

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

Université – Constantine -3-
Faculté du génies des procédés
Pharmaceutiques



Mémoire de fin d'étude pour l'obtention du diplôme Master

Thème

**Modélisation des systèmes
ternaire liquide par le modèle NRTL**

Option : génie chimique

Dirigé par :

M^{me} : N.OUTILI

Réalisé par :

M^r : LALOUANI BRAHIM.

M^r : KERABCHI NASSIM.

Année : 2013/2014

II.8	La méthode de Simplexe Nelder-Mead.....	page 25
II.8.1	Simplexe.....	page 26
II.8.2	Direction	page 27
II.9	Conclusion.....	page 29

Chapitre III: Résultat et discussions.

II.1	Introduction	page 30
III.2	Système étudié	page 30
III.3	Critères de sélection du solvant	page 30
III.3.1	La sélectivité	page 31
III.3.3	Coefficient de distribution	page 31
III.3.3	Propriétés physique.....	page 32
III.4	Utilisation du modèle thermodynamique	page 33
III.4.1	Optimisation des paramètres d'interaction du modèle NRTL	page 34
III.4.2	Calcul des équilibres	page 36
III.5	Conclusion	page 42

Résumé :

Les liquides ioniques ont été identifiés en tant qu'une des nouvelles classes des solvants qui donnent la possibilité de transformer les procédés chimiques traditionnels en technologies propres et vertes grâce à leurs propriétés physico-chimiques favorables telle que leur non-volatilité dans l'atmosphère.

L'étude des équilibres de phases est très importante pour la conception, l'optimisation et le contrôle des opérations de transformations et séparations. L'optimisation des procédés de séparation est l'une des branches les plus importantes dans la conception des procédés.

L'objectif de ce travail, est d'exploiter les données expérimentales d'équilibre liquide-liquide des systèmes ternaires contenant les liquides ioniques comme des solvants pour calculer de nouveaux paramètres d'interaction de les comparé a un solvant organique bien défini pour le modèle thermodynamique NRTL Général, et Les valeurs optimales de ces paramètres ont été obtenues par un programme de calcul en Matlab utilisant la fonction intrinsèque `fminsearch`, basé sur la méthode d'optimisation du Simplexe de Nelder-Mead.

L'examen de résultats a permis de conclure que le modèle NRTL Général, donne de bonne prédictions pour les 3 systèmes étudiés, avec une erreur standard moyenne entre les fractions molaires expérimentales et calculées de 1.625 %.

Mots clés : Liquides ioniques, équilibre liquide-liquide, optimisation, paramètres d'interaction, NRTL Généralisé, Matlab utilisant la fonction intrinsèque `fminsearch`, basé sur la méthode d'optimisation du Simplexe de Nelder-Mead.

Abstract :

Ionic Liquids have been identified as one of the new classes of solvents that offer opportunities to transform traditional chemical processes into clean, green technologies grace to theirs favorable physicochemical properties, such as their non volatility in the atmosphere.

The study of Equilibria is very important for the design, optimization and control of transformations and separations operations. The optimization of the separation process is one of the most important branches in process design.

The objective of this work is to use the experimental liquid-liquid equilibria data of ternary systems involving ionic liquids as solvents for the estimation of new interaction parameters of the thermodynamic model general NRTL. The optimal values of these parameters have been obtained by a calculation program of Matlab using the `fminsearch` intrinsic function, based on the optimization method of Nelder-Mead simplex of.

The examination of the results permitted to conclude that the NRTL model give better predictions for the 41 studied systems, with root mean square deviation between experimental and calculated compositions about 1.625 %.

Keywords : Ionic liquids, liquid-liquid equilibria, optimization, interaction parameters, general NRTL, Matlab using the `fminsearch` intrinsic function, based on the optimization method of Nelder-Mead simplex
