

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE SALAH BOUBNIDER CONSTANTINE 3



FACULTE DE GENIE DES PROCEDES

DEPARTEMENT DE GENIE PHARMACEUTIQUE

MEMOIRE

En vue d'obtention

DU MASTER 2 EN GENIE PHARMACEUTIQUE

N° d'ordre :

Série :

Prédiction des équilibres liquide -liquide binaires en utilisant la nouvelle approche MGC-NRTL .

Dirigé par :

DOCTEUR BOUNEB NARJES

Présenté par :

- BOUDJAHM FERIEL

- DAUDI ASMA

Année universitaire : 2019/2020

Session : septembre 2020

Remerciement.....	
SOOMMAIRE.....	
Liste des figures.....	
Liste des tableaux.....	
NOMENCLATURE.....	
Introduction générale.....	

Chapitre 1 : Equilibre de phase et modèle thermodynamique

1 Introduction.....	3
1.1 Equilibre de phase	3
1.1.1 potentiel chimique et l'enthalpie libre.....	3
1.1.2 Equilibre liquide _liquide.....	4
1.1.2.1 Condition des équilibres liquides_liquides.....	5
1.2 les modelés de coefficients d'activités	5
1.2.1 les modèles semi_prédicatifs	6
1.2.1.1 Van Laar.....	6
1.2.1.2 Margules.....	7
1.2.1.3 Le modèle de wilson.....	7

1.2.1.4	Equation NRTL (Non-Radom, Two-Liquides).....	8
1.2.1.5	Le modèle UNIQUAC.....	10
1.2.2	Les modèles prédictifs.....	12
1.2.2.1	le modèle UNIFAC.....	12
1.2.2.2	Le modèle U NIFAC modifié (Dortmund).....	12
1.2.2.3	a-terme combinatoire	13
1.2.2.4	b-terme résiduel.....	13
1.2.2.5	« GC_NRTL ».....	14
1.2.2.6	L'équation GC_NRTL modifié.....	15
1.3	Conclusion	16

Chapitre 2 : la nouvelle approche "MGC_NRTL"

2.1	Introduction	17
2.2	Modélisation.....	17
2.2.1	Aspect théorique : la nouvelle approche MGC_NRTL.....	17
2.2.2	Variable de décision (paramétré à optimiser).....	20
2.2.3	Fonction objective.....	20
2.3	Méthode d'optimisation utilisée.....	20
2.4	Algorithme génétique « AG ».....	20
2.4.1	Définition.....	20
2.4.2	Les étapes de l'algorithme génétique.....	21
2.4.2.1	Génération de la population initiale.....	22
2.4.2.2	Evaluation de la fonction objective.....	22
2.4.2.3	La sélection	22
2.4.2.4	Le croisement.....	23

2.4.2.5 La mutation.....	23
2.4.2.6 Remplacement de la population.....	23
2.4.3 Procédure d'estimation des paramètres d'interaction entre groupe par l'algorithme génétique	24

Chapitre 3: Résultats et Discussion

3.1 Introduction.....	25
3.2 Les systèmes considérés.....	25
3.3 Découpage des molécules en groupement fonctionnels.....	25
3.4 Les paramètres d'algorithme génétique.....	27
3.5 Résultats et discussion d'ELL.....	28
3.5.1 La matrice des paramètres d'interaction entre groupes.....	28
3.5.2 Effet de la variation de la température sur les paramètres d'interaction entre groupes pour ELL.....	31
3.5.3 Prédiction des compositions en utilisant le modèle MGC-NRTL.....	33
3.6 Conclusion.....	40
CONCLUSION GENERALE.....	41
REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUE.....	42
ANNEXE.....	45
RESUME.....	
ABSTRACT.....	
ملخص	

Titre : Prédiction des équilibres liquide-liquide binaires en utilisant la nouvelle approche MGC-NRTL

RESUME

Dans le présent travail, une nouvelle approche prédictive MGC-NRTL (Modified Group contribution- Non Random Two Liquids) a été proposée et testée pour les équilibres liquide-liquide binaires à des températures différentes.

Les compositions prédites pour les différents systèmes considérés ont été calculées en utilisant les paramètres d'interaction moléculaires estimés à partir de la matrice des paramètres d'interaction entre groupes établie.

L'accord entre les données expérimentales et les résultats obtenus a prouvé la fiabilité de la nouvelle approche et la robustesse de la méthode d'optimisation choisie « Génétique Algorithmique ».

Mots clés : GC-NRTL; Paramètre d'interaction; Algorithme génétique; Equilibre de phases.