

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

UNIVERSITE CONSTANTINE 3



**Faculté de Génie des Procédés**  
**Département : Génie Chimique**

N° d'ordre :... ..

Série :... ..

**Mémoire de Master**

Filière : Génie des procédés

Spécialité : Génie Chimique

**Modélisation des équilibres L-S et estimation  
des nouveaux paramètres d'interaction du  
modèle GC-NRTL**

Dirigé par:

**Dr : MOUDJARI YOUCEF**

Présenté par :

**BENYOUNES DOUNIA  
ITIM ILHEM**

Année Universitaire 2021/2022.

Session : (juin)

# Table de matière

Liste des tableaux .....	i
Liste des figures.....	ii
Nomenclature.....	iii
INTRODUCTION GENERALE .....	1

## **Chapitre I**

### **Revue bibliographiques et notions théoriques**

Introduction .....	3
I.1 Notions de la solubilité .....	4
I.2 Définition d'une phase .....	4
I.2.1 Le diagramme de phase .....	4
I.3 Conditions d'équilibre .....	5
I.4 Modèles thermodynamique .....	8
Introduction .....	8
I.4.1 Modèles semi-prédictifs.....	10
I.4.1.1 Modèle de Van Laar et Margules .....	10
I.4.1.2 Le modèle de Wilson .....	10
I.4.1.3 Le modèle NRTL.....	11
I.4.1.4 Le modèle UNIQUAC .....	13
I.4.2 Les modèles prédictifs .....	15
I.4.2.1 Le modèle ASOG .....	15
I.4.2.1 Le modèle UNIFAC .....	16

## **Chapitre II**

### **Description du modèle GC-NRTL**

Introduction .....	20
II .1 Aspect théorique du modèle GC-NRTL .....	20
II .1.1 Le concept de contribution du groupe .....	20
II .2 L'équation GC- NRTL .....	20

## **Chapitre III**

### **Résultat et discussions**

III.1 Etude préliminaire .....	28
III.1.1 Prédiction de la solubilité.....	28
III.1.2 Propriétés des corps purs .....	28
III.1.3 Systèmes considérés .....	29
III.3 Résultat obtenu .....	38
III.4 Discussion des résultats obtenus .....	47
III.5 Estimation des nouveaux paramètres d'interaction de groupes .....	48
III.5.1 Procédure d'estimation des paramètres d'interaction entre groupes .....	49
III.5.2 Méthode de Simplexe de Nelder & Mead .....	49
III.5.3 Méthode d'initialisation .....	51
III.5.4 Algorithme de calcul des paramètres d'interaction.....	52
III.5.5 Test de validation du modèle GC-NRTL .....	52
III.6 Résultats obtenus .....	53
III.7 interprétation générale des résultats obtenus .....	62
<b>CONCLUSION GENERALE .....</b>	<b>63</b>

ANNEXES

## Résumé :

L'objectif principal de ce travail était dans un premier temps de prédire les solubilités de huit systèmes par les modèles de contribution de groupe GC-NRTL et UNIFAC codé dans un programme FORTRAN.

Les résultats obtenus pour les cinq premiers systèmes avec le modèle GC-NRTL sont meilleur que ceux obtenu par UNIFAC dont les déviations AAD=1.8205% et AAD=14.98% pour GC-NRTL et UNIFAC respectivement, par contre dans les trois derniers systèmes on constate que les solubilités prédites par UNIFAC sont bonnes que celle prédites par GC-NRTL.

Dans un second temps, une nouvelle décomposition a été faite pour les molécules contenant le groupement (AC) lié à une autre chaîne aromatique dont on l'a nommée (AC)<sub>LINK</sub>, par conséquent douze nouveaux paramètres d'interaction impliquent dans les quatre systèmes considérés ont été optimisés en utilisant SIMPLEX.

Les résultats obtenus sont satisfaisants, donc ces douze paramètres deviennent disponibles pour les futures utilisations.

La validation des résultats a été réalisée en construisant les diagrammes de la phase (Solide-Liquide) par trois nouveaux groupements (AC)<sub>LINKED</sub>.

Les résultats obtenus sont excellents dont la déviations AAD est de 2.33% et de 5.12% pour GC-NRTL et UNIFAC respectivement.

## Les mots clés :

Equilibre liquide-solide, concept de contribution de groupe, paramètre d'interaction, groupement fonctionnel, solubilité, coefficient d'activité .

## المخلص :

ان الهدف الاساسي من هذه الدراسة هو ايجاد معامل النشاط الكيميائي وكذا الذوبانية لثمان انظمة ثنائية اعتمادا على نموذج GC-NRTL وذلك بتطبيق برنامج FORTRAN النتائج المتحصل عليها من تطبيق هذا الاخير على الخمس انظمة الاولية تثبت افضلية نموذج GC-NRTL على نموذج UNIFAC حيث كانت نتائج مرضية جدا بارتياح على قيم الذوبانية قدر ب % 1.8205 AAD على عكس نموذج UNIFAC و الذي قدر الارتياح فيه بحوالي % 14.98 , و في المقابل بالنسبة للثلاث انظمة المتبقية تحصلنا على نتائج معاكسة قليلا ، غير مرضية بالنسبة لنموذج GC NRTL على غرار نموذج UNIFAC . انطلاقا من هذه النتائج للأنظمة الثنائية (صلب -سائل) التي تتضمن مجموعة كيميائية جديدة وهي المجموعة العطرية الكربونية (AC) التي تشكل رابطة مع سلسلة عطرية اخرى والتي أطلقنا عليها تسمية (AC)<sub>linked</sub> و بتطبيق نموذج GC-NRTL على اربعة انظمة جديدة تحتوي على هذه المجموعة تمكنا من تحديد قيم اثنا عشر معامل تفاعلي جديد خاص ب (AC)<sub>LINKED</sub> و ذلك باستعمال برنامج SIMPLEX للتحقق من صحة ودقة هذه المعاملات التفاعلية الجديدة فمنا بتطبيقها على ثلاث انظمة جديدة تحتوي على المجموعة الكيميائية (AC)<sub>LINKED</sub> وكانت النتائج جيدة ومشجعة للاستخدامات المستقبلية لهذه المجموعة بارتياح تقدر ب % 2.33 AAD et % 5.12 AAD لنموذجي GC-NRTL و UNIFAC على التوالي.

## الكلمات المفتاحية :

التوازن صلب -سائل ، مبدا مساهمة المجموعة ،معامل التفاعل ،المجموعة الوظيفية ،الذوبانية ،معامل النشاط