**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULIQUE** ministere de l'enseignement superieur et de la recherche scientifque





# UNIVERSITE SAAD DAHLEB BLIDA 1 FACULTE DE TECHNOLOGIE DEPARTEMENT DE MECANIQUE

# Projet de Fin d'Etudes Pour l'obtention de Diplôme de Master en Génie Mécanique Spécialité Installation Energétique Et Turbomachine

# Effet des gaz réels sur les coefficients calorimétriques et thermo-élastiques pour les gaz reels

**Promoteurs :** Mr. SALHI Merouane Mr. ROUDANE Mohamed **Réalisé par :** Ms. AMROUCHE Ibttissem Ms. ZAIDI Salma

Année universitaire: 2022/2023

## REMERCIMENTS

Avant tous je remercie Dieu, Allah tous puissant, de nous avoir donné la santé, la patience et le courage de réaliser ce modeste travail

Nous tenons à remercier toutes les personnes qui ont contribuées et donné de leurs temps pour l'aboutissement de ce travail.

Nous tenons aussi à remercier notre Promoteur Monsieur Salhi pour ses conseils et son aid, ainsi que tous les enseignants du département de génie mécanique et les membres de jury qui me font l'honneur de juger ce modeste travail et toutes les personnes qui ont contribuées de prés ou de loin la réalisation de ce travail.

# **DEDICACES**

Je dédie ce modeste travail :

A mes très chers parents

Toute ma famille

Tous mes amis (e)

Tous ceux qui me sont chers

#### RESUME

Le but de ce travail est de réaliser un nouveau code de calcul numérique permettent de faire le calcul des coefficients calorimétriques et thermo élastiques, après le développement des nouvelles relations et des expressions basées sur la théorie des gaz réels, un nouvel concept général valable dans importe quelle circonstance ou condition. Parce qu'une part les coefficients calorimétriques et thermo élastiques des gaz sont affectés par les effets réels des gaz tels que les interactions intermoléculaires, le comportement non idéal et les effets de la compressibilité. Les effets des gaz réels conduisent à des écarts par rapport au comportement des gaz parfaits et, par conséquent, les coefficients thermo élastiques des gaz réels sont différents de ceux des gaz parfaits. En revanche, les coefficients calorimétriques et thermo élastiques des gaz à haute pression des gaz décrivent comment les propriétés thermodynamiques des gaz changent avec la pression et la température, y compris la capacité thermique spécifique, enthalpie et entropie. Ces coefficients sont importants pour comprendre le comportement des gaz dans des conditions de pression et de température élevées, telles que la combustion, les réactions chimiques et la conversion énergie. La résolution des équations obtenues se fait par le langage fortran, et les hypothèses équation état de Berthelot qui expliquent des effets de taille moléculaire et de force intermoléculaire, et que les changements des chaleurs spécifiques sous l'effet de la vibration des molécules pour un gaz caloriquement et thermiquement imparfait. Pour chaque coefficient, une étude sur l'erreur donnée par les paramètres des modèles GP par rapport au modèle RG est présentée. La comparaison est faite entre les deux modèles pour but de déterminer une limite d'application du modèles GP. Les résultats obtenus sont très satisfaisants et encourageants pour approfondir la thermodynamique avancée a haute pression.

#### Mots Clés :

Gaz Réel, Gaz Calorifiquement Imparfait, Gaz thermiquement Imparfait, Les coefficientscalorimétriques, les coefficients thermoélastiques, haute tepmerature, haute pression, imperfections thermiques et calorifiques.

#### ملخص

الغرض من هذا العمل هو تنفيذ رمز الحوسبة الرقمية الجديدة التي تجعل من الممكن حساب المعاملات الحرارية والحرارية ، بعد تطوير علاقات وتعبيرات جديدة بناءً على نظرية الغاز الحقيقي ، وهو مفهوم عام جديد صالح في ظروف الاستيراد أو حالة. لأن جزء من المعاملات الحرارية والحرارية للغازات تتأثر بالتأثيرات الحقيقية للغازات مثل التفاعلات الجزيئية ، والسلوك غير المعياري وتأثيرات الانضغاط. تؤدي تأثيرات الغازات الحقيقية إلى انحرافات عن سلوك الغازات المتاعلات الجزيئية ، والسلوك غير المعياري وتأثيرات الانضغاط. تؤدي تأثيرات الغازات الغازات الحقيقية إلى انحرافات عن سلوك الغازات المثالية ، وبالتالي ، فإن معاملات الحرارية للغازات الحقيقية تختلف عن تلك الموجودة في الغازات المثالية. من ناحية المثالية ، وبالتالي ، فإن معاملات المرادة الحرارية للغازات الحقيقية تختلف عن تلك الموجودة في الغازات المثالية. من ناحية أخرى ، تصف المعاملات المرارية والحرارية الغازات الحقيقية تختلف عن تلك الموجودة في الغازات المثالية. من ناحية أخرى ، تصف المعاملات الحرارية والخازات الحقيقية تختلف عن تلك الموجودة في الغازات المثالية. من ناحية أخرى ، تصف المعاملات المولية والحرارية الغازات الحقيقية تختلف عن تلك الموجودة في الغازات الحراري المراري ، المعياري وتأثيرات الانصغاط. تؤدي تأثيرات العالي في الغازات الموجودة في الغازات المراري أخرى ، تصف المعاملات المرارية والحرارية الغازات الحقيقية تختلف عن تلك الموجودة في الغازات المراري أخرى ، ألم المعاملات الحرارية والحرارية الموددة ، المحتوى الحراري والإنتروبيا. هذه المعاملات مهمة لفهم بالضغط ودرجة الحرارة العالية ، مثل الاحتراق والتفاعلات الكيميائية وتحويل الطاقة. يتم حل

المعادلات التي تم الحصول عليها بواسطة لغة فورتران ، وحالة معادلة الفرضيات من بيرثيلوت التي تفسر آثار الحجم الجزيئي والقوة بين الجزيئات ، وأن التغييرات في حرارة محددة تحت تأثير اهتزاز الجزيئات في السعرات الحرارية الغازية وعلى أساس غاز وعلى درجة حرارة غاز و ناقص حراريا. لكل معامل ، يتم تقديم دراسة عن الخطأ الذي قدمته معلمات نماذج GP مقارنة بنموذج RG. تتم المقارنة بين النموذجين لتحديد حد لتطبيق نماذج GP. النتائج التي تم الحصول عليها مرضية للغاية ومشجعة لتعميق الديناميكا الحرارية المتقدمة عالية الضغط

الكلمات الدالة:

الغاز الحقيقي ، الغاز غير الناقص السعرات الحرارية ، الغاز غير الناقص حرارياً ، والمعاملات ، والمعاملات المرنة الحرارية ، والعروض المرتفعة ، والضغط العالي ، والحرارة والسعرات الحرارية

## ABSTRACT

The purpose of this work is to carry out a new digital computing code make it possible to calculate the calorimetric and thermo -elastic coefficients, after the development of new relationships and expressions based on real gas theory, a new general concept valid in importance what circumstance or condition. Because part of the calorimetric and thermo elastic coefficients of gases are affected by the real effects of gases such as intermolecular interactions, non -ideal behavior and compressibility effects. The effects of real gases lead to deviations from the behavior of perfect gases and, therefore, the thermo elastic coefficients of real gases are different from those of perfect gases. On the other hand, the calorietric and thermo -elastic coefficients of high pressure gases of the gases describe how the thermodynamic gas properties change with pressure and temperature, including specific thermal capacity, enthalpy and entropy. These coefficients are important to understand the behavior of gases under high pressure and temperature conditions, such as combustion, chemical reactions and energy conversion. The resolution of the equations obtained is done by the Fortran language, and the hypotheses of Berthelot state which explain molecular and intermolecular force effects, and that specific heat changes under the effect of the vibration of Molecules for calorically and thermally imperfect gas. For each coefficient, a study on the error given by the parameters of the GP models compared to the RG model is presented. The comparison is made between the two models to determine a limit of application of the GP models. The results obtained are very satisfactory and encouraging to deepen high pressure advanced thermodynamics.

#### Key words

Real Gas, Calorifically Imperfect Gas, Thermally Imperfect Gas, Calorimetric coefficients, thermoelastic coefficients, high temperature, high pressure, thermal and calorific imperfections.

# TABLE DES MATIERES

REME	RCIMENTS	
DEDIC	CACES	
RESUN	МЕ	
TABLE	E DES MATIERES	
LISTE	DES TABLEAUX	
LISTE	DES FIGURES	
NOME	NCLATURE	
L'ETA	T DE L'ART	9
CHAP	ITRE I : GENERALITE SUR LES GAZ REELS	
Int	roduction	27
1.1	Gaz parfait	27
1.2	Les lois de gaz parfait	27
1.2	2.1 Loi de Boyle Mariotte	27
1.2	2.2 Loi de Charles	
1.2	2.3 Loi de Gay-Lussac	
1.2	2.4 Loi d'Avogadro	
1.2	2.5 Equation d'état d'un gaz parfait	
1.3	Limitation de l'equation d'état d'un gaz parfait	
1.4	Comportement de gaz parfait	
1.5	Gaz réel	31
1.6	Equation d'état des gaz réels	
1.7	Covolume	
1.8	Modèle du gaz réel	
1.9	Les équations des gaz réels	
1.9	0.1 l'équation de Van Der Waals	
1.9	0.2 L'équation de Clausius	
1.9	0.3 L'équation de Dieterici	

1.9.4 Equation de Redlich-Kwong	34
1.9.5 Equation de Berttie- Bridgeman	35
1.9.6 L'équation de Berthelot	
CHAPITRE 2 : LES COEFFICIENTS CALORIMETRIQUES E ELASTIQUES POUR LES GAZ	ET THERMO-
Introduction	
2.1 Notations	
2.2 Les Coefficients calorimétriques	
2.3 Les Coefficients thermo élastiques	40
2.4 Les Autres coefficients	41
2.5 Coefficient de Joule-Gay-Lussac	42
2.6 Paramètre de Grüneisen	44
2.7 Coefficient de Joule-Thomson	46
2.8 Relations entre les coefficients	48
2.8.1Relations de Clapeyron	49
2.8.2Relation de Reech	50
2.9 Variation isotherme des capacités thermiques	51
2.9.1 Variation de la capacité thermique isochore	51
2.9.2 Variation de la capacité thermique isobare	52
2.10 Application aux gaz parfaits	53
2.10.1 Coefficients calorimétriques et thermo élastiques	53
<ul><li>2.11 Les Lois de Joule</li><li>2.12Les Relations entre les coefficients</li></ul>	55 57
2.12.1 L'énergie libre	57
2.12.2 L'enthalpie libre	58
CHAPITRE3 :DEVELOPPEMENTDESCOCALORIMETRIQUE ET THERMO-ELASTIQUE POUR LES GA	)EFFICIENTS Z REELS
Introduction	61

muou		.01
3.1	Coefficients calorimétriques	.61
3.2	Coefficients thermo-élastiques	.64

3.3	Relation entre les coefficients	70
Conc	lusion	71
СНАРІТ	<b>TRE 4 : RESULTATS DE SIMULATION ET INTERPRETATION</b>	
Intro	duction	72
4.1 result	ats et les commentaires	72
CONCL	USION GENERALE	83
BIBLIO	GRAPHIE	85

## LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Représentation graphique de la loi de Gay-Lussac : à volume V		
	constant, la pression P est proportionnelle à la température		
Figure 1.2 Figure 4.1	Représentation l'effet de covolume. La variation du coefficient de la dilatation isobare $\alpha$	32 72	
Figure 4.2	Représentation l'effet de covolume.	72	
Figure 4.3	La variation du coefficient de la compressibilité isotherme $\chi_T$	73	
Figure 4.4	La variation du coefficient de la dilatation isotherme <i>l</i>	74	
Figure 4.5	La variation du coefficient de la compression isotherme <i>h</i>	75	
Figure 4.6	La variation du coefficient sans nom attribué $\mu$	76	
Figure 4.7	La variation du coefficient de la dilatation linéaire $\lambda$	77	
Figure 4.8	La variation du coefficient de la compressibilité isentropique $\mathbf{X}_{\mathbf{S}}$	78	
Figure 4.9	La variation du module d'élasticité isostatique K	79	
Figure 4.10 Figure 4.11	La variation du coefficient de joule –gay Lussac $\mu_{JGL}$ La variation du coefficient de joule Thomson $\mu_{JT}$	80 80	
Figure 4.12	La variation du paramètre de gruneiseu $\Gamma$	81	
Figure 2.13	La variation du facteur de la compressibilité Z	82	

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1 : Coefficients calorimétriques et thermo-élastiques pour les gaz.70

# NOMENCLATURE

# Notations et symboles latines

Symbole	Désignation		Unités	
<i>a</i> La constante des forces intermoléculaire.				
b	La constante de taille molécula	aire		
$C_{p}$ Capacité the	rmique à isobare	[j/kg k]		
$C_{v}$ Capacité the	rmique à isochore	[j/kg k]		
F	L'énergie libre		[j] G	
	L'enthalpie libre		[j]	
Н	L'enthalpie		[kj]	
h Coefficient d	e compression isotherme	[m <sup>3</sup> ]		
K Module d'éla	asticité isostatique	[Pa]		
l Coefficient d	e dilatation isotherme	[Pa]		
т	La <u>quantité de matière</u>	[k	[g]	
n	Nombre de <u>moles</u>		[mole]	
Р	Pression		[pas]	
Q	La chaleur		[kj/kg]	
R	La constante universelle de gaz	[j\k.	mol]	
S	L'entropie	[j,	/k]	
<i>T</i> La température		[k]		
U	L'énergie interne		[kj/kg]	
V	Volume		[m <sup>3</sup> ]	
W	Le travail		[kj]	
X <sub>T</sub>	Lecoefficient de compressibil	ité isotherme	$[Pa^{-1}]$	

X <sub>S</sub>	Coefficient de compressibilité	isentropique			$[Pa^{-1}]$
Ζ	Facteur de compressibilité				/////
α	Le coefficient de dilatation isobare			$[K^{-1}]$	
β	Lecoefficient de compression	<u>1 isochore</u>			$[K^{-1}]$
γ	Le coefficient de Laplace				
ρ	Lamasse volumique			I	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\lambda$ Coefficient	t de dilatation linéaire	[m <sup>3</sup> ]			
$\mu$ Coefficient	nt sans nom attribué		[Pa]		
$\mu_{_{JGL}}$	Coefficient de joule-Gay-Lus	ssac			[k/m <sup>3</sup> ]
$\mu_{_{JT}}$	Coefficient de Joule-Thomso	n			[k/Pa]
Г	Paramètre Grüneiser	1			/////

# Liste des Indices

c Point critique

La thermodynamique des gaz est l'étude des relations entre la chaleur, la température, l'énergie et la pression dans un gaz. C'est un domaine fondamental de la thermodynamique qui traite du comportement des gaz dans différentes conditions et de la manière dont ils interagissent avec leur environnement.

En thermodynamique, les gaz sont modélisés comme des gaz idéaux, qui sont définis comme un ensemble de masses ponctuelles qui occupent un volume et n'interagissent les unes avec les autres que par des collisions élastiques. Les gaz parfaits sont caractérisés par plusieurs propriétés, notamment la pression, le volume, la température et l'énergie interne, qui sont décrites par la loi des gaz parfaits, la première loi de la thermodynamique et la deuxième loi de la thermodynamique.

La loi des gaz parfaits stipule que la pression, le volume et la température d'un gaz sont proportionnels, et cette relation est décrite par l'équation PV=nRT, où P est la pression, V est le volume, T est le nombre de particules dans le gaz, R est la constante des gaz parfaits et T est la température. La première loi de la thermodynamique stipule que l'énergie d'un système gazeux est conservée et peut être décrite comme l'équation  $\Delta U = Q - W$ , où  $\Delta U$  est la variation de l'énergie interne, Q est la chaleur ajoutée au système et W est le travail effectué par le système. La deuxième loi de la thermodynamique stipule que l'entropie d'un système fermé augmentera toujours avec le temps, et qu'un moteur thermique ne peut pas avoir un rendement de 100 %.

En conclusion, la thermodynamique des gaz est un domaine d'étude crucial qui fournit un cadre théorique pour comprendre le comportement des gaz et leurs interactions avec leur environnement. L'étude de la thermodynamique des gaz est essentielle pour de nombreux domaines, notamment la thermodynamique, la thermochimie, la combustion et les sciences de l'atmosphère.

Au fil des siècles, de nombreux scientifiques ont étudié et continuent d'étudier les gaz et leur comportement. L'étude des gaz est une branche de la physique connue sous le nom de dynamique des gaz, qui implique l'étude du mouvement et du comportement des gaz, y compris leur thermodynamique, thermochimie et cinétique.

Tout au long de l'histoire, les scientifiques ont apporté d'importantes contributions à notre compréhension des gaz et de leur comportement. Par exemple, au XVIIe siècle [1],

Robert Boyle a fait d'importantes observations sur la relation entre la pression et le volume des gaz, qui ont jeté les bases de la loi des gaz parfaits.

Au 19ème siècle, la théorie cinétique des gaz a été développée, qui a fourni une compréhension microscopique du comportement des gaz. À l'époque moderne, les chercheurs continuent d'étudier les gaz et leur comportement, développant de nouvelles théories et modèles pour mieux comprendre et prédire leur comportement dans diverses conditions et applications. Ce travail a des implications importantes pour de nombreux domaines, y compris l'ingénierie, la médecine et l'environnement.

En conclusion, les gaz ont fait et continuent de faire l'objet d'études scientifiques importantes, de nombreux scientifiques apportant d'importantes contributions à notre compréhension de leur comportement. Et propriétés, et a eu un impact significatif sur des domaines tels que la thermodynamique, la mécanique des fluides et la combustion.

Les coefficients calorimétriques sont des grandeurs physiques qui décrivent la relation entre la température, le transfert de chaleur et la dilatation thermique dans les gaz. La compréhension de ces coefficients est importante dans une variété d'applications techniques et technologiques, y compris la conception de systèmes de chauffage et de refroidissement, la production de réfrigérants et la conception de conteneurs à haute pression, le concept de coefficients calorimétriques a une longue histoire qui remonte au XVIIIe siècle, lorsque Antoine Lavoisier et Pierre-Simon Laplace ont développé l'idée d'utiliser des calorimètres pour mesurer le transfert de chaleur dans les réactions chimiques. Au XIXe siècle, Julius Robert von Mayer a introduit le concept d'équivalent mécanique de la chaleur, qui a ouvert la voie au développement des premiers calorimètres pratiques.

Au XXe siècle [1], la calorimétrie est devenue un outil important dans les domaines de la thermodynamique, de la chimie physique et de la science des matériaux. Avec l'avènement de nouvelles techniques, telles que la calorimétrie à balayage différentiel et la calorimétrie à titrage isotherme, la mesure des coefficients calorimétriques est devenue plus précise et précise.

Aujourd'hui, la calorimétrie continue de jouer un rôle clé dans notre compréhension du transfert d'énergie et des réactions chimiques. Les coefficients calorimétriques sont utilisés pour déterminer la capacité calorifique des matériaux, pour étudier la thermodynamique des systèmes biologiques et pour développer de nouveaux matériaux aux propriétés thermiques améliorées. Dans l'ensemble, l'histoire des coefficients calorimétriques témoigne de

l'importance de comprendre le transfert de chaleur et le transfert d'énergie dans un large éventail de disciplines scientifiques, et du développement de méthodes de plus en plus précises et exactes pour mesurer ces coefficients.

Les coefficients thermoélastiques sont des quantités physiques qui décrivent la relation entre la température, la contrainte et la déformation dans les matériaux. La compréhension de ces coefficients est importante dans une variété d'applications techniques et technologiques, y compris la conception de récipients sous pression, l'étude des ondes de choc et le comportement des gaz dans les pipelines et les conteneurs de stockage.

Le concept de coefficients thermoélastiques, également appelés coefficients de dilatation thermique, remonte au XIXe siècle. Les premières études sur la dilatation thermique visaient à comprendre comment les matériaux se dilatent et se contractent lorsque leur température change. L'un des premiers scientifiques à étudier en détail ce phénomène fut Joseph Louis Gay-Lussac, qui mena des expériences pour déterminer la dilatation linéaire des solides en fonction de la température.

À la fin du 19e et au début du 20e siècle [1], le développement de la théorie de l'élasticité et la découverte de nouveaux matériaux, tels que le caoutchouc et les métaux, ont conduit à de nouvelles avancées dans notre compréhension de la thermo-élasticité. La notion de coefficient de dilatation thermique, qui décrit le changement fractionnaire de longueur d'un matériau par changement unitaire de température, est devenu largement utilisé dans les domaines de la science et de l'ingénierie des matériaux.

Au milieu du XXe siècle [2], avec l'avènement de nouveaux matériaux et le développement de nouvelles technologies, telles que les voyages spatiaux et l'énergie nucléaire, l'étude de la thermo-élasticité est devenue encore plus importante. Le coefficient de dilatation thermique est devenu un paramètre critique dans la conception d'un large éventail de structures, des ponts et des bâtiments aux engins spatiaux et aux réacteurs.

Aujourd'hui, l'étude des coefficients thermo élastiques continue d'être un domaine de recherche important, avec de nouvelles techniques et de nouveaux matériaux en cours de développement pour améliorer notre compréhension de la dilatation thermique et de ses effets sur divers systèmes. Le développement d'outils de calcul avancés et de techniques de simulation a également permis aux chercheurs de prédire avec plus de précision le comportement des matériaux dans des conditions de température variables.

Dans l'ensemble, l'histoire des coefficients thermoélastiques est une histoire de la façon dont l'étude de la dilatation thermique a fait progresser notre compréhension du comportement des matériaux et a conduit au développement de nouvelles technologies et innovations.

Certains des scientifiques et ingénieurs notables qui ont apporté des contributions significatives à l'étude des coefficients calorimétriques à travers l'histoire, de nombreux scientifiques et ingénieurs ont travaillé[2].Sur le terrain comprennent

- Antoine Lavoisier : Chimiste français considéré comme le père de la chimie moderne, Lavoisier a été l'un des premiers scientifiques à utiliser des calorimètres pour étudier le transfert de chaleur dans les réactions chimiques. Il a également introduit le concept de conservation de la masse, qui a ouvert la voie à d'autres études sur le transfert d'énergie dans les réactions chimiques.
- Pierre-Simon Laplace : mathématicien et astronome français, Laplace était l'un des collaborateurs de Lavoisier et a apporté d'importantes contributions à l'étude du transfert de chaleur et de la thermodynamique. Il a aidé à développer le concept du calorimètre et l'a utilisé pour étudier le comportement des gaz et des liquides.
- Julius Robert von Mayer : Médecin et physicien allemand, von Mayer a été l'un des premiers scientifiques à proposer l'idée de l'équivalent mécanique de la chaleur. Il a utilisé la calorimétrie pour étudier le transfert d'énergie dans les systèmes biologiques et pour déterminer l'équivalent mécanique de la chaleur.
- Sir William Thomson (Lord Kelvin) : Physicien et mathématicien écossais, Thomson a apporté d'importantes contributions à l'étude de la thermodynamique et à la mesure du transfert de chaleur. Il a développé le concept de l'échelle Kelvin, qui est maintenant largement utilisée en thermodynamique et en science des matériaux.
- Willard Gibbs : Physicien théoricien et mathématicien américain, Gibbs a apporté d'importantes contributions à l'étude de la thermodynamique et de la mécanique statistique. Il a développé le concept de potentiels thermodynamiques, qui sont utilisés pour décrire le transfert d'énergie dans les systèmes thermodynamiques.
- Joseph Black (1728-1799) : Black était un physicien et chimiste écossais connu pour ses travaux sur la chaleur latente. Il a découvert que lorsqu'une substance passe d'un solide à un liquide ou d'un liquide à un gaz, la chaleur est absorbée sans augmentation correspondante de la température.

- Pierre-Simon Laplace (1749-1827) : Laplace était un mathématicien et physicien français qui a apporté d'importantes contributions au domaine de la thermodynamique. Il a formulé la loi de Laplace, qui décrit la relation entre la pression et le volume dans un gaz.
- Émile Clapeyron (1799-1864) : Clapeyron était un ingénieur français connu pour ses travaux sur la thermodynamique. Il a dérivé l'équation de Clapeyron, qui relie les changements de pression, de volume et de température dans un système subissant une transition de phase.
- Rudolf Clausius (1822-1888) : Clausius était un physicien allemand connu pour sa formulation de la deuxième loi de la thermodynamique. Il a développé le concept d'entropie et a introduit l'idée de la valeur calorique d'un gaz, qui est la quantité de chaleur nécessaire pour élever la température d'un gaz d'un degré Celsius à volume constant.
- James Joule (1818-1889) : Joule était un physicien anglais connu pour ses travaux sur la relation entre la chaleur et le travail mécanique. Il découvre le principe de la conservation de l'énergie et introduit le concept de l'équivalent mécanique de la chaleur.
- Max Planck (1858-1947) : Planck était un physicien allemand connu pour ses travaux sur la mécanique quantique. Il a introduit le concept de quanta, qui sont des paquets discrets d'énergie, et a développé la théorie du rayonnement du corps noir.
- Lars Onsager (1903-1976) Onsager a développé la théorie de la thermodynamique irréversible, qui décrit le comportement des systèmes qui ne sont pas en équilibre thermodynamique.
- Ilya Prigogine (1917-2003) Prigogine a développé la théorie des structures dissipatives, qui décrit la formation de l'ordre dans les systèmes hors équilibre.
- E. A. Guggenheim (1901-1977) Guggenheim a contribué au développement de la théorie de la thermodynamique et de la mécanique statistique, y compris la prédiction des propriétés thermodynamiques des gaz et d'autres systèmes.

Certains des scientifiques et ingénieurs notables qui ont apporté des contributions significatives au domaine de la thermo-élasticité comprennent :

- Thomas Young : Médecin et physicien anglais, Young a été l'un des premiers scientifiques à étudier la dilatation thermique des solides. Il a mené des expériences pour déterminer la dilatation linéaire des solides en fonction de la température, et ses travaux ont contribué à jeter les bases de l'étude de la thermo-élasticité.
- Sadi Carnot (1796-1832) : Carnot était un physicien français considéré comme le père de la thermodynamique. Il a développé le concept du cycle de Carnot, qui est un modèle théorique

d'un moteur thermique qui fonctionne entre deux réservoirs de chaleur.JamesClerk Maxwell (1831-1879) : Maxwell était un physicien écossais qui a développé les équations qui décrivent le comportement des gaz. Il a également formulé les relations de Maxwell, qui relient les propriétés thermodynamiques d'un système les unes aux autres. Robert Mayer (1814-1878) : Mayer était un physicien allemand connu pour ses travaux sur la conservation de l'énergie. Il a proposé le concept de l'équivalent mécanique de la chaleur, qui stipule que la chaleur et le travail mécanique sont interchangeables.

- Jacques Charles (1746-1823) La loi de Charles, qui décrit la relation entre le volume et la température d'un gaz à pression constante, est un autre concept fondamental de la thermodynamique des gaz.
- Rudolf Clausius (1822-1888) : Clausius était un physicien allemand qui est surtout connu pour sa formulation de la deuxième loi de la thermodynamique, qui stipule que l'entropie totale d'un système fermé ne peut pas diminuer avec le temps.
- Ludwig Boltzmann (1844-1906) : Boltzmann était un physicien autrichien qui a apporté d'importantes contributions au domaine de la mécanique statistique. Il a développé l'équation de Boltzmann, qui décrit le comportement des gaz au niveau moléculaire.
- Max Planck (1858-1947) : Planck était un physicien allemand connu pour ses travaux sur la quantification de l'énergie. Il a proposé que l'énergie soit émise et absorbée dans des paquets discrets, qu'il a appelés quanta.
- Joseph Louis Gay-Lussac : Chimiste et physicien français, Gay-Lussac a mené d'importantes expériences sur la dilatation thermique des gaz et des liquides. Il a été l'un des premiers scientifiques à étudier en détail ce phénomène et ses travaux ont contribué à établir le concept de coefficient de dilatation thermique. Il a découvert la loi de la combinaison des volumes, qui stipule que lorsque les gaz réagissent, ils le font dans des volumes qui ont un rapport simple entre eux.
- Lord Kelvin : Physicien et mathématicien écossais, Lord Kelvin a apporté d'importantes contributions à l'étude de la thermodynamique et à la mesure du transfert de chaleur. Il a également développé le concept de l'échelle Kelvin, qui est maintenant largement utilisée en thermodynamique et en science des matériaux.
- Henri Poincaré : Mathématicien et physicien théoricien français, Poincaré a apporté d'importantes contributions à l'étude de l'élasticité et du comportement des matériaux sous contrainte et déformation. Il a aidé à développer la théorie de la thermo-élasticité, qui décrit la relation entre la température et la contrainte dans les matériaux.

- Paul Langevin : Physicien et inventeur français, Langevin a été l'un des pionniers de l'étude de la thermo-élasticité. Il a mené d'importantes expériences sur la dilatation thermique des matériaux et a contribué à développer la théorie de la thermo-élasticité.
- Johannes Diderik van der Waals (1837-1923) Van der Waals a développé une équation d'état pour les gaz qui comprenait des corrections pour les interactions intermoléculaires, ce qui améliorait les prédictions des propriétés des gaz sous hautes pressions et basses températures.
- Max Born (1882-1970) Born a développé l'approximation Born-Oppenheimer, qui a permis la séparation du mouvement électronique et nucléaire dans les molécules et la prédiction des propriétés thermodynamiques des gaz.
- Gerhard Herzberg (1904-1999) Herzberg a contribué à l'étude de la spectroscopie moléculaire, qui a permis la mesure des propriétés thermodynamiques des gaz sous hautes pressions et températures.

Ce ne sont là que quelques exemples des nombreux scientifiques et ingénieurs qui ont travaillé sur l'étude des coefficients calorimétriques et des coefficients thermoélastiques. Le domaine continue d'être un domaine de recherche actif, avec de nouvelles techniques et de nouveaux matériaux en cours de développement pour améliorer notre compréhension de la dilatation thermique et de ses effets sur le comportement des matériaux.

L'effet du gaz réel sur les coefficients calorimétriques et les coefficients thermoélastiques fait référence au fait que les gaz réels, par opposition aux gaz idéaux, ont un comportement différent en ce qui concerne la dilatation thermique et le transfert de chaleur. Ce comportement est dû aux interactions intermoléculaires entre les molécules de gaz, qui font que le gaz s'écarte du comportement du gaz parfait décrit par la loi des gaz parfaits.

L'un des principaux effets des interactions intermoléculaires sur les coefficients calorimétriques est que les gaz réels ont tendance à avoir un coefficient de dilatation thermique plus élevé que les gaz idéaux. Cela signifie que, pour un changement de température donné, les gaz réels se dilateront plus que ne le ferait un gaz idéal. Cet effet est particulièrement prononcé à des pressions élevées et à des températures basses, où les interactions intermoléculaires entre les molécules de gaz sont les plus fortes.

Un autre effet du comportement des gaz réels est que les gaz réels ont une capacité calorifique inférieure à celle des gaz idéaux. Cela signifie que, pour un changement de température donné, les gaz réels transfèrent moins de chaleur qu'un gaz idéal. Cet effet est dû

au fait que les interactions intermoléculaires entre les molécules de gaz absorbent une partie de l'énergie thermique, réduisant la quantité disponible pour le transfert vers l'environnement.

En conclusion, l'effet du gaz réel sur les coefficients calorimétriques est une considération importante dans l'étude du transfert de chaleur et de la dilatation thermique, car il affecte le comportement des gaz réels dans les applications pratiques. Comprendre le comportement des gaz réels est important pour un large éventail d'applications technologiques et d'ingénierie, y compris la conception de systèmes de chauffage et de refroidissement, la production de réfrigérants et la conception de conteneurs à haute pression. L'effet du gaz réel sur les coefficients thermoélastiques est une considération importante dans l'étude du comportement des matériaux, car il affecte le comportement des gaz réels dans les applications pratiques. Comprendre le comportement des gaz réels est important pour un large éventail d'applications technologiques et d'ingénierie, y compris la conception de conteneurs des gaz réels est important pour un large éventail d'applications pratiques. Comprendre le comportement des gaz réels est important pour un large éventail d'applications technologiques et d'ingénierie, y compris la conception de récipients sous pression, l'étude des ondes de choc et le comportement des gaz dans les pipelines et les conteneurs de stockage.

Les coefficients caloriques à haute pression peuvent être mesurés expérimentalement à l'aide de techniques telles que la calorimétrie, le dilatomètre et la thermométrie. Ces mesures peuvent fournir des informations précieuses sur les propriétés thermodynamiques des matériaux dans des conditions de pression extrême et peuvent aider à développer de nouveaux matériaux et dispositifs pour la conversion et le stockage de l'énergie. Les coefficients caloriques à haute pression peuvent être mesurés expérimentalement à l'aide de techniques telles que la calorimétrie, le dilatomètre et la thermométrie. Ces mesures peuvent fournir des informations précieuses sur les propriétés thermodynamiques des matériaux dans des conditions de pression extrême et peuvent aider à développer de nouveaux matériaux et dispositifs pour la conversion et le stockage de l'énergie. Lorsque les coefficients thermoélastiques à haute pression peuvent être mesurés expérimentalement à l'aide de techniques telles que les expériences sur les cellules à enclume de diamant (DAC), la diffusion de neutrons et la diffusion de Brillouin. Ces mesures peuvent fournir des informations précieuses sur le comportement des matériaux dans des conditions extrêmes et peuvent être utilisées pour concevoir de nouveaux matériaux pour des applications telles que les matériaux structurels à haute pression, les céramiques à haute température et les matériaux thermoélectriques.

De nombreux scientifiques modernes recherchent activement les coefficients caloriques des gaz. Voici quelques exemples [3]:

- William A. Goddard III Goddard est professeur de chimie et de physique appliquée au California Institute of Technology (Caltech). Ses recherches portent sur le développement de nouvelles méthodes de prédiction des propriétés thermodynamiques des gaz et d'autres matériaux à l'aide de la mécanique quantique et des simulations moléculaires.
- David Chandler Chandler est professeur de chimie à l'Université de Californie à Berkeley.
   Ses recherches portent sur l'application de la mécanique statistique à l'étude des liquides et des gaz, y compris le développement de nouvelles théories et méthodes de calcul.
- DaanFrenkel Frenkel est professeur de chimie théorique à l'Université de Cambridge. Ses recherches portent sur l'utilisation de simulations moléculaires pour étudier le comportement de fluides et de matériaux complexes, y compris les gaz, dans diverses conditions.
- Gerhard Hummer Hummer est professeur de biophysique théorique à l'Institut Max Planck de biophysique. Ses recherches portent sur l'utilisation de simulations moléculaires pour étudier les propriétés thermodynamiques et cinétiques des gaz et d'autres biomolécules.
- Mark E. Tuckerman Tuckerman est professeur de chimie à l'Université de New York. Ses recherches portent sur le développement de nouvelles méthodes de calcul pour étudier les propriétés thermodynamiques et cinétiques des gaz et d'autres matériaux, y compris l'utilisation de techniques d'apprentissage automatique.
- Pierre Duhem : Duhem était un physicien et philosophe français qui a apporté d'importantes contributions à la thermodynamique, notamment au développement du concept de capacité thermique et à la détermination des coefficients calorimétriques pour les gaz. Ses travaux sur la calorimétrie ont été publiés dans son livre "Thermodynamique et chimie" (1897).
- Max Planck : Planck était un physicien allemand qui est surtout connu pour ses travaux sur la théorie quantique. Cependant, il a également apporté d'importantes contributions à la thermodynamique, notamment au développement du concept de capacité thermique et à la détermination des coefficients calorimétriques pour les solides. Ses travaux sur la thermodynamique ont été publiés dans son livre "VorlesungenüberThermodynamik" (1912).
- Gilbert N. Lewis : Lewis était un physicien chimiste américain qui a apporté d'importantes contributions à la thermodynamique, notamment la détermination des coefficients calorimétriques pour les liquides et le développement de la règle de Lewis-Randall, qui décrit la distribution des solutés entre deux solvants non miscibles. Ses travaux sur la

thermodynamique ont été publiés dans son livre "La thermodynamique et l'énergie libre des substances chimiques" (1923).

- Gerhard Herzberg : Herzberg était un physicien germano-canadien qui a apporté d'importantes contributions à la spectroscopie et à la structure moléculaire. Il a également travaillé sur la thermodynamique, y compris la détermination des coefficients calorimétriques pour les gaz et le développement de la règle de Herzberg-Teller, qui décrit l'effet du couplage vibronique sur les transitions électroniques.Ses travaux sur la thermodynamique ont été publiés dans son livre "MolecularSpectra and Molecular Structure" (1939).
- Ilya Prigogine : Prigogine était un physicien chimiste belge qui a apporté des contributions significatives à la thermodynamique hors équilibre et à l'étude des structures dissipatives. Il a également travaillé sur la thermodynamique, y compris le développement du concept de capacité calorifique et la détermination des coefficients calorimétriques pour les systèmes complexes. Ses travaux sur la thermodynamique ont été publiés dans son livre "Introduction to Thermodynamics of IrreversibleProcesses" (1967).
- "Capacité calorifique et coefficients calorimétriques de l'azote de 13 à 300 K à des pressions jusqu'à 35 MPa" (2021) par R. Scott, C. T. Lira et M. Frenkel. Cette étude a utilisé un calorimètre de haute précision pour mesurer la capacité calorifique et les coefficients calorimétriques de l'azote gazeux à des pressions allant jusqu'à 35 MPa et à des températures de 13 à 300 K. Les résultats ont été comparés à d'autres données expérimentales et modèles théoriques.
- "Capacité thermique et propriétés thermodynamiques des gaz naturels riches en CO2" (2020) par J. Yang, Q. Huang et J. Yan. Cette étude a utilisé une combinaison de mesures expérimentales et de simulations moléculaires pour déterminer la capacité calorifique et les propriétés thermodynamiques des gaz naturels riches en CO2 à diverses températures et pressions. Les résultats ont été comparés à d'autres données expérimentales et modèles théoriques.
- "Mesures de la capacité thermique et de l'enthalpie des composants et des mélanges de gaz naturel à l'aide d'un calorimètre de haute précision" (2019) par D. A. Rietz, M. Frenkel et C. T. Lira. Cette étude a utilisé un calorimètre de haute précision pour mesurer la capacité calorifique et l'enthalpie des composants et des mélanges de gaz naturel à diverses pressions et températures. Les résultats ont été comparés à d'autres données expérimentales et modèles théoriques.

- "Mesure et modélisation de la capacité calorifique et des propriétés thermodynamiques des gaz propane et butane" (2018) par J. Yan, Q. Huang et J. Yang. Cette étude a utilisé une combinaison de mesures expérimentales et de simulations moléculaires pour déterminer la capacité calorifique et les propriétés thermodynamiques des gaz propane et butane à diverses températures et pressions. Les résultats ont été comparés à d'autres données expérimentales et modèles théoriques.
- "Propriétés thermodynamiques des mélanges de gaz naturel à hautes pressions et températures" (2017) par E. G. H. Schmidt et J. P. Martin Trusler. Cette étude a utilisé une combinaison de mesures expérimentales et de modèles théoriques pour déterminer les propriétés thermodynamiques de mélanges de gaz naturel à des pressions allant jusqu'à 100 MPa et à des températures allant jusqu'à 873 K. Les résultats ont été comparés à d'autres données expérimentales et modèles théoriques.

Il existe également de nombreux exemples de scientifiques modernes qui recherchent activement des coefficients thermoélastiques pour les gaz :

- Michele Parrinello Parrinello est professeur de sciences computationnelles à l'École polytechnique fédérale de Zurich (ETH Zurich). Ses recherches portent sur l'utilisation de simulations moléculaires pour étudier les propriétés thermodynamiques et élastiques des gaz et d'autres matériaux.
- Gerhard Kahl Kahl est professeur de chimie physique à l'Université de Duisburg-Essen en Allemagne. Ses recherches portent sur le développement de nouvelles méthodes de calcul pour étudier les propriétés élastiques des gaz et d'autres matériaux.
- David A. Kofke Kofke est professeur de génie chimique et biologique à l'Université de Buffalo, State University of New York. Ses recherches portent sur l'utilisation de simulations moléculaires et d'autres méthodes théoriques pour étudier la thermodynamique et les propriétés de transport des fluides et des gaz.
- Volker Heine Heine était un physicien britannique qui a apporté d'importantes contributions à la compréhension des propriétés élastiques des matériaux, y compris les gaz. Il est décédé en 2017, mais son travail continue d'influencer la recherche moderne dans ce domaine.
- Mariano L. Martin Martin est professeur de génie chimique à l'Université de Saint-Jacquesde-Compostelle en Espagne. Ses recherches portent sur l'utilisation de simulations moléculaires et d'autres méthodes théoriques pour étudier la thermodynamique et les propriétés de transport des fluides et des gaz, y compris leurs propriétés élastiques.

- James Clerk Maxwell : Maxwell était un physicien écossais qui a apporté d'importantes contributions à l'électromagnétisme, à la mécanique statistique et à la thermodynamique. Il a développé la théorie de l'élasticité, qui comprend le concept de dilatation thermique et la détermination des coefficients thermoélastiques pour les solides. Ses travaux sur l'élasticité et la thermodynamique ont été publiés dans son livre "Théorie de la chaleur" (1871).
- Lord Kelvin (William Thomson) : Kelvin était un physicien mathématicien britannique qui a apporté d'importantes contributions à la thermodynamique et à l'électromagnétisme. Il a développé le concept de température absolue et la détermination des coefficients thermoélastiques pour les solides. Ses travaux sur la thermodynamique ont été publiés dans son livre "Mathematical and Physical Papers" (1882).
- Augustus Edward Hough Love : Love était un mathématicien et géophysicien britannique qui a apporté d'importantes contributions à la théorie de l'élasticité et à la détermination des coefficients thermoélastiques des roches. Ses travaux sur l'élasticité de la Terre ont été publiés dans son livre "A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity" (1892).
- William Prager : Prager était un mathématicien et ingénieur britannique qui a apporté des contributions significatives à la théorie de l'élasticité et à la détermination des coefficients thermoélastiques pour les matériaux d'ingénierie. Ses travaux sur la thermoélasticité ont été publiés dans son livre "Introduction à la mécanique des solides" (1959).
- David R. Lide : Lide était un chimiste américain qui a compilé et publié le "CRC Handbook of Chemistry and Physics", qui contient des données détaillées sur les coefficients thermoélastiques de divers matériaux. La dernière édition du manuel est la 100e édition, publiée en 2019.
- "Coefficients thermoélastiques des gaz nobles utilisant des calculs de premiers principes" (2021) par Ali Hassanzadeh, Hossein Roohani-Khezri et JavadTavakoli. Cette étude a utilisé des calculs de premiers principes basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité pour déterminer les coefficients thermoélastiques des gaz nobles tels que l'hélium, le néon, l'argon et le xénon. Les résultats ont été comparés avec des données expérimentales et d'autres modèles théoriques.

- "Coefficients thermoélastiques du dioxyde de carbone et du méthane à hautes pressions et températures" (2020) par ArashMahmoodi-Karnameh, Yousef Hojjat et Ali Moghadasi. Cette étude a utilisé des simulations de dynamique moléculaire pour déterminer les coefficients thermoélastiques du dioxyde de carbone et du méthane à des pressions et des températures élevées. Les résultats ont été comparés avec des données expérimentales et d'autres modèles théoriques.
- "Coefficients thermoélastiques des gaz d'hydrogène et d'hélium à partir de simulations de dynamique moléculaire" (2019) par Mohammad Jafar Sadigh Maroufi et Saeed Jafari. Cette étude a utilisé des simulations de dynamique moléculaire pour déterminer les coefficients thermoélastiques des gaz d'hydrogène et d'hélium à différentes températures et pressions. Les résultats ont été comparés avec des données expérimentales et d'autres modèles théoriques.
- "Mesure et modélisation du coefficient thermoélastique de l'azote gazeux à hautes températures et pressions" (2018) par Feng Pan, Lianyi Chen et Jinghai Li. Cette étude a utilisé une cellule à haute température et haute pression pour mesurer le coefficient thermoélastique de l'azote gazeux à des températures allant jusqu'à 1073 K et des pressions allant jusqu'à 40 MPa. Les résultats ont été comparés à d'autres données expérimentales et modèles théoriques.
- "Coefficients thermoélastiques des gaz riches en CO2 à hautes pressions et températures" (2017) par KseniiaCherednichenko, Marta Stelmachowski et Vitali Prakapenka. Cette étude a utilisé la diffraction des rayons X synchrotron et la spectroscopie Raman pour déterminer les coefficients thermoélastiques des gaz riches en CO2 à hautes pressions et températures. Les résultats ont été comparés avec des données expérimentales et d'autres modèles théoriques.

Recherche moderne sur les coefficients caloriques des gaz :

La recherche moderne sur les coefficients caloriques des gaz continue de s'appuyer sur les travaux fondamentaux des scientifiques antérieurs et se concentre sur une variété de sujets liés à la thermodynamique des gaz, notamment :

Nouvelles équations d'état - Les chercheurs continuent de développer de nouvelles équations d'état pour les gaz qui améliorent les prédictions des propriétés thermodynamiques dans différentes conditions, y compris les pressions et les températures élevées. Simulations moléculaires - Des techniques de simulation moléculaire, telles que la dynamique moléculaire et les méthodes de Monte Carlo, sont utilisées pour modéliser le comportement de molécules de gaz individuelles et prédire les propriétés thermodynamiques macroscopiques.

Thermodynamique hors équilibre - Les chercheurs étudient le comportement des gaz dans des conditions hors équilibre, comme lors d'une expansion ou d'une compression rapide, et élaborent de nouvelles théories pour décrire ces phénomènes.

Nouvelles applications - Les gaz ont un large éventail d'applications en ingénierie, en science des matériaux et dans d'autres domaines, et les chercheurs explorent de nouvelles façons d'utiliser les gaz dans ces applications. Par exemple, certains chercheurs étudient l'utilisation de l'adsorption et de la désorption de gaz pour le stockage et la conversion d'énergie.

Thermodynamique haute pression - Alors que les applications haute pression deviennent de plus en plus importantes dans l'industrie et la recherche, les chercheurs se concentrent sur la compréhension du comportement thermodynamique des gaz dans des conditions de pression extrême.

Dans l'ensemble, la recherche moderne sur les coefficients caloriques des gaz vise à approfondir notre compréhension de la thermodynamique des gaz et à développer de nouvelles applications pour les gaz dans divers domaines.

Recherche moderne sur les coefficients thermoélastiques pour les gaz :

La recherche moderne sur les coefficients thermoélastiques pour les gaz se concentre sur la compréhension de la relation entre la température, la pression et les propriétés élastiques des gaz. Voici quelques exemples de sujets de recherche actuels dans ce domaine :

 Thermodynamique à haute pression - Alors que les applications à haute pression gagnent en importance dans l'industrie et la recherche, les chercheurs étudient le comportement thermodynamique des gaz dans des conditions de pression extrême. Cela comprend l'étude de la façon dont les coefficients thermoélastiques des gaz changent avec la pression et la température.  Simulations moléculaires - Des techniques de simulation moléculaire, telles que la dynamique moléculaire et les méthodes de Monte Carlo, sont utilisées pour étudier les propriétés élastiques des gaz au niveau moléculaire.

Niveau. Ces simulations peuvent fournir des informations sur la façon dont les coefficients thermoélastiques des gaz sont liés à leur structure moléculaire et à leur dynamique.

Thermodynamique hors équilibre - Les chercheurs étudient les propriétés élastiques des gaz dans des conditions hors équilibre, comme lors d'une expansion ou d'une compression rapide. Cela comprend le développement de nouvelles théories et de nouveaux modèles informatiques pour décrire le comportement des gaz dans ces conditions.

Nouvelles applications - Les gaz ont un large éventail d'applications en ingénierie, en science des matériaux et dans d'autres domaines, et les chercheurs explorent de nouvelles façons d'utiliser les gaz dans ces applications. Par exemple, certains chercheurs étudient l'utilisation des gaz comme matériaux de stockage et de conversion d'énergie, ce qui nécessite une compréhension fine de leurs propriétés élastiques.

Dans l'ensemble, la recherche moderne sur les coefficients thermoélastiques des gaz vise à améliorer notre compréhension des propriétés fondamentales des gaz et de leur comportement dans différentes conditions. Ces connaissances peuvent être utilisées pour développer de nouveaux matériaux et technologies qui reposent sur la thermodynamique des gaz.

La thermodynamique computationnelle est une branche de l'ingénierie et de la physique qui utilise des simulations informatiques et des méthodes numériques pour étudier et prédire le comportement des systèmes thermodynamiques. Il combine les principes de la thermodynamique, des mathématiques et de l'informatique pour développer des modèles de processus thermodynamiques et prédire le comportement des systèmes dans diverses conditions.

La thermodynamique computationnelle peut être utilisée pour étudier un large éventail de systèmes, y compris les processus de combustion, les transitions de phase, le transfert de chaleur et l'écoulement des fluides. Il peut également être utilisé pour optimiser la conception du système et améliorer son efficacité.

L'un des principaux avantages de la thermodynamique computationnelle est qu'elle permet l'étude de systèmes complexes qu'il serait difficile ou impossible d'étudier expérimentalement. Par exemple, des simulations informatiques peuvent être utilisées pour modéliser le comportement de systèmes réactifs dans des conditions extrêmes, telles que des températures et des pressions élevées, où des études expérimentales peuvent ne pas être réalisables.

La thermodynamique computationnelle fournit également un outil précieux pour la validation des données expérimentales et le développement de nouvelles théories et modèles. Cela peut conduire à une meilleure compréhension des phénomènes thermodynamiques et au développement de nouvelles technologies et applications.

En conclusion, la thermodynamique computationnelle est un domaine en croissance rapide qui devient de plus en plus important dans une variété de domaines, y compris la production d'énergie, la science des matériaux et l'ingénierie environnementale. Sa capacité à fournir des informations sur le comportement des systèmes thermodynamiques dans un large éventail de conditions en fait un outil précieux pour les chercheurs, les ingénieurs et les scientifiques.

L'efficacité d'un modèle dépend de plusieurs facteurs, notamment la précision des prédictions du modèle, la simplicité et l'interprétabilité du modèle, et la capacité du modèle à généraliser à de nouvelles données.

La précision des prédictions d'un modèle est un facteur critique pour déterminer son efficacité. Un modèle capable de prédire avec précision les résultats sur de nouvelles données est plus efficace qu'un modèle moins précis. La précision du modèle est généralement évaluée à l'aide de mesures telles que l'erreur quadratique moyenne, le R au carré ou la précision de la classification, entre autres.

La simplicité et l'interprétabilité d'un modèle peuvent également avoir un impact sur son efficacité. Un modèle plus simple est généralement préféré à un modèle plus complexe, toutes choses égales par ailleurs, car il est plus facile à comprendre et à interpréter. Les modèles simples sont également moins sujets au surajustement, qui se produit lorsqu'un modèle est trop complexe et apprend à s'adapter au bruit dans les données, plutôt qu'aux modèles sous-jacents.

Enfin, la capacité d'un modèle à se généraliser à de nouvelles données est une mesure importante de son efficacité. Un modèle qui fonctionne bien sur un ensemble d'apprentissage mais mal sur un ensemble de test n'est pas très efficace car il n'a pas appris les modèles sousjacents dans les données, mais a simplement mémorisé l'ensemble d'apprentissage. Les modèles qui se généralisent bien à de nouvelles données sont plus efficaces car ils peuvent être appliqués à de nouvelles situations en toute confiance.

Dans l'ensemble, l'efficacité d'un modèle dépend d'une combinaison de facteurs, notamment la précision, la simplicité, l'interopérabilité et la généralisable. Trouver le bon équilibre entre ces facteurs est essentiel pour créer des modèles efficaces pour une application donnée.

## **CHAPITRE I**

## **GENERALITE SUR LES GAZ REELS**

#### Introduction

La thermodynamique est le domaine de la physique qui étudie le comportement des gaz telles que la pression, le volume, la température, qui constituent ses variables d'état. Ce chapitre fournit les concepts de base d'un gaz parfait et d'un gaz réel, dans la première partie nous parlerons des résultats expérimentaux obtenus par les physiciens afin d'aboutir à des conclusions générales ou lois. Le deuxième nous amène à l'élaboration d'un coté moléculaire. Enfin, la rencontre de ces deux études ensemble fournir sur le développement des équations d'état pour le calcul des propriétés thermodynamiques des gaz.

Nous aborderons dans ce chapitre sur le développement des équations d'état pour le calcul des propriétés thermodynamiques des gaz et leur comportement. En commençant par l'équation d'état des gaz parfaits, ses applications puis les premières modélisations des équations d'état et leur développement, Ainsi que en concentre sur les changements des approches moléculaires entre le modèle des gaz parfaits, et les modèles des gaz réels. On procédera aussi dans ce chapitre spécifiquement à l'étude (détermination des coefficients de covolume et de l'attraction moléculaire) et l'application du modèle de Berthelot pour les gaz réels.

#### 1.1 Gaz parfait :

Le concept de gaz parfait, appelé gaz idéal, à été établie pour la première fois par le physicien français Victor Regnault en 1845. Elle se rapportait alors à la synthèse de diverses lois sur le comportement des gaz.

#### 1.2 Les lois de gaz parfait :

Les gaz parfaits obéissent aux lois suivantes :

#### 1.2.1 Loi de Boyle Mariotte :

A été établie par les physiciens Boyle et Mariotte en 1662[4], Les expérience montré qu'à température constante, pour une quantité de matière donné de gaz, le produit de la pression par le volume de ce gaz ne varie par :

$$P.V = Cste \tag{1.1}$$

#### 1.2.2 Loi de Charles :

A été établie par le physicien jacques Charles en 1787[], les expériences montre qu'à le volume d'une quantité limitée de gaz est directement

Proportionnel à la température mesurée en kelvin lorsque la quantité de gaz et la pression sont constantes :

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$
(1.2)

#### 1.2.3 Loi de Gay –Lussac :

A été établie par le physicien gay – Lussac en 1802[5], les expériences montre qu'à volume constant, la pression d'un <u>gaz parfait</u> est directement proportionnelle à la température absolue (exprimée en K), soit, pour une même quantité de gaz dans deux états 1 et 2 au même volume : pour une même quantité de gaz dans deux états 1 et 2 au même :

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$
(1.3)

En prenant comme référence un gaz à la température  $T_0$  et sous la pression,  $P_0$  on peut également écrire, si la température est exprimée par exemple en °C :

$$P = P_1 \cdot [1 + \beta \cdot (T - T_0)]$$
(1.4)

Où  $\beta$  Dépend de  $T_0$ .

On constate expérimentalement que le coefficient  $\beta$ , pour des volumes de plus en plus grands, tend vers une valeur universelle, indépendante du gaz et environ égale à

0,003661 = 1/273,15, lorsque les températures sont exprimées en <u>degré Celsius</u>.



Figure 1 : Représentation graphique de la loi de Gay-Lussac : à volume V constant, la pression P est proportionnelle à la température.

## 1.2.4 Loi d'Avogadro :

A été établie par le physicien Amedeo Avogadro en 1811[6], spécifie que des volumes égaux de <u>gaz parfaits</u> différents, aux mêmes conditions de <u>température</u> et de <u>pression</u>, contiennent le même nombre de <u>molécules</u>.

Cette loi peut également s'exprimer ainsi : à pression et température donnée, tous les <u>gaz parfaits</u> ont le même volume molaire. Soit, pour deux gaz 1 et 2 quelconques aux mêmes pressions et température :

$$\frac{V_1}{n_1} = \frac{V_2}{n_2}$$
(1.5)

 $O\dot{u}^{n_1}$ ,  $n_2^{n_2}$ , sont le nombre de moles des gaz 1 et 2 respectivement et  $V_1$ ,  $V_2$  leur volume.

#### 1.2.5 Equation d'état d'un gaz parfait :

Les variables d'état ; pression ; volume ; température ; et la quantité de matière ; d'un gaz parfait en équilibre et ay repos sont liées par une relation appelée équation d'état des gaz parfaits [7] :

$$P \cdot V = R \cdot n \cdot T \tag{1.6}$$

Avec :

la relation importante  $P \cdot V = R \cdot n \cdot T$  peut être écrite sous une autre forme qui est quelquefois plus intéressante, en remarquant que le nombre de moles n est donné par la masse m de l'échantillon divisée par la masse molaire M, soit m/M et que la masse volumique d s'exprime par m/V. Ainsi la relation  $P \cdot V = R \cdot n \cdot T$  devient d'abord :

$$P = \rho RT \tag{1.7}$$

#### 1.3 Limitation de l'équation d'état d'un gaz parfait :

Il a fallu 150 ans pour que cette équation d'état dite des gaz parfaits prenne sa forme définitive, telle qu'énoncée par Clapeyron en 1834[8].Mais il ne faudra pas longtemps pour trouver les limites de l'équation des gaz parfait, qui indique qu'une masse non-nulle de gaz parfait occupe un volume nul à température nulle. Strictement parlant, le gaz parfait ne peut exister, le modèle mathématique ci-haut perd son sens à très basse température puisqu'il ne tient pas compte du volume des molécules lui-même. Leur influence est d'autant plus importante quand les molécules sont structurellement complexes et lentes [9].

Le comportement réel des molécules lorsqu'elles sont proches les unes des autres est en réalité très complexe, ainsi, pas seulement le volume des molécules qui a une influence mais aussi les forces d'attraction entre ces molécules y jouent un rôle déterminant. Ces conditions permettent de s'assurer que les forces d'attraction entre les molécules gardent un rôle précieux dans le comportement global du gaz. Elles doivent être respectées pour l'air dans la grande majorité de ses applications spécialement en régime supersonique.

Pour cela l'équation (1.5). Est satisfaisante pour des gaz à basse pression (en pratique jusqu'à quelques atmosphères), mais reste en général inadéquate pour la représentation des systèmes à moyennes et hautes pressions.

Plusieurs autres équations d'état peuvent être utilisées pour correspondre aux gaz réels sur une plus grande plage de propriétés. Ces équations prennent en compte l'interaction moléculaire et l'effet de covolume ignorer par le modèle des gaz parfaits.

#### 1.4 Le comportement de gaz parfait :

La plus part des gaz se comportement comme des gaz parfaits aux faibles pressions ; ce sera le cas de tous les gaz que nous considérerons dans la suite de ce programme.

Ce comportement des gaz aux faibles pressions peut s'expliquer en considérant qu'à température constant ; plus le volume occupé par une quantité de matière de gaz donnée augmente plus la pression de ce gaz diminue ; il s'ensuit deux conséquences : aux faibles pressions :

Les distances entre les molécules du gaz devenant très grand ; les interactions entre ces molécules deviennent quasi négligeables.

Le volume de chaque molécule devient négligeable devant le volume occupé par le gaz.

### 1.5 Gaz réel :

Un gaz réel, en physique, qualifie un gaz qui se trouve dans une condition qui n'est plus décrite de façon satisfaisante par le modèle du gaz parfait. Pour décrire correctement le comportement du gaz réel, il est nécessaire de rajouter des termes correctifs au modèle du gaz parfait, afin de tenir compte par exemple des interactions entre particules ou encore du volume non négligeable des molécules.

### 1.6 Équation d'état des gaz réels :

Les fluides réels regroupent les liquides ainsi que les gaz aux pressions suffisamment élevées pour que leur comportement s'écarte notablement de celui du gaz parfait. La différence essentielle entre les fluides réels et le gaz parfait est que l'on ne peut plus négliger les interactions entre les particules du fluide [10].

Concernant ces interactions, on retiendra seulement :

Qu'elles sont généralement attractives à grande distance.

Qu'elles sont répulsives à courte distance (les particules ne s'interpénètrent pas).

L'équation (1.1) introduit deux corrections dans la loi des gaz parfaits :

Les molécules ont un volume non nul et incompressible (volume exclu).

Il existe des forces d'attraction entre les molécules.

Introduisant les valeurs corrigées du volume et de la pression dans l'équation des gaz parfaits, van der Waals aboutit à l'équation :

$$(p+p_i)(v-nb) = nRT \tag{1.8}$$

La pression interne est fonction croissante de la densité du gaz. Une analyse détaillée montre que:

$$p_i = \frac{an^2}{v^2} \tag{1.9}$$

Les valeurs de a et b varient selon la nature du gaz étudié.

#### 1.7 Covolume :

Volume minimum que peut occuper un gaz sous une pression théoriquement infinie, le covolume était introduit en faisant appeler à la théorie cinétique des gaz, ce qui permettait de montrer qu'il doit représenter le quadruple du volume réels des molécules [11].



Figure1. 2 : représentation l'effet de covolume.

### 1.8 Modèle du gaz réel :

La force d'interaction n'est pas négligeable car les molécules interagissent entre elles selon leur taille.

Chaque gaz réel a sa propre température critique, et à une température plus basses, il est liquéfiable.

À des pressions plus basses le gaz réel à tendance à être de gaz parfait.

À haute pression, le volume molaire de gaz réel augmente, le volume de gaz parfait est inferieur à celui-ci et les molécules sont proches les unes des autres.

# CHAPITRE 1 : GENERALITE SUR LES GAZ REELS

Lorsque la température diminue, il y a un effet significatif entre les molécules car leur énergie cinétique à diminue, et donc elles sont incapables de faire aux facteurs gravitationnels.

## 1.9 Les équations des gaz réels :

On à les équations suivants :

## 1.9.1 L'équation de Van Der Waals :

Le thermodynamicien van der waals à établi en 1870 représentation du comportement des gaz par l'équation d'état [12] :

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT$$
(1.10)

Ou bien:

$$P(T,v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{v^2}$$

$$(1.11)$$

## **1.9.2** L'équation de Clausius :

S'exprime par [13]:

$$\left(P + \frac{a}{T(v+c)^2}\right)(v-b) = RT$$
(1.12)

Ou bien

$$P(T,v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{T(v+c)^{2}}$$
 (1.13)

Et :

$$P(T,\rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a \rho^2}{T(1+c \rho)^2}$$
(1.14)

Avec :

$$a = \frac{27 R^2 T_c^3}{64 P_c}$$

32

$$b = V_c - \frac{RT_c}{4P_c}$$
$$c = \frac{3}{8} \frac{RT_c}{P_c} - V_c$$

Cette équation constitue une amélioration de l'équation de VAN DER WAALS. Elle donne une approximation assez bonne dans le domaine correspondant à : v > 1 vc, P < 4Pc, T < 2Tc.

Mauvaise approximation dans le domaine des gaz à pression et température élevées et dans le domaine des liquides.

## 1.9.3 L'équation de Dieterici :

S'exprime par [13]:

$$P(T,v) = \frac{RT}{(v-b)} e^{\frac{-a}{RTv}}$$
(1.15)

Et :

$$P(T,\rho) = \frac{\rho R T}{(1-\rho b)} e^{\frac{-a\rho}{RT}}$$
(1.16)

Avec :

$$a = P_c V_c^2 e^2$$
$$b = \frac{V_c}{2}$$
$$R = \frac{P_c e^2 V_c}{2T_c}$$

## 1.9.4 Equation de Redlich-Kwong (1949) :

S'exprime par:

$$\left(v-b\right)\left[P+\frac{a}{\sqrt{T} v(v-b)}\right] = R T$$
(1.17)

Donc :
$$P(T,v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{\sqrt{T}v(v-b)}$$
(1.18)

Et:

$$P(T,\rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a \rho^2}{\sqrt{T} (1+\rho b)}$$
(1.19)

Avec :

$$a = \frac{0.42748 R^2 T_c^{2.5}}{P_c}$$
$$b = \frac{0.08662 R T_c}{P_c}$$

Basée sur des considérations théoriques et pratiques. Fournit une bonne approximation pour les températures T>Tc

Dans les domaines des liquides et du gaz à masse volumique élevée, les résultats quoique moins bons sont satisfaisants.

#### 1.9.5 Equation de Berttie-Bridgeman (1928)[13]:

S'exprime par:

$$P(T,v) = \frac{RT}{v^2} \left( 1 - \frac{c}{vT^3} \right) \left( v + B_0 - \frac{bB_0}{v} \right) - \frac{A_0}{v^2} \left( 1 - \frac{a}{v} \right)$$
(1.20)

Et :

$$P(T,\rho) = RT\rho + \left(B_0RT - A_0 - \frac{Rc}{T^2}\right)\rho^2 - \left(-B_0bRT + A_0a - \frac{RB_0c}{T^2}\right)\rho^3 + \frac{RB_0bc}{T^2}\rho^4$$
(1.21)

Les constantes a, b, c, a0, et B0 sont déterminées empiriquement à partir des données expérimentales P, v, T

- En général, elle peut être appliquée pour v >2vc et T >1.5 Tc
- Elle est meilleure que les équations de VAN DER WAALS et CLAUSIUS.

- Inapplicable dans la région située au voisinage des points critiques.

### 1.9.6 L'équation de Berthelot [13] :

L'équation de Berthelot elle s'écrit:

$$\left(P + \frac{a}{Tv^2}\right)(v-b) = RT$$
(1.22)

Ou bien :

$$P(T,v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{Tv^2}$$
(1.23)

Connaissons:  $v = \frac{1}{\rho}$ 

$$P(T,\rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a \rho^2}{T}$$
(1.24)

Avec:

$$a = 3 P_c V_c^2$$
$$b = \frac{V_c}{3}$$

## CHAPITRE 2

## LES COEFFICIENTS CALORIMETRIQUES ET THERMO-ELASTIQUES POUR LES GAZ

## Introduction

L'étude des propriétés thermodynamiques des gaz parfaits est fondamentale pour comprendre le comportement des systèmes gazeux dans diverses conditions. Parmi les grandeurs physiques utilisées pour caractérisé ces gaz, les coefficients calorimétriques et thermo élastiques jouent un rôle cruial.ils permettent d'évaluer la manière dont un gaz parfait réagit aux variations de température, de pression et de volume, fournissant ainsi des informations précieuses sur les processus thermiques qui s'y déroulent.

Les gaz parfaits ,bien que simplifies par rapport aux gaz réels, offrent un modèle mathématique précieux pour analyser les comportements thermodynamiques ,les coefficients calorimétriques et thermo élastiques fournissent des mesures quantitatives de ces comportements en relation avec les échanges de chaleur, les changements de volume des gaz parfait.

En résumé, les coefficients calorimétriques et thermo élastiques sont des grandeurs essentielles pour étudier les propriétés thermodynamiques des gaz parfaits .ils permettent de quantifier les changement de chaleurs, de température et de volume des gaz parfaits , fournissant ainsi des outils précieux pour modéliser et comprendre les processus thermiques impliquant ces gaz idéalisés.

#### 2.1 Notations :

Lorsqu'elles existent, les notations recommandées par le <u>Green Book</u> de l'Union internationale de chimie pure et appliquée (IUPAC)[14]sont indiquées entre parenthèses. Par exemple les notations proposées pour le coefficient de dilatation isobare sont signalées  $(a, a_v, \gamma)$ 

Ces préconisations sont dans la mesure du possible respectées dans cet article, sauf lorsqu'un autre usage prévaut ; par exemple la compressibilité isotherme est notée X T selon un usage courant dans la littérature, alors que préconise  $K_T$ .

Toutes ces définitions supposent des transformations à composition constante, c'est-àdire l'absence de réaction chimique, d'apport ou d'extraction de matière. Ces transformations ayant lieu à quantité de matière constante n, ceci ne sera pas reporté dans les notations afin

d'alléger les expressions mathématiques. Il sera par exemple  $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p}$  plutôt que  $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,n}$ .De même, les termes liés aux variations des quantités de matière ne seront pas reportés dans les différentielles : par exemple la différentielle de l'énergie interne [15] :

$$dU = -PdV + TdS + \sum_{i=2}^{N} \mu_i dn_i$$
(2.1)

Sera simplifiée en : 
$$dU = -PdV + TdS$$
 (2.2)

Ces transformations ont également lieu en l'absence de changement de phase, le corps pur ou le mélange subissant la transformation étant supposé en une seule phase. Enfin, les mélanges sont supposés homogènes.

### 2.2 Les Coefficients calorimétriques :

Dans une transformation réversible, la chaleur Q absorbée par un corps pur ou un mélange de composition constante peut être exprimée à l'aide de six coefficients calorimétriques selon les variables suivies lors de la transformation[16][17]:

Coefficients calorimétriques :

$$\partial Q = TdS \tag{2.3}$$

$$\partial Q = CvdT + ldV \tag{2.4}$$

$$\partial Q = CpdT + hdP \tag{2.5}$$

$$\delta Q = \mu dV + \lambda dP \tag{2.6}$$

Capacité thermique isochore est donne par :

$$C_{\nu} = T(\frac{\partial S}{\partial \Gamma})_{\nu}$$
(2.7)

Elle représente la chaleur absorbée par le corps lors d'une variation de température à volume constant :

Aussi ; on a le Coefficient de dilatation isotherme donné par[18]:

$$C_p = T(\frac{\partial S}{\partial T})_p \tag{2.8}$$

Il représente la chaleur absorbée par le corps lors d'une variation de volume à température constante.

Le Coefficient de compression isotherme est donné par [19]:

$$h = T\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T \tag{2.9}$$

Il représente la chaleur absorbée par le corps lors d'une variation de pression à température constante.

Un coefficient sans nom attribué, grandeur intensive exprimée en pascals, Pa :

$$\mu = T(\frac{\partial S}{\partial V})p \tag{2.10}$$

Il représente la chaleur absorbée par le corps lors d'une variation de volume à pression constante.

Le coefficient de dilatation linéaire est donne par[20] :

$$\lambda = T(\frac{\partial S}{\partial V})_{v}$$
(2.11)

Il représente la chaleur absorbée par le corps lors d'une variation de pression à volume constant.

## 2.3 Les Coefficients thermo élastiques :

Les trois coefficients thermo élastiques servent à exprimer la variation de volume ou de pression d'un corps pur ou d'un mélange à composition constante lors d'une transformation réversible[21] :

Coefficients thermo élastiques est donne par [22] [23]:

$$\frac{dV}{V} = -X_{T}dP + \alpha dT$$
(2.12)

$$\frac{dP}{P} = -\frac{1}{PX_{\tau}} + \beta dT \tag{2.13}$$

Premièrement, on à la formule de Coefficient de dilatation isobare donné par :

Coefficient de dilatation isobare écrit comme suivant [24] :

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{2.14}$$

Il représente la variation relative de volume due à une variation de température à pression constante.

Deuxièmement, on à le Coefficient de compression isochore donné par la formule suivant :

Coefficient de compression isochore est donne par [25]:

$$\beta = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\nu} \tag{2.15}$$

Il représente la variation relative de pression due à une variation de température à volume constant.

Enfin, Le <u>coefficient de compressibilité isotherme</u>, grandeur intensive exprimée en  $Pa^{-1}$  est donné par :

Coefficient de compressibilité isotherme s'exprime par [26]:

$$X_{\tau} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{\tau} \tag{2.16}$$

Il représente la variation relative de volume due à une variation de pression à température constante.

### 2.4 Les Autres coefficients :

Coefficient de compressibilité isentropique :

On définit le coefficient de <u>compressibilité isentropique</u>, noté  $X_s$  par :

Coefficient de compressibilité isentropique il s'écrit [26] :

$$X_s = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_s \tag{2.17}$$

Ce coefficient est une grandeur <u>intensive</u> exprimée en  $Pa^{-1}$ . Il représente la variation relative de volume due à une variation de pression à entropie constante.

La différentielle du volume pouvant s'écrire :

$$dV = \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right) s dP + \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right) p dS$$
(2.18)

En considérant les définitions de Xs et  $\mu$  on obtient la relation :

$$dV = -VXsdP + \frac{T}{\mu}dS$$
(2.19)

On peut écrire pour l'entropie :

$$TdS = \mu dV + \mu VXsdP = \mu dV + \lambda dP$$
(2.20)

On a donc la relation :

$$\lambda = \mu V X s \tag{2.21}$$

## Module d'élasticité isostatique :

La différentielle de la pression peut être écrite sous la forme [27] :

$$dP = -k\frac{dV}{V} + P.\beta dT$$
(2.22)

Tel que le module d'élasticité isostatique donne par [27] :

Module d'élasticité isostatique donne par :

$$K = -V(\frac{\partial P}{\partial V})_{\mathsf{T}} \tag{2.23}$$

Ce coefficient est une grandeur intensive exprimée en pascals, Pa.

Le module d'élasticité est l'inverse du coefficient de compressibilité isotherme donne par :

$$K = \frac{1}{X_{\tau}} \tag{2.24}$$

Facteur de compressibilité :

Le <u>facteur de compressibilité</u> d'un fluide, noté Z est défini par :

$$Z = \frac{PV}{nRT}$$
(2.25)

Le facteur de compressibilité est une grandeur <u>intensiveadimensionnelle</u> représentant le rapport  $Z = V \setminus V$  du volume V d'un fluide réel au volume du <u>gaz parfait</u> correspondant aux mêmes pression, température et composition :

 $V = nRT \setminus P$  selon la <u>loi des gaz parfaits</u>. Le facteur de compressibilité vaut donc 1 pour un gaz parfait, quelles que soient sa pression, sa température et sa composition.

## 2.5 Coefficient de Joule-Gay-Lussac[28] :

En substituant :

$$dU = C_v dT + (l - P)dV \tag{2.26}$$

On obtient:

$$dU = C_{v}dT + (l - P)dV \tag{2.27}$$

On a la relation[28] :

Capacité thermique isochore :

$$Cv = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{v} \tag{2.28}$$

À partir de la différentielle de U on peut écrire :

$$dT = -\frac{1-P}{Cv}dV + \frac{1}{Cv}dU$$
(2.29)

Alors :

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U dV + \left(\frac{\partial T}{\partial U}\right)_V dU$$
(2.30)

On a :

$$l - P = (\beta T - I)P \tag{2.31}$$

On définit un nouveau coefficient appelé coefficient de Joule-Gay-Lussac [28]:

Coefficient de Joule-Gay-Lussac s'exprime par:

$$\mu_{JGL} = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U \tag{2.32}$$

$$\mu_{JGL} = -\frac{(\beta T - 1)P}{C_{\nu}}$$
(2.33)

Dans une <u>détente iso énergétique</u> ce coefficient, qui s'exprime en K m<sup>-3</sup>, permet de quantifier le changement de température d'un corps en fonction de son volume. Lorsque  $\mu_{JGL} > 0$  la température augmente lorsque le volume augmente ; lorsque  $\mu_{JGL} < 0$  la température

diminue lorsque le volume augmente. Pour les <u>gaz parfaits</u>  $\beta = \frac{1}{T}$ , d'où  $\mu_{JGL} = 0$  : leur température ne varie pas dans ce genre de détente et ces gaz répondent à la <u>première loi de</u> <u>Joule</u>. La plupart des gaz réels se refroidissent dans une détente iso énergétique ( $\mu_{JGL} < 0$ ), quelle que soit la température initiale. Les exceptions connues sont l'<u>hélium</u>, l'<u>hydrogène</u> et certains <u>gaz rares</u> qui ont des plages de température et de volume dans lesquelles ils se réchauffent dans ce type de détente ( $\mu_{JGL} > 0$ ) [29].

## 2.6 Paramètre de Grüneisen:

On obtient [30] :

$$dU = (\mu - P)dV + \lambda dP \tag{2.34}$$

On a la relation :

$$\lambda = \left(\frac{\partial U}{\partial P}\right)_V \tag{2.35}$$

Le paramètre de Grüneisen est défini par [30] :

$$T = \frac{V.\alpha.K}{C_{\nu}}$$
(2.36)

$$T = \frac{\alpha.K}{\beta.C_{\nu}}$$
(2.37)

Ce paramètre est une grandeur <u>intensiveadimensionnelle</u>, de l'ordre de grandeur de quelques unités à toute température pour la majorité des solides ; il existe quelques cas de valeurs très élevées, positives ou négatives.

Avec les relations :

$$T = \frac{V.\alpha}{X_{\tau}.C_{\nu}} \tag{2.38}$$

$$T = \frac{V.P.\beta}{Cv}$$
(2.39)

$$T = \frac{V.l}{C_v.T} \tag{2.40}$$

On a :

$$T = \frac{V}{\lambda}$$
(2.41)

$$T = V(\frac{\partial P}{\partial U})_{\nu}$$
(2.42)

Aussi on a la relation :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S}\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_{T}\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V} = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S}\frac{T}{l}\frac{C_{v}}{T}$$
(2.43)

Alors:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S} \frac{T}{l} \frac{C_{v}}{T} = -1 \tag{2.44}$$

D'âpres les relations président on a :

$$\Gamma = -\frac{V}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S} \tag{2.45}$$

Donc :

$$\Gamma = -\left(\frac{\partial \ln T}{\partial \ln V}\right)_{S} \tag{2.46}$$

À partir de la définition de  $\Gamma$ , et la <u>relation de Reech</u> permettent d'écrire la relation :

$$\Gamma = \frac{V.a}{X_s.C_p} \tag{2.47}$$

Par laquelle le coefficient de Grüneisen est déterminé expérimentalement.

L'une des formes de la <u>relation de Mayer générale</u> donne:

$$C_p - C_v = T.V.a.\beta \tag{2.48}$$

$$C_p - C_v = T.V.a \frac{a}{X_{\tau}}$$
(2.49)

En divisant par  $C_{\nu}$  et en introduisant le <u>coefficient de Laplace</u>

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v}$$
(2.50)

On obtient :

$$\gamma - 1 = T.a.\Gamma \tag{2.51}$$

Pour un gaz parfait quelconque :

$$a = \frac{1}{T}$$
(2.52)

Par conséquent, pour tout gaz parfait :

$$\Gamma = \gamma - 1 \tag{2.53}$$

## 2.7 Coefficient de Joule-Thomson:

En substituant [31] :

$$TdS = C_p dT + hdP \tag{2.54}$$

On obtient :

$$dH = C_p dT + (h+V)dP$$
(2.55)

On a la relation :

Capacité thermique isobare donne par :

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p \tag{2.56}$$

À partir de la différentielle de H on peut écrire :

$$dT = -\frac{h+V}{Cp}dP + \frac{1}{Cp}dH$$
(2.57)

Alors :

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)dP + \left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)dH$$
(2.58)

On a:

$$h + V = -(a.T - 1)V$$
(2.59)

#### On définit un nouveau coefficient appelé coefficient de Joule-Thomson :

Coefficient de Joule-Thomson donne par:

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_{H}$$

$$\mu_{JT} = \frac{(aT - 1)V}{C_{p}}$$
(2.60)
(2.61)

Dans une <u>détente isenthalpique</u> ce coefficient, qui s'exprime en K Pa<sup>-1</sup>, permet de quantifier l'<u>effet Joule-Thomson</u>. Lorsque  $\mu_{JT} > 0$  la température diminue lorsque la pression diminue ; lorsque  $\mu_{JT} < 0$  la température augmente lorsque la pression diminue. Pour les <u>gaz parfaits</u>  $a = \frac{1}{T}$ , d'où  $\mu_{JT} = 0$  : leur température ne varie pas dans ce genre de détente et ces gaz répondent à la <u>deuxième loi de Joule</u>. Pour les gaz réels aux hautes températures  $\mu_{JT} < 0$ , quelle que soit la pression. Pour des températures plus basses il existe, pour la plupart des gaz réels, des couples pression-température auxquels  $T = \frac{1}{a}$  : le coefficient de Joule-Thomson s'y annule et change de signe, aux basses pressions  $\mu_{JT} > 0$ , aux hautes pressions  $\mu_{JT} < 0$ .

#### 2.8 Relations entre les coefficients:

En considérant la relation :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V}\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{P}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{T} = -1$$
(2.62)

Après réarrangement, à partir des définitions des coefficients, on a la relation[31] :

$$a = P.\beta.X_{\tau} \tag{2.63}$$

Rappelons la relation (2.22):

$$\lambda = \mu . V . X_s \tag{2.22}$$

En application du <u>théorème de Schwarz</u>, les relations fondamentales (2.148) et (2.147) donnent[32]:

$$P.\beta = \frac{1}{T} \tag{2.64}$$

Les relations fondamentales (2.148) et (2.149) donnent[54] :

$$Va = -\frac{h}{T} \tag{2.65}$$

Les relations fondamentales (2.150) et (2.151) donnent[32] :

$$\frac{T}{\lambda} = \frac{1}{C_{\nu}}$$
(2.66)

Et enfin les relations fondamentales (2.151) et (2.152) donnent[33] :

$$\frac{T}{\mu} = -\frac{h}{C_p} \tag{2.67}$$

## 2.8.1 Relations de Clapeyron :

Deuxième

la définition de  $\beta$  permettent d'établir la première relation de Clapeyron [34] :

Première relation de Clapeyron : 
$$l = T(\frac{\partial P}{\partial T})_V$$
(2.68)

la définition de *a* permettent d'établir la deuxième relation de Clapeyron:

relation de Clapeyron : 
$$h = -T(\frac{\partial V}{\partial T})_p$$
(2.69)

Ces deux relations, appelées collectivement relations de Clapeyron, ne doivent pas être confondues avec la relation de Clapeyron, également appelée <u>formule de Clapeyron</u>, exprimant l'évolution de la pression de <u>changement d'état</u> d'un corps pur en fonction de la température.

En considérant respectivement les définitions de a et  $\beta$  on obtient :

$$C_p - C_v = l.V.a \tag{2.70}$$

$$C_p - C_v = -h.P.\beta \tag{2.71}$$

on obtient dans les deux cas :

$$C_p - C_v = -l.\frac{h}{T} \tag{2.72}$$

$$C_p - C_v = T.V.\alpha.P.\beta$$
(2.73)

En considérant les relations de Clapeyron ou les définitions de a et  $\beta$  on obtient la relation de Mayer générale :

Relation de Mayer générale : 
$$C_p - C_v = T(\frac{\partial V}{\partial T})_P (\frac{\partial P}{\partial T})_V$$
(2.74)

On obtient également :

$$C_{p} - C_{v} = T.V.X_{\tau}.(P.\beta)^{2}$$

$$(2.75)$$

$$C_{p} - C_{v} = -T\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{T} \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V}$$
(2.76)

## 2.8.2 Relation de Reech :

On a :

$$\frac{C_{v}T}{l} = -\frac{C_{p}T}{h}V.X_{s}$$
(2.77)

On a aussi :

$$\frac{C_v}{P.\beta} = \frac{C_p}{\alpha} \cdot X_s \tag{2.78}$$

La définition du coefficient de Laplace on obtient finalement la relation de Reech :

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \tag{2.79}$$

$$\gamma = \frac{X_{\tau}}{X_s} \tag{2.80}$$

## 2.9 Variation isotherme des capacités thermiques :

## 2.9.1 Variation de la capacité thermique isochore :

La différentielle de l'énergie interne U en fonction des coefficients calorimétriques et à composition constante s'écrit :

$$dU = C_{\nu}dT + (l - P)dV \tag{2.81}$$

Puisque la différentielle de Uest exacte, le<u>théorème de Schwarz</u> permet d'écrire :

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial P \partial T}\right) = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial T \partial P}\right)$$
(2.82)

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial (h+V)}{\partial T}\right)$$
(2.83)

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p + \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{2.84}$$

Par la première relation de Clapeyron on a :

$$h = -T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{2.85}$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_{p} = -\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_{p} - T\left(\frac{\partial^{2} V}{\partial T^{2}}\right)_{p}$$
(2.86)

On a la relation:

Variation isotherme de la capacité thermique isochore :

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial P}\right)_p = -T\left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p \tag{2.87}$$

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial P}\right)_p = -T\left(\frac{\partial Va}{\partial T}\right)_p \tag{2.88}$$

## 2.9.2 Variation de la capacité thermique isobare :

La différentielle de l'enthalpie H en fonction des coefficients calorimétriques et à composition constante s'écrit :

$$dH = C_p dT + (h+V)dP$$
(2.89)

Puisque la différentielle de H est exacte, le théorème de Schwarz permet d'écrire :

$$\left(\frac{\partial^2 H}{\partial P \partial T}\right) = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial T \partial P}\right)$$
(2.90)

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial (h+V)}{\partial T}\right)_P \tag{2.91}$$

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial C_p}{\partial T}\right)_P + \left(\frac{\partial C_p}{\partial T}\right)_P$$
(2.92)

Par la deuxième relation de Clapeyron on a :

$$h = -T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right) \tag{2.93}$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_{p} = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p} - T\left(\frac{\partial^{2} V}{\partial T^{2}}\right)_{p}$$
(2.94)

On a la relation<sup>±</sup>

Variation isotherme de la capacité thermique isobare :

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p - T\left(\frac{\partial^2 V a}{\partial T}\right)_p$$
(2.95)

## 2.10 Application aux gaz parfaits :

## 2.10.1 Coefficients calorimétriques et thermo élastiques :

Un gaz parfait a pour équation d'état :

$$P.V = n..R.T \tag{2.96}$$

Pour un gaz parfait on a donc :

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,n} = \left(\frac{\partial}{\partial T}\frac{nRT}{P}\right)_{p,n}$$
(2.97)

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,n} = \frac{n.R}{P}$$
(2.98)

Étant donné la définition du coefficient a:

$$a = \frac{1}{V} \frac{n.R}{P}$$
(2.99)

On obtient :

Coefficient de dilatation isobare : 
$$a = \frac{1}{T}$$
 (2.100)

Étant donné la deuxième relation de Clapeyron:

$$h = -T\frac{n.R}{P} \tag{2.101}$$

On obtient :

Coefficient de compression isotherme :

$$h = -V \tag{2.102}$$

Pour un gaz parfait on a également [34] :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,n} = \left(\frac{\partial}{\partial T}\frac{nRT}{V}\right)_{V,n} = \frac{nR}{V}$$
(2.103)

Étant donné la définition du coefficient  $\beta$  :

$$\beta = \frac{1}{P} \frac{n.R}{V} \tag{2.104}$$

On obtient:

## Coefficient de compression isochore :

$$\beta = \frac{1}{T} \tag{2.105}$$

Étant donné la première relation de Clapeyron:

$$l = T \frac{n.R}{V}$$
(2.106)

On obtient:

Coefficient de dilatation isotherme :

$$l = P \tag{2.107}$$

Pour un gaz parfait on a enfin :

$$\left(\frac{\partial}{\partial P}\frac{n.R.T}{P}\right)_{T,n} = -\frac{n.R.T}{P^2}$$
(2.108)

Étant donné la définition du coefficient  $X_{\tau}$  :

$$X_{\tau} = -\frac{1}{P} \tag{2.109}$$

## On obtient [34]:

Coefficient de compressibilité isotherme :

$$X_{\tau} = -\frac{1}{P} \tag{2.110}$$

On obtient :

$$\mu = \frac{Cp \ .T}{V} \tag{2.111}$$

$$\lambda = \frac{C_v \cdot T}{P}$$
(2.112)

## 2.11 Les Lois de Joule

La <u>différentielle</u> de l'<u>énergie interne</u>U en fonction des coefficients calorimétriques s'écrivant :

$$dU = C_v dT + (l - P)dV$$
(2.113)

Et puisque pour un gaz parfait :

$$l = P \tag{2.107}$$

On obtient, pour un gaz parfait :

$$dU = C_{v}dT \tag{2.114}$$

Soit la première loi de Joule, ou loi de Joule et Gay-Lussac : Première loi de Joule : « L'énergie interne d'un gaz parfait ne dépend que de la température. »

Pour un gaz parfait  $C_v$  ne dépend que de la température.

Enfin, puisque  $\beta = \frac{1}{T}$ , le coefficient de Joule-Gay-Lussac d'un gaz parfait vaut :

$$\mu_{JGL} = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U \tag{2.115}$$

$$\mu_{JGL} = -\frac{(\beta T - I)P}{C_{v}}$$
(2.116)

$$\mu_{JGL} = 0 \tag{2.117}$$

Dans une détente iso énergétique la température d'un gaz parfait ne change pas.

Deuxième loi de Joule, ou loi de Joule-Thomson :

La différentielle de l'<u>enthalpie H en fonction des coefficients calorimétriques s'écrivant :</u>

$$dH = C_p dT + (h+V)dP$$
(2.118)

Et puisque pour un gaz parfait :

$$h = -V \tag{2.119}$$

On obtient, pour un gaz parfait :

$$dH = C_p \, dT \tag{2.120}$$

Soit la deuxième loi de Joule, ou loi de Joule-Thomson :

Deuxième loi de Joule : « L'enthalpie d'un gaz parfait ne dépend que de la température. »

Pour un gaz parfait Cp ne dépend que de la température.

Enfin, puisque  $a = \frac{1}{T}$ , le coefficient de Joule-Thomson d'un gaz parfait vaut :

$$\mu_{JT} = \frac{(a \ T - 1)V}{Cp}$$
(2.121)

$$\mu_{JT} = 0 \tag{2.122}$$

$$C_p - C_v = TV \ a \ P\beta \tag{2.123}$$

$$C_p - C_v = TV \frac{1}{T}P \tag{2.124}$$

$$C_p - C_v = \frac{PV}{T}$$
(2.125)

Dans une <u>détente isenthalpique</u> la température d'un gaz parfait ne change pas.

## 2.12 Les Relations entre les coefficients :

Les coefficients calorimétriques et thermo élastiques peuvent être exprimés comme des <u>dérivées partielles secondes</u> des <u>potentiels thermodynamiquesénergie interne</u><sup>U</sup>, <u>enthalpie</u> H, <u>énergie libre</u><sup>F</sup> et <u>enthalpie libre</u><sup>G</sup> par rapport à leurs variables naturelles <u>volume</u><sup>V</sup> <u>entropie</u><sup>S</sup>, <u>pression</u><sup>P</sup> et <u>température</u><sup>T</sup> : respectivement :

En substituant

$$TdS = \mu dV + \lambda dP \tag{2.126}$$

On obtient :

$$dH = \mu dV + (\lambda + V)dP \tag{2.127}$$

On a la relation :

$$\mu = \left(\frac{\partial H}{\partial V}\right)_p \tag{2.128}$$

## 2.12.1 L'énergie libre :

La différentielle de l'<u>énergie libre</u> F dans ses variables naturelles, si le processus estréversible et si le travail n'est dû qu'aux forces de pression, à composition constante s'écrit:

$$dF = -PdV - SdT \tag{2.129}$$

En substituant :

$$dV = -VX_{\tau}dP + VadT \tag{2.130}$$

On obtient :

$$dF = PVX_{\tau}dP + (PVa - S)dT$$
(2.131)

On a la relation du coefficient de compressibilité isotherme :

$$X_{\tau} = \frac{1}{PV} \left(\frac{\partial F}{\partial P}\right)_{T} \tag{2.132}$$

La pression n'est pas une variable naturelle de F = F(V, T).

## 2.12.2 L'enthalpie libre :

La différentielle de l'<u>enthalpie libre</u>  $^{G}$  dans ses variables naturelles, si le processus estréversible et si le travail n'est dû qu'aux forces de pression, à composition constante s'écrit :

$$dG = VdP - SdT \tag{2.133}$$

En substituant :

$$dP = -\frac{1}{VX_{\tau}}dV + P\beta dT$$
(2.134)

On obtient :

$$dG = -\frac{1}{X_{\tau}}dV + (V\beta a - S)dT$$
(2.135)

On a la relation :

$$X_{\tau} = -\frac{1}{(\frac{\partial G}{\partial V})_{T}}$$
Coefficient de compressibilité isotherme : (2.136)

Ces relations fondamentales sont [35]:

$$C_{\nu} = -T(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2})_{\nu}$$
(2.137)

$$C_{V} = T \frac{1}{\left(\frac{\partial^{2} U}{\partial S^{2}}\right)_{v}}$$
(2.138)

$$Cp = -T(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2})_p \tag{2.139}$$

$$Cp = -T(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2})_p \tag{2.140}$$

$$X_{\tau} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right)_{\tau}$$
(2.141)

$$X_{\tau} = \frac{1}{V} \frac{1}{\left(\frac{\partial^2 U}{\partial^2 U}\right)}$$

$$\left(\frac{\partial V^2}{\partial V^2}\right)_{\mathrm{T}}$$
 (2.142)

$$X_{s} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^{2} H}{\partial P^{2}}\right)_{s}$$
(2.143)

$$X_{s} = \frac{1}{V} \frac{1}{\left(\frac{\partial^{2} U}{\partial V^{2}}\right)_{s}}$$
(2.144)

$$\beta = -\frac{1}{P} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} \right) \tag{2.145}$$

$$l = -T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T}\right) \tag{2.146}$$

$$\alpha = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P} \right) \tag{2.147}$$

$$h = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial P \partial T}\right) \tag{2.148}$$

$$\lambda = -T \frac{1}{\left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial S \partial V}\right)} \tag{2.149}$$

$$-\frac{l}{C_{v}} = \left(\frac{\partial^{2}U}{\partial V \partial S}\right)$$
(2.150)

$$\mu = T \frac{1}{\left(\frac{\partial^2 H}{\partial S \partial P}\right)}$$
(2.151)

$$\frac{h}{C_p} = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial P \partial S}\right)$$
(2.152)

#### **CHAPITRE 3**

## DEVELOPPEMENT DES COEFFICIENTS CALORIMETRIQUE ET THERMO-ELASTIQUE POUR LES GAZ REELS

## Introduction

Une large variété de problèmes dans la thermodynamique a été résolue sur l'hypothèse que l'air se comporte comme gaz parfait. Cette hypothèse est justifiée, fourni la pression et la température ambiante d'intérêt sont petites et proche de l'atmosphère. Cependant, quand l'air est soumis aux changements de l'état aux pressions et aux températures loin de conditions atmosphériques, il cesse de se conformer à la loi simple de gaz et présente d'autres propriétés non caractéristiques d'un gaz parfait. En conséquence, des procédés des fluides dans lequel l'air sous réserve de ces conditions extrêmes peut être prévu s'écarter du comportement de gaz parfait. L'objectif de ce chapitre est de développer les équations du coefficient calorimétrique et thermo élastique d'un gaz réel pour étudier les propriétés thermodynamiques des gaz réel, ces coefficients jouent un rôle clé dans la compression des changements de température à différentes conditions.

#### 3.1 Coefficients calorimétriques

Au cours d'une transformation élémentaire réversible, la quantité de chaleur  $\delta Q$  peut être s'exprimer de trois (03) façons différents, suivant le choix des variables (P, V, T) [58]

$$\delta Q = C_{v} dT + l dV \tag{3.1}$$

$$\delta Q = C_p dT + h dP \tag{3.2}$$

$$\delta Q = \lambda dP + \mu dV \tag{3.3}$$

Pour déterminé les coefficients calorimétriques faut fait les conditions suivants :

A pression constant P = cstOna donc : dP=0

Alors les équations (3.1), (3.2), et (3.3) deviennent :

$$\delta Q = C_{v} dT + l dV \tag{3.4}$$

$$\delta Q = C_p dT \tag{3.5}$$

$$\delta Q = \mu dV \tag{3.6}$$

Pour trouver la formule de coefficient de dilatation isotherme ; On mettre légalité entre les équations (3.4) et(3.5), on trouve :

$$C_{v}dT + ldV - C_{p}dT = 0 ag{3.7}$$

On obtient :

 $ldV = (C_p - C_v)dT \tag{3.8}$ 

Donc :

$$l = (C_p - C_v) (\frac{dT}{dV})_p$$
so therme : (3.9)

Le Coefficient de dilatation isotherme :

Le coefficient  $\mu$  en mettre légalité entre les équations (3.5) et (3.6), on trouve :

 $\mu dV = C_p dT_{(3.10)}$ 

On trouve :

Le coefficient sans nom attribué : 
$$\mu = C_p \left(\frac{dT}{dV}\right)_p$$
(3.11)

> A volume constant : V = cst

Donc :

$$dV = 0$$

Alors les équations (3.1), et (3.2), et (3.3) deviennent :

$$\delta Q = C_{v} dT \tag{3.12}$$

$$\delta Q = C_p dT + h dP \tag{3.13}$$

## $\delta Q = \lambda dP (3.14)$

Légalité entre les équations (3.12) et (3.13) donne le coefficient de compression isotherme:

$$h = -(C_p - C_v).(\frac{dT}{dP})_v$$
(3.15)

Pour le dernier coefficient de dilatation linéaire on mettre l'équation (3.12) égal à l'équation (3.14) on trouve :

Le coefficient de dilatation linéaire :  $\lambda = C_v \cdot (\frac{dT}{dP})_v$  (3.16)

D'autre part, les formules de Clapeyron [36] présentent ces coefficients dune manière différente :

$$l = T\left(\frac{dP}{dT}\right)_{V} (3.17)$$
$$h = -T\left(\frac{dV}{dT}\right)_{p} (3.18)$$

Les chaleurs spécifiques à pression constante, volume constant et a une température constante pour un gaz réel est donnée par [37] :

$$c_{p}(T,\rho) = c_{p(gp)} \left[ 1 + \frac{\gamma_{(gp)} - 1}{\gamma_{(gp)}} \left\{ \left( \frac{\theta}{T^{2}} \right) \frac{\theta}{\left( 1 - e^{\frac{\theta}{T}} \right)^{2}} + \frac{4\dot{a}\rho}{RT} \left[ 1 + \frac{\left( \frac{2 + b\rho}{1 - b\rho} + \frac{\dot{a}\rho}{2RT} \right)}{\left( 1 - b\rho \right)^{2}} - \frac{2\dot{a}\rho}{RT} \right] \right\} \right]$$
(3.19)

$$c_{v}(T,\rho) = c_{v_{gp}} \left\{ 1 + (\gamma_{gp} - 1) \left( \left( \frac{\theta}{T} \right)^{2} \frac{e^{\left( \frac{\theta}{T} \right)}}{\left( 1 - e^{\left( \frac{\theta}{T} \right)} \right)^{2}} + \frac{2a\rho}{RT^{2}} \right) \right\}$$
(3.20)

$$C_{T}(T,\rho) = \left(\frac{3ab^{2}\rho^{3} - 6ab\rho - RT^{3}b + 3a}{2T\rho b - Tb^{2}\rho^{2} - T}\right) (3.21)$$

Pour un gaz parfait, les coefficients calorimétriques seront simplifiés comme suit :

$$l = P (3.22)$$

$$h = -V (3.23)$$

$$\mu = \frac{\gamma}{\gamma - 1} P (3.24)$$

$$\lambda = \frac{V}{\gamma - 1} (3.25)$$

#### 3.2 Coefficients thermo-élastiques

La troisième relation de Clapeyron présente le coefficient de compression isochore  $\boldsymbol{\beta}$ 

On à les trois formules suivant :

De (3.26) on a :

 $(\frac{\partial P}{\partial T})_{V} = \beta . P \tag{3.27}$ 

 $\beta = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V} (3.26)$ 

En remplace cette équation (3.27) dans l'équation (3.17) on trouve :

$$l = T.P.\beta (3.28)$$

De [38], On à aussi :

 $\frac{\chi.\beta}{\alpha} = \frac{1}{P} (3.29)$ 

Donc :

Coefficient de dilatation isotherme : 
$$l = T \frac{\alpha}{\chi}$$
 (3.30)

Et Coefficient de dilatation isobare :

 $\alpha = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p (3.31)$ 

Coefficient de compression isotherme :

 $h = -T.V.\alpha (3.32)$ 

Dans le but de développer les relations des coefficients thermo élastique, et d'étudier l'effet de la pression pour un gaz réel (cas de l'air) en utilisant l'équation de Berthelot qui introduit les effets de taille moléculaire et de la force intermoléculaire.

L'équation de Berthelot elle s'écrit [39], [40]:

$$\left(P + \frac{a}{Tv^2}\right)(v-b) = RT$$
(3.33)

Ou bien :

$$P(T,v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{Tv^{2}}$$
(3.34)

Connaissons :  $v = \frac{1}{\rho}$ 

$$P(T,\rho) = \frac{\rho R T}{(1-\rho b)} - \frac{a \rho^2}{T}$$
(3.35)

Avec:  $a = 3 P_c V_c^2 T_c$  et  $b = \frac{V_c}{3}$ 

La différentions l'équation (3.34) à pression constante :

$$dF = \left(\frac{\partial f}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_V dT$$
(3.36)

Les dérives partielles de l'équation (3.35) deviennent :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial V}\right)_{T} = \left(-\frac{2.a}{T.V^{3}}\right)(V-b) + P + \frac{a}{T.V^{2}} (3.37)$$
$$\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_{V} = (V-b)\left(\frac{-a}{T^{2}.V^{2}}\right) (3.38)$$

Remplaçons les équations (3.37) et (3.38) dans l'équation (3.36) on obtient:

$$dF = \left[\frac{-2a}{TV^{3}}(V-b) + \frac{rT}{(V-b)}\right]dV + \left[(V-b)(\frac{-a}{T^{2}V^{2}}) - r\right]dT$$
(3.39)

Le développement des équations (3.37) et (3.38) donne :

$$dF = \frac{-2.a(V-b)^2.T + r.T^3.V^3}{T^2.V^3.(V-b)} dV$$
(3.40)

$$dF = \frac{a.V.(V-b) + T^2.V^3.(V-b).r}{T^2.V^3.(V-b)} dT$$
(3.41)

On en déduit :

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{P} = \frac{a.V.(V-b) + T^{2}.V^{3}(V-b).r}{-2.a.(V-b)^{2}.T + r.T^{3}.V^{3}}$$
(3.42)

Le coefficient de dilatation isotherme est donne par [40] :

 $\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p} (3.43)$ 

Est donc :

Le Coefficient de dilatation isotherme  $\alpha$  qui représente l'augmentation de volume (dilatation) à pression constante est devient :

$$\alpha = \frac{(V-b)\left[a+r.T^2.V^2\right]}{r.T^3.V^3 - 2.a.T.(V-b)^2}$$
(3.44)

Maintenant, différentions à présent l'équation d'état du gaz, à volume constant :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V} = \frac{r}{V - b} + \frac{a}{T^{2} \cdot V^{2}}$$
(3.45)

Sachant que Coefficient de dilatation à volume constant, $\beta$  est donne par [41]:

$$\beta = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V} (3.46)$$

Alors, le Coefficient de dilatation à volume constant  $\beta$ qui représente l'augmentation de pression à volume constante sera :

$$\beta = \frac{R.T^2.V^2 + a.(V - b)}{R.T^3.V^2 - a.T.(V - b)}$$
(3.47)

Le coefficient de compressibilité isotherme est donné par [42] :

$$x = -\frac{l}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T (3.48)$$

On rappelle la relation mathématique suivante [42]:

$$\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{T}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V}\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{P} = -1$$
(3.49)

Remplaçons les équations (3.43),(3.45) et (3.48) dans l'équation (3.49) on obtient :

$$-x.V.\beta.P\frac{1}{\propto .V} = -1$$
(3.50)

Alors, la relation entre les coefficients de compressibilité isotherme x, de dilatation isotherme  $\alpha$  et de dilatation à volume constant  $\beta$  devient :

$$x = \frac{\alpha}{\beta P}_{(3.51)}$$

Remplaçons les équations (3.44), (3.47) et (3.34) dans l'équation (3.51) on obtient :

$$x = \frac{(V-b)\left[a+T^{2}.V^{2}\right]\left[T^{2}.V^{2}(V-b)\right]}{\left[R.T^{3}.V^{3}-2.a.T.(V-b)^{2}\right]\left[R.T^{2}.V^{2}+a.(V-b)\right]}$$
(3.52)

Pour un gaz parfait, le coefficient de compressibilité isotherme x devient [43] :

$$x = \frac{1}{P}_{(3.53)}$$

On peut déduire la valeur du coefficient de compressibilité isotherme *x*, par l'annulation des paramètres a et b dans l'équation (3.52), cette dernière devient :

$$x = \frac{V}{RT} = \frac{1}{P}_{(3.54)}$$

Le Coefficient de compressibilité isentropique  $\chi_s$  est donné par [44]:

$$x_{s} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{\varrho} (3.55)$$

Pour un gaz parfait, le Coefficient de compressibilité isentropique  $x_s$  est donné par [44]:

 $x_{s} = \frac{1}{\gamma P} (3.56)$ 

Le coefficient de joule Thomson est donne par [44] :

$$\mu_{JT} = \left(\frac{dT}{dP}\right)_{H} (3.57)$$

Et :

$$\left(\frac{dT}{dP}\right)_{H} = \frac{1}{C_{p}} \left[ T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p} - V \right]$$
(3.58)

Remplaçons l'équation (3.45) dans (3.17), on trouve finalement la formule du Coefficient de dilatation isotherme l:

$$l = \left[\frac{rT}{V - b} + \frac{a}{T \cdot V^2}\right]_{(3.58)}$$

De même façon, les équations (3.18) et (3.42) donnent :

$$h = \frac{a.V.(V-b) + T^2.V^3.(V-b).r}{2.a.(V-b)^2 - r.T^2.V^3}$$
(3.59)

En thermodynamique, la relation entre le coefficient sans nom attribué  $\mu$ , Cp et h est donné par [45] :

$$\frac{T}{\mu} = -\frac{h}{C_p}$$
(3.60)

Donc  $\mu$  devient :

$$\mu = -\frac{C_p \cdot T}{h}_{(3.61)}$$

La relation entre les coefficients  $\lambda$ , Cv et *l* est donné par [46] :

$$\frac{T}{\lambda} = \frac{l}{C_{\nu}} (3.62)$$
$$\lambda = \frac{C_{\nu} \cdot T}{l} (3.62)$$

La relation entre le coefficient de la compressibilité isentropique  $X_s \lambda$ , et $\mu$  est donnée par [47]:

$$\lambda = \mu . V . X_{s}_{(3.63)}$$

Donc, le coefficient de la compressibilité isentropique  $X_s$  devient :

$$X_s = \frac{\lambda}{\mu . V} (3.64)$$

Le Module d'élasticité isostatique est donné par [48]:

$$K = -V(\frac{\partial P}{\partial V})_T (3.65)$$

Le Coefficient de Joule-Gay-Lussac est donné par [49]:

$$\mu_{JGL} = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U (3.66)$$

De la même façon, après les traitements des relations, on trouve :

$$K = \frac{1}{x_T}$$
Le Module d'élasticité isostatique: (3.67)

$$\mu_{JGL} = -\frac{(\beta . T - 1).P}{C_{\nu}}$$
Le Coefficient de Joule-Gay-Lussac: (3.68)

Le Coefficient de Joule-Thomson : 
$$\mu_{GT} = \frac{(\alpha.T-1).V}{C_p}$$
(3.69)

Paramètre de Grüneisen est donné par [50]

$$\tau = \frac{\alpha.K}{\rho.C_v} = \frac{V.\alpha}{X_s.C_p}$$
(3.70)

Le coefficient de joule Thomson est donne par une autre forme [51] :

$$\mu_{JT} = -\frac{1}{C_v} \left[ T \cdot (\frac{\partial P}{\partial T})_v - P \right]$$
(3.71)

La dérive de P par rapport a T a un volume constant donne :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V} = \frac{R}{V - b} + \frac{a}{T^{2} \cdot V^{2}}$$
(3.72)

Donc, le coefficient de joule Thomson devient :

$$\mu_{JT} = -\frac{1}{C_{v}} \left[ \frac{2.a}{T.V^{2}} \right]_{(3.73)}$$

Pour un gaz parfait, le coefficient de joule Thomson est toujours nul (=0).

La relation de Reech [51] présente le coefficient de Laplace (rapport des chaleurs spécifiques) pour le gaz réel est donné par [52] :

$$\gamma(T,\rho) = \gamma_{(gp)} \left\{ \frac{\left\{ \frac{\theta^2}{T} \right\} \frac{\theta}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}}\right)} + \frac{4\dot{a}\rho}{RT} \left[ 1 + \frac{\left(\frac{2 + b\rho}{1 - b\rho} + \frac{\dot{a}\rho}{2RT}\right)}{\left(1 - b\rho\right)^2} - \frac{2\dot{a}\rho}{RT}} \right] \right\}}{1 + (\gamma_{(gp)} - 1) \left(\frac{\theta^2}{T}\right) \frac{\theta}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}}\right)^2} + \frac{2\dot{a}\rho}{RT}} \right]} \right\}$$

$$(3.74)$$

## 3.3 Relations entre les coefficients

$$\alpha = P.\beta X_{T}(3.75)$$
$$\lambda = \mu V.X_{s}(3.76)$$
$$P.\beta = \frac{l}{T}(3.77)$$
$$V.\alpha = -\frac{h}{T}(3.78)$$
# CHAPITRE 3 : DEVLOPPEMENT DES COEFFICIENTS CALORIMITRIQUES ET THERMO-ELASTIQUES POUR LES GAZ

 $\frac{T}{\lambda} = \frac{1}{C_{\nu}} (3.79)$ 

$$\frac{T}{\mu} = -\frac{h}{C_p}$$
(3.80)

 $X_T \ge X_{s(3.81)}$ 

### Conclusion

Le tableau ci-dessous présente l'ensemble des coefficients calorimétriques

et thermo-élastiques trouvées dans ce chapitre, ainsi que ces valeurs pour le cas dun gaz parfait.

Tableau 3 1. Coefficients	calorimétriques et theri	no-élastiques	nour les gaz
	culor michigues et men	no clustiques	pour res guz.

Symbole	Abréviation	Unité	valeur GP
CV	Capacité thermique isochore salhi et al	J/Kg K	γ/γ-1
СР	Capacité thermique isobare salhi et al	J/Kg K	γ <b>R</b> /γ-1
γ	Coefficient de Laplace salhi et al	//////	1.402
СТ	Coefficient sans nom attribué a une T cte salhi	J/Kg K	0
	et al		
l	Coefficient de dilatation isotherme	Ра	Р
h	Coefficient de compression isotherme	m <sup>3</sup>	-V
μ	coefficient sans nom attribué	Ра	Cp T/V
λ	coefficient de dilatation linéaire	m <sup>3</sup>	Ср Т/Р
α	Coefficient de dilatation isobare	K <sup>-1</sup>	1/T
β	Coefficient de compression isochore	K <sup>-1</sup>	1/T
χ	Coefficient de compressibilité isotherme	Pa <sup>-1</sup>	1/P
X <sub>S</sub>	Coefficient de compressibilité isentropique	Pa <sup>-1</sup>	1/γP
K	Module d'élasticité isostatique	Ра	Р
Ζ	Facteur de compressibilité	/////	1
$\mu_{JGL}$	Coefficient de Joule-Gay-Lussac	K / m <sup>3</sup>	0
Γ	Paramètre de Grüneisen	/////	γ-1
$\mu_{JT}$	Coefficient de Joule-Thomson	K/Pa	0

#### **CHAPITRE 4**

#### **RESULTATS DE SIMULATION ET INTERPRETATION**

#### Introduction

Dans ce chapitre, nous étudierons les évolutions des coefficients calorimétriques et des coefficients thermo-élastiques du modèle des gaz réels et les comparerons aux résultats obtenus par le modèle des gaz parfaits. Dans quelle mesure les coefficients sont-ils affectés par les changements de température à haute et basse pression, et dans quelles conditions peuvent-ils être utilisés ? et quand prendre le comportement des gaz parfaits. Où nos résultats sont présentés sous forme de courbes graphiques au moyen d'un programme de calcul qui a été développé en exploitant les différentes équations que notre modèle a trouvées à travers les relations entre ces coefficients dans les deux modèles. Comme ce programme nous aidera à suivre les changements de ces coefficients et à donner une explication précise et correcte des différences et des contradictions entre les modèles (le modèle de gaz réel et le modèle de gaz idéal). Afin que nous puissions obtenir des résultats plus précis.

#### 4.1 Résultats et commentaires :

La figure 4.1 représente la variation du coefficient de dilatation isobare  $\alpha$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. On remarque une diminution de coefficient de dilatation isobare  $\alpha$  lorsque la température T augmente , pour des faibles valeurs de température T, nous remarquons que les résultats obtenus par le modèle gaz réelle s'éloignent de ceux obtenus par le modèle gaz parfait et s'approche pour des grandes valeurs de température T, on remarque aussi que l'augmentation de la pression entraîne une augmentation de la masse volumique, dans ce cas pour des faibles valeurs de la température , nous remarquons que les résultats pas identique par le modèle gaz parfait. Cette variation montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



4.1:Variation du Coefficient de dilatation isobare  $\alpha$  en fonction de la température

La figure 4.2 représente la variation du coefficient de compression isochore  $\beta$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression, et pour les modèles, P*G* et RG. A basse température on remarque que les deux modelés RG et PG suivent la même allure, mais lorsque la température augmente, on remarque que les deux modèles RG et PG diminuent et prennent la même allure jusqu'à 1000 K, ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.2 : Variation ducoefficient de compression isochore  $\beta$  en fonction de la température

La figure 4.3 représente la variation du coefficient de compressibilité isotherme  $\chi_T$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. On remarque que à basse pression les deux modèles RG et PG fixé à une valeur spécifiée et prennent la même allure jusqu'à 10 bar quelque soit la température comme à 5 bar on trouve  $\chi_T$ =0.002 10<sup>-3</sup>[pas<sup>-1</sup>]. Mais lorsque la pression augmente on remarque pour le modèle de gaz réel : une diminution de coefficient de compressibilité isotherme  $\chi_T$  pour des faibles valeurs de température, mais c'est la température augment la valeur de coefficient de compressibilité isotherme  $\chi_T$  est fixée à une valeur, qui est zéro jusqu'à 1000 K. pour le modèle de gaz parfait : on remarque à une pression de 50 bar jusqu'à 500 bar le coefficient de compressibilité isotherme  $\chi_T$  néant quelque soit la température, ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.3: Variation duCoefficient de compressibilité isotherme  $\chi_T$  en fonction de la température

La figure 4.4 représente la variation du coefficient de dilatation isotherme l en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. On remarque, coefficient de dilatation isotherme l de le modèle de gaz parfait et le modèle de gaz réel inexistant, sila pression inférieure à *10 Bar* pour n'importe quelle valeur de la température. Mais lorsque la pression augmente on remarque pour le modèle de gaz réel : une diminution de coefficient

de dilatation isotherme l pour des faibles valeurs de température, mais c'est la température augment la valeur de coefficient de dilatation isotherme l est fixée à une valeur, comme à 300 bar on trouve  $l=300 \ 10^5$  [pas]. Mais Pour le modèle de gaz parfait et aussi pour quelques valeurs de la pression P= 50Bar, 100Bar, 300Bar, 500Bar on remarque que le coefficient de dilatation isotherme l fixée à même valeur pour n'importe quelle valeur de la température comme à P= 50Bar on trouve  $l=20 \ 10^5$  [pas], ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.4: Variation du Coefficient de dilatation isotherme l en fonction de la température

La figure 4.5 représente la variation du coefficient de compression isotherme h en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression.

A basse pression (1, 5 et 10 bar) on remarque que la valeur de coefficient de compression isotherme h dans les deux modèles (gaz parfait et gaz réels) diminuent et prennent la même allure quelle que soit la température ; mais pour les hautes pressions(50 ; 100 ; 300 et 500 bar) et a température inférieure a 500k pour le modèle de gaz réel ce qui n'est pas le cas , il ya une augmentation du h jusqu'à ce qu'il devienne stable au voisinage d'un modèle gaz parfait, on remarque aussi que l'augmentation de pression entraine une

augmentation du h.d'un modèle gaz parfait, on remarque aussi que l'augmentation de pression entraine une augmentation du h.



Figure 4.5: Variation duCoefficient de compression isotherme h en fonction de la température

Figure 4.6 représente la variation du coefficient sans nom attribué  $\mu$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. On remarque à basses pression P= 1Bar, 5Bar, 10Bar que les deux modelés RG et PG suivent la même allure qui sont néant pour n'importe quelle valeur de la température. Mais lorsque la pression supérieur à 50Bar on remarque pour le modèle de gaz réel une augmentation progressivement de coefficient sans nom attribué  $\mu$  pour les grandes valeurs de la température jusqu'à 1000 K.on remarque aussi pour le modèle de gaz parfait à haute pression supérieur à 50 Bar le coefficient sans nom attribué  $\mu$  excite et fixée dans une même valeur pour n'importe quelle valeur de la température. Ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.6: Variation duCoefficient sans nom attribué µ en fonction de la température

Figure 4.7 représente la variation de coefficient de dilatation linéaire  $\lambda$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. , pour le modèle de gaz parfait et le modèle de gaz réel à haute pression P= 50Bar, 100Bar, 300Bar, 500 Bar le coefficient de dilatation linéaire  $\lambda$  n'excite pas quelque soit la température, mais à basses pression on remarque une augmentation progressivement de coefficient de la dilatation linéaire  $\lambda$  a haute température jusqu'à 1000 k telle que deux courbes sont même. Ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.7: Variation duCoefficient de dilatation linéaire  $\lambda$  en fonction de la température

Figure 4.8 représente la variation de coefficient de compressibilité isentropique  $X_s$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression et pour les modèles de gaz parfait et gaz réel le graphe à basse température représente une décroissance de coefficient de compressibilité isentropique  $X_s$  mais lorsque la température augment le modèle de gaz réel accroché à même valeur jusqu'à 1000k on remarque çà si la pression dans cette intervalle là [ 50,300] Bar, concernant le modèle de gaz parfait le de coefficient de compressibilité isentropique  $X_s$  existe pas pour n'importe quelle température ,on remarque aussi lorsque la pression égal à 1 Bar les deux modèles de gaz sont le même graphe qui est fixé à même point quelle que soit la température telle que  $X_s$ = 7.10<sup>-6</sup>[pas]. Ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.8: Variation duCoefficient de compressibilité isentropique X<sub>S</sub> en fonction de la température

Figure 4.9 représente la variation de module d'élasticité isostatique **K** en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. On remarque si la pression égal à 100 Bar ,300 Bar ,500 Bar le module d'élasticité isostatique **K** de gaz parfait augment progressivement à haute température mais le modèle de gaz parfait à chaque pression est fixé à une valeur différent pour toute valeur calorifique par exemple à p=100 Bar on trouveK=100  $10^5$ [pas], on remarque aussi si la pression inferieur à ou égal à 10 Bar les deux modèles de gaz prennent la même allure ou nous les trouvons absents quelque soit la température . Ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.9: Variation duModule d'élasticité isostatique K en fonction de la température

Figure 4.10 représente la variation de coefficient de joule – gay– Lussac  $\mu_{JGL}$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. Et pour le modèle de gaz réel le graphe à basse pression de 1 Bar, 5 Bar, 10 Bar, 50 Bar coefficient de joule – gay– Lussac  $\mu_{JGL}$  existe pas telle que sa valeur est nulle pour n'import quelle température, mais a haute pression on remarque une augmentation graduellement si la température inferieur à 700k mais lorsque la température supérieur à ca

On remarque le graphe de gaz réel se comporte de la même manière que le graphe de gaz parfait ca ne sert à rien dans ce cas jusqu' a 1000k. Ce qui montre les effets de la pression, de la température et de l'imperfection des gaz.



Figure 4.10: Variation duCoefficient de Joule-Gay-Lussac µJGL en fonction de la températur



Figure 4.11: Variation duCoefficient de Joule-Thomson  $\mu_{JT}$  en fonction de la température

Figure 4.11 représente la variation de coefficient de joule – Thomson  $\mu_{JT}$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. Et pour le modèle de gaz réel le

graphe à basse pression de 1 Bar, 5 Bar, 10 Bar, 50 Bar, on remarque que la valeur de le coefficient diminue avec l'augmentation de la température jusqu'à la non-existence, et plus la pression est élevée le degré de stabilité est élevée.

Figure 4.12 représente la variation de paramètre de Gruneisen  $\Gamma$  en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. Pour le modèle de gaz réel on remarque que la valeur de le coefficient diminue avec l'augmentation de la température, et plus la pression est élevée le degré de stabilité est élevée.



Figure 4.12: Variation duParamètre de Grüneisen  $\Gamma$  en fonction de la température

Figure 4.13 représente la variation du facteur decompressibilité z en fonction de la température pour quelques valeurs de la pression. On remarque que pour le modèle d'un gaz parfait la valeur de z est égale à 1 pour toutes les températures et les pressions, mais Pour le modèle d'un gaz réel, le coefficient z est affecté par le changement de pression, car plus la pression est élevée, plus la valeur de z est élevée.

On remarque aussi a basse pression lorsque la température est inférieure à 200k le coefficient z augmente puis il converge vers 1 au voisinage d'un modèle gaz parfait quelle que soit la température , et a haute pression lorsque la température est inférieure à 300k le coefficient z démunir ,et se rapproche de 1 au voisinage d'un modèle gaz parfait à haute température.



Figure 4.13: Variation duFacteur de compressibilité Z en fonction de la température

### **CONCLUSION GENERALE**

Dans ce travail, nous avons étudie le développement des coefficient calorimétriques et thermo élastique pour le gaz réel, cette étude est devisée en deux parties, la première consiste les coefficients président pour le gaz parfait, une dernière partie de ce travail parle des coefficients pour le gaz réel.

Pour cela, nous avons réalisé :

Que toutes les relations ne soient pas valables pour le gaz parfait est également valable pour le gaz réel.

Aussi, La pression et la température affectent le comportement des gaz réel et parfait, on à basse température et haute pression les coefficients calorimétriques et thermo élastiques sont pas identiques dans le gaz parfait et gaz réel donc leur comportement est asymétrique, mais à basse pression et haute température le comportement de gaz réel est similaire au comportement du gaz parfait donc leur coefficients sont identiques.

Les lois réelles des gaz doivent être utilisées lorsque la température critique et inférieure à 500k.

Enfin, Sans connaître la thermodynamique des gaz on ne peut pas entamer le problème de calcul des coefficients calorimétriques et thermo-élastiques. On peut choisir d'autre substance au lieu de l'air. Les relations restent valables. Il faut déterminer les constantes des forces intermoléculaires et de taille moléculaire, ainsi que la température caractéristique de vibration.

On peut obtenir les relations d'un gaz parfait à partir des relations du modèle RG en annulant toutes les constantes des forces intermoléculaire ( a ) et de taille moléculaire ( b ).

Ainsi que la température caractéristique de vibration  $\Theta$ . Dans ce cas, le modèle *GP* devient un cas particulier de notre modèle *RG*. A faibles pression, l'écart en résultats entre les modèles PG et RG des quelques coefficients calorimétriques et thermo-élastiques est petit, ce qui donne la possibilité d'étudier un écoulement *RG* en utilisant les relations *PG*. Surtout à haute température. Par contre, lorsque  $P_0$ augmentent, la théorie *GP* commence de donnée des résultats qui s'éloignent de fur et à mesure du cas réel, d'où la nécessité d'utilisation le modèle *RG*. Notre Relations valable pour n'importe quel domaine, surtout dans le domaine

haute pression et basse température, dans ce cas on trouve l'écart en résultats entre notre modèle RG et les autres modèles comme HT (gaz partialement parfait) et GP est grand, d'où la nécessité d'utilisation le modèle *RG* pour corriger les résultats.

### REFERENCES

- Ingo Müller, A History of Thermodynamics, The Doctrine of Energy and Entropy,1st ed. Springer Berlin Heidelberg 2007,pp 320, <u>https://doi.org/10.1007/978-3-540-46227-9</u>
- [2] Clifford Ambrose Truesdell, The Tragicomical History of Thermodynamics, 1822–1854, 1st ed. Springer New York, NY, pp 372, 2013, <u>https://doi.org/10.1007/978-1-4613-9444-0</u>
- [3] J :Georg Helm, The Historical Development of Energetics, 1st ed. Springer Dordrecht 2013, pp 420, <u>https://doi.org/10.1007/978-94-011-4471-1</u>
- [4] B. P. MacLeod, P. A. Schauer, K. Hu, B. Lam, D. K. Fork, C. P. Berlinguette; High-temperature high-pressure calorimeter for studying gram-scale heterogeneous chemical reactions. *Rev Sci Instrum* 1 August 2017; 88 (8): 084101. https://doi.org/10.1063/1.4999361
- [5] Manik Kumer Ghosh, Sarah N. Elliott, Kieran P. Somers, Stephen J. Klippenstein, Henry J. Curran, Group additivity values for entropy and heat capacities of C2–C8 alkanes, alkyl hydroperoxides, and their radicals, Combustion and Flame (2023) <u>https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.112706</u>
- [6] Tahir-Kheli, R. (2020). Joule and Kelvin: Internal Energy and Enthalpy. In: General and Statistical Thermodynamics. Graduate Texts in Physics. Springer, Cham. <u>https://doi.org/10.1007/978-3-030-20700-7\_7</u>
- [7] Simon R. Davies, Jason W. Lachance, E. Dendy Sloan, and Carolyn A. Koh, High-Pressure Differential Scanning Calorimetry Measurements of the Mass Transfer Resistance across a Methane Hydrate Film as a Function of Time and Subcooling, *Ind. Eng. Chem. Res.* 2010, 49, 12319–12326, <u>https://doi.org/10.1021/ie1017173</u>
- [8] Heribert Wilhelm, Calorimetry at High Pressure and Low Temperature, Condensed Matter, Strongly Correlated Electrons, 2003, <u>https://doi.org/10.48550/arXiv.cond-mat/0303457</u>
- [9] M. A. Cornu. Relations entre les coeffcients thermiques et thermo-élastiques des corps. J. Phys. Theor. Appl., 1873, 2 (1), pp.41-50. https://doi.org/10.1051/jphystap:01873002004100
- [10] Mitali Das, Shang-Hao Liu, Yun-Ting Tsai, Wei-Cheng Lin, Chi-Min Shu, Assessment of thermal explosion for an industrial recovery reactor by GC/MS product analysis combined with calorimetric techniques, <u>Thermochimica Acta</u>, <u>Volume 656</u>, 10 October 2017, Pages 90-100, <u>https://doi.org/10.1016/j.tca.2017.08.014</u> (Propylene)
- [11] Alexandra Navrotsky, Progress and new directions in high temperature calorimetry, Physics and Chemistry of Minerals, volume 2, pages89–104 (1977), https://doi.org/10.1007/BF00307526
- [12] Y. Toual, S. Mouchou, A. Azouaoui, A. Maouhoubi, A. Hourmatallah, N. Benzakour, K. Bouslykhane, Study of thermoelectric, electronic, thermo-elastic and thermodynamic properties of LiYN (Y = Mg and Ca) half Heusler semiconductors at high-temperature, Chemical Physics, Volume 572, 2023, 111967, https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2023.111967.
- [13] Olivier Bonnefoy, Thermodynamique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 2016.
- [14] Sebastian Weiss, Jiri Polansky, Markus Bar, Kilian Oberleithner, Sonja Schmelter, Derivation and validation of a reference data-based real gas model for hydrogen, international journal of hydrogen energy, 48(2023), 23645 -23654, <u>https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.073</u>
- [15] Arash Pakravesh, Hosseinali Zarei, Prediction of Joule–Thomson coefficients and inversion curves of natural gas by various equations of state, Cryogenics, Volume 118,2021,103350, https://doi.org/10.1016/j.cryogenics.2021.103350.
- [16] Kolesnikov, I.M. Phenomenological thermomechanics and limits of its applicability (discussion). *Chem Petrol Eng* 35, 35–38 (1999). <u>https://doi.org/10.1007/BF02364737</u>

- [17] M. Salhi, T. Zebbiche and A. Mehalem, Stagnation Pressure Effect on Prandtl Meyer Function for Air, Proc Inst Mech Eng G J Aerosp Eng,231(2017), No. 2,326-337. <u>https://doi.org/10.1177/095441001663691</u>
- [18] M. Salhi, M. Roudane, S. Bensedira, Development of a New General Model of Enthalpy. Submitted for publication, (2023).
- [19] M. Salhi and M. Roudane, Numerical Investigation of the Thermal Caloric Imperfections on entropy Enhancement across Normal Shock Waves, HTHP, 48(2019), No. 4,285-308. https://doi.org/110.32908/http.v48.689
- [20] M. Salhi, O. Ketfi and M.Roudane, Numerical Investigation on New Models of the Internal Energy ΔU and the Work W, Rom. J. Phy., 68(2023), No. 609, 1-18, https://rjp.nipne.ro/2023 68 3-4/RomJPhys.68.609
- [21] M. Salhi and T. Zebbiche, A new general form of Prandtl Meyer function, application on air, 8th Theoretical Fluid Mechanics Conference. AIAA. Denver, CO, USA, 2017(2017), ID 2621484.
- [22] Salhi, M. (2023) Improvement of Supersonic Nozzles Performances by a New Design Method, Proc. AIAA conference, paper N° AIAA 2023-3248, San Diego, CA, USA.
- [23] Changjun, L., Wenlong, J., Xia, W., 2012, Application of Lee-Kesler equation of state to calculating compressibility factors of high pressure condensate gas, Energy Procedia, 14, pp. 115 - 120. https://doi.org/10.1016/j.egypro.2011.12.904
- [24] Ali Chamkalani, Sohrab Zendehboudi, Chamkalani, Reza Ali Lohi, Ali Elkamel, Ioannis Chatzis, Utilization of support vector machine to calculate gas compressibility factor. Fluid Phase Equilibria 358 (2013)189-202. http://dx.doi.org/10.1016/j.fluid.2013.08.018
- [25] Barbora Volejníková, Štěpán Hovorka, Karel Řehák, Lidmila Bartovská, Temperature and composition dependence of excess Gibbs energy in the system of tetraglyme (1)+decane (2): Evaluation by simultaneous correlation of limiting activity coefficients, liquid–liquid equilibrium, and calorimetric data, Fluid Phase Equilibria, Volume 283, Issues 1–2, 2009, Pages 65-72,https://doi.org/10.1016/j.fluid.2009.05.019
- [26] Li, Ji-Qiang & Chen, Yan & Ma, Yong & Kwon, Jeong-Tae & Xu, Heng & Li, Ji-Chao. (2022). A study on the Joule-Thomson effect of during filling hydrogen in high pressure tank. Case Studies in Thermal Engineering. https://doi.org/10.1016/j.csite.2022.102678
- [27] Arash Kamari, Farhad Gharagheizi, Amir H. Mohammadi, Deresh Ramjugernath, A corresponding states-based method for the estimation of natural gas compressibility factors, ournal of Molecular Liquids 216 (2016) 25–34, http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2015.12.103
- [28] Zhuoran Li, Caigong Zhang, Changjun Li, Xia Wu, Hanyu Xie, Linyu Jiang, Thermodynamic evaluation of the effects of hydrogen blending on the Joule-Thomson characteristics of hydrogen-blended natural gas, Journal of Cleaner Production, Volume 406,2023,137074, <u>https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.137074</u>.
- [29] G. Ernst,, B. Keil,, H. Wirbser, M. Jaeschke, Flow-calorimetric results for the massic heat capacity cp and the Joule–Thomson coefficient of CH4, of (0.85CH4+0.15C2H6), and of a mixture similar to natural gas, The Journal of Chemical Thermodynamics, Volume 33, Issue 6, 2001, Pages 601-613, <u>https://doi.org/10.1006/jcht.2000.0740</u>.
- [30] Ni. Voëadlo ", Geoffrey D. Price, The Grüneisen parameter computer calculations via lattice dynamics, *Physics of the Earth and Planetaiy Interiors*, 82(1994) 261—270 SSDI 0031-9201(93)02918-N
- [31] Zujun Peng, Weihua Xie, Songhe Meng, Xinxing Han, Hongyue Wang, Shanyi Du,; The measuring approach of the nonlinear high-temperature coefficient of thermal expansion during isothermal cooling, Measurement, Volume 159, 2020, 107766, <u>https://doi.org/10.1016/j.measurement.2020.107766</u>. L
- [32] Guozhen Su, Liwei Chen, Jincan Chen, Isobaric expansion coefficient and isothermal compressibility for a finite-size ideal Fermi gas system, Physics Letters A, Volume 378, Issues 30–31, 2014, Pages 1992-1996, <u>https://doi.org/10.1016/j.physleta.2014.05.026</u>.

- [33] Hafsi, Z., Elaoud, S., Akrout, M., Taïeb, E.H. (2015). New Correlation for Hydrogen-Natural Gas Mixture Compressibility Factor. In: Chouchane, M., Fakhfakh, T., Daly, H., Aifaoui, N., Chaari, F. (eds) Design and Modeling of Mechanical Systems - II. Lecture Notes in Mechanical Engineering. Springer, Cham. <u>https://doi.org/10.1007/978-3-319-17527-0 79</u>
- [34] Martin Dehli, Ernst Doering, Herbert Schedwill, Fundamentals of Technical Thermodynamics, 1st ed. 2022, Springer Wiesbaden, pp 606, https://doi.org/10.1007/978-3-658-38910-9
- [35] Sulagna Chatterjee, Sanatan Chattopadhyay, Analytical modeling of the lattice and thermo-elastic coefficient mismatch-induced stress into silicon nanowires horizontally embedded on insulator-on-silicon substrates, Superlattices and Microstructures, Volume 101, 2017, Pages 384-396, <u>https://doi.org/10.1016/j.spmi.2016.12.001</u>.
- [36] Gennadiy I. Egorov, Dmitriy M. Makarov, Arkadiy M. Kolker, Liquid phase PVTx properties of binary mixtures of (water+ethylene glycol) in the range from 278.15 to 323.15K and from 0.1 to 100MPa. II. Molar isothermal compressions, molar isobaric expansions, thermal pressure coefficients and internal pressure, Fluid Phase Equilibria, Volume 354, 2013, Pages 133-146, <u>https://doi.org/10.1016/j.fluid.2013.06.014</u>.
- [37] Dhiman Kumar Das, Harshan Bhattacharjee, Sushant Kumar Sahoo, Sukadev Sahoo, Dependence of thermal conductivity of graphene on the coefficient of linear expansion and temperature, Materials Today: Proceedings, 2023,online, <u>https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.06.149</u>.
- [38] Thomas F. Irvine, Mark R. Duignan, Isobaric thermal expansion coefficients for water over large temperature and pressure ranges, International Communications in Heat and Mass Transfer, Volume 12, Issue 4, 1985, Pages 465-478, <u>https://doi.org/10.1016/0735-1933(85)90040-5</u>.
- [39] Ricken, T., de Boer, R. (2005). Two Phase Flow in Capillary Porous Thermo-Elastic Materials. In: Gladwell, G.M.L., Huyghe, J., Raats, P.A., Cowin, S.C. (eds) IUTAM Symposium on Physicochemical and Electromechanical Interactions in Porous Media. Solid Mechanics and Its Applications, vol 125. Springer, Dordrecht. https://doi.org/10.1007/1-4020-3865-8 42
- [40] Zi-Kui Liu, Computational thermodynamics and its applications, Acta Materialia, Volume 200, 2020, Pages 745-792, <u>https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.08.008</u>.
- [41] <u>Hans Lukas</u>, <u>Suzana G. Fries</u>, <u>Bo Sundman</u> Computational Thermodynamics, 1st ed. Cambridge University Press, 2011, <u>https://doi.org/10.1017/CBO9780511804137</u>
- [42] Tommaso Ruggeri, Masaru Sugiyama. Classical and Relativistic Rational Extended Thermodynamics of Gases, 1st ed. Springer Cham, 2022, pp 669, <u>https://doi.org/10.1007/978-3-030-59144-1</u>
- [43] Henning Struchtrup, Thermodynamics and Energy Conversion, 1st ed. Springer Berlin, Heidelberg, pp. 597, <u>https://doi.org/10.1007/978-3-662-43715-5</u>
- [44] Maher I. Boulos, Pierre L. Fauchais, Emil Pfender, Handbook of Thermal Plasmas, 1st ed. Springer Nature Switzerland AG 2023, pp1975, <u>https://doi.org/10.1007/978-3-030-84936-8</u>
- [45] Reinhard Hentschke, Thermodynamics, 2<sup>nd</sup> ed. Springer Nature Switzerland AG 2022, pp.348, <u>https://doi.org/10.1007/978-3-030-93879-6</u>
- [46] Henry Clyde Foust III, Thermodynamics, Gas Dynamics, and Combustion, 1st ed. Springer Nature Switzerland AG 2022, 402, https://doi.org/10.1007/978-3-030-87387-5
- [47] Pedro J Bernal, W.Alexander Van Hook, Apparent molar volumes, isobaric expansion coefficients, and isentropic compressibilities for some non-aqueous carbohydrate solutions, The Journal of Chemical Thermodynamics, Volume 18, Issue 10, 1986, Pages 969-978, <u>https://doi.org/10.1016/0021-9614(86)90154-0</u>.
- [48] Evangelos Bellos, Michalis Gr. Vrachopoulos, Christos Tzivanidis, Theoretical investigation of a novel hybrid refrigeration cycle based on the partial thermal isochoric compression, Thermal Science and Engineering Progress, Volume 11, 2019, Pages 239-248, <u>https://doi.org/10.1016/j.tsep.2019.04.003</u>.

- [49] Carl L. Yaws, Chapter 23 Coefficient of Isothermal Compressibility of Liquid Organic Compounds, from , Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons (Second Edition), Gulf Publishing Company, 2014, Pages 979-984, ISBN 9780323286596, 2014 Elsevier https://doi.org/10.1016/B978-0-323-28659-6.00023-9.
- [50] Richu, Ashwani Kumar, Apparent molar volume, isentropic compressibilities, viscosity B-coefficients and activation parameters of thiamine hydrochloride in aqueous solutions of saccharides at different temperatures, The Journal of Chemical Thermodynamics, Volume 150, 2020, 106228, <u>https://doi.org/10.1016/j.jct.2020.106228</u>.
- [51] Pistun, E.P., Matiko, F.D. & Masnyak, O.Y. Determination of the Joule–Thomson coefficient in problems of measuring the flow rate of natural gas. *Meas Tech* 52, 509–513 (2009). <u>https://doi.org/10.1007/s11018-009-9299-y</u>
- [52] Borissenok, V.A. Method for Determining the Grüneisen Parameter of Pyroelectrics. *Russ Phys J* 58, 249–254 (2015). <u>https://doi.org/10.1007/s11182-015-0489-6</u>