

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
UNIVERSITE SALAH BOUBNIDER



FACULTE DE GENIE DES PROCEDES
DEPARTEMENT DE GENIE PHARMACEUTIQUE

N° d'ordre :
Série :

Mémoire de Master

Filière : **Génie des Procédés**

Spécialité : **Génie pharmaceutique**

**INFLUENCE DE LA METHODE D'OPTIMISATION ET DE
LA VARIATION DU COEFFICIENT DE REPARTITION NON
ALEATOIRE SUR LA FIABILITE DU MODELE NRTL**

Dirigé par :

Mme : BOUNEB. N

Grade : MCB

Présenté par :

LASOUI AHCÈNE

Année Universitaire 2017/2018
Session : juin

Sommaire

<i>Titre</i>	<i>Page</i>
LISTE DES TABLEAUX	
LISTE DES FIGURES	
NOMENCLATURE	
Introduction générale	1
Références bibliographiques.....	3

Chapitre I

Les modèles de calcul du coefficient d'activité

I.1 Introduction.....	4
I.2 Les modèles de calcul du coefficient d'activité	4
I.2.1 Les modèles prédictifs	5
I.2.1.1 Le modèle ASOG (Analytical solution of groups)	5
I.2.1.2 Le modèle UNIFAC (Universal Functional Activity Coefficient)	6
I.2.2 Les modèles semi-prédictifs	8
I.2.2.1 Modèle de VAN LAAR.....	9
I.2.2.2 Modèle de MARGULES.....	10
I.2.2.3 Modèle de Wilson	11
I.2.2.4 Modèle UNIQUAC	12
I.2.2.5 Modèle NRTL (Non Random Two Liquids)	13
I.3. La fiabilité du modèle NRTL.....	15
Références bibliographiques.....	17

Chapitre II

Modalisation et optimisation

II .1.Introduction.....	20
-------------------------	----

II.2 Modélisation	20
II.2.1 Définition et analyse du problème.....	20
II.2.1.1 Equilibres liquide-liquide	21
II.2.2 Les variables de décision.....	22
II.2.3 Fonction objective	22
II.3 Choix de la méthode d'optimisation	23
II.4. Algorithmes génétiques	23
II.4.1 Le principe de fonctionnement d'un algorithme génétique.....	24
II.4.2 Algorithme Génétique d'estimation des paramètres d'interaction.....	26
II.4.3 Algorithme Génétique de reproduction des données expérimentales.	27
Références bibliographiques	28

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1 Introduction.....	30
III.2. Les Systèmes considérés	30
III.3 Résultats et discussion	31
III.3.1 Etude de l'influence de la méthode d'optimisation sur la fiabilité du modèle NRTL.....	32
III.3.1.1 Système 01 :(heptane(1)-benzène(2)-acide acétique, nitrile(3) à 20c°).....	32
III.3.1.2 Système 2 :(heptane(1)-benzène(2)-acide acétique, nitrile(3) à 45c°).....	35
III.3.1.3. Système 3 :(Phénol(1) –amine, triéthyle (2)-eau(3) à 15c°)	37
III.3.1.4 Système 4 :(benzène(1)-pyridine(2)-eau(3) à 25c°).....	40
III.3.1.5. Système 5 :(Glycérol (1)– éthanol(2) –méthane, tetrachloro (3) à 25c°).....	43
III.3.1.6 Système N° 06 :(Benzène, isopropyle (1) -2 propanone(2)-acide formique, amide(3) à 25c°).....	45
III.3.1.7. Système N° 07 :(Eau (1) -Acide formique(2)-Ethane,1,2-Dichloro (3) à 30c°	48
III.3.1.8. Système N° 08 :(Methane,Tetrachloro(1) –Nicotine (2)- Eau(3) à 25C°)..	50
III.3.1.9. Système N° 09 :(Toluene (1) –Acide propanouique (2)-Eau (3) à 31C°)..	52
III.3.2 Etude de l'influence de la variation de coefficients de répartition non aléatoire (α) sur la fiabilité du modèle NRTL.....	56

III.3.2.1 Système N°06 :(Benzène, isopropyle (1) -2 propanone(2)-acide formique, amide(3) à 25c°).....	56
III.3.2.2. Système N° 07 :(Eau (1) -Acide formique(2)-Ethane,1,2-Dichloro (3) à 30c°	59
III.3.2.3. Système N° 08 :(Methane,Tetrachloro(1) –Nicotine (2)- Eau(3) à 25C°)..	61
III.3.2.4 Système N° 09 : (Toluene (1) –Acide propanouique (2)-Eau (3) à 31C°)...	64
Conclusion.....	65
Références bibliographiques.....	66
Conclusion générale.....	67

Abstract

The experimental measurements of phase equilibrium data are not always easy to perform. Moreover, whatever the used method, these measures are laborious and expensive for a large number of systems. It is therefore essential to have reliable thermodynamics models able to predicting phase equilibrium data. As a result, the improvement and study of the reliability of these models has been the aim of many research.

This work is devoted to the study of the influence of the optimization method and the influence of the variation of non-random distribution coefficients (α) on the reliability of the NRTL model for the prediction of ternary liquid-liquid equilibria.

Comparing with the DECHEMA data base, the results obtained showed a good representation of the considered systems, which confirms the accuracy of the values of the non-random distribution coefficients and estimated interaction parameters as well as the robustness of the used optimization method .

Keywords :

liquid-liquid equilibria, thermodynamic model, activity coefficients, optimization, genetic algorithm, DECHEMA , interaction parameter, NRTL model.