

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE SALAH BOUBNIDER - CONSTANTINE 3



FACULTE DE GENIE DES PROCÉDES  
DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE

N° d'ordre : .....

Série : .....

Mémoire de Master

Filière : Génie des Procédés

Spécialité : Génie Chimique

Thème

**Modélisation de la solubilité des systèmes solides dans les fluides supercritiques : Détermination des paramètres Kij par la méthode de contribution de groupe**

Dirigé par :

**Dr. ZEHIOUA Rouf**

Grade : MCA

Présenté par :

**FALOUTI Oumeima**

**BENHARKAT Ibtissem**

Année Universitaire : 2021/2022

Session : Juin

# SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE.....	1
CHAPITRE 1 : LES FLUIDES SUPERCRITIQUE.....	4
1.1. Introduction .....	4
1.2. Les fluides supercritiques .....	4
1.2.1. Historique .....	4
1.2.2. Définition .....	5
1.3. Propriétés des fluides supercritiques .....	6
1.4. Dioxyde de carbone supercritique (CO <sub>2</sub> ) : définition, avantages et inconvénients : [27].....	7
1.5. Intérêt pour le Génie Chimique & le Génie des Procédés : .....	8
1.6. Applications industrielles du dioxyde de carbone à l'état supercritique : .....	9
1.7. Conclusion :.....	10
CHAPITRE 2 : Modélisation thermodynamique : Solubilité des substances solides dans les fluides supercritiques.....	11
2.1. Introduction .....	11
2.2. Modèle thermodynamique.....	12
2.2.1. Équations d'état cubiques et règles de mélange.....	12
2.2.2. Condition d'équilibre fluide – solide.....	12
2.3. Calcul de la solubilité solide dans un fluide supercritique.....	13
2.4. Propriétés des mélanges binaires.....	16
2.4.1. Calcul des propriétés critiques.....	16
2.4.2. Volume molaire du liquide à saturation (méthode Rackett) .....	17
2.4.3. Calcul de facteur centrique.....	17

2.4.4. Calcul de la pression à saturation .....	17
2.5. Algorithme de calcul de la solubilité.....	18
2.6. La méthode du simplexe Nelder – Mead.....	19
2.7. Conclusion.....	19
CHAPITRE 3 : Résultats et discussions .....	20
3.1. Introduction .....	20
3.2. Présentation des résultats de calcul de la solubilité d'un solide dans leCO <sub>2</sub> supercritique	20
3.2.1. Calcul du paramètre d'interaction $K_{i,j}$ par l'équation de Jaubert .....	20
3.2.2. Calcul de la solubilité des systèmes test considérés ( $K_{ij}$ issus de la littérature) .....	21
3.2.3. Calcul de la solubilité des systèmes test considérés ( $K_{ij}$ via l'équation de Jaubert) ....	26
3.3. Conclusion.....	36
Conclusion générale.....	37
Références bibliographiques .....	39
Annexe1 .....	46
Annexe2 .....	47

## Résumé

---

L'utilisation des fluides supercritiques et particulièrement le CO<sub>2</sub> pour l'extraction, la purification, la séparation, la croissance cristalline et la transformation de différentes substances du domaine chimique, agroalimentaire ou pharmaceutique, suscite un intérêt sans cesse croissant. Cet intérêt est principalement dû aux avantages liés à cette technique d'extraction. Notant également, que les données d'équilibre de phases, sont d'une grande importance pour le calcul, la conception des procédés et le design des installations industriels. Leurs disponibilités ont été toujours un souci majeur, d'où le nombre important des études qui s'intéressent à la production expérimentale de ces données. Ce qui a encouragé également le développement de modèles thermodynamiques pour la prédiction de ces équilibres entre phases.

Dans ce même contexte ce présent travail a pour l'objectif de développer un modèle thermodynamique capable de prédire la solubilité des solides dans le CO<sub>2</sub> supercritiques, en utilisant une combinaison entre l'équation d'état de Peng – Robinson et la règle de mélange de Van der Waals et en adoptant la méthode de contribution de groupe pour le calcul du paramètre d'interaction binaire K<sub>ij</sub>.

**Mot clés :** fluides supercritique, CO<sub>2</sub>, équilibre, modèle thermodynamique, solubilité, équation d'état, règle de mélange, contribution de groupe.

---