

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE CONSTANTINE 3**



**FACULTE DE GENIE DES PROCÉDES
DEPARTEMENT GENIE CHIMIQUE**

N° d'ordre :

Série :

Mémoire de Master

Filière : **Génie des Procédés**

Spécialité : **Génie Chimique**

**Modélisation des équilibres L-S par des méthodes
de contribution des groupes.**

Dirigé par:

MOUDJARI .Y

Grade : MCB

Présenté par :

DERRADJI Lina

CHOUGUI Randa

BOUARIF Ibtissem

Année Universitaire 2020/2021.

Session : juin

Table de matière

Liste des tableaux.....	i
Liste des figures.....	ii
Nomenclature.....	iii
Introduction générale.....	1
Chapitre I : Equilibre de phase et modèles thermodynamiques.....	3
I.1 Représentation thermodynamique des équilibres (liquide - solide).....	3
I.1.1 Définition d'une phase.....	3
I.1.2 Equilibre des phases.....	4
I.1.3 Définition de solubilité.....	4
I.1.4 Courbe d'équilibre liquide solide.....	4
I.1.5 Condition d'équilibre.....	5
I.2 Modèle du coefficient d'activité.....	8
I.2.1 Modèle semi – prédictifs.....	9
I.2.2 Modèle prédictif.....	14
Chapitre II : Le modèle (GC-NRTL) modifié.....	20
II.1 Aspect théorique du modèle (GC-NRTL) modifié.....	20
II.1.1 Origine du modèle (GC-NRTL) modifié.....	20
II.1.2 Groupements fonctionnels.....	20
II.1.3 La matrice de paramètres d'interaction.....	21
II.2 Développement du modèle (GC- NRTL) modifié.....	22
II.2.1 L'équation (GC- NRTL) modifié.....	22
II.3 Motivations d'utiliser (GC- NRTL) modifié.....	26
Chapitre III : Résultats et discussion.....	27
III.1 Introduction.....	27
III.2 Propriétés des corps purs.....	27
III.3 Systèmes considérés.....	28
III.3.1 Modélisation de la solubilité du Naproxène.....	29
III.3.2 Modélisation de la solubilité du Triméthoprim.....	33
III.4 Estimation des nouveaux paramètres d'interaction de groupes.....	37
III.5 Résultat obtenus.....	38
III.5.1 Mélange Naproxène + Octanol.....	40
III.5.2 Mélange Naproxène + Cyclohexane.....	41

III.5.3 Mélange Naproxène +Chloroforme.....	42
III.5.4 Mélange Triméthoprimé + Méthanol.....	43
III.5.5 Mélange Triméthoprimé + Ethanol.....	44
III.5.6 Mélange Triméthoprimé + 1-Propanol.....	45
III.5.7 Mélange Triméthoprimé +2-Propanol.....	46
III.5.8 Mélange Triméthoprimé +1-Butanol.....	47
III.5.9 Mélange Triméthoprimé +2-Butanol.....	48
III.6 Discussion des résultats.....	49
Conclusion générale.....	50
Références bibliographiques.....	51
Annexe	

Résumé :

L'objectif principal de ce travail consiste à la prédiction des diagrammes de phases des équilibres liquide-solide pour neufs systèmes binaires par les modèles GC-NRTL_{modifié} et UNIFAC. La comparaison de ces résultats nous a montré que les solubilités prédites par GC-NRTL_{modifié} sont en très bon accord avec celles expérimentales dont la déviation relative absolue moyenne AARD est égale **22.48%**, contrairement à celles obtenues par UNIFAC dont AARD est **46.61%**.

L'occasion a été exploitée pour déterminer 40 nouveaux paramètres d'interaction entre groupes pour le modèle GC-NRTL_{modifié}, jusque-là inexistant. Les paramètres d'interaction calculés pour le modèle GC-NRTL_{modifié} à partir de données d'équilibre ont donné d'excellents résultats et donc deviennent disponibles pour de futures utilisations des systèmes impliquant ces groupements.

Mots clés : Equilibre liquide-solide, Concept de contribution de groupe, Paramètre d'interaction, GC-NRTL_{modifié}. UNIFAC.

المُلخَص:

هذا العمل يهدف الى التقدير و التنبؤ بأنظمة توازن الحالة (صلب -سائل) للأنظمة الثنائية التسعة بواسطة نماذج GC-NRTL_{modifié} و UNIFAC، مقارنة هذه النتائج تظهر بان الذوبانية المقدره بنموذج GC-NRTL_{modifié} في اتفاق جيد مع نظيرتها التجريبية اين نجد متوسط الفارق النسبي المطلق AARD يساوي **22.48%** بالعكس مع النتائج المتحصل عليها عن طريق نموذج UNIFAC اين نجد AARD يساوي **46.61%**.

استغلت هذه الفرصة لتحديد 40 معامل تفاعلي جديد ما بين المجموعات لنموذج GC-NRTL_{modifié} غير المتوفرة اين أعطت نتائج ممتازة تسمح باعتماد هذه المعاملات في الاستخدامات المستقبلية للأنظمة التي تحتوي على هذه المجموعات.

الكلمات المفتاحية: توازن الصلب -السائل مبداء، مساهمة المجموعات، المعاملات التفاعلية، GC-NRTL_{modifié}

UNIFAC