'effectuer au moins une itération avec des valeurs calculées à l'instant $t+\Delta t$, puisque ces valeurs étaient égales à celles à l'instant t lors de la première itération.

Le calcul se termine lorsque la surface de la goutte a atteint 4% de sa surface initiale, c'est à dire $(Dg/Dg^0)^2=0,04$.

4.2 Calcul de l'évaporation

Cette partie décrit l'ensemble des opérations effectuées dans la partie "calcul" de la Figure 4.8. Il s'agit là du modèle à composants discrets, mais le modèle à thermodynamique continue est basé sur le même principe.

4.2.1 Calcul des coefficients de transfert de masse

Les fractions massiques du liquide à la surface sont connues, ce qui permet de connaître les fractions molaires du liquide à la surface :

$$x_{i,l}^s = \frac{Y_{i,l}^s / M_i}{\sum Y_{i,l}^s / M_i} \quad (4.8)$$

La loi de *Raoult* donne les fractions molaires de vapeur à la surface :

$$x_{i,g}^s = x_{i,l}^s \frac{P_{sat,i}(T^s, P)}{P^\infty} \quad (4.9)$$

Ce qui permet de déterminer les fractions massiques de vapeur à la surface :

$$Y_{i,g}^s = \frac{x_{i,g}^s M_i}{x_{air}^s M_{air} + \sum x_{i,g}^s M_i}$$

Pour calculer les valeurs de ζ_i , il est nécessaire d'utiliser l'expression du débit total de vapeur :

$$\dot{m} = 2\pi r_s \rho_g D_{i,g} Sh_i * \ln(1 + B_{m,i}) \text{ avec } B_{m,i} = \frac{Y_{i,g}^s - Y_{i,g}^\infty}{\zeta_i - Y_{i,g}^s} \quad (4.10)$$

Donc, pour tout composant i , le terme $D_{i,g} Sh_i * \ln(1 + B_{m,i}) = \frac{\dot{m}}{2\pi r_s \rho_g}$ garde la même valeur.

L'équation manquante pour résoudre le système est :

$$\sum_i \zeta_i = \sum_i \frac{Y_{i,g}^s (1 + B_{m,i}) - Y_{i,g}^\infty}{B_{m,i}} = \sum_i \frac{Y_{i,g}^s \exp(\dot{m}/2\pi r_s \rho_g D_{i,g} Sh_i *) - Y_{i,g}^\infty}{\exp(\dot{m}/2\pi r_s \rho_g D_{i,g} Sh_i *) - 1} = 1 \quad (4.11)$$

Il faut donc résoudre l'équation suivante :

$$f(\dot{m}/(2\pi r_s \rho_g)) = f(x) = 1 - \sum_i \frac{Y_{i,g}^s \exp(x/(D_{i,g} Sh_i *)) - Y_{i,g}^\infty}{\exp(x/(D_{i,g} Sh_i *)) - 1} = 0 \quad (4.12)$$

Une fois, la valeur x déterminée, il est possible de trouver toutes les valeurs de ζ_i et de $B_{m,i}$. La méthode de résolution de l'équation (4.12) est donnée en Annexe B.

4.2.2 Calcul de coefficient de transfert d'énergie

Le flux de chaleur servant à chauffer la goutte dépend du coefficient de transfert d'énergie de *Spalding* B_T . Il existe deux expressions du débit massique total :

$$\dot{m} = 2\pi r_s \rho_g D_{i,g} Sh_i * \ln(1 + B_{m,i}) \quad (4.13)$$

$$\dot{m} = 2\pi r_s \frac{\lambda_g}{Cp_v} Nu * \ln(1 + B_T) \quad (4.14)$$

Les coefficients de transfert de *Spalding* sont donc liés par la relation suivante :

$$B_T = (1 + B_{m,i})^\phi - 1 \quad (4.15)$$

$$\text{avec } \phi = \frac{Cp_v}{Cp_g} \frac{Sh_i * 1}{Nu * Le_g} \quad (4.16)$$

où Le_g est le nombre de *Lewis* du mélange gazeux :

$$Le_g = \frac{\lambda_g}{\rho_g D_{i,g} Cp_g} \quad (4.17)$$

Toutes ces grandeurs peuvent être calculées sauf le nombre de *Nusselt* modifié Nu^* qui dépend de B_T :

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu_o - 2}{F(B_T)} \quad (4.18)$$

Il est donc nécessaire d'effectuer un calcul itératif de B_T (décrit en Annexe B).

4.2.3 Calcul du nouveau rayon et des nouveaux profils de température et des fractions massiques

L'expression du débit massique permet de déterminer le nouveau rayon :

$$\dot{m} = -\frac{4}{3} \pi \rho_l \frac{dr_s^3}{dt} \quad (4.19)$$

$$\text{ce qui donne : } r_s^{n+1} = \left[(r_s^n)^3 - \frac{3\dot{m}\Delta t}{4\pi\rho_l} \right]^{1/3} \quad (4.20)$$

Or, en prenant une masse volumique moyenne entre les deux pas de temps, la dilatation de la goutte due au chauffage de celle ci n'est pas prise en compte. Il est donc nécessaire de considérer les variations de la masse volumique en remplaçant les équations (4.19) et (4.20) respectivement par :

$$\dot{m} = -\frac{4}{3} \pi \frac{d(\rho_l r_s^3)}{dt} \quad (4.21)$$

$$\text{et } r_s^{n+1} = \left[\frac{\rho_l^n}{\rho_l^{n+1}} (r_s^n)^3 - \frac{3\dot{m}\Delta t}{4\pi\rho_l^{n+1}} \right]^{1/3} \quad (4.22)$$

La quantité de chaleur servant à chauffer la goutte s'exprime de la manière suivante :

$$\dot{Q}_l = \dot{m} \left(\frac{Cp_v (T^\infty - T^s)}{B_T} - l_v \right) \quad (4.23)$$

Modèle à diffusion infinie :

La température est uniforme dans la goutte, donc :

$$\dot{Q}_l = \frac{4}{3} \pi r_s^3 \rho_l Cp_l \frac{\partial T}{\partial t} \quad (4.24)$$

$$\text{ce qui donne : } T^{n+1} = T^n + \frac{3\dot{Q}_l \Delta t}{4\pi r_{smoy}^3 \rho_l Cp_l} \quad (4.25)$$

Le bilan de masse pour chaque espèce i donne :

$$\rho_l \frac{dY_{i,l}}{dt} = \frac{3}{4\pi r_s^3} \dot{m} (Y_{i,l} - \xi_i) \quad (4.26)$$

ce qui implique que :

$$Y^{n+1} = Y^n + \frac{3\Delta t}{4\pi r_{smoy}^3 \rho_l} \dot{m} (Y_{moy} - \xi_i) \quad (4.27)$$

Modèles à diffusion limitée et effective :

Comme le rayon de la goutte varie au cours du temps, il est nécessaire d'effectuer un changement de variable en posant $x = r / r_s(t)$. En passant des variables (t,r) aux variables (t,x) , les dérivées partielles deviennent :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{x}{r_s(t)} \frac{dr_s(t)}{dt} \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r_s(t)} \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.29)$$

Le bilan des espèces à l'interface permet de dire :

$$\dot{m} Y_{i,l}^s - 4\pi r_s^2 \rho_l D_{i,l} \left. \frac{dY_{i,l}}{dr} \right|_{r=r_s} = \dot{m}_i \quad (4.30)$$

ce qui implique :

$$Y_{iN+1}^{n+1} - Y_{iN}^{n+1} = \dot{m} (Y_{moy}^s - \xi_i) \frac{\Delta x}{4\pi r_{moy} \rho_l D_{i,l}} \quad (4.31)$$

$$\text{avec } \Delta x = \frac{\Delta r}{r_s(t)} = \frac{1}{N} \quad (4.32)$$

Le profil de la fraction massique pour chaque espèce est déterminé par l'équation de diffusion des espèces :

$$\frac{\partial Y_{i,l}}{\partial t} - \frac{D_{i,l}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial r} \right) = 0 \quad (4.33)$$

qui devient après le changement de variables :

$$\frac{\partial Y_{i,l}}{\partial t} = \frac{D_{i,l}}{r_s^2(t)} \frac{\partial^2 Y_{i,l}}{\partial x^2} + \frac{1}{r_s^2(t)} \left(\frac{2D_{i,l}}{x} + \frac{x}{2} \frac{dr_s^2(t)}{dt} \right) \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial x} \quad (4.34)$$

Une fois discrétisée, cette équation peut s'écrire, tous calculs terminés :

$$\begin{aligned} & \left[\alpha_1 \frac{k-2}{2} + \alpha_2 (k-1)^2 \right] Y_{ik-1}^{n+1} - (1 + \alpha_1)(k-1) Y_{ik}^{n+1} + \left[\alpha_1 \frac{k}{2} - \alpha_2 (k-1)^2 \right] Y_{ik+1}^{n+1} \\ & = - \left[\alpha_1 \frac{k-2}{2} + \alpha_2 (k-1)^2 \right] Y_{ik-1}^n - (1 - \alpha_1)(k-1) Y_{ik}^n - \left[\alpha_1 \frac{k}{2} - \alpha_2 (k-1)^2 \right] Y_{ik+1}^n \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\text{avec } \alpha_1 = \frac{D_{i,l} \Delta t}{r_{smoy}^2 \Delta x^2}, \quad \alpha_2 = \frac{\dot{m} \Delta t}{16\pi \rho_l r_{smoy}^3} \text{ et } 2 \leq k \leq N.$$

Au centre de la goutte ($x=0$, $x=1$), l'équation (4.35) ne s'applique plus et il faut transformer l'équation (4.34) en utilisant la règle de l'Hopital :

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x} \frac{\partial Y_i}{\partial x} = \frac{\partial^2 Y_i}{\partial x^2} \quad (4.36)$$

La condition de symétrie permet d'écrire :

$$Y_{ik}^n = Y_{i(-k)}^n \quad (4.37)$$

On obtient finalement :

$$(1 + 3\alpha_1) Y_{i1}^{n+1} - 3\alpha_1 Y_{i2}^{n+1} = (1 - 3\alpha_1) Y_{i1}^n + 3\alpha_1 Y_{i2}^n \quad (4.38)$$

Ce système étant tridiagonal, l'algorithme de Thomas (décrit en Annexe B) est utilisé.

L'équation de diffusion de la chaleur s'écrit de la même façon que l'équation de diffusion des espèces (4.33) :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\lambda_l}{\rho_l C_{p_l} r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0 \quad (4.39)$$

La résolution de cette équation s'effectue donc de la même manière, sauf à l'interface où le bilan d'énergie donne :

$$\dot{Q}_l = 4\pi r_s^2 \lambda_l \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=r_s} \quad (4.40)$$

$$\text{donc : } T_{N+1}^{n+1} - T_N^{n+1} = \frac{\dot{Q}_l \Delta x}{4\pi \lambda_l r_{smoy}} \quad (4.41)$$

4.3 Discrétisation du temps et de l'espace

Dans cette partie, l'influence de la valeur du pas de temps et de l'espace sur la précision et la stabilité du calcul sera étudiée.

4.3.1 Discrétisation du temps

Comme le schéma de *Crank-Nicholson* est utilisé, les éventuels problèmes de stabilité proviendraient des systèmes itératifs des nombres de *Spalding*.

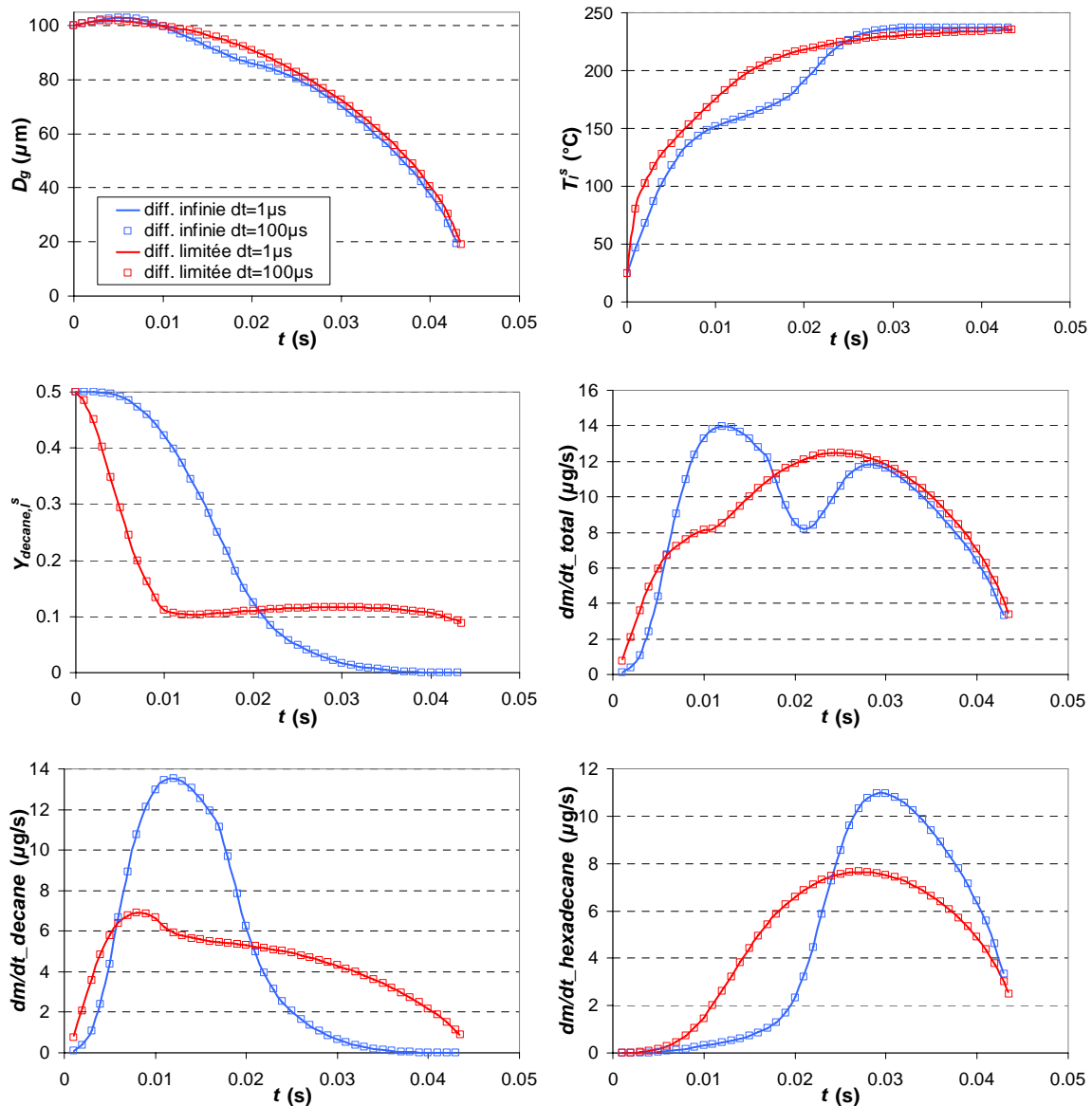
La durée de vie des gouttes pouvant être faible (par exemple de l'ordre de quelques dizaines de millisecondes pour des gouttes de $100\mu\text{m}$), le pas de temps doit être suffisamment réduit. Pour connaître son influence, des calculs ont été effectués pour les modèles à diffusion infinie et limitée avec les paramètres suivants :

- la goutte a un diamètre initial de $100\mu\text{m}$ et une température initiale de 25°C ;
- la goutte est initialement composée de 50% de n-décane et 50% de n-hexadécane (en masse);
- la température ambiante est de 1000K et la pression ambiante est de 1atm ;
- la goutte est immobile et le milieu ambiant est stagnant;
- les pas de temps utilisés sont $1\mu\text{s}$ et $100\mu\text{s}$.

Les résultats des calculs sont présentés sur la Figure 4.9. Sur les axes des graphiques, t désigne le temps, D_g le diamètre de la goutte, T_l^s la température à la surface de la goutte, $Y_{decane,l}^s$ la fraction massique de n-décane liquide à la surface de la goutte, dm/dt_{total} le débit massique total de vapeur, dm/dt_{decane} le débit massique de vapeur de n-décane, $dm/dt_{hexadecane}$ le débit massique de vapeur de n-hexadécane et dt le pas de temps Δt .

Bien que la différence entre les deux pas de temps soit importante, les résultats sont absolument identiques. La précision est donc très bonne pour un pas de temps $\Delta t=100\mu\text{s}$, mais pour une valeur de $200\mu\text{s}$, des problèmes de convergence dans le calcul de B_T apparaissent avec des composants à faible température d'ébullition (comme le n-butane). Pour éviter ce problème, un pas de temps de $100\mu\text{s}$ sera utilisé par la suite.

Remarque : cette première étude met déjà en évidence la différence entre les modélisations. Pour les modèles à diffusion limitée, la goutte reste multi-composants durant la toute sa durée de vie, alors que pour le modèle à diffusion infinie, la goutte devient mono-composant vers $30\mu\text{s}$. Il est donc nécessaire de prendre en compte la résistance à la diffusion des espèces et de l'énergie.


 Figure 4.9 : Comparaison des calculs pour les deux modèles avec $\Delta t=1\mu s$ et $\Delta t=100\mu s$

4.3.2 Discrétisation de l'espace

Une étude pour une goutte mono-composant effectuée par *Béard* [39] montre que les résultats trouvés par le modèle à conduction limitée (correspondant au modèle à diffusion limitée mais pour une goutte mono-composant) sont identiques pour $N=20$ et $N=100$. Or pour une goutte multi-composants, s'ajoutent au gradient de température des gradients de composition qui peuvent être bien plus importants, la diffusion des espèces liquides étant considérablement plus faible que celle de l'énergie. Il est donc nécessaire de distinguer 2 pas d'espace, NT pour le profil de température et NC pour les profils de composition (fractions ou paramètres de distribution).

Etude du profil de température

Les conditions sont les mêmes que pour les calculs précédents avec $\Delta t=100\mu s$, $NC=150$ et les valeurs utilisées pour NT sont 20, 50 et 100. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 4.10.

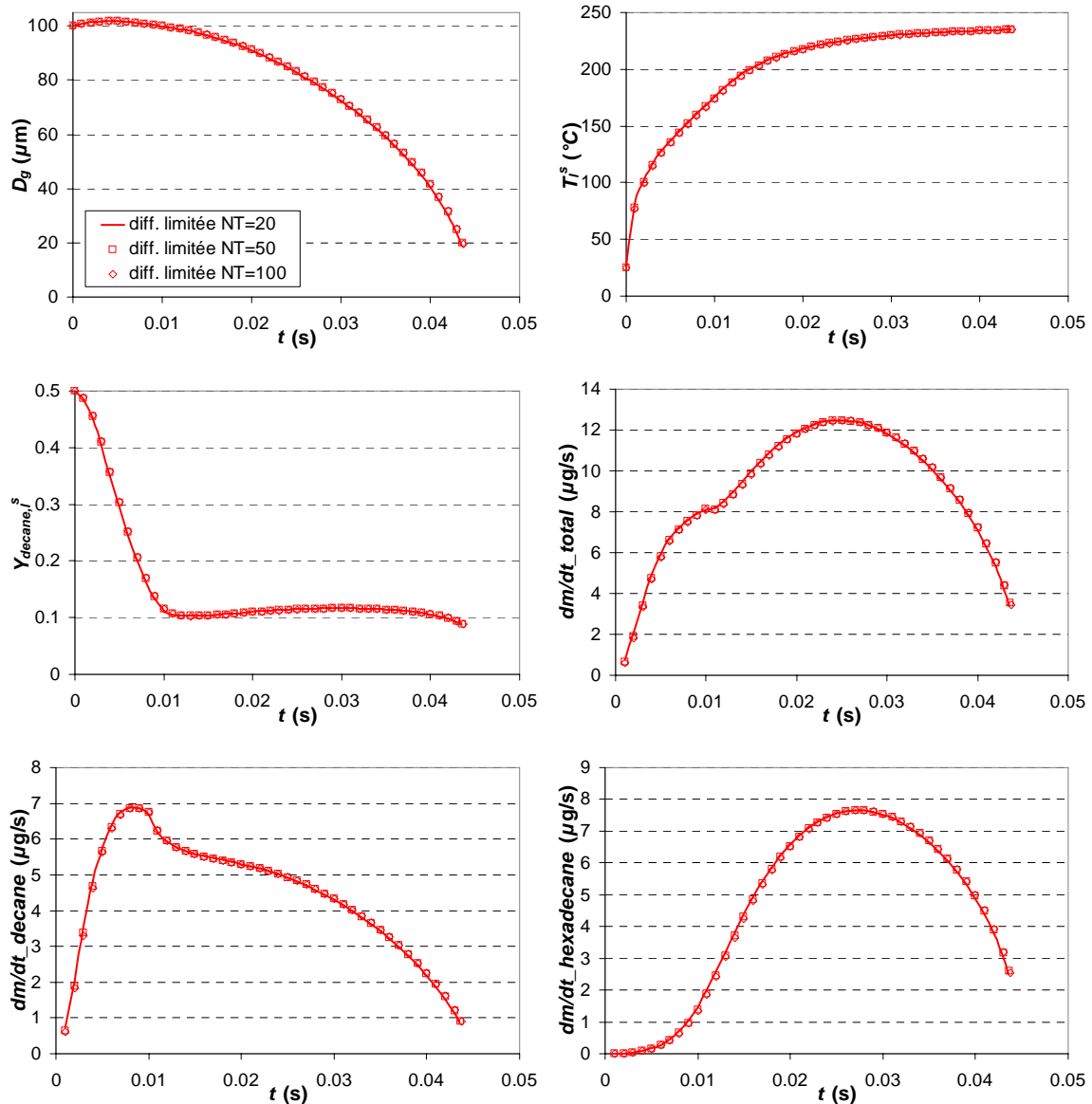


Figure 4.10 : Comparaison des calculs pour différentes valeurs de NT

Là aussi une très bonne précision est obtenue pour un faible nombre de nœuds de discrétisation puisque les résultats sont extrêmement proches. Pour une goutte multi-composants, il est donc aussi possible de fixer $NT=20$. Cependant, il ne faut pas perdre de vue que lorsque les gradients de température seront plus importants (par exemple pour des composants aux températures d'ébullition plus élevées ou pour des pressions ambiantes plus importantes), les résultats perdront en précision. A l'inverse, lorsque ces gradients seront faibles et que la température sera presque uniforme, le nombre de nœuds de discrétisation peut être encore réduit.

Etude du profil de composition

Les conditions sont toujours les mêmes que précédemment avec $\Delta t=100\mu s$, $NT=20$ et les valeurs utilisées pour NC sont 60, 100, 150 et 300. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 4.11.

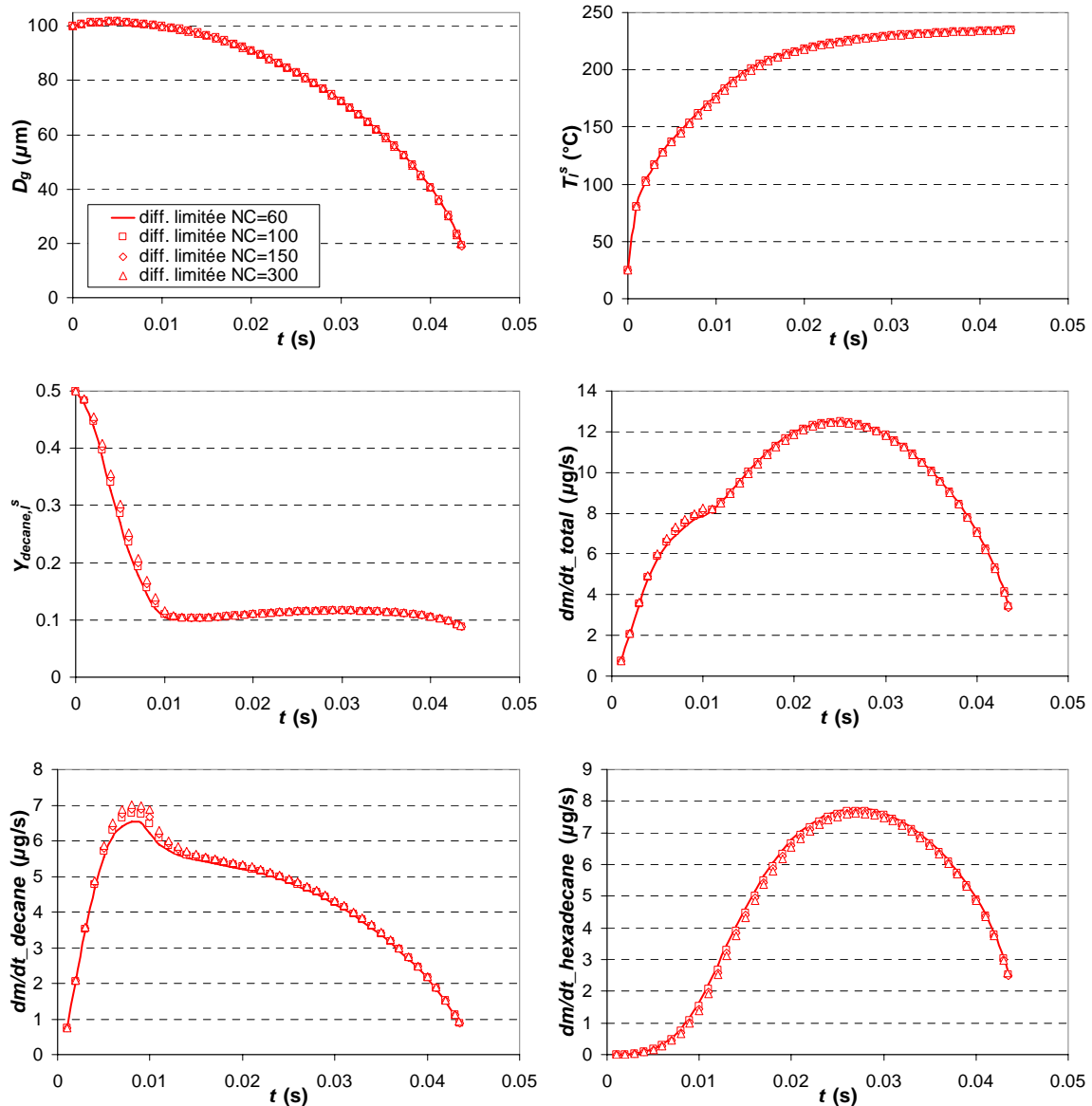


Figure 4.11 : Comparaison des calculs pour différentes valeurs de NC

Le diamètre, la température à la surface de la goutte et le débit total de vapeur ne sont pas affectés par la valeur de NC , ce qui n'est pas le cas des fractions massiques des espèces liquides à la surface de la goutte et donc les débits massiques de vapeur pour chaque composant.

Il apparaît clairement que la faible diffusion des espèces liquides contraint à choisir une valeur de NC plus importante que celle de NT . D'ailleurs, le calcul ne converge pas avec $NC=50$. D'après ces résultats, 60 nœuds de discrétisation semblent suffisants pour obtenir une bonne précision, mais le calcul est à la limite de la stabilité. Des calculs effectués pour

d'autres compositions et conditions au loin montrent que la limite de la stabilité peut être approchée pour $NC=100$.

Cette valeur dépend aussi des composants utilisés. Si la différence de température d'ébullition entre les deux composants croît, les gradients augmenteront aussi. A l'inverse, si cette différence de température d'ébullition est faible, moins de nœuds de discrétisation seront nécessaires puisque la composition sera quasiment homogène.

La même étude est effectuée avec le modèle à diffusion limitée en remplaçant le n-hexadécane par du 1,2,4-triméthylbenzène (dont la température d'ébullition est très proche de celle du n-décane) avec $NC=50$ et $NC=300$. Les résultats sont présentés sur la Figure 4.12.

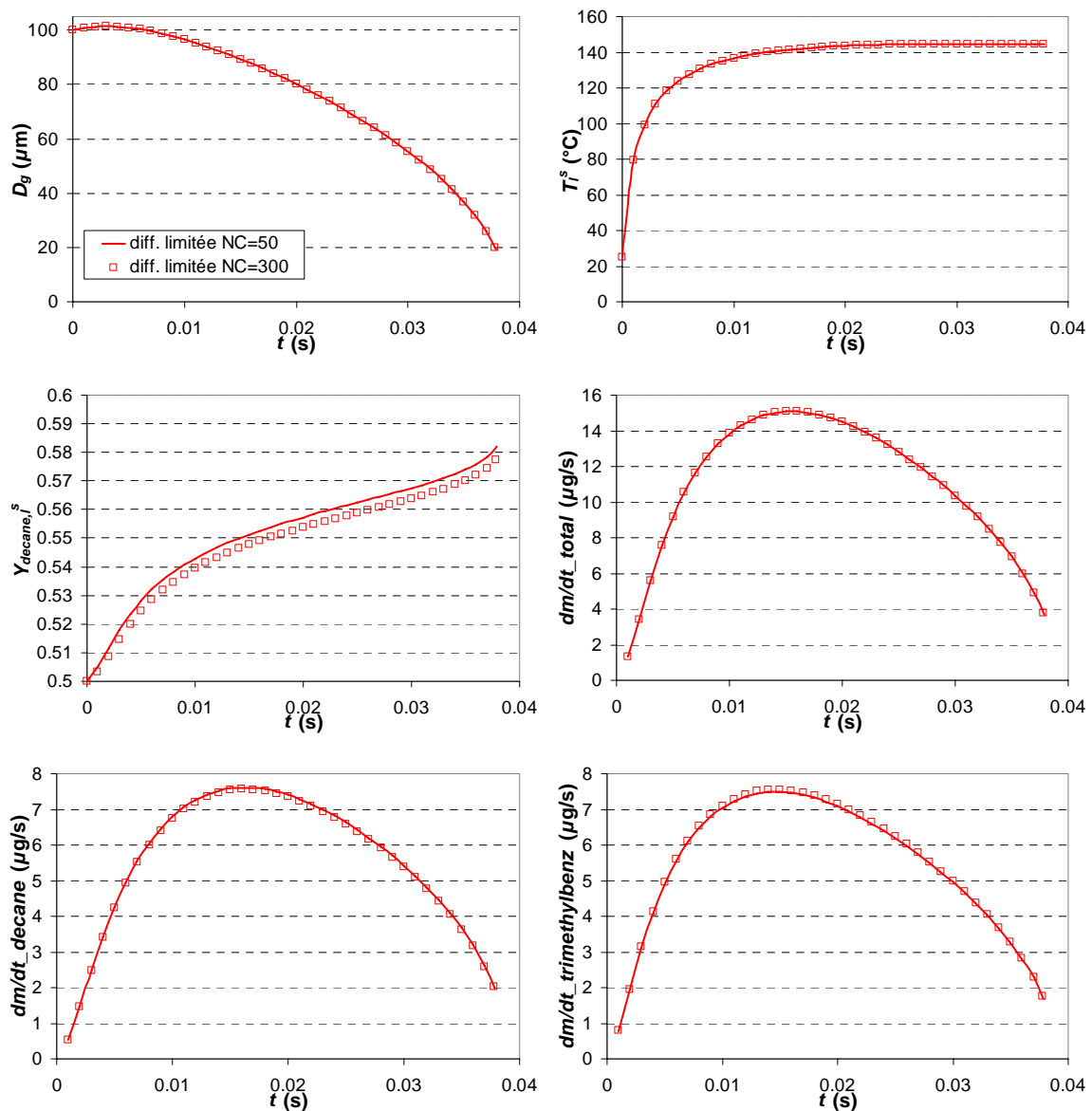


Figure 4.12 : Comparaison des calculs pour différentes valeurs de NC

Cette fois, les écarts pour les deux valeurs de NC sont insignifiants, puisque la composition de la goutte change peu, ce qui implique de faibles gradients de concentration.

Remarque : on parle ici de nombre de nœuds de discrétisation et non du pas d'espace Δr . Or plus le rayon de la goutte est important et plus ce pas d'espace est grand puisque $\Delta r = r_s / NC$. Cependant, des calculs avec des gouttes de $500\mu\text{m}$ de diamètre montrent qu'il n'est pas nécessaire d'augmenter la valeur de NT ou NC pour garder la même précision qu'avec des gouttes de $100\mu\text{m}$ de diamètre. Cela influe tout de même sur la stabilité puisque le calcul converge difficilement avec $NC=100$ pour des gouttes de $500\mu\text{m}$ de diamètre.

Pour être sûr que le calcul soit stable une valeur $NC=150$ semble nécessaire.

4.4 Conclusion

Tous les modèles développés ainsi que les améliorations apportées ont été présentés. Le modèle à thermodynamique continue surestimait l'évaporation des gouttes pour une évaporation à de faibles températures au loin. Nous avons alors amélioré ce modèle grâce à une nouvelle corrélation plus précise pour le calcul de la pression de vapeur saturante.

Les propriétés physiques manquantes des différents composants ont dû être déterminées et sont listées en Annexe A. La discrétisation des équations ainsi que les différents processus itératifs et méthodes de résolution des systèmes d'équations ont été détaillés. L'influence de la valeur des pas de temps et d'espace a aussi été analysée afin de réduire les temps de calcul.

Il découle de cette étude que la valeur du pas de temps Δt n'a pas d'influence sur la précision du calcul et que la seule limite à sa valeur est la convergence du calcul, qui n'est pas obtenue si elle est trop importante. Un pas de temps de $100\mu s$ est donc choisi.

Comme pour une goutte mono-composant, des résultats identiques sont obtenus pour 21 et 101 nœuds de discrétisation pour la température (respectivement $NT=20$ et 100). C'est donc le nombre de 21 nœuds qui est retenu.

Par contre, le choix du nombre de nœuds pour la composition est plus délicat. En effet, des différences de résultats ou des problèmes de convergence apparaissent suivant ce nombre. 151 nœuds de discrétisation de l'espace ($NC=150$) semblent nécessaire pour que le calcul reste stable.

CHAPITRE 5 VALIDATIONS EXPERIMENTALES

Comme il a été précisé auparavant, les mesures expérimentales pour des températures ambiantes élevées sont rares. L'objectif de ce chapitre est donc de comparer les mesures présentées dans le Chapitre 3 aux résultats numériques des modèles développés dans le Chapitre 4. Dans la première partie, les mesures de diamètre des gouttes effectuées à l'ONERA – DMAE seront confrontées, alors que dans la seconde partie, il s'agira de comparer les évolutions de températures moyennes mesurées au LEMTA de Nancy.

Evidemment comme la goutte n'est composée que de deux composants, les modélisations utilisées sont les modèles à composants discrets.

5.1 Comparaison de l'évolution du diamètre des gouttes

5.1.1 Etude des mélanges éthanol / 1-butanol

Conditions initiales et conditions à l'infini pour les modèles numériques

Pour les modèles d'évaporation, il est nécessaire de fixer les conditions initiales du liquide (c'est à dire les conditions au bord d'attaque de la plaque chauffante et non à la sortie de l'injecteur) : le diamètre de la goutte, sa température et sa composition.

Le diamètre initial est celui mesuré au bord d'attaque de la plaque. La température initiale (au bord d'attaque de la plaque) n'est pas connue. Il a été observé dans le Chapitre 3 que les gouttes refroidissent lorsqu'elles sont injectées dans un milieu à faible température. Or, ici, les gouttes parcourent 43mm avant d'atteindre le bord d'attaque de la plaque. Elles sont en forte interaction à l'injection et atteignent le bord d'attaque en configuration de goutte isolée. Il est alors légitime de penser qu'elles refroidissent entre l'injecteur et le bord d'attaque. Cependant, la présence de la plaque chauffe l'ensemble du système par conduction dans les parties métalliques du déviateur et du système de soutien de la plaque chauffante. Il est d'ailleurs impossible de toucher l'anneau de charge du déviateur sans se brûler, alors qu'il se trouve à 40mm du bord d'attaque de la plaque chauffante. Ces éléments à haute température contribuent donc à chauffer l'air entre l'injecteur et le bord d'attaque de la plaque et donc à limiter le refroidissement de la goutte, ou même la chauffer, sur cette distance. Il est donc difficile d'estimer la température initiale de la goutte. Une température initiale (au bord d'attaque de la plaque) comprise entre 20 et 25°C est donc choisie pour tous les mélanges d'éthanol et de 1-butanol, ce qui donne de bons résultats.

D'autres calculs ont été effectués avec une différence de 10°C sur la température initiale. Un écart inférieur à 1µm a été observé sur les résultats finaux du diamètre. De plus, cette température initiale n'a aucune influence sur la constante d'évaporation, sauf pendant la période de chauffage la durée est relativement limitée. En fait, changer la température initiale revient quasiment à translater la courbe de l'évolution du diamètre.

La composition initiale (au bord d'attaque de la plaque) de la goutte est, elle aussi, inconnue. L'évaporation de gouttes étant faible entre l'injection et le bord d'attaque, elle peut être considérée comme égale à celle à la sortie de l'injecteur.

La température ambiante utilisée dans le modèle numérique est donnée par le profil de température trouvé expérimentalement à 0,8mm de la plaque chauffante. Ce dernier est exprimé sous la forme d'un polynôme du sixième ordre représenté en noir sur la Figure 5.1.

La température ambiante étant fonction de la hauteur, une connaissance précise de la position de la goutte, et donc de sa vitesse, est alors nécessaire.

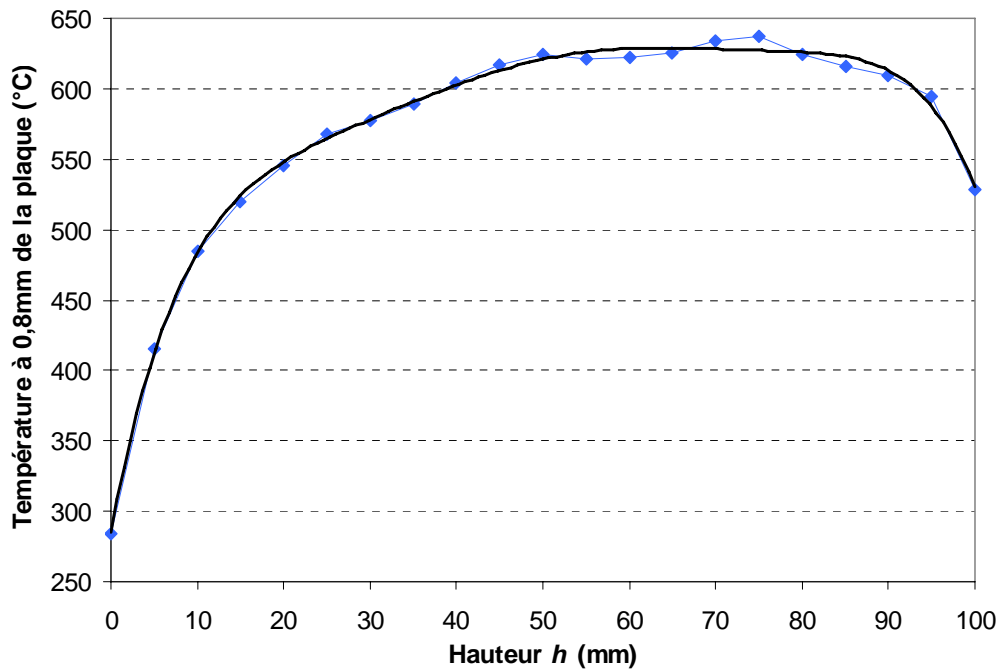


Figure 5.1: Profil de température de l'air à 0,8 mm de la plaque chauffante

Pour calculer l'évolution de la vitesse de la goutte, il serait possible d'intégrer l'équation de la dynamique dans le modèle pour un jet ascendant :

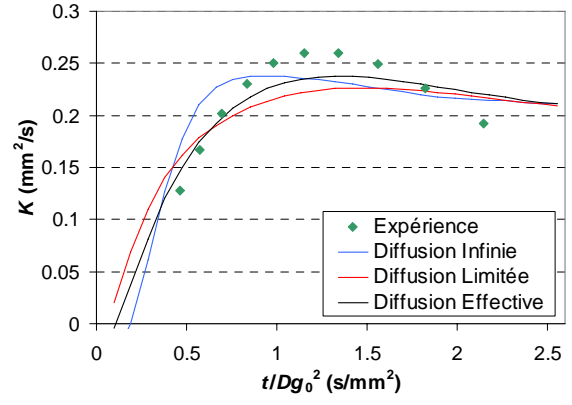
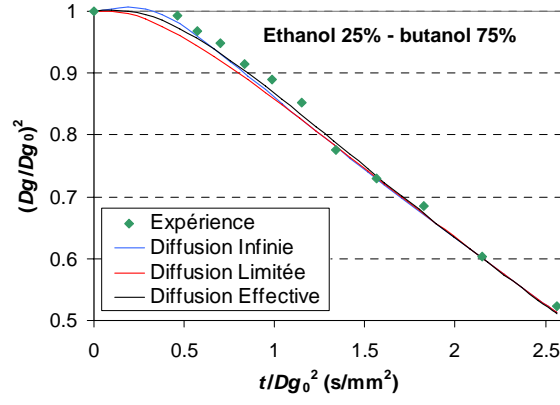
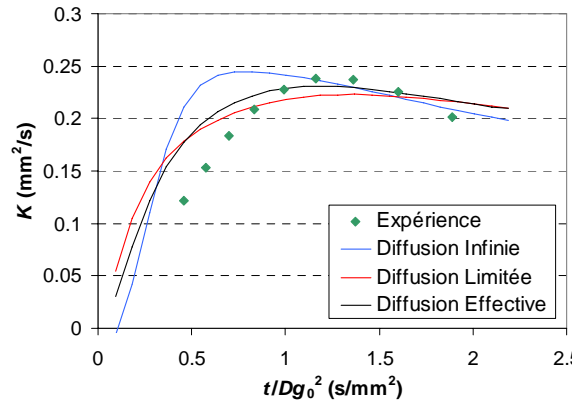
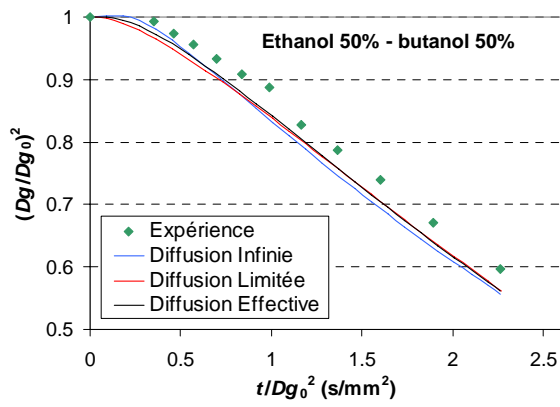
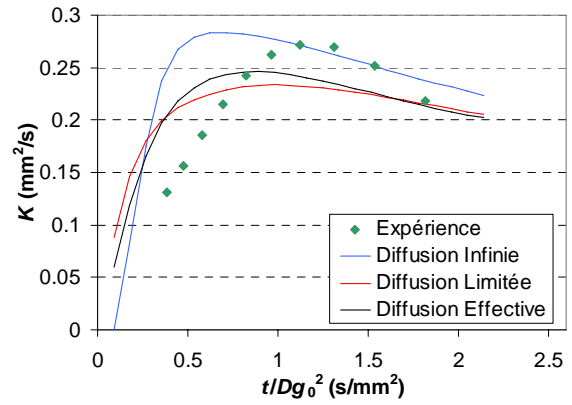
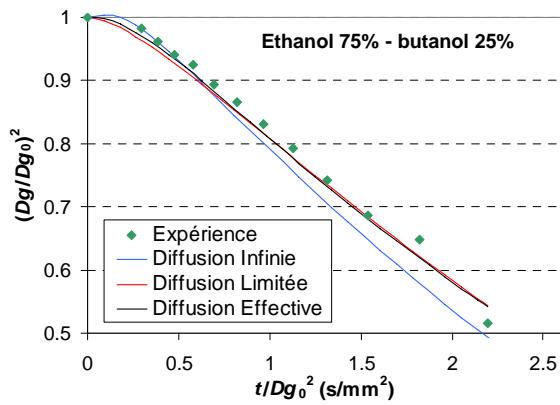
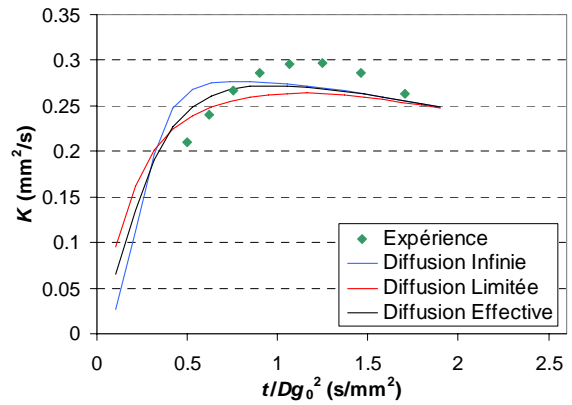
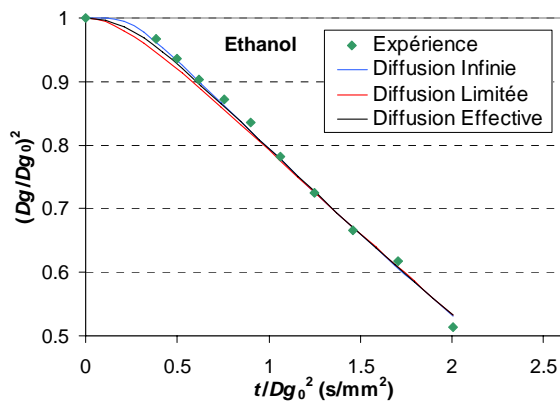
$$\rho_l r_s^3 \frac{dVg}{dt} = \frac{3}{8} r_s^2 \rho_g^\infty Cd (V^\infty - Vg)^2 - gr_s^3 \rho_l \quad (5.1)$$

où g représente la gravité. Cela ne ferait qu'ajouter une incertitude sur le calcul de la vitesse et de la position de la goutte et donc une erreur sur la température ambiante. Il est donc plus judicieux d'implanter dans le modèle les corrélations trouvées à partir des mesures expérimentales (Figure 3.1 et Tableau 3.1).

Résultats

Le seul modèle adapté pour les conditions expérimentales rencontrées est le modèle à diffusion effective. L'évaporation est trop rapide pour le modèle à diffusion infinie d'où l'apparition de gradients de composition non négligeables dans la goutte. Quant aux nombres de *Reynolds* particuliers, ils varient entre environ 2 et 25, les effets de recirculation à l'intérieur de la goutte sont alors trop importants pour ne pas en tenir compte, comme c'est le cas dans le modèle à diffusion limitée.

Les prévisions numériques sont maintenant confrontées aux mesures expérimentales. Sur la Figure 5.2, sont comparées l'évolution de la taille de la goutte à gauche et la valeur instantanée de la constante d'évaporation K à droite.



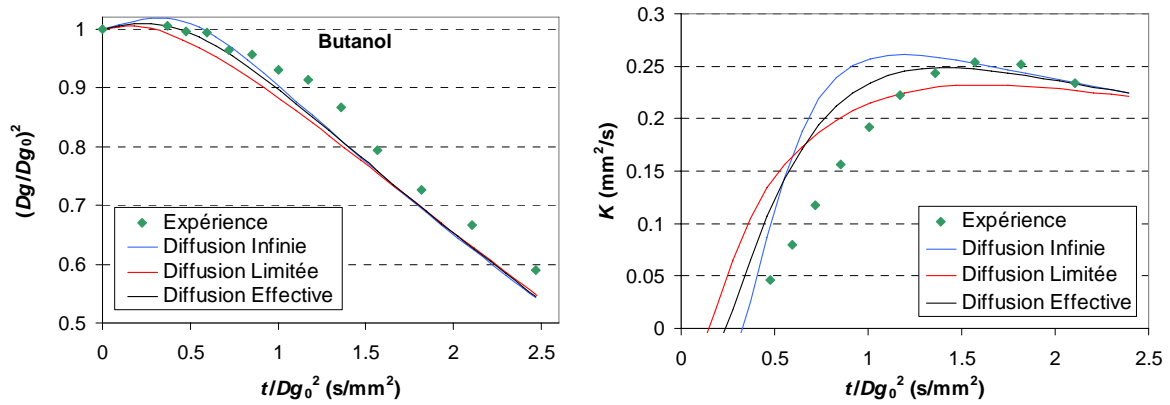


Figure 5.2 : Evolution de la taille de la goutte (à gauche) et de la constante d'évaporation K (à droite) pour chaque mélange éthanol / 1-butanol en fonction du temps

Bien que le modèle à diffusion effective soit le seul modèle adapté aux conditions expérimentales, tous les modèles donnent tout de même des résultats très proches. Ils sont tous capables de prédire précisément la décroissance de la taille des gouttes.

Si les différents modèles prévoient des évolutions de taille de goutte relativement proches, ce n'est pas du tout le cas pour les débits de vapeur pour chaque espèce (exemple avec le mélange éthanol 50% / 1-butanol 50% sur la Figure 5.3). Le modèle à diffusion infinie peut prévoir des débits presque deux fois plus élevés pour l'éthanol ou deux fois plus faibles pour le 1-butanol. Le modèle à diffusion effective prévoit quant à lui un comportement intermédiaire.

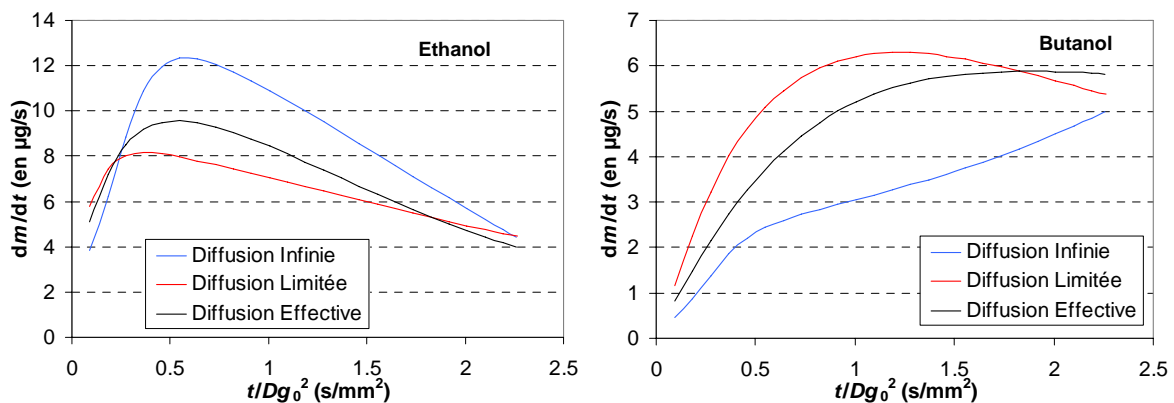


Figure 5.3 : Evolution du débit massique de vapeur de l'éthanol (à gauche) et du 1-butanol (à droite) en fonction du temps pour le mélange éthanol 50% / 1-butanol 50%

Ce comportement s'explique par les écarts de température de surface (Figure 5.4 à gauche) et de composition du liquide à la surface de la goutte (Figure 5.4 à droite) qui sont dues aux différences de diffusion de la température et des espèces dans le liquide.

L'uniformité de la température du liquide supposée dans le modèle à diffusion infinie retarde effectivement le chauffage de la surface de la goutte. Toute l'énergie reçue pour son

chauffage est répartie dans tout le liquide, contrairement aux modèles à diffusion limitée et effective où elle sert d'abord à chauffer le liquide principalement la surface et sa proximité, avant de chauffer le reste de la goutte par conduction et convection.

En ce qui concerne la fraction d'éthanol liquide à la surface (Figure 5.4 à droite), elle chute au début de l'évaporation pour les modèles à diffusion limitée et effective. La quantité d'éthanol liquide évaporé à la surface est difficilement renouvelé à cause de la faible diffusion des espèces liquides à l'intérieur de la goutte. Quant au modèle à diffusion infinie, il la renouvelle instantanément par sa composition uniforme du liquide.

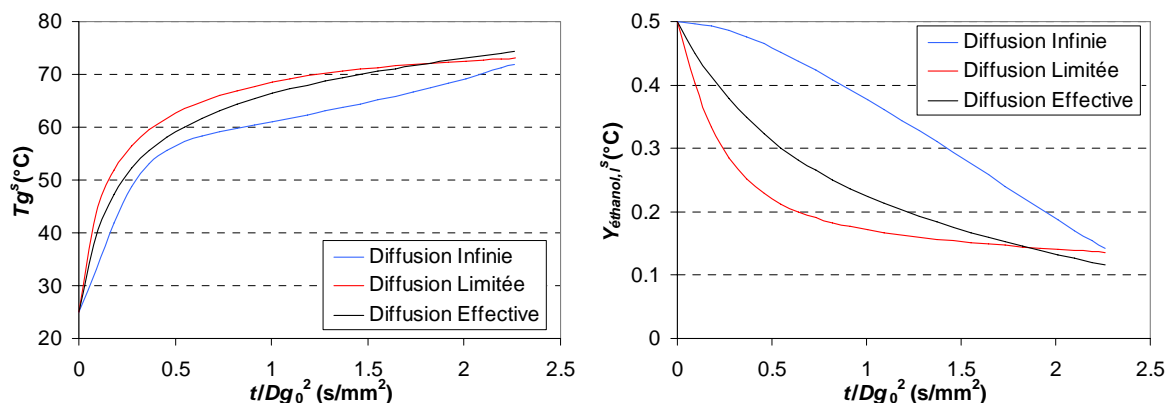


Figure 5.4 : Evolution de la température de la goutte à la surface (à gauche) et de la fraction massique d'éthanol liquide à la surface (à droite) en fonction du temps pour le mélange éthanol 50% / 1-butanol 50%

5.1.2 Etude des mélanges acétone / éthanol

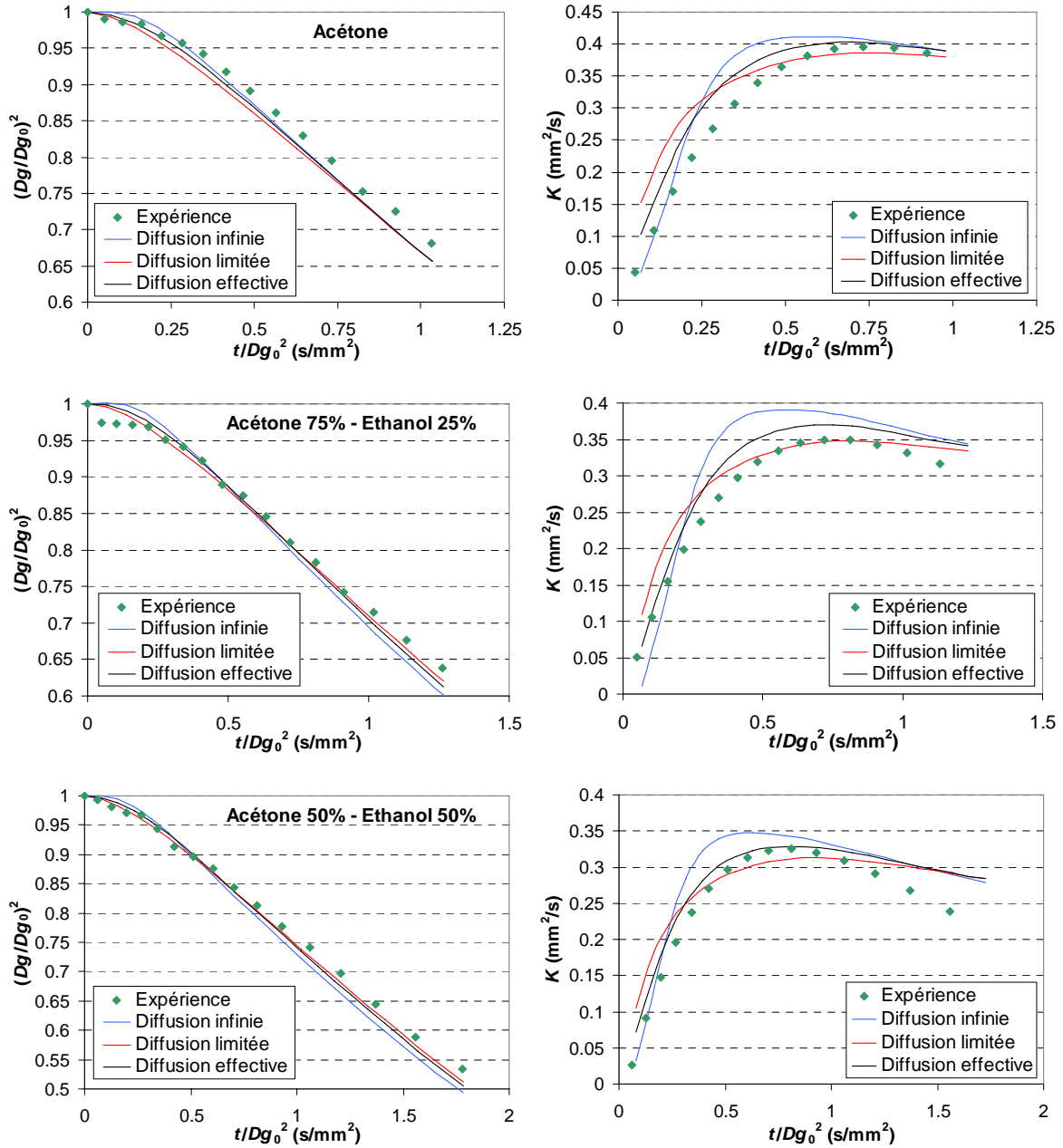
Afin de compléter la validation des modèles concernant l'évolution de la taille des gouttes, les mesures effectuées avec les mélanges d'acétone et d'éthanol sont elles aussi comparées aux résultats numériques. Dans le Chapitre 3, il a été observé que la constante d'évaporation augmentait avec la proportion initiale d'acétone dans la goutte, alors qu'elle variait peu pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol. Il est donc intéressant de vérifier si les modèles prédiront eux aussi des constantes d'évaporation différentes suivant la composition initiale.

Conditions initiales et conditions à l'infini pour les modèles numériques

Les conditions initiales (au bord d'attaque de la plaque) et les conditions au loin sont toujours les mêmes que lors de l'étude précédente, à part la température initiale des gouttes. L'acétone, par sa faible température d'ébullition, refroidissant plus que l'éthanol et le 1-butanol, il est nécessaire d'imposer des températures initiales plus faibles. Elles sont donc comprises entre 5°C et 20°C.

Résultats

Sur la Figure 5.5, l'évolution de la taille de la goutte (à gauche) et la valeur instantanée de la constante d'évaporation K (à droite) sont là aussi confrontées.



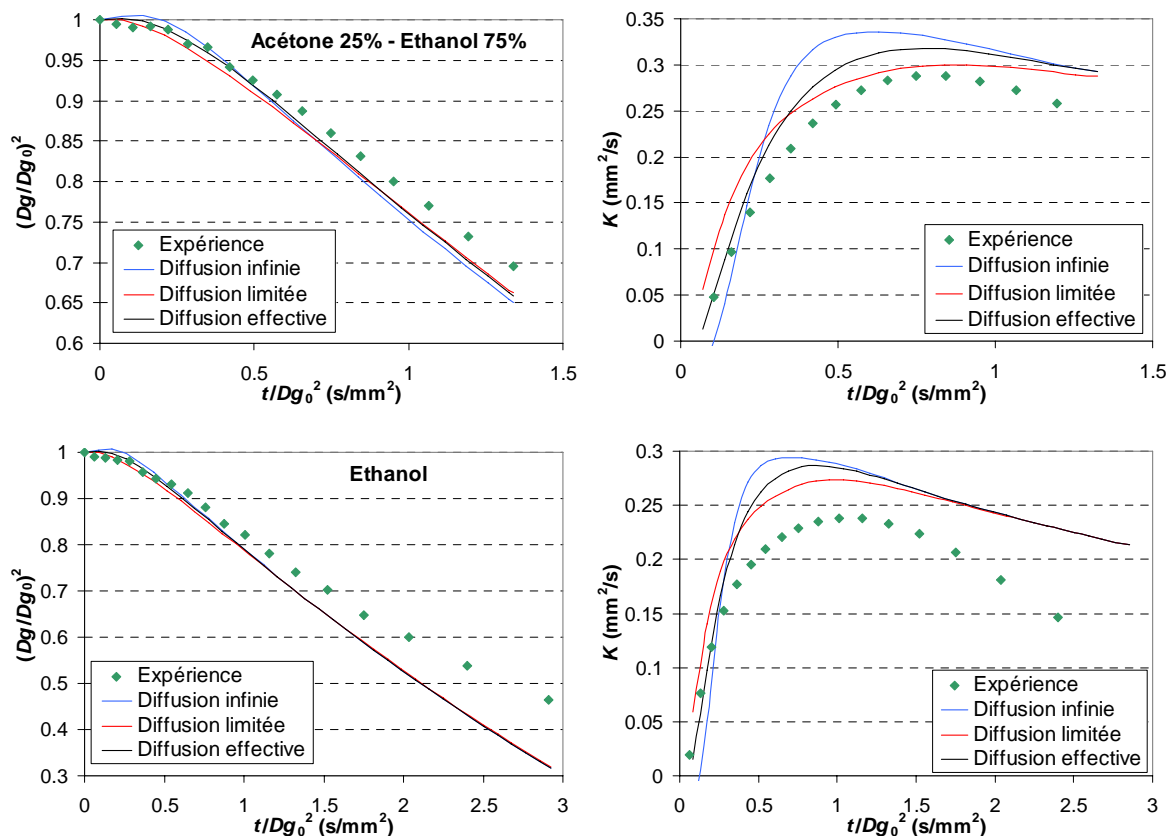


Figure 5.5 : Evolution de la taille de la goutte (à gauche) et de la constante d'évaporation K (à droite) pour chaque mélange acétone / éthanol en fonction du temps

Comme pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol, tous les modèles sont capables de prédire précisément l'évolution de la taille de la goutte pour tous les liquides, à l'exception de l'éthanol pur, alors que dans l'étude précédente les résultats pour ce composant correspondaient très bien (Figure 5.2). Les modèles ont donc bien simulé la croissance de la constante d'évaporation avec l'augmentation de la concentration d'acétone. Il est donc nécessaire d'identifier quelle(s) propriété(s) physique(s) influe(nt) sur la vitesse d'évaporation de la goutte, ce qui sera effectué par la suite.

Le constat déjà effectué auparavant avec les mélanges d'éthanol et de 1-butanol concernant les débits de vapeur pour chaque espèce est semblable ici. Si tous les modèles prévoient des évolutions de taille de gouttes très proches, les débits de vapeur diffèrent (Figure 5.6). Les écarts sont toutefois plus limités ici, car la différence de température d'ébullition entre les deux composants n'est que de $22,1^{\circ}\text{C}$ contre $39,4^{\circ}\text{C}$ pour les mélanges d'éthanol et de 1-butanol. Cela se traduit donc par une chute bien moins brutale de la fraction massique d'acétone liquide à la surface de la goutte (Figure 5.7 à droite) et donc des gradients de concentration moins intenses et une meilleure concordance entre les modèles. De plus, la goutte chauffant beaucoup moins grâce aux températures d'ébullition plus faibles, les

gradients thermiques sont moins importants et la température de surface prévue par les modèles sont plus proches (Figure 5.7 à gauche).

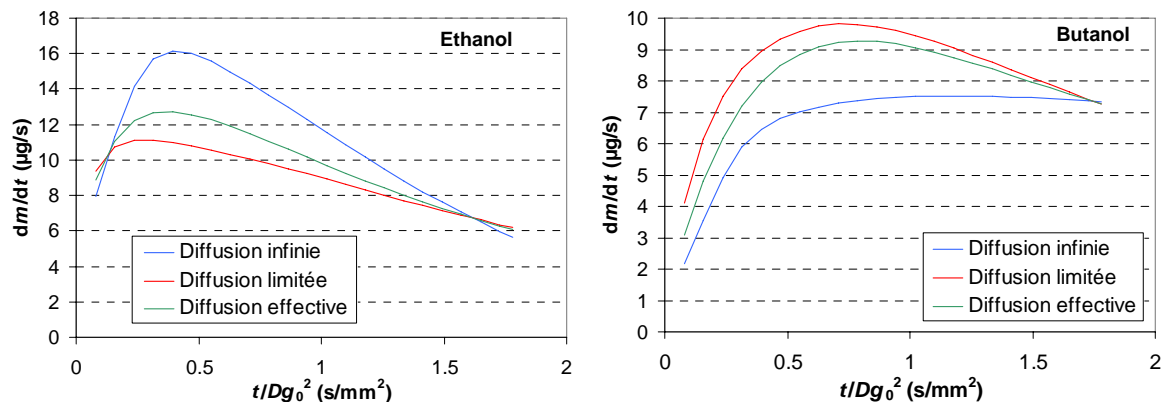


Figure 5.6 : Evolution du débit massique de vapeur de l'acétone (à gauche) et de l'éthanol (à droite) en fonction du temps pour le mélange acétone 50% / éthanol 50%

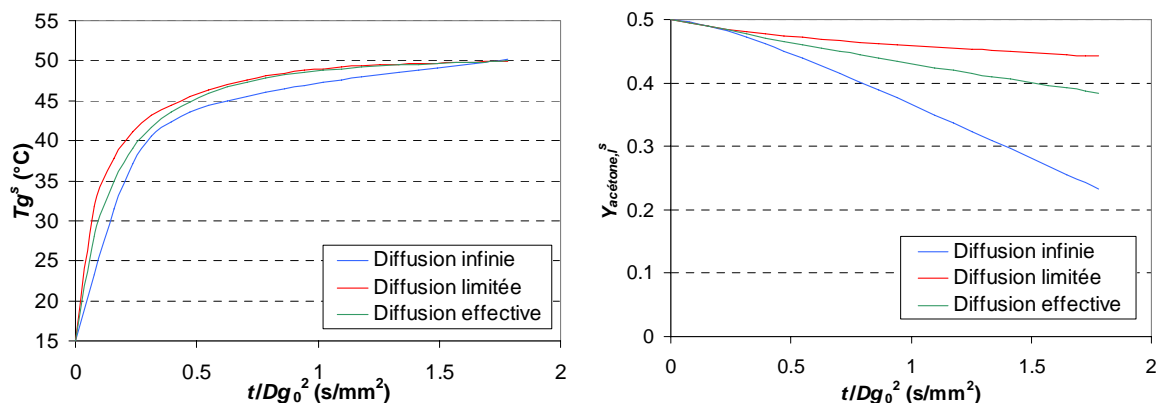


Figure 5.7 : Evolution de la température de la goutte à la surface (à gauche) et de la fraction massique d'acétone liquide à la surface (à droite) en fonction du temps pour le mélange acétone 50% / éthanol 50%

5.1.3 Influence des propriétés physiques sur la constante d'évaporation

Les mélanges d'éthanol et de 1-butanol donnaient des décroissances de taille de gouttes relativement proches. La grande différence entre les propriétés physiques de ces deux composants est seulement la température d'ébullition (78,4°C pour l'éthanol et 117,8°C pour le 1-butanol). Or, pour les mélanges d'acétone et d'éthanol s'ajoute à la différence de température d'ébullition (56,3°C pour l'acétone et 78,4°C pour l'éthanol) la chaleur latente d'évaporation qui est bien plus faible pour l'acétone (Figure 5.8).

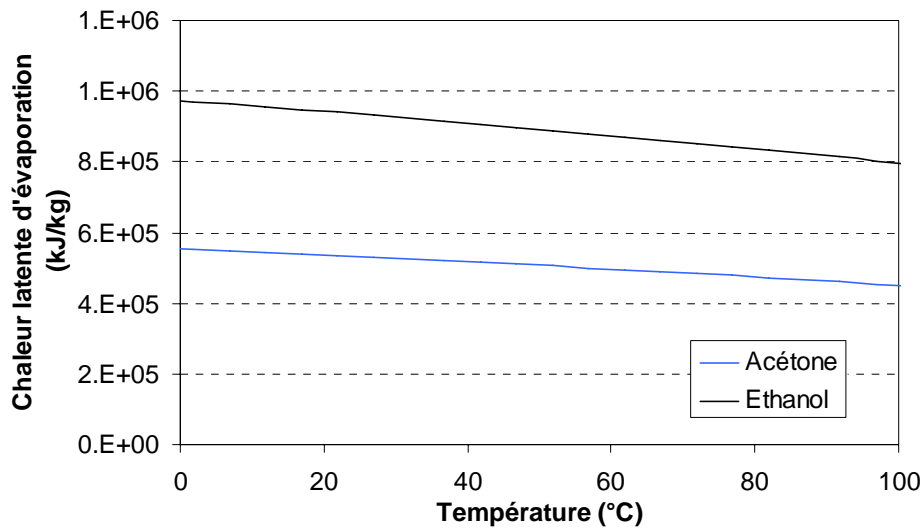


Figure 5.8 : Evolution de la chaleur latente d'évaporation de l'acétone et de l'éthanol en fonction de la température

Cette différence peut expliquer l'écart sur la constante d'évaporation entre les deux composants. Lorsque les composants purs s'évaporent dans une ambiance à température élevée, la chaleur perçue par la goutte en provenance du milieu ambiant est assez proche quel que soit le composant, à condition que la température de la goutte reste du même ordre de grandeur. Une partie de la chaleur est utilisée pour chauffer la goutte et l'autre pour évaporer (ce qui correspond à la chaleur latente d'évaporation). Plus la température de la goutte augmente, plus la chaleur perçue par la goutte diminue et plus la goutte consomme d'énergie pour vaporiser, puisqu'elle s'évapore plus. La goutte finit donc par atteindre une température d'équilibre ou de « saturation » lorsque toute la puissance reçue par la goutte est consommée pour s'évaporer. Cette température est donc forcément liée à la chaleur latente d'évaporation. Si cette dernière était plus faible, évaporer une certaine quantité de masse liquide consommerait moins d'énergie, la température d'équilibre serait plus élevée et donc la goutte s'évaporerait plus vite. A l'inverse, si la chaleur latente d'évaporation était plus importante, la température d'équilibre diminuerait et la goutte s'évaporerait moins rapidement.

Pour vérifier cette affirmation, une étude numérique est effectuée. Le modèle à diffusion effective est utilisé pour simuler à nouveau l'évaporation de la goutte d'acétone pur dans les conditions expérimentales, mais en doublant et en divisant par deux la chaleur latente d'évaporation l_v (égale à $5,01 \cdot 10^5$ kJ/kg à la température normale d'ébullition).

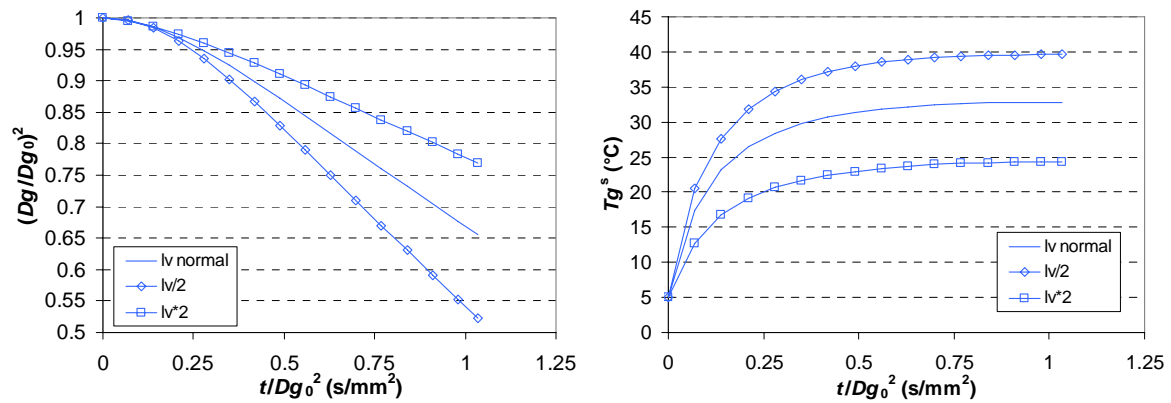


Figure 5.9 : Evolution de la taille de la goutte (à gauche) et de la température à la surface de la goutte (à droite) en fonction du temps pour l'acétone pur avec différentes chaleurs latentes d'évaporation lv

La Figure 5.9 de gauche confirme bien que la vitesse d'évaporation de la goutte est considérablement influencée par cette propriété physique. En divisant (respectivement en multipliant) par deux la chaleur latente d'évaporation, la température d'équilibre sur la Figure 5.9 à droite passe de 32,8°C à 39,6°C (respectivement de 32,8°C à 24,3°C) et ainsi la constante d'évaporation passe de 0,4mm²/s à 0,57mm²/s (respectivement de 0,4mm²/s à 0,26mm²/s). Il est donc primordial de connaître précisément la chaleur latente d'évaporation de chaque composant pour estimer correctement l'évolution de la taille de la goutte.

5.2 Comparaison de l'évolution de la température moyenne

Il vient d'être vérifié que les modèles développés étaient capables de prédire une bonne évolution de la taille des gouttes. L'inconvénient est que tous les modèles donnent la même décroissance de diamètre alors que la température et la composition de la goutte, et donc les débits de vapeur pour chaque espèce, varient d'un modèle à l'autre. Dans cette partie, le chauffage et le refroidissement des gouttes étudiés dans le Chapitre 3 serviront à compléter la validation des modèles numériques. Les conditions initiales se réfèrent cette fois aux conditions à la sortie de l'injecteur.

5.2.1 Injection dans un milieu à faible température

Les résultats des mesures de température moyenne des gouttes injectées dans le milieu à faible température, présentés dans le Chapitre 3, sont comparés aux prédictions des modèles d'évaporation. D'autres mesures qui n'ont pas été présentées, les gouttes n'étant pas injectées dans les mêmes conditions (diamètre, température et vitesse initiaux) et donc difficilement comparables entre elles, seront elles aussi confrontées aux résultats numériques.

Conditions initiales et conditions à l'infini pour les modèles numériques

Le diamètre initial des gouttes est connu. La température initiale est égale à celle de l'injection, qui est donnée par le thermocouple placé à l'intérieur de l'injecteur placé très près de l'orifice d'injection. La composition initiale des gouttes est elle aussi connue car le liquide ne peut s'évaporer dans les conduits.

La température à l'infini est celle de la pièce et les fractions de vapeur à l'infini sont nulles.

Il ne faut pas oublier que le déviateur électrostatique de gouttes n'a pas été utilisé et que les interactions ne sont donc pas négligeables car le paramètre de distance initial C_0 est compris entre 6 et 8,5. Le facteur correctif déterminé par *Atthasit* et al. [35], déjà défini dans le Chapitre 3, doit donc être appliqué sur le débit massique de vapeur pour tenir compte de ces interactions aussi bien pour la décroissance du diamètre que sur le chauffage et le refroidissement :

$$\eta = 1 - 0,57 \left[1 - \frac{1 - \exp(0,13(C_0 - 6))}{1 + \exp(0,13(C_0 - 6))} \right] \quad (5.2)$$

pour $2,5 < C_0 < 16$ et un nombre de *Reynolds* particulière $12 < Re < 25$.

Refroidissement brutal de la goutte après injection

Tout d'abord, les résultats obtenus avec le modèle à diffusion effective (modèle le plus adapté à ces conditions) pour un composant pur, en l'occurrence l'acétone, sont présentés sur la Figure 5.10. Le calcul a démarré à deux hauteurs différentes : à l'injection (hauteur nulle) et

à 4mm. Mais avant de s'intéresser à la température, il est intéressant de constater que, d'après le modèle, la goutte s'évapore très peu malgré que l'acétone soit très volatile. Le diamètre passe de $111,8\mu\text{m}$ à l'injection à une valeur de $105,2\mu\text{m}$ à une hauteur de 55mm. Cependant, cette diminution du diamètre est en grande partie due aux variations de la masse volumique du liquide avec la température. Sans cette variation de masse volumique, il serait alors égal à $110,44\mu\text{m}$. Le modèle confirme bien que la goutte s'évapore très peu lorsqu'elle est injectée dans le milieu ambiant. Cette condition est primordiale pour affirmer que la composition des liquides bi-composants reste quasiment inchangée durant toute la période de mesure, car cette hypothèse a été utilisée pour déterminer les températures mesurées par la technique FIL dans le Chapitre 3 et qui seront à nouveau présentées ici.

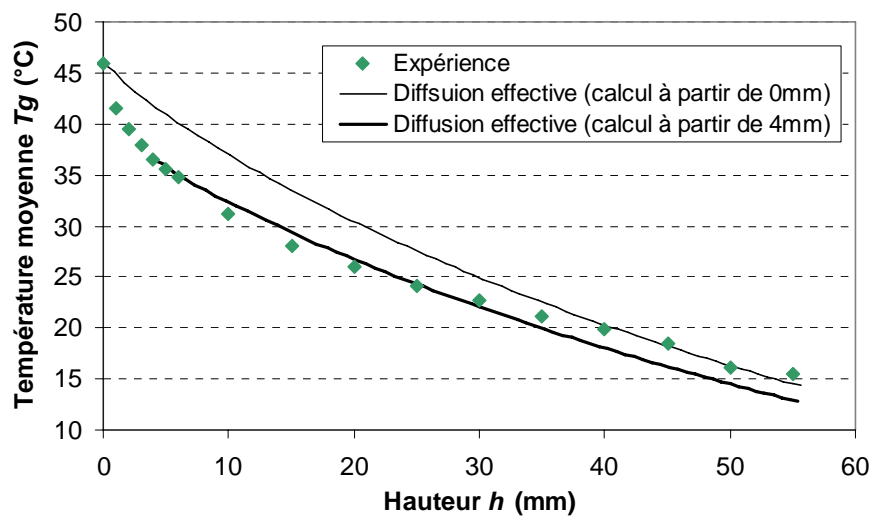


Figure 5.10 : Evolution de la température moyenne de la goutte en fonction de la hauteur pour l'acétone pure

Lorsque le calcul commence à l'injection (hauteur nulle), il n'est pas capable de reproduire la chute brutale de température observée sur les premiers millimètres de la mesure. Par contre, lorsque le calcul commence à une hauteur de 4mm, le modèle prévoit un bien meilleur refroidissement. Les premiers millimètres qui suivent l'injection doivent donc faire l'objet d'un phénomène qui refroidit considérablement le liquide et qui n'est pas pris en compte par le modèle.

La Figure 5.11 montre la désintégration du jet liquide en gouttes en sortie d'injecteur. Pour les mesures présentées sur la Figure 5.10, un orifice de $50\mu\text{m}$ de diamètre a été placé sur l'injecteur. Avant de former des gouttes de $111,8\mu\text{m}$ de diamètre, un jet liquide de $50\mu\text{m}$ de diamètre sort de l'injecteur. Les vibrations mécaniques générées par la céramique piézo-électrique sont transmises à ce jet liquide qui se désintègre progressivement pour former des gouttes à 3 ou 4mm de l'injecteur. Ces gouttes ne sont pas immédiatement sphériques, mais le deviendront quelques millimètres plus loin.



Figure 5.11 : désintégration du jet liquide en gouttes en sortie d'injecteur

Cela peut donc expliquer la différence entre les résultats numériques et expérimentaux. Les mesures à 1, 2 et 3mm de l'injecteur ont été effectuées sur le jet liquide puisque la technique FIL, par son principe, le permet. Les signaux de fluorescence ainsi acquis apparaissent alors continus. A partir de 4mm, le jet est désintégré en gouttes qui ne sont pas encore sphériques. L'évaporation (et donc le chauffage et le refroidissement) d'un liquide dépend du rapport S/V de la surface de l'interface liquide-gaz sur le volume de liquide. Pour une goutte parfaitement sphérique de diamètre Dg , ce rapport s'écrit :

$$\frac{S}{V} = \frac{\pi Dg^2}{\pi Dg^3/6} = \frac{6}{Dg} \quad (5.3)$$

Pour un jet liquide de diamètre Dj et de longueur Lj :

$$\frac{S}{V} = \frac{\pi DjLj}{\pi Dj^2 Lj/4} = \frac{4}{Dj} \quad (5.4)$$

Comme $Dg \approx 2Dj$, pour le jet liquide :

$$\frac{S}{V} \approx \frac{8}{Dg} \quad (5.5)$$

Le rapport S/V pour le jet liquide est donc plus important que celui de la goutte, ce qui explique le refroidissement plus important durant les quatre premiers millimètres. Pour le cas étudié, ce rapport est égal à $5,37 \cdot 10^4 \text{m}^{-1}$ pour la goutte et $8 \cdot 10^4 \text{m}^{-1}$ pour le jet liquide, soit 49% de plus.

Deux calculs sont à nouveau effectués à partir de la sortie de l'injecteur jusqu'à 4mm, mais en choisissant un diamètre initial de la goutte de sorte à obtenir un rapport S/V égal à celui du jet. Ce diamètre est donc égal à $75 \mu\text{m}$. Le premier considère toujours le facteur correctif η (équation (5.2)) pour tenir compte des interactions entre gouttes, l'autre non. La chute de température est cette fois plus brutale et les pentes deviennent comparables à celle observée expérimentalement (Figure 5.12). Ceci n'est en aucun cas une validation car, par leur forme, une goutte ne s'évapore et ne refroidit pas exactement comme un jet liquide, mais les ordres de grandeur doivent être comparables.

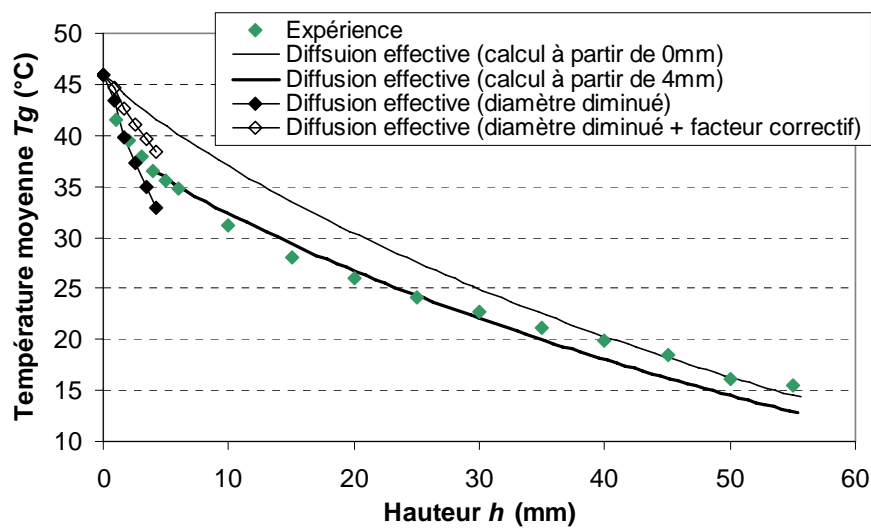


Figure 5.12 : Evolution de la température moyenne de la goutte en fonction de la hauteur pour l'acétone pure

D'après cette étude, le calcul doit commencer à une hauteur où le jet liquide est bien désintégré en gouttes et non à la sortie de l'injecteur.

Résultats

Les résultats obtenus avec tous les modèles pour les gouttes d'environ 110 μm de diamètre étudiées dans le Chapitre 3 sont présentés sur la Figure 5.13. D'autres mesures avec des gouttes d'environ 230 μm de diamètre sont aussi comparées sur la Figure 5.14. Elles n'avaient pas été utilisées pour une étude paramétrique, car les conditions initiales et les profils de vitesse différents (respectivement dans le Tableau 5.1 et le Tableau 5.2) ne le permettaient pas.

Composition initiale du liquide	Dg_0 (en μm)	Tg_0 (en $^{\circ}\text{C}$)	C_0	T^{∞} (en $^{\circ}\text{C}$)
Acétone 60% - Ethanol 40%	243,7	43,7	3,45	21,9
Acétone 40% - Ethanol 60%	235,4	44,7	3,38	20
Acétone 20% - Ethanol 80%	209,6	44,5	3,95	20

Tableau 5.1 : Conditions initiales et au loin pour les gouttes d'environ 230 μm de diamètre composées d'acétone et d'éthanol

Composition initiale du liquide	Vg (en m/s)	Vg/Vg_0
Acétone 60% - Ethanol 40%	$8,967 - 2,913h - 9,735h^2$	$1 - 0,325h - 1,086h^2$
Acétone 40% - Ethanol 60%	$7,182 - 6,623h + 1,492h^2$	$1 - 0,922h + 0,208h^2$
Acétone 20% - Ethanol 80%	$8,5929 - 6,558h - 10,513h^2$	$1 - 0,763h - 1,223h^2$

Tableau 5.2 : Corrélations des vitesses et des vitesses adimensionnées en fonction de la hauteur pour les gouttes d'environ 230 μm de diamètre composées d'acétone et d'éthanol

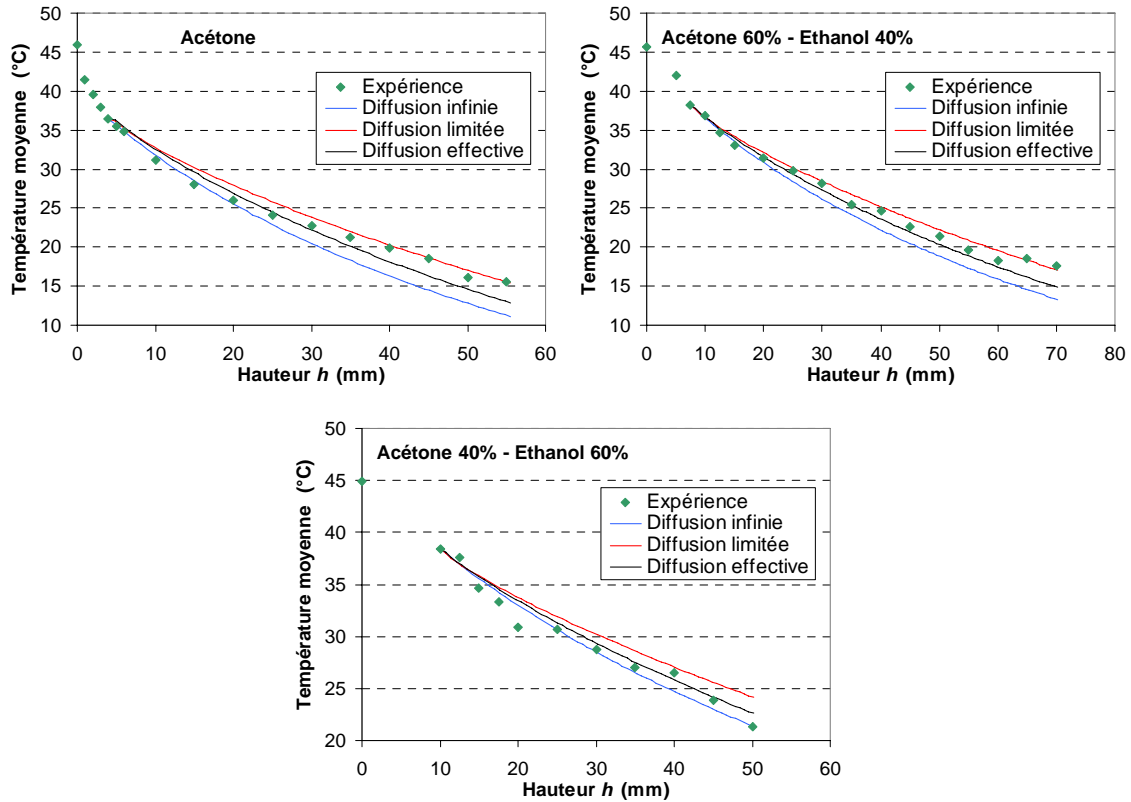


Figure 5.13 : Evolution de la température moyenne de la goutte en fonction de la hauteur pour toutes les gouttes d'environ 110 μm de diamètre composées d'acétone et d'éthanol

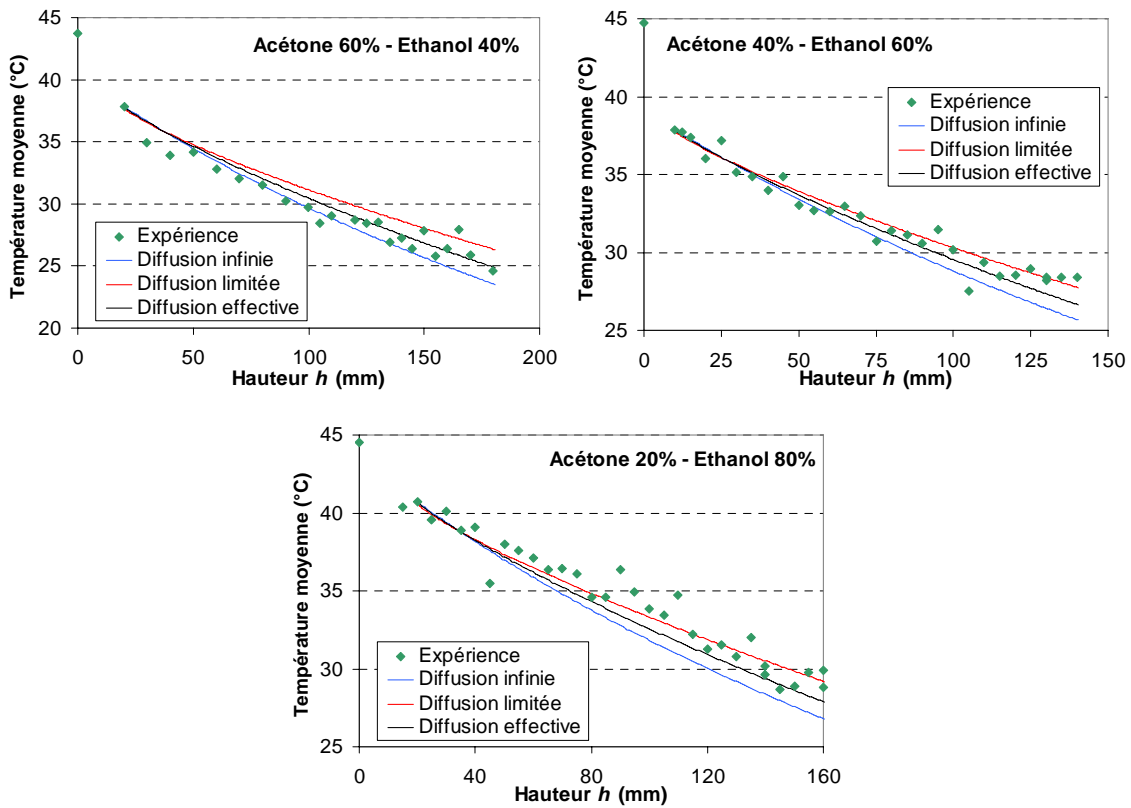


Figure 5.14 : Evolution de la température moyenne de la goutte en fonction de la hauteur pour les gouttes d'environ 230 μm de diamètre composées d'acétone et d'éthanol

Ces résultats montrent que les modèles à diffusion limitée et effective sont les plus aptes à prédire l'évolution de la température moyenne de la goutte. En général, les températures mesurées ont un comportement se situant entre ces deux modèles. La seule différence de modélisation entre eux se situe au niveau de la conductivité thermique et des coefficients de diffusion des espèces qui, dans le modèle à diffusion effective, sont augmentés en les multipliant par des coefficients correctifs dont la valeur est comprise entre 1 et 2,72, afin de tenir compte des effets de convection dans la goutte. Le calcul de ces coefficients utilise un coefficient de frottement qui est surestimé d'après *Castanet* [34], ce qui explique que les mesures expérimentales se situent, en général, entre les résultats de ces deux modèles.

Le modèle à diffusion infinie a tendance à surestimer le refroidissement, ce qui s'explique par les profils de composition du liquide uniformes utilisés dans ce modèle. L'évaporation étant faible, l'écart de concentration de chaque composant à la surface calculée par tous les modèles (Figure 5.15 à droite) n'est pas assez important pour avoir une influence notable sur le comportement prédit. La différence provient surtout de l'uniformité du profil de température de la goutte dans le modèle à diffusion infinie, avec lequel la température moyenne de la goutte reste forcément égale à la température de surface. Cela implique que, même si la température moyenne est sous-estimée par rapport aux deux autres modèles, la température de surface reste tout de même bien au-dessus pendant une grande partie du calcul (Figure 5.15 à gauche), ce qui surestime l'évaporation de la goutte et à fortiori son refroidissement.

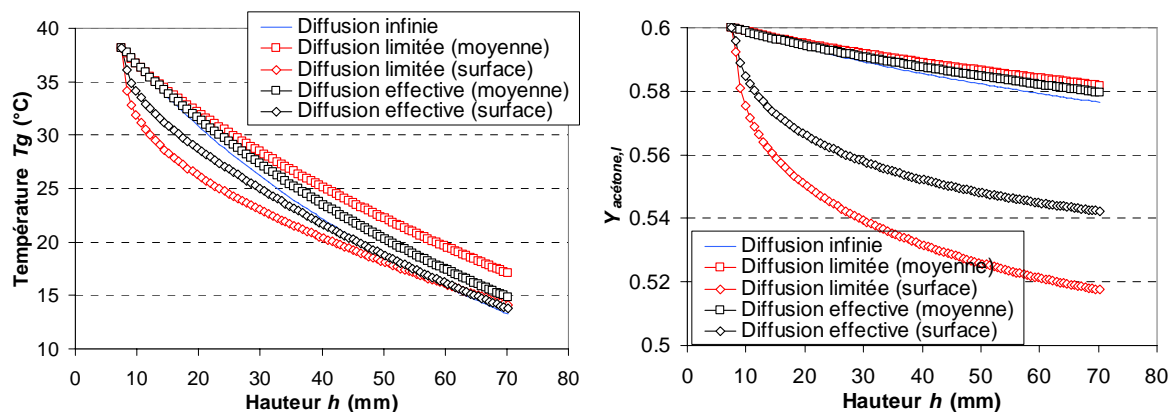


Figure 5.15 : Evolution de la température de la goutte (à gauche) et de la fraction massique d'acétone liquide (à droite) en fonction de la hauteur pour la goutte de 107,11 μ m composée de 60% d'acétone et de 40% éthanol

Les modèles numériques prédisent donc un bon comportement de la température moyenne en refroidissement, surtout avec les modèles à diffusion limitée et effective. Dans cette configuration, les échanges d'énergie entre la goutte et le milieu ambiant restent faibles. Il est

donc utile d'étudier le comportement de la température lorsque ces échanges sont bien plus élevés, comme c'est le cas lors de l'injection dans le panache d'air chaud.

5.2.2 Injection dans le panache d'air chaud

Conditions initiales et conditions à l'infini pour les modèles numériques

La définition des conditions initiales et des conditions à l'infini dans les modèles numériques est identique à celle de l'étude précédente, à exception de la température à l'infini. Contrairement à l'étude de l'évolution du diamètre le long de la plaque chauffante, les gouttes ne sont pas déviées ici et le nombre important de gouttes passant dans le panache d'air chaud refroidit ce dernier. La température de l'air (rappelée sur la Figure 5.16) semble atteindre un palier (dans la direction horizontale) à environ 2mm du jet. Un profil de température moyen est donc défini à partir de quatre profils de température mesurés à quatre endroits différents situés à 2mm de l'axe du jet de gouttes. Ce profil de température est défini en fonction de la hauteur par un polynôme du sixième ordre dans les modèles numériques.

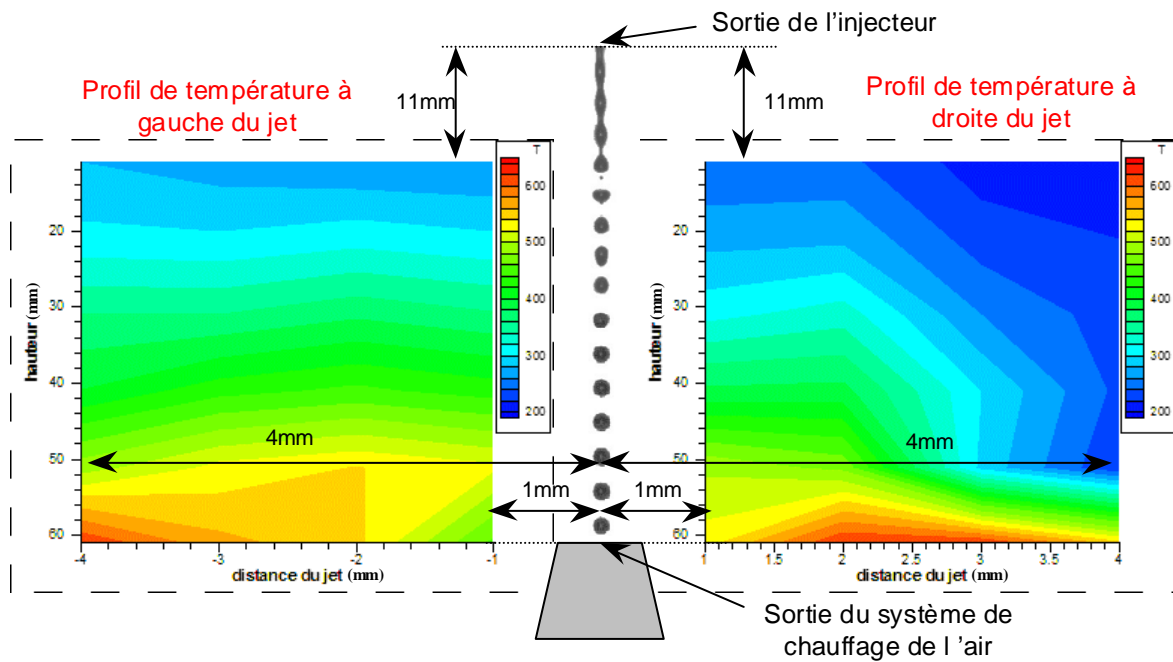


Figure 5.16: Température du panache d'air chaud avec le jet de gouttes, à gauche du jet (à gauche) et à droite du jet (à droite).

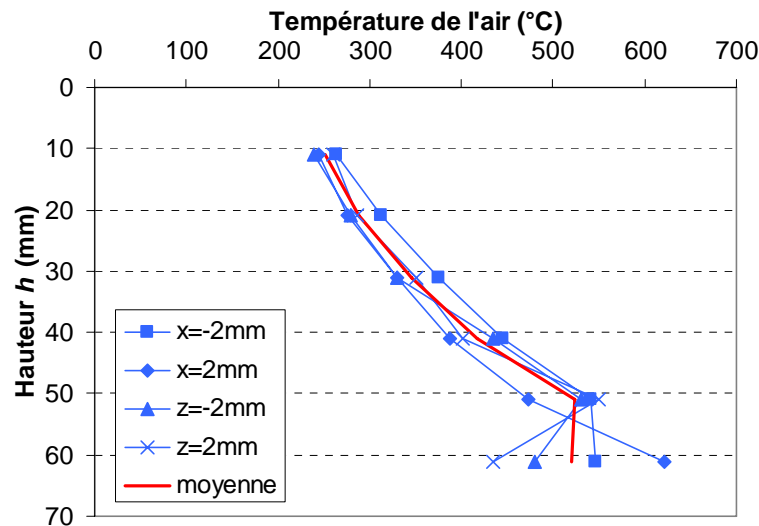


Figure 5.17: Profil de température du panache d'air chaud en 4 endroits situés à 2mm du jet de gouttes

Résultats

Tout d'abord, il est important de préciser que, d'après les modèles, le diamètre varie peu malgré que les gouttes soient injectées dans le panache d'air chaud. Dans le pire des cas (acétone 40% - éthanol 60% injecté à 42,5°C), la diminution de diamètre en tenant compte de la variation de masse volumique du liquide avec la température n'est que d'environ 4 μ m alors que le diamètre initial est de 137 μ m. L'approximation, pour déterminer la température mesurée des gouttes, qui consiste à considérer que la composition ne change quasiment pas grâce à la faible évaporation des gouttes reste donc valable ici. D'ailleurs les modèles ne prévoient qu'une variation d'environ 1% de la concentration moyennes des composants. Ce dernier résultat n'est donné qu'à titre indicatif, car il n'a pas été prouvé que les modèles prédisaient une évolution correcte de la composition des gouttes.

En comparaison avec l'étude expérimentale effectuée auparavant dans la couche limite thermique de la plaque chauffante, les gouttes s'évaporent beaucoup moins, ce qui s'explique par deux raisons. Ici les gouttes sont en fortes interactions alors qu'elles pouvaient être considérées comme isolées le long de la plaque chauffante, leur paramètre de distance initial C_0 étant 10 à 20 fois plus élevé. Ensuite, la température de l'air dans le panache d'air chaud est moins importante puisqu'elle monte progressivement de 250°C à 520°C (Figure 5.17), alors qu'elle atteint très vite un pallier compris entre 600°C et 650°C le long de la plaque chauffante.

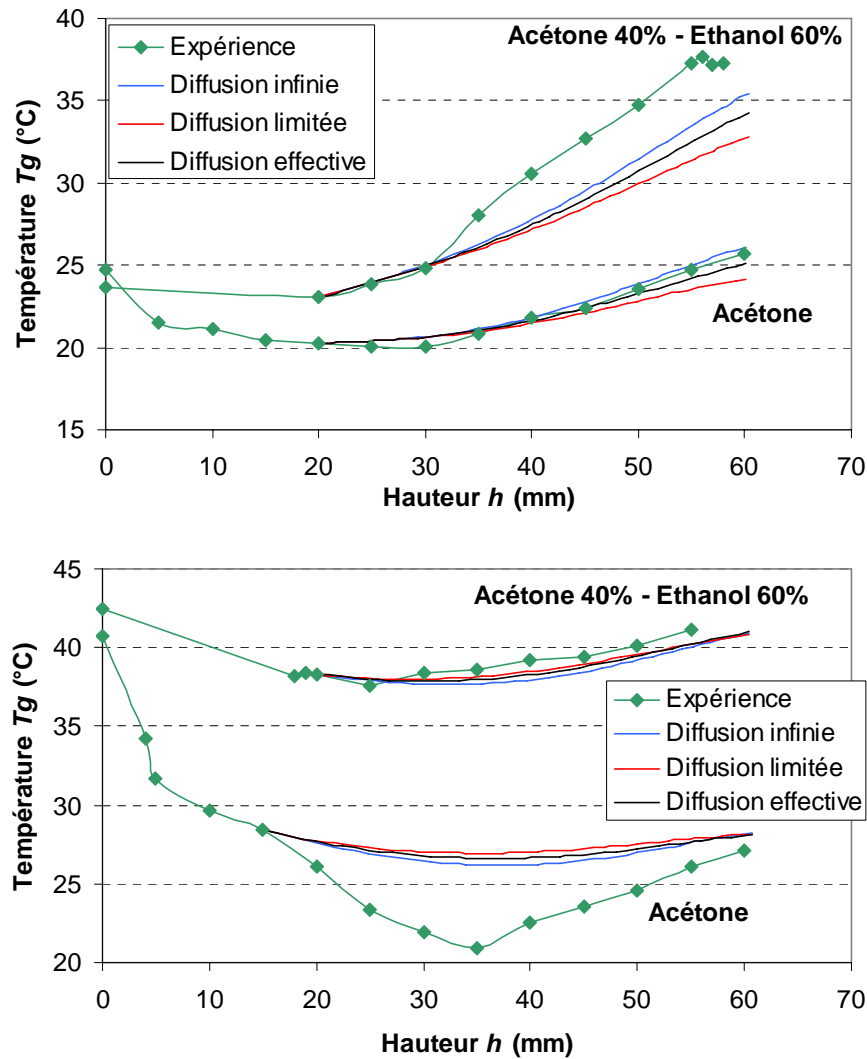


Figure 5.18 : Evolution de la température moyenne de la goutte en fonction de la hauteur pour les mélanges d'acétone et d'éthanol injectés dans le panache d'air chaud

Les résultats prédits par les modèles sont confrontés aux mesures expérimentales sur la Figure 5.18. Deux résultats peuvent être distingués ici. Lorsque les évolutions temporelles de température sont brutales, comme c'est le cas pour l'acétone pur injecté à 40,7°C et le mélange acétone-éthanol injecté à 23,7°C, des écarts apparaissent entre les mesures expérimentales et les prévisions numériques. Par contre, ces résultats s'accordent correctement si les variations de température de la goutte restent modérées.

Comme il s'agit seulement des toutes premières mesures de température de goutte bi-composants effectuées lors d'une étude de faisabilité, le dispositif expérimental demande à être amélioré. Tout d'abord, il serait judicieux d'utiliser le déviateur de gouttes afin d'obtenir le cas de la goutte isolée et donc des variations de température plus intenses [35]. De plus, il a été remarqué dernièrement que les gouttes s'évaporeraient totalement lors de leur contact avec le récupérateur de gouttes (7 sur la Figure 2.21) soumis à une température intense. La vapeur

ainsi produite serait entraînée par le panache d'air chaud, ce qui perturberait l'évaporation du jet de gouttes. Dans ces conditions, il est difficile de reproduire numériquement les conditions expérimentales, ce qui pourrait expliquer les écarts observés.

5.3 Conclusion

Tout d'abord, l'évolution de la taille des gouttes a été comparée. Les résultats prédits par tous les modèles sont en très bon accord avec les mesures expérimentales aussi bien pour les mélanges éthanol / 1-butanol que pour les mélanges acétone / éthanol. Si tous les modèles prévoient une évolution du diamètre très proche, par contre la composition et la température à la surface de la goutte, et donc les débits de vapeur pour chaque composant, divergent. Ces écarts augmentent avec la différence de température d'ébullition entre les deux composants.

Il a aussi été montré numériquement de l'importance de la valeur de la chaleur latente d'évaporation des composants sur la constante d'évaporation des gouttes. Plus cette valeur augmente, plus l'évaporation est lente.

L'évolution de la température moyenne des gouttes a aussi été comparée. Lorsqu'elles sont injectées dans le milieu à faible température, le refroidissement prédit par les modèles à diffusion limitée et effective est en bon accord avec les mesures. Le modèle à diffusion infinie sous-estime par contre la température moyenne des gouttes principalement à cause de l'hypothèse d'uniformité de la température dans la goutte. Dans le panache d'air chaud, la concordance entre les mesures et les calculs dépend des variations de température de la goutte dans le temps. Les résultats s'accordent bien tant que ces variations de température ne sont trop élevées. Il s'agit toutefois des premières mesures de température de gouttes bi-composants et le dispositif expérimental demande à être amélioré, tout comme la technique de mesure.

CHAPITRE 6 EVAPORATION DE CARBURANTS

Dans ce chapitre, l'évaporation de carburants réels (essence, kérosène, gasoil) est étudiée. Il a pour but de comparer les performances et les temps de calcul de chaque modèle. Tout d'abord, la composition des carburants et les conditions initiales et à l'infini seront présentées. Ensuite les résultats seront comparés et analysés. Enfin, des utilisations plus simples des modèles développés seront proposées pour réduire le temps de calcul tout en essayant de préserver la précision des modèles. Un des résultats les plus importants concerne la composition de la vapeur dans le spray de gouttes car il est susceptible de modifier le comportement en combustion tel que l'allumage, la propagation de flamme ou encore les émissions polluantes. Une attention particulière est donc portée sur les débits de vapeur et leur composition.

6.1 Conditions initiales et conditions au loin

6.1.1 Composition initiale des carburants

Kérosène

La composition du kérosène utilisé est inspirée de celle trouvée par *Guéret* [40] (Annexe C, Tableau C.5) et sa composition initiale est détaillée dans le Tableau 6.1. Elle est définie par les fractions molaires pour les modèles à composants discrets et les paramètres de distribution pour les modèles à thermodynamique continue, et se divise en 4 groupes de composants : 11 n-alcanes, 11 iso-alcanes, 7 alkylbenzènes et 7 cycloalcanes.

La distribution initiale de ces groupes, avec la masse molaire comme variable de distribution I , est présentée sur la Figure 6.1. Les fonctions de distribution du modèle à thermodynamique continue (MTC) sont tout à fait adaptées pour chaque groupe pour représenter la composition du modèle à composants discrets (MCD). C'est aussi le cas en utilisant la température normale d'ébullition comme variable de distribution I .

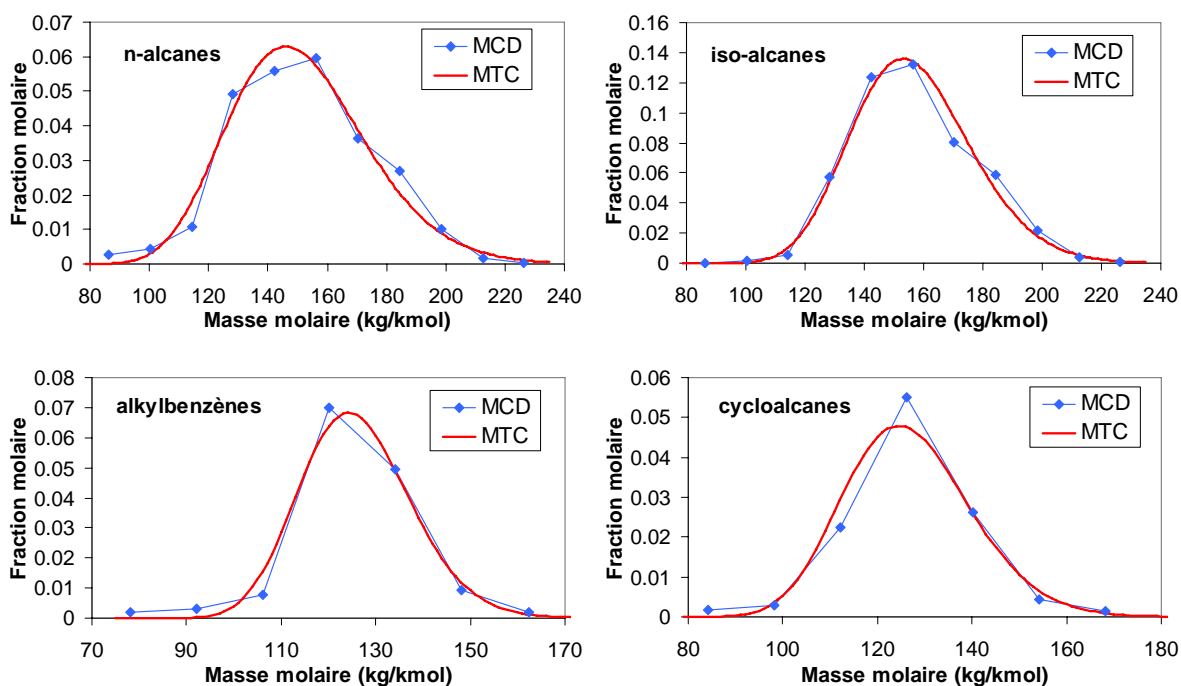


Figure 6.1 : Distribution initiale des différents groupes de composants du kérosène avec la masse molaire pour variable de distribution

Composants	Nombre d'atomes de carbone	Fraction molaire	Paramètres de distribution	
			Masse molaire (kg/kmol)	Température normale d'ébullition (K)
n-alcanes	6	0,26		
	7	0,44		
	8	1,09		
	9	4,92	Moyenne	Moyenne
	10	5,60	151,45	459,67
	11	5,95	Ecart type	Ecart type
	12	3,65	23,46	36,45
	13	2,70	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f
	14	1,00	0	300
	15	0,17		
	16	0,03		
Total	25,79			
iso-alcanes	6	0,03		
	7	0,13		
	8	0,50		
	9	5,70	Moyenne	Moyenne
	10	12,37	156,94	447,46
	11	13,18	Ecart type	Ecart type
	12	8,06	20,27	31,25
	13	5,86	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f
	14	2,18	0	300
	15	0,39		
	16	0,05		
Total	48,46			
alkylbenzènes	6	0,19		
	7	0,32	Moyenne	Moyenne
	8	0,78	126,08	444,72
	9	7,00	Ecart type	Ecart type
	10	4,95	11,72	17,56
	11	0,94	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f
	12	0,18	0	300
	Total	14,35		
cycloalcanes	6	0,18		
	7	0,30	Moyenne	Moyenne
	8	2,24	126,89	422,90
	9	5,49	Ecart type	Ecart type
	10	2,63	13,48	27,72
	11	0,43	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f
	12	0,13	0	300
	Total	11,40		

Tableau 6.1 : Composition initiale du kérosène utilisé

Essence

La composition utilisée pour l'essence [41] (Tableau 6.2) est détaillée en Annexe C (Tableau C.6 et Tableau C.7). Cette composition est très complète et compte plus de 300

composants. Comme il a été précisé dans le Chapitre 4, les isomères sont regroupés en composants de substitution et la composition est ainsi réduite à 37 composants de substitutions : 7 n-alcane, 10 iso-alcane, 7 oléfines, 6 alkylbenzènes, 2 naphtalènes et 5 cycloalcanes.

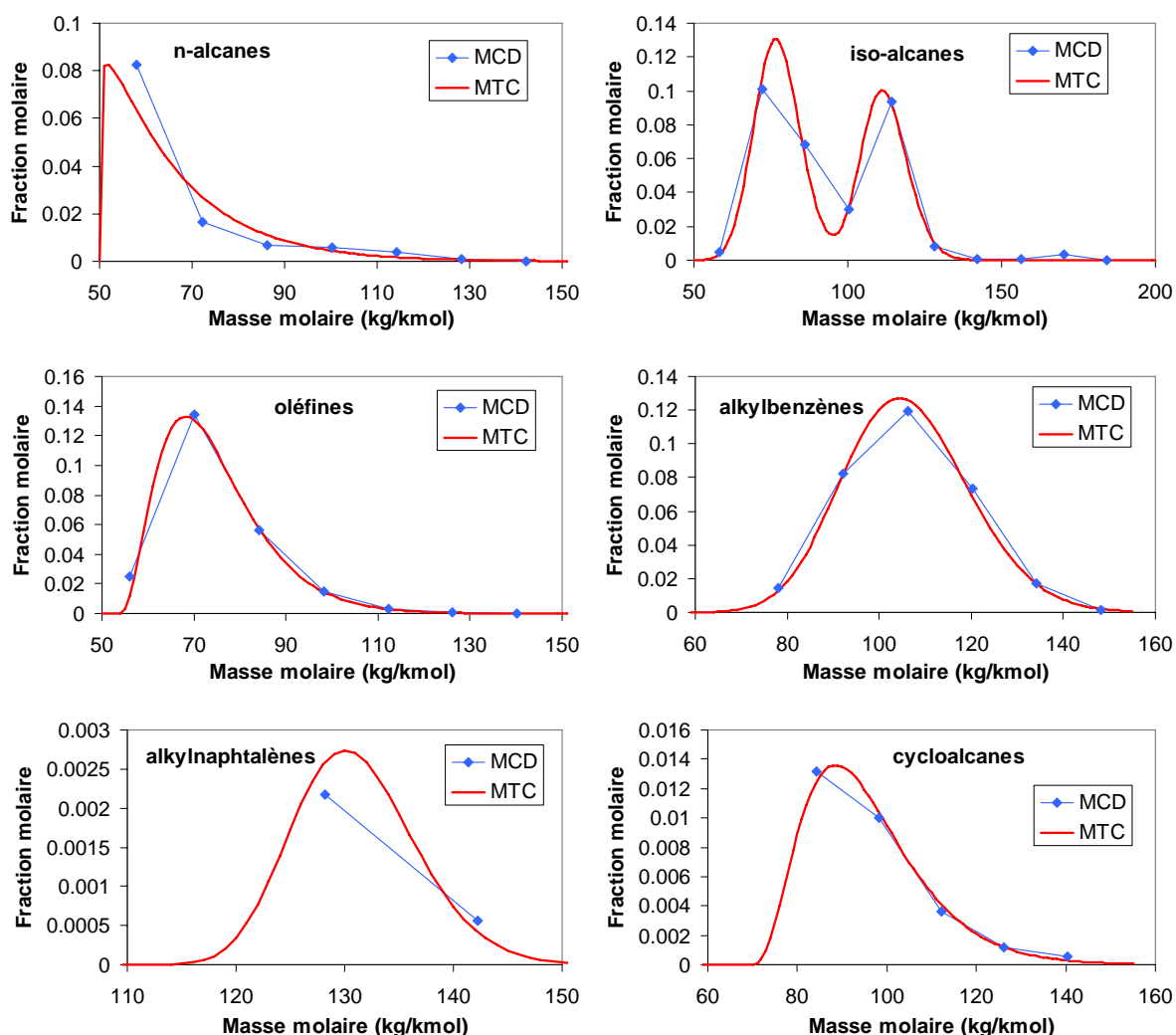


Figure 6.2 : Distribution initiale des différents groupes de composants de l'essence avec la masse molaire pour variable de distribution

Le tracé de la distribution initiale de ce carburant (Figure 6.2) montre l'intérêt de l'utilisation de la distribution Γ pour décrire la composition du mélange. Pour ce carburant, il arrive que les composants majoritaires d'un groupe soient les composants les plus volatiles (et donc de masse molaire la plus faible). La représentation de tels groupes par une fonction gaussienne n'est alors pas possible, contrairement à la distribution Γ . En effet, la valeur de son paramètre d'origine γ peut être choisie afin d'ajuster la forme de cette fonction pour définir correctement la composition du groupe de composants. Il est nécessaire de remarquer que le groupe de n-alcane est tout de même très difficilement représenté par cette fonction, et que le groupe d'iso-alcane présente deux maximums et nécessite donc deux fonctions de distribution.

Composants	Nombre d'atomes de carbone	Fraction molaire	Paramètres de distribution		
			Masse molaire (kg/kmol)	Température normale d'ébullition (K)	
n-alcanes	4	8,24			
	5	1,63	Moyenne	Moyenne	
	6	0,69	66,33	292,37	
	7	0,60	Ecart type	Ecart type	
	8	0,39	15,53	35,96	
	9	0,08	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f	
	10	0,01	50	260	
	Total	11,64			
iso-alcanes	4	0,48			
	5	10,13			
	6	6,85	Moyenne	Moyenne	
	7	3,00	77,27 / 112,04	306,34 / 382,21	
	8	9,35	Ecart type	Ecart type	
	9	0,81	7,51 / 7,43	20,41 / 13,76	
	10	0,06	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f	
	11	0,06	0 / 50	200 / 250	
	12	0,33			
	13	0,005			
	Total	30,68			
	oléfines	4	2,47		
		5	13,43	Moyenne	Moyenne
6		5,62	74,47	313,79	
7		1,48	Ecart type	Ecart type	
8		0,28	11,40	24,25	
9		0,05	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f	
10		0,01	54	250	
Total		23,34			
alkylbenzènes	6	1,47	Moyenne	Moyenne	
	7	8,20	106,17	410,69	
	8	11,94	Ecart type	Ecart type	
	9	7,36	13,69	25,57	
	10	1,73	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f	
	11	0,11	0	300	
	Total	30,82			
alkylnaphtalènes	10	0,22	Moyenne	Moyenne	
	11	0,06	131,08	496,26	
			Ecart type	Ecart type	
			5,69	10,10	
	Total	0,27	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f	
		100	450		
cycloalcanes	6	1,31	Moyenne	Moyenne	
	7	1,00	95,54	364,04	
	8	0,36	Ecart type	Ecart type	
	9	0,12	13,33	23,77	
	10	0,06	Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f	
	Total	2,85	70	330	

Tableau 6.2 : Composition initiale de l'essence utilisée

Gasoil

Il est très difficile de connaître précisément la composition du gasoil, cette dernière est souvent donnée par une courbe de distillation. La composition trouvée par *Habchi* et al. [42], présentée en Annexe C (Figure C.7 et Tableau C.8), est donc utilisée.

Cette composition avait été découpée en plusieurs pseudo-composants définis par leur masse molaire, leur température d'ébullition et leur température critique [42] (Tableau C.8 en Annexe C). La nature des ces pseudo-composants n'étant pas connue, seuls les modèles à thermodynamique continue seront utilisés avec une seule fonction de distribution. L'ensemble de la composition sera alors représenté par un seul groupe de composants. Il faut donc choisir un groupe dont les propriétés physiques sont proches de celles des pseudo-composants représentant ce gasoil (Tableau C.8 en Annexe C).

L'évolution de la température normale d'ébullition en fonction de la masse molaire pour les n-alcanes s'accorde avec celle de ces pseudo-composants (Figure 6.3). Les n-alcanes sont donc choisis pour représenter ce gasoil. Cependant, ils sous-estiment légèrement la température critique, ce qui influencera quelque peu le calcul de la chaleur latente d'évaporation (Annexe A).

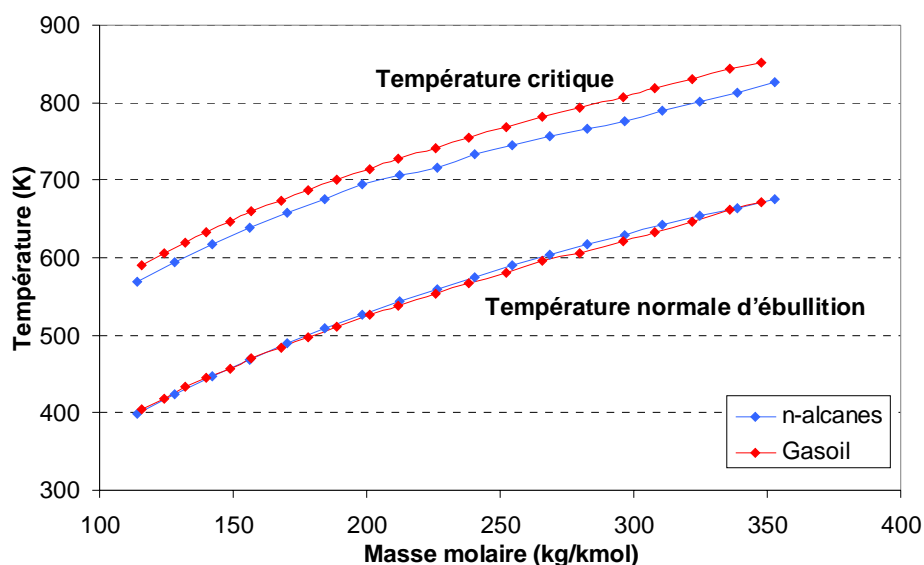


Figure 6.3 : Evolution de la température normale d'ébullition et de la température critique en fonction de la masse molaire pour les n-alcanes et du gasoil

La distribution initiale de ce gasoil est donnée dans le Tableau 6.3 et la Figure 6.4.

Paramètres de distribution	
Masse molaire (kg/kmol)	Température normale d'ébullition (K)
Moyenne	Moyenne
208,08	529,13
Ecart type	Ecart type
50,83	58,30
Origine γ de la fonction f	Origine γ de la fonction f
50	250

Tableau 6.3 : Distribution initiale du gasoil utilisé

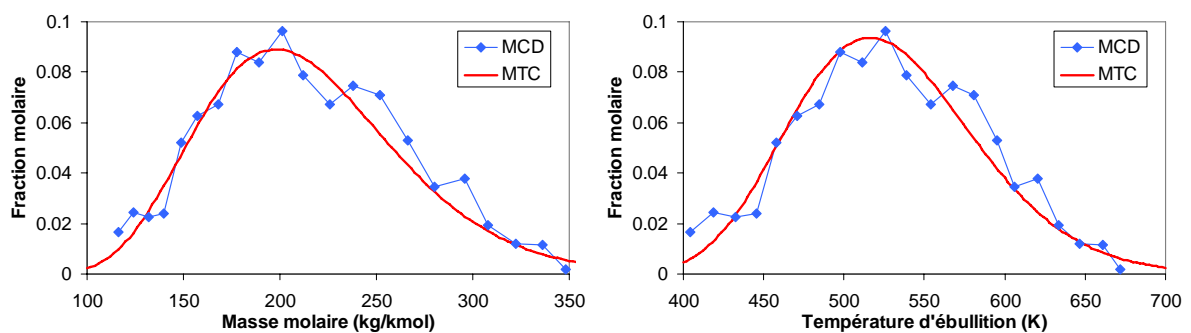


Figure 6.4 : Distribution initiale du gasoil avec la masse molaire (à gauche) et la température normale d'ébullition (à droite) comme variable de distribution

6.1.2 Conditions initiales de la goutte et conditions à l'infini

Les différentes compositions initiales viennent d'être présentées dans le paragraphe précédent. Le diamètre initial de la goutte est de $100\mu\text{m}$ et sa température initiale est de 300K . Afin que les gradients de température et de composition dans la goutte soient maximaux, il faut éviter les effets convectifs dans la goutte et le nombre de *Reynolds* doit alors être nul. Il n'y a donc aucun mouvement entre la goutte et l'air ambiant.

Tout d'abord, les modèles sont comparés pour une température à l'infini de 300K et une pression de 1atm . Par la suite, la température à l'infini sera de 1000K et la pression de 10atm . La goutte est isolée et le milieu à l'infini est dépourvu de vapeur.

6.2 Comparaison entre les différents modèles

Dans cette partie, les performances (précision et temps de calcul) des différents modèles sont comparées. Il faut vérifier d'une part, si, malgré leurs différentes simplifications, les modèles à thermodynamique continue donnent des résultats proches de ceux obtenus avec les modèles à composants discrets, et d'autre part si l'uniformité de la température et de la composition du liquide utilisée dans le modèle à diffusion infinie donne des résultats semblables à ceux prédits par le modèle à diffusion limitée qui tient compte des effets diffusifs de la température et de la composition.

Pour résumer quatre modèles sont confrontés :

- Modèle à composants discrets, à diffusion infinie
- Modèle à composants discrets, à diffusion limitée
- Modèle à thermodynamique continue, à diffusion infinie
- Modèle à thermodynamique continue, à diffusion limitée.

Les liquides étudiés sont, du plus volatile au moins volatile, l'essence, le kérosène et le gasoil définis précédemment.

6.2.1 Evaporation à faible température ambiante

Le milieu ambiant est à la température de 300K et à la pression de 1atm. L'évaporation des gouttes étant faible, l'énergie et les espèces se diffusent suffisamment rapidement dans la goutte. Les profils de température et de composition sont donc quasiment uniformes et les modèles à diffusion infinie et limitée prévoient les mêmes résultats. Dans cette partie, seules les prévisions du modèle à diffusion limitée sont donc présentées.

Comparaison avec les liquides mono-composants

Les carburants sont souvent représentés par des liquides mono-composants : l'iso-octane pour l'essence, le n-decane pour le kérosène et le n-dodecane pour le gasoil. L'évolution de la taille de la goutte pour ces différents liquides est comparée sur la Figure 6.12 qui montre bien que, dans ces conditions, le phénomène de distillation (c'est à dire les changements de pente dans la décroissance de la taille de la goutte) d'un carburant en évaporation ne peut être simulé par un liquide ne contenant qu'une seule espèce. Les écarts sont plus importants lorsque le carburant contient de nombreuses espèces peu volatiles qui sont très difficiles à évaporer dans un milieu à faible température. Evaporer la goutte d'essence nécessite donc plus de 5s, plus de 400s pour le kérosène et après 6400s, le diamètre de la goutte de gasoil est passé de 100 μ m à 81,4 μ m.

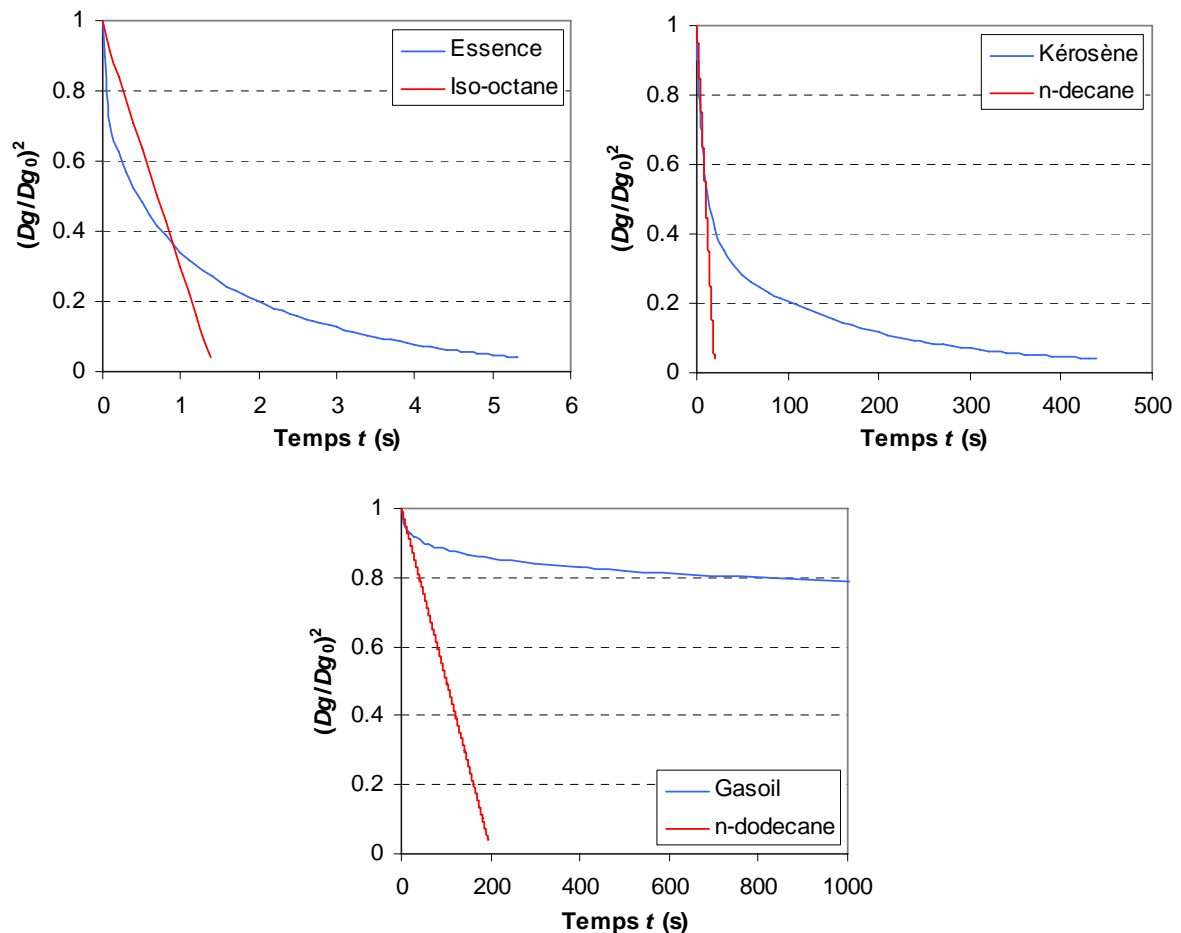


Figure 6.5 : Comparaison de l'évolution de la taille de gouttes de carburants réels avec leurs liquides mono-composants les représentant avec les modèles à composants discrets

Taille et température de surface de la goutte

L'évolution de la taille (Figure 6.6 à gauche) et de la température de surface des gouttes (Figure 6.6 à droite) sont maintenant comparées pour l'essence, le kérosène et le gasoil. Les tailles de goutte obtenues pour le kérosène ont déjà été présentées dans le Chapitre 4 (Figure 4.5) afin de montrer que l'utilisation de notre nouvelle corrélation pour la pression de vapeur saturante (équation (4.6)) prévoyait de bien meilleurs résultats que la relation de *Clausius-Clapeyron* avec la loi de *Trouton*. Pour l'essence, cette nouvelle corrélation permet de trouver des résultats encore plus proches de ceux prévus par le modèle à composants discrets (Figure 6.6 en haut à gauche). Cette meilleure concordance entre les deux modèles pour l'essence peut s'expliquer par une corrélation plus précise pour la pression de vapeur saturante. En effet, une corrélation est déterminée pour chaque carburant et l'essence balaie un nombre d'atomes de carbone plus faible (de 4 à 10 atomes de carbone) que le kérosène (de 6 à 16 atomes de carbone), ce qui permet de déterminer des corrélations plus précises pour l'essence. La différence de taille en fin de durée de vie de la goutte prévue entre les deux modèles pour le kérosène sera expliquée plus loin.

Remarque : pour mieux observer la décroissance de température du kérosène en début d'évaporation, l'échelle de temps a été raccourcie de 500s à 50s (Figure 6.6 au centre à droite).

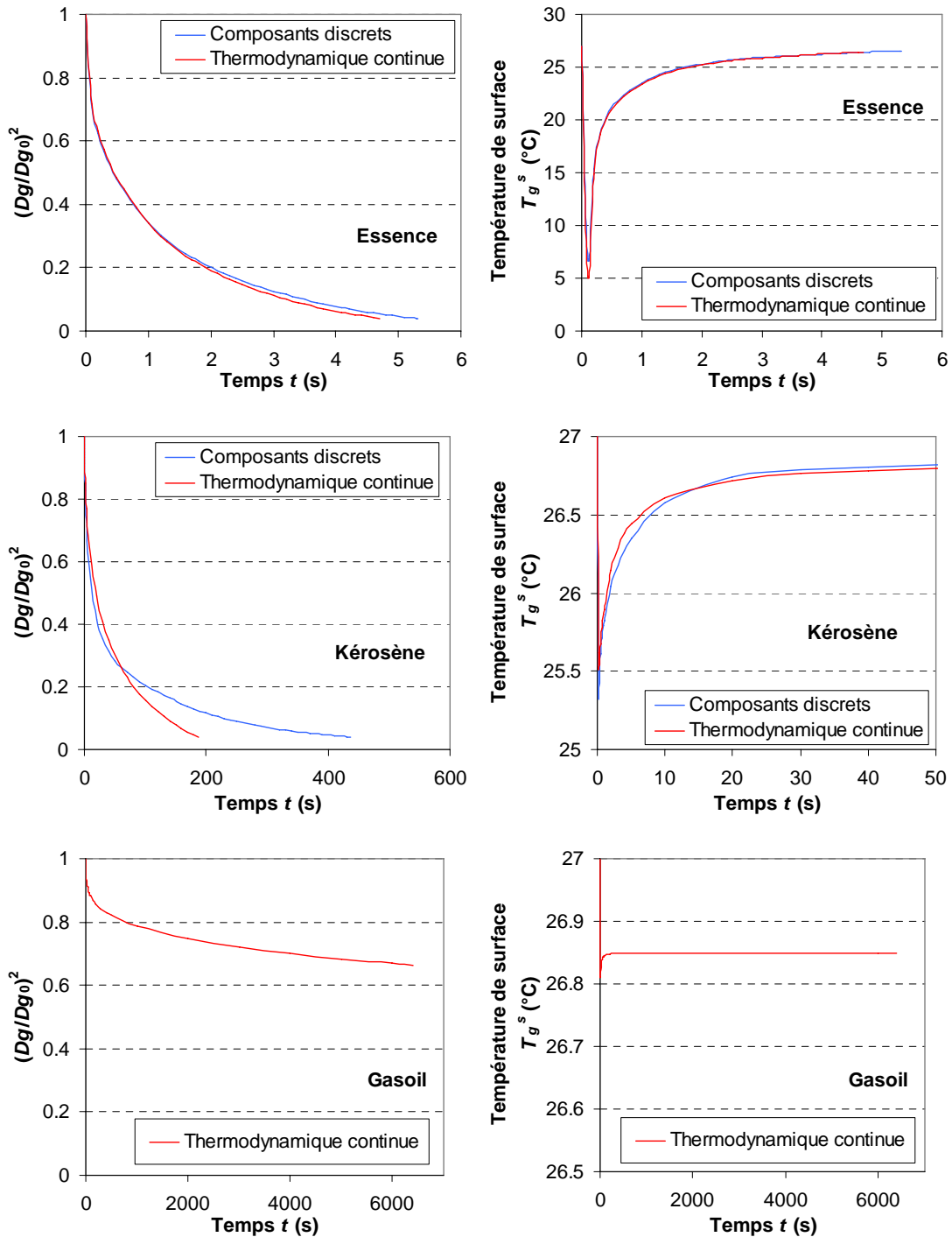


Figure 6.6 : Evolution de la taille de la goutte pour l'essence, le kérosène et le gasoil avec pour le modèle à composants discrets et le modèle à thermodynamique continue

L'étude bibliographique dans le Chapitre 1 a montré que le taux d'évaporation variait considérablement avec la température d'ébullition des composants (Figure 1.3). Cela se retrouve également ici car quelques secondes suffisent pour évaporer la goutte d'essence, alors que plusieurs minutes sont nécessaires pour le kérosène et après plus d'une heure, la goutte de gasoil s'est peu évaporée.

Les températures de surface des gouttes sont également proches entre les deux modèles, mis à part la différence de durée de vie de la goutte pour le kérosène. Les mesures expérimentales de température de gouttes bi-composants, en évaporation dans une ambiance à faible température, présentées dans le Chapitre 2 ont montré que les gouttes refroidissaient et atteignaient des températures inférieures à la température ambiante. C'est également le cas ici puisque la température à l'infini est de 27°C. Ces mesures montraient également que les températures atteintes étaient plus faibles pour les composants plus volatiles. Ici, la température de surface diminue fortement pour l'essence qui contient des espèces très volatiles. Elle remonte par la suite puisque les composants dans la goutte présentent des températures d'ébullition de plus en plus élevées et nécessitent des températures plus importantes pour s'évaporer. Les températures de surface sont plus élevées pour le gasoil, puisqu'il est le carburant le moins volatil.

Composition du liquide et de la vapeur

La composition de la phase liquide à la surface est analysée car elle va gouverner, avec la température de surface, l'évaporation des différents composants. Par contre dans la phase vapeur, il faut plutôt s'intéresser à la composition de la vapeur qui diffuse vers l'extérieur et qui sera un terme source dans les équations de la phase gazeuse dans les modèles de combustion d'un spray.

Afin de comparer les deux modélisations du liquide (composants discrets et thermodynamique continue), les paramètres de distribution pour chaque groupe de composants sont déterminés à partir des résultats donnés par le modèle à composants discrets. Ils sont calculés de la manière suivante pour la phase liquide à la surface de la goutte :

$$\theta_{j,l}^s = \sum_{i \in j} \frac{x_{i,l}^s}{x_{j,l}^s} M_i; \quad \sigma_{j,l}^s = \sqrt{\sum_{i \in j} \frac{x_{i,l}^s}{x_{j,l}^s} (M_i - \theta_{j,l}^s)^2} \quad (6.1)$$

Pour la phase vapeur, ils s'écrivent :

$$\theta_{j,v}^\infty = \sum_{i \in j} \frac{\dot{n}_i}{\dot{n}_j} M_i; \quad \sigma_{j,v}^\infty = \sqrt{\sum_{i \in j} \frac{\dot{n}_i}{\dot{n}_j} (M_i - \theta_{j,v}^\infty)^2} \quad (6.2)$$

Dans l'équation (6.2), les débits molaires de vapeur remplacent les fractions molaires à la surface car, comme il a été précisé auparavant, il faut calculer les paramètres de distribution de la vapeur qui diffuse vers l'extérieur et non ceux à la surface de la goutte.

Pour chaque groupe j de composants, les fractions molaires globales de liquide à la surface de la goutte $x_{j,l}^s$ et les débits molaires globaux de vapeur \dot{n}_j sont calculés respectivement par :

$$x_{j,l}^s = \sum_{i \in j} x_{i,l}^s \quad \text{et} \quad \dot{n}_j = \sum_{i \in j} \dot{n}_i \quad (6.3)$$

L'essence présente encore des résultats bien plus proches que le kérosène pour la composition du liquide et de la vapeur. Les fractions molaires globales liquides à la surface de la goutte s'accordent bien pour les alkylbenzènes de l'essence (Figure 6.7 à gauche) ainsi que pour tous les autres groupes de ce carburant. Les débits globaux de vapeur sont donc également très proches (Figure 6.8 à gauche) pour ce carburant. Par contre, des divergences font leur apparition pour la composition liquide des groupes de n-alcane (Figure 6.7 à droite) et d'iso-alcane du kérosène. Cela n'empêche pas d'obtenir des débits globaux de vapeur proches entre les modèles car ces groupes s'évaporent principalement en début de durée de vie de la goutte (Figure 6.8 à droite).

Remarque : pour mieux observer l'évolution du débit global de vapeur du groupe de n-alcane du kérosène en début d'évaporation, l'échelle de temps a été raccourcie de 500s à 50s (Figure 6.8 à droite).

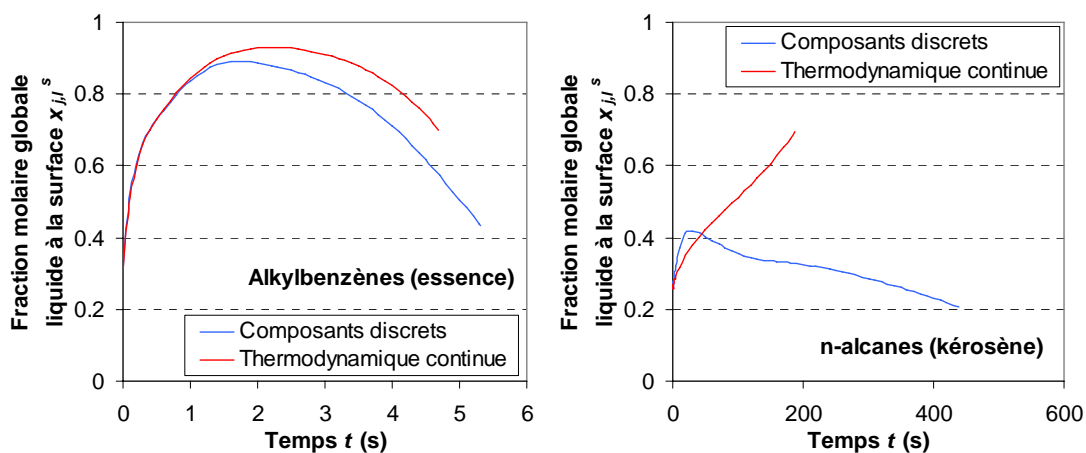


Figure 6.7 : Evolution de la fraction molaire globale de liquide à la surface de la goutte pour le groupe d'alkylbenzènes de l'essence (à gauche) et le groupe de n-alcane du kérosène (à droite)

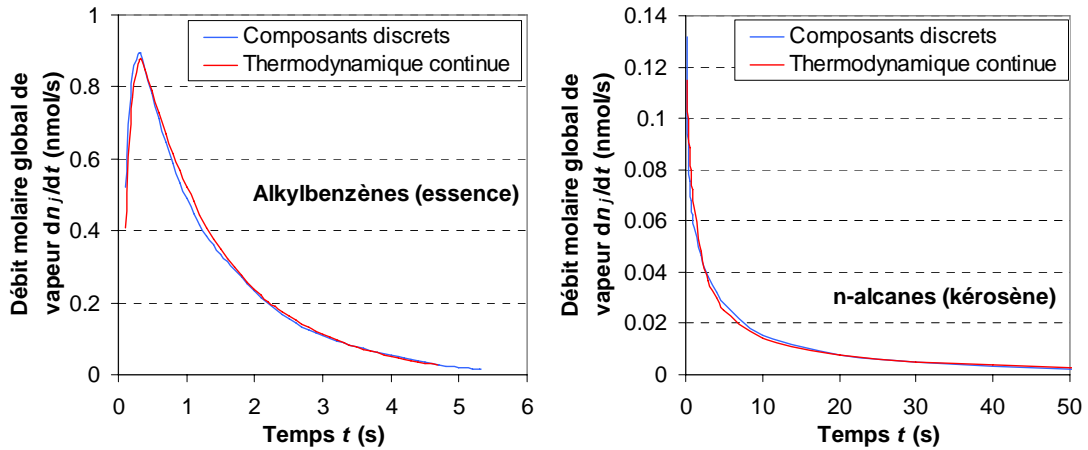


Figure 6.8 : Evolution des débits molaires globaux de vapeur pour le groupe d'alkylbenzènes de l'essence (à gauche) et le groupe de n-alcanes du kérosène (à droite)

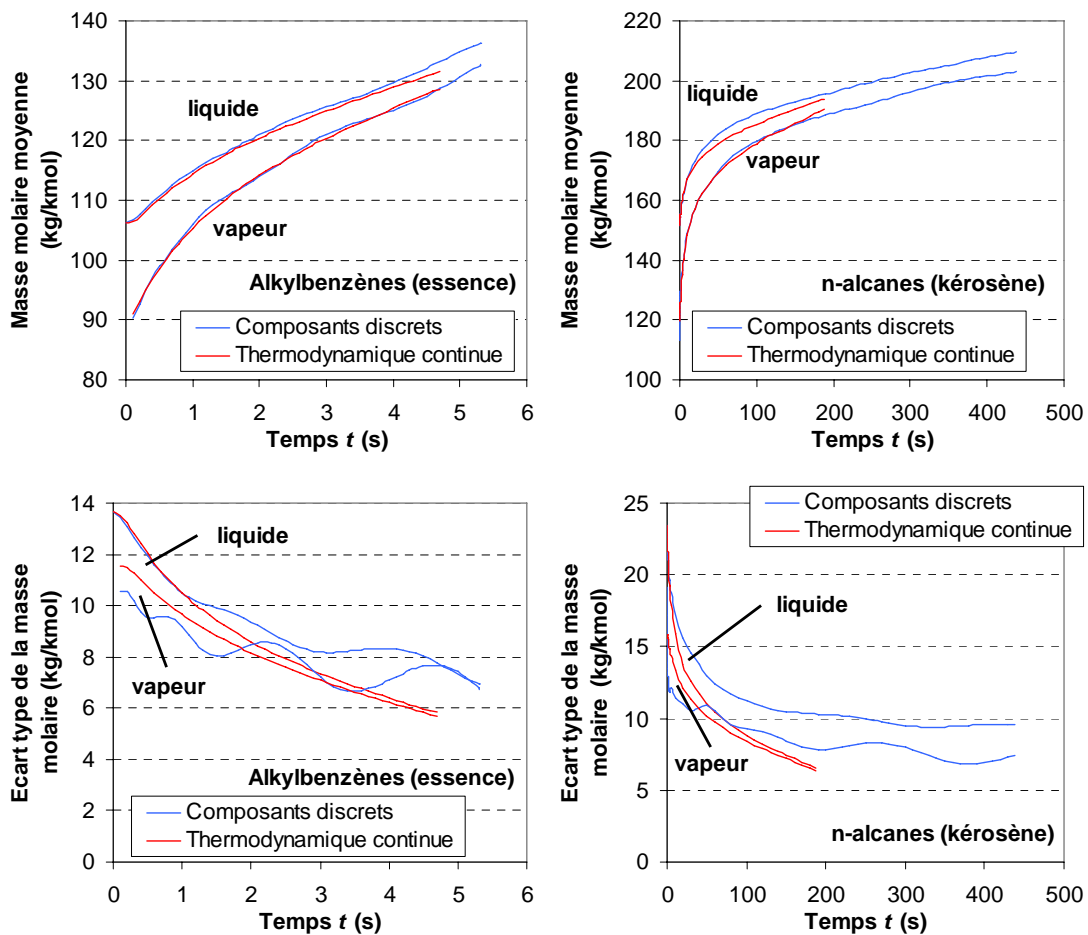


Figure 6.9 : Evolution de la masse molaire moyenne (en haut) et de l'écart type de la masse molaire (en bas) des deux phases avec le groupe d'alkylbenzènes de l'essence (à gauche) et le groupe de n-alcanes (à droite) du kérosène

La distribution de la phase liquide à la surface de la goutte et de la vapeur diffusée vers l'extérieur pour les deux groupes étudiés sont présentés sur la Figure 6.9. La masse molaire moyenne de la vapeur est évidemment plus faible que celle de la phase liquide, puisque les

composants les plus volatiles (et donc de masse molaire plus faible) s'évaporent majoritairement. Pour les groupes de l'essence, les masses molaires moyennes s'accordent entre les deux modèles aussi bien pour la phase liquide que pour la phase vapeur. Pour les groupes du kérosène, les résultats sont également proches pour les deux modèles, mais il ne faut pas oublier que la durée de vie de la goutte diffère entre ces modèles.

En ce qui concerne les écarts types, le modèle à thermodynamique continue sous-estime souvent le modèle à composants discrets, surtout avec le kérosène. Il est intéressant de noter que les écart-types présentent des oscillations avec le modèle à composants discrets, ce qui montre l'évaporation successive des différents composants. Chaque oscillation indique qu'un composant du groupe a été entièrement vaporisé et qu'un autre composant s'évapore par la suite.

Il faut également remarquer que les résultats obtenus pour le groupe d'alkyl-naphtalènes de l'essence s'accordent également pour les deux modèles malgré que ce groupe soit composé que de deux composants (Figure 6.2).

Pour mieux comparer la composition de la vapeur prévue par les deux modèles, les fonctions de distribution sont maintenant discrétisées pour calculer le débit de vapeur de chaque espèce. Pour l'essence, les comportements sont similaires pour chaque composant. Pour le kérosène, les débits sont proches pour les composants majoritaires de chaque groupe (par exemple le n-undecane sur la Figure 6.10) qui s'évapore au début de la durée de vie de la goutte. Pour les composants minoritaires, les résultats pour les composants très volatiles qui s'évaporent en début de durée de vie de la goutte sont convenables, mais ceux pour les composants peu volatiles divergent totalement entre les modèles (par exemple le n-tetradecane sur la Figure 6.10). Cette différence est due aux fonctions de distribution qui éprouvent des difficultés à représenter les composants minoritaires qu'ils restent dans la goutte à la fin de l'évaporation.

Cette différence de débit de vapeur pour les composants s'évaporant à la fin de la durée de vie de la goutte explique les écarts d'évolution de taille de goutte entre les deux modèles pour ce carburant (Figure 6.6 au milieu à gauche). En début d'évaporation, ce sont les composants très volatiles et les composants majoritaires qui s'évaporent. Ces composants présentent des débits de vapeur semblables entre les deux modèles, d'où une évolution de diamètre relativement proche durant cette période. Ensuite, lorsqu'un grand volume de la goutte s'est évaporé ($(Dg/Dg_0)^2=0,2$), il ne reste que les composants minoritaires peu volatiles dont les débits de vapeur diffèrent entre les deux modèles, et l'évolution du diamètre diverge.

La variable de distribution utilisée pour le modèle à thermodynamique continue est la masse molaire. Dans ces conditions, il est déconseillé de choisir la température d'ébullition comme variable de distribution car, comme il a été montré dans le Chapitre 4, les résultats divergent totalement entre le modèle à composants discrets et le modèle à thermodynamique continue.

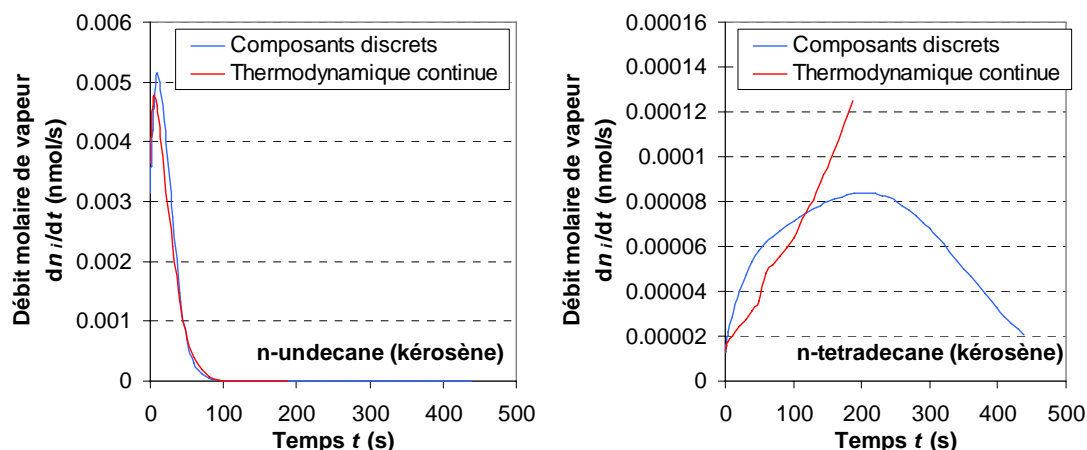


Figure 6.10 : Evolution du débit molaire de vapeur pour le n-undecane (à gauche) et le n-tetradecane (à droite) du kérosène

Temps de calcul

Les temps de calcul des deux modèles pour les trois carburants sont donnés dans le Tableau 6.4. Apparaissent également ceux obtenus avec les liquides mono-composants souvent utilisés pour simuler numériquement ces carburants, c'est à dire :

- l'iso-octane pour l'essence
- le n-decane pour le kérosène
- le n-dodecane pour le gasoil

Le pas de temps pour tous les modèles est de 100 μ s.

Carburant	Modèles à Composants Discrets		Modèles à Thermodynamique Continue	
	Diffusion infinie	Diffusion limitée	Diffusion infinie	Diffusion limitée
Iso-octane	< 1s	< 1s		
Essence	322s	540s	7s	231s
n-decane	1s	3s		
Kérosène	35400s	115320s	136s	2010s
n-dodecane	18s	40s		
Gasoil			X	X

Tableau 6.4 : Temps de calcul obtenus avec les différents modèles pour les différents carburants

Le symbole X signifie que la fin de durée de vie de la goutte n'a pas été atteinte car la durée de vie est extrêmement longue (plusieurs heures, voir même plusieurs jours).

Il a été montré auparavant que les liquides mono-composants ne pouvaient reproduire le comportement des carburants réels (Figure 6.5), puisque la durée de vie de ces derniers est bien plus longue à cause du phénomène de distillation.

Malgré un pas de temps élevé (100 μ s), le temps de calcul est extrêmement élevé avec le modèle à composants discrets, surtout en diffusion limitée. Comme les modèles de diffusion infinie et limitée donnent les mêmes résultats, il est plus judicieux d'utiliser le modèle à diffusion infinie. Enfin, le modèle à thermodynamique continue se révèle très intéressant par son temps de calcul bien plus court que celui du modèle à composants discrets. De plus, le modèle à thermodynamique continue est plus stable et le calcul converge bien plus facilement.

6.2.2 Evaporation à forte température ambiante

Le milieu ambiant est à une température de 1000K et à une pression de 10atm. Des différences apparaissent maintenant entre les modèles à diffusion infinie et limitée. Les résultats obtenus pour tous les modèles sont donc présentés.

Comparaison avec les liquides mono-composants

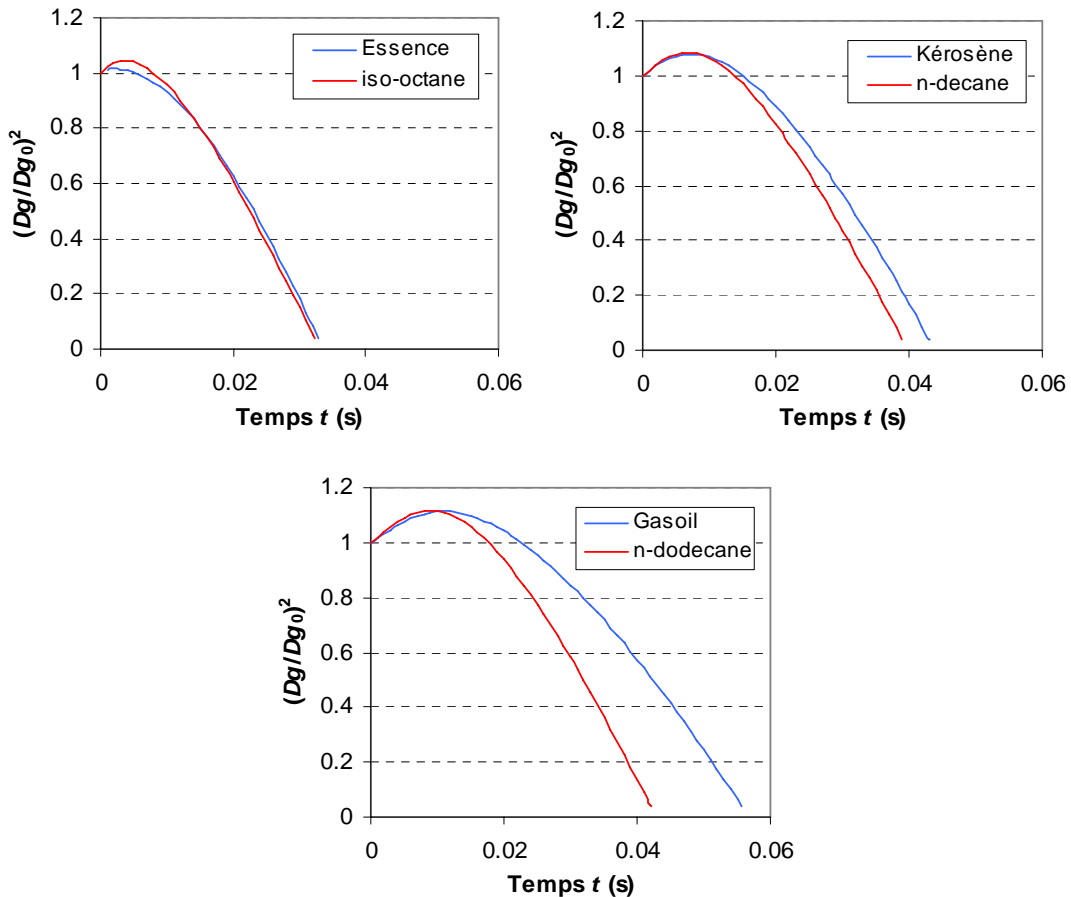


Figure 6.11 : Comparaison de l'évolution de la taille de gouttes de carburants réels avec leurs liquides mono-composants les représentant avec les modèles à composants discrets en diffusion limitée

Les carburants réels et les liquides mono-composants les représentant sont à nouveau comparés (Figure 6.11). Cette fois-ci, les liquides mono-composants sont plus aptes à

reproduire l'évolution de la taille des gouttes de carburant. Cependant, quelques écarts peuvent faire leur apparition surtout pour le gasoil.

Taille et température de surface de la goutte

Les premiers résultats concernent l'évolution de la taille de la goutte (Figure 6.12) et montrent que les modèles à thermodynamique continue s'accordent très bien avec les modèles à composants discrets.

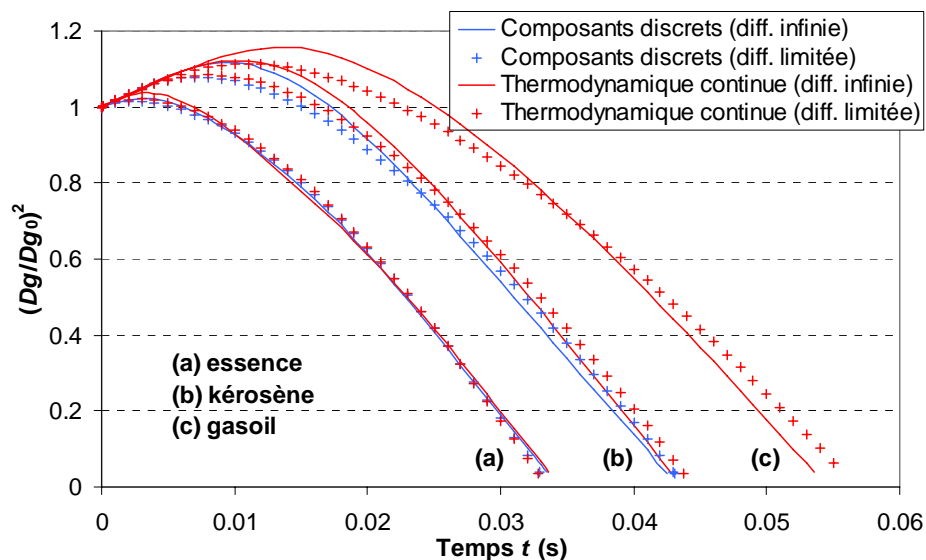


Figure 6.12 : Evolution de la taille de la goutte en fonction du temps pour les trois carburants

Par contre, les modèles à diffusion infinie tendent à surestimer la croissance de la taille de la goutte pendant la période de chauffage au début de la durée de vie de la goutte. Cette croissance durant cette période est due à la faible évaporation du liquide qui est insuffisante pour compenser la dilatation de la goutte. Elle est d'autant plus importante que le carburant est peu volatil. En effet, les températures à la surface de la goutte (Figure 6.13) doivent être plus importantes (ce qui entraîne plus de dilatation), et plus de temps est alors nécessaire pour obtenir une évaporation intense de la goutte (Figure 6.14). L'association de ces deux phénomènes contribuent évidemment à la croissance de la taille de la goutte.

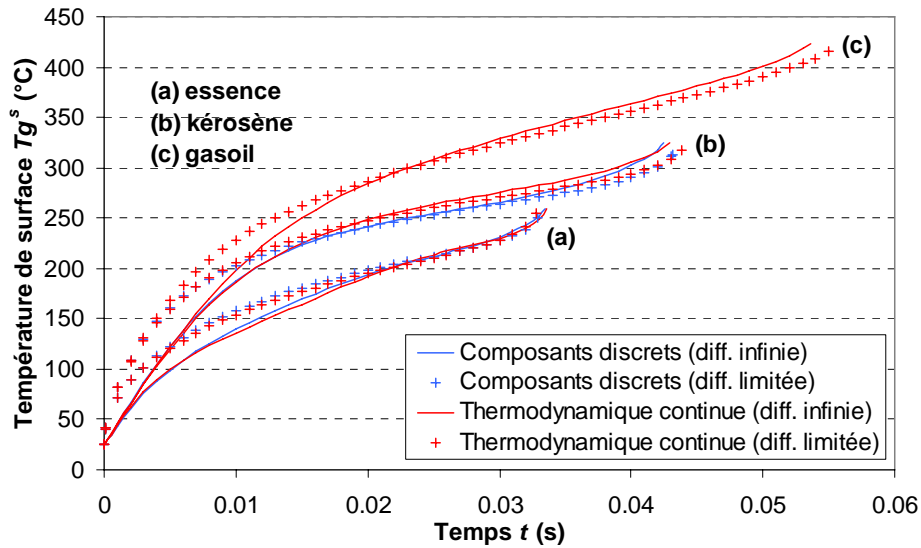


Figure 6.13 : Evolution de la température de surface de la goutte en fonction du temps pour les trois carburants

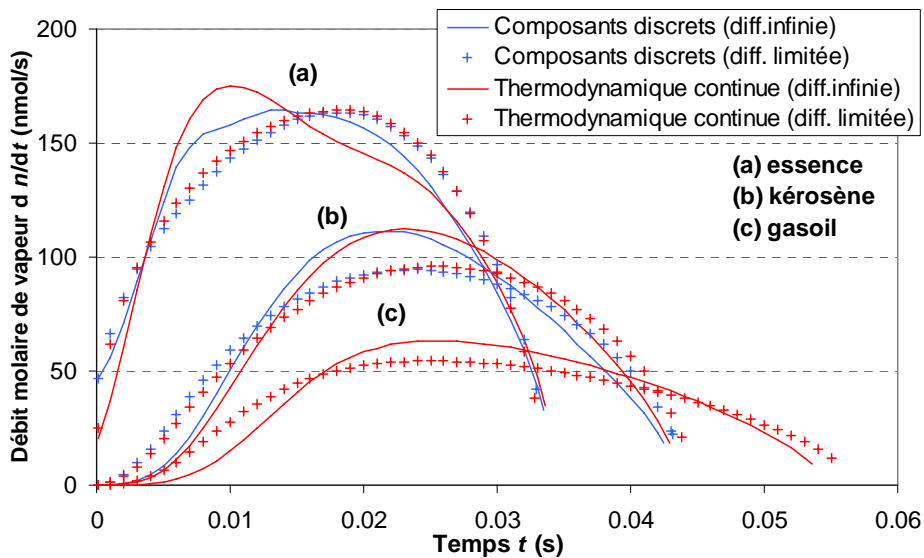


Figure 6.14 : Evolution du débit molaire total de vapeur en fonction du temps pour les trois carburants

La différence de taille de goutte durant cette période entre les deux modèles de diffusion s'explique principalement par le retard du débit de vapeur (Figure 6.14) prévu par le modèle à diffusion infinie puisqu'il sous-estime la température de surface (Figure 6.13). L'uniformité de la température du liquide supposée dans ce modèle retarde effectivement le chauffage de la surface de la goutte. Toute l'énergie reçue pour son chauffage est répartie dans toute la goutte, contrairement au modèle à diffusion limitée où elle sert d'abord à chauffer le liquide principalement proche de la surface, avant de chauffer le reste de la goutte par conduction.

Concernant la température de surface (Figure 6.13) et le débit total de vapeur (Figure 6.14), les modèles à thermodynamique continue sont toujours en bon accord avec les modèles à composants discrets.

Composition du liquide et de la vapeur

La précision obtenue sur la composition du liquide à la surface de la goutte dépend de l'instant où les composants s'évaporent principalement. Deux exemples de groupes de composants sont donc comparés : les oléfines et les alkylbenzènes de l'essence. Par rapport aux autres espèces, les oléfines ont une volatilité moyenne, alors que celles des alkylbenzènes est faible (Figure 4.1). La distribution dans l'essence de ces deux groupes est tracée en fonction de la température normale d'ébullition sur la Figure 6.15. Elle montre bien que les oléfines s'évaporeront bien avant les alkylbenzènes, d'autant plus que les oléfines les plus volatiles sont les composants majoritaires dans ce groupe.

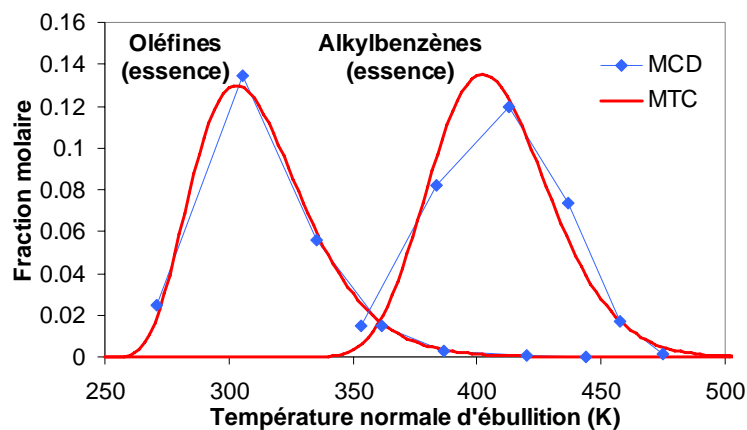


Figure 6.15 : Distribution en fonction de la température normale d'ébullition des groupes d'oléfines et le groupe d'alkylbenzènes de l'essence

Les résultats obtenus pour le débit molaire global de vapeur sont tout d'abord comparés pour ces deux groupes (Figure 6.16). Les modèles à composants discrets et à thermodynamique continue donnent à nouveau des résultats proches. Par contre, ce n'est pas le cas entre modèles à diffusion infinie et limitée, mais ces différences restent toutefois acceptables pour le groupe d'alkylbenzènes. La comparaison de ces deux modèles pour tous les groupes de composants de chaque carburant montre que, plus un groupe composant s'évapore tard, plus les débits globaux de vapeur prévus par ces deux modèles sont proches.

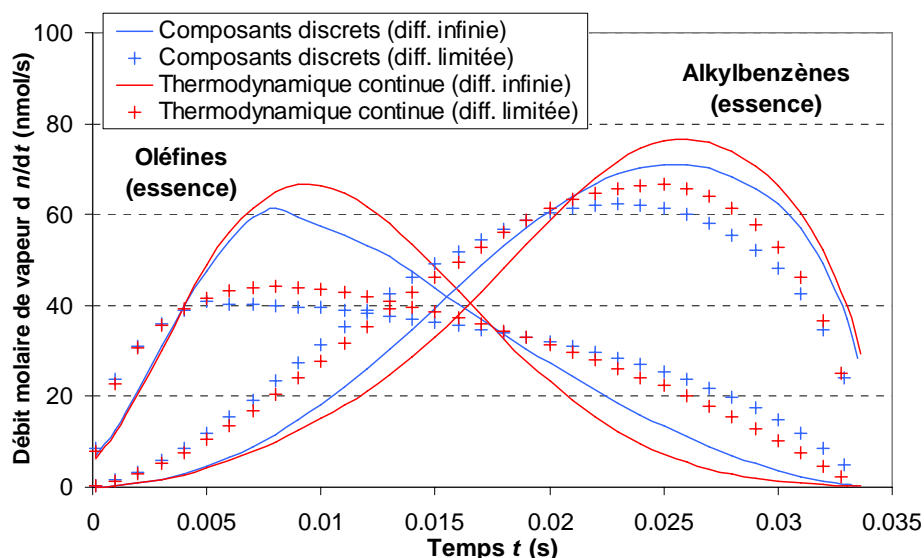


Figure 6.16 : Evolution du débit molaire global de vapeur en fonction du temps pour le groupe d'oléfines et le groupe d'alkylbenzènes de l'essence

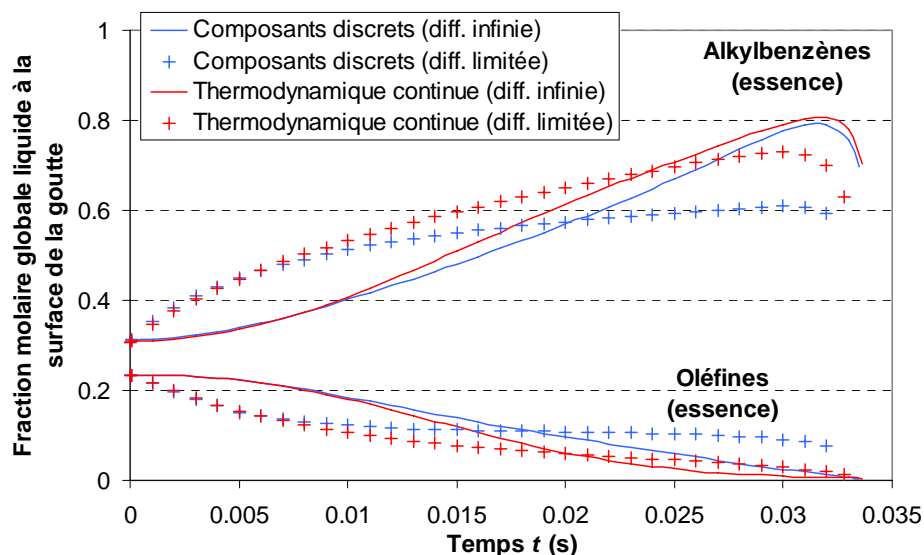


Figure 6.17 : Evolution de la fraction molaire globale liquide en fonction du temps pour le groupe d'oléfines et le groupe d'alkylbenzènes de l'essence

Cette différence plus importante pour les groupes s'évaporant principalement en début de durée de vie de la goutte s'explique par la composition du liquide à la surface. Les fractions molaires globales du liquide à la surface diffèrent entre les deux modèles de diffusion (Figure 6.17). Les espèces les plus volatiles s'évaporent bien plus vite, mais leur proportion à la surface diminue rapidement car la quantité vaporisée est difficilement renouvelée à la surface à cause des effets diffusifs qui ralentissent le transport des espèces liquides de l'intérieur de la goutte vers la surface. Par contre, ces espèces sont instantanément renouvelées par l'uniformité de la composition dans le modèle à diffusion infinie, d'où des variations moins brutales des fractions molaires globales liquides à la surface.

Pour les groupes s'évaporant principalement au début de la durée de vie de la goutte, cette fraction diminue et devient faible (oléfines sur la Figure 6.17), ce qui implique des pourcentages d'erreur importants sur la valeur de cette fraction. Elle peut donc varier du simple au double entre les deux modèles pour ces groupes de composants. Par contre, cette fraction molaire augmente pour les groupes s'évaporant principalement tardivement et le pourcentage d'erreur sur sa valeur est bien plus faible, surtout en fin de durée de vie de la goutte (alkylbenènes sur la Figure 6.17) quand l'évaporation de ces groupes est maximale. Ces écarts plus faibles de fractions molaires globales liquides à la surface expliquent donc le meilleur accord entre les deux modèles de diffusion pour les groupes vaporisant principalement tardivement au cours la durée de vie de la goutte.

La distribution de la phase liquide à la surface de la goutte et de la vapeur diffusée vers l'extérieur pour les deux groupes étudiés sont présentés sur la Figure 6.18. La masse molaire moyenne de la vapeur est, comme lors de l'évaporation à faible température ambiante, plus faible que celle de la phase liquide, puisque les composants à la surface les plus volatiles (et donc de masse molaire plus faible) s'évaporent principalement.

Pour le groupe d'oléfines, la masse molaire moyenne des deux phases est relativement proche dès le début de l'évaporation car ce sont les composants majoritaires qui s'évaporent durant cette période. Par la suite, une fois ces espèces majoritaires vaporisées, seuls restent les composants minoritaires qui sont difficilement décrits par une fonction de distribution, d'où les écarts importants entre tous les modèles.

Pour le groupe d'alkylbenènes, l'écart de masse molaire moyenne entre les deux phases est cette fois-ci plus conséquent au début d'évaporation, puisque les composants minoritaires très volatiles s'évaporent principalement durant cette période. La valeur de la masse molaire moyenne de la phase vapeur se rapproche ensuite progressivement de celle de la phase liquide, les composants majoritaires s'évaporant principalement lors de la deuxième moitié de la durée de vie de la goutte. Les modèles à thermodynamique continue suivent très bien l'évolution des modèles à composants discrets. De faibles écarts apparaissent toutefois entre les modèles à diffusion infinie et limitée.

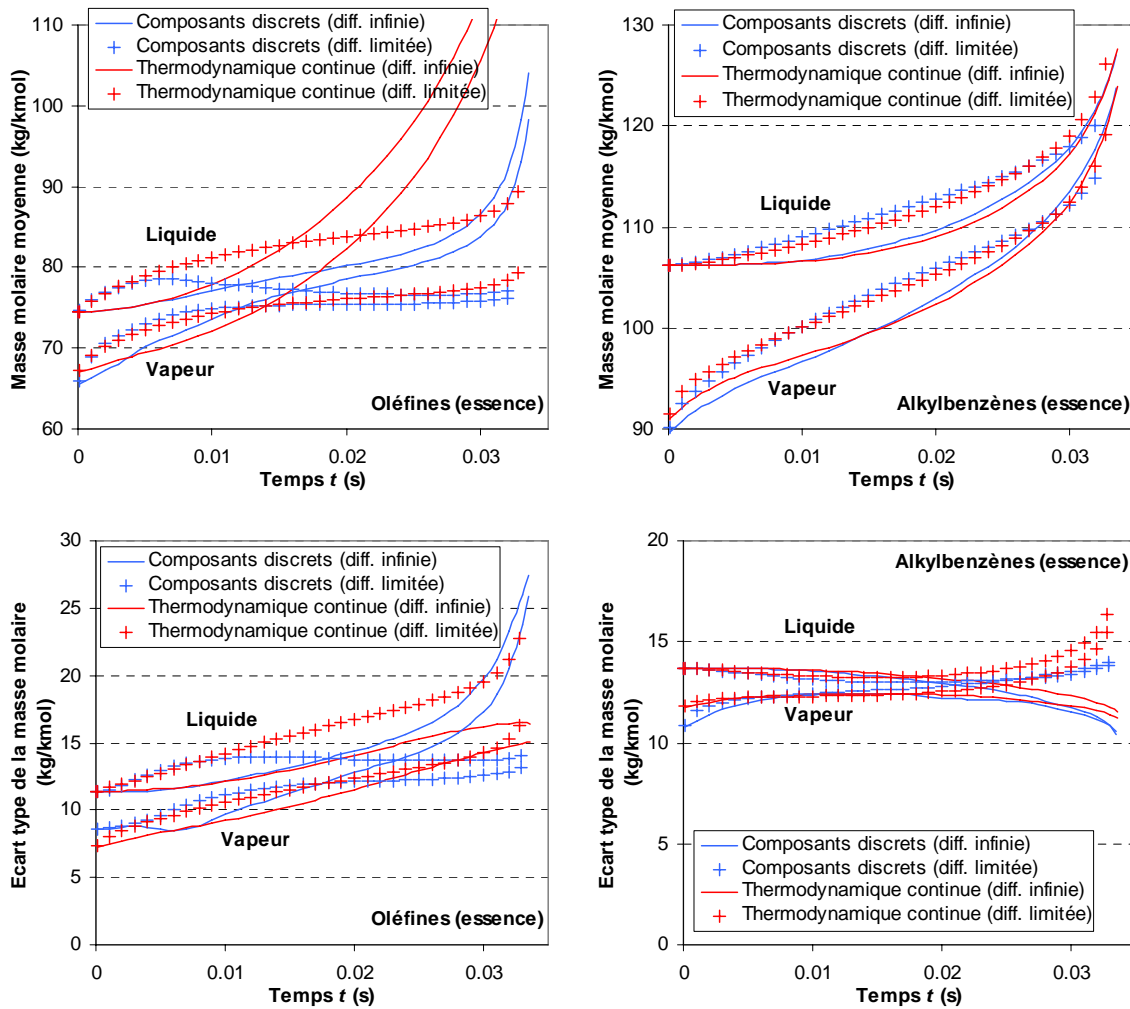


Figure 6.18 : Evolution de la masse molaire moyenne (en haut) et de l'écart type de la masse molaire (en bas) des deux phases avec le groupe d'oléfines (à gauche) et le groupe d'alkylbenzènes (à droite) de l'essence

En ce qui concerne les écarts types, les modèles prédisent tous des valeurs assez proches. Comme pour les masses molaires moyennes, des divergences apparaissent seulement quand il ne reste quasiment plus dans la goutte que les espèces minoritaires qui sont difficilement représentables par des fonctions de distribution.

Il est également intéressant de noter que les résultats obtenus pour le groupe d'alkylnaphtalènes s'accordent également, malgré que ce groupe soit composé que de deux composants (Figure 6.2).

Les fonctions de distribution sont maintenant discrétisées afin de comparer le comportement du débit de vapeur pour chaque composant. L'observation déjà effectuée pour les débits globaux de vapeur pour les groupes de composants est la même ici. Plus les composants s'évaporent principalement tard dans la durée de vie de la goutte, plus les résultats entre les modèles à diffusion infinie et limitée sont proches (Figure 6.19).

Pour le kérosène, les composants majoritaires dans chaque groupe présentent une volatilité moyenne mais vaporisent tout de même assez tard. Donc, des écarts entre les deux modèles apparaissent surtout pour les composants minoritaires très volatiles. Par contre pour l'essence, les composants majoritaires de certains groupes sont les plus volatiles et des écarts apparaissent donc avec ces composants pour le débit de vapeur. Quant aux modèles à thermodynamique continue, ils s'accordent toujours avec les modèles à composants discrets.

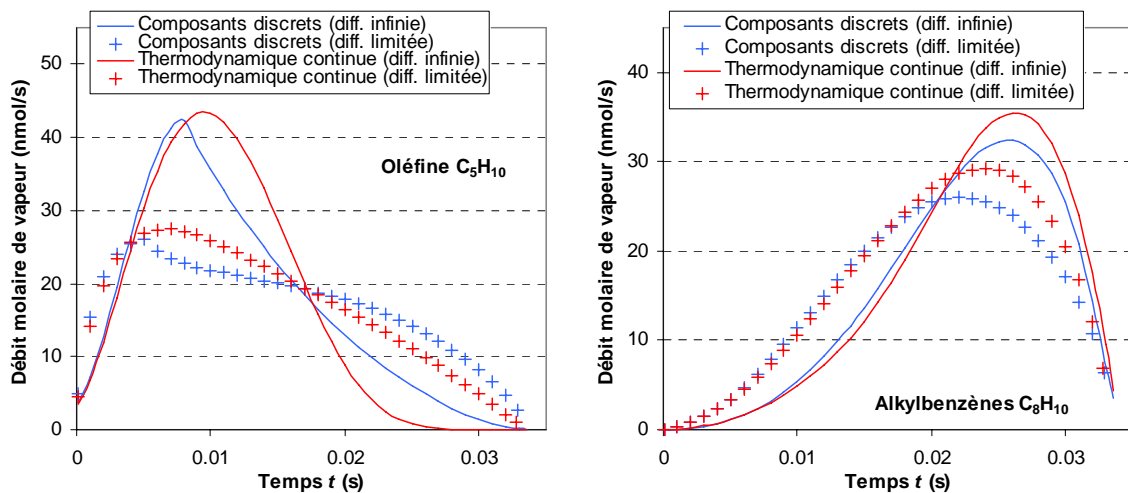


Figure 6.19 : Evolution du débit molaire de vapeur en fonction du temps pour le composant oléfine C₅H₁₀ (à gauche) et le composant alkylbenzène C₈H₁₀ (à droite) pour l'essence

D'autres calculs montrent que les écarts entre les deux modèles de diffusion diminuent avec l'augmentation de la pression au loin, car les valeurs de la pression de vapeur saturante sont plus proches entre les différentes espèces. Dans ce cas, l'évaporation séquentielle des différents composants est moins marquée et les intensités des gradients de composition sont plus faibles. Ces écarts entre ces modèles diminuent également lorsque la température à l'infini est plus faible, car les gouttes s'évaporent plus lentement. Les espèces ont alors plus de temps pour diffuser dans la goutte, ce qui réduit les gradients de composition dans la goutte.

Dans cette partie, la variable de distribution utilisée dans les modèles à thermodynamique continue est la masse molaire. L'utilisation de la température normale d'ébullition prévoit des résultats tout aussi satisfaisants pour une température à l'infini élevée.

Temps de calcul

Les temps de calcul de tous les modèles pour les trois carburants sont donnés dans le Tableau 6.5. Apparaissent également ceux obtenus avec les liquides mono-composants souvent utilisés pour simuler numériquement ces carburants, c'est à dire :

- ❑ l'iso-octane pour l'essence
- ❑ le n-décane pour le kérosène

- le n-dodécane pour le gasoil

Le pas de temps dans tous les modèles est de $1\mu s$. Celui qui a été utilisé précédemment pour une évaporation à température à l'infini faible était de $100\mu s$.

Carburant	Modèles à Composants Discrets		Modèles à Thermodynamique Continue	
	Diffusion infinie	Diffusion limitée	Diffusion infinie	Diffusion limitée
Iso-octane Essence	1,1s 98s	1,5s 243s	13s	83s
n-décane Kérosène	1,3s 118s	1,8s 294s	9s	50s
n-dodécane Gasoil	1,5s	1,9s	2,8s	3,8s

Tableau 6.5 : Temps de calcul obtenus avec les différents modèles pour différents carburants

- **Kérosène et essence**

Avec les modèles à composants discrets, le passage d'un liquide mono-composant à un liquide multi-composants augmente considérablement le temps de calcul, puisqu'il est multiplié par 90 avec le modèle à diffusion infinie et 160 avec le modèle à diffusion limitée. Tout l'intérêt des modèles à thermodynamique continue est mis en évidence ici puisque les temps de calcul sont réduits tout en prédisant les mêmes résultats que les modèles à composants discrets. Mais ils restent tout de même bien plus élevés que ceux obtenus avec des liquides mono-composants, c'est à dire environ 10 fois plus avec le modèle à diffusion infinie et plusieurs dizaines de fois avec le modèle à diffusion limitée.

Pour des liquides mono-composants, le temps de calcul du modèle à diffusion limitée est à peine plus long que le modèle à diffusion infinie car la seule différence entre les deux modèles est le calcul du profil de température qui finit par se stabiliser à une température d'équilibre. Pour les liquides multi-composants, il faut y ajouter le calcul des profils de composition, c'est à dire la fraction de chaque composant avec le modèle à composants discrets et la fraction globale ou les deux paramètres de distribution pour le modèle à thermodynamique continue. De plus la discrétisation du rayon de la goutte est bien plus fine pour la composition : 21 nœuds pour la température et 151 nœuds pour la composition (Chapitre 4). Le passage du modèle à diffusion infinie au modèle à diffusion limitée augmente donc considérablement le temps de calcul (environ 2,5 fois plus avec les modèles à composants discrets et 6 fois plus avec les modèles à thermodynamique continue).

- **Gasoil**

Aucune composition discrète du gasoil n'étant exploitable, aucun calcul n'a été effectué avec les modèles à composants discrets. Dans les modèles à thermodynamique continue, le

mélange n'est décrit que par une seule fonction de distribution. Dans ce cas, la modélisation du modèle à thermodynamique continue est tout simplement équivalente à celle du modèle mono-composant auquel on applique une fonction de distribution dont les paramètres sont uniformes dans la goutte (même pour le modèle à diffusion limitée, voir Chapitre 4) mais varient au cours du temps. Cela double tout de même le temps de calcul. Cela s'explique par le fait que la goutte atteint une température d'équilibre pour le n-dodécane pur, alors qu'elle augmente sans cesse pour le gasoil (Figure 6.13). De plus, la composition du gasoil varie au cours du temps. Plus d'itérations sont donc nécessaires pour faire converger à la fois le calcul de la température et de la composition de la goutte.

6.3 Réduction du temps de calcul

Même si l'utilisation des modèles à thermodynamique continue diminue considérablement le temps de calcul par rapport aux modèles à composants discrets, ce temps reste relativement élevé par rapport aux calculs pour un liquide mono-composant. Le but de cette partie est de simplifier d'avantage le modèle à thermodynamique continue afin d'obtenir des temps de calcul comparables à ceux des modèles mono-composants. Ces simplifications sont donc présentées et leurs résultats avec le kérosène sont comparés à ceux obtenus précédemment.

6.3.1 Simplification des modèles à thermodynamique continue

1^{ère} simplification

Dans les modèles à thermodynamique continue, les propriétés physiques pour chaque groupe de composants sont calculées grâce à des corrélations propres à chaque groupe. Ensuite, les propriétés du mélange de groupes sont déduites en utilisant des lois de mélange (voir Annexe A). L'ensemble de ces opérations requiert un temps de calcul non négligeable.

La première simplification consisterait à considérer que les propriétés physiques du mélange de groupes sont celles du groupe majoritaire (par exemple les iso-alcanes pour le kérosène). Il serait également possible de définir, avant le calcul, des corrélations de propriétés physiques moyennes pour le mélange qui seraient calculées à partir de celles existantes pour chaque groupe de composants pondérées par la fraction globale initiale de ces groupes. Par exemple, pour la densité molaire du liquide :

$$c_l(I) = \sum_j x_{j,l,0} c_{j,l}(I) \quad (6.4)$$

Par contre, chaque groupe de composants garde sa propre corrélation de la pression de vapeur saturante pour pouvoir calculer la fraction molaire de vapeur et sa distribution à la surface de la goutte pour chaque groupe.

Une autre simplification découle de l'utilisation de propriétés physiques communes. Comme le coefficient de diffusion de la vapeur dans le mélange gazeux est le même pour chaque groupe j de composants, le nombre de *Sherwood* modifié Sh_j^* et donc le nombre de transfert de masse $B_{m,j}$ sont eux aussi identiques pour chaque groupe j . Il n'est donc plus nécessaire d'effectuer le calcul itératif (voir Annexe B) pour déterminer chaque valeur de $B_{m,j}$.

Avec ces simplifications, un débit de vapeur et sa distribution sont toujours calculés pour chaque groupe de composants.

Remarque : de telles simplifications peuvent être également appliquées au modèle à composants discrets. Un débit de vapeur est alors toujours déterminé pour chaque composant.

2^{ème} simplification

Les propriétés physiques de la première simplification sont reprises ici. Mais cette fois-ci, toutes les fonctions de distribution de la composition initiale du liquide $f_{j,l0}$ ($f_{j,l}$ pour la fonction de distribution d'un groupe j de composants liquides + indice 0 se référant à l'instant initial) sont sommées en les pondérant par leur fraction initiale pour former une fonction initiale g_{l0} qui n'est pas forcément une fonction de distribution:

$$g_{l0}(I) = \sum_j x_{j,l0} f_{j,l0}(I) \quad (6.5)$$

Ensuite une fonction de distribution f_{l0} représente g_{l0} (Figure 6.20). Seule f_{l0} sera alors appliquée dans le modèle à thermodynamique continue utilisant une unique fonction de distribution.

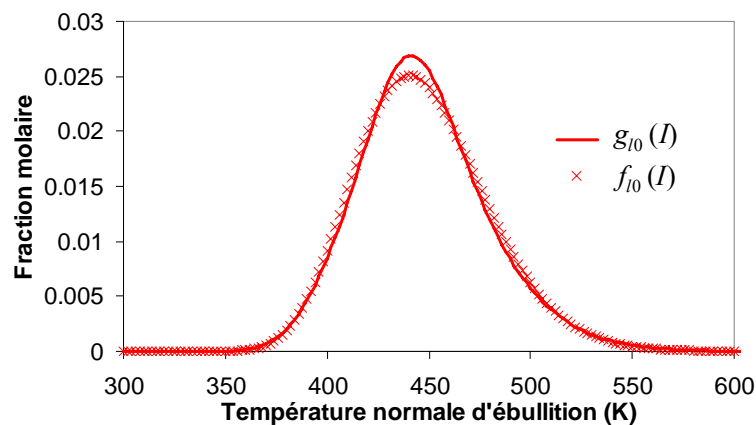


Figure 6.20 : Distribution de la somme g_{l0} des fonctions de distribution et de la fonction de distribution f_{l0} représentant g_{l0}

Contrairement à la première simplification, une seule fraction de vapeur ainsi que sa distribution sont calculées à la surface de la goutte pour l'ensemble des groupes de composants. La température normale d'ébullition doit être utilisée comme variable de distribution I et non la masse molaire. En effet, pour des composants de même masse molaire, la pression de vapeur saturante diffère totalement d'un groupe de composants à l'autre (Figure 6.21 à gauche), puisque les températures d'ébullition ne sont pas semblables. Par contre, pour une même température d'ébullition, les écarts de pression de vapeur saturante sont quasiment inexistantes (Figure 6.21 à droite).

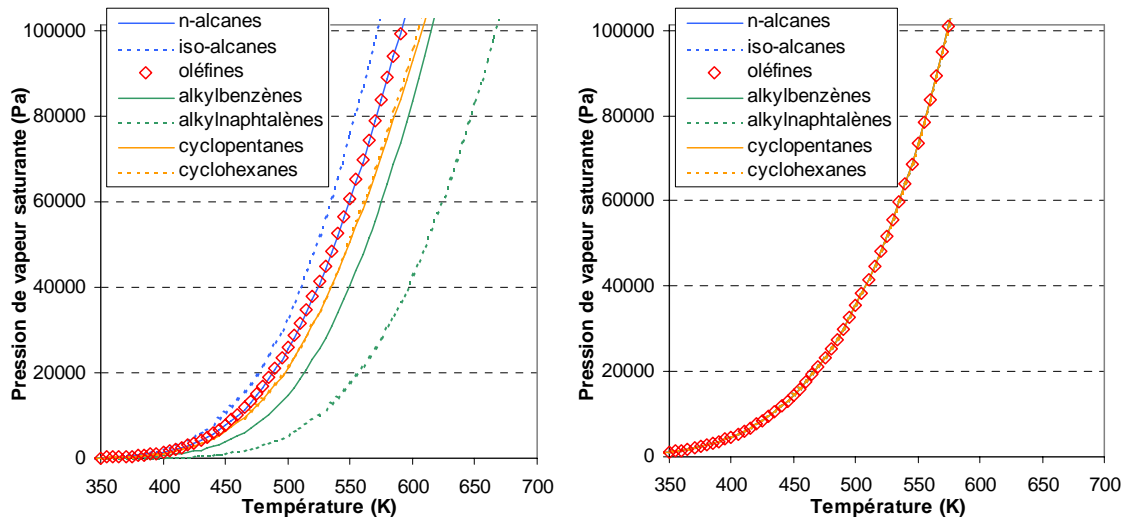


Figure 6.21 : Evolution de la pression de vapeur saturante en fonction de la température pour des composants de masse molaire de 150kg/kmol (à gauche) ou de température normale d'ébullition de 450K (à droite) d'après les corrélations des modèles à thermodynamique continue pour une pression de 10atm

Ce modèle simplifié ne donne donc que le débit total de vapeur \dot{n} et sa distribution (la température normale d'ébullition moyenne θ_v et l'écart type de cette température normale d'ébullition σ_v) pour l'ensemble des espèces du carburant. Pour déterminer le débit global de chaque groupe j de composants, il est supposé que la vapeur dont la température normale d'ébullition $I = \theta_v$ est composée du groupe j avec la fraction suivante :

$$x_{j,v}(\theta_v) = x_{j,l0} \frac{f_{j,l0}(\theta_v)}{f_{l0}(\theta_v)} \quad (6.6)$$

En multipliant le débit de vapeur total \dot{n} par cette fraction, un débit de vapeur \dot{n}_j pour ce groupe j de composants peut ainsi être déterminé :

$$\dot{n}_j(\theta_v) = x_{j,v} \dot{n}(\theta_v) \quad (6.7)$$

Par contre, tous les groupes de composants ont la même distribution pour la composition de la vapeur (θ_v et σ_v).

6.3.2 Résultats obtenus avec les modèles simplifiés

1^{ère} simplification

Des calculs ont été effectués pour le kérosène avec le premier modèle simplifié. Les propriétés physiques choisies sont celles des iso-alcanes puisqu'il s'agit du groupe majoritaire dans ce carburant. Les modèles à thermodynamique continue utilisent cette fois-ci la température normale d'ébullition comme variable de distribution I .

Les résultats ainsi obtenus par ce modèle simplifié sont très satisfaisants. Ils restent quasiment identiques à ceux calculés par les modèles à thermodynamique continue plus complets qui, comme il a été précisé précédemment, donnent des résultats proches de ceux des modèles à composants discrets. Un exemple est donné pour le débit global de vapeur pour le groupe d'iso-alcanes du kérosène (Figure 6.22) et sa distribution (Figure 6.23).

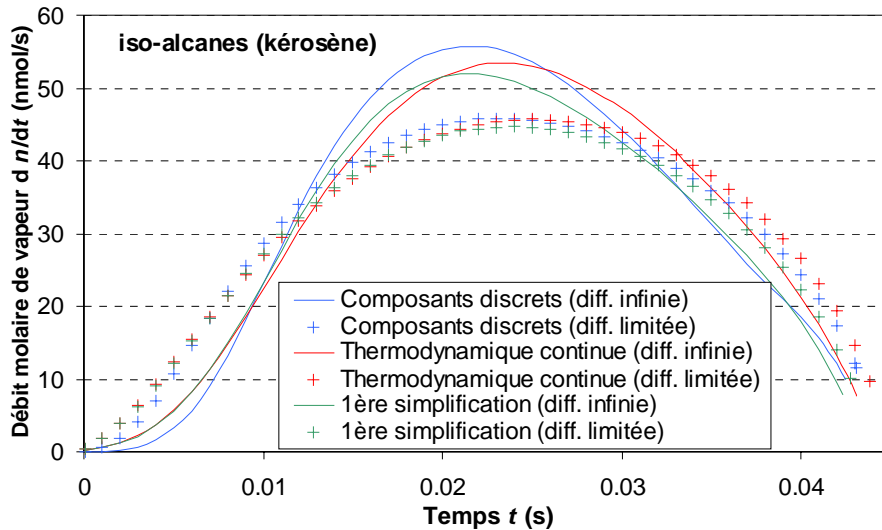


Figure 6.22 : Evolution du débit molaire global de vapeur en fonction du temps pour le groupe d'iso-alcanes du kérosène

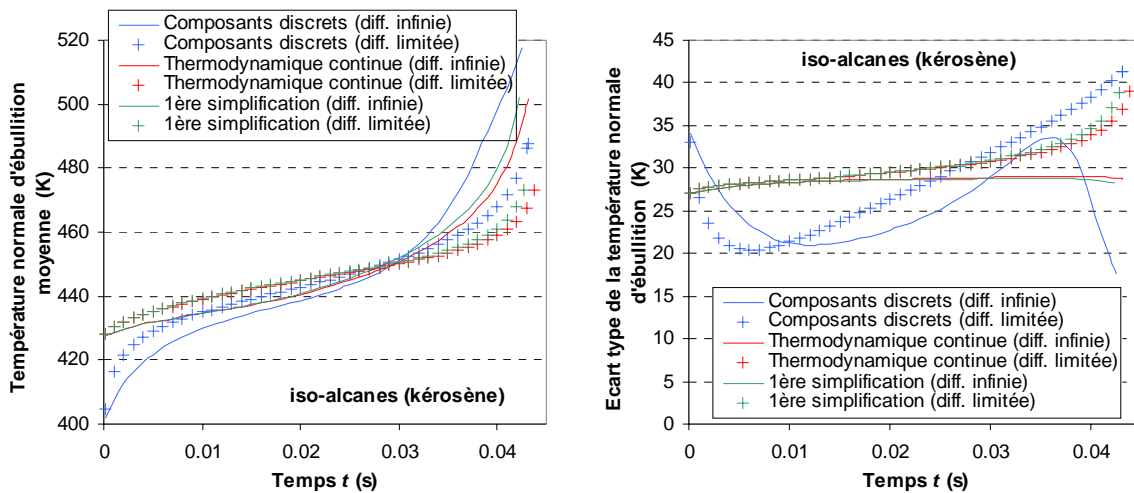


Figure 6.23 : Evolution de la distribution de la vapeur en fonction du temps pour le groupe d'iso-alcanes du kérosène

2^{nde} simplification

Des calculs pour le kérosène sont maintenant effectués avec le second modèle simplifié. Les propriétés physiques sont toujours celles des iso-alcanes. Les paramètres de distribution

initiaux de la fonction $f_{i,0}$ sont $\theta_{i,0} = 447,4\text{K}$ et $\sigma_{i,0} = 32,49\text{K}$. Les modèles à thermodynamique continue utilisent toujours la température normale d'ébullition comme variable de distribution I .

Cette fois, les résultats s'accordent moins. Si l'évolution de la taille de la goutte ou de la température de surface est tout à fait satisfaisante, les débits de vapeur et leur distribution sont quant à eux affectés. Plus un groupe de composants est majoritaire dans la composition initiale du liquide, plus son débit de vapeur et sa distribution s'accordent avec les modèles à thermodynamique continue complets. Les résultats s'avèrent donc satisfaisants avec le groupe des iso-alcanes (48% en mole de la composition initiale) et dans une moindre mesure avec les n-alcanes (26%). Par contre, les résultats divergent avec les cycloalcanes (14%) et surtout les alkylbenzènes (11%) (exemple avec le débit global de vapeur sur la Figure 6.24).

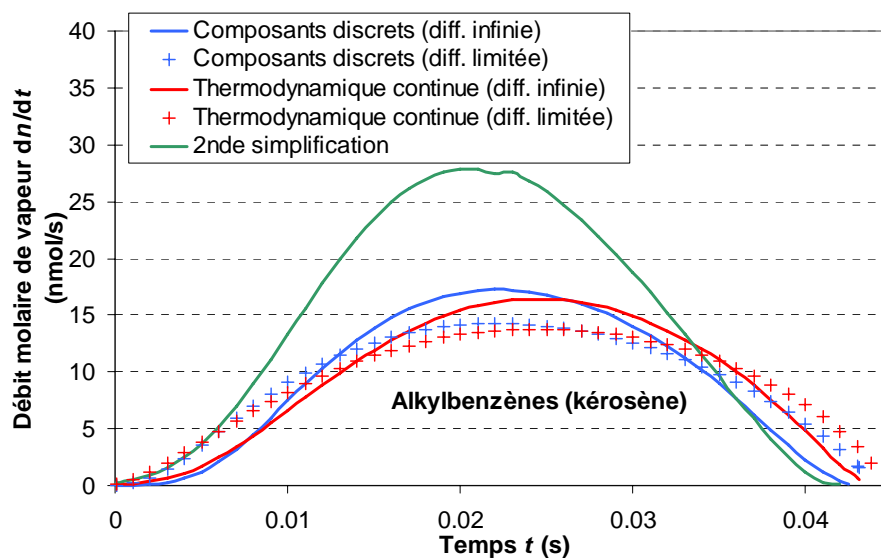


Figure 6.24 : Evolution du débit molaire global de vapeur en fonction du temps pour le groupe d'alkylbenzènes du kérosène

6.3.3 Temps de calcul

Avec la 1^{ère} simplification, les résultats restent très proches des modèles à thermodynamique continue complets, mais le gain en temps de calcul (Tableau 6.6) n'est pas réellement significatif. Ce temps a cependant bien été réduit avec la seconde simplification. Il est seulement 76% plus important que le temps nécessaire pour une goutte de n-décane pur. Cette seconde simplification donne toutefois des écarts non négligeables pour les groupes de composants minoritaires.

Carburant	Modèles à Composants Discrets		Modèles à Thermodynamique Continue		1 ^{ère} simplification		2 ^{nde} simplification
	Diffusion infinie	Diffusion limitée	Diffusion infinie	Diffusion limitée	Diffusion infinie	Diffusion limitée	Diffusion infinie
n-décane	1,3s	1,8s					
Kérosène	118s	294s	9s	50s	6s	44s	2,3s

Tableau 6.6 : Temps de calcul obtenus avec les différents modèles ainsi que les modèles simplifiés pour le kérosène

Les résultats obtenus pour cette seconde simplification montre donc l'intérêt du développement d'un modèle à thermodynamique continue avec la température d'ébullition comme variable de distribution (cette simplification ne fonctionnant qu'avec cette variable de distribution). Mais il ne faut pas oublier que, en évaporation à faible température ambiante, l'utilisation de cette variable de distribution surestime considérablement le taux d'évaporation (Figure 4.7).

6.4 Conclusion

Les différents modèles développés ont été testés et comparés pour différents carburants réels (essence, kérosène et gasoil). Pour une évaporation à faible température ambiante, les liquides mono-composants ne peuvent reproduire le phénomène de distillation des carburants. Dans ces conditions, les modèles à composants discrets sont très exigeants en temps de calcul et sont assez instables, contrairement aux modèles à thermodynamique continue bien plus rapides et plus stables. De plus, en utilisant notre nouvelle corrélation pour la pression de vapeur saturante définie dans le chapitre 4, les prévisions restent proches de celles données par les modèles à composants discrets.

L'évaporation dans ces conditions est suffisamment lente pour que les gradients de température et de compositions soient quasiment nuls et les modèles à diffusion infinie et limitée fournissent des résultats identiques.

Pour une évaporation à température ambiante élevée, les modèles à thermodynamique continue s'accordent toujours correctement avec les modèles à composants discrets. Cependant, des différences font leur apparition entre les modèles à diffusion infinie et limitée pour les débits de vapeur pour chaque espèce. Ces écarts sont d'autant plus importants que les espèces vaporisent tôt dans la durée de vie de la goutte. Pour le kérosène, ils sont surtout présents pour les composants volatiles minoritaires. Par contre, certains composants majoritaires de l'essence sont très volatiles et leur débit de vapeur diverge. D'autres calculs montrent que les différences entre les deux modèles de diffusion s'amenuisent avec l'augmentation de la pression ambiante et la diminution de la température ambiante.

Le temps de calcul pour les modèles à composants discrets sont également très longs dans ces conditions. Les modèles à thermodynamique continue les diminuent, mais ils restent tout de même plusieurs fois plus longs que ceux des liquides mono-composants.

Des simplifications ont été tentées pour réduire ces temps de calcul. La première n'affecte pas la précision du modèle mais le gain en temps de calcul n'est pas réellement convaincant. Au contraire, grâce à la seconde simplification, le temps de calcul n'est même pas doublé par rapport au modèle pour une goutte mono-composant tout en gardant une bonne précision, hormis la composition de la vapeur des groupes de composants minoritaires.

Evidemment, d'innombrables autres simplifications sont possibles et ne peuvent être toutes étudiées. Citons par exemple pour les modèles à composants discrets, l'utilisation des corrélations des modèles à thermodynamique continue pour le calcul des propriétés physiques. Cela éviterait de calculer les propriétés de chaque composant puis d'appliquer les lois de mélange souvent exigeantes en temps de calcul. Toujours avec les modèles composants discrets, les espèces pourraient encore être groupées par classe de volatilité afin

de réduire leur nombre. La description complète des différents modèles ainsi que la présentation des nombreuses corrélations de propriétés physiques données dans l'Annexe A permettent de nombreuses combinaisons de simplifications et ainsi de calculer avec une bonne précision l'évolution de la grandeur physique souhaitée.

CHAPITRE 7 COMBUSTION D'UN BROUILLARD DE GOUTTES MULTI-COMPOSANTS

Dans ce chapitre, le modèle à composants discrets en diffusion effective est implanté dans une modélisation de l'évaporation et de la combustion d'un nuage de gouttes monodisperse. Le modèle à composants discrets pour calculer l'évaporation des gouttes a été choisi car il est plus précis que le modèle à thermodynamique continue. De plus, ce dernier n'est pas le plus approprié pour les mélanges bi-composants qui seront majoritairement étudiés dans cette partie.

Ce chapitre se divise en trois parties. Tout d'abord, la modélisation de la phase gazeuse et de la cinétique chimique est décrite. Les délais d'auto-allumage du brouillard de gouttes seront ensuite comparés et analysés pour plusieurs compositions du liquide avec différentes valeurs de températures du gaz, de tailles de gouttes et de richesses. La dernière partie étudiera, pour différentes compositions, l'allumage, la propagation et la stabilité de la flamme dans des conditions de température et de pression faibles rencontrées lors des processus d'allumage en condition atmosphérique au sol ou en altitude.

Dans ce Chapitre, le composant de référence est le n-decane qui sert souvent à représenter le kérosène. Du n-hexane sera ajouté à la composition de la goutte afin de vérifier si la présence d'un composant volatile modifie le comportement. Finalement les gouttes seront composées d'un grand nombre de n-alcanes et d'un iso-alcane pour se rapprocher de la composition réelle du kérosène.

7.1 Modélisation de la combustion d'un brouillard de gouttes

7.1.1 Configuration du nuage de gouttes

Les hypothèses utilisées sont les suivantes :

- Le système est à symétrie sphérique.
- La vaporisation des gouttes peut être représentée par le comportement d'une goutte isolée dans des conditions identiques à celles qui existent localement dans le nuage.
- La réaction chimique comporte une seule étape et suit la loi d'Arrhénius.

Le nuage de gouttes est sphérique et son rayon initial r_0 est de 1cm. La frontière du calcul (où sont appliquées les conditions à l'infini) reste fixe et située à 2cm du centre du nuage. Les équations régissant la conservation de la masse, des espèces et de l'énergie sont identiques à l'intérieur et à l'extérieur du nuage, sauf le débit de vapeur \dot{m} qui est nul à l'extérieur du nuage. La température et la composition initiales du mélange gazeux sont égales à celles définies à l'infini. Le système est ouvert et la pression est supposée constante.

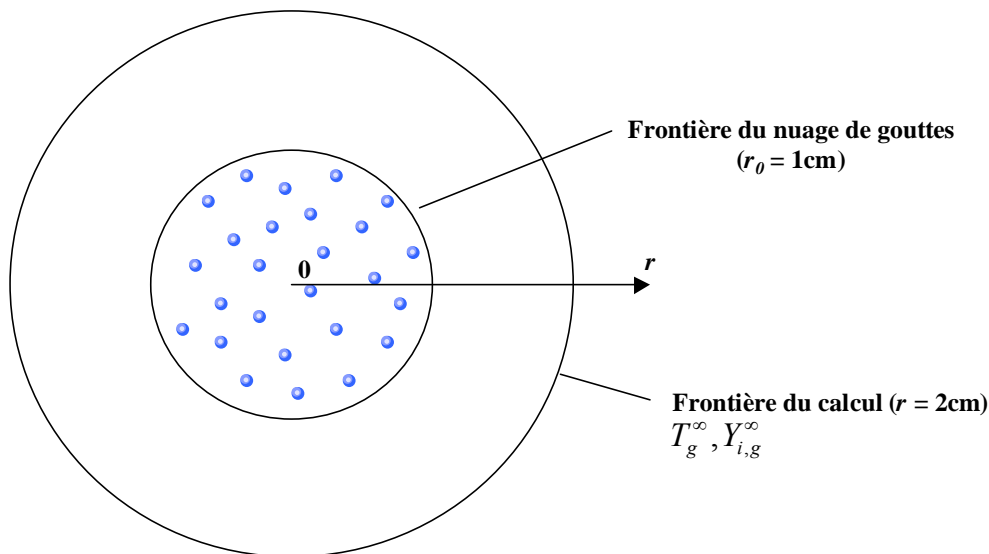


Figure 7.1 : Schéma du nuage de gouttes et de son environnement

Aucun effet de convection forcée n'est appliqué. La gravité est négligée et aucun effet de convection naturelle n'est alors présent. La seule vitesse de l'air rencontrée est celle engendrée par les variations de densité du mélange gazeux.

Les gouttes ont toutes le même diamètre initial et sont initialement immobiles. Elles peuvent ensuite se déplacer suivant la composante radiale car le système est à symétrie sphérique. Le rayon du nuage peut donc varier au cours du temps. La distribution spatiale des gouttes est

initialement uniforme et caractérisée par une densité n_{bg} , nombre de gouttes par unité de volume. Avec le mouvement des gouttes, la distribution spatiale évolue au cours du temps.

Evidemment, un nuage de gouttes qui reste parfaitement sphérique n'est pas une configuration réaliste pour la combustion d'un spray. Cette symétrie est perturbée, par exemple, par les effets de la gravité qui provoque la chute des gouttes et la convection naturelle. Le but de cette étude n'est toutefois pas de simuler le comportement réel d'un spray de gouttes. Il s'agit d'une configuration simple pour réaliser une étude paramétrique. Les différentes hypothèses ou conditions qui simplifient cette configuration servent à supprimer tout phénomène perturbateur qui empêcherait d'analyser et de comprendre le comportement en régime de combustion du nuage de gouttes dans cette étude paramétrique.

7.1.2 Modélisation de la phase liquide

Modélisation de l'évaporation des gouttes

Le modèle à composants discrets et à diffusion effective est choisi pour déterminer l'évaporation des gouttes, puisqu'il est le plus complet. Les résultats sur les débits de vapeur de chaque espèce ($= \dot{m}_i = \xi_i \dot{m}$) et sur les flux de chaleur servant à chauffer et évaporer la goutte ($= \dot{m} C_{p_v} (T^\infty - T^s) / B_T$) servent ensuite de termes sources dans les équations de la phase gazeuse du brouillard de gouttes. A une position \vec{x}_p donnée, les gouttes sont rassemblées en un groupe p de gouttes. L'évaporation d'un groupe p de gouttes est différente de celle des autres groupes, puisque ces derniers ne rencontrent pas des conditions identiques localement dans le nuage.

Déplacement des gouttes

Lors de l'allumage, la vitesse de l'air peut être importante à cause des variations brutales de la densité de l'air et ainsi entraîner les gouttes. La position et la vitesse d'un groupe p de gouttes sont respectivement gouvernées par :

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{V}_p \quad (7.1)$$

$$\rho_l r_s^3 \frac{d\vec{V}_p}{dt} = \frac{3}{8} r_s^2 \rho_g^\infty Cd (\vec{V}^\infty - \vec{V}_p) \|\vec{V}^\infty - \vec{V}_p\| \quad (7.2)$$

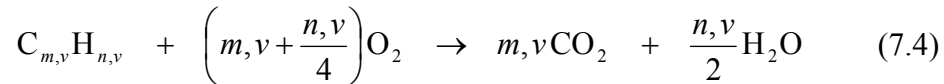
La gravité est négligée dans l'équation (7.2). Le coefficient de traînée Cd est donnée par *Mulholland* [43] :

$$Cd = \frac{24}{Re} (1 + 0,11 Re^{0,687}) \text{ pour } 25 \leq Re \leq 300 \quad (7.3)$$

7.1.3 Modélisation de la phase gazeuse

Réaction chimique

La cinétique chimique faisant intervenir plusieurs hydrocarbures est mal connue. Une des solutions possibles serait d'écrire une équation bilan pour chaque espèce de vapeur v et de calculer son taux de réaction $\dot{\omega}_v$. Une réaction globale à une seule étape irréversible entre l'espèce de vapeur de combustible (indice v) et l'oxydant (indice O) créant des produits (indice P) est considérée pour chaque espèce v :



$$\dot{\omega}_v = BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{M_v}\right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_O}{M_O}\right)^{a_O} e^{-T_a/T} \quad (7.5)$$

où Y_v est la fraction de vapeur v dans le mélange gazeux, M_v la masse molaire de la vapeur v , B le facteur pré-exponentiel et T_a la température d'activation.

Dans le Tableau 7.1, les paramètres B , β , a_v , a_O et T_a sont ceux déterminés par *Westbrook* et *Dryer* [44] de sorte à reproduire les richesses limites d'inflammabilité ainsi que la vitesse maximale de propagation de la flamme.

Composants	B (m ³ /(mol.s))	β	a_v	a_O	T_a (K)
n-alcanes					
n-hexane	5,7.10 ⁵	0	1,5	0,25	15 155
n-heptane	5,1.10 ⁵	0	1,5	0,25	15 155
n-octane	4,6.10 ⁵	0	1,5	0,25	15 155
n-nonane	4,2.10 ⁵	0	1,5	0,25	15 155
n-decane	3,8.10 ⁵	0	1,5	0,25	15 155
Alkylbenzènes					
benzène	2,0.10 ⁵	0	-0,1	1,85	15 155
methylbenzène	1,6.10 ⁵	0	-0,1	1,85	15 155

Tableau 7.1 : Paramètres des taux de réaction à une étape pour différents composants [44]

L'utilisation de coefficients a_v et a_O non-unitaires interdit l'utilisation d'une telle méthode car cela surestimerait le taux de réaction pour chaque espèce. Pour démontrer cela, si l'on considère que la phase gazeuse ne contient qu'une seule espèce de vapeur v , en séparant sa fraction massique Y_v en deux parts égales, le taux de réaction de chaque part de vapeur sera alors :

$$\dot{\omega}_v = BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{2M_v}\right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_O}{M_O}\right)^{a_O} e^{-T_a/T} \quad (7.6)$$

Le calcul du taux de réaction total pour les deux parts serait donc le double de ce taux de réaction :

$$\begin{aligned}\dot{\omega} &= 2BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{2M_v} \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T} \\ &= 2^{1-a_v} BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{M_v} \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T}\end{aligned}\quad (7.7)$$

L'expression du taux de réaction pour une espèce (équation (7.5)) n'est donc pas retrouvée si le coefficient a_v est différent de 1 :

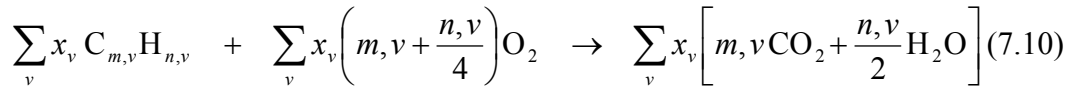
$$\begin{aligned}\dot{\omega}_v &= BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{M_v} \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T} \\ &= BT^\beta \left(\rho_g \left(\frac{Y_v}{2M_v} + \frac{Y_v}{2M_v} \right) \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T} \\ &\neq 2^{1-a_v} BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{M_v} \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T}\end{aligned}\quad (7.8)$$

Cette différence pourrait s'expliquer par la fraction d'oxygène qui n'a pas été modifiée. En la divisant également par 2 (puisque la fraction de vapeur a été divisée par 2), cela donne :

$$\begin{aligned}\dot{\omega}_v &= 2^{1-a_v} BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{M_v} \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{2M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T} \\ &= 2^{1-a_v-a_o} BT^\beta \left(\frac{\rho_g Y_v}{M_v} \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T}\end{aligned}\quad (7.9)$$

Comme $a_v + a_o$ est généralement égal à 1,75 [44], le taux de réaction reste tout de même incorrect. Calculer un taux de réaction $\dot{\omega}_v$ pour chaque espèce de vapeur v faussera donc toute la cinétique chimique lors de la combustion.

Il s'avère plus approprié de considérer une seule réaction globale, comme le propose *Aggarwal* [45] :



Le taux de réaction est toujours exprimé selon la loi d'Arrhénius :

$$\dot{\omega} = BT^\beta \left(\rho_g \sum_v \frac{Y_v}{M_v} \right)^{a_v} \left(\frac{\rho_g Y_o}{M_o} \right)^{a_o} e^{-T_a/T} \quad (7.11)$$

Les coefficients a_v et a_O diffèrent totalement entre les n-alcanes et les alkylbenzènes. Ces deux natures de composants ne peuvent être mélangées dans l'équation bilan (7.10). Le liquide est alors uniquement composé de n-alcanes ou d'alkylbenzènes.

L'autre inconvénient concerne les facteurs pré-exponentiels B variant entre chaque composant, même s'ils sont de même nature. Cela signifie que certaines espèces sont plus réactives que d'autres. Le fait de multiplier les coefficients stœchiométriques par la fraction molaire de vapeur x_v dans l'équation bilan (7.10) suppose que les différentes espèces ont toutes la même réactivité. Pour une meilleure prise en compte de ces écarts de réactivité, nous proposons de modifier l'équation bilan (7.10) :

$$\begin{aligned} \sum_v x_v \frac{B_v}{B} C_{m,v} H_{n,v} + \sum_v x_v \frac{B_v}{B} \left[m_{,v} + \frac{n_{,v}}{4} \right] O_2 \\ \rightarrow \sum_v x_v \frac{B_v}{B} \left[m_{,v} CO_2 + \frac{n_{,v}}{2} H_2O \right] \end{aligned} \quad (7.12)$$

où B_v est le facteur pré-exponentiel de l'espèce de vapeur v et B le facteur pré-exponentiel moyen :

$$B = \sum_v x_v B_v \quad (7.13)$$

Equations de conservation

L'équation de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_g v_g) = n_{bg} \dot{m} \quad (7.14)$$

Elle permet de calculer la vitesse v de l'air à la distance radiale r :

$$v_g(r) = \frac{1}{r^2 \rho_g} \int_0^r \left(n_{bg} \dot{m} - \frac{\partial \rho_g}{\partial t} \right) r^2 dr \quad (7.15)$$

L'évolution de la composition de la phase gazeuse est déterminée par les équations de conservation des espèces :

□ pour une espèce v de vapeur de combustible

$$\rho_g \frac{\partial Y_{v,g}}{\partial t} + \rho_g v_g \frac{\partial Y_{v,g}}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_g D_{v,g} \frac{\partial Y_{v,g}}{\partial r} \right) = n_{bg} \dot{m} (\xi_v - Y_{v,g}) - v_v M_v \dot{\omega} \quad (7.16)$$

□ pour l'oxydant O

$$\rho_g \frac{\partial Y_{O,g}}{\partial t} + \rho_g v_g \frac{\partial Y_{O,g}}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_g D_{O,g} \frac{\partial Y_{O,g}}{\partial r} \right) = -n_{bg} \dot{m} Y_{O,g} - v_O M_O \dot{\omega} \quad (7.17)$$

□ pour les produits P

$$\rho_g \frac{\partial Y_{P,g}}{\partial t} + \rho_g v_g \frac{\partial Y_{P,g}}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_g D_{P,g} \frac{\partial Y_{P,g}}{\partial r} \right) = -n_{bg} \dot{m} Y_{P,g} + \nu_P M_P \dot{\omega} \quad (7.18)$$

□ pour les autres espèces

$$\rho_g \frac{\partial Y_{i,g}}{\partial t} + \rho_g v_g \frac{\partial Y_{i,g}}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_g D_{i,g} \frac{\partial Y_{i,g}}{\partial r} \right) = -n_{bg} \dot{m} Y_{i,g} \quad (7.19)$$

où les coefficients stœchiométriques ν sont définis, comme dans l'équation bilan (7.12), pour un composant $C_{m,v}H_{n,v}$ par :

$$\nu_v = x_v \frac{B_v}{B} \quad (7.20)$$

$$\nu_O = x_v \frac{B_v}{B} \left[m, v + \frac{n, v}{4} \right] \quad (7.21)$$

$$\text{pour le dioxyde de carbone } \nu_P = x_v \frac{B_v}{B} m, v \quad (7.22)$$

$$\text{pour la vapeur d'eau } \nu_P = x_v \frac{B_v}{B} \frac{n, v}{2} \quad (7.23)$$

Le profil de température du gaz est gouverné par l'équation de bilan d'énergie :

$$\begin{aligned} \rho_g C_{p,g} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_g C_{p,g} v_g \frac{\partial T}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda_g \frac{\partial T}{\partial r} \right) \\ = -n_{bg} \dot{m} C_{p,v} (T - T^s) \left(\frac{1}{B_T} + 1 \right) + \dot{\omega} \sum_v x_v \frac{B_v}{B} \nu_v M_v Q_{c,v} \end{aligned} \quad (7.24)$$

où $Q_{c,v}$ est la chaleur de réaction de la vapeur de combustible v .

Le terme $\dot{m} C_{p,v} (T - T^s) / B_T$ représente la puissance perçue par la goutte pour chauffer et s'évaporer, alors que $\dot{m} C_{p,v} (T - T^s)$ est la puissance consommée par la vapeur pour passer de la température T^s à la surface de la goutte à la température T loin de la goutte.

Le système est fermé par les conditions aux limites suivantes :

□ au centre du nuage, la vitesse v du gaz est nulle, tout comme les gradients de température et de composition du gaz

$$\left\{ \begin{array}{l} v = 0 \\ \frac{\partial Y_{i,g}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \end{array} \right. \quad (7.25)$$

- à la limite du domaine de calcul, la température et la composition du gaz sont identiques à celles définies à l'infini

$$\begin{cases} Y_{i,g} = Y_{i,g}^\infty \\ T = T_i^\infty \end{cases} \quad (7.26)$$

Les équations de la phase gazeuse sont également discrétisées par la méthode de *Crank-Nicholson*. A chaque nœud de discrétisation dans le nuage, le modèle d'évaporation donne la valeur des termes sources (\dot{m}_i et $\dot{m} C_{p_v} (T^\infty - T^s) / B_T$).

7.2 Auto-allumage d'un brouillard de gouttes multi-composants

L'allumage d'un nuage de gouttes est étudié pour différents paramètres : le modèle d'évaporation, la taille et la composition de la goutte, la température initiale du gaz et de la richesse.

7.2.1 Influence de la composition

Le kérosène est souvent représenté par le n-decane. Du n-hexane, qui est un composant plus volatile, est d'abord ajouté afin d'analyser la différence de comportement en combustion lors de l'auto-allumage. Le nuage présente les conditions suivantes :

- le gaz est initialement à la température de 1000K
- la pression ambiante est de 10atm
- le rayon initial du nuage est de 1cm
- le diamètre initial des gouttes est de 100 μ m
- la température initiale des gouttes est de 300K
- le nombre de gouttes est ajusté aux proportions stœchiométriques.

Les délais d'allumage sont d'abord comparés (Figure 7.2). Le critère d'auto-allumage est basé sur un adimensionnement de la température maximale T_{max} dans la zone de réaction de la phase gazeuse. L'allumage a lieu si (Thévenin [46]) :

$$\frac{T_a (T_{max} - T^\infty)}{T^\infty{}^2} > 5 \quad (7.27)$$

où T_a est la température d'activation.

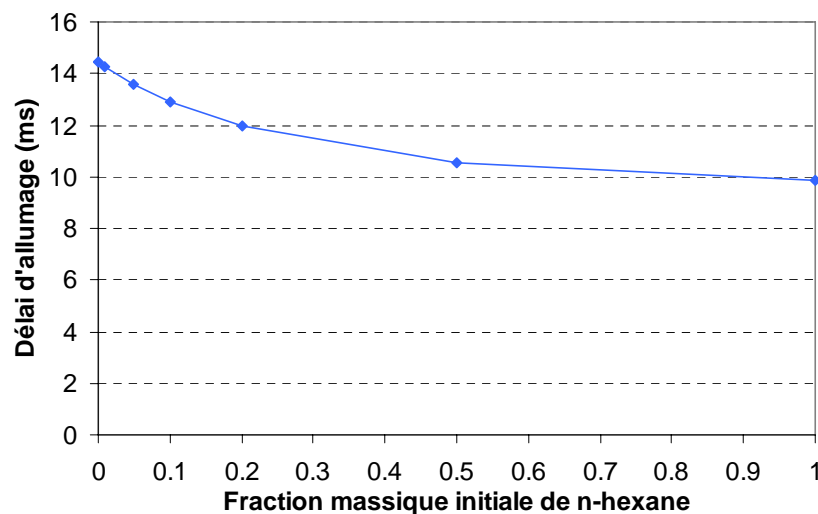


Figure 7.2 : Délai d'allumage du nuage en fonction de la fraction massique initiale de n-hexane dans les gouttes

Comme le n-hexane pur s'évapore plus que le n-decane pur pendant le début de l'évaporation, pendant de la phase de chauffage des gouttes, le délai d'allumage pour du n-hexane pur (9,88ms) est 32% plus faible que celui du n-decane pur (14,48ms). Pour diminuer ce délai pour le n-decane, l'ajout d'une faible quantité de n-hexane suffit, puisqu'un nuage de gouttes composées de 20% de n-hexane et 80% de n-decane s'auto-allume à 11,95ms.

Le comportement obtenu expérimentalement par *Yang* et al. [47] pour une goutte de n-heptane/n-hexadecane isolée injectée dans une ambiance à haute température est identique ici. L'ajout d'un composant volatile réduit le délai d'allumage et lorsque les gouttes sont composées d'au moins 50% du composant le plus volatile, le délai d'allumage est identique à celui de ce composant pur (Figure 7.2 et Figure 7.3).

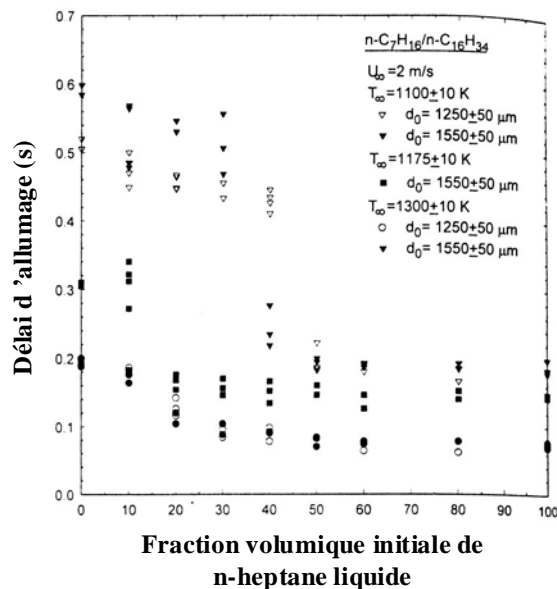


Figure 7.3 : Délai d'allumage pour différentes fractions de n-heptane liquide pour des diamètres initiaux et des températures ambiantes différentes [47]

Deux mélanges plus complexes de n-alcanes (Tableau 7.2) sont également testés. Le premier est composé de 11 n-alcanes (du C_6H_{14} au $C_{16}H_{34}$) et sa distribution est identique à celle du groupe de n-alcanes du kérosène étudié dans le Chapitre précédent. Le deuxième mélange est identique au premier sauf que les composants moins volatiles que le n-decane, c'est à dire entre le n-undecane ($C_{11}H_{24}$) et le n-hexadecane ($C_{16}H_{34}$) sont remplacés par le n-decane. Ce deuxième mélange permettra donc d'observer quelle est l'influence des composants peu volatiles par rapport au premier mélange.

Composition	Fraction massique initiale	
	Mélange 1	Mélange 2
n-hexane	0,0056	0,0056
n-heptane	0,0113	0,0113
n-octane	0,0318	0,0318
n-nonane	0,1617	0,1617
n-decane	0,2040	0,7896
n-undecane	0,2380	
n-dodecane	0,1591	
n-tridecane	0,1273	
n-tetradecane	0,0510	
n-pentadecane	0,0087	
n-hexadecane	0,0015	

Tableau 7.2 : Composition des deux mélanges complexes de n-alcanes

Les facteurs pré-exponentiels des n-alcanes situés entre le n-undecane et le n-hexadecane ne sont pas connus. Comme ces facteurs décroissent du n-hexane ($B = 5,7.10^5 \text{m}^3/(\text{mol.s})$) au n-decane $B = 3,8.10^5 \text{m}^3/(\text{mol.s})$, ils sont supposés égaux à celui du n-decane pour les espèces situées entre le n-undecane et le n-hexadecane.

Pour le premier mélange, la quantité de composants volatiles est faible et leur présence a peu d'influence sur le délai d'allumage puisque sa valeur reste comprise entre celle du n-decane pur (14,48ms) et celle du mélange binaire n-hexane5% - n-decane95% (13,57ms) (Tableau 7.3). La présence des composants peu volatiles (c'est à dire du n-undecane au n-hexadecane) n'explique pas cette faible différence de comportement entre le mélange 1 et le n-decane, car le mélange 2 qui ne contient pas de ces composants peu volatiles présente un délai d'allumage très proche de celui du mélange 1 (Tableau 7.3). Les composants volatiles semblent ne pas être en proportion suffisante dans les deux mélanges pour réduire significativement le délai d'allumage par rapport au n-decane pur.

Composition	Délai d'allumage (ms)	Pourcentage de réduction du délai d'allumage par rapport au n-decane pur
n-hexane pur	9,88	31,7%
n-hexane 50% - n-decane 50%	10,56	27,0%
n-hexane 20% - n-decane 80%	11,95	17,4%
n-hexane 10% - n-decane 90%	12,90	10,9%
n-hexane 5% - n-decane 95%	13,57	6,3%
mélange 2	13,72	5,2%
mélange 1	14,03	3,1%
n-hexane 1% - n-decane 99%	14,26	1,5%
n-decane pur	14,48	

Tableau 7.3 : Délai d'allumage pour les différentes compositions présentés par ordre croissant

7.2.2 Influence du modèle d'évaporation

Dans ce chapitre, le modèle à diffusion effective sert à déterminer la quantité de vapeur fournie à la phase gazeuse. Des hypothèses de profils uniformes pour la température ou la composition dans la goutte sont tout de même testées dans des conditions identiques à celles de la partie précédente. Quatre cas sont alors étudiés :

- température et composition non uniformes dans la goutte (diffusion effective)
- température uniforme et composition non uniforme dans la goutte (diffusion effective + température uniforme)
- température non uniforme et composition uniforme dans la goutte (diffusion effective + composition uniforme)
- température et composition uniformes dans la goutte (diffusion infinie).

Il a été montré dans le Chapitre précédent que, pendant la période de chauffage de la goutte, l'hypothèse de température uniforme du liquide dans le modèle à diffusion infinie sous-estime la valeur de la température de surface et donc le débit de vapeur. Plus de temps est donc nécessaire pour atteindre une concentration de vapeur suffisante et ainsi allumer le nuage de goutte. Que la composition de la goutte soit uniforme ou non, l'hypothèse de température uniforme dans la goutte retarde donc l'allumage (Figure 7.4). Ce retard augmente avec la proportion initiale de n-decane (composant le moins volatile) dans la goutte. Moins un composant est volatile, plus il doit chauffer pour s'évaporer et plus la température de surface est sous-estimée par l'hypothèse de température uniforme dans la goutte, ce qui favorise le retard à l'allumage. En passant d'un profil de température non-uniforme à un profil uniforme, l'augmentation du délai d'allumage varie alors de 11,8% pour le n-hexane pur à 21,5% pour le n-decane pur.

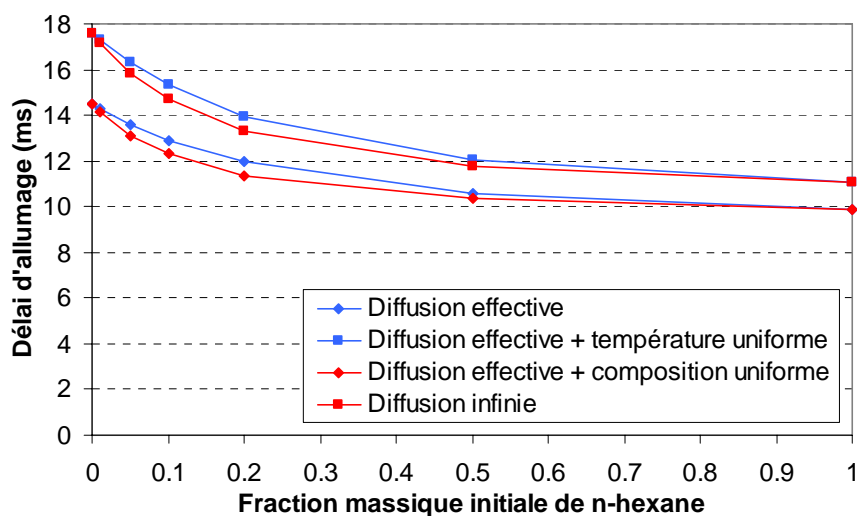


Figure 7.4 : Délai d'allumage du nuage en fonction de la fraction massique initiale de n-hexane dans les gouttes pour différents profils de la température et de la composition de la phase liquide

L'uniformité de la composition de la goutte a peu d'influence sur l'allumage puisque cela sous-estime faiblement le délai d'allumage (Figure 7.4) et l'écart observé le plus important est inférieur à 5%.

Un calcul est effectué pour une goutte de n-hexane 20% - n-decane 80% dans des conditions semblables à celle du nuage. La quantité de masse évaporée est tracée en fonction du temps sur la Figure 7.5. Elle montre effectivement que l'uniformité de la température sous-estime cette quantité alors que, au contraire, l'uniformité de la composition la surestime.

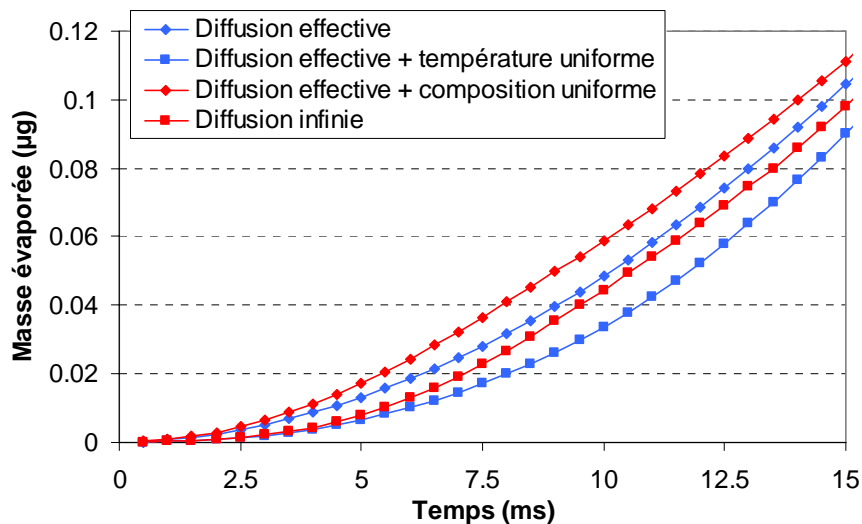


Figure 7.5 : Evolution de la masse évaporée en fonction du temps pour les différentes modélisations des profils de température et de composition pour le mélange de n-hexane 20% - n-decane 80%

La conclusion est la même pour le mélange 1 de 11 n-alcane (Tableau 7.4). Un profil de température uniforme retarde l'allumage alors qu'une composition uniforme l'avance légèrement. Le temps de calcul étant relativement long avec le modèle à diffusion effective, il serait donc judicieux d'utiliser ce modèle mais avec un profil de composition uniforme.

Profils de température et de composition	Délai d'allumage (ms)
Diffusion effective	14.03
Diffusion effective + température uniforme	17.01
Diffusion effective + composition uniforme	13.80
Diffusion infinie	16.91

Tableau 7.4 : Délai d'allumage pour le mélange 1 avec les différentes modélisations des profils de température et de composition

Dans les quatre cas, le mélange 1 présente toujours un comportement proche de celui du n-decane pur et son délai d'allumage reste compris entre celui du mélange n-hexane 5% - n-decane 95% et celui du n-decane pur.

7.2.3 Influence du diamètre initial de la goutte

Le paramètre étudié maintenant est le diamètre initial des gouttes. Seul le modèle à diffusion effective est utilisé. Deux types d'allumage sont observés : l'allumage interne et l'allumage externe. Sur la Figure 7.6, la zone rouge indique la position de la flamme. En allumage interne, la flamme se développe dans le nuage, alors qu'en allumage externe, il a lieu à la périphérie de ce nuage.

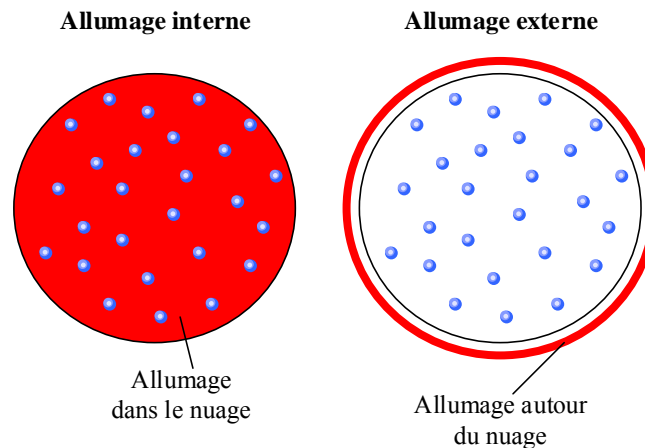


Figure 7.6 : allumage interne (à gauche) et allumage externe (à droite) du nuage de gouttes

La Figure 7.7 fait apparaître, de haut en bas, la température du gaz, la fraction massique de vapeur et le taux de réaction dans le nuage à l'instant $t=2\text{ms}$ (à gauche) et à l'instant t où le critère d'allumage est atteint (à droite).

Dans les parties précédentes, le diamètre initial des gouttes était de $100\mu\text{m}$. La concentration de vapeur et la température dans le nuage étaient suffisantes pour que l'allumage s'effectue à l'intérieur du nuage (Figure 7.7 en haut), c'est l'allumage « interne ».

Pour un diamètre initial de $50\mu\text{m}$, le volume des gouttes est divisé par huit et pour garder la stœchiométrie, il faut huit fois plus de gouttes dans le nuage. La quantité de vapeur dans le nuage augmente alors plus vite avec des gouttes de $50\mu\text{m}$ mais l'air a considérablement refroidi (Figure 7.7 en haut). En effet, à volume de liquide égal, le chauffage et l'évaporation du liquide sont plus rapides avec de petites gouttes. Cela contribue au refroidissement du gaz dans le nuage, tout comme l'éjection de vapeur dont la température est égale à celle à la surface des gouttes. Malgré que la concentration de vapeur soit plus importante (Figure 7.7 au milieu) avec des gouttes plus petites, la température du gaz dans le nuage est trop faible pour atteindre un taux de réaction suffisamment important dans le nuage provoquer l'allumage (Figure 7.7 en bas). Il faut donc attendre que la vapeur diffuse à l'extérieur du nuage où la température est plus importante pour le taux de réaction soit suffisant pour provoquer l'allumage (Figure 7.7 en bas). C'est l'allumage « externe ».

Un comportement intermédiaire est mis en évidence avec un diamètre initial de $75\mu\text{m}$ (Figure 7.7).

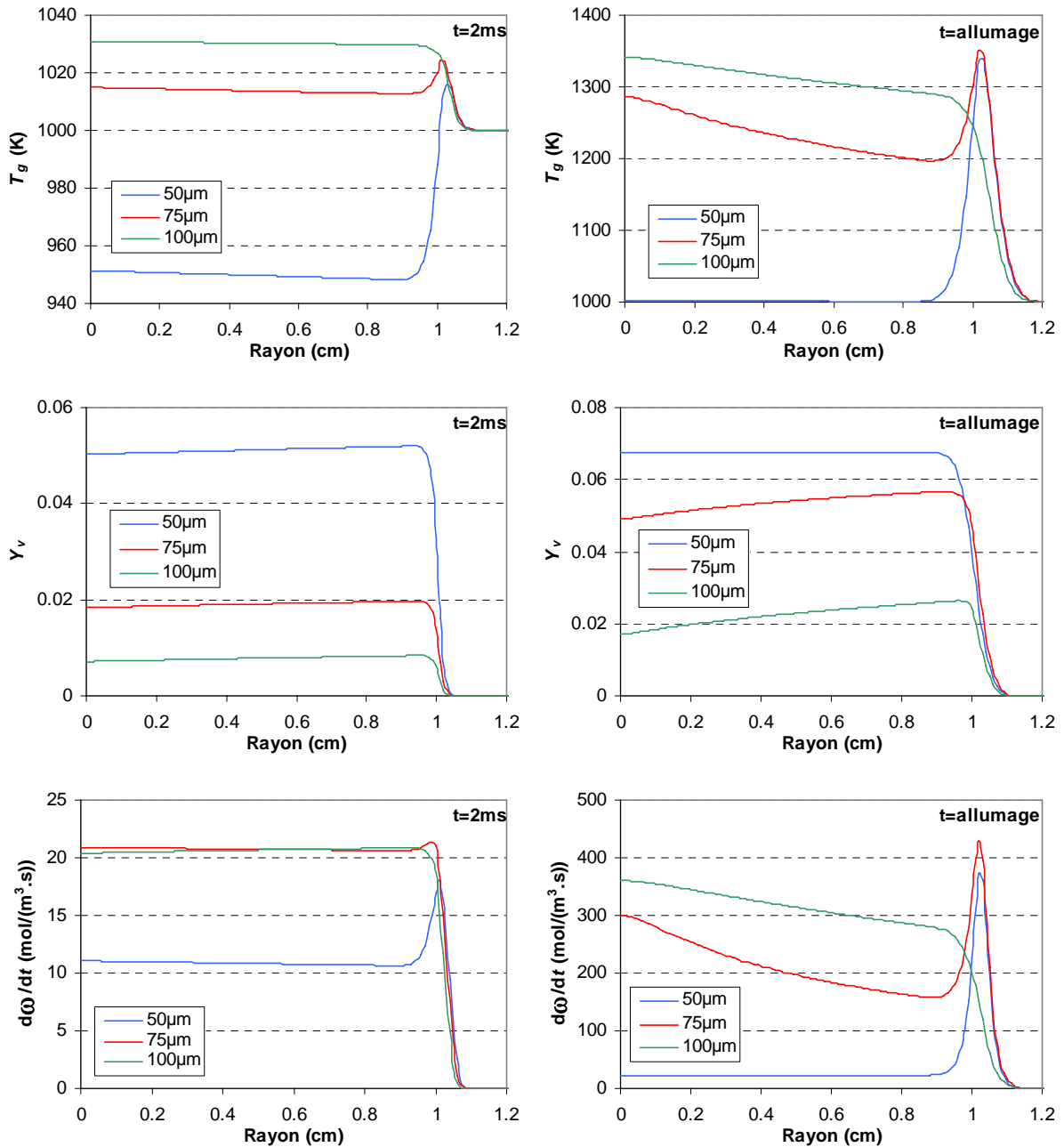


Figure 7.7 : De haut en bas, température du gaz, fraction massique de vapeur et taux de réaction en fonction du rayon pour différents diamètres de gouttes de n-hexane à $t=2ms$ (à gauche) et t à l'allumage du nuage (à droite)

Remarque : sur la Figure 7.7, les échelles des ordonnées sont différentes entre les figures de gauche et celles de droite pour une meilleure lisibilité. Il est également rappelé que le rayon du nuage de gouttes est de 1cm.

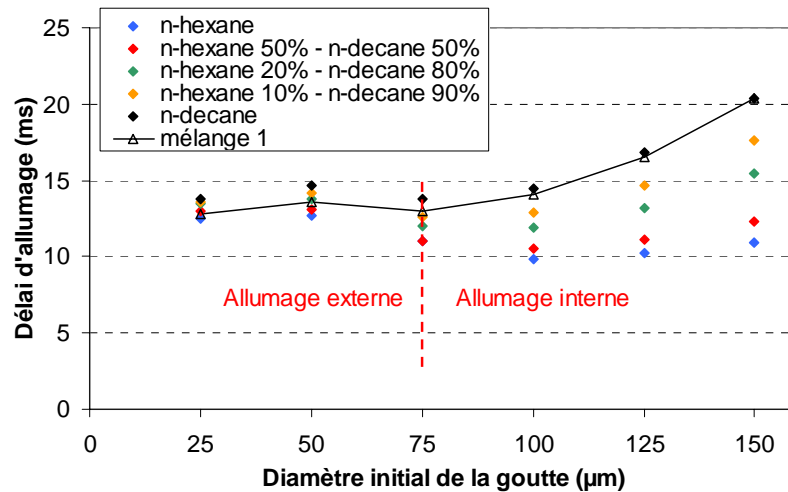


Figure 7.8 : Délai d'allumage du nuage en fonction du diamètre initial des gouttes pour différentes compositions du liquide

La Figure 7.8 montre bien l'influence de la composition sur l'allumage du nuage. Lorsque les gouttes sont composées de composants peu volatiles, elles doivent atteindre une température plus importante pour s'évaporer. Les gouttes de grande taille sont difficiles à chauffer, ce qui explique l'influence considérable de la composition sur les grandes gouttes. Pour des gouttes de 150μm, par rapport à un nuage de n-hexane pur, deux fois plus de temps est nécessaire pour allumer le nuage de n-decane pur. Cet écart diminue avec le diamètre initial pour un allumage interne.

Par contre, le délai d'allumage augmente à nouveau en passant de gouttes de 100μm à des gouttes de 50μm, car l'on passe d'un allumage interne à un allumage externe et qu'il faut attendre que la vapeur se diffuse en quantité suffisante à l'extérieur du nuage pour provoquer l'allumage.

Ensuite le délai d'allumage diminue avec le diamètre initial des gouttes puisque les gouttes s'évaporent plus vite. L'influence de la composition est faible car le temps de chauffage des gouttes est comparable pour toutes les compositions avec les petites gouttes.

Le mélange 1, qui représente le groupe de n-alcane du kérosène du Chapitre précédent, s'allume comme le n-decane pur en allumage interne. Par contre, en allumage externe, il est plus proche du n-hexane pur, mais la différence entre le n-decane pur et le n-hexane pur est très faible pour ce mode d'allumage. Le mélange 1 présente donc un comportement proche de celui du n-decane pur.

Le comportement obtenu expérimentalement par *Yang* et al. [47] pour des gouttes isolées de n-heptane, d'iso-octane et de n-hexadecane injectées dans une ambiance à haute température se retrouve ici. Lorsque les plus petits diamètres, la différence de comportement entre le n-heptane et l'hexadecane est la plus faible. Ensuite, le n-heptane demande beaucoup plus de temps pour s'allumer pour les plus grands diamètres. Il est également intéressant de noter que

l'iso-octane, malgré qu'il possède la même volatilité que le n-heptane, requiert également plus de temps car son taux de réaction est plus faible.

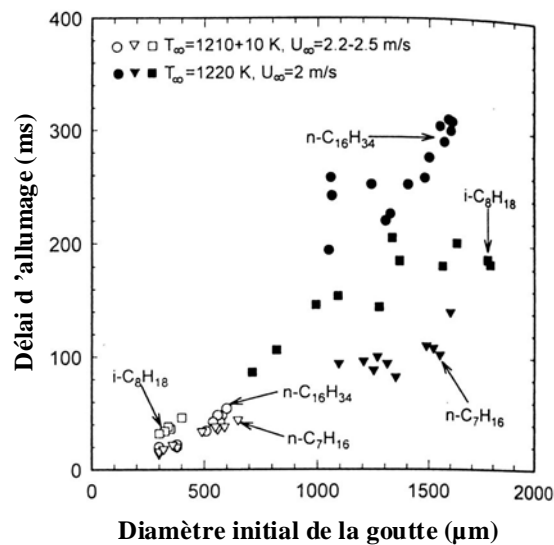


Figure 7.9 : Délai d'allumage pour différents composants purs en fonction du diamètre initial de la goutte [47]

Ces iso-alcanes moins réactifs sont très présents dans la composition du kérosène et pourraient rendre plus délicat l'allumage du nuage. Un iso-alcane est maintenant ajouté à cette étude. Il s'agit de l'iso-alcane de substitution remplaçant la totalité des iso-alcanes à dix atomes de carbone. Il s'appellera « iso-decane » dans ce Chapitre et permettra donc de représenter l'ensemble des iso-alcanes du kérosène car, comme pour les n-alcanes, les iso-alcanes très volatiles sont en quantité trop faible pour réellement affecter l'allumage.

Le taux de réaction des iso-alcanes n'est toutefois pas connu. Pour que ce composant présente un taux de réaction plus faible que celui des n-alcanes, son expression du taux de réaction sera identique à celle du n-decane avec un facteur pré-exponentiel B divisé par deux. Il s'agira alors plus d'une étude qualitative que quantitative. Dans le Chapitre précédent, la proportion des n-alcanes dans l'ensemble des alcanes (n-alcanes + iso-alcanes) était d'environ 34%. Un mélange n-decane 34% - iso-decane 66% est également étudié. Les délais d'allumage ainsi obtenus pour l'iso-decane et ce mélange sont comparés (Figure 7.10) à ceux du n-decane et du mélange 1, représentatif de l'ensemble des n-alcanes du kérosène.

L'iso-decane pur s'allume bien plus difficilement que le n-decane pur. Même si son délai d'allumage est réduit par l'ajout de n-decane, il reste bien au-dessus de celui du n-decane pur et du mélange 1. La présence des iso-alcanes dans le kérosène réduit donc la capacité d'allumage de ce carburant.

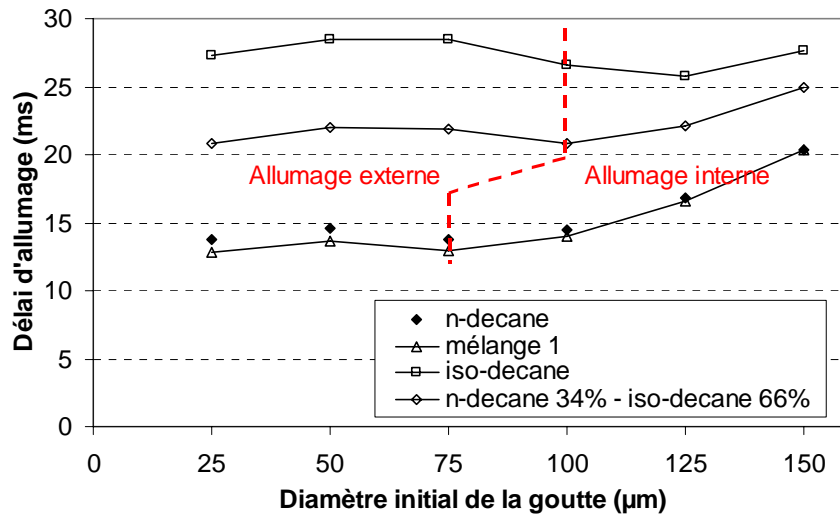


Figure 7.10 : Délai d'allumage du nuage en fonction du diamètre initial des gouttes pour différentes compositions du liquide

7.2.4 Influence de la température initiale du gaz

La température du gaz a une influence notable sur l'allumage puisqu'elle favorise la réaction chimique. L'allumage du nuage de gouttes est donc analysé avec plusieurs compositions pour des températures initiales du gaz variant de 800 à 1200K.

Les conditions initiales du nuage sont toujours présentées dans la partie 7.2.1 :

- la pression ambiante est de 10atm
- le rayon initial du nuage est de 1cm
- le diamètre initial des gouttes est de 100μm
- la température initiale des gouttes est de 300K
- le nombre de gouttes est ajusté aux proportions stœchiométriques.

Pour une température initiale du gaz inférieure à 950K, l'allumage devient externe car l'évaporation refroidit trop le nuage pour que l'allumage ait lieu à l'intérieur. La Figure 7.11 montre bien la grande influence de la température initiale du gaz sur l'allumage du nuage de gouttes. Lorsque cette température est inférieure à 1000K, le délai d'allumage croît de façon exponentielle, alors qu'au dessus de 1000K ce délai tend à converger.

Pour une meilleure analyse de l'influence de la composition, le pourcentage de réduction du délai d'allumage par rapport au n-decane pur est tracé sur la Figure 7.12 pour les différentes compositions. La présence d'un composant volatile réduit fortement ce délai lorsque la température du gaz augmente puisqu'il est quasiment divisé par deux pour le n-hexane pur dans un nuage à 1200K. Par contre, il est à peine réduit de 10% dans un nuage à 800K. En ce qui concerne le mélange 1 représentatif du groupe de n-alcanes du kérosène, son délai d'allumage est encore une fois proche de celui du n-decane pur.

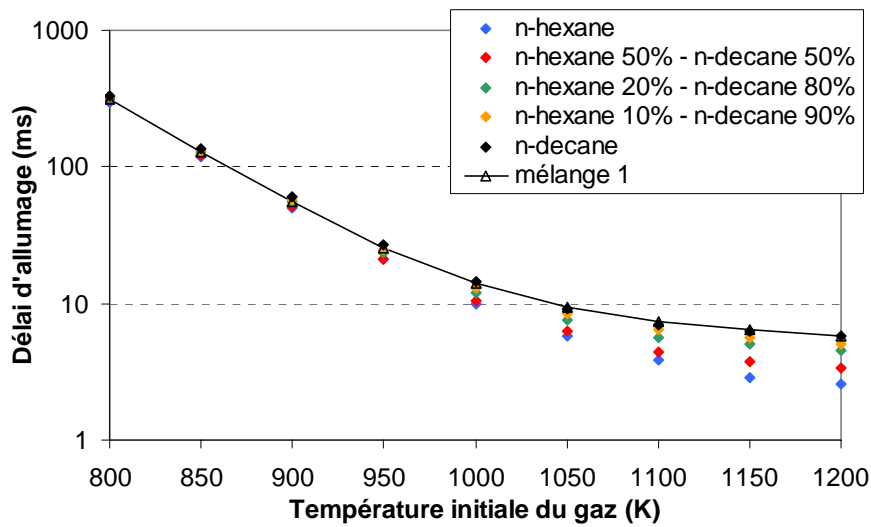


Figure 7.11 : Délai d'allumage du nuage en fonction de la température initiale de l'air pour différentes compositions du liquide

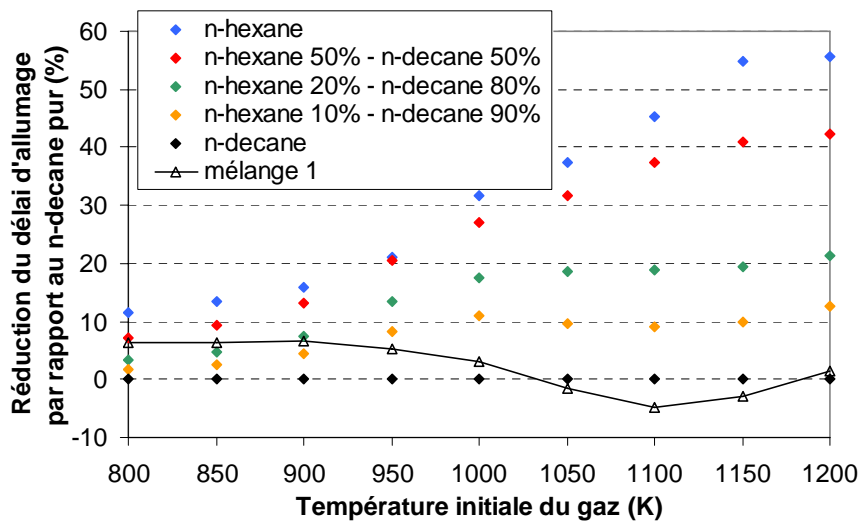


Figure 7.12 : Pourcentage de réduction du délai d'allumage du nuage par rapport au n-decane pur en fonction de la température initiale de l'air pour différentes compositions du liquide

L'iso-decane pur et le mélange n-decane 34% - iso-decane 66% sont également comparés au n-decane pur et au mélange 1. Si pour des températures initiales du gaz élevées les délais d'allumage sont identiques, ceux de l'iso-decane pur et du mélange n-decane 34% - iso-decane 66% augmentent pour des températures plus faibles (Figure 7.13 et Figure 7.14). Dans ces conditions d'allumage difficiles, la présence des iso-alcane dans le kérosène rend donc l'allumage délicat.

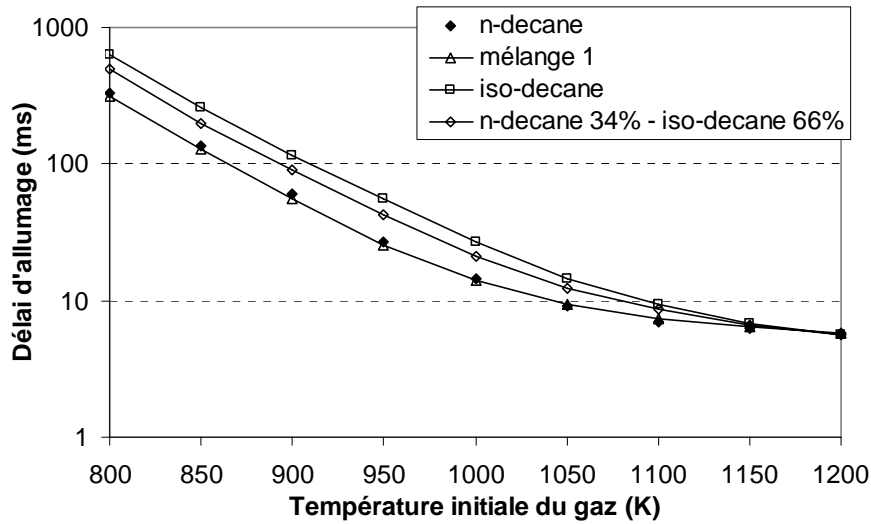


Figure 7.13 : Délai d'allumage du nuage en fonction de la température initiale de l'air pour différentes compositions du liquide

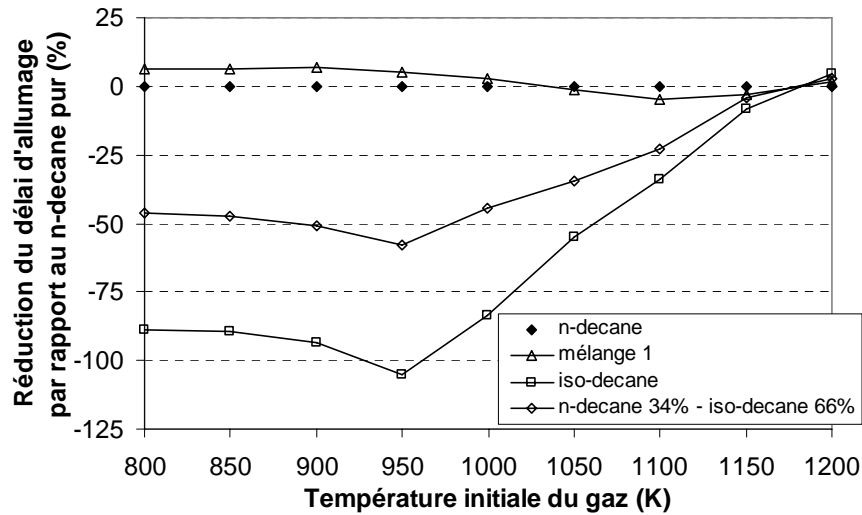


Figure 7.14 : Pourcentage de réduction du délai d'allumage du nuage par rapport au n-decane pur en fonction de la température initiale de l'air pour différentes compositions du liquide

Remarque : sur la Figure 7.14, un pourcentage négatif de réduction du délai d'allumage signifie que ce délai est augmenté, et non réduit.

7.2.5 Influence de la richesse

L'influence de la richesse est maintenant analysée toujours dans les mêmes conditions :

- la température initiale du gaz est de 1000K
- la pression ambiante est de 10atm
- le rayon initial du nuage est de 1cm
- le diamètre initial des gouttes est de 100µm
- la température initiale des gouttes est de 300K.

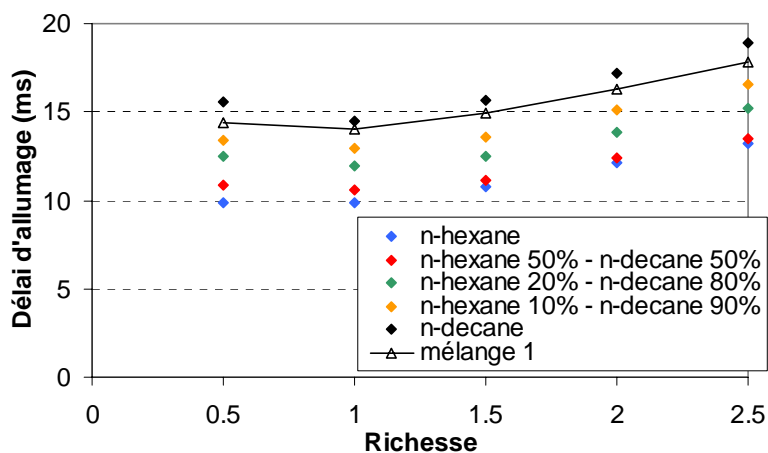


Figure 7.15 : Délai d'allumage du nuage en fonction de la richesse pour différentes compositions du liquide

Le délai d'allumage est minimal à la stœchiométrie pour toutes les compositions étudiées (Figure 7.15). La quantité de vapeur fournie au gaz par les gouttes augmente logiquement avec la richesse. Cependant, le refroidissement du gaz durant les premiers instants croît également. La stœchiométrie présente donc le meilleur compromis entre quantité de vapeur et refroidissement du nuage pour le délai d'allumage.

Pour toutes les richesses étudiées, l'influence de la composition est quasiment la même. Le mélange 1, représentatif du groupe de n-alcane du kérosène, présente encore une fois des délais d'allumage proches de ceux du n-decane pur. L'ajout d'iso-alcane augmente là encore le délai d'allumage (Figure 7.16).

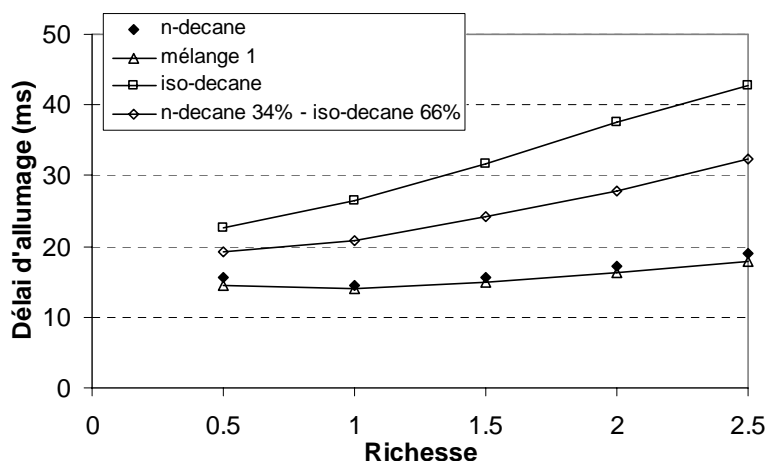


Figure 7.16 : Délai d'allumage du nuage en fonction de la richesse pour différentes compositions du liquide

7.3 Allumage et propagation de la flamme dans un brouillard de gouttes multi-composants

L'allumage et la propagation de la flamme dans le nuage de gouttes (Figure 7.17) sont étudiés dans les conditions atmosphériques au sol et en altitude. L'allumage est obtenu grâce à la décharge d'une bougie (Figure 7.17 à gauche). Cette dernière est simulée grâce à un terme source au centre du nuage d'une puissance de 10 000W pendant 40 μ s sur un rayon de 5mm. Le rayon initial du nuage est de 5cm et le diamètre initial gouttes est de 50 μ m. Le nombre de gouttes est ajusté pour obtenir la stœchiométrie. La température initiale des gouttes est égale à celle du gaz.

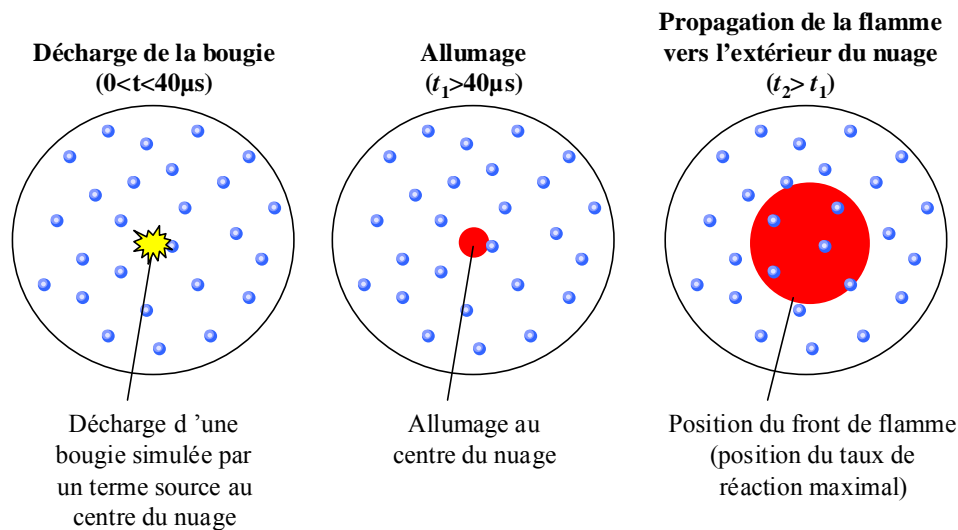


Figure 7.17 : Allumage et propagation de la flamme dans le nuage de gouttes

7.3.1 Allumage au sol

L'allumage et la propagation de la flamme dans nuage sont comparés pour différentes compositions dans les conditions atmosphériques au sol (290K et 1atm). Les compositions étudiées sont les suivantes :

- le n-hexane pur
- le n-decane pur
- le mélange 1 présenté dans la partie précédente, représentatif de l'ensemble des n-alcanes du kérosène
- l'iso-decane pur
- le mélange n-decane 34% - l'iso-decane 66%.

Pour chaque composition, le nuage s'allume en son centre et la flamme se propage vers l'extérieur, sauf pour l'iso-decane qui s'allume puis s'éteint, la flamme ne se propageant pas.

La Figure 7.18 donne la position radiale où le taux de réaction est maximal dans le nuage montrant ainsi la position de la flamme (comme indiqué sur la Figure 7.17 à droite).

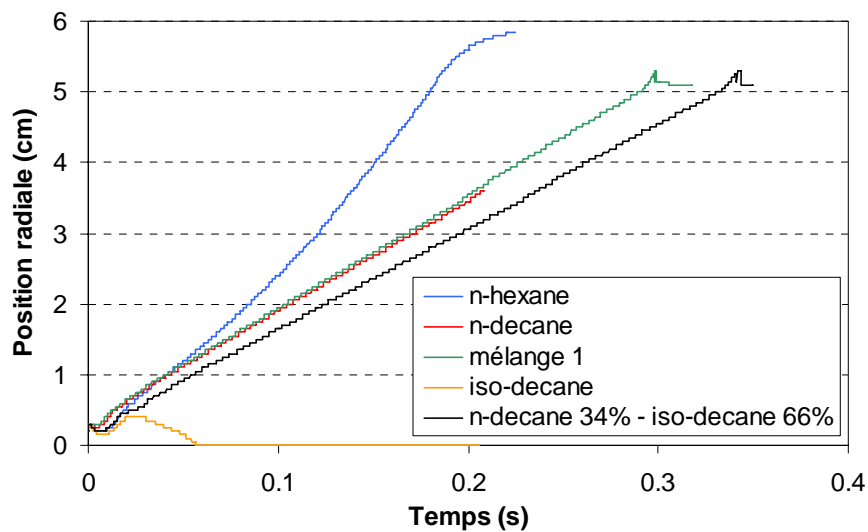


Figure 7.18 : Evolution de la position radiale du taux de réaction maximal dans le nuage pour les différentes compositions de la goutte

Lorsque les gouttes sont composées de n-hexane pur, composant très volatile, la flamme se propage bien plus rapidement dans le nuage, à la vitesse de 20cm/s au centre du nuage à 35cm/s au maximum. Cela s'explique par l'évaporation plus importante du n-hexane à faible température ambiante. En dehors de la flamme, la proportion de vapeur est donc plus importante, ce qui favorise la réaction chimique (Figure 7.19) et la propagation de la flamme. Le mélange 1 malgré la présence de composants volatiles se comporte exactement comme le n-decane pur (Figure 7.18), les taux de réactions étant identiques (Figure 7.19). Une fois encore, ce dernier composant peut remplacer l'ensemble des n-alcane du kérosène. La flamme se propage à la vitesse de 16cm/s pour ces deux compositions.

L'iso-decane pur s'allume mais la flamme ne se propage pas. L'ajout de n-decane permet de propager la flamme, qui progresse toutefois moins vite (14,5cm/s) que le n-decane pur et le mélange 1. La présence des iso-alcane dans le kérosène ralentit donc la progression de la flamme et pourrait éventuellement éviter sa propagation dans ces conditions plus défavorables.

Remarque : la discrétisation de l'espace implique une évolution en forme de « marche d'escalier » pour la position où la valeur du taux de réaction est maximale (Figure 7.18) ainsi des oscillations de cette valeur maximale du taux de réaction (Figure 7.19). Le calcul pour le n-decane pur (en rouge sur la Figure 7.18 et la Figure 7.19) a dû être arrêté pour un problème de convergence. C'est pour cette raison les résultats pour ce composant ne sont pas tracés jusqu'à l'extérieur du nuage.

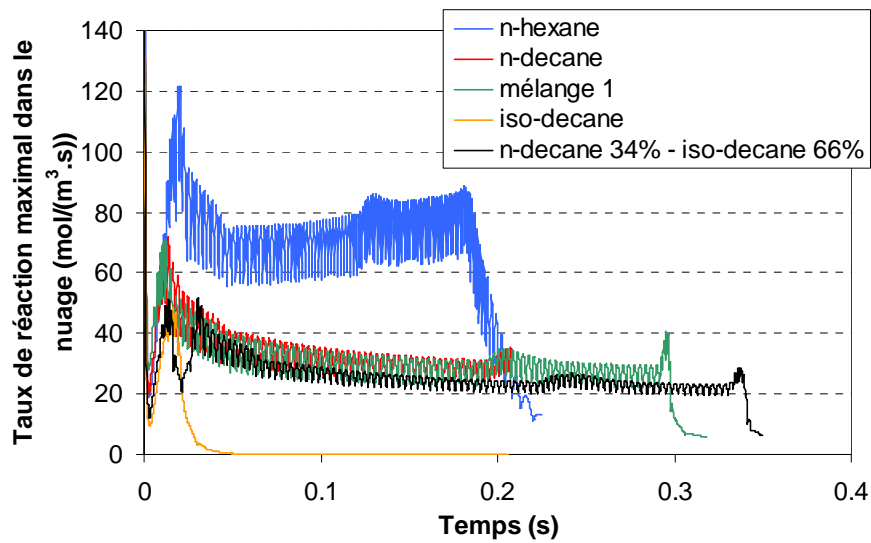


Figure 7.19 : Evolution de la valeur maximale du taux de réaction dans le nuage pour les différentes compositions de la goutte

7.3.2 Allumage en altitude

Le n-decane pur et le mélange n-decane 34% - l'iso-decane 66% sont testés dans des conditions atmosphériques à haute altitude (240K et 0,55atm) très défavorables à l'allumage du nuage et à la propagation de la flamme. Dans des conditions aussi difficiles, le modèle de combustion a éprouvé certaines difficultés et il a juste été possible de vérifier si l'allumage avait eu lieu au centre du nuage.

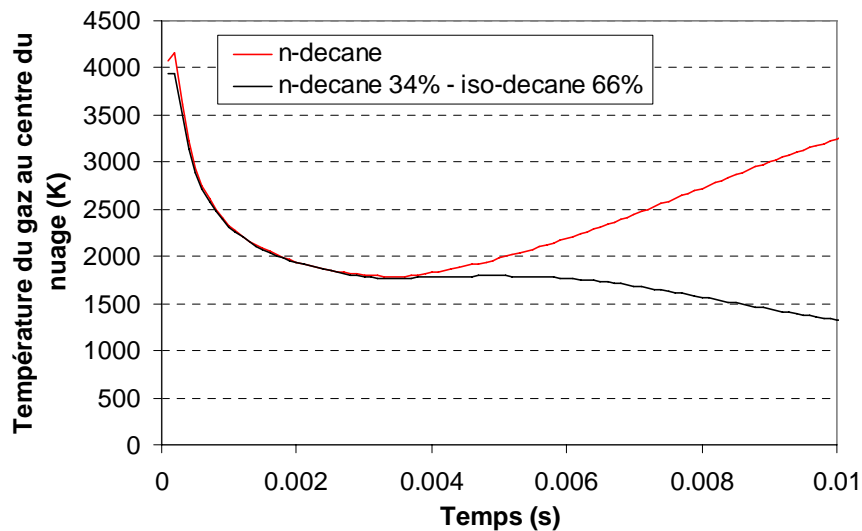


Figure 7.20 : Evolution temporelle de la température du gaz au centre du nuage

L'évolution temporelle de la température du gaz au centre du nuage est tracée sur la Figure 7.20. Après la décharge de la bougie, la température s'élève jusqu'à 4000K puis

diminue rapidement, l'évaporation et le chauffage des gouttes consommant de l'énergie. La proportion de vapeur augmente alors et permet une amorce d'allumage du nuage de n-decane. Par contre, le mélange de n-decane et d'iso-alcane n'est pas assez réactif pour engendrer l'allumage. Cela montre bien qu'il faut tenir compte de la présence des iso-alcane dans le kérosène car ils peuvent empêcher l'allumage d'un brouillard de gouttes dans des conditions défavorables.

7.4 Conclusion

Les modèles d'évaporation de gouttes multi-composants ont été intégrés dans un modèle de combustion d'un nuage de gouttes. L'auto-allumage de ce nuage a été étudié pour différentes compositions du liquide. Il a d'abord été montré que le délai d'allumage, représentatif de la faculté du nuage à s'allumer, est peu affecté par l'hypothèse d'uniformité de la composition de la goutte. Au contraire, une température uniforme sous-estime le débit de vapeur et retarde l'allumage.

Le délai d'allumage peut être diminué par la présence d'un composant très volatile dans la composition de la goutte. Ces composants ne sont toutefois pas en proportion suffisante dans le kérosène pour que mélange de n-alcanes (représentatif de l'ensemble de n-alcanes du kérosène) s'allume plus vite que le n-decane pur. Par contre les iso-alcanes, dont le taux de réaction est plus faible que celui des n-alcanes, retardent significativement le délai d'allumage. Leur présence dans la composition du kérosène peut donc affecter l'allumage, la propagation et la stabilité de la flamme.

L'allumage au centre du nuage, généré par la décharge d'une bougie, et la propagation de la flamme sont ensuite testés dans des conditions atmosphériques au sol. Les composants volatiles favorisent la propagation de la flamme, mais ils ne sont pas en proportion suffisante dans le kérosène pour affecter le comportement du mélange de n-alcanes (représentatif de l'ensemble de n-alcanes du kérosène) qui se comporte exactement comme le n-decane pur. Par contre, la présence des iso-alcanes, moins réactifs, ralentissent la propagation de la flamme. Dans des conditions atmosphériques en altitude, le n-decane pur s'allume, contrairement au mélange de n-decane et d'iso-decane.

Il découle de cette étude que :

- ❑ l'hypothèse d'une composition uniforme dans la goutte peut être appliquée, mais les gradients de température doivent être considérés,
- ❑ dans un groupe de composants, si les composants les plus volatiles sont en faible quantité, ils peuvent être négligés et le groupe peut être représenté par le composant majoritaire de ce groupe,
- ❑ les composants de nature différente ne présentent pas des comportements similaires en combustion, chaque groupe de composants doit alors être considéré.

Le kérosène peut être représenté par ses composants majoritaires dans chaque groupe :

- ❑ 26,47% de n-decane
- ❑ 51,53% de $C_{10}H_{22}$ iso-alcane de substitution
- ❑ 12,2% de C_9H_{12} alkylbenzène de substitution (ou de 1,2,4-triméthylbenzène)

- 9,8% de C_9H_{18} cyclo-alcane de substitution (ou de n-propylcyclohexane).

CONCLUSION GENERALE & PERSPECTIVES

Ce mémoire présente une étude numérique et expérimentale sur l'évaporation de gouttes multi-composants. L'objectif de ces travaux était de modéliser l'évaporation de gouttes de carburants en considérant leur caractère multi-composants de tels liquides afin de mieux simuler l'évaporation et la combustion d'un spray dans les chambres de combustion.

Une étude bibliographique a permis de faire le point sur les nombreux modèles d'évaporation existants. Leur comparaison avec les différentes mesures expérimentales prouve que ces modèles sont aptes à prévoir correctement l'évolution de la taille de la goutte lorsqu'elle s'évapore dans un milieu à faible température. Ces mesures montrent également qu'il est nécessaire de tenir compte de l'aspect multi-composants des gouttes dont le comportement en évaporation ne peut être reproduit par un liquide mono-composant.

Une expérience développée pour mesurer l'évolution de la taille et de la température d'un jet de gouttes mono-composants a été utilisée pour des gouttes bi-composants s'évaporant dans un milieu à haute température. Toutefois, la mesure de la température n'a pas été possible. Pour cela, une nouvelle technique de mesure développée par le LEMTA de Nancy a permis de mesurer, pour la première fois, l'évolution de la température moyenne de gouttes bi-composants lors d'une étude de faisabilité.

Les mesures de diamètre de gouttes bi-composants (éthanol / 1-butanol ou acétone / éthanol) en évaporation ont été effectuées le long d'une plaque chauffante. La distance entre gouttes a été augmentée grâce à un système de déviation de gouttes pour se rapprocher du cas de la goutte isolée. Les espèces liquides présentant des propriétés différentes, la composition du liquide influe sur la vitesse d'évaporation des gouttes. Des premières mesures de température de gouttes bi-composants (acétone / éthanol) ont également été effectuées. Elles ont d'abord été injectées dans un environnement à faible température (environ 20°C) puis dans un panache d'air chaud. La volatilité des composants influe beaucoup sur l'évolution de la température des gouttes. Plus la température d'ébullition est élevée, plus les températures atteintes sont importantes.

Les modèles présentés dans l'étude bibliographique ont ensuite été développés. Une amélioration du calcul de la composition de la vapeur à la surface de la goutte a été apportée au modèle à thermodynamique continue afin de mieux prévoir la vitesse d'évaporation des gouttes à faible température ambiante. Les propriétés physiques manquantes de nombreux

composants ont également été déterminées pour simuler l'évaporation de carburants avec une composition très détaillée.

Les résultats prévus par ces modèles ont ensuite été comparés aux mesures expérimentales. Les évolutions de la taille des gouttes étaient en bon accord et les modèles sont capables de prédire des constantes d'évaporation correctes pour les différents mélanges étudiés. En ce qui concerne la température des gouttes, les modèles ont également suivi les différentes décroissances de température lorsque les gouttes étaient injectées dans une ambiance à faible température. Il est toutefois difficile de comparer les résultats des gouttes injectées dans le panache d'air chaud, car la configuration expérimentale était difficilement modélisable (interactions entre gouttes, vapeur entraînée par le panache d'air chaud). Des écarts faisaient leur apparition pour les fortes évolutions temporelles de température observées expérimentalement.

Les propriétés physiques déterminées pour de nombreux composants ont permis de comparer les performances des différents modèles pour des carburants à la composition très détaillée.

Pour une évaporation à faible température ambiante, les hypothèses de température et de compositions uniformes dans la goutte sont tout à fait adaptées car les gradients sont négligeables dans la goutte. Grâce à l'amélioration apportée dans ces travaux au calcul de la composition à la surface de la goutte, les modèles à thermodynamique continue étaient quasiment aussi précis que les modèles à composants discrets, ces derniers étant plus complets mais beaucoup plus exigeants en temps de calcul.

Pour une température ambiante élevée, les hypothèses d'uniformité de la température et de la composition dans la goutte ne sont plus valables et il s'avère nécessaire de considérer les gradients dans la phase liquide. Il a toutefois été remarqué que des différences apparaissaient seulement pour les débits de vapeur pour les composants qui s'évaporaient en début de durée de vie de la goutte. Les modèles à composants discrets et à thermodynamique continue ont également prévu des résultats proches dans ces conditions.

Il a découlé de cette étude que, avec l'amélioration apportée, les modèles à thermodynamique continue sont aussi précis que les modèles à composants discrets tout en réduisant significativement le temps de calcul.

Les modèles à composants discrets ont finalement été implantés dans un modèle de combustion d'un nuage de gouttes.

Pour auto-allumer le nuage de gouttes, ce dernier est placé dans une ambiance à température et pression élevées et le délai d'allumage a été étudié. Il est d'abord apparu que l'hypothèse de composition uniforme dans les gouttes affecte très peu le délai d'allumage, contrairement à l'hypothèse de température uniforme qui le surestime. Ce délai d'allumage a ensuite été analysé en faisant varier la taille des gouttes, la température du gaz et la richesse. Plusieurs

compositions ont été testées et il est apparu que les n-alcanes très volatiles du kérosène sont en quantité insuffisante pour favoriser l'allumage de ce carburant par rapport au n-decane pur, composant souvent utilisé pour simuler l'évaporation du kérosène. Par contre, la présence des iso-alcanes, moins réactifs que les n-alcanes, a augmenté le délai d'allumage.

L'allumage, généré par la décharge d'une bougie, et la propagation de la flamme dans le nuage ont également été étudiés dans les conditions atmosphériques au sol. Malgré que la flamme se propage plus vite pour les n-alcanes volatiles purs que pour le n-decane pur, leur présence dans le kérosène n'a pas affecté l'allumage et la vitesse de propagation de la flamme par rapport au n-decane pur. Par contre, la présence des iso-alcanes dans le kérosène ralentit la propagation de la flamme dans le nuage. D'ailleurs, dans des conditions en altitude, la présence de ces iso-alcanes n'ont pas permis l'allumage du nuage alors qu'il a été obtenu pour le n-decane pur.

Cette dernière partie a donc montré que les espèces très volatiles du kérosène ne favorise pas significativement l'allumage du spray, mais que la présence de composants moins réactifs comme les iso-alcanes peut être défavorable à l'allumage. Le kérosène peut ainsi être représenté par les espèces majoritaires de chaque groupe de composants.

Perspectives

Le travail effectué durant cette thèse a apporté de nouvelles validations expérimentales pour l'évolution de la taille des gouttes ainsi que des premières mesures de température effectuées lors d'un stage au LEMTA de Nancy. Cette coopération entre le LEMTA et l'ONERA-DMAE a été effectuée dans le cadre d'un Projet Fédérateur Aérospatial qui a débuté en janvier 2005 pour une durée de 4 ans. Ce programme, impliquant trois laboratoires du CNRS et trois départements de l'ONERA, a pour objectif d'utiliser ou de développer des techniques expérimentales afin de mesurer l'évolution de la taille, de la température et de la composition des gouttes bi-composants en évaporation dans un jet monodisperse ou un spray polydisperse. Ces mesures permettront ainsi de valider et d'améliorer les modèles d'évaporation de gouttes multi-composants utilisés durant ces travaux.

Bruno Frackowiak [48], *Nicolas Garcia-Rosa* [49] et *Claire Laurent* [50] ont travaillé successivement sur une méthode d'estimation des gradients thermiques dans des gouttes mono-composants en coopération avec le CORIA de Rouen et le LEMTA de Nancy. Des résultats encourageants ont été obtenus et cette méthode sera améliorée et étendue au cas de gouttes bi-composants durant la thèse de *Claire Laurent* dans le cadre de ce projet. La technique de mesure de température de gouttes bi-composants par LIF trois couleurs est également en cours d'amélioration au LEMTA, où une technique de mesure de composition de gouttes bi-composants sera prochainement développée.

L'évaporation de gouttes multi-composants fait l'objet de nombreux travaux depuis de plusieurs années. Les applications en combustion restent toutefois moins étudiées. Il est pourtant primordial de connaître l'influence des différentes espèces sur le comportement des carburants en régime de combustion. Dans ces travaux, il a été remarqué numériquement que les composants très volatiles sont en quantité insuffisante dans le kérosène pour favoriser significativement l'allumage de ce carburant par rapport au n-decane pur, et qu'il faut par contre considérer les composants de nature différente. Ce constat demande à être validé expérimentalement. L'influence de la composition sur la production des émissions polluantes pourrait également être analysée. Un autre sujet où il est nécessaire de tenir compte de l'aspect multi-composants des carburants est le ré-allumage en haute altitude. Il a été montré dans ces travaux qu'il faut considérer la présence des composants moins réactifs que les n-alcanes car ils rendent l'allumage encore plus difficile à obtenir.

D'un point de vue numérique, les modèles du calcul de taux de réaction pour chaque composant lorsque la vapeur est composée de plusieurs espèces manquent également, tout comme une cinétique détaillée des différentes espèces des carburants. Il est également nécessaire de s'intéresser au caractère multi-composants des gouttes en régime de combustion.

Enfin ces travaux de modélisation montrant l'influence des propriétés de chaque composant sur l'allumage et la propagation de la flamme pourront être appliqués pour l'élaboration de carburants alternatifs, recherche qui sera conduite dans le cadre du pôle de compétitivité.

ANNEXE A : PROPRIETES PHYSIQUES

A.1 Détermination des propriétés physiques

A.1.1 Coefficients de diffusion

Coefficient de diffusion binaire pour des gaz à basse pression

Fuller, Schettler et Giddings [51,52] ont proposé la corrélation suivante (exprimée en cm²/s) pour des composants A et B :

$$D_{AB} = \frac{10^{-3} T^{1,75} [(M_A + M_B)/M_A M_B]^{1/2}}{P [(\sum v)_A^{1/3} + (\sum v)_B^{1/3}]^2} \quad (\text{A.1})$$

où P est exprimée en atmosphères, T en Kelvin et M en g/mol. Pour déterminer $\sum v$, les valeurs des volumes de diffusion atomique sont données ci-dessous.

Atomes	Volume de diffusion atomique v
C	16,5
H	1,98
O	5,48
	Volume de diffusion pour des molécules simples $\sum v$
Air	20,1

Tableau A.1 : Valeurs des volumes de diffusion atomiques

Coefficients de diffusion pour les gaz multi-composants

La loi de *Blanc* [53] donne le coefficient de diffusion de l'espèce i dans un mélange gazeux :

$$D_{i,g} = \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}} \frac{x_j}{D_{ij}} \right)^{-1} \quad (\text{A.2})$$

Le coefficient de diffusion D_{ij} est déterminé grâce à la corrélation de *Fuller* et al. (équation (A.1))

Coefficients de diffusion binaire dans les liquides

Dans les liquides, la densité moléculaire sont plus importantes tout comme le champ de force des molécules voisines, d'où une diffusion plus faible pour les liquides que celle des gaz à basse pression.

Le coefficient de diffusion D_{AB}^0 du soluté A à très faible concentration dans un solvant B est donné (en cm²/s) par *Scheibel* [54] :

$$D_{AB}^0 = \frac{K'T}{\mu_B V_{bA}^{1/3}} \quad (\text{A.3})$$

où V_b est le volume molaire à la température d'ébullition en cm³/mol, et la viscosité μ est exprimée en cPois.

K' est déterminé par :

$$K' = 8,2 \cdot 10^{-8} \left[1 + \left(\frac{3V_{bB}}{V_{bA}} \right)^{2/3} \right] \quad (\text{A.4})$$

sauf si $V_{bA} < 2,5 V_{bB}$. Dans ce cas, il faut prendre $K' = 17,5 \cdot 10^{-8}$.

Pour tenir compte de l'influence de la concentration sur le coefficient de diffusion binaire, un facteur de correction α est apporté par *Vignes* :

$$D_{AB} = \alpha \left[(D_{AB}^0)^{x_B} (D_{BA}^0)^{x_A} \right] \quad (\text{A.5})$$

Cette corrélation a été dérivée pour donner :

$$D_{AB} \mu = \left[(D_{AB}^0 \mu_B)^{x_B} (D_{BA}^0 \mu_A)^{x_A} \right] \quad (\text{A.6})$$

Coefficient de diffusion dans les liquides multi-composants

Perkins et Geankoplis [55] ont proposé une relation simple pour la diffusion d'un composant à faible concentration dans un mélange liquide :

$$D_{Am}^0 \eta_m^{0,8} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq A}}^n x_j D_{Aj}^0 \eta_j^{0,8} \quad (\text{A.7})$$

A.1.2 Viscosité

Viscosité des gaz à basse pression

Reichenberg [56] a suggéré la relation suivante pour la viscosité η (en μ Pois) d'un gaz à basse pression :

$$\mu = \frac{a^* T_r}{[1 + 0,36 T_r (T_r - 1)]^{1/6}} \quad (\text{A.8})$$

$$\text{avec } T_r = \frac{T}{T_c} \text{ et } a^* = \frac{M^{1/2} T_c}{\sum_i n_i C_i} \quad (\text{A. 9})$$

où T_c est la température critique en Kelvin et la masse molaire M est exprimée en g/mol. N_i est le nombre de groupes atomiques du i -ème type et les groupes de contributions C_i sont présentés dans le tableau ci-dessous.

Atome de carbone	Groupes de contributions C_i
En dehors d'un anneau	
CH ₃ + 1 liaison simple	9,04
CH ₂ + 2 liaisons simples	6,47
CH + 3 liaisons simples	2,67
C + 4 liaisons simples	-1,53
Dans un anneau	
CH ₂ + 2 liaisons simples	6,91
CH + 3 liaisons simples	1,16
C + 4 liaisons simples	0,23
CH + 1 liaison aromatique	5,9
C + 1 liaison aromatique + liaison simple	3,59

Tableau A.2 : Valeurs des groupes de contributions C_i

Viscosité des mélanges de gaz à basse pression

Wilke [57] propose la relation suivante pour la viscosité du mélange de gaz :

$$\mu_g = \sum_i \frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j \phi_{i,j}} \quad (\text{A.10})$$

$$\text{avec } \phi_{i,j} = \frac{\left[1 + (\mu_i/\mu_j)^{1/2} (M_j/M_i)^{1/4}\right]^2}{\left[8(1 + M_i/M_j)\right]^{1/2}} \quad (\text{A.11})$$

Viscosité des liquides purs

La viscosité (en cPoises) pour un liquide pur s'écrit sous la forme suivante :

$$\log(\mu) = \text{Vis}b \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{\text{Vis}t0} \right) \quad (\text{A.12})$$

où *Visb* et *Vis*t0 sont des coefficients déterminés à partir de résultats expérimentaux. Si ces coefficients ne sont pas connus, il est nécessaire d'utiliser la méthode de *Van Velzen, Cardozo* et *Langenkamp* [58] pour les alcanes et les naphènes :

$$\log(\mu_i) = B \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \quad (\text{A.13})$$

où B et T_0 sont des coefficients dépendant de la structure moléculaire du composant. Pour les aromatiques, la méthode de *Orrick et Erbar* [59] :

$$\mu_l = 10^{-3} \rho_l(20^\circ C) M \exp\left(n + \frac{275 + n + 20na}{T}\right) \quad (\text{A.14})$$

où n désigne le nombre d'atomes de carbone et na le nombre d'anneaux.

Viscosité des mélanges liquides

Grundberg et Nissan [60,61] proposent une méthode de calcul de viscosité du mélange de liquide à basse température :

$$\ln(\mu_l) = \sum_i x_{i,l} \ln \mu_{i,l} \quad (\text{A.15})$$

$\eta_{i,l}$ est déterminé grâce à l'équation (A.12).

A.1.3 Conductivité thermique

Conductivité thermique d'un gaz

La conductivité thermique λ d'un gaz s'écrit (en cal/(cm.s.K)) par *Roy-Todos* [62,63] :

$$\lambda\Gamma = (\lambda\Gamma)_{tr} + (\lambda\Gamma)_{int} \quad (\text{A.16})$$

avec :

$$\begin{aligned} \Gamma &= T_c^{1/6} M^{1/2} / P_c^{2/3} \\ (\lambda\Gamma)_{tr} &= 99,6 \cdot 10^{-6} \left(e^{0,0464T_r} - e^{-0,2412T_r} \right) \\ (\lambda\Gamma)_{int} &= Cf(T_r) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

C est spécifique pour chaque composant et est estimé par une technique de contribution de groupes. $F(T_r)$ est une relation spécifique pour chaque type de composant (Tableau A.3).

	$f(T_r)$
Hydrocarbures saturés	$-0,152T_r + 1,191T_r^2 - 0,039T_r^3$
Aromatiques et naphthènes	$-0,354T_r + 1,501T_r^2 - 0,147T_r^3$
Alcools	$1,000T_r^2$
Aldehydes, ketones, ethers, esters	$-0,082T_r + 1,045T_r^2 + 0,037T_r^3$

Tableau A.3 : Equations $f(T_r)$ pour la méthode de *Roy-Todos*

Conductivité thermique d'un mélange de gaz

Wassiljewa [64] propose une relation permettant de calculer la conductivité thermique du mélange, similaire à celle utilisée pour la viscosité du mélange gazeux :

$$\lambda_g = \sum_i \frac{x_i \lambda_i}{\sum_j x_j A_{ij}} \quad (\text{A.18})$$

$$A_{ij} = \frac{1,065 \left(1 + \left(\lambda_{tr_i} / \lambda_{tr_j}\right)^{1/2} \left(M_i / M_j\right)^{1/4}\right)^2}{\left[8 \left(1 + M_i / M_j\right)\right]^{1/2}} \quad (\text{A.19})$$

λ_{tr} est la conductivité thermique pour une molécule mono-atomique, dont le rapport, pour deux composants est donnée en fonction de la masse molaire et de la viscosité de chacun des composants :

$$\frac{\lambda_{tr_i}}{\lambda_{tr_j}} = \frac{\mu_i}{\mu_j} \frac{M_j}{M_i} \quad (\text{A.20})$$

Les équations (A.18), (A.19) et (A.20) donnent :

$$A_{ij} = 1,065 \phi_{ij} \quad (\text{A.21})$$

Conductivité thermique des liquides purs

Robbins et Kingrea [65] proposent de déterminer la conductivité thermique (en cal/(cm s K)) d'un liquide pur par :

$$\lambda_l = \frac{(88,0 - 4,94H)(10^{-3})}{l_{vb}/T_b + R \ln(273/T_b)} \left(\frac{0,55}{T_r}\right)^N C_p \rho_l \quad (\text{A.22})$$

Le paramètre H dépend de la structure moléculaire et N de la densité du liquide à 20°C.

Conductivité thermique d'un mélange liquide

La conductivité thermique du mélange de liquide est donnée par la relation de *Li* [66] :

$$\lambda_l = \sum_i \sum_j \phi_i \phi_j \lambda_{ij} \quad (\text{A.23})$$

$$\text{avec } \lambda_{ij} = 2 \left(\lambda_i^{-1} + \lambda_j^{-1}\right)^{-1} \quad (\text{A.24})$$

$$\text{et } \phi_i = \frac{x_i V_i}{\sum_j x_j V_j} \quad (\text{A.25})$$

A.1.4 Pression de vapeur de saturation

La pression de vapeur de saturation peut être exprimée (en mm de mercure) à l'aide de l'équation :

$$\ln(P_{sat}) = A - \frac{B}{T + C} \quad (\text{A.26})$$

où A , B et C sont les coefficients de l'équation de pression de vapeur d'Antoine [37]. Cependant, cette relation ne peut être utilisée que sur une plage de pression assez réduite. Il est préférable d'utiliser la relation de *Clausius-Clapeyron* qui est directement liée à la

température d'ébullition T_b et va donc gouverner l'évaporation de chaque composant présent dans le liquide. Pour un composant pur :

$$P_{sat} = P^\infty \exp \left[\frac{l_v M}{R} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{A.27})$$

$$T_b = \frac{l_{vb} M / R}{l_{vb} M / R T_{nb} - \ln(P^\infty)} \quad (\text{A.28})$$

où R est la constante universelle des gaz parfaits, P^∞ est la pression au loin (en atm). T_{nb} est la température normale d'ébullition à la pression atmosphérique (1atm) et T_b est la température d'ébullition à la pression P^∞ .

A.1.5 Enthalpie de vaporisation

La variation de la chaleur latente d'évaporation (en cal/mol) en fonction de la température est donnée par *Watson* [67] :

$$l_{v2} = l_{v1} \left(\frac{1 - T_{r2}}{1 - T_{r1}} \right)^{0,38} \quad (\text{A.29})$$

Il suffit de connaître la chaleur latente de vaporisation à la température normale d'ébullition pour obtenir :

$$l_v = l_{vb} \left(\frac{1 - T_r}{1 - T_{rb}} \right)^{0,38} \quad (\text{A.30})$$

l_{vb} est donnée par *Vetere* [68] :

$$l_{vb} = RT_c T_{br} \frac{0,4343 \ln P_c - 0,68859 + 0,89584 T_{br}}{0,37691 - 0,37306 T_{br} + 0,14878 P_c^{-1} T_{br}^{-2}} \quad (\text{A.31})$$

A.1.6 Chaleur spécifique

Cas d'un gaz idéal

La chaleur spécifique d'un gaz idéal est donnée en fonction de la température du gaz par la relation :

$$Cp_g = A + BT + CT^2 + DT^3 \quad (\text{A.32})$$

Les valeurs des coefficients A , B , C et D dépendent du gaz. Si les valeurs ne sont pas disponibles, il est possible de déterminer les valeurs de ces coefficients en utilisant la méthode *Benson* [69] qui donnent les valeurs de Cp_g pour les températures de 300, 400, 500, 600, 800 et 1000K. Cette méthode utilise des groupes de contribution en affectant une valeur (en cal/(mol.K)) pour chaque type d'atome de carbone. L'estimation de ces groupes de contribution étant complexe, il est préférable de se reporter à la référence [69].

Chaleur spécifique d'un mélange de gaz idéaux

La chaleur spécifique du mélange gazeux s'écrit :

$$Cp_g = \sum_i Y_{i,g} Cp_{i,g} \quad (\text{A.33})$$

$Cp_{i,g}$ est donné par l'équation (A.32) pour l'espèce i .

Chaleur spécifique des liquides purs

Rowlinson [70] utilise la méthode des états correspondants pour estimer la chaleur spécifique (en cal/mol) d'un liquide pur :

$$\frac{Cp_l - Cp^0}{R} = 2,56 + 0,436(1 - T_r)^{-1} + \omega [2,91 + 4,28(1 - T_r)^{1/3} T_r^{-1} + 0,296(1 - T_r)^{-1}] \quad (\text{A.34})$$

Cp^0 est la chaleur spécifique du gaz idéal donnée par l'équation (A.32) et R la constante du gaz parfait.

Chaleur spécifique d'un mélange liquide

La chaleur spécifique d'un mélange de liquides s'écrit de la même façon qu'un mélange gazeux :

$$Cp_l = \sum_i Y_{i,l} Cp_{i,l} \quad (\text{A.35})$$

$Cp_{i,l}$ est donné par l'équation (A.34) pour l'espèce i .

A.1.6 Masse volumique

Masse volumique d'un gaz pur

La masse volumique du gaz pur est déterminée à partir de l'équation du gaz parfait :

$$\frac{P}{\rho_g} = \frac{R}{M} T \quad (\text{A.36})$$

Masse volumique d'un mélange gazeux

La masse volumique d'un mélange gazeux est déterminée par l'égalité :

$$\rho_g = \left(\sum_i \frac{Y_{i,g}}{\rho_{i,g}} \right)^{-1} \quad (\text{A.37})$$

$\rho_{i,g}$ est déterminée grâce à l'équation (A.36).

Masse volumique d'un liquide pur

Pour un liquide saturé de masse molaire M , la masse volumique est entièrement déterminée si l'on connaît son volume molaire V . Une corrélation développée par *Yamada et Gunn* [71] s'écrit :

$$\begin{aligned} V &= V^{REF} Z_c \phi(T_r, T_r^{REF}) \\ Z_c &= 0,29056 - 0,08775\omega \\ \phi(T_r, T_r^R) &= (1 - T_r)^{2/7} - (1 - T_r^{REF})^{2/7} \end{aligned} \quad (A.38)$$

V^{REF} est le volume molaire de référence qui est donc déjà connu pour une température T^{REF} . Si aucune valeur n'est aucune, il est possible d'utiliser *Gunn et Yamada* [72] :

$$\frac{V}{V_{sc}} = V_r^{(0)}(1 - \omega\Gamma) \quad (A.39)$$

$$V_{sc} = \frac{RT_c}{P_c}(0,2920 - 0,0967\omega)$$

$$\text{avec : } V_r^{(0)} = 0,33593 - 0,33953T_r + 1,51941T_r^2 - 2,02512T_r^3 + 1,11422T_r^4 \quad (A.40)$$

$$\Gamma = 0,29607 - 0,09045T_r - 0,048842T_r^2$$

Masse volumique d'un mélange liquide

Pour un mélange liquide, la masse volumique s'écrit :

$$\rho_l = \sum_i Y_{i,l} \rho_{i,l} \quad (A.41)$$

A.2 Corrélations pour le modèle à thermodynamique Continue

Des corrélations dépendant souvent linéairement de la variable de distribution I ont été déterminées pour chaque propriété. Cette partie décrit la forme et l'utilisation de ces corrélations.

A.2.1 Hypothèse de calcul

Les propriétés pour un mélange j de vapeur ou de liquide doivent être calculées en intégrant les corrélations pour des composants purs avec la fonction de distribution. Par exemple, pour la chaleur spécifique du liquide dont la loi de mélange permet d'écrire :

$$x_{j,l}Cp_{j,l} = \sum_{i \in j} x_{i,l}Cp_{i,l} = \int_0^{\infty} x_{j,l}Cp_{j,l}(I)f_{j,l}dI \quad (\text{A.42})$$

$Cp_{j,l}$ variant linéairement avec la variable de distribution I :

$$Cp_{j,l}(I) = a_{Cp} + b_{Cp}I \quad (\text{A.43})$$

$$\text{donc } x_{j,l}Cp_{j,l} = x_{j,l}Cp_{j,l}(\theta_{j,l}) \quad (\text{A.44})$$

Ceci revient à considérer que, pour le calcul de cette propriété, le mélange liquide j a une masse molaire égale (respectivement température d'ébullition) à sa masse molaire (respectivement température d'ébullition) moyenne $\theta_{j,l}$. Or certaines lois de mélanges sont trop complexes (comme par exemple la conductivité thermique ou la viscosité) pour pouvoir être intégrées analytiquement comme il vient d'être effectué. L'ensemble des propriétés est donc calculé en supposant que le mélange j a θ_j pour masse molaire (respectivement température d'ébullition). Il est donc nécessaire que les variations de ces propriétés avec la variable de distribution I ne soient pas trop importantes pour que cette approximation reste valable.

A.2.2 Propriétés pondérées par les flux molaires

L'enthalpie de vaporisation est la moyenne des valeurs des différents composants pondérés par leur flux molaire (et non par leur concentration). Pour un groupe de composants j , l'enthalpie de vaporisation s'écrit :

$$l_{vj} = \Phi_{Hj}(a_{Hj} + b_{Hj}I) \quad (\text{A.45})$$

où Φ_{Hj} , a_{Hj} et b_{Hj} sont des fonctions ne dépendant que de la température dans la corrélation de l_{vj} .

L'enthalpie pour l'ensemble de la vapeur de fuel s'écrit :

$$\dot{N}l_v = \sum_j \dot{N}_j l_{v,j} = \sum_j \sum_{i \in j} \dot{N}_i l_{v,i} \quad (\text{A.46})$$

Pour un composant i :

$$\dot{N}x_{i,g}^s - c_g D_{i,g} \left. \frac{dx_{i,g}}{dr} \right|_{r=r_s} = \dot{N}_i \quad (\text{A.47})$$

Ce qui donne :

$$\dot{N}l_v = \sum_j \left[\int_0^\infty x_{j,g}^s f_{j,v}(I) \Big|_{r=r_s} \dot{N}l_{v,j}(I) dI - \int_0^\infty c_g D_{j,g}(I) l_{v,j}(I) \frac{\partial(x_{j,g} f_{j,v}(I))}{\partial r} \Big|_{r=r_s} dI \right] \quad (\text{A.48})$$

En substituant $l_{v,j}$, on trouve après calcul :

$$l_v = \sum_j \Phi_{Hj} \left\{ a_{Hj} \xi_j + \frac{b_{Hj}}{B_{m,j}} \left[x_{j,g}^s \theta_{j,v}^s (1 + B_{j,m}) - x_{j,g}^\infty \theta_{j,v}^\infty \right] \right\} \quad (\text{A.49})$$

Si $x_{j,g}^\infty = 0$ quelque soit j , alors cela devient :

$$l_v = \sum_j \xi_j \Phi_{Hj} \left[a_{Hj} + b_{Hj} \theta_{j,v}^s \right] \quad (\text{A.50})$$

On obtient une équation similaire pour Cp_v puisque : $Cp_{j,v} = a_{c_j} + b_{c_j} I$.

A.2.3 Corrélations utilisées

Les corrélations utilisées dans les modèles à thermodynamique continue dépendent linéairement de la variable de distribution I . Voici la forme de ces corrélations :

Pression de vapeur saturante

Pour la pression de vapeur saturante, si la variable de distribution est la masse molaire, la corrélation a la forme suivante :

$$P_{sat}(I) = P^\infty \exp\left(\frac{A + BI}{T}\right) \quad (\text{A.51})$$

avec :

$$\begin{aligned} A = & \left(a_{pv00} + a_{pv01} P^\infty + a_{pv02} P^{\infty 2} + a_{pv03} P^{\infty 3} \right) \\ & + \left(a_{pv10} + a_{pv11} P^\infty + a_{pv12} P^{\infty 2} + a_{pv13} P^{\infty 3} \right) T \\ & + \left(a_{pv20} + a_{pv21} P^\infty + a_{pv22} P^{\infty 2} + a_{pv23} P^{\infty 3} \right) T^2 \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

$$\begin{aligned}
B = & \left(b_{pv00} + b_{pv01}P^\infty + b_{pv02}P^{\infty 2} + b_{pv03}P^{\infty 3} \right) \\
& + \left(b_{pv10} + b_{pv11}P^\infty + b_{pv12}P^{\infty 2} + b_{pv13}P^{\infty 3} \right) I \\
& + \left(b_{pv20} + b_{pv21}P^\infty + b_{pv22}P^{\infty 2} + b_{pv23}P^{\infty 3} \right) I^2
\end{aligned} \quad (A.53)$$

Si la variable de distribution I est la température normale d'ébullition, elle s'écrit :

$$P_{sat,j}(I) = P^\infty \exp\left[\tau_j \left(s_{fg} / RT \right) (T - T_{b,j}(I))\right] \quad (A.54)$$

$$\text{avec } T_{b,j}(I) = \frac{I}{1 - \frac{\ln(P^\infty)}{s_{fg}/R}} \quad (A.55)$$

$$\text{et le coefficient correcteur } \tau_j = \tau_a + \tau_b P^\infty + \tau_c P^{\infty 2} \quad (A.56)$$

Température normale d'ébullition :

$$T_{nb} = T_{ba} + T_{bb} I \quad (A.57)$$

Température critique :

$$T_c = T_{ca} + T_{cb} I \quad (A.58)$$

Enthalpie de vaporisation :

$$l_v = (l_{vba} + l_{vbb} I) \left(\frac{T_{ca} + T_{cb} I - T}{T_c - T_{nb}} \right)^{0.38} \quad (A.59)$$

Densité molaire du liquide :

$$c_l = (c_{lA1} + c_{lA2} T) + (c_{lB1} + c_{lB2} T) I + (c_{lC1} + c_{lC2} T) I^2 \quad (A.60)$$

La densité molaire du liquide c_l est une corrélation du second ordre en fonction de la variable de distribution I car il faut une très bonne précision sur cette propriété. En effet, elle est utilisée pour calculer la décroissance de la taille de la goutte et une erreur peut entraîner une différence de 10% sur sa durée de vie en utilisant une corrélation du premier ordre.

Chaleur spécifique du liquide :

$$Cp_l = (Cp_{lA1} + Cp_{lA2} T) + (Cp_{lB1} + Cp_{lB2} T) I \quad (A.61)$$

Viscosité dynamique du liquide :

$$\log(\mu_l) = (Visb_1 + Visb_2 I + Visb_3 I^2) \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{Vis0_1 + Vis0_2 I + Vis0_3 I^2} \right) \quad (A.62)$$

Conductivité thermique du liquide :

$$\lambda_l = (\lambda_{lA1} + \lambda_{lA2}T + \lambda_{lA3}T^2) + (\lambda_{lB1} + \lambda_{lB2}T + \lambda_{lB3}T^2)I \quad (\text{A.63})$$

Densité molaire du mélange gazeux :

$$c_g = \frac{P}{RT} \quad (\text{A.64})$$

Remarque : c_g ne dépend pas de la composition.

Chaleur spécifique de la vapeur :

$$Cp_v = (Cp_{vA1} + Cp_{vA2}T + Cp_{vA3}T^2) + (Cp_{vB1} + Cp_{vB2}T + Cp_{vB3}T^2)I \quad (\text{A.65})$$

Viscosité dynamique de la vapeur :

$$\mu_v = (\mu_{vA1} + \mu_{vA2}T + \mu_{vA3}T^2) + (\mu_{vB1} + \mu_{vB2}T + \mu_{vB3}T^2)I \quad (\text{A.66})$$

Conductivité thermique de la vapeur :

$$\lambda_v = (\lambda_{vA1} + \lambda_{vA2}T + \lambda_{vA3}T^2) + (\lambda_{vB1} + \lambda_{vB2}T + \lambda_{vB3}T^2)I \quad (\text{A.67})$$

Volume de diffusion atomique pour le calcul du coefficient de diffusion dans la phase gazeuse :

$$\sum v = v_A + v_B I \quad (\text{A.68})$$

A.3 Propriétés physiques

Dans cette partie, les propriétés physiques de plusieurs composants ou groupes de composants seront données. Les coefficients sont présentés de la manière suivante pour les composants discrets :

M

$l_{vb} T_{nb} T_c$

$Cp_{vA} Cp_{vB} Cp_{vC}$ ($Cp_v = Cp_{vA} + Cp_{vB}.T + Cp_{vC}.T^2$ en J/(kg.K))

$\mu_{vA} \mu_{vB} \mu_{vC}$ ($\mu_v = \mu_{vA} + \mu_{vB}.T + \mu_{vC}.T^2$ en kg/(m.s))

$\lambda_{vA} \lambda_{vB} \lambda_{vC}$ ($\lambda_v = \lambda_{vA} + \lambda_{vB}.T + \lambda_{vC}.T^2$ en W/(m.s))

v (volume de diffusion atomique pour le calcul de la diffusion du composant dans la phase gazeuse)

$\rho_l A \rho_l B$ ($\rho_l = \rho_l A + \rho_l B.T$)

$Cp_l A Cp_l B$ ($Cp_l = Cp_l A + Cp_l B.T$)

$\lambda_l A \lambda_l B \lambda_l C$ ($\lambda_l = \lambda_l A + \lambda_l B.T + \lambda_l C.T^2$ en W/(m.s))

$Vis_b Vis_0$ (coefficients pour la viscosité du liquide)

Pour les groupes de composants utilisant la masse molaire comme variable de distribution, ils sont présentés dans cet ordre :

$a_{pv00} a_{pv01} a_{pv02} a_{pv03}$

$a_{pv10} a_{pv11} a_{pv12} a_{pv13}$

$a_{pv20} a_{pv21} a_{pv22} a_{pv23}$

$b_{pv00} b_{pv01} b_{pv02} b_{pv03}$

$b_{pv10} b_{pv11} b_{pv12} b_{pv13}$

$b_{pv20} b_{pv21} b_{pv22} b_{pv23}$

$l_{vba} l_{vbb} (T_c - T_{nb})^{0,38}$

$T_{ca} T_{cb} T_{ba} T_{bb}$

$Cp_{vA1} Cp_{vA2} Cp_{vA3} Cp_{vB1} Cp_{vB2} Cp_{vB3}$

$\mu_{vA1} \mu_{vA2} \mu_{vA3} \mu_{vB1} \mu_{vB2} \mu_{vB3}$

$\lambda_{vA1} \lambda_{vA2} \lambda_{vA3} \lambda_{vB1} \lambda_{vB2} \lambda_{vB3}$

$v_A v_B$

$c_{IA1} c_{IA2} c_{IB1} c_{IB2} c_{IC1} c_{IC2}$

$Cp_{lA1} Cp_{lA2} Cp_{lB1} Cp_{lB2}$

$\lambda_{lA1} \lambda_{lA2} \lambda_{lA3} \lambda_{lB1} \lambda_{lB2} \lambda_{lB3}$

$Vis_{b1} Vis_{b2} Vis_{b3} Vist_{01} Vist_{02} Vist_{03}$

Et pour les groupes de composants utilisant la température d'ébullition comme variable de distribution :

$M_a M_b$	(Masse molaire $M = M_a + M_b I$)
$\tau_a \tau_b \tau_c$	(Coefficients de correction pour la pression de vapeur saturante)
$l_{vba} l_{vbb} (Tc-Tb)^{0,38}$	
$T_{ca} T_{cb}$	
$Cp_{vA1} Cp_{vA2} Cp_{vA3} Cp_{vB1} Cp_{vB2} Cp_{vB3}$	
$\mu_{vA1} \mu_{vA2} \mu_{vA3} \mu_{vB1} \mu_{vB2} \mu_{vB3}$	
$\lambda_{vA1} \lambda_{vA2} \lambda_{vA3} \lambda_{vB1} \lambda_{vB2} \lambda_{vB3}$	
$v_A v_B$	
$c_{IA1} c_{IA2} c_{IB1} c_{IB2} c_{IC1} c_{IC2}$	
$C_{pIA1} C_{pIA2} C_{pIB1} C_{pIB2}$	
$\lambda_{IA1} \lambda_{IA2} \lambda_{IA3} \lambda_{IB1} \lambda_{IB2} \lambda_{IB3}$	
$Visb_1 Visb_2 Visb_3 Vist0_1 Vist0_2 Vist0_3$	

Remarque : la lettre « D » des coefficients présentés dans cette partie remplace le terme $\cdot 10^{\wedge}$

A.3.1 Composants discrets

n-alcanes

n-butane C₄H₁₀

058.124
 3.8489D+05 272.7 425.2
 01.4585D+02 05.7716D+00 -2.0170D-03
 -1.9748D-07 02.7354D-08 -5.4689D-12
 -4.1992D-03 02.6193D-05 01.2968D-07
 085.80
 09.3862D+02 -1.2339D+00
 06.3495D+02 06.2525D+00
 02.7473D-01 -7.1855D-04 05.2959D-07
 265.84 160.20

n-pentane C₅H₁₂

072.151
 03.5687D+05 309.2 469.6
 02.0889D+02 05.5182D+00 -1.8529D-03
 -3.6857D-07 02.5888D-08 -4.9248D-12
 -3.7981D-03 01.9580D-05 01.3129D-07
 106.26
 09.5679D+02 -1.1330D+00
 07.0431D+02 05.5081D+00
 02.7832D-01 -6.9716D-04 05.0674D-07
 313.66 182.48

n-hexane C₆H₁₄

086.178
 03.3449D+05 341.9 507.4

02.1439D+02 05.4863D+00 -1.8527D-03
-4.1068D-07 02.4126D-08 -4.3464D-12
-3.3236D-03 01.4608D-05 01.2547D-07
126.72
09.6703D+02 -1.0520D+00
07.6585D+02 05.0255D+00
02.8082D-01 -6.7657D-04 04.8041D-07
362.79 207.09

n-heptane C₇H₁₆

100.205
03.1603D+05 371.6 540.2
02.1801D+02 05.6135D+00 -1.8522D-03
-4.3965D-07 02.2776D-08 -3.9093D-12
-2.9889D-03 01.1310D-05 01.2114D-07
147.18
09.6924D+02 -9.7180D-01
08.3165D+02 04.8096D+00
02.8716D-01 -6.6559D-04 04.6156D-07
436.73 232.53

n-octane C₈H₁₈

114.232
03.0097D+05 398.8 568.8
02.1987D+02 05.4484D+00 -1.8556D-03
-4.4781D-07 02.1592D-08 -3.5436D-12
-2.6723D-03 08.7153D-06 01.1481D-07
167.64
09.7686D+02 -9.3040D-01
08.5967D+02 04.4404D+00
02.8324D-01 -6.4415D-04 04.4124D-07
473.70 251.71

n-nonane C₉H₂₀

128.259
02.8754D+05 424.0 594.6
-5.7432D+01 05.6605D+00 -2.0442D-03
-4.4538D-07 02.0550D-08 -3.2331D-12
-2.4359D-03 06.8136D-06 01.1002D-07
181.10
09.8041D+02 -8.8870D-01
07.7375D+02 04.0123D+00
02.5412D-01 -5.5343D-04 03.6486D-07
525.56 272.12

n-decane C₁₀H₂₂

142.286
02.7580D+05 447.3 617.6
02.2452D+02 05.4176D+00 -1.8536D-03
-4.3697D-07 01.9629D-08 -2.9702D-12
-2.2040D-03 05.2436D-06 01.0387D-07
208.56
09.8912D+02 -8.7640D-01
09.1440D+02 04.1244D+00
02.8367D-01 -6.1904D-04 04.0750D-07
558.61 288.37

n-undecane C₁₁H₂₄

156.313
02.6527D+05 469.1 638.8
02.2518D+02 05.4121D+00 -1.8552D-03
-4.2569D-07 01.8809D-08 -2.7430D-12
-2.0289D-03 04.0454D-06 09.9296D-08
229.02
09.9564D+02 -8.6220D-01
09.3288D+02 04.0193D+00
02.8378D-01 -6.0990D-04 03.9484D-07
605.50 305.01

n-dodecane C₁₂H₂₆

170.340
02.5594D+05 489.5 658.3
02.2645D+02 05.4039D+00 -1.8562D-03
-4.1296D-07 01.8076D-08 -2.5460D-12
-1.8675D-03 03.0558D-06 09.4511D-08
249.48
09.9512D+02 -8.7640D-01
09.3670D+02 03.9407D+00
02.7928D-01 -5.8675D-04 03.7271D-07
631.63 318.78

n-tridecane C₁₃H₂₈

184.367
02.4735D+05 508.6 675.8
02.2805D+02 05.3961D+00 -1.8556D-03
-3.9969D-07 01.7416^E-08 -2.3764D-12
-1.7489D-03 02.2869D-06 09.1133D-08
269.94
09.9564D+02 -8.6220D-01
09.6425D+02 03.8523D+00
02.7918D-01 -5.7768D-04 03.6165D-07
664.10 332.10

n-tetradecane C₁₄H₃₀

198.394
02.3977D+05 526.7 694.0
02.2857D+02 05.3892D+00 -1.8537D-03
-3.8640D-07 01.6815D-08 -2.2187D-12
-1.6237D-03 01.5885D-06 08.7141D-08
290.40
01.0033D+03 -8.0680D-01
09.8852D+02 03.7711D+00
02.8098D-01 -5.7771D-04 03.5803D-07
689.85 344.21

n-pentadecane C₁₅H₃₂

212.421
02.3259D+05 543.8 707.0
02.2930D+02 05.3844D+00 -1.8551D-03
-3.7363D-07 01.6275D-08 -2.0959D-12
-1.5353D-03 01.0921D-06 08.4102D-08
310.86
01.0064D+03 -7.9530D-01
09.8648D+02 03.7317D+00

02.7687D-01 -5.6072D-04 03.4231D-07
718.51 355.92

n-hexadecane C₁₆H₃₄

226.448
02.2594D+05 560.0 717.0
02.3044D+02 05.3799D+00 -1.8555D-03
-3.6178D-07 01.5795D-08 -1.9949D-12
-1.4627D-03 07.1173D-07 08.1376D-08
331.32
01.0051D+03 -7.7710D-01
09.8882D+02 03.6958D+00
02.7214D-01 -5.4459D-04 03.2967D-07
738.30 366.11

n-heptadecane C₁₇H₃₆

240.475
02.1971D+05 575.2 733.0
02.3096D+02 05.3759D+00 -1.8544D-03
-3.4971D-07 01.5323D-08 -1.8785D-12
-1.3497D-03 02.6339D-07 07.6946D-08
351.78
01.0121D+03 -7.8270D-01
09.9403D+02 03.6520D+00
02.7194D-01 -5.3992D-04 03.2223D-07
757.88 375.88

n-octadecane C₁₈H₃₈

254.502
02.1384D+05 589.5 745.0
02.3098D+02 05.3746D+00 -1.8550D-03
-3.3864D-07 01.4902D-08 -1.7853D-12
-1.2532D-03 -5.6224D-08 07.2732D-08
372.24
01.0118D+03 -7.6680D-01
09.9154D+02 03.6240D+00
02.6762D-01 -5.2290D-04 03.0753D-07
777.40 385.00

n-nonadecane C₁₉H₄₀

268.529
02.0843D+05 603.1 756.0
02.3177D+02 05.3700D+00 -1.8548D-03
-3.2824D-07 01.4514D-08 -1.7021D-12
-1.1742D-03 -3.1583D-07 06.9257D-08
392.70
01.0133D+03 -7.6094D-01
09.9844D+02 03.5885D+00
02.8828D-01 -5.5939D-04 03.2640D-07
793.62 393.54

n-eicosane C₂₀H₄₂

282.556
02.0326D+05 617.0 767.0
02.3622D+02 05.3611D+00 -1.8549D-03
-3.1830D-07 01.4152D-08 -1.6244D-12
-1.1578D-03 -5.6800D-07 06.9382D-08

413.16
01.0168D+03 -7.6250D-01
01.0257D+03 03.5410D+00
02.6764D-01 -5.1917D-04 03.0145D-07
811.29 401.67

n-heinecosane C₂₁H₄₄

296.583
02.0438D+05 629.2 776.2
01.0411D+02 05.8315D+00 -2.2215D-03
-3.0919D-07 01.3816D-08 -1.5576D-12
-1.1763D-03 -8.0622D-07 07.1419D-08
433.62
01.0223D+03 -7.6906D-01
01.0745D+03 03.4545D+00
02.6316D-01 -5.1368D-04 02.9799D-07
819.13 410.03

n-docosane C₂₂H₄₆

310.610
01.9657D+05 641.8 789.0
01.0424D+02 05.8301D+00 -2.2221D-03
-2.9968D-07 01.3495D-08 -1.4835D-12
-1.1150D-03 -1.0363D-06 06.8925D-08
454.08
01.0238D+03 -7.5862D-01
01.0645D+03 03.4411D+00
02.6519D-01 -5.1131D-04 02.9353D-07
832.87 418.20

n-tricosane C₂₃H₄₈

324.637
01.8903D+05 653.4 801.3
01.0435D+02 05.8288D+00 -2.2228D-03
-2.9062D-07 01.3195D-08 -1.4155D-12
-1.0635D-03 -1.2412D-06 06.6872D-08
474.54
01.0194D+03 -7.4216D-01
01.0529D+03 03.4308D+00
02.6445D-01 -5.0138D-04 02.8337D-07
846.61 426.36

n-tétracosane C₂₄H₅₀

338.664
01.8091D+05 664.5 813.7
01.0445D+02 05.8277D+00 -2.2234D-03
-2.8185D-07 01.2911D-08 -1.3512D-12
-1.0125D-03 -1.4245D-06 06.4745D-08
495.00
01.0151D+03 -7.2445D-01
01.0374D+03 03.4251D+00
02.6566D-01 -4.9622D-04 02.7738D-07
860.35 434.53

n-pentacosane C₂₅H₅₂

352.691
01.7222D+05 675.1 826.3

01.0445D+02 05.8267D+00 -2.2240D-03
-2.7334D-07 01.2642D-08 -1.2900D-12
-9.6172D-04 -1.5880D-06 06.2542D-08
515.46
01.0129D+03 -7.0691D-01
01.0180D+03 03.4235D+00
02.6848D-01 -4.9160D-04 02.7030D-07
874.09 442.69

iso-alcane

iso-butane (2-methylpropane) C₄H₁₀

058.124
03.6605D+05 261.3 408.1
01.5164D+02 05.7782D+00 -2.0071D-03
-1.1892D-07 02.8225D-08 -5.7450D-12
-4.6385D-03 02.8433D-05 01.3618D-07
085.80
09.2402D+02 -1.2593D+00
04.7811D+02 06.7275D+00
02.3093D-01 -5.8837D-04 04.1161D-07
302.51 170.20

iso-alcane C₅H₁₂ de substitution

072.151
03.2843D+05 291.8 447.1
01.4543D+02 05.8035D+00 -2.0136D-03
-2.7980D-07 02.6930D-08 -5.2512D-12
-4.2022D-03 02.1931D-05 01.3688D-07
106.26
09.5330D+02 -1.1927D+00
04.6218D+02 06.2284D+00
02.2397D-01 -5.3084D-04 03.5031D-07
361.02 193.95

iso-alcane C₆H₁₄ de substitution

086.178
03.1718D+05 331.0 497.6
01.4581D+02 05.7477D+00 -2.0363D-03
-4.0754D-07 02.5202D-08 -4.6034D-12
-3.7690D-03 01.6273D-05 01.3896D-07
126.72
09.6493D+02 -1.0527D+00
06.4647D+02 05.2900D+00
02.4329D-01 -5.6763D-04 03.9089D-07
414.48 219.07

iso-alcane C₇H₁₆ de substitution

100.205
02.9918D+05 359.6 531.4
01.8944D+02 05.6197D+00 -1.9759D-03
-4.4701D-07 02.3852D-08 -4.1493D-12
-3.3956D-03 01.2599D-05 01.3489D-07
147.18
09.8052D+02 -1.0034D+00
06.8488D+02 04.9918D+00
02.4214D-01 -5.4579D-04 03.6664D-07

452.45 236.52

iso-alcane C₈H₁₈ de substitution

114.232
02.8723D+05 386.7 561.8
02.0873D+02 05.4879D+00 -1.8886D-03
-4.6184D-07 02.2629D-08 -3.7557D-12
-3.0331D-03 09.7037D-06 01.2836D-07
167.64
09.9091D+02 -9.5640D-01
07.7193D+02 04.5768D+00
02.4257D-01 -5.4230D-04 03.6468D-07
506.47 256.34

iso-alcane C₉H₂₀ de substitution

128.259
02.7126D+05 410.2 587.04
06.1537D+01 06.0264D+00 -2.2796D-03
-4.6156D-07 02.1557D-08 -3.4346D-12
-2.7464D-03 07.5426D-06 01.2216D-07
181.10
01.0099D+03 -9.1770D-01
07.4868D+02 04.5336D+00
02.3628D-01 -5.0375D-04 03.2716D-07
535.46 272.02

iso-alcane C₁₀H₂₂ de substitution

142.286
02.5915D+05 433.0 608.6
02.2861D+01 06.1688D+00 -2.4002D-03
-4.5646D-07 02.0710D-08 -3.1821D-12
-2.5130D-03 05.8848D-06 01.1636D-07
208.56
01.0183D+03 -8.9460D-01
07.9922D+02 04.3411D+00
02.3490D-01 -4.9733D-04 03.2154D-07
568.76 286.31

iso-alcane C₁₁H₂₄ de substitution

156.313
02.4980D+05 435.6 589.8
07.4084D+01 05.9424D+00 -2.2594D-03
-4.1430D-07 01.9148D-08 -3.0186D-12
-2.5990D-03 06.1423D-06 01.1690D-07
229.02
01.1541D+03 -1.0601D+00
08.9377D+02 04.1170D+00
02.9677D-01 -6.6380D-04 04.4605D-07
564.55 284.70

iso-alcane C₁₃H₂₈ de substitution

170.340
02.5054D+05 459.0 612.5
07.6783D+01 05.9306D+00 -2.2576D-03
-4.0885D-07 01.8394D-08 -2.7910D-12
-2.3383D-03 04.7147D-06 01.0972D-07
249.48

01.1717D+03 -1.0435D+00
09.2326D+02 04.0040D+00
03.0281D-01 -6.6667D-04 04.4146D-07
594.25 297.17

iso-alcane C₁₄H₃₀ de substitution

198.394
02.4420D+05 518.5 674.6
08.1032D+01 05.9122D+00 -2.2548D-03
-3.9167D-07 01.7061D-08 -2.3195D-12
-1.7693D-03 02.0300D-06 09.2464D-08
290.40
01.1990D+03 -9.8450D-01
01.0022D+03 03.7684D+00
03.2085D-01 -6.7334D-04 04.2507D-07
648.63 319.71

iso-alcane C₁₅H₃₂ de substitution

212.421
02.3855D+05 563.0 689.8
08.2736D+01 05.9049D+00 -2.2535D-03
-3.7913D-07 01.6498D-08 -2.1822D-12
-1.6640D-03 01.4454D-06 08.9085D-08
310.86
01.2391D+03 -1.0026D+00
01.0209D+03 03.7041D+00
03.3128D-01 -6.8852D-04 04.2963D-07
673.29 329.91

iso-alcane C₁₆H₃₄ de substitution

226.448
02.3573D+05 559.3 712.8
08.4230D+01 05.8986D+00 -2.2525D-03
-3.6610D-07 01.5968D-08 -2.0238D-12
-1.5109D-03 07.5681D-07 08.3861D-08
331.32
01.2642D+03 -9.9980D-01
01.0445D+03 03.6321D+00
03.4068D-01 -6.9524D-04 04.2469D-07
696.25 339.46

Alcènes**alcène C₄H₈ de substitution**

056.108
04.0123D+05 271.0 425.4
02.1081D+02 04.9452D+00 -1.6764D-03
-2.0990D-07 02.9128D-08 -5.8221D-12
-2.2688D-02 01.0768D-04 03.6503D-10
081.84
09.7788D+02 -1.2846D+00
06.6378D+02 05.8005D+00
02.7975D-01 -7.4691D-04 05.6525D-07
262.12 155.60

alcène C₅H₁₀ de substitution

070.135
03.6388D+05 305.3 466.8
02.5328D+02 04.9716D+00 -1.6710D-03
-3.5336D-07 02.7233D-08 -5.1830D-12
-2.0240D-02 09.0832D-05 01.4101D-08
102.30
09.7730D+02 -1.1310D+00
07.4378D+02 05.1008D+00
02.7527D-01 -6.9935D-04 05.2229D-07
327.10 180.71

alcène C₆H₁₂ de substitution

084.162
03.3384D+05 335.4 508.3
02.1662D+02 05.0855D+00 -1.7428D-03
-4.3749D-07 02.5687D-08 -4.6219D-12
-1.7664D-02 07.5272D-05 02.4210D-08
122.76
09.8125D+02 -1.0450D+00
06.7048D+02 04.8494D+00
02.5331D-01 -5.9392D-04 04.1393D-07
347.99 198.20

alcène C₇H₁₄ de substitution

98.189
03.0482D+05 361.5 537.1
01.4996D+02 05.4448D+00 -2.0246D-03
-4.6345D-07 02.4288D-08 -4.1890D-12
-1.6102D-02 06.5803D-05 02.9628D-08
143.22
09.6707D+02 -9.5840D-01
09.3146D+02 05.1018D+00
02.9841D-01 -6.9881D-04 04.9308D-07
382.84 213.30

alcène C₈H₁₆ de substitution

112.216
02.8764D+05 386.7 563.8
01.3915D+02 05.5124D+00 -2.0690D-03
-4.7225D-07 02.3047D-08 -3.8132D-12
-1.4690D-02 05.7800D-05 03.3360D-08
163.68
09.8069D+02 -9.2400D-01
08.2066D+02 04.2337D+00
02.5196D-01 -5.7344D-04 03.9579D-07
407.62 222.92

1-nonène C₉H₁₈

126.243
02.8740D+05 420.0 592.0
02.4148D+02 05.1423D+00 -1.7701D-03
-4.5682D-07 02.1156D-08 -3.3429D-12
-1.2102D-02 04.6102D-05 03.3043D-08
184.14
09.8508D+02 -8.6240D-01
08.9113D+02 04.0570D+00

02.8242D-01 -6.2579D-04 04.2513D-07
471.00 258.92

1-decène C₁₀H₂₀

140.270
02.7535D+05 443.7 615.0
02.4194D+02 05.1593D+00 -1.7756D-03
-4.4755D-07 02.0155D-08 -3.0634D-12
-1.1202D-02 04.1228D-05 03.4721D-08
204.60
09.8522D+02 -8.2640D-01
09.2582D+02 03.9331D+00
02.8275D-01 -6.1305D-04 04.0854D-07
518.37 277.80

1-undecène C₁₁H₂₂

154.297
02.6468D+05 463.8 637.0
02.4161D+02 05.1745D+00 -1.7832D-03
-4.3563D-07 01.9270D-08 -2.8192D-12
-1.0057D-02 03.5777D-05 03.4718D-08
225.06
01.0086D+03 -8.6890D-01
09.2807D+02 03.8597D+00
02.8461D-01 -6.1459D-04 04.0013D-07
566.26 294.89

1-dodecène C₁₂H₂₄

168.324
02.5504D+05 486.5 657.0
02.4191D+02 05.1835D+00 -1.7892D-03
-4.2208D-07 01.8484D-08 -2.6096D-12
-9.2426D-03 03.1821D-05 03.4865D-08
245.52
01.0085D+03 -8.4360D-01
09.4290D+02 03.7802D+00
02.8394D-01 -6.0182D-04 03.8507D-07
615.67 310.07

1-tridecène C₁₃H₂₆

182.351
02.4642D+05 505.9 674.0
02.4144D+02 05.1953D+00 -1.7948D-03
-4.0795D-07 01.7781^B-08 -2.4343D-12
-8.5146D-03 02.8450D-05 03.4437D-08
265.98
01.0127D+03 -8.2930D-01
09.5390D+02 03.7214D+00
02.8290D-01 -5.9161D-04 03.7372D-07
658.16 323.71

1-tétradecène C₁₄H₂₈

196.378
02.3861D+05 524.3 689.0
02.4106D+02 05.2051D+00 -1.7986D-03
-3.9408D-07 01.7150D-08 -2.2840D-12
-7.8816D-03 02.5608D-05 03.3770D-08

286.44
01.0168D+03 -8.2040D-01
09.6665D+02 03.6702D+00
02.8177D-01 -5.8265D-04 03.6336D-07
697.49 336.13

1-pentadecène C₁₅H₃₀

210.405
02.3105D+05 541.3 704.0
02.4149D+02 05.2112D+00 -1.8025D-03
-3.8068D-07 01.6576D-08 -2.1467D-12
-7.3708D-03 02.3275D-05 03.3349D-08
306.90
01.0178D+03 -8.0550D-01
09.7561D+02 03.6240D+00
02.7974D-01 -5.7077D-04 03.5131D-07
739.13 347.46

1-hexadecène C₁₆H₃₂

224.432
02.2443D+05 557.6 717.0
02.4106D+02 05.2172D+00 -1.8069D-03
-3.6796D-07 01.6054D-08 -2.0289D-12
-6.8468D-03 02.1060D-05 03.2402D-08
327.36
01.0182D+03 -7.9450D-01
09.8370D+02 03.5830D+00
02.7655D-01 -5.5753D-04 03.3859D-07
767.48 357.85

1-heptadecène C₁₇H₃₄

238.459
02.3355D+05 572.9 725.1
01.2239D+02 05.6600D+00 -2.1557D-03
-3.5651D-07 01.5584D-08 -1.9395D-12
-7.1110D-03 02.1459D-05 03.4577D-08
347.82
01.0300D+03 -8.2000D-01
01.0884D+03 03.4314D+00
02.6894D-01 -5.5498D-04 03.3961D-07
787.52 367.45

1-octadecène C₁₈H₃₆

252.486
02.1472D+05 587.4 739.0
02.4110D+02 05.2286D+00 -1.8112D-03
-3.4485D-07 01.5141D-08 -1.8349D-12
-6.0120D-03 01.7631D-05 03.0567D-08
368.28
01.0240D+03 -7.8520D-01
01.0007D+03 03.5182D+00
02.7000D-01 -5.3695D-04 03.2082D-07
816.19 386.93

1-nonadecène C₁₉H₃₈

266.513
02.1996D+05 601.2 750.0

01.2075D+02 05.6750D+00 -2.1644D-03
-3.3414D-07 01.4735D-08 -1.7483D-12
-6.4194D-03 01.8371D-05 03.3767D-08
388.74
01.0318D+03 -8.0100D-01
01.0915D+03 03.3851D+00
02.6545D-01 -5.3545D-04 03.1996D-07
833.42 385.35

1-eicosène C₂₀H₄₀

280.540
02.1361D+05 614.4 762.1
01.2006D+02 05.6812D+00 -2.1679D-03
-3.2371D-07 01.4356D-08 -1.6637D-12
-6.1311D-03 01.7078D-05 03.3434D-08
409.20
01.0322D+03 -7.9140D-01
01.0906D+03 03.3666D+00
02.6410D-01 -5.2745D-04 03.1222D-07
852.20 393.61

1-heneicosène C₂₁H₄₂

294.567
02.0690D+05 628.2 775.6
01.1970D+02 05.6865D+00 -2.1711D-03
-3.1338D-07 01.3999D-08 -1.5800D-12
-5.8095D-03 01.5694D-05 03.2930D-08
429.66
01.0306D+03 -7.7687D-01
01.0865D+03 03.3510D+00
02.6337D-01 -5.1800D-04 03.0211D-07
868.00 401.59

1-docosène C₂₂H₄₄

308.594
01.9908D+05 640.2 787.5
01.1911D+02 05.6916D+00 -2.1742D-03
-3.0379D-07 01.3667D-08 -1.5069D-12
-5.5296D-03 01.4517D-05 03.2392D-08
450.12
01.0292D+03 -7.6363D-01
01.0759D+03 03.3440D+00
02.6366D-01 -5.1196D-04 02.9541D-07
886.35 409.41

1-tricosène C₂₃H₄₆

322.621
01.9174D+05 652.2 800.2
01.1858D+02 05.6964D+00 -2.1769D-03
-2.9467D-07 01.3355D-08 -1.4359D-12
-5.2683D-03 01.3404D-05 03.1928D-08
470.58
01.0284D+03 -7.5171D-01
01.0653D+03 03.3358D+00
02.6407D-01 -5.0467D-04 02.8669D-07
904.69 417.24

1-tetracosène C₂₄H₄₈

336.648
01.8376D+05 663.2 812.3
01.1809D+02 05.7008D+00 -2.1795D-03
-2.8545D-07 01.3062D-08 -1.3709D-12
-5.0237D-03 01.2389D-05 03.1413D-08
491.04
01.0256D+03 -7.3561D-01
01.0503D+03 03.3335D+00
02.6532D-01 -4.9972D-04 02.8077D-07
923.04 425.06

1-pentacosène C₂₅H₅₀

350.675
01.7523D+05 674.2 825.3
01.1764D+02 05.7047D+00 -2.1817D-03
-2.7662D-07 01.2784D-08 -1.3071D-12
-4.7667D-03 01.1354D-05 03.0793D-08
511.50
01.0222D+03 -7.1694D-01
01.0314D+03 03.3346D+00
02.6760D-01 -4.9414D-04 02.7311D-07
941.38 432.88

Benzènes**Benzène C₆H₆**

078.114
03.9342D+05 353.3 562.1
-1.1187D+02 04.5416D+00 -1.7236D-03
-5.8656D-07 02.8691D-08 -4.7594D-12
-9.4887D-03 03.5369D-05 09.0799D-08
090.68
01.2204D+03 -1.1535D+00
04.2688D+02 04.0770D+00
02.8549D-01 -5.7424D-04 03.4889D-07
545.64 265.34

Toluène (methylbenzène) C₇H₈

092.141
03.5975D+05 383.8 591.7
-7.6081D+01 04.6644D+00 -1.7512D-03
-5.6547D-07 02.6199D-08 -4.1419D-12
-1.0615D-02 03.3303D-05 01.1091D-07
111.14
01.1817D+03 -1.0666D+00
05.5630D+02 03.7714D+00
03.7925D-01 -5.7800D-04 03.6476D-07
467.33 255.24

Alkylbenzène C₈H₁₀ de substitution

106.168
03.4047D+05 412.7 620.1
03.1189D+01 04.5585D+00 -1.6432D-03
-5.4131D-07 02.4265D-08 -3.6559D-12
-1.0738D-02 02.9438D-05 01.2110D-07

131.60
01.1647D+03 -1.0025D+00
06.5405D+02 03.6355D+00
02.6998D-01 -5.5808D-04 03.5282D-07
480.53 265.74

1,2,4-trimethylbenzene C₉H₁₂

120.195
03.2621D+05 442.5 649.1
01.4816D+02 04.2976D+00 -1.4708D-03
-5.1494D-07 02.2626D-08 -3.2399D-12
-1.0352D-02 02.4859D-05 01.2552D-07
152.06
01.1584D+03 -9.4940D-01
08.4658D+02 03.2123D+00
02.5834D-01 -5.3320D-04 03.3790D-07
515.07 284.99

Alkylbenzène C₉H₁₂ de substitution

120.195
03.2199D+05 437.0 643.5
08.7231D+01 04.5538D+00 -1.6125D-03
-5.1689D-07 02.2792D-08 -3.2968D-12
-1.0418D-02 02.5448D-05 01.2455D-07
152.06
01.1536D+03 -9.5270D-01
07.2714D+02 03.4991D+00
02.6018D-01 -5.3701D-04 03.4031D-07
514.70 278.07

Alkylbenzène C₁₀H₁₄ de substitution

134.222
02.9906D+05 457.5 665.3
01.2833D+02 05.3727D+00 -2.3109D-03
-4.9458D-07 02.1735D-08 -3.0069D-12
-1.0275D-02 02.2456D-05 01.2928D-07
172.52
01.1423D+03 -9.1280D-01
09.3272D+02 03.5073D+00
02.7940D-01 -5.8616D-04 03.7492D-07
584.67 297.65

Alkylbenzène C₁₁H₁₆ de substitution

148.249
02.8548D+05 475.2 676.1
01.1908D+02 05.6255D+00 -2.4860D-03
-4.7112D-07 02.0540D-08 -2.8028D-12
-1.0212D-02 02.0717D-05 01.3172D-07
192.98
01.1422D+03 -9.0610D-01
01.0032D+03 03.4723D+00
02.8207D-01 -5.9453D-04 03.8025D-07
638.36 313.27

Alkylbenzène C₁₂H₁₈ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1,2-diisopropylbenzene
1,3-diisopropylbenzene
1,4-diisopropylbenzene
n-hexylbenzene

162.276
02.6546D+05 484.0 681.0
05.2414D+01 05.8095D+00 -2.5676D-03
-4.8664D-07 02.1199D-08 -2.8674D-12
-1.0437D-02 02.0189D-05 01.3614D-07
213.44
01.1263D+03 -8.8860D-01
09.3329D+02 03.5640D+00
02.6488D-01 -5.4556D-04 03.4233D-07
685.57 327.05

n-heptylbenzène C₁₃H₂₀

176.303
02.7151D+05 518.7 710.0
09.2995D+01 05.6708D+00 -2.4466D-03
-4.2938D-07 01.8710D-08 -2.3961D-12
-9.2558D-03 01.5194D-05 01.2863D-07
233.90
01.1120D+03 -8.5480D-01
01.0344D+03 03.3716D+00
02.9169D-01 -5.9924D-04 03.7176D-07
729.87 339.69

n-octylbenzène C₁₄H₂₂

190.330
02.6434D+05 537.7 724.7
09.4014D+01 05.6804D+00 -2.4312D-03
-4.1115D-07 01.7971D-08 -2.2383D-12
-8.8497D-03 01.3049D-05 01.2676D-07
254.36
01.1084D+03 -8.4310D-01
01.0555D+03 03.3264D+00
02.8696D-01 -5.8672D-04 03.6171D-07
771.23 351.31

n-nonylbenzène C₁₅H₂₄

204.357
02.5740D+05 555.2 737.8
09.4894D+01 05.6886D+00 -2.4179D-03
-3.9449D-07 01.7311D-08 -2.1027D-12
-8.4871D-03 01.1235D-05 01.2479D-07
274.82
01.1048D+03 -8.3150D-01
01.0726D+03 03.2899D+00
02.8115D-01 -5.6936D-04 03.4665D-07
809.62 362.04

n-decylbenzène C₁₆H₂₆

218.384
02.5078D+05 571.1 749.2
09.5662D+01 05.6958D+00 -2.4063D-03
-3.7922D-07 01.6717D-08 -1.9865D-12
-8.1850D-03 09.7435D-06 01.2306D-07

295.28
01.0948D+03 -7.9590D-01
01.0872D+03 03.2602D+00
02.7422D-01 -5.4813D-04 03.3161D-07
818.04 370.09

n-undecylbenzène C₁₇H₂₈

232.411
02.4535D+05 589.2 764.0
09.6337D+01 05.7021D+00 -2.3960D-03
-3.6427D-07 01.6170D-08 -1.8670D-12
-7.7546D-03 07.9508D-06 01.1991D-07
315.74
01.0982D+03 -8.0990D-01
01.1025D+03 03.2266D+00
02.7219D-01 -5.4245D-04 03.2375D-07
868.59 378.76

n-dodecylbenzène C₁₈H₃₀

246.438
02.3970D+05 604.2 775.2
09.6934D+01 05.7078D+00 -2.3870D-03
-3.5102D-07 01.5677D-08 -1.7708D-12
-7.4733D-03 06.6879D-06 01.1799D-07
336.20
01.0964D+03 -8.0360D-01
01.1143D+03 03.2018D+00
02.6728D-01 -5.2767D-04 03.1082D-07
894.15 386.30

n-tridecylbenzène C₁₉H₃₂

260.465
02.3419D+05 619.2 787.1
09.7467D+01 05.7128D+00 -2.3790D-03
-3.3841D-07 01.5221D-08 -1.6796D-12
-7.1763D-03 05.4365D-06 01.1578D-07
356.66
01.0941D+03 -7.9550D-01
01.1239D+03 03.1792D+00
02.6390D-01 -5.1753D-04 03.0241D-07
917.57 393.51

n-tetradecylbenzène C₂₀H₃₄

274.492
02.2752D+05 632.2 796.9
09.7947D+01 05.7172D+00 -2.3718D-03
-3.2706D-07 01.4805D-08 -1.6022D-12
-6.9177D-03 04.4365D-06 01.1357D-07
377.12
01.0927D+03 -7.9040D-01
01.1274D+03 03.1647D+00
02.6080D-01 -5.0780D-04 02.9406D-07
938.82 400.49

n-pentadecylbenzène C₂₁H₃₆

288.519
02.2135D+05 646.2 808.7

09.8656D+01 05.7209D+00 -2.3651D-03
-3.1584D-07 01.4415D-08 -1.5238D-12
-6.6200D-03 03.3379D-06 01.1094D-07
397.58
01.0895D+03 -7.8040D-01
01.1305D+03 03.1492D+00
02.5873D-01 -4.9960D-04 02.8680D-07
961.34 407.37

n-hexadecylbenzène C₂₂H₃₈

302.546
02.1474D+05 658.2 818.7
09.9036D+01 05.7247D+00 -2.3591D-03
-3.0569D-07 01.4055D-08 -1.4563D-12
-6.3901D-03 02.4622D-06 01.0894D-07
418.04
01.0874D+03 -7.7320D-01
01.1294D+03 03.1395D+00
02.5645D-01 -4.9100D-04 02.7922D-07
984.50 414.22

n-heptadecylbenzène C₂₃H₄₀

316.573
02.0862D+05 670.2 829.3
09.9382D+01 05.7280D+00 -2.3537D-03
-2.9590D-07 01.3718D-08 -1.3914D-12
-6.1685D-03 01.6006D-06 01.0706D-07
438.50
01.0840D+03 -7.6170D-01
01.1269D+03 03.1324D+00
02.5421D-01 -4.8188D-04 02.7148D-07
1007.7 421.07

n-octadecylbenzène C₂₄H₄₂

330.600
02.0158D+05 681.2 839.4
09.9698D+01 05.7311D+00 -2.3488D-03
-2.8674D-07 01.3404D-08 -1.3320D-12
-5.9509D-03 08.2322D-07 01.0502D-07
458.96
01.0810D+03 -7.5210D-01
01.1203D+03 03.1279D+00
02.5299D-01 -4.7473D-04 02.6482D-07
1030.8 427.92

n-nonadecylbenzène C₂₅H₄₄

330.600
01.9389D+05 692.2 850.3
09.9988D+01 05.7339D+00 -2.3443D-03
-2.7779D-07 01.3106D-08 -1.2740D-12
-5.7097D-03 04.3218D-08 01.0257D-07
479.42
01.0775D+03 -7.3940D-01
01.1095D+03 03.1266D+00
02.5263D-01 -4.6687D-04 02.5655D-07
1054.0 434.77

Naphtalènes

Naphtalène C₁₀H₈

128.174
03.3946D+05 491.1 748.4
05.8420D+01 04.4299D+00 -2.1612D-03
-5.3641D-07 02.3638D-08 -2.8133D-12
-9.0230D-03 01.3587D-05 01.3535D-07
140.44
01.2926D+03 -8.9320D-01
08.9986D+02 02.4887D+00
03.9960D-01 -7.9927D-04 04.8934D-07
873.32 352.57

Alkylnaphtalène C₁₁H₁₀ de substitution

142.201
03.2494D+05 516.0 766.5
01.0139D+02 04.4871D+00 -2.1270D-03
-4.9727D-07 02.2104D-08 -2.5399D-12
-8.5365D-03 01.0708D-05 01.3252D-07
160.90
01.2769D+03 -8.7960D-01
09.6617D+02 02.4817D+00
03.7887D-01 -7.5509D-04 04.5640D-07
609.75 327.99

Alkylnaphtalène C₁₂H₁₂ de substitution

156.228
03.0905D+05 537.1 773.4
02.1169D+02 05.1943D+00 -2.4839D-03
-4.6763D-07 02.0864D-08 -2.3652D-12
-7.9933D-03 08.9573D-06 01.2570D-07
181.36
01.2649D+03 -8.6430D-01
01.1696D+03 02.7994D+00
04.0713D-01 -8.1589D-04 04.9440D-07
652.74 335.32

Alkylnaphtalène C₁₃H₁₄ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-propylnaphtalene
2-n-propylnaphtalene

170.255
02.9199D+05 546.2 771.4
01.5130D+02 05.3743D+00 -2.5408D-03
-4.4759D-07 01.9947D-08 -2.2700D-12
-8.1707D-03 08.8600D-06 01.2806D-07
201.82
01.2436D+03 -8.6110D-01
01.1251D+03 02.8985D+00
03.7436D-01 -7.4394D-04 04.4709D-07
695.74 351.50

Alkylnaphtalène C₁₄H₁₆ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-butylnaphtalene

2-n-butylnaphtalene

184.282

02.8196D+05 563.9 782.2

01.4792D+02 05.4066D+00 -2.5178D-03

-4.2498D-07 01.9057D-08 -2.1235D-12

-7.8837D-03 07.3946D-06 01.2602D-07

222.28

01.2244D+03 -8.4090D-01

01.1366D+03 02.8955D+00

03.5928D-01 -7.0863D-04 04.2218D-07

738.73 361.82

Alkylnaphtalène C₁₅H₁₈ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-pentylnaphtalene

2-n-pentylnaphtalene

198.309

02.7397D+05 581.7 793.7

01.4501D+02 05.4346D+00 -2.4978D-03

-4.0448D-07 01.8270D-08 -1.9900D-12

-7.5744D-03 05.9739D-06 01.2360D-07

242.74

01.2097D+03 -8.2620D-01

01.1507D+03 02.8869D+00

03.4718D-01 -6.8056D-04 04.0212D-07

781.73 371.28

Alkylnaphtalène C₁₆H₂₀ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-hexylnaphtalene

2-n-hexylnaphtalene

212.336

02.6574D+05 581.7 793.7

01.4249D+02 05.4587D+00 -2.4806D-03

-3.8717D-07 01.7578D-08 -1.8859D-12

-7.3840D-03 05.0327D-06 01.2213D-07

263.20

01.2000D+03 -8.2120D-01

01.1608D+03 02.8842D+00

03.3510D-01 -6.5354D-04 03.8266D-07

824.73 379.94

Alkylnaphtalène C₁₇H₂₂ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-heptylnaphtalene

2-n-heptylnaphtalene

226.363

02.5984D+05 613.7 813.4

01.4028D+02 05.4799D+00 -2.4656D-03
-3.7003D-07 01.6945D-08 -1.7747D-12
-7.0590D-03 03.7501D-06 01.1923D-07
283.66
01.1892D+03 -8.0870D-01
01.1755D+03 02.8710D+00
03.2644D-01 -6.3291D-04 03.6768D-07
867.72 387.87

Alkylnaphtalène C₁₈H₂₄ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-octylnaphtalene
2-n-octylnaphtalene

240.390
02.5396D+05 629.7 824.2
01.3833D+02 05.4987D+00 -2.4523D-03
-3.5466D-07 01.6376D-08 -1.6783D-12
-6.7840D-03 02.6816D-06 01.1671D-07
304.12
01.1806D+03 -7.9970D-01
01.1876D+03 02.8604D+00
03.1836D-01 -6.1369D-04 03.5361D-07
910.72 395.10

Alkylnaphtalène C₁₉H₂₆ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-nonylnaphtalene
2-n-nonylnaphtalene

254.417
02.4812D+05 645.2 834.8
01.3659D+02 05.5153D+00 -2.4405D-03
-3.4052D-07 01.5857D-08 -1.5906D-12
-6.5092D-03 01.7022D-06 01.1399D-07
324.58
01.1716D+03 -7.8830D-01
01.1966D+03 02.8536D+00
03.1094D-01 -5.9522D-04 03.4009D-07
953.71 401.76

Alkylnaphtalène C₂₀H₂₈ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-decylnaphtalene
2-n-decylnaphtalene

268.444
02.4301D+05 660.2 845.4
01.3504D+02 05.5303D+00 -2.4297D-03
-3.2741D-07 01.5382D-08 -1.5102D-12
-6.2654D-03 08.0519D-07 01.1165D-07
345.04
01.1650D+03 -7.8110D-01
01.2070D+03 02.8433D+00
03.0376D-01 -5.7615D-04 03.2495D-07
996.71 407.87

Alkylnaphtalène C₂₁H₃₀ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-undecylnaphtalene

2-n-undecylnaphtalene

282.471

02.3674D+05 667.2 850.5

01.3392D+02 05.5433D+00 -2.4201D-03

-3.1535D-07 01.4946D-08 -1.4376D-12

-6.0152D-03 05.8585D-09 01.0895D-07

365.50

01.1590D+03 -7.7370D-01

01.2118D+03 02.8376D+00

02.9883D-01 -5.6291D-04 03.1474D-07

1039.7 413.71

Alkylnaphtalène C₂₂H₃₂ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

1-n-dodecylnaphtalene

2-n-dodecylnaphtalene

296.498

02.3156D+05 674.2 855.5

01.3264D+02 05.5554D+00 -2.4114D-03

-3.1951D-07 01.5290D-08 -1.4388D-12

-5.7921D-03 -7.7297D-07 01.0670D-07

385.96

01.1533D+03 -7.6620D-01

01.2180D+03 02.8293D+00

02.9400D-01 -5.5017D-04 03.0506D-07

1082.7 418.85

Cyclopentanes**Cyclopentane C₅H₁₀**

070.135

03.8883D+05 322.4 511.6

-4.3752D+02 06.1830D+00 -2.1541D-03

-4.8101D-07 02.7712D-08 -4.9626D-12

-1.2730D-02 04.9684D-05 01.0326D-07

082.10

01.0724D+03 -1.1181D+00

07.5219D+01 05.8295D+00

02.1152D-01 -3.3289D-04 01.1644D-07

406.69 231.67

Methylcyclopentane C₆H₁₂

084.162

03.4518D+05 345.0 532.7

-2.5890D+02 05.9823D+00 -2.0960D-03

-5.2387D-07 02.7797D-08 -4.8257D-12

-1.2398D-02 04.4101D-05 01.0831D-07

102.56

01.0628D+03 -1.0652D+00

02.7411D+02 05.3602D+00

02.2383D-01 -4.0832D-04 02.1155D-07
440.52 243.24

Cyclopentane C₇H₁₄ de substitution

098.189
03.1507D+05 367.1 556.3
-2.7284D+02 06.2234D+00 -2.3051D-03
-5.4124D-07 02.6861D-08 -4.4969D-12
-1.2028D-02 03.9255D-05 01.1332D-07
123.02
01.0604D+03 -1.0122D+00
03.3655D+02 05.1204D+00
02.1262D-01 -3.9141D-04 02.1109D-07
431.13 246.67

Cyclopentane C₈H₁₆ de substitution

112.216
02.9369D+05 391.7 583.2
-3.5276D+02 06.5877D+00 -2.6171D-03
-5.5027D-07 02.5876D-08 -4.1511D-12
-1.0942D-02 03.2632D-05 01.1157D-07
143.48
01.0370D+03 -9.4010D-01
03.8574D+02 04.8634D+00
01.9804D-01 -3.6263D-04 01.9959D-07
478.80 266.61

Cyclopentane C₉H₁₈ de substitution

Propriétés déterminées seulement à partir des composants suivants :

trans-1-méthyl-2-isopropylcyclopentane
1-méthyl-3-isopropylcyclopentane
n-butylcyclopentane

126.243
02.8206D+05 420.2 612.6
-2.8523D+02 06.4864D+00 -2.5345D-03
-5.2717D-07 02.3814D-08 -3.6362D-12
-9.8287D-03 02.6613D-05 01.0867D-07
163.94
01.0586D+03 -9.1300D-01
05.0253D+02 04.6032D+00
02.2075D-01 -4.1408D-04 02.3846D-07
527.13 285.63

n-pentylcyclopentane C₁₀H₂₀

140.270
02.8207D+05 454.2 645.1
-2.2451D+02 06.3072D+00 -2.4667D-03
-4.8447D-07 02.1330D-08 -3.0761D-12
-8.2027D-03 01.9904D-05 09.8509D-08
184.40
01.0659D+03 -8.7810D-01
06.2734D+02 04.2766D+00
02.4280D-01 -4.6421D-04 02.7388D-07
570.53 302.80

n-hexylcyclopentane C₁₁H₂₂

154.297
02.6657D+05 476.3 660.1
-4.1009D+01 05.7073D+00 -1.9987D-03
-4.6376D-07 02.0286D-08 -2.8482D-12
-7.4329D-03 01.6773D-05 09.2507D-08
204.86
01.0393D+03 -8.4450D-01
06.5305D+02 04.2307D+00
02.3800D-01 -4.5249D-04 02.6498D-07
617.57 318.65

n-heptylcyclopentane C₁₂H₂₄

168.324
02.5727D+05 497.3 679.0
-1.7324D+01 05.6756D+00 -1.9860D-03
-4.4470D-07 01.9368D-08 -2.6274D-12
-6.7806D-03 01.3973D-05 08.8109D-08
225.32
01.0304D+03 -8.1690D-01
06.9101D+02 04.1228D+00
02.3659D-01 -4.4852D-04 02.6256D-07
654.77 333.12

n-octylcyclopentane C₁₃H₂₆

182.351
02.4871D+05 516.9 694.0
01.8504D+00 05.6480D+00 -1.9789D-03
-4.2655D-07 01.8562D-08 -2.4493D-12
-6.3267D-03 01.2000D-05 08.4967D-08
245.78
01.0424D+03 -8.1270D-01
07.2884D+02 04.0255D+00
02.4072D-01 -4.5594D-04 02.6630D-07
695.83 346.19

n-nonylcyclopentane C₁₄H₂₈

196.378
02.4031D+05 535.3 710.5
01.9291D+01 05.6240D+00 -1.9688D-03
-4.0936D-07 01.7840D-08 -2.2824D-12
-5.8383D-03 01.0049D-05 08.1202D-08
266.24
01.0523D+03 -8.1720D-01
07.6286D+02 03.9412D+00
02.4453D-01 -4.6212D-04 02.6693D-07
735.19 357.74

n-decylcyclopentane C₁₅H₃₀

210.405
02.3264D+05 552.5 723.8
03.4246D+01 05.6022D+00 -1.9610D-03
-3.9350D-07 01.7196D-08 -2.2453D-12
-5.4469D-03 08.5682D-06 07.7860D-08
286.70
01.0633D+03 -8.1430D-01
07.8933D+02 03.8727D+00

02.4816D-01 -4.6823D-04 02.7006D-07
771.74 368.30

n-undecylcyclopentane C₁₆H₃₂

224.432
02.4051D+05 570.8 741.0
-1.0025D+02 06.1173D+00 -2.3813D-03
-3.7610D-07 01.6585D-08 -1.9678D-12
-5.2500D-03 06.8700D-06 07.9029D-08
307.16
01.0489D+03 -7.8550D-01
08.8474D+02 03.6986D+00
02.3904D-01 -4.5223D-04 02.5938D-07
760.82 378.68

n-dodecylcyclopentane C₁₇H₃₄

238.459
02.2034D+05 570.8 741.0
05.8077D+01 05.5701D+00 -1.9484D-03
-3.6466D-07 01.6081D-08 -1.9079D-12
-4.7395D-03 06.0714D-06 07.1349D-08
327.62
01.0498D+03 -7.8070D-01
08.2381D+02 03.7677D+00
02.4007D-01 -4.4529D-04 02.5179D-07
853.90 385.53

n-tridecylcyclopentane C₁₈H₃₆

252.486
02.1489D+05 598.6 761.0
06.8405D+01 05.5547D+00 -1.9440D-03
-3.5191D-07 01.5598D-08 -1.8115D-12
-4.4667D-03 05.1557D-06 06.8668D-08
348.08
01.0500D+03 -7.7360D-01
08.4018D+02 03.7209D+00
02.3820D-01 -4.4019D-04 02.4766D-07
891.80 392.78

n-tetradecylcyclopentane C₁₉H₃₈

266.513
02.0985D+05 614.2 772.0
07.7495D+01 05.5425D+00 -1.9389D-03
-3.3990D-07 01.5153D-08 -1.7224D-12
-4.2120D-03 04.3280D-06 06.6095D-08
368.54
01.0499D+03 -7.6640D-01
08.5489D+02 03.6799D+00
02.3711D-01 -4.3626D-04 02.4408D-07
924.60 399.62

n-pentadecylcyclopentane C₂₀H₄₀

280.540
02.0532D+05 628.2 780.0
08.5044D+01 05.5329D+00 -1.9354D-03
-3.2929D-07 01.4747D-08 -1.6502D-12
-3.9490D-03 03.6721D-06 06.2884D-08

389.00
01.0507D+03 -7.6340D-01
08.6953D+02 03.6461D+00
02.3496D-01 -4.3090D-04 02.3959D-07
950.57 406.33

n-hexadecylcyclopentane C₂₁H₄₂

294.567
02.1139D+05 641.2 798.0
-5.0672D+01 06.0415D+00 -2.3464D-03
-3.1680D-07 01.4351D-08 -1.5497D-12
-4.3141D-03 03.1632D-06 07.0947D-08
409.46
01.0529D+03 -7.6500D-01
09.5498D+02 03.5173D+00
02.3117D-01 -4.3001D-04 02.4011D-07
978.53 412.97

n-heptadecylcyclopentane C₂₂H₄₄

308.594
02.0410D+05 653.2 808.6
-4.3513D+01 06.0306D+00 -2.3414D-03
-3.0668D-07 01.3996D-08 -1.4798D-12
-4.1143D-03 02.5038D-06 06.8925D-08
429.92
01.0513D+03 -7.5570D-01
09.5670D+02 03.4958D+00
02.3124D-01 -4.2646D-04 02.3610D-07
1009.1 419.73

n-octadecylcyclopentane C₂₃H₄₆

322.621
01.9787D+05 664.2 818.8
-3.6976D+01 06.0207D+00 -2.3369D-03
-2.9717D-07 01.3665D-08 -1.4155D-12
-3.9663D-03 01.9332D-06 06.7618D-08
450.38
01.0504D+03 -7.4780D-01
09.5892D+02 03.4748D+00
02.3059D-01 -4.2183D-04 02.3157D-07
1039.6 426.48

n-nonadecylcyclopentane C₂₄H₄₈

336.648
01.9787D+05 675.2 829.6
-3.0983D+01 06.0115D+00 -2.3328D-03
-2.8795D-07 01.3353D-08 -1.3535D-12
-3.7854D-03 01.3602D-06 06.5718D-08
470.84
01.0504D+03 -7.4780D-01
09.5401D+02 03.4605D+00
02.3169D-01 -4.1920D-04 02.2794D-07
1070.1 433.24

n-eicosylcyclopentane C₂₅H₅₀

350.675
01.8297D+05 686.2 841.2

-2.5470D+01 06.0031D+00 -2.3390D-03
-2.7894D-07 01.3058D-08 -1.2930D-12
-3.6176D-03 08.0231D-07 06.4020D-08
491.30
01.0452D+03 -7.2230D-01
09.4840D+02 03.4470D+00
02.3238D-01 -4.1416D-04 02.2198D-07
1100.7 440.00

Cyclohexanes

Cyclohexane

084.162
03.5561D+05 353.9 553.4
-5.9168D+02 06.9896D+00 -2.6266D-03
-5.0892D-07 02.5416D-08 -4.2743D-12
-1.1429D-02 03.9676D-05 01.0668D-07
102.56
01.0860D+03 -1.0440D+00
01.2393D+02 05.6150D+00
02.2442D-01 -3.4568D-04 01.3223D-07
653.52.52 290.84

Methylcyclohexane

098.189
03.1673D+05 374.1 572.1
-2.9348D+02 06.3839D+00 -2.2841D-03
-5.3144D-07 02.5456D-08 -4.1557D-12
-1.0863D-02 03.4732D-05 01.0737D-07
123.02
01.0618D+03 -9.8860D-01
02.5844D+02 05.3607D+00
02.2679D-01 -3.8356D-04 01.8409D-07
528.41 271.58

Cyclohexane C₈H₁₆ de substitution

112.216
02.9651D+05 397.3 597.4
-2.9205D+02 06.4124D+00 -2.3129D-03
-5.4079D-07 02.4868D-08 -3.8946D-12
-9.9070D-03 02.8850D-05 01.0519D-07
143.48
01.0565D+03 -9.3720D-01
02.8230D+02 05.1749D+00
02.0952D-01 -3.4740D-04 01.6759D-07
502.38 279.85

Cyclohexane C₉H₁₈ de substitution

126.243
02.8138D+05 420.9 617.1
-3.0390D+02 06.5049D+00 -2.5715D-03
-5.4162D-07 02.4376D-08 -3.6947D-12
-9.5736D-03 02.5747D-05 01.0700D-07
163.94
01.0697D+03 -9.1210D-01
04.6933D+02 04.6154D+00
02.1774D-01 -3.9860D-04 02.2419D-07

565.14 296.16

Cyclohexane C₁₀H₂₀ de substitution

140.270
02.6658D+05 440.8 636.6
-2.9952D+02 06.5655D+00 -2.6372D-03
-5.3178D-07 02.3558D-08 -3.4516D-12
-9.2683D-03 02.2848D-05 01.0890D-07
184.40
01.0773D+03 -8.9510D-01
05.0843D+02 04.4961D+00
02.1189D-01 -3.8693D-04 02.1795D-07
627.11 311.52

n-pentylcyclohexane C₁₁H₂₂

154.297
02.7155D+05 475.2 666.8
-1.9438D+02 06.2612D+00 -2.4458D-03
-4.6153D-07 02.0149D-08 -2.7948D-12
-7.6469D-03 01.6870D-05 09.6652D-08
204.86
01.0587D+03 -8.5730D-01
06.7039D+02 04.1545D+00
02.4148D-01 -4.6112D-04 02.7083D-07
686.68 325.46

n-hexylcyclohexane C₁₂H₂₄

168.324
02.6441D+05 497.2 685.6
-1.6928D+02 06.2228D+00 -2.4284D-03
-4.4216D-07 01.9245D-08 -2.5792D-12
-7.0472D-03 01.4155D-05 09.2918D-08
225.32
01.0571D+03 -8.3740D-01
07.2181D+02 04.0373D+00
02.4200D-01 -4.6146D-04 02.7020D-07
742.50 338.23

n-heptylcyclohexane C₁₃H₂₆

182.351
02.5737D+05 517.2 701.8
-1.4808D+02 06.1903D+00 -2.4138D-03
-4.2379D-07 01.8449D-08 -2.3992D-12
-6.5585D-03 01.2019D-05 08.9558D-08
245.78
01.0571D+03 -8.2480D-01
07.6445D+02 03.9427D+00
02.4202D-01 -4.6163D-04 02.6978D-07
795.38 349.96

n-octylcyclohexane C₁₄H₂₈

196.378
02.5199D+05 537.2 718.3
-1.2984D+02 06.1626D+00 -2.4012D-03
-4.0641D-07 01.7737D-08 -2.2361D-12
-6.1145D-03 01.0118D-05 08.6422D-08
266.24

01.0567D+03 -8.1250D-01
08.0553D+02 03.8553D+00
02.4174D-01 -4.6069D-04 02.6832D-07
845.30 360.80

n-nonylcyclohexane C₁₅H₃₀

210.405
02.4604D+05 555.2 732.5
-1.1406D+02 06.1383D+00 -2.3901D-03
-3.9031D-07 01.7099D-08 -2.0982D-12
-5.7456D-03 09.5994D-06 08.3576D-08
286.70
01.0561D+03 -8.0130D-01
08.3904D+02 03.7829D+00
02.4056D-01 -4.5686D-04 02.6446D-07
892.24 370.85

n-decylcyclohexane C₁₆H₃₂

224.432
02.2424D+05 572.2 745.8
02.9412D+01 05.7675D+00 -2.0457D-03
-3.7535D-07 01.6523D-08 -1.9764D-12
-5.4340D-03 07.3185D-06 08.1139D-08
307.16
01.0560D+03 -7.9260D-01
07.4800D+02 03.9694D+00
02.4418D-01 -4.4242D-04 02.4488D-07
925.84 378.69

n-undecylcyclohexane C₁₇H₃₄

238.459
02.3581D+05 589.2 759.5
-8.8070D+01 06.0988D+00 -2.3722D-03
-3.6117D-07 01.5996D-08 -1.8633D-12
-5.1295D-03 06.1199D-06 07.8630D-08
327.62
01.0567D+03 -7.8670D-01
08.9664D+02 03.6610D+00
02.3840D-01 -4.5061D-04 02.5809D-07
967.13 386.93

n-dodecylcyclohexane C₁₈H₃₆

252.486
02.3047D+05 604.2 771.1
-7.7241D+01 06.0821D+00 -2.3648D-03
-3.4826D-07 01.5518D-08 -1.7670D-12
-4.8873D-03 05.1742D-06 07.6561D-08
348.08
01.0569D+03 -7.8100D-01
09.1859D+02 03.6128D+00
02.3644D-01 -4.4434D-04 02.5198D-07
994.06 392.86

n-tridecylcyclohexane C₁₉H₃₈

266.513
02.2440D+05 619.2 783.4
-7.7553D+01 06.0674D+00 -2.3581D-03

-3.3593D-07 01.5075D-08 -1.6756D-12
-4.6266D-03 04.2443D-06 07.4126D-08
368.54
01.0561D+03 -7.7240D-01
09.3435D+02 03.5721D+00
02.3598D-01 -4.4134D-04 02.4885D-07
1019.5 398.62

n-tetradecylcyclohexane C₂₀H₄₀

280.540
02.1932D+05 633.2 794.9
-5.8833D+01 06.0541D+00 -2.3519D-03
-3.2445D-07 01.4667D-08 -1.5936D-12
-4.4234D-03 03.4649D-06 07.2346D-08
389.00
01.0560D+03 -7.6610D-01
09.5032D+02 03.5337D+00
02.3483D-01 -4.3734D-04 02.4515D-07
1043.6 404.26

n-pentadecylcyclohexane C₂₁H₄₂

294.567
02.1319D+05 646.2 805.9
-5.0672D+01 06.0415D+00 -2.3464D-03
-3.1370D-07 01.4289D-08 -1.5189D-12
-4.0058D-03 02.6972D-06 06.6789D-08
409.46
01.0551D+03 -7.5860D-01
09.5970D+02 03.5032D+00
02.3362D-01 -4.3096D-04 02.3862D-07
1071.6 409.92

n-hexadecylcyclohexane C₂₂H₄₄

308.594
02.0624D+05 658.2 816.2
-4.3513D+01 06.0306D+00 -2.3414D-03
-3.0370D-07 01.3938D-08 -1.4514D-12
-3.6381D-03 02.0699D-06 06.1743D-08
429.92
01.0531D+03 -7.4820D-01
09.6241D+02 03.4825D+00
02.3313D-01 -4.2632D-04 02.3411D-07
1098.3 415.55

n-heptadecylcyclohexane C₂₃H₄₆

322.621
01.9959D+05 670.2 827.3
-3.6976D+01 06.0207D+00 -2.3369D-03
-2.9399D-07 01.3608D-08 -1.3858D-12
-3.3130D-03 01.5074D-06 05.7289D-08
450.38
01.0514D+03 -7.3850D-01
09.6416D+02 03.4614D+00
02.3327D-01 -4.2290D-04 02.3030D-07
1125.0 421.17

n-octadecylcyclohexane C₂₄H₄₈

336.648
 01.9344D+05 682.2 839.1
 -3.0983D+01 06.0115D+00 -2.3328D-03
 -2.8453D-07 01.3297D-08 -1.3223D-12
 -3.0280D-03 01.0059D-06 05.3394D-08
 470.84
 01.0491D+03 -7.2690D-01
 09.6514D+02 03.4411D+00
 02.3352D-01 -4.1936D-04 02.2650D-07
 1151.8 426.80

n-nonadecylcyclohexane C₂₅H₅₀

350.675
 01.8650D+05 693.2 850.4
 -2.5470D+01 06.0031D+00 -2.3290D-03
 -2.7564D-07 01.3006D-08 -1.2640D-12
 -2.7744D-03 05.9077D-07 04.9829D-08
 491.30
 01.0466D+03 -7.1470D-01
 09.6107D+02 03.4266D+00
 02.3391D-01 -4.1416D-04 02.2057D-07
 1178.5 432.42

A.3.2 Modèles à thermodynamique continue**n-alcanes C₄H₁₀ – C₁₀H₂₂****Variable de distribution : masse molaire**

-7.3159D+02 -7.0930D+01 -1.2308D+00 01.5764D-01
 01.2054D+01 -4.4170D-02 03.4077D-02 -1.5625D-03
 -1.0542D-02 -5.4420D-04 -2.7690D-06 01.1815D-06
 -5.2921D+01 01.2301D-01 04.3452D-02 -2.0679D-03
 01.0488D-01 -4.7087D-03 06.7239D-06 06.3496D-06
 -5.1849D-05 08.1896D-06 -1.4618D-07 -6.1041D-09
 01.1292D+07 01.9969D+05 06.9660D+00
 305.20 2.2625 159.77 2.0631
 -5.3001D+03 02.6903D+01 -8.8535D-03 02.6647D+02 05.2353D+00 -1.7774D-03
 03.5078D-06 02.1347D-08 00.0000D+00 -1.7808D-08 -4.5547D-11 00.0000D+00
 -5.4772D-03 03.7261D-05 01.5280D-07 02.3835D-05 -2.4003D-07 -3.3260D-10
 01.0194D+00 01.4586D+00
 03.0874D+01 -4.9255D-02 -3.1776D-01 06.1990D-04 01.0584D-03 -2.2443D-06
 -2.9058D+04 02.0688D+02 01.1161D+03 02.6670D+00
 02.7104D-01 -7.8252D-04 06.1027D-07 01.0769D-04 01.1760D-06 -1.4561D-09
 -1.6059D+01 05.2243D+00 -8.1161D-03 03.6911D+01 02.3211D+00 -3.8524D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-076.37 0.4818
 01.0806D+00 -5.1763D-02 01.3443D-03
 -4.1250D+06 09.6664D+04 06.9660D+00
 128.85 1.0998
 -2.5957D+04 -3.7059D+02 01.2504D-01 01.2920D+02 02.5159D+00 -8.5088D-04
 04.9224D-06 02.4868D-08 00.0000D+00 -8.7286D-09 -2.2062D-11 00.0000D+00
 -7.3389D-03 05.6453D-05 01.7739D-07 01.1596D-05 -1.1799D-07 -1.5804D-10
 -1.1038D+02 07.0280D-01

05.1173D+01 -9.3528D-02 -1.7526D-01 03.7612D-04 01.7107D-04 -4.0494D-07
-1.0295D+05 02.9035D+01 05.0098D+02 01.2011D+00
02.6171D-01 -8.7341D-04 07.2267D-07 05.4942D-05 05.6942D-07 -7.0465D-10
-8.7222D+01 09.9428D-01 01.0340D-03 -7.5223D+00 05.2500D-01 03.1152D-04

n-alcanes $C_6H_{14} - C_{16}H_{34}$

Variable de distribution : masse molaire

-1.6192D+03 -1.0944D+02 -5.4032D+00 06.3885D-01
01.5853D+01 -1.9908D-01 09.1980D-02 -5.3373D-03
-1.3590D-02 -1.5073D-04 -7.7653D-05 05.5611D-06
-4.4076D+01 02.6972D-01 03.7430D-02 -2.9900D-03
06.5559D-02 -3.8871D-03 02.1696D-07 01.0082D-05
-1.3489D-05 04.2118D-06 05.2874D-08 -1.4655D-08
01.6171D+07 01.5815D+05 06.9938D+00
396.66 1.4867 221.39 1.5389
-2.2452D+03 02.3366D+01 03.0584D-04 02.4000D+02 05.2712D+00 -1.8567D-03
02.3500D-06 01.9857D-08 00.0000D+00 -7.9714D-09 -3.2842D-11 00.0000D+00
-4.1956D-03 01.9891D-05 01.5170D-07 01.2946D-05 -9.2662D-08 -3.2325D-10
01.0194D+00 01.4586D+00
02.0697D+01 -2.5744D-02 -1.3890D-01 02.0503D-04 02.9976D-04 -4.7697D-07
-3.0905D+04 01.8737D+02 01.1309D+03 02.8425D+00
02.9132D-01 -7.5324D-04 05.6491D-07 -6.6696D-05 09.2366D-07 -1.0679D-09
-3.8961D+01 05.5961D+00 -9.6014D-03 04.2958D+01 02.2365D+00 -3.5955D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-141.21 0.6441
01.1837D+00 -8.1025D-02 02.8765D-03
-6.4950D+06 01.0258D+05 06.9938D+00
180.80 0.9704
-3.5696D+04 -7.1133D+02 02.5924D-01 01.5382D+02 03.3784D+00 -1.1903D-03
03.5353D-06 02.4603D-08 00.0000D+00 -5.2635D-09 -2.1388D-11 00.0000D+00
-6.1066D-03 03.3802D-05 01.9827D-07 08.5176D-06 -6.1471D-08 -2.1020D-10
-2.0496D+02 09.3950D-01
03.7291D+01 -5.3677D-02 -1.0486D-01 01.7364D-04 08.2746D-05 -1.5049D-07
-1.9703D+05 -2.2841D+02 07.3936D+02 01.8546D+00
02.9953D-01 -8.8360D-04 07.1695D-07 -4.0400D-05 05.9547D-07 -6.9131D-10
-4.9153D+02 03.0095D+00 -1.4505D-03 -1.1616D+02 01.0811D+00 -3.9258D-04

n-alcanes $C_{10}H_{22} - C_{20}H_{42}$

Variable de distribution : masse molaire

-2.7707D+03 -8.1834D+01 -2.3179D+01 02.1060D+00
02.0299D+01 -7.1628D-01 02.4153D-01 -1.6074D-02
-1.7326D-02 04.9302D-04 -2.2993D-04 01.6323D-05
-3.8029D+01 01.4986D-01 08.3963D-02 -6.8931D-03
04.3982D-02 -2.9457D-03 -1.5510D-04 02.2678D-05
04.3338D-06 02.0953D-06 03.1626D-07 -3.2376D-08
02.1507D+07 01.2930D+05 06.9073D+00
478.76 1.0456 284.25 1.1960
-3.0019D+03 01.6080D+01 -1.4216D-05 02.4408D+02 05.3085D+00 -1.8548D-03
01.6103D-06 01.8196D-08 00.0000D+00 -4.0049D-09 -2.3883D-11 00.0000D+00
-3.1590D-03 09.9423D-06 01.3850D-07 07.4221D-06 -3.9380D-08 -2.5410D-10
01.0194D+00 01.4586D+00
01.4661D+01 -1.5233D-02 -7.0385D-02 08.4728D-05 01.1111D-04 -1.4365D-07
-2.7921D+04 01.6287D+02 01.1124D+03 02.9733D+00

02.9398D-01 -7.0314D-04 05.0003D-07 -7.8064D-05 06.4912D-07 -7.1729D-10
06.9151D+01 04.3504D+00 -6.1376D-03 08.9849D+01 01.7069D+00 -2.1436D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-234.21 0.8285
01.2392D+00 -1.0473D-01 05.1136D-03
-9.0735D+06 01.0768D+05 06.9073D+00
229.87 0.8737
-6.0044D+04 -1.2274D+03 04.3443D-01 02.0199D+02 04.3985D+00 -1.5368D-03
02.5766D-06 02.3874D-08 00.0000D+00 -3.3705D-09 -1.9944D-11 00.0000D+00
-4.9361D-03 01.9516D-05 01.9860D-07 06.2214D-06 -3.3278D-08 -2.1162D-10
-3.4060D+02 01.2085D+00
02.8299D+01 -3.3911D-02 -6.8153D-02 09.2438D-05 04.5604D-05 -6.7881D-08
-2.8861D+05 -5.3303D+02 09.2193D+02 02.4625D+00
03.1319D-01 -8.5992D-04 06.7271D-07 -6.6390D-05 05.4662D-07 -6.0297D-10
-6.1415D+02 03.4724D+00 -1.8861D-03 -1.1717D+02 01.0820D+00 -3.9056D-04

n-alcanes C₈H₁₈ – C₂₅H₅₂**Variable de distribution : masse molaire**

-2.0802D+03 -2.7606D+02 -6.1278D+00 02.5978D+00
01.6858D+01 04.1248D-01 01.2125D-01 -1.6259D-02
-1.2523D-02 -1.1355D-03 -3.4169D-05 01.3260D-05
-4.0589D+01 05.6977D-01 04.1812D-02 -8.2711D-03
05.5617D-02 -5.3528D-03 01.2403D-04 02.5073D-05
-1.2293D-05 06.0017D-06 -1.9641D-07 -2.4392D-08
02.3151D+07 01.1858D+05 06.8614D+00
477.74 1.0185 291.38 1.1355
02.2096D+04 -1.0542D+02 09.4375D-02 07.7744D+01 06.0177D+00 -2.4071D-03
01.6145D-06 01.8005D-08 00.0000D+00 -3.7633D-09 -2.2173D-11 00.0000D+00
-3.0734D-03 01.0198D-05 01.3204D-07 06.5387D-06 -3.7307D-08 -2.1121D-10
01.0194D+00 01.4586D+00
01.4540D+01 -1.4919D-02 -6.6294D-02 07.7429D-05 09.5851D-05 -1.1833D-07
-3.7182D+04 01.6494D+02 01.1566D+03 02.9428D+00
02.9576D-01 -6.9923D-04 04.9280D-07 -9.4310D-05 06.2302D-07 -6.6302D-10
09.3430D+01 04.0325D+00 -5.2476D-03 01.0305D+02 01.5329D+00 -1.6484D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-249.26 0.8675
01.2675D+00 -1.1239D-01 06.2500D-03
-7.4959D+06 01.0482D+05 06.8614D+00
215.69 0.8982
02.2848D+04 -1.6675D+03 07.2580D-01 03.5797D+01 05.3178D+00 -2.1363D-03
02.6214D-06 02.3753D-08 00.0000D+00 -3.3883D-09 -1.9632D-11 00.0000D+00
-4.8235D-03 02.0357D-05 01.8763D-07 05.8883D-06 -3.3908D-08 -1.8851D-10
-3.6256D+02 01.2653D+00
02.8216D+01 -3.2910D-02 -6.7113D-02 08.7354D-05 04.3986D-05 -6.1969D-08
-3.2648D+05 -5.7103D+02 01.0051D+03 02.5571D+00
02.9796D-01 -8.1360D-04 06.3578D-07 -4.4683D-05 04.7074D-07 -5.3821D-10
-5.6740D+02 03.3131D+00 -1.7537D-03 -6.9928D+01 08.9022D-01 -1.9935D-04

Iso-alcanes C₄H₁₀ – C₁₀H₂₂**Variable de distribution : masse molaire**

-1.0484D+03 -5.6356D+00 -5.5606D+00 02.0029D-01

01.4850D+01 -5.6529D-01 07.0847D-02 -2.1121D-03
-1.6575D-02 05.1129D-04 -7.7557D-05 02.5085D-06
-4.6206D+01 -2.8850D-01 06.0976D-02 -1.7992D-03
07.3109D-02 -1.0526D-03 -1.8213D-04 06.7906D-06
-3.4006D-08 04.9283D-07 03.1126D-07 -1.1487D-08
01.0585D+07 01.8858D+05 06.9867D+00
278.97 2.4076 147.29 2.0566
01.5077D+04 -5.0137D+01 04.9526D-02 -2.7841D+01 06.3202D+00 -2.6022D-03
03.8537D-06 02.1752D-08 00.0000D+00 -1.9808D-08 -4.2978D-11 00.0000D+00
-6.0286D-03 04.0900D-05 01.5592D-07 02.5522D-05 -2.6223D-07 -2.5329D-10
01.0194D+00 01.4586D+00
02.9848D+01 -5.0531D-02 -3.0064D-01 06.3514D-04 09.9927D-04 -2.2960D-06
-3.6979D+04 02.4468D+02 01.0582D+03 02.5743D+00
02.2716D-01 -6.2940D-04 04.4927D-07 09.1176D-05 08.9783D-07 -8.7260D-10
07.5388D+00 05.8798D+00 -1.3628D-02 03.7246D+01 02.6728D+00 -6.5309D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-070.20 0.4822
01.0806D+00 -5.1763D-02 01.3443D-03
-2.8744D+06 09.1561D+04 06.9867D+00
104.74 1.1758
-2.3642D+04 -2.6499D+02 09.5364D-02 01.1842D+02 02.3041D+00 -8.1052D-04
05.3138D-06 02.4799D-08 00.0000D+00 -9.7485D-09 -2.0810D-11 00.0000D+00
-7.8590D-03 06.0247D-05 01.7188D-07 01.2417D-05 -1.2911D-07 -1.1699D-10
-1.0137D+02 07.0330D-01
04.6615D+01 -9.1079D-02 -1.5982D-01 03.7547D-04 01.5911D-04 -4.1606D-07
-1.1175D+05 06.7931D+01 05.1166D+02 01.2301D+00
02.1780D-01 -6.8764D-04 05.0591D-07 05.2343D-05 04.1942D-07 -4.0771D-10
-1.6302D+02 01.9517D+00 -6.0440D-04 -5.7178D+01 01.0002D+00 -4.8288D-04

Iso-alcanes C₆H₁₄ – C₁₆H₃₄**Variable de distribution : masse molaire**

-5.7437D+02 -2.9758D+02 02.0815D+01 -1.7923D-02
01.0191D+01 01.0649D+00 -6.5562D-02 -1.3574D-03
-4.4640D-03 -2.2555D-03 01.5992D-04 -5.5142D-07
-4.6628D+01 09.7795D-01 -6.2189D-02 -6.5700D-04
08.8285D-02 -9.0202D-03 06.2535D-04 -4.8932D-06
-5.6630D-05 01.3381D-05 -9.4219D-07 01.0036D-08
01.5000D+07 01.5189D+05 06.9290D+00
389.03 1.4216 200.14 1.5859
01.5224D+04 -4.0541D+01 04.2426D-02 -1.4353D+01 06.1804D+00 -2.5051D-03
02.3890D-06 02.0344D-08 00.0000D+00 -7.3088D-09 -3.2066D-11 00.0000D+00
-4.8956D-03 02.2151D-05 01.7502D-07 01.5481D-05 -1.0109D-07 -4.0488D-10
01.0194D+00 01.4586D+00
01.9173D+01 -2.3860D-02 -1.2013D-01 01.7885D-04 02.6979D-04 -4.1790D-07
-6.5766D+04 02.4025D+02 01.3235D+03 02.5741D+00
01.5086D-01 -3.9865D-04 03.0424D-07 08.3888D-04 -1.3473D-06 05.8789D-10
01.0008D+02 04.5542D+00 -9.5476D-03 09.2866D+01 01.8597D+00 -3.8336D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-123.60 0.6247
01.1837D+00 -8.1025D-02 02.8765D-03
-3.7607D+06 09.4865D+04 06.9290D+00
205.95 0.9046
01.7478D+04 -8.0648D+02 03.5307D-01 -1.0038D+01 03.8658D+00 -1.5673D-03
03.2941D-06 02.4177D-08 00.0000D+00 -4.5702D-09 -1.9742D-11 00.0000D+00

-6.8725D-03 03.5028D-05 02.2630D-07 09.8134D-06 -6.4010D-08 -2.5570D-10
 -1.7926D+02 09.1130D-01
 04.2163D+01 -7.1106D-02 -1.3445D-01 02.5921D-04 01.2442D-04 -2.5284D-07
 -2.2873D+05 -7.8088D+01 08.2549D+02 01.6086D+00
 05.3550D-02 -2.5251D-04 02.4830D-07 05.0987D-04 -7.9625D-07 03.2996D-10
 -5.8043D+02 04.1835D+00 -3.5680D-03 -1.7951D+02 01.6782D+00 -1.4098D-03

Alcènes C₄H₈ – C₁₀H₂₀

Variable de distribution : masse molaire

-5.7986D+02 04.4920D+01 -1.6855D+01 06.4903D-01
 08.0601D+00 -3.9090D-01 01.0447D-01 -3.9673D-03
 02.1308D-05 -7.8966D-04 -5.3607D-05 03.4683D-06
 -5.0963D+01 -4.8306D-01 01.3505D-01 -5.0208D-03
 01.2737D-01 -3.7906D-03 -3.5966D-04 01.9806D-05
 -1.3067D-04 01.2872D-05 -2.8507D-08 -1.5926D-08
 01.1954D+07 01.8850D+05 07.0266D+00
 311.11 2.2269 160.83 2.0336
 -1.9157D+03 -2.1103D+01 01.0557D-02 02.2697D+02 05.4239D+00 -1.9428D-03
 03.7365D-06 02.3140D-08 00.0000D+00 -1.9388D-08 -5.5498D-11 00.0000D+00
 -2.9811D-02 01.4582D-04 -1.3321D-08 01.3675D-04 -7.7984D-07 03.8218D-10
 00.0000D+00 01.4586D+00
 03.4132D+01 -5.3185D-02 -3.7572D-01 06.9804D-04 01.3118D-03 -2.5980D-06
 -2.6870D+04 01.8369D+02 01.1055D+03 02.6849D+00
 02.6935D-01 -7.9248D-04 06.3122D-07 05.5887D-05 01.4492D-06 -1.7379D-09
 01.6496D+02 01.6031D+00 06.3082D-03 01.0544D+02 07.9529D-01 03.0519D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-078.71 0.4907
 01.0806D+00 -5.1763D-02 01.3443D-03
 -2.9443D+06 09.2670D+04 07.0266D+00
 134.34 1.0969
 -2.1915D+04 -4.3726D+02 01.5589D-01 01.2495D+02 02.5985D+00 -9.0679D-04
 05.2865D-06 02.7527D-08 00.0000D+00 -9.5801D-09 -2.7283D-11 00.0000D+00
 -4.0693D-02 02.0808D-04 -4.4263D-08 06.7432D-05 -3.8511D-07 01.8992D-10
 -1.1481D+02 07.1580D-01
 06.6875D+01 -1.1644D-01 -2.5818D-01 05.0027D-04 02.7861D-04 -5.6780D-07
 -1.1355D+05 -2.8811D+01 05.4156D+02 01.3207D+00
 02.6517D-01 -9.0999D-04 07.7163D-07 02.6808D-05 07.2067D-07 -8.6284D-10
 01.3908D+02 -6.1922D-02 02.0371D-03 09.9419D+01 -6.6763D-02

Alcènes C₆H₁₂ – C₁₆H₃₂

Variable de distribution : masse molaire

-1.4530D+03 -7.3455D+01 -9.3688D+00 08.4631D-01
 01.5936D+01 -4.1746D-01 01.1531D-01 -6.4808D-03
 -1.4580D-02 02.1473D-04 -1.1492D-04 07.2036D-06
 -4.4428D+01 01.9997D-02 06.8888D-02 -4.3828D-03
 06.3920D-02 -2.4557D-03 -1.7425D-04 01.7573D-05
 -7.9645D-06 02.0175D-06 03.0455D-07 -2.4881D-08
 01.4833D+07 01.6296D+05 07.0357D+00
 397.44 1.4861 211.15 1.5931
 -1.9135D+03 -1.9367D+01 09.4964D-03 02.5164D+02 05.3018D+00 -1.8470D-03
 02.5128D-06 02.1384D-08 00.0000D+00 -8.7935D-09 -3.9830D-11 00.0000D+00
 -2.2918D-02 09.9355D-05 02.6591D-08 07.6845D-05 -3.7749D-07 03.8890D-11
 00.0000D+00 01.4586D+00

02.1300D+01 -2.6019D-02 -1.4616D-01 02.1232D-04 03.2269D-04 -5.0797D-07
-2.9096D+04 01.8610D+02 01.1160D+03 02.7095D+00
02.6472D-01 -6.7679D-04 05.1207D-07 08.6262D-05 04.8353D-07 -7.5657D-10
03.7816D+01 03.6735D+00 -1.6892D-03 02.5700D+01 02.2673D+00 -3.4905D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-129.69 0.6215
01.1837D+00 -8.1025D-02 02.8765D-03
-6.7482D+06 01.0225D+05 07.0357D+00
199.25 0.9355
-4.9060D+04 -6.4853D+02 02.0215D-01 01.8441D+02 03.1822D+00 -1.0575D-03
03.7209D-06 02.6753D-08 00.0000D+00 -5.6130D-09 -2.5200D-11 00.0000D+00
-3.3418D-02 01.5121D-04 02.0241D-08 04.8926D-05 -2.4095D-07 02.7027D-11
-1.8916D+02 09.0650D-01
03.7626D+01 -5.3379D-02 -1.0755D-01 01.7640D-04 08.6899D-05 -1.5703D-07
-1.7435D+05 -1.5958D+02 06.9469D+02 01.6714D+00
03.0038D-01 -8.2975D-04 06.8252D-07 -3.7618D-05 04.7682D-07 -6.1229D-10
01.8101D+02 -4.0719D-01 02.6473D-03 -8.7651D+01 08.9053D-01 -1.5767D-04

Alcènes C₁₀H₂₀ – C₂₀H₄₀**Variable de distribution : masse molaire**

-1.3530D+03 -3.0609D+02 01.0271D+01 05.1095D-01
01.5721D+01 06.1853D-01 03.6224D-02 -6.0600D-03
-1.3076D-02 -1.2740D-03 04.8459D-05 02.5851D-06
-4.3591D+01 01.0026D+00 -4.1038D-02 -8.6432D-04
05.7385D-02 -7.8205D-03 05.7375D-04 -1.2657D-05
-6.9747D-06 08.4692D-06 -6.7651D-07 01.6589D-08
01.6984D+07 01.5330D+05 06.8922D+00
483.97 1.0134 280.85 1.2140
04.0029D+04 -1.6790D+02 01.2709D-01 01.0289D+01 06.1589D+00 -2.5254D-03
01.6498D-06 01.8744D-08 00.0000D+00 -4.1233D-09 -2.5593D-11 00.0000D+00
-1.5177D-02 05.9906D-05 03.6994D-08 03.4634D-05 -1.6298D-07 -1.5698D-11
00.0000D+00 01.4586D+00
01.4500D+01 -1.3477D-02 -6.8247D-02 06.8980D-05 01.0626D-04 -1.1092D-07
-5.4747D+04 01.6719D+02 01.2672D+03 02.7927D+00
03.0982D-01 -7.1302D-04 05.0412D-07 -1.5869D-04 06.7244D-07 -7.0515D-10
-1.0815D+02 05.5001D+00 -7.2796D-03 05.9544D+01 01.8381D+00 -2.2559D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-228.26 0.8180
01.2392D+00 -1.0473D-01 05.1136D-03
-1.7892D+07 01.2518D+05 06.8922D+00
248.25 0.8372
03.3222D+04 -1.5573D+03 06.9058D-01 01.6731D+01 05.0074D+00 -2.0416D-03
02.6225D-06 02.4687D-08 00.0000D+00 -3.4315D-09 -2.1122D-11 00.0000D+00
-2.3453D-02 09.8798D-05 04.0761D-08 02.9021D-05 -1.3647D-07 -1.3183D-11
-3.3294D+02 01.1931D+00
02.6134D+01 -2.5705D-02 -5.9953D-02 06.3012D-05 03.8106D-05 -4.1921D-08
-3.4075D+05 -4.7387D+02 01.0305D+03 02.2911D+00
03.4442D-01 -8.6668D-04 06.6779D-07 -1.2678D-04 05.5037D-07 -5.8186D-10
-1.2869D+03 05.5669D+00 -3.3896D-03 -1.4459D+02 01.1589D+00 -4.6152D-04

Alcènes C_8H_{16} – $C_{25}H_{50}$ **Variable de distribution : masse molaire**

-2.3873D+03 -4.0303D+01 -4.5112D+01 04.8830D+00
 01.7930D+01 -9.4191D-01 03.4357D-01 -2.8894D-02
 -1.4142D-02 08.1969D-04 -3.5094D-04 03.0616D-05
 -3.9229D+01 -1.2359D-01 01.5861D-01 -1.5087D-02
 05.2644D-02 -1.3599D-03 -5.4341D-04 06.2890D-05
 -8.4962D-06 01.5859D-07 07.6293D-07 -7.6760D-08
 02.1079D+07 01.2921D+05 06.8600D+00
 475.59 1.0238 285.18 1.1595
 03.1596D+04 -1.3648D+02 01.0181D-01 03.1874D+01 06.0780D+00 -2.4596D-03
 01.6885D-06 01.8715D-08 00.0000D+00 -4.0087D-09 -2.4302D-11 00.0000D+00
 -1.5618D-02 06.2090D-05 03.5872D-08 03.3881D-05 -1.5953D-07 -1.1816D-11
 00.0000D+00 01.4586D+00
 01.4631D+01 -1.4244D-02 -6.6435D-02 07.1681D-05 09.5820D-05 -1.0757D-07
 -3.8559D+04 01.5318D+02 01.1859D+03 02.8611D+00
 02.8748D-01 -6.8102D-04 04.8716D-07 -6.6146D-05 05.3858D-07 -6.2327D-10
 -2.1872D+02 06.6780D+00 -1.0220D-02 07.1613D+01 01.8121D+00 -2.3800D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-237.45 0.8471
 01.2675D+00 -1.1239D-01 06.2500D-03
 -1.1015D+07 01.1201D+05 06.8600D+00
 224.17 0.8823
 01.8704D+04 -1.5600D+03 06.7022D-01 03.6617D+01 05.1130D+00 -2.0553D-03
 02.7248D-06 02.4818D-08 00.0000D+00 -3.5483D-09 -2.1186D-11 00.0000D+00
 -2.4487D-02 01.0394D-04 03.8332D-08 03.0188D-05 -1.4230D-07 -9.3850D-12
 -3.4635D+02 01.2356D+00
 02.6321D+01 -2.8677D-02 -6.0128D-02 07.2635D-05 03.7805D-05 -4.9465D-08
 -3.2181D+05 -5.2538D+02 01.0075D+03 02.4222D+00
 02.9921D-01 -8.0331D-04 06.3510D-07 -4.8848D-05 04.4612D-07 -5.2787D-10
 -8.6275D+02 04.0341D+00 -2.0212D-03 -1.8663D+02 01.2880D+00 -5.5521D-04

Alkylbenzènes C_6H_6 – $C_{10}H_{14}$ **Variable de distribution : masse molaire**

-3.7646D+03 01.4656D+02 -1.6452D+01 05.2018D-01
 02.7104D+01 -1.8355D+00 01.6164D-01 -4.5947D-03
 -3.1323D-02 02.8181D-03 -2.4611D-04 06.9331D-06
 -3.0515D+01 -1.3374D+00 01.3756D-01 -4.2309D-03
 -2.5637D-02 08.2974D-03 -8.5461D-04 02.6043D-05
 01.3569D-04 -1.7635D-05 01.6302D-06 -4.7037D-08
 01.7326D+07 01.7375D+05 07.5967D+00
 421.17 1.8402 210.90 1.8644
 -4.9490D+04 -1.3618D+02 09.5400D-02 04.9491D+02 06.0619D+00 -2.7342D-03
 02.9690D-06 02.6984D-08 00.0000D+00 -1.4523D-08 -7.6830D-11 00.0000D+00
 -9.2658D-03 05.4695D-05 04.6753D-08 -9.8068D-06 -2.4012D-07 06.4591D-10
 -2.3258D+01 01.4586D+00
 04.0134D+01 -4.3674D-02 -4.2539D-01 05.0559D-04 01.4174D-03 -1.7236D-06
 -6.7120D+04 01.2441D+02 01.2857D+03 02.4580D+00
 02.9851D-01 -5.7968D-04 03.3544D-07 -2.2278D-04 01.2226D-07 01.9683D-10
 01.6684D+03 -2.3399D+01 01.1441D-01 04.4732D+02 -4.0826D+00 02.2163D-02

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-111.73 0.5330
 01.0806D+00 -5.1763D-02 01.3443D-03
 -3.2655D+06 09.5600D+04 07.5967D+00
 213.38 0.9861
 -9.5945D+04 -4.4093D+02 01.0433D-01 02.4064D+02 02.2559D+00 -6.8165D-04
 04.6340D-06 03.5761D-08 00.0000D+00 -7.8437D-09 -4.1418D-11 00.0000D+00
 -7.8743D-03 08.1355D-05 -2.9194D-08 -5.9500D-06 -1.2756D-07 03.5349D-10
 -1.8623D+02 07.7740D-01
 08.0024D+01 -9.3118D-02 -2.7141D-01 03.3498D-04 02.5187D-04 -3.2005D-07
 -2.6387D+05 -1.9402D+02 08.2477D+02 01.4252D+00
 03.2896D-01 -6.0369D-04 03.1817D-07 -1.3234D-04 09.0479D-08 09.3369D-11
 06.1025D+03 -2.8206D+01 03.5294D-02 01.3628D+03 -5.7558D+00 07.4935D-03

Alkylbenzènes C₆H₆ – C₁₆H₂₆**Variable de distribution : masse molaire**

-1.7528D+03 -9.1591D+01 03.0992D-01 01.0666D-01
 01.4562D+01 -1.6510D-01 04.7420D-02 -2.0095D-03
 -1.0389D-02 -4.9952D-04 09.8522D-06 02.9786D-07
 -4.6007D+01 02.6719D-01 02.5134D-03 -2.3635D-04
 07.1903D-02 -4.3866D-03 02.4758D-04 -6.7765D-06
 -2.4463D-05 06.1762D-06 -4.0353D-07 01.1605D-08
 01.7561D+07 01.6964D+05 07.4538D+00
 478.77 1.2847 246.67 1.5164
 -1.8337D+04 -1.8900D+02 01.2068D-01 01.9482D+02 06.6719D+00 -3.0666D-03
 02.2915D-06 02.4317D-08 00.0000D+00 -8.0537D-09 -5.1116D-11 00.0000D+00
 -1.1920D-02 04.9171D-05 09.8615D-08 01.4814D-05 -1.8687D-07 01.6126D-10
 -2.3258D+01 01.4586D+00
 02.9565D+01 -3.0373D-02 -2.2803D-01 02.5962D-04 05.3670D-04 -6.3920D-07
 -8.4273D+04 08.4621D+01 01.4924D+03 02.8928D+00
 02.7288D-01 -5.7019D-04 03.6579D-07 03.2852D-05 -3.0266D-09 -6.6016D-11
 04.2831D+02 -5.2878D-02 09.1861D-03 01.9928D+02 06.0670D-01 09.2674D-04

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-159.86 0.6535
 01.1837D+00 -8.1025D-02 02.8765D-03
 -9.8037D+06 01.1139D+05 07.4538D+00
 267.72 0.8516
 -5.2235D+04 -1.2467D+03 06.0506D-01 01.3316D+02 04.3414D+00 -1.9917D-03
 03.6444D-06 03.2813D-08 00.0000D+00 -5.4020D-09 -3.4095D-11 00.0000D+00
 -1.4115D-02 07.9652D-05 06.8978D-08 09.3142D-06 -1.2341D-07 01.1357D-10
 -2.5643D+02 09.5320D-01
 06.8246D+01 -7.6708D-02 -2.1248D-01 02.5476D-04 01.7873D-04 -2.2303D-07
 -3.2401D+05 -3.7405D+02 09.7776D+02 01.8825D+00
 02.6789D-01 -5.6639D-04 03.7135D-07 02.0915D-05 -9.0061D-09 -3.2560D-11
 01.2623D+03 -4.5598D+00 06.7354D-03 02.9658D+02 -5.4520D-01 01.1985D-03

Alkylbenzènes C₁₀H₁₄ – C₂₀H₃₄**Variable de distribution : masse molaire**

-1.5500D+03 -1.3632D+02 07.5924D+00 -5.3296D-01
 01.5554D+01 -3.3761D-01 07.6576D-02 -2.4421D-03
 -1.2116D-02 -8.9734D-05 -2.8528D-05 03.0421D-07
 -4.6938D+01 02.7292D-01 -5.9991D-03 01.1868D-03

06.6879D-02 -3.8081D-03 03.0598D-04 -1.7478D-05
-1.4888D-05 03.5820D-06 -2.6369D-07 01.5717D-08
01.7837D+07 01.6657D+05 07.2490D+00
483.97 1.0134 286.62 1.2862
01.0910D+03 -3.8938D+01 -2.4677D-02 09.0975D+01 05.8732D+00 -2.2925D-03
01.6062D-06 02.1392D-08 00.0000D+00 -4.1937D-09 -3.4395D-11 00.0000D+00
-1.4133D-02 04.0212D-05 01.5319D-07 02.6888D-05 -1.3579D-07 01.4122D-10
-2.3258D+01 01.4586D+00
01.9088D+01 -1.6557D-02 -1.0290D-01 09.5266D-05 01.7547D-04 -1.6650D-07
-5.3635D+04 01.0892D+02 01.3293D+03 02.7640D+00
03.0280D-01 -6.7678D-04 04.6403D-07 -1.3624D-04 05.8695D-07 -6.0682D-10
-4.2797D+01 05.7886D+00 -8.0808D-03 01.0938D+02 01.7465D+00 -2.5132D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-219.00 0.7705
01.2392D+00 -1.0473D-01 05.1136D-03
-1.9340D+07 01.2961D+05 07.2490D+00
312.93 0.7652
-1.9655D+04 -1.3220D+03 04.7522D-01 07.1591D+01 04.5194D+00 -1.7624D-03
02.5628D-06 02.9243D-08 00.0000D+00 -3.3006D-09 -2.7081D-11 00.0000D+00
-2.0204D-02 07.0925D-05 01.8474D-07 02.1049D-05 -1.0640D-07 -1.0994D-10
-3.4269D+02 01.1238D+00
04.1445D+01 -3.8214D-02 -1.0731D-01 01.0355D-04 07.6192D-05 -7.5537D-08
-3.4709D+05 -4.9249D+02 01.0285D+03 02.1225D+00
03.2645D-01 -7.9251D-04 05.8935D-07 -9.3720D-05 04.2892D-07 -4.5376D-10
-9.4843D+02 04.4353D+00 -2.2996D-03 -1.7894D+02 01.4067D+00 -7.7848D-04

Alkylbenzènes C₈H₁₀ – C₂₅H₄₄**Variable de distribution : masse molaire**

-3.3652D+03 03.7204D+02 -9.9848D+01 06.4161D+00
02.1920D+01 -3.0071D+00 06.1604D-01 -3.6558D-02
-1.8001D-02 03.1919D-03 -6.6359D-04 03.9430D-05
-3.8868D+01 -1.2849D+00 02.9929D-01 -1.8308D-02
04.1596D-02 04.5999D-03 -1.2626D-03 08.0049D-05
05.6143D-06 -6.9062D-06 01.6215D-06 -9.8022D-08
02.2749D+07 01.3910D+05 07.1825D+00
537.32 0.9380 303.32 1.1787
-3.2183D+03 -1.0334D+02 03.4802D-02 01.0982D+02 06.0960D+00 -2.5006D-03
01.5718D-06 02.0857D-08 00.0000D+00 -3.7771D-09 -3.0416D-11 00.0000D+00
-1.3316D-02 03.8014D-05 01.4516D-07 02.2842D-05 -1.1929D-07 01.1463D-10
-2.3258D+01 01.4586D+00
01.8984D+01 -1.6904D-02 -9.6689D-02 09.2747D-05 01.4992D-04 -1.4809D-07
-5.4543D+04 08.9265D+01 01.3098D+03 02.8525D+00
02.9224D-01 -6.4319D-04 04.3258D-07 -1.0614D-04 04.7893D-07 -4.9150D-10
09.1248D+00 05.1130D+00 -6.1589D-03 01.2926D+02 01.4936D+00 -1.7994D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-251.27 0.8377
01.2675D+00 -1.1239D-01 06.2500D-03
-1.3378D+07 01.1859D+05 07.1825D+00
296.30 0.7952
-3.1315D+04 -1.6462D+03 06.7335D-01 09.2883D+01 05.1265D+00 -2.1128D-03
02.5786D-06 02.8865D-09 00.0000D+00 -3.2657D-09 -2.6123D-11 00.0000D+00
-1.9166D-02 06.9433D-05 01.7235D-07 01.9329D-05 -1.0248D-07 -9.3188D-11
-3.8976D+02 01.2219D+00
04.4278D+01 -4.2565D-02 -1.1475D-01 01.1608D-04 08.0362D-05 -8.3908D-08

-3.8885D+05 -6.2622D+02 01.1064D+03 02.3874D+00
 03.1446D-01 -7.5265D-04 05.4929D-07 -8.1095D-05 03.8210D-07 -3.9983D-10
 -8.8402D+02 04.0775D+00 -1.8718D-03 -1.3516D+02 01.2042D+00 -5.5866D-04

Alkylnaphtalènes C₁₀H₈ – C₁₆H₂₀

Variable de distribution : masse molaire

-2.2683D+03 -2.3208D+02 01.8437D+01 -5.9543D-01
 01.2741D+01 04.2956D-01 -3.5973D-02 01.2924D-03
 -7.0003D-03 -1.0640D-03 09.6475D-05 -3.2282D-06
 -4.4852D+01 01.0052D+00 -8.4414D-02 02.8414D-03
 07.4066D-02 -7.3382D-03 06.3131D-04 -2.0698D-05
 -3.0450D-05 08.5407D-06 -7.6486D-07 02.5251D-08
 02.4627D+07 01.4939D+05 07.8810D+00
 680.63 0.5642 342.23 1.2054
 -1.5662D+04 -3.4945D+02 01.1257D-01 02.3213D+02 07.2259D+00 -3.0829D-03
 01.3790D-06 02.5846D-08 00.0000D+00 -3.7567D-09 -5.4039D-11 00.0000D+00
 -1.1094D-02 02.4551D-05 01.5241D-07 01.7698D-05 -9.3426D-08 -1.4559D-10
 -4.6517D+01 01.4586D+00
 02.5386D+01 -1.7646D-02 -1.6021D-01 01.1192D-04 03.1713D-04 -2.2166D-07
 -7.3551D+04 -1.3925D+02 01.5322D+03 03.6046D+00
 05.0374D-01 -1.0373D-03 06.5913D-07 -7.7588D-04 01.7658D-06 -1.2751D-09
 03.2318D+03 -3.0858D+01 09.2747D-02 05.5148D+02 -2.9051D+00 09.9912D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-279.06 0.8207
 01.1837D+00 -8.1025D-02 02.8765D-03
 -1.7386D+07 01.2320D+05 07.8810D+00
 518.03 0.4725
 -8.8283D+04 -2.3771D+03 09.7967D-01 02.0484D+02 05.9510D+00 -2.5426D-03
 02.4562D-06 04.1166D-08 00.0000D+00 -3.1359D-09 -4.4791D-11 00.0000D+00
 -1.6280D-02 05.1607D-05 01.9542D-07 01.4977D-05 -7.8475D-08 -1.2384D-10
 -4.5356D+02 01.1971D+00
 06.0958D+01 -4.2895D-02 -1.5288D-01 01.0825D-04 01.0068D-04 -7.1651D-08
 -5.1067D+05 -1.1492D+03 01.2749D+03 02.9658D+00
 07.0957D-01 -1.5058D-03 01.0003D-06 -6.1726D-04 01.4049D-06 -1.0198D-09
 -5.9981D+02 02.0213D+00 06.1618D-04 -2.9925D+02 01.6755D+00 -8.9808D-04

Alkylnaphtalènes C₁₀H₈ – C₂₂H₃₂

Variable de distribution : masse molaire

-3.9785D+03 02.1450D+02 -4.1059D+01 02.1556D+00
 02.3249D+01 -2.3290D+00 03.4702D-01 -1.6942D-02
 -1.9837D-02 02.4604D-03 -3.7263D-04 01.8325D-05
 -3.8976D+01 -9.1352D-01 01.5303D-01 -7.6709D-03
 03.4814D-02 03.1626D-03 -6.0824D-04 03.1556D-05
 01.8253D-05 05.5862D-06 09.3060D-07 -4.6561D-08
 02.4459D+07 01.5078D+05 07.6252D+00
 667.89 0.6440 360.51 1.0997
 -9.2855D+02 -1.9724D+02 02.2249D-02 01.4210D+02 06.3009D+00 -2.5340D-03
 01.2307D-06 02.3030D-08 00.0000D+00 -2.8730D-09 -3.7235D-11 00.0000D+00
 -1.1183D-02 02.2368D-05 01.5501D-07 01.8255D-05 -8.0458D-08 -1.6105D-10
 -4.6517D+01 01.4586D+00
 02.1548D+01 -1.4894D-02 -1.1507D-01 07.9424D-05 01.8888D-04 -1.2894D-07
 -5.3112D+04 -4.5427D+01 01.4074D+03 03.0355D+00
 04.8734D-01 -1.0092D-03 06.4055D-07 -6.8162D-04 01.6053D-06 -1.1690D-09

01.0753D+03 -4.9265D+00 01.7122D-02 02.7500D+02 04.2902D-01 02.3536D-04

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-322.84 0.9009
 01.2675D+00 -1.1239D-01 06.2500D-03
 -2.4445D+07 01.3622D+05 07.6252D+00
 458.46 0.5828
 -4.9405D+04 -2.2459D+03 08.4894D-01 01.3240D+02 05.7010D+00 -2.2974D-03
 02.1839D-06 03.5477D-08 00.0000D+00 -2.6315D-09 -3.4263D-11 00.0000D+00
 -1.7128D-02 04.8838D-05 02.0718D-07 01.6533D-05 -7.3321D-08 -1.4539D-10
 -5.1741D+02 01.3141D+00
 06.4480D+01 -4.4211D-02 -1.1475D-01 01.1608D-04 08.0362D-05 -8.3908D-08
 -3.8885D+05 -6.2622D+02 01.1064D+03 02.3874D+00
 07.0864D-01 -1.5289D-03 01.0191D-06 -6.1619D-04 01.4488D-06 -1.0552D-09
 06.7282D+03 -2.2309D+01 02.0696D-02 05.6303D+02 -1.1293D+00 01.3619D-03

Cyclopentanes C₅H₁₀ – C₁₀H₂₀

Variable de distribution : masse molaire

03.9020D+02 -2.1095D+02 04.6878D-01 02.3878D-01
 -3.8658D+00 01.3713D+00 -1.7630D-02 -1.0064D-03
 02.3774D-02 -3.8656D-03 01.6604D-04 -2.0112D-06
 -5.4781D+01 01.4585D+00 02.6769D-03 -1.8329D-03
 02.0310D-01 -1.6938D-02 05.7141D-04 -3.3498D-06
 -2.9856D-04 03.5486D-05 -1.6663D-06 02.5659D-08
 01.4743D+07 01.6940D+05 07.3458D+00
 373.42 1.9024 188.61 1.8518
 -1.8312D+04 -4.8327D+01 06.3325D-02 -1.2116D+02 06.7821D+00 -2.9996D-03
 03.1687D-06 02.4175D-08 00.0000D+00 -1.4257D-08 -4.8944D-11 00.0000D+00
 -1.7757D-02 07.9933D-05 01.1251D-07 06.4020D-05 -4.2365D-07 -4.9751D-11
 -2.0200D+01 01.4586D+00
 03.4599D+01 -4.0001D-02 -3.6085D-01 04.4842D-04 01.2044D-03 -1.4863D-06
 -7.4092D+04 02.1746D+02 01.1100D+03 02.8274D+00
 01.8904D-01 -2.5735D-04 02.4981D-08 02.7616D-04 -1.3140D-06 01.7445D-09
 04.9979D+02 -3.0269D+00 02.5293D-02 02.4109D+02 -7.0143D-01 08.2008D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-100.32 0.5360
 01.0806D+00 -5.1763D-02 01.3443D-03
 -2.7391D+06 09.2074D+04 07.3458D+00
 180.01 1.0264
 -7.4849D+03 -7.2158D+02 03.5944D-01 -6.1481D+01 03.6167D+00 -1.5953D-03
 04.6264D-06 02.9497D-08 00.0000D+00 -7.7135D-09 -2.7308D-11 00.0000D+00
 -2.4482D-02 01.2276D-04 01.2104D-07 03.5104D-05 -2.2794D-07 -3.5907D-11
 -1.6653D+02 07.8180D-01
 09.9718D+01 -1.2135D-01 -4.0828D-01 05.0902D-04 04.5291D-04 -5.6346D-07
 -1.8839D+05 -5.9578D+01 06.0266D+02 01.4983D+00
 01.5396D-01 -1.1610D-04 -1.4974D-07 01.6727D-04 -7.2891D-07 09.3432D-10
 06.1816D+02 -1.9990D+00 04.1886D-03 01.9557D+02 -2.0623D-01 09.8170D-04

Cyclopentanes C₆H₁₂ – C₁₆H₃₂

Variable de distribution : masse molaire

-1.0666D+03 -3.3618D+02 01.9838D+01 -1.7232D-01
 01.4101D+01 01.0918D+00 -5.7442D-02 -3.4652D-04

-1.1774D-02 -1.9075D-03 01.3405D-04 -1.7764D-06
-4.6381D+01 01.2512D+00 -7.0386D-02 03.8177D-04
06.7886D-02 -9.4066D-03 06.3733D-04 -1.0821D-05
-1.4356D-05 01.1633D-05 -8.5011D-07 01.6366D-08
01.4468D+07 01.7020D+05 07.2354D+00
419.88 1.4844 212.32 1.6449
-5.2389D+04 09.5691D+01 -4.7974D-02 02.3579D+02 05.3184D+00 -1.8687D-03
02.6460D-06 02.4634D-08 00.0000D+00 -9.5704D-09 -5.2612D-11 00.0000D+00
-1.6805D-02 06.2157D-05 01.3863D-07 05.5608D-05 -2.6689D-07 -2.8332D-10
-2.0200D+01 01.4586D+00
02.3961D+01 -2.7225D-02 -1.7071D-01 02.2358D-04 03.8261D-04 -5.3310D-07
-8.8253D+04 02.2999D+02 01.2291D+03 02.7400D+00
01.9164D-01 -3.4523D-04 01.7557D-07 02.5691D-04 -5.7897D-07 04.6755D-10
01.2518D+02 03.6391D+00 -3.0670D-03 01.1492D+02 01.5897D+00 -1.8152D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-126.34 0.6021
01.1837D+00 -8.1025D-02 02.8765D-03
-3.8779D+06 09.4757D+04 07.2354D+00
226.62 0.9060
-8.4263D+04 -5.6857D+02 01.8208D-01 01.4644D+02 03.1856D+00 -1.1122D-03
03.9231D-06 03.1564D-08 00.0000D+00 -5.9081D-09 -3.2283D-11 00.0000D+00
-2.4178D-02 09.7805D-05 01.7521D-07 03.4225D-05 -1.6483D-07 -1.7227D-10
-2.0449D+02 08.7820D-01
04.4116D+01 -5.6344D-02 -1.2895D-01 01.8380D-04 01.0542D-04 -1.6078D-07
-2.4271D+05 -1.1601D+02 07.3824D+02 01.6493D+00
01.4193D-01 -2.1380D-04 03.9849D-08 01.9586D-04 -4.8956D-07 04.6859D-10
01.3187D+02 03.5362D-01 01.3966D-03 06.4875D+01 04.3296D-01 02.0992D-04

Cyclopentanes C₁₀H₂₀ – C₂₀H₄₀**Variable de distribution : masse molaire**

-1.9925D+03 -2.6820D+02 07.1563D+00 04.4144D-01
01.6128D+01 03.7823D-01 06.5762D-02 -6.5723D-03
-1.2146D-02 -1.0228D-03 01.0921D-05 03.5259D-06
-4.0631D+01 07.2677D-01 -9.8460D-04 -2.3203D-03
05.5924D-02 -6.4666D-03 03.6368D-04 -4.5906D-06
-1.1286D-05 07.0151D-06 -4.1551D-07 05.5987D-09
02.1339D+07 01.3181D+05 07.0622D+00
513.69 0.9790 289.57 1.2284
-4.3296D+04 06.0251D+01 -2.1894D-02 02.3971D+02 05.3170D+00 -1.8571D-03
01.6313D-06 02.0435D-08 00.0000D+00 -4.1271D-09 -3.0349D-11 00.0000D+00
-1.1812D-02 03.3273D-05 01.2986D-07 02.9072D-05 -1.1175D-07 -2.4077D-10
-2.0200D+01 01.4586D+00
01.6247D+01 -1.4748D-02 -8.1525D-02 08.0618D-05 01.3266D-04 -1.3540D-07
-7.2197D+04 01.9261D+02 01.1350D+03 02.9477D+00
02.4611D-01 -4.8981D-04 03.0470D-07 -2.8983D-05 01.8643D-07 -2.1797D-10
02.0675D+02 02.6024D+00 02.5519D-04 08.9571D+01 01.9235D+00 -2.8459D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-233.06 0.8092
01.2392D+00 -1.0473D-01 05.1136D-03
-9.8031D+06 01.0743D+05 07.0622D+00
282.07 0.7985
-1.0301D+05 -1.2640D+03 04.4065D-01 02.0083D+02 04.4539D+00 -1.5557D-03
02.6232D-06 02.7640D-08 00.0000D+00 -3.3944D-09 -2.4799D-11 00.0000D+00
-1.8746D-02 06.0142D-05 01.8635D-07 02.3814D-05 -9.2113D-08 -1.9552D-10

-3.6014D+02 01.1803D+00
03.3360D+01 -3.2453D-02 -8.2789D-02 08.5537D-05 05.6833D-05 -6.0894D-08
-3.3825D+05 -4.9291D+02 09.2123D+02 02.3826D+00
02.5162D-01 -5.2981D-04 03.5312D-07 -2.1169D-05 01.4458D-07 -1.7204D-10
05.5324D+02 -1.4872D+00 03.3888D-03 -2.3434D+02 01.6049D+00 -9.3130D-04

Cyclopentanes C₈H₁₆ – C₂₅H₅₀

Variable de distribution : masse molaire

-2.0096D+03 -7.7379D+01 -4.1713D+01 04.5353D+00
01.6663D+01 -6.0711D-01 02.9837D-01 -2.5642D-02
-1.2964D-02 02.0054D-04 -2.5546D-04 02.4545D-05
-4.0477D+01 01.6729D-01 01.0347D-01 -1.1170D-02
05.4236D-02 -3.1857D-03 -1.9897D-04 03.9781D-05
-9.5554D-06 02.8520D-06 02.5561D-07 -4.4396D-08
02.0312D+07 01.3443D+05 07.0241D+00
501.62 1.0032 289.82 1.1866
-2.8134D+04 05.7124D+00 02.3898D-02 09.4791D+01 05.8411D+00 -2.2832D-03
01.7366D-06 02.0975D-08 00.0000D+00 -4.2410D-09 -3.0752D-11 00.0000D+00
-1.1816D-02 03.5437D-05 01.2251D-07 02.6277D-05 -1.1078D-07 -1.8639D-10
-2.0200D+01 01.4586D+00
01.6004D+01 -1.5309D-02 -7.5555D-02 08.0858D-05 01.1151D-04 -1.2555D-07
-8.9192D+04 02.2278D+02 01.2205D+03 02.8007D+00
02.2810D-01 -4.4343D-04 02.6766D-07 02.6467D-05 03.2864D-08 -8.9974D-11
09.7670D+01 03.6985D+00 -2.3924D-03 01.1609D+02 01.6072D+00 -1.9922D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-233.61 0.8239
01.2675D+00 -1.1239D-01 06.2500D-03
-1.2174D+07 01.1267D+05 07.0241D+00
256.74 0.8452
-6.1888D+04 -1.3166D+03 05.2444D-01 09.8666D+01 04.7377D+00 -1.8229D-03
02.8461D-06 02.8813D-08 00.0000D+00 -3.7045D-09 -2.6494D-11 00.0000D+00
-1.8761D-02 06.4733D-05 01.7109D-07 02.3079D-05 -9.7323D-08 -1.6250D-10
-3.6095D+02 01.2018D+00
02.8252D+01 -3.0688D-02 -6.3920D-02 07.8137D-05 03.9571D-05 -5.3342D-08
-3.7505D+05 -4.3040D+02 01.0069D+03 02.3055D+00
02.1331D-01 -4.3081D-04 02.7379D-07 03.7060D-05 -8.8746D-09 -4.7764D-11
02.9782D+02 -4.7898D-01 02.4074D-03 -4.6717D+01 09.1773D-01 -3.0806D-04

Cyclohexanes C₆H₁₂ – C₁₀H₂₀

Variable de distribution : masse molaire

-2.2137D+03 -1.6488D+02 05.9419D+00 -7.4451D-02
01.5235D+01 04.1580D-01 -4.5756D-03 -2.3944D-04
-1.1579D-02 -1.1982D-03 05.7799D-05 -9.5507D-07
-3.7127D+01 01.1523D+00 -4.4978D-02 06.9175D-04
06.2595D-02 -9.6737D-03 04.9176D-04 -9.6740D-06
-2.6657D-05 01.4823D-05 -8.4666D-07 01.7788D-08
01.7963D+07 01.3795D+05 07.4589D+00
426.20 1.5071 220.95 1.5722
-1.6081D+05 04.7571D+01 03.8578D-02 01.2410D+03 06.1292D+00 -2.8380D-03
02.4247D-06 01.9868D-08 00.0000D+00 -8.2334D-09 -1.0765D-11 00.0000D+00
-1.4697D-02 06.4483D-05 01.0377D-07 04.0000D-05 -3.0399D-07 02.9015D-11
-2.0200D+01 01.4586D+00
03.3598D+01 -3.6631D-02 -3.3973D-01 03.9743D-04 01.1075D-03 -1.2978D-06

-8.4908D+04 02.6060D+02 01.1096D+03 02.6556D+00
02.4536D-01 -2.9440D-04 01.5978D-08 -2.4317D-04 -6.9537D-07 01.5081D-09
02.6394D+03 -3.7850D+01 01.6813D-01 05.7948D+02 -5.8263D+00 02.8055D-02

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-140.31 0.6355
01.0806D+00 -5.1763D-02 01.3443D-03
-1.4661D+06 08.7849D+04 07.4589D+00
214.41 0.9585
-3.2875D+05 -8.1529D+02 04.3960D-01 07.7306D+02 03.9022D+00 -1.8106D-03
03.5823D-06 02.1384D-08 00.0000D+00 -5.2380D-09 -6.8558D-12 00.0000D+00
-2.0329D-02 01.0719D-04 09.9843D-08 02.5469D-05 -1.9331D-07 01.8080D-11
-2.2485D+02 09.2690D-01
01.0696D+02 -1.2256D-01 -4.3317D-01 05.0745D-04 04.7224D-04 -5.5368D-07
-2.4109D+05 -1.0928D+02 07.0637D+02 01.6807D+00
02.7962D-01 -1.9684D-04 -1.9587D-07 -1.5489D-04 -4.4188D-07 09.5898D-10
01.1885D+04 -5.7216D+01 07.1917D-02 02.0440D+03 -9.1892D+00 01.1943D-02

Cyclohexanes C₆H₁₂ – C₁₆H₃₂**Variable de distribution : masse molaire**

-2.7862D+03 02.6053D+02 -4.5345D+01 02.0340D+00
02.2027D+01 -2.2835D+00 03.1447D-01 -1.2957D-02
-2.0952D-02 02.5877D-03 -3.6829D-04 01.5323D-05
-3.6621D+01 -1.5240D+00 02.2794D-01 -9.6219D-03
02.6098D-02 06.3938D-03 -1.0787D-03 04.6897D-05
03.1132D-05 -9.4327D-06 01.4771D-06 -6.2346D-08
01.4779D+07 01.7060D+05 07.3370D+00
438.56 1.4159 218.89 1.6104
-5.1892D+04 08.7909D+01 -9.6457D-03 01.3680D+02 05.7099D+00 -2.3589D-03
02.3960D-06 02.3565D-08 00.0000D+00 -8.2505D-09 -4.6358D-11 00.0000D+00
-1.5152D-02 05.5951D-05 01.2986D-07 04.5415D-05 -2.3245D-07 -2.1391D-10
-2.0200D+01 01.4586D+00
02.4217D+01 -2.5888D-02 -1.7163D-01 02.0668D-04 03.8182D-04 -4.8312D-07
-1.0137D+05 02.5945D+02 01.2845D+03 02.6056D+00
01.9820D-01 -2.8702D-04 09.5558D-08 02.1336D-04 -8.5378D-07 08.6220D-10
07.1808D+02 -3.5540D+00 02.0802D-02 02.3950D+02 02.7863D-01 01.6456D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-134.66 0.6183
01.1837D+00 -8.1025D-02 02.8765D-03
-7.5058D+06 01.0346D+05 07.3370D+00
245.54 0.8804
-6.8538D+04 -6.1282D+02 02.3753D-01 01.0072D+02 03.3760D+00 -1.2978D-03
03.5357D-06 02.9969D-08 00.0000D+00 -5.1623D-09 -2.9007D-11 00.0000D+00
-2.1396D-02 08.7963D-05 01.5901D-07 02.8353D-05 -1.4523D-07 -1.3298D-10
-2.1662D+02 09.0180D-01
05.2342D+01 -6.1098D-02 -1.6208D-01 02.0317D-04 01.3859D-04 -1.8031D-07
-2.7712D+05 -8.4334D+01 08.0008D+02 01.5958D+00
01.6664D-01 -5.1220D-05 -1.9008D-07 01.3766D-04 -8.1986D-07 09.4538D-10
02.0315D+03 -7.7465D+00 01.0265D-02 03.2012D+02 -4.9890D-01 01.0644D-03

Cyclohexanes C₁₀H₂₀ – C₂₀H₄₀**Variable de distribution : masse molaire**

-8.4256D+02 -1.4003D+02 02.4506D+00 -1.6917D-01
 01.4423D+01 -3.1882D-01 01.0078D-01 -4.1616D-03
 -1.2109D-02 -2.6699D-05 -6.4610D-05 02.6115D-06
 -4.8289D+01 03.3740D-01 -9.9185D-04 07.4554D-04
 06.9161D-02 -4.1008D-03 02.8091D-04 -1.5340D-05
 -1.4431D-05 03.5650D-06 -1.9720D-07 01.1680D-08
 01.6261D+07 01.6384D+05 07.1574D+00
 500.93 1.0741 271.25 1.3209
 -4.6477D+04 07.1003D+01 -3.2173D-02 01.0684D+02 05.8010D+00 -2.2373D-03
 01.7367D-06 02.1630D-08 00.0000D+00 -4.6477D-09 -3.5446D-11 00.0000D+00
 -1.2397D-02 03.5852D-05 01.3313D-07 03.0023D-05 -1.2246D-07 -2.2624D-10
 -2.0200D+01 01.4586D+00
 01.6816D+01 -1.5550D-02 -8.5821D-02 08.7425D-05 01.4101D-04 -1.4987D-07
 -1.0666D+05 02.3292D+02 01.3277D+03 02.7136D+00
 02.5253D-01 -4.9749D-04 03.0817D-07 -6.1213D-05 02.0618D-07 -2.1844D-10
 -2.2938D+02 07.6553D+00 -1.1119D-02 01.1824D+02 01.7406D+00 -2.5777D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-200.07 0.7475
 01.2392D+00 -1.0473D-01 05.1136D-03
 -1.7171D+07 01.2365D+05 07.1574D+00
 279.50 0.8148
 -7.0034D+04 -1.2081D+03 04.6121D-01 08.3463D+01 04.5318D+00 -1.7480D-03
 02.7409D-06 02.9288D-08 00.0000D+00 -3.6093D-09 -2.7526D-11 00.0000D+00
 -1.8845D-02 06.2146D-05 01.8127D-07 02.3243D-05 -9.4801D-08 -1.7434D-10
 -3.1202D+02 01.0902D+00
 02.7098D+01 -2.7511D-02 -6.0309D-02 06.7976D-05 03.7043D-05 -4.5576D-08
 -3.7383D+05 -3.0692D+02 09.9518D+02 02.0227D+00
 02.6162D-01 -5.3960D-04 03.5719D-07 -3.8619D-05 01.5623D-07 -1.7463D-10
 -7.0398D+02 03.4983D+00 -1.1471D-03 -6.1337D+00 08.6464D-01 -3.3897D-04

Cyclohexanes C₈H₁₆ – C₂₅H₅₀**Variable de distribution : masse molaire**

-2.2030D+03 02.8630D+02 -1.0466D+02 07.5468D+00
 01.8089D+01 -2.5357D+00 06.3130D-01 -4.1639D-02
 -1.4766D-02 02.6821D-03 -6.8097D-04 04.5082D-05
 -4.1444D+01 -9.2356D-01 02.8480D-01 -1.9511D-02
 05.2632D-02 02.6527D-03 -1.1634D-03 08.4249D-05
 -5.1111D-06 -4.7470D-06 01.5000D-06 -1.0201D-07
 01.9919D+07 01.4154D+05 07.1040D+00
 504.23 1.0258 283.24 1.2267
 -4.7830D+04 07.6726D+01 -2.6243D-02 01.1167D+02 05.7808D+00 -2.2586D-03
 01.7314D-06 02.1333D-08 00.0000D+00 -4.2705D-09 -3.2017D-11 00.0000D+00
 -1.2431D-02 03.5100D-05 01.3530D-07 02.8957D-05 -1.1003D-07 -2.3844D-10
 -2.0200D+01 01.4586D+00
 01.6367D+01 -1.5306D-02 -7.7855D-02 08.0278D-05 01.1519D-04 -1.2357D-07
 -9.9933D+04 02.4176D+02 01.2823D+03 02.6975D+00
 02.2225D-01 -4.1500D-04 02.3986D-07 04.8905D-05 -7.0664D-08 08.3673D-12
 -9.3455D+01 06.2053D+00 -7.4913D-03 01.4145D+02 01.4721D+00 -1.8676D-03

Variable de distribution : température normale d'ébullition

-221.72 0.7990
01.2675D+00 -1.1239D-01 06.2500D-03
-1.3049D+07 01.1589D+05 07.1040D+00
267.26 0.8364
-2.7257D+04 08.0175D+01 -2.8308D-02 05.5564D+01 05.7547D+00 -2.2384D-03
02.7817D-06 02.9065D-08 00.0000D+00 -3.5946D-09 -2.6699D-11 00.0000D+00
-1.9251D-02 06.2119D-05 01.8824D-07 02.3842D-05 -9.2541D-08 -1.9065D-10
-3.4361D+02 01.1654D+00
02.9328D+01 -3.0202D-02 -6.7547D-02 07.6262D-05 04.2785D-05 -5.1701D-08
-3.8874D+05 -3.4871D+02 01.0325D+03 02.1419D+00
02.0089D-01 -3.6813D-04 02.1343D-07 05.9345D-05 -1.1567D-07 05.2814D-11
-6.8349D+02 03.4137D+00 -1.0639D-03 -2.3783D+01 09.2109D-01 -3.8326D-04

ANNEXE B : MODELISATION

B.1 Processus du calcul

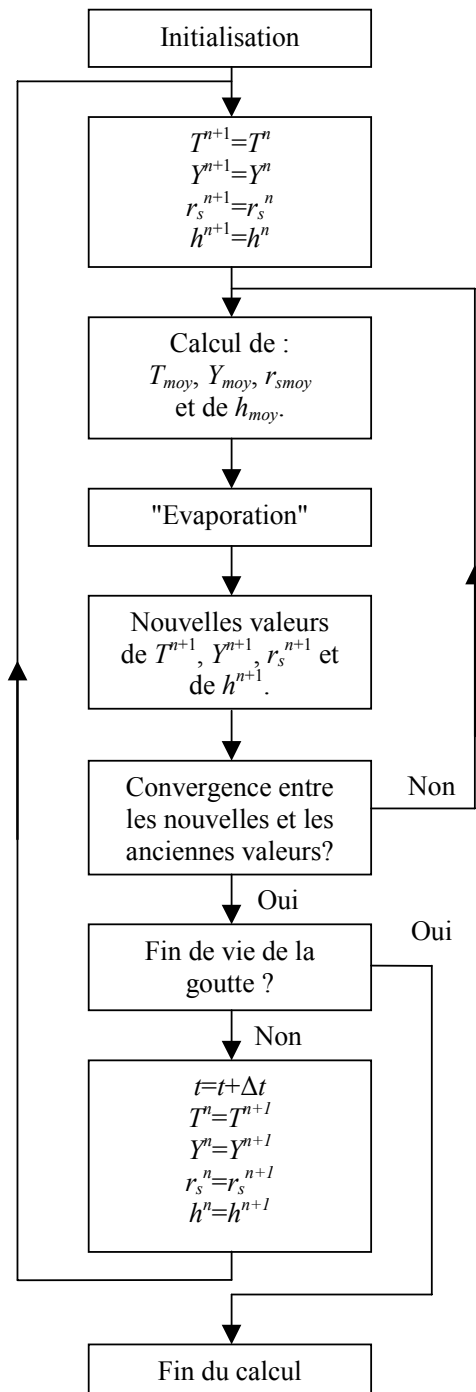


Figure B.1 : Processus principal du calcul

Le détail du module « Evaporation » sur la Figure B.1 est donné sur la Figure B.2.

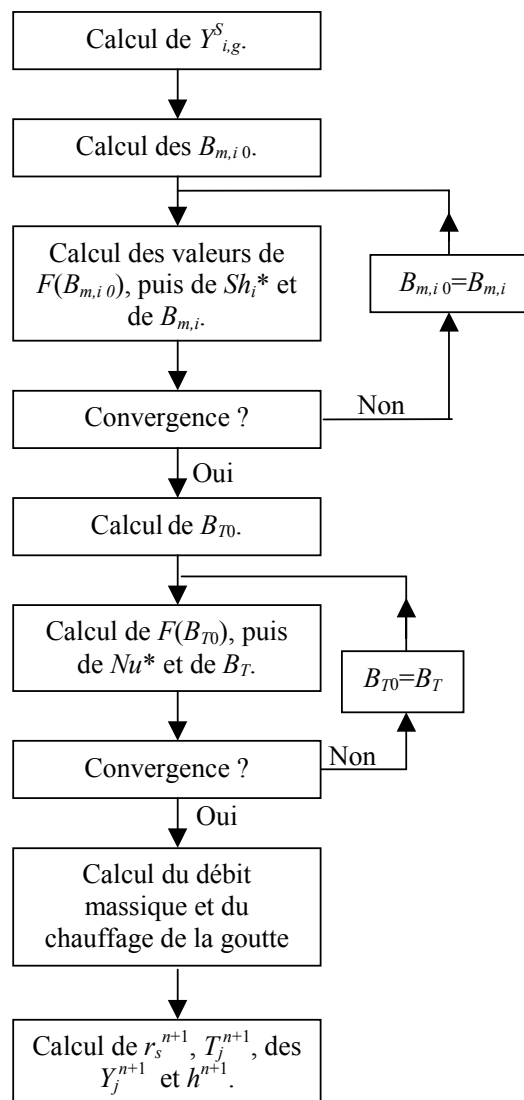


Figure B.2 : Description du module “Evaporation”

B.2 Algorithmes de calcul

B.2.1 Nombres de transfert de masse de Spalding

Pour déterminer les différents nombres de transfert de masse de *Spalding* $B_{m,i}$ et il est nécessaire de résoudre l'équation :

$$f\left(\frac{\dot{m}}{2\pi r_s \rho_g}\right) = f(x) = 1 - \sum_i \frac{Y_{i,g}^s \exp(x/(D_{i,g} Sh_i^*)) - Y_{i,g}^\infty}{\exp(x/(D_{i,g} Sh_i^*)) - 1} = 0 \quad (\text{B.1})$$

Pour cela, la méthode *Newton-Raphson* est utilisée. En voici la description.

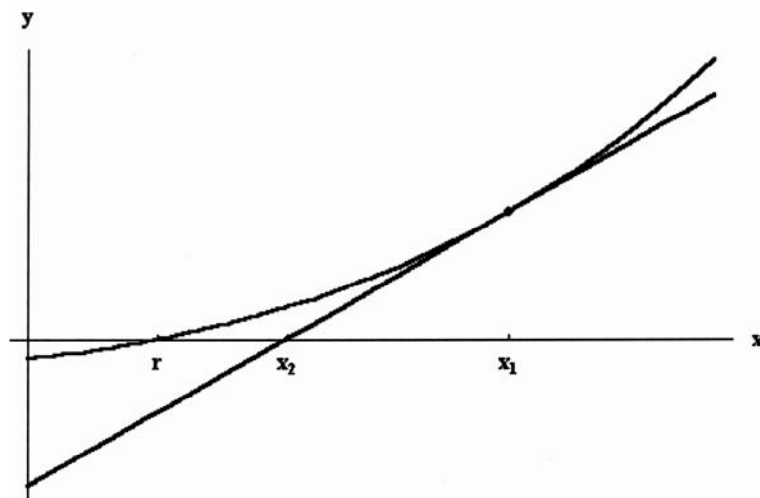


Figure B.3 : Tracé de la méthode *Newton-Raphson*

Si r est la racine de $f(x)$ et que $f'(r)$ est non nul, il est possible de trouver une valeur approchée de r grâce à une valeur x_1 assez proche de r (Figure B.3). La tangente de $f(x)$ au point $(x_1, f(x_1))$ croise l'axe des abscisse au point x_2 . La Figure B.3 montre que l'abscisse de x_2 est plus proche de la valeur r . Cette abscisse a pour valeur :

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \quad (\text{B.2})$$

En appliquant cette procédure n fois, la valeur de x_{n+1} tendra vers celle de r :

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (\text{B.3})$$

Pour déterminer la valeur de $r = D_{i,g} Sh_i^* \ln(1 + B_{m,i}) = \frac{\dot{m}}{2\pi r_s \rho_g}$, la valeur de x_1 est calculée de

la façon suivante :

$$x_1 = \frac{\sum_i x_{i,g}^s D_{i,g} Sh_i^*}{\sum_i x_{i,g}^s} \ln(1 + B_M) \text{ avec } B_M = \frac{\sum_i Y_{i,g}^s - \sum_i Y_{i,g}^\infty}{1 - \sum_i Y_{i,g}^s} \quad (\text{B.4})$$

Seulement 5 ou 6 itérations au maximum sont nécessaires pour trouver une racine r avec une erreur inférieure à 0,01%.

B.2.2 Nombre de transfert d'énergie de Spalding

Le nombre de transfert d'énergie de *Spalding* B_T dépend du nombre de *Nusselt* modifié Nu^* qui lui dépend de B_T . Là aussi, un calcul itératif est nécessaire. Une première valeur de Nu^* est calculée grâce à une première valeur $B_T = B_{T0}$ en supposant la quantité de chaleur servant à chauffer la goutte nulle :

$$B_{T0} = \frac{Cp_{vap}(T^\infty - T^s)}{l_v} \quad (\text{B.5})$$

Nu^* est utilisée pour déterminer une nouvelle valeur de B_T qui servira à calculer une autre valeur de Nu^* puis de B_T et ainsi de suite jusqu'à convergence de B_T (écart inférieur à 0,01%). En général, 2 ou 3 itérations suffisent.

B.2.3 Calcul des différents profils dans la goutte

Pour résoudre les systèmes tridiagonaux présents dans les calculs de profils (de température ou de composition) dans la goutte, l'algorithme de Thomas est utilisé. En voici la description. Le système d'équations à résoudre peut s'écrire, pour j compris entre 1 et $N+1$, sous la forme suivante :

$$a_j G_{j-1}^{n+1} + b_j G_j^{n+1} + c_j G_{j+1}^{n+1} = f_j \quad (\text{B.6})$$

$$a_1 = c_{N+1} = 0 \quad (\text{B.7})$$

Cela donne sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & 0 & a_N & b_N & c_N \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & a_{N+1} & b_{N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1^{n+1} \\ G_2^{n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ G_N^{n+1} \\ G_{N+1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ f_N \\ f_{N+1} \end{pmatrix} \quad (\text{B.8})$$

Dans un premier temps, il faut rendre le système bidiagonale en supprimant les coefficients a_i puis remplacer les coefficients b_i par 1 :

$$\begin{pmatrix} 1 & z_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 1 & z_2 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 & z_N \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1^{n+1} \\ G_2^{n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ G_N^{n+1} \\ G_{N+1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ w_N \\ w_{N+1} \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

Le système devient alors :

$$G_j^{n+1} + z_j G_{j+1}^{n+1} = w_j \text{ pour } j = 1, \dots, N \quad (\text{B.10})$$

$$G_{N+1}^{n+1} = w_{N+1} \quad (\text{B.11})$$

avec comme nouveaux coefficients :

$$z_1 = \frac{c_1}{b_1} \quad (\text{B.12})$$

$$z_j = \frac{c_j}{b_j - a_j z_{j-1}} \text{ pour } j = 1, \dots, N \quad (\text{B.13})$$

$$w_1 = \frac{f_1}{b_1} \quad (\text{B.14})$$

$$w_j = \frac{f_j - a_j w_{j-1}}{b_j - a_j z_{j-1}} \text{ pour } j = 1, \dots, N+1 \quad (\text{B.15})$$

Dans un second temps, les solutions G_j^{n+1} peuvent être trouvées dans le sens décroissant de j .

Tout d'abord :

$$G_{N+1}^{n+1} = w_{N+1} \quad (\text{B.16})$$

puis

$$G_j^{n+1} = w_j - z_j G_{j+1}^{n+1} \text{ pour } j = N, \dots, 1 \quad (\text{B.17})$$

ANNEXE C : COMPOSITION DES CARBURANTS

C.1 Définitions des différents hydrocarbures

Les hydrocarbures sont des composés organiques entièrement composés d'atomes de carbone et d'hydrogène : les paraffines, les oléfines, les naphènes et les aromatiques. Les membres de chaque classe contiennent différents nombres d'atomes de carbone mais présentent une structure commune. Les classes diffèrent suivant l'arrangement des atomes de carbone et d'hydrogène.

C.1.1 Paraffines

Les paraffines, aussi appelés alcanes, ont pour formule générale C_nH_{2n+2} , où n désigne le nombre d'atome de carbone. Ces atomes de carbone sont joints par des liaisons simples.

Pour les paraffines possédant au moins quatre atomes de carbone, il est possible d'avoir des composants différents pour un même nombre d'atomes de carbone et d'hydrogène. Ces composants, appelés isomères, diffèrent dans leur arrangement (Figure C.1) ainsi que dans leurs propriétés physiques et chimiques. Pour les paraffines normales, appelées n-paraffines (ou n-alcanes), les atomes de carbone sont joints de sorte à former une chaîne unique. Pour les iso-paraffines, les atomes de carbone forment une chaîne qui a la même structure que les n-paraffines, mais d'autres atomes ou chaînes de carbone viennent se greffer sur la chaîne principale.

Le n-octane et l'iso-octane (Figure C.1) sont deux exemples d'isomères à huit atomes de carbone (C_8H_{18}). L'iso-octane est le nom commun pour le 2,2,4-triméthylpentane qui est souvent utilisé pour représenter l'essence.

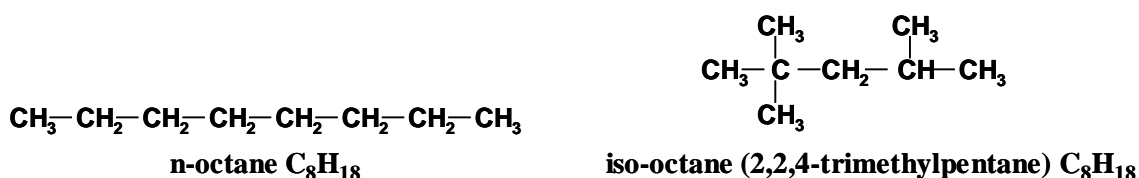


Figure C.1: Exemple de n-paraffine et d'iso-paraffine

Les paraffines sont souvent des composants majoritaires dans les différents carburants.

C.1.2 Oléfines

Les oléfines, aussi appelées alcènes, sont similaires aux paraffines mais contiennent au moins deux atomes d'hydrogène en moins et au moins une double liaison entre deux atomes de carbone. Les oléfines avec une seule double liaison ont pour formule générale C_nH_{2n} . Comme les paraffines, les oléfines possédant au moins quatre atomes de carbone peuvent former des isomères.

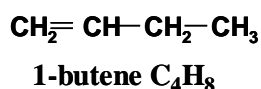
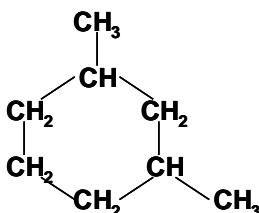


Figure C.2 : Exemple d'oléfine

Ces composants sont très peu présents, voir même absents, dans le kérosène, mais apparaissent dans la composition des essences.

C.1.3 Naphtènes

Dans les naphtènes, aussi appelés cycloparaffines ou cycloalcanes, certains atomes de carbone forment un anneau. Les naphtènes les plus présents dans les produits pétroliers présentent des anneaux contenant cinq ou six atomes (respectivement appelés cyclopentanes et cyclohexanes). La formule générale des naphtènes composés d'un seul anneau est C_nH_{2n} .



1,3-dimethylcyclohexane C_8H_{16}

Figure C.3 : Exemple de naphtène

Les naphtènes sont présents dans le kérosène et le gasoil et en faible quantité dans l'essence.

C.1.4 Aromatiques

Comme les naphtènes, certains atomes de carbone des aromatiques forment un anneau, mais ils sont cette fois joints par des liaisons aromatiques et non par des liaisons simples. C'est à dire que les atomes de carbone sont liés par une liaison simple et une liaison double.

L'anneau des aromatiques à anneau unique (aromatiques monocycliques) comme les alkylbenzènes contiennent toujours six atomes de carbone. La formule générale est C_nH_{2n-6} . Dans les aromatiques contenant plusieurs anneaux, chaque anneau est formé de six atomes de carbone, mais certains atomes de carbone appartiennent à plusieurs anneaux. La naphthalène

est l'aromatique à deux anneaux (aromatique bicyclique) le plus simple. Il a pour formule générale C_nH_{2n-12} .

Les aromatiques monocycliques sont les plus présents dans le kérosène et les aromatiques bicycliques y sont en quantité plus faible. La quantité totale d'aromatiques dans le Jet A et le Jet A1 (kérosènes présentés plus loin) est limitée à 25% du volume, alors que la quantité totale de naphthalènes est limitée à 3% du volume.

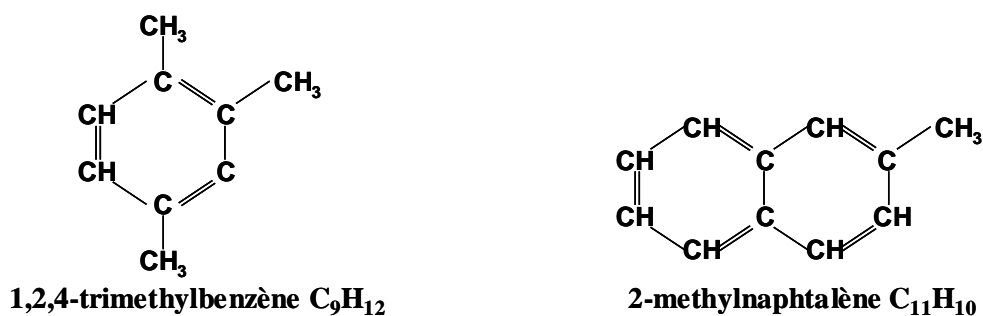


Figure C.4 : Exemple d'alkylbenzène (à gauche) et de d'alkylnaphtalène (à droite)

Le 1,2,4-triméthylbenzène est souvent utilisé pour représenter les aromatiques dans le kérosène.

C.1.5 Autres hydrocarbures particuliers

Par leur structure, il arrive que certains hydrocarbures soient à la fois un mélange d'aromatiques et de naphthalènes, comme la tétraline, aussi appelée 1,2,3,4-tétrahydronaphtalène, qui est un atome de naphthalène sur lequel 4 atomes d'hydrogène ont été ajoutés sur le deuxième anneau en remplaçant les liaisons aromatiques par des liaisons simples (Figure C.5). Ce composant est tout de même considéré comme un aromatique.

La décaline est la tétraline sur laquelle six atomes d'hydrogène ont été ajoutés au premier anneau pour remplacer les liaisons aromatiques restantes en liaisons simples. Contrairement à la tétraline, la décaline est classé dans les naphthalènes puisqu'il se nomme également dicyclohexane.

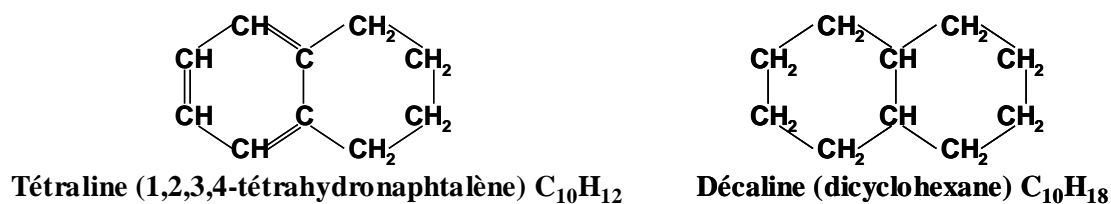


Figure C.5 : Tétraline et décaline

Le deuxième anneau de la tétraline n'est parfois composé que de cinq atomes de carbone. Le composant ainsi formé est l'indane. L'indène est un indane où une double liaison apparaît dans le deuxième anneau.

C.2 Composition des carburants

C.2.1 Classification des carburants

Le Tableau C.1 [41] présente quelques caractéristiques et la composition globale des différents carburants existants. Il apparaît que l'essence est constituée de composants avec peu d'atomes de carbone et donc à faible température d'ébullition, contrairement au gasoil.

Type de produit	Intervalle de distillation à pression atmosphérique (°C)		Nombre d'atomes de carbone	Rapport H/C atomique	Composition par familles chimiques (% volume)			
	Point initial	Point final			Paraffines	Naphtènes	Oléfines	Aromatiques
GPL	<0	0	3 et 4	2,0-2,67	60-100	0	0-40	0
Essence	30-35	180-200	4 à 10	1,7-1,9	40-65	0-5	0-20	15-45
Kérosène	140-150	250-280	9 à 13	1,9-2,1	50-65	20-30	0	10-20
Gasoil	160-180	340-370	10 à 20	1,9-2,1	50-65	20-30	0	10-30
Carburant lourd	180-200	450*	>15	0,8-1,7	**	**	0	**

Tableau C.1: Caractéristiques générales et composition globale des différents types de carburants [41]

- * Température correspondant à 20-30% distillés. La fraction la plus importante (70-80%) ne s'évapore quasiment pas à pression atmosphérique.
- ** Il n'existe pas, dans les fuels lourds, de molécules purement paraffiniques, naphténiques ou aromatiques. Le pourcentage d'atomes de carbone engagés dans des structures aromatiques peut varier de 55 à 100.

C.2.2 Les carburéacteurs

La classification des kérosènes [41] (Tableau C.2) est rendue complexe par la distinction entre les usages civils et militaires, et par le fait que des produits quasiment identiques sont parfois désignés par des sigles différents dans les différentes régions du monde. Il existe essentiellement trois types de carburéacteurs; La première étant de type « kérosène », la seconde « kérosène à haut point d'éclair », et la troisième « large coupe ». Le carburéacteur utilisé par l'ensemble de l'aviation civile internationale est de type kérosène Jet A1.

Type de carburant	Additif anti-glace	Symbole OTAN	Usage civil symbole défini par la norme ASTM D1655	Usage militaire appellations courantes
Kérosène	oui	F-34	Jet A1	TR0, JP-8, AVTUR (TR0/ni*, AVTUR)
	non	F-35		
Haut point d'éclair	oui	F-44	Jet B	TR5, JP-5 (TR5/ni*)
	non	F-43		
Large coupe	oui	F-40	Jet B	TR4, JP-4 (TR4/ni*)
	non	F-45		
Haute stabilité thermique (vols supersoniques)	oui			TS, JP-7
Haute énergie volumique (missiles)	oui			RJ-6, JP-9, JP-10
	non			RJ-4, RJ-5

Tableau C.2 : Classification et nomenclature des principaux carburateurs [41]

* Le signe « ni » signifie ici : « non inhibited » (pas d'additif anti-glace).

	JP-4	JP-5	JP-7	JP-8 (Jet A/A1)	RP-1
Formule approximative	$C_{8,5}H_{17}$	$C_{12}H_{22}$	$C_{12}H_{25}$	$C_{11}H_{21}$	$C_{12}H_{24}$
Rapport atomique H/C	1,99	1,87	2,02	1,91	1,98
Intervalle de distillation à pression atmosphérique (°C)	60-235	180-255	190-250	165-265	175-275
Composition moyenne (% vol.)					
Paraffines	59	45	65	60	39
Aromatiques	10	19	3	18	3
Naphtènes	29	34	32	20	58
Oléfines	2	2	0	2	0

Tableau C.3 : Composition de différents carburateurs [41]

	% vol.
Paraffines	57
n-paraffines	28
iso-paraffines	29
Aromatiques	20
Alkylbenzènes	18
Alkylnaphtalènes	2
Naphtènes	20
Autres	3

Tableau C.4 : Composition d'un kérosène de type Jet A [41]

Comme le montrent le Tableau C.3 et le Tableau C.4, le kérosène (Jet A) est majoritairement composé d'alcane (paraffines). On y trouve aussi des aromatiques (en grande majorité des alkylbenzènes et peu de alkylnaphtalènes) et des naphthènes. Les oléfines y sont rares. La formule représentant ce carburéacteur est $C_{11}H_{21}$, ce qui explique qu'il est représenté par le n-decane ou le n-undecane lors de l'utilisation de modèle d'évaporation de gouttes mono-composants.

Le Tableau C.5 fait apparaître une composition plus complète d'un kérosène de type TR0 [40]. Suivant le nombre d'atomes de carbone, la proportion de n-alcane par rapport au total d'alcane varie. Plus ce nombre d'atomes de carbone augmente, plus cette proportion des n-alcane diminue (de 2/3 à 1/4) et celle des iso-alcane augmente. On retrouve aussi les espèces les plus représentatives de chaque groupe de composants : le n-undecane pour les alcane, le 1,2,4-triméthylbenzène pour les aromatiques et le n-propylbenzène pour les naphthènes.

Hydrocarbures	% masse	Exemples de composants dosés	% masse	Masse molaire (kg/kmol)
Alcane	78			Mmoyen=155,2
C8	1,2	n-octane	0,84	114,232
C9	9,2	n-nonane	4,3	128,259
C10	17,4	n-decane	5,4	142,286
C11	20,3	n-undecane	6,3	156,313
C12	13,5	n-dodecane	4,2	170,340
C13	10,7	n-tridecane	3,4	184,367
C14	4,3	n-tetradecane	1,3	198,394
C15	0,8	n-pentadecane	0,2	212,421
Autres	0,6			
Aromatiques	9,8			Mmoyen=125,2
C8	0,56			106,168
C9	5,7	1,2,4-triméthylbenzène	2,2	120,195
C10	4,5			134,222
Autres	1,4			
Naphtènes	12,2			Mmoyen=130,8
C9	4,7	n-propylcyclohexane	1	126,243
C10	2,5	n-butylcyclohexane	0,66	140,270
Autres	2,6			

Tableau C.5 : Composition d'un kérosène TR0 par classe et par nombre d'atomes de carbone [40]

L'essence

Le Tableau C.6 et le Tableau C.7 [41] indiquent la composition d'une essence commerciale classique distribuée en Europe. Elle est composée avec autant d'alcane que d'aromatiques, les naphènes y sont rares, contrairement aux oléfines. Il est à noter que le groupe des isoparaffines présente deux fractions massiques maximales dans la classification par nombre d'atomes de carbone (Tableau C.7). Ce groupe ne peut pas être représenté par une seule fonction de distribution dans le modèle à thermodynamique continue.

Normales paraffines			
Constituant	% masse	Constituant	% masse
<i>n</i> -Butane	5,14	<i>n</i> -Nonane	0,11
<i>n</i> -Pentane	1,26	<i>n</i> -Décane	0,01
<i>n</i> -Hexane	0,64	<i>n</i> -Undécane	
<i>n</i> -Heptane	0,65	<i>n</i> -Dodécane	
<i>n</i> -Octane	0,48	<i>n</i> -Tridécane	
		Total	8,29

Oxygénés	
Constituant	% masse
MTBE	0,50
ETBE	3,00
Total	3,50

Isoparaffines			
Constituant	% masse	Constituant	% masse
Isobutane	0,30	3,4-Diméthylhexane	0,28
Isopentane	7,84	3-Méthylheptane	0,55
2,2-Diméthylbutane	0,05	3-Éthylhexane	0,17
2,3-Diméthylbutane	1,46	2,2,5-Triméthylhexane	0,28
2-Méthylpentane	3,12	2,4,4-Triméthylhexane	0,04
3-Méthylpentane	1,71	2,3,5-Triméthylhexane	0,05
2,2-Diméthylpentane	0,02	2,2-Diméthylheptane	0,02
2,4-Diméthylpentane	0,63	2,4-Diméthylheptane	0,05
2,2,3-Diméthylbutane	0,05	2,6-Diméthylheptane	0,04
3,3-Diméthylpentane	0,08	2,5-Diméthylheptane	0,11
2-Méthylhexane	0,92	3,4-Diméthylheptane	0,02
2,3-Diméthylpentane	0,46	4-Méthylheptane	0,10
3-Méthylhexane	0,90	2-Méthylheptane	0,13
3-Éthylpentane	0,16	3-Méthylheptane	0,26
2,2,4-Triméthylpentane	4,11	C ₉ -Isoparaffines	0,02
2,2-Diméthylhexane	0,08	2,2-Diméthylheptane	0,01
2,5-Diméthylhexane	0,82	2,7-Diméthylheptane	0,02
2,4-Diméthylhexane	0,56	2-Méthylnonane	0,02
3,3-Diméthylhexane	0,06	3-Méthylnonane	0,02
2,3,4-Triméthylpentane	2,22	C ₁₀ -Isoparaffines	0,02
2,3,3-Triméthylpentane	1,55	C ₁₁ -Isoparaffines	0,10
2,3-Diméthylhexane	0,57	C ₁₂ -Isoparaffines	0,61
2-Méthyl-3-éthylpentane	0,03	C ₁₃ -Isoparaffines	0,01
2-Méthylheptane	0,47		
		Total	31,10

Aromatiques			
Constituant	% masse	Constituant	% masse
Benzène	1,23	2-Méthylindane	0,11
Toluène	8,11	1-Méthyl-4- <i>n</i> -propylbenzène	0,17
Éthylbenzène	2,89	1,3-Diméthyl-5-éthylbenzène	0,22
<i>m</i> -Xylène	5,70	1-Méthyl-2- <i>n</i> -propylbenzène	0,07
<i>p</i> -Xylène	1,96	1,4-Diméthyl-2-éthylbenzène	0,16
<i>o</i> -Xylène	3,06	1,3-Diméthyl-4-éthylbenzène	0,15
Isopropylbenzène	0,19	1-Méthylindane	0,03
<i>n</i> -Propylbenzène	0,64	1,2-Diméthyl-4-éthylbenzène	0,24
1-Méthyl-3-Éthylbenzène	2,05	1,2,3,5-Tétraméthylbenzène	0,18
1-Méthyl-4-Éthylbenzène	0,91	1,2,4,5-Tétraméthylbenzène	0,22
1,3,5-Triméthylbenzène	0,88	5-Méthylindane	0,07
1-Méthyl-2-Éthylbenzène	0,92	4-Méthylindane	0,09
1,2,4-Triméthylbenzène	2,94	1,2,3,4-Tétraméthylbenzène	0,07
1,2,3-Triméthylbenzène	0,61	Tétraline	0,03
1-Méthyl,4-Isopropylbenzène	0,10	Naphtalène	0,30
Indane	0,36	C ₁₀ -Aromatiques	0,13
Indène + 1-Méthyl-2-	0,13	2-Méthylnaphtalène	0,06
Isopropylbenzène	0,11	1-Méthylnaphtalène	0,03
1,3-Diéthylbenzène	0,20	C ₁₁ -Aromatiques	0,17
1-Méthyl-3- <i>n</i> -propylbenzène		Total	35,49

Naphènes			
Constituant	% masse	Constituant	% masse
1-Méthylcyclopentane	1,09	<i>cis</i> -1-Méthyl-3-Éthylcyclopentane	0,04
Cyclohexane	0,10	<i>trans</i> -1-Méthyl-2-Éthylcyclopentane	0,03
1,1-Diméthylcyclopentane	0,01	1-Méthyl, 4-Éthylcyclopentane	0,04
<i>cis</i> -1,3-Diméthylcyclopentane	0,24	C ₈ -Naphènes	0,01
<i>trans</i> -1,3-Diméthylcyclopentane	0,20	1,1,3-Triméthylcyclohexane	0,02
<i>trans</i> -1,2-Diméthylcyclopentane	0,15	1,3,5-Triméthylcyclohexane	0,02
1-Méthylcyclohexane	0,34	Diméthyléthylcyclopentane	0,04
1-Éthylcyclopentane	0,10	C ₉ -Naphènes	0,09
<i>r</i> -1, <i>trans</i> -2, <i>cis</i> -4-Triméthylcyclopentane	0,06	C ₁₀ -Naphènes	0,09
<i>r</i> -1, <i>trans</i> -2, <i>cis</i> -3-Triméthylcyclopentane	0,06	<i>cis</i> -Décaline	0,01
<i>r</i> -1, <i>cis</i> -2, <i>trans</i> -4-Triméthylcyclopentane	0,11		
<i>cis</i> -1,3-Diméthylcyclohexane	0,02	Total	2,92
<i>trans</i> -1-Méthyl-3-Éthylcyclopentane	0,05		

Oléfines			
Constituant	% masse	Constituant	% masse
Isobut-1-ène + <i>n</i> -but-1-ène	0,28	2-Éthylbut-1-ène	0,15
(<i>E</i>)-But-2-ène	0,56	(<i>E</i>)-Hex-3-ène	0,33
(<i>Z</i>)-But-2-ène	0,60	(<i>Z</i>)-Hex-3-ène	0,12
C ₄ -Oléfines	0,05	(<i>E</i>)-Hex-2-ène	0,65
3-Méthylbut-1-ène	0,29	2-Méthylpent-2-ène	0,70
Pent-1-ène	0,89	4-Méthylcyclopent-1-ène	0,15
2-Méthylbut-1-ène	1,72	(<i>E</i>)-3-Méthylpent-2-ène	0,46
Isoprène	0,06	3-Méthylcyclopent-1-ène	0,08
(<i>E</i>)-Pent-2-ène	2,25	(<i>Z</i>)-Hex-2-ène	0,36
(<i>Z</i>)-Pent-2-ène	1,27	(<i>Z</i>)-3-Méthylpent-2-ène	0,64
2-Méthylbut-2-ène	3,13	2,4-Diméthylpent-1-ène	0,02
(<i>E</i>)-Penta-1,3-diène	0,06	3-Méthylhex-1-ène	0,05
(<i>Z</i>)-Penta-1,3-diène	0,06	Cyclohex-1-ène	0,06
Cyclopent-1-ène	0,38	C ₆ -Oléfines	0,28
4-Méthylpent-1-ène	0,13	C ₇ -Oléfines	1,49
3-Méthylpent-1-ène	0,19	C ₈ -Oléfines	0,34
2-Méthylpent-1-ène	0,53	C ₉ -Oléfines	0,07
Hex-1-ène	0,24	C ₁₀ -Oléfines	0,02
		Total	18,66

Tableau C.6 : Composition complète d'une essence commerciale classique européenne [41]

Nombre de C	Familles						Total
	n-Paraffines	Isoparaffines	Naphtènes	Aromatiques	Oléfines	Oxygénés	
4	5,14	0,30			1,49		6,93
5	1,26	7,84			10,11	0,50	19,71
6	0,64	6,34	1,19	1,23	5,07	3,00	17,47
7	0,65	3,22	1,05	8,11	1,56		14,59
8	0,48	11,47	0,43	13,61	0,34		26,33
9	0,11	1,12	0,16	9,49	0,07		10,95
10	0,01	0,09	0,09	2,80	0,02		3,01
11		0,10		0,25			0,35
12		0,61					0,61
13		0,01					0,01
Total	8,29	31,10	2,92	35,49	18,66	3,50	99,96

Tableau C.7 : Composition par nombre d'atomes de carbone (nombre de C dans le tableau) d'une essence commerciale classique européenne [41]

Cet exemple de composition complète de l'essence montre que celle utilisée par *Hallett et Grimwood* [16] (Tableau 1.1, Tableau 1.2 et Figure 1.1) est incomplète. D'abord les oléfines ne sont pas considérées, malgré qu'ils soient relativement présents dans l'essence. Ensuite les n-paraffines, les iso-paraffines et les naphtènes (cycloparaffines) ont tous été regroupés dans un même groupe de composants appelé « paraffine ». Les propriétés physiques pour ce groupe sont celles des n-paraffines bien que les températures d'ébullition de ces trois groupes soient différentes et que les n-paraffines ne soient pas le groupe majoritaire. Cette approximation peut s'expliquer par la méconnaissance des propriétés physiques des iso-paraffines et des naphtènes.

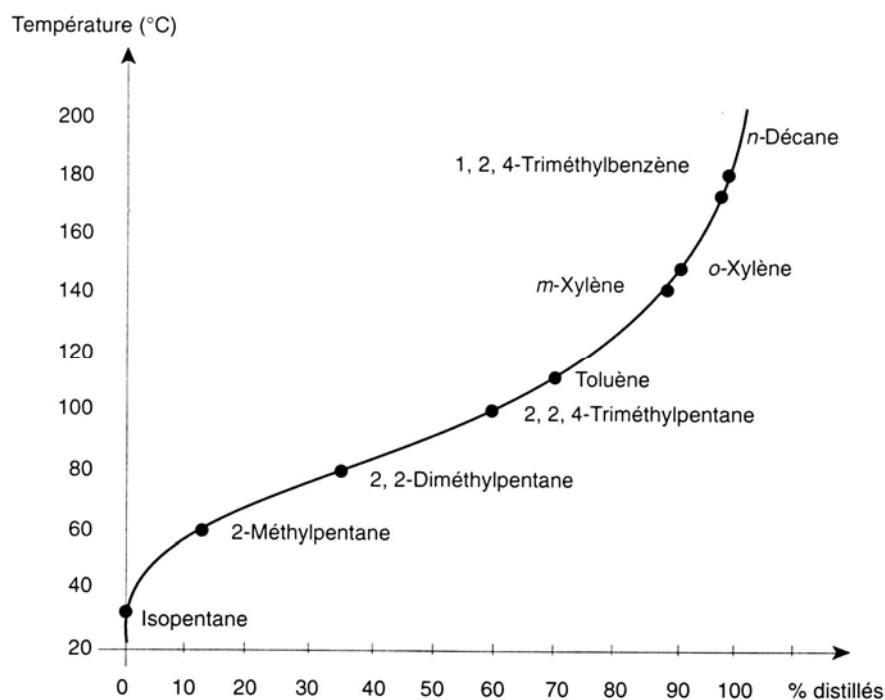


Figure C.6 : Courbe de distillation d'une essence [41]

Une courbe de distillation d'une essence est tracée sur la Figure C.6 avec quelques composants typiques. Elle confirme que certains composants présents dans les essences sont très volatiles.

Le gasoil

Il est très difficile de déterminer la composition du gasoil car ce carburant est composé d'hydrocarbures plus lourds (pouvant aller de 8 à 25 atomes de carbone) qu'il n'est pas toujours possible d'identifier. Sa composition est donc souvent représentée par une courbe de distillation [42] (Figure C.7). La différence avec l'essence est très notable car les composants sont beaucoup moins volatiles.

La courbe de distillation peut être discrétisée en plusieurs « pseudo-composants » [42]. Dans le Tableau C.8, les colonnes indiquent dans l'ordre la masse molaire (en g/mol), la température critique (en K), la pression critique (en bar), le facteur acentrique et la fraction molaire des différents pseudo-composants déterminés à partir de la courbe de distillation. Cependant, la composition de chaque famille de composants (alcane, aromatiques ...) n'est pas connue.

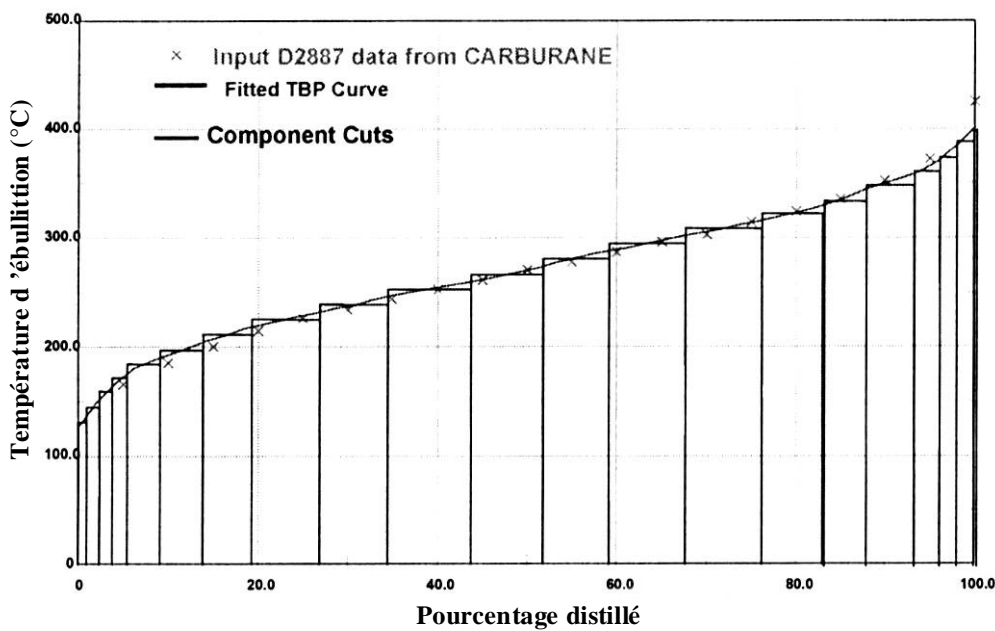


Figure C.7 : Courbe de distillation d'un gasoil [42]

Mw_i g/mol	Tc_i K	Pc_i bar	ω_i	x_i
116	591	27.76	0.331	0.0168
124	605	26.64	0.353	0.0244
132	620	25.47	0.377	0.0228
140	633	24.51	0.397	0.0238
149	647	23.52	0.419	0.0521
157	660	22.69	0.441	0.0628
168	674	21.76	0.466	0.0672
178	688	20.91	0.491	0.0878
189	701	20.16	0.514	0.0837
201	715	19.38	0.541	0.0964
212	728	18.69	0.567	0.0786
226	742	17.96	0.596	0.0674
238	755	17.34	0.623	0.0745
252	768	16.74	0.651	0.0709
266	781	16.16	0.680	0.0532
280	794	15.61	0.710	0.0346
296	807	15.06	0.743	0.0378
308	818	14.63	0.770	0.0194
322	830	14.18	0.801	0.0122
336	844	13.70	0.835	0.0117
348	852	13.40	0.858	0.0020

Table 2 : The Diesel fuel cuts obtained by the PROII™ software.

Tableau C.8 : Discrétisation en « pseudo-composants » de la courbe de distillation d'un gasoil [42]

Une autre composition plus complète (Figure C.8) montre que le nombre d'atomes de carbone dans les molécules du gasoil est relativement élevé et occupe une large plage de valeurs (entre 7 et 29). Certaines espèces de ce carburant sont difficilement identifiables, mais les n-alcanes y sont les plus nombreux. Les iso-alcanes et les monoaromatiques (alkylbenzènes) sont également très présents et dans une moindre mesure, les naphthéniques (cyclo-alcanes). Peu de di-aromatiques (alkylnaphtalènes) ou de polyaromatiques (aromatiques à plus de deux anneaux) ont été identifiés, à moins qu'ils soient compris dans les composants inconnus.

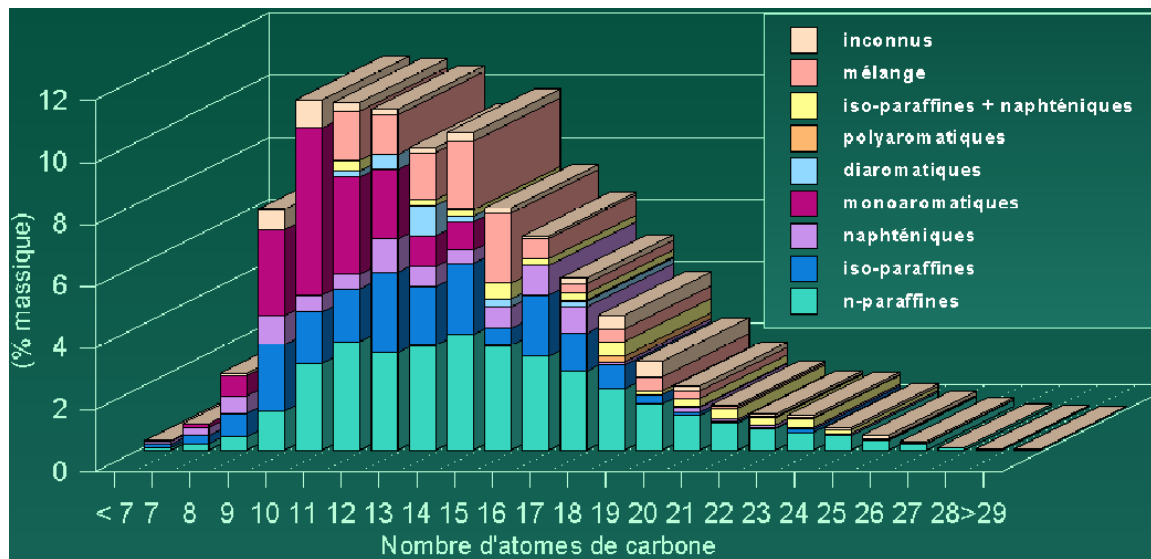


Figure C.8 : Distribution des différents composants d'un gasoil

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] **C. Nje Nje**, Etude Numérique de l'Evaporation Instationnaire d'un Nuage de Gouttes Multicomposants, Thèse de la Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, 2000.
- [2] **W.A. Sirignano**, Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays, Cambridge Univ. Pr., 1999.
- [3] **P. Lara-Urbanejo, W.A. Sirignano**, Multicomponent Droplet Vaporization in a Convective Field, 18th International Symposium in Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, Pennsylvania, pp. 1365-1374, 1981.
- [4] **A.Y. Tong, W.A. Sirignano**, Multicomponent Droplet Vaporization in a High Temperature Gas, Combustion and Flame, vol. 66, pp. 221-235, 1986.
- [5] **G. Chen, S.K. Aggarwal, T.A. Jackson, G.L. Switzer**, Experimental Study of Pure and Multicomponent Fuel Droplet Evaporation in a Heated Air Flow, Atomization and Sprays, vol. 7, pp. 317-337, 1997.
- [6] **S.K. Aggarwal, Z. Shu**, Multicomponent and Single-Component Fuel Droplet Evaporation under High-Pressure Condition, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1997.
- [7] **K. Gartung, S. Arndt, N. Roth, B. Weigand**, Evaporation of Tetradecane and Hexadecane mixture droplets : an Experimental and Theoretical Study ». Inst. On Liquid Atomization and Spray Systems – Europe, Darmstadt, Germany, September 11-13, 2000.
- [8] **G. Brenn, O. Kastner, D. Rensik, C. Tropea**, Evaporation and Drying of Multicomponent and Multiphase Droplets in a Tube Levitator, 15th Inst. On Liquid Atomization and Spray Systems, Toulouse, France, July 5-7, 1999.
- [9] **G. Brenn, L.J. Devuprasath, F. Durst**, Computations and Experiments on the Evaporation of Multi-component Droplets, 9th Int. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems, Sorrento, Italy, July 13-17, 2003.

- [10] **K. Gartung, ST. Arndt, CH. Seibel**, Vaporization of Multicomponent Fuel Droplets numerical and Experimental Evaluation, 18th Inst. On Liquid Atomization and Spray Systems, Zaragoza, Spain, September 9-11, 2002.
- [11] **J. Strengle, K. Prommersberger, M. Willmann, S. Wittig**, Experimental and Theoretical of One- and Two-component Droplet Vaporization in a High Pressure Environment, Int. J. of Heat and Mass Transfer, Vol. 42, pp.2683-2694, 1999.
- [12] **B. Abramzon, W.A. Sirignano**, Approximate Theory of Single Droplet Vaporization in a Convective Field : Effect of Variable Properties, Stefan Flow and Transient Liquid Heating, vol. 1, Thermal Eng. Joint Conf., ASME JSME, pp. 11-18, 1987.
- [13] **W.E. Ranz, W.R. Marshall**, Evaporation from Drops, Chem. Eng. Progr., vol. 48, pp.141-146, 173-180, 1952.
- [14] **J. Tamim, W.L.H. Hallett**, A Continuous Thermodynamics Model for Multicomponent Droplet Vaporization, Chemical Engineering Science, vol. 50, N° 18, pp. 2933-2942, 1995.
- [15] **W.L.H. Hallett**, A simple model for the vaporization of droplets with large numbers of components, Combustion and Flame, vol. 121 pp. 334-344, 2000.
- [16] **W.L.H. Hallett, C. Grimwood**, A Simple Continuous Mixture Evaporation Model with Multiple Distribution Functions, <http://www.genie.uottawa.ca/profs/hallett/hallettqs.pdf>.
- [17] **Z. Abdel-Qader, W.L.H. Hallett**, The Role of Liquid Mixing in Evaporation of Complex Multicomponent Mixtures : Modeling using Continuous Thermodynamics – II, <http://by.genie.uottawa.ca/profs/hallett/hallettld.pdf>.
- [18] **K.G. Harstadt, P.C. Le Clercq, J. Bellan**, Modeling Evaporation of Jet A, JP-7 and RP-1 drops at 1 to 15 bars, Combustion and Flame, Vol. 137 (1-2), pp. 163-177, 2004.
- [19] **M. Burger, R. Schmehl, K. Prommersberger, O. Schäfer, R. Koch, S. Wittig**, Droplet Evaporation Modeling by the Distillation Curve Model: Accounting for Kerosene Fuel and Elevated Pressures, Int. Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 46, pp. 4403-4412, 2003.

- [20] **N. Roth, A. Frohn**, Measuring Technique to investigate the Evaporation Process of Droplets consisting of Hydrocarbon Mixtures, 13th Int. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems, Florence, Italy, 1997.
- [21] **W.D. Bachalo**, Methods of Measuring the Size and Velocity of Spheres by Dual-Beam Light-Scatter Interferometer, *Appl. Opt.*, vol. 19, pp. 363-370, 1980.
- [22] **P. Lavielle, F. Lemoine, M. Lebouché, O. Ravel, G. Lavergne, J. Farré**, Mesure de la Température sur un Train de Gouttes Monodisperses par Utilisation de la Fluorescence Induite par Laser, *Fluvisu*, Toulouse, France, 1999.
- [23] **G König, K. Anders, A. Frohn**, A New Light-Scattering Technique to Measure the Droplet Diameter of Periodically Generated moving Droplets, *J. Aerosol Sc.*, vol. 17(2), pp.157-167, 1986.
- [24] **R.N. Berglund, Y.H. Liu**, Generation of Monodisperse Aerosol Standards, *Environmental Science & Technology*, vol. 7, pp. 147-153, 1973.
- [25] **Lord Rayleigh**, *Proc. London Math Soc.*, vol.10(4), 1878.
- [26] **R.E. Russo, R. Withnell, G.M. Hieftje**, Simple and Inexpensive Design for an Isolated Droplet Generator Useful in Studies of Atomization in Flames, vol. 35, pp. 531-536, 1981.
- [27] **G. Mie**, Beiträge zur Optik Trüber Medien, Speziell Kolloidaler Metallösungen, *Ann. Phys.* 25, pp. 377-445, 1908.
- [28] **L.V. Lorenz**, Upon the Light Reflected and Refracted by a Transparent Sphere, *Vidensk. Selk. Shrifter* 6, 1-62, 1890.
- [29] **P. Massoli, R. Calabria**, Sizing of droplets in reactive fuel sprays by Mie scattering methods, 15th Inst. On Liquid Atomization and Spray Systems, Toulouse, France, July 5-7, 1999.
- [30] **O. Adam**, Etude Expérimentale du Comportement des Gouttes en Régime d'Interactions, Thèse de l'ENSAE, juin 1997.
- [31] **P. Massoli**, Rainbow Refractometry Applied to Radially Inhomogeneous Spheres : the Critical Case of Evaporating Droplets, *Applied Optics*, Vol.37(15), 1998.

- [32] **P. Lavielle, F. Lemoine, M. Lebouché, G. Lavergne**, Mesure de la Température de Gouttelettes en Combustion par Fluorescence Induite par Laser à Deux Couleurs : Résultats Préliminaires et Perspectives, comptes rendus de l'académie des sciences Série IIB Mécanique, Vol. 329, pp. 557-564, 2001.
- [33] **P. Lavielle, A. Delconte, D. Blondel, M. Lebouché, F. Lemoine**, Non-intrusive Temperature Measurements using Three-color-laser-induced Fluorescence, Experiments in Fluids, Vol. 36, pp. 706-716, 2004.
- [34] **G. Castanet**, Etude Aérothermique d'un Jet de Gouttes Monodispersé en Evaporation et en Combustion à l'Aide de Méthodes Optiques, Thèse de l'Université Henri Poincaré, Nancy I, septembre 2004.
- [35] **A. Atthasit, N. Doué, Y. Biscos, G. Lavergne**, Influence of Droplet Concentration on the Dynamics and Evaporation of a Monodisperse Stream of Droplets in Evaporation Regime, 1st International Symposium on Combustion and Atmospheric Pollution, St-Petersburg, Russia, July 8-11, 2003.
- [36] **G. Castanet**, Bilan Energétique sur un Jet de Gouttes Monodisperses en Evaporation par des Méthodes Optiques, rapport de DEA ENSEM de Nancy, avril-septembre 2001.
- [37] **C. Antoine**, C. R., vol. 107, pp. 681-836 (1888).
- [38] **K.G. Harstadt, P.C. Le Clercq, J. Bellan**, A Statical Model of Multicomponent-fuel Drop Evaporation for Many-Droplet Gas-liquid Flow Simulations, AIAA Journal, Vol. 41, N°10, pp. 1858-1874, 2003.
- [39] **P. Béard**, Modélisation Lagrangienne de la Dispersion et de l'Evaporation de Gouttes dans un Ecoulement Turbulent Instationnaire, Thèse de l'ENSAE, 1994.
- [40] **C. Guéret**, Thèse de l'Université d'Orléans, 1989.
- [41] **J.C. Guibert**, Carburants et Moteurs Tome 1, Editions Technip, 1997.
- [42] **C. Habchi, F.A. Lafossas, P. Béard, D. Broseta**, Formulation of a One-Component Fuel Lumping Model to assess the Effects of Fuel Thermodynamic Properties on Internal Combustion Engine Mixture Preparation and Combustion, SAE, 2004-01-1996, 2004.

- [43] **J.A. Mulholland, R.K. Srivastava, J.O.L. Wendt**, Influence of Droplet Spacing on Drag Coefficient in Nonevaporating Monodisperse Streams, *AIAA Journal*, Vol. 26, N°10, pp. 1231-1237, October 1988.
- [44] **C.K. Westbrook, F.L. Dryer**, Simplified Reaction Mechanisms for the Oxydation of Hydrocarbon Fuels in Flames, *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, pp. 31-43, 1981.
- [45] **S.K. Aggarwal**, Ignition Behavior of a Multicomponent Fuel Spray, *Combustion and Flame*, Vol. 76, pp. 5-15, 1989.
- [46] **D. Thévenin**, Dynamique de l'Allumage de Flamme de Diffusion dans des Ecoulements Cisailés, Thèse de l'Ecole Centrale de Paris.
- [47] **J.R. Yang, C.Y. Yukao, J.J. Whang, S.C. Wong**, Experiments on the Ignition of Monocomponent and Bicomponent Fuel Droplets in Convective Flow, *Combustion and Flame*, vol. 123, pp. 266-274, 2000.
- [48] **B. Frackowiak**, Détection de Gradients Thermiques à l'Intérieur d'une Goutte par Méthode Arc-en-ciel, rapport de DEA de l'ENSEA Toulouse, 2003.
- [49] **N. Garcia-Rosa**, Restitution du Champ Thermique à l'Intérieur d'une Goutte en Evaporation par Technique Arc-en-ciel, rapport de DEA de l'ENSAE Toulouse, 2004.
- [50] **C. Laurent**, Validation des Modèles d'Evaporation et de Combustion de Jets Monodisperses : Evaluation Expérimentale des Gradients Thermiques dans des Gouttes Monocomposant, rapport de DEA de l'ENSAE Toulouse, 2005.
- [51] **E.N. Fuller, J.C. Giddings**, *J. Gas Chromatogr.*, vol. 3, pp. 222, 1965.
- [52] **E.N. Fuller, P.D. Schettler, J.C. Giddings**, *Ind. Eng. Chem.*, vol. 58(5), pp. 18, 1966.
- [53] **A. Blanc**, *J. Phys.*, vol. 7, pp. 825, 1908.
- [54] **E.G. Scheibel**, *Ind. Eng. Chem.*, vol. 46, pp. 2007, 1954.
- [55] **L.R. Perkins, C.J. Geankoplis**, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 24, pp.1035, 1969.

- [56] **D. Reichenberg**, The Viscosities of Gas Mixtures at Moderate Pressures, NPL Rep. Chem. 29, National Physical Laboratory, Teddington, England, May 1974.
- [57] **C.R. Wilke**, J. Chem. Phys., vol. 18, pp. 517, 1950.
- [58] **D. Van Velzen, R.L. Cardozo, H. Langenkamp**, Liquid Viscosity and Chemical Constitution of Organic Compounds : A new Correlation and a Compilation of Literature Data, Euratom 4735^e, Joint Nuclear Research Centre, Ispra Establishment, Italy, 1972.
- [59] **C. Orrick, J. H. Erbar**, private communication, December 1974.
- [60] **L. Grundberg, A.H. Nissan**, Trans. Faraday Soc., vol. 44, pp. 1013, 1948.
- [61] **L. Grundberg, A.H. Nissan**, Ind. Eng. Chem., vol. 42, pp. 885, 1950.
- [62] **D. Roy, G. Todos**, Ind. Eng. Chem. Fundam., vol. 7, pp. 529, 1968.
- [63] **D. Roy, G. Todos**, Ind. Eng. Chem. Fundam., vol. 9, pp. 71, 1970.
- [64] **A. Wassiljewa**, Physik. Z., vol. 5, pp. 737, 1904.
- [65] **L.A. Robbins, C.L. Kingrea**, (a) Hydrocarbon Proc. Pet. Refiner, vol. 41(5), pp. 133, 1962 ; (b) preprint of paper presented at the sess. Chem. Eng. 27th Midyear Meet. Am. Pet. Inst., Div. Refining, San Francisco, May 14, 1962.
- [66] **C.C. Li**, AIChE J., in press, 1976.
- [67] **K.M. Watson**, « Ind Eng Chem », vol. 35, pp. 398, 1943.
- [68] **A. Vetere**, New Generalized Correlations for Enthalpy of Vaporization of Pure Compounds, Laboratori Ricerche Chimica Industriale, SNAM PROGETTI, San Donato Milanese, 1973.
- [69] **S.W. Benson, F.R. Cruickshank, D.M. Golden, G.R. Haugen, H.E. O'Neal, A.S. Rodgers, R. Shaw, R. Walsh**, Chem. Rev., vol. 69, pp. 279, 1969.
- [70] **J.S. Rowlinson**, Liquids and Liquid Mixtures, 2nd Ed., Butterworth, London, 1969.

[71] **T. Yamada, R.D. Gunn**, J. Chem. Eng. Data, vol. 18, pp. 234, 1973.

[72] **R.D. Gunn, T. Yamada**, AIChE J., vol. 17, pp. 1341, 1971.

Modélisation de l'évaporation de gouttes multicomposants.

Résumé :

Cette thèse, financée par la DGA, a pour objectif le développement de modèles d'évaporation de gouttes multicomposants afin de bien prévoir la vaporisation des carburants. Une approche expérimentale réalisée en parallèle sur l'évaporation de gouttes bicomposants a fourni des résultats pour une validation partielle de ces modèles.

Deux modèles de description des phases liquide et vapeur sont proposés. Le premier, souvent appliqué dans les travaux existants dans la littérature, est une modélisation discrète de la composition et devient extrêmement exigeant en temps de calcul lorsque le nombre de composants dans la goutte augmente. Le second modèle décrit la composition des carburants grâce à des fonctions de distribution et a fait l'objet d'améliorations durant ces travaux. Grâce à une recherche approfondie de propriétés physiques pour de nombreux hydrocarbures, l'évaporation du kérosène, de l'essence, du gasoil ou des futurs carburants alternatifs, peut alors être simulée avec une composition liquide très détaillée.

Des techniques de mesure non intrusives sont mises en oeuvre afin de déterminer l'évolution de la taille et de la température de gouttes bicomposants en évaporation dans une ambiance à faible ou haute température.

Une étude spécifique sur l'allumage d'un noyau de gouttes multicomposants dans des conditions critiques (haute altitude) montre l'intérêt de considérer l'aspect multicomposants du kérosène.

Mots-clés : évaporation, gouttes, multicomposants, carburant, allumage, techniques optiques.

Modelling of the vaporization of multicomponent droplets

Abstract:

The purpose of this study, supported by DGA, is to develop models for the evaporation of multicomponent droplets to predict correctly the fuel vaporization. Measurements obtained in parallel for vaporizing binary droplets allowed validating partially these models.

Two models are proposed to describe the liquid and vapor phases. The first one, often applied by authors in existing studies, is a discrete modeling of the composition and the computation time becomes considerable when the number of components increases. The second model describes the fuel composition with probability distribution functions and was improved for this study. The physical properties were found or determined for many hydrocarbons, and the vaporization of kerosene, gasoline, Diesel and eventually future alternative fuels can be simulated with the whole liquid composition.

Non-intrusive measuring techniques were carried out to determine the evolution of size and temperature for binary droplets vaporizing in ambient or high temperature conditions.

A specific study on the ignition of a cluster of multicomponent droplets in high altitude conditions demonstrates the interest of considering the different components in kerosene.

Keywords: vaporization, droplets, multicomponent, fuel, ignition, optical techniques.