

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



FACULTE DE GENIE DES PROCEDES
DEPARTEMENT DE GENIE PHARMACEUTIQUE

N° d'ordre :

Série :

Mémoire de Master

Filière : **Génie des procédés**

Spécialité : **Génie Pharmaceutique**

**Etude prédictive de l'extraction du phénol de l'eau en
utilisant différents solvants via le modèle NRTL**

Dirigé par :

Dr. BOUNAB Nardjess

Présenté par :

TALBI Mouna

ELGOUACEM Amani

MEZEN Abir Hayeet

Année Universitaire 2022/2023

Session : Juin 2023

Liste des figures	
Liste des tableaux	
Nomenclature	
Introduction générale	1
CHAPITRE I : L'extraction et Les équilibres liquide-liquide	
I.1.introduction	2
I.2.Classification des systèmes d'extraction liquide-liquide	2
I.3. Extraction par solvant	3
I.3.1. Principe	3
I. 3.2. Solvant	4
I.3.2.1. Choix- de solvant	4
I.3.2.2.Les Risque Liés A Utilisation Des Solvants et solutions	5
I.4.Principales méthodes d'extraction liquide-liquide	5
I.5.Extraction liquide-liquide et les équilibres de phases	6
I.5.1.Paramètres d'équilibre liquide-liquide ou d'extraction liquide-liquide	6
I.5.1.1.Coefficient de partage ou de distribution	6
I.5.1.2.Sélectivité	7
I.6.Représentation de l'équilibre liquide-liquide	8
I.6.1.Différents types de système ternaire	8
I.7.Application industrielle de l'extraction liquide-liquide	9

CHAPITRE II: Modèles de coefficient d'activité

II.1.Introduction	11
II.2.Classification des modèles	11
II.3.Modèles semi-prédictifs	12
II.3.1.Modèles de Van Laar	12
II.3.2 Modèles de Margules	13
II.3.3.Scatchard-Hamer	13
II.3.4. Modèle de Wilson	13
II.3.5. Modèle UNIQUAC.	14
II.3.6. Modèle NRTL	15
II.4. Modèles prédictifs	16
II.4.1.Modèle UNIFAC	17
II.4.1.1. UNIFAC Original	17
II.4.1.2. UNIFAC modifié (Dortmund)	18
II.3.Conclusion	19

CHAPITRE III : Modélisation et méthode d'optimisation utilisée

III.I.Introduction	20
III.2.Notions thermodynamiques nécessaires à la modélisation des ELL	20
III.2.1.Le potentiel chimique d'un système thermodynamique	20
III.2.2.Un système en équilibre liquide-liquide	21
III.3.Modélisation	22
III.3.1.Les variables de décision	23
III.3.2. La fonction objective	23
III.4.Méthode d'optimisation utilisée	24
III.4.1.Algorithme Génétique « AG »	24

III.4.2.Fonctionnement des AG	24
III.4.3.Les différents opérateurs de l'AG	25
III.5.Le calcul des équilibres liquide-liquide ternaire à l'aide d'un AG	27

CHAPITRE IV : Résultats et discussion

IV.1 Introduction	29
IV.2 Systèmes considérés	29
IV.3 Les paramètres de l'algorithme génétique	29
IV.4 Résultats et discussion	30
IV.4.1 Système N°1 : Naphtalène (1) -Phénol (2) -eau (3) à T=298K	31
IV.4.2.Système N°2 : Acide acétique (1) - Phénol (2) -eau (3) à T=317,4K	33
IV.4.3.Système N°3 Amine (1) - Phénol(2) - eau(3) à T=308K	36
IV.4.4.Système N°5 Pentanone (1)-Phénol(2)- eau (3) à T=303	38
IV.4.5.Système N°5 Aniline(1)-Phénol(2)- eau (3) à T=369,7K	41
IV.4.6.Système N°6 Benzène (1) - Phénol (2)- eau (3) à T=298K	43
IV.5. Évaluation de la qualité des résultats obtenus	46
IV.6. Conclusion	48
Conclusion Générale	
Références bibliographique	
Annexes	

Liste des figures

Liste des figures

Figure	Page
Figure I.1 : Principe d'extraction liquide-liquide.	4
Figure I.2 : Courbe de partage ou de distribution	7
Figure 1.3 : Types de diagrammes ternaires	9
Figure II.1 : Cellules élémentaires d'un mélange à n constituants	15
Figure III.1 : Concepts de base d'un Algorithme Génétique	25
Figure III.2 : Le croisement	26
Figure III.3 : La mutation	26
Figure III.4 : Organigramme d'un algorithme génétique	27
Figure III.5 : Algorithme de calcul des compositions	28
Figure IV. 1: Courbe de solubilité de systèmes : Naphetalane(1)-phénol (2) - eau(3) a T=298K	31
Figure IV. 2: Les courbes de distributions du phénol dans le solvant (Naphetalane)	33
Figure IV.3: Courbe de solubilité de systèmes : Acide acétique (1)-phénol (2) - eau(3) a T=317,4K	34
Figure IV.4 : Les courbes de distributions du phénol dans le solvant (Acide acétique)	35
Figure IV.5 : Courbe de solubilité de systèmes : Amine(1)-phénol (2) -eau(3) a T= 308K	37

Figure IV. 6 : Les courbes de distributions du phénol dans le solvant (Amine)	38
Figure IV. 7 : Courbe de solubilité de systèmes : Pentanone (1)-phénol (2) -eau(3) a T=303K	39
Figure IV.8 : Les courbes de distributions du phénol dans le solvant (Pentanone)	40
Figure IV. 9 : Courbe de solubilité de systèmes : Aniline (1)-phénol (2) -eau(3) a T=369,7K	42
Figure IV.10: Les courbes de distributions du phénol dans le solvant (Benzène)	43
Figure IV.11 : Courbe de solubilité de systèmes : Benzène (1)-phénol (2) -eau(3) a T=298K	44

Liste des tableaux

Liste des tableaux :

Tableau	Page
Tableau II.1 : Classification des modèles de calcul du coefficient d'activité	11
Tableau III.1 : Vocabulaire mathématique ou codage	27
Tableau IV.1: Les systèmes considérés	29
Tableau IV. 2 : Les valeurs des paramètres utilisées dans l'algorithme génétique pour 6 systèmes considérés	30
Tableau IV. 3: les paramètres d'interaction du système 1	31
Tableau IV. 4 Les compositions expérimentale et prédites du phénol dans le solvant (Naphetalane) en utilisant les paramètres d'interaction rapportes dans la littérature à T=298	31
Tableau IV. 5 : Coefficients de distribution et facteur de sélectivité du système : Naphetalane(1)-phénol (2) -eau(3)	32
Tableau IV.6: les paramètres d'interaction du système 2	33
Tableau IV.7: Les compositions expérimentale et prédites du phénol dans le solvant (Acide acétique) en utilisant les paramètres d'interaction rapportes dans la littérature à T=317,4K	34
Tableau IV.8: Coefficients de distribution et facteur de sélectivité du système : Acide acétique(1)- phénol (2) -eau(3) a T=317,4K	35
Tableau IV.9: les paramètres d'interaction du système 3	36

Tableau IV.10: La composition expérimentale et prédites du phénol dans le solvant (Amine) en utilisant les paramètres d'interaction rapporte dans la littérature à T=308K	36
Tableau IV.11: Coefficients de distribution et facteur de sélectivité du système : Amine (1)- phénol (2) -eau(3) a T=308 K	37
Tableau IV. 12: les paramètres d'interaction du système 4	38
Tableau IV. 13 : Les compositions expérimentale et prédites du phénol dans le solvant (Pentanone) en utilisant les paramètres d'interaction rapportes dans la littérature à T= 303K	39
Tableau IV. 14: Coefficients de distribution et de sélectivité du système : Pantanone (1) -Phénol (2) -eau (3) à T= 303K	40
Tableau IV.15 : les paramètres d'interaction du système 5	41
Tableau IV.16 : Les compositions expérimentale et prédites du phénol dans le solvant (Aniline) en utilisant les paramètres d'interaction rapportes dans la littérature à T=369,7 k	41
Tableau IV.17 : Coefficients de distribution et de sélectivité du système : Aniline(1) -Phénol (2) -eau (3) à T=369,7K	42
Tableau IV.18 : les paramètres d'interaction du système 6	43
Tableau IV.19 : Les compositions expérimentale et prédites du phénol dans le solvant (Benzène) en utilisant les paramètres d'interaction rapportes dans la littérature à T= 298K	44
Tableau IV.20: Coefficient de distribution et de sélectivité du système : Benzène (1) -Phénol (2) -eau (3) à T=298K	45
Tableau IV.21 : la déviation moyenne absolue	46

Résumé

Notre travail consiste à prédire les données d'équilibre de l'extraction liquide-liquide du phénol de l'eau en utilisant le modèle NRTL. Nous avons testé six systèmes ternaires différents : naphthalène/phénol/eau, acide acétique/phénol/eau, amine/phénol/eau, pentanone/phénol/eau, aniline/phénol/eau et benzène/phénol/eau, à différentes températures et à pression atmosphérique. Les données d'équilibre prédites entre les phases ont été utilisées pour étudier la faisabilité de l'extraction du phénol de l'eau.

Les valeurs des coefficients de partage calculées sont supérieures à 1. Donc, l'extraction du phénol de l'eau est réalisable pour les six solvants testés. Cependant, parmi ces solvants, le pentanone s'est avéré être le plus efficace pour cette extraction, notamment à une température de 298 K, car son coefficient de partage est plus élevé par rapport aux autres solvants.

L'accord entre les données expérimentales et les résultats obtenus a prouvé la fiabilité du modèle NRTL et a confirmé également la robustesse de la méthode d'optimisation choisie « Algorithme Génétique »

Mot clé : Extraction liquide-liquide, équilibre liquide-liquide, paramètre d'interaction, Algorithme génétique, phénol, DMA, NRTL.

Abstract

Our work consists in predicting the equilibrium data of the liquid-liquid extraction of phenol from water using the NRTL model. We tested six different ternary systems: naphthalene/phenol/water, acetic acid/phenol/water, amine/phenol/water, pentanone/phenol/water, aniline/phenol/water and benzene/phenol/water, at different temperatures and at atmospheric pressure. The predicted equilibrium data between the phases was used to investigate the feasibility of extracting phenol from water.

The values of the partition coefficients calculated are greater than 1. Therefore, the extraction of phenol from water is possible for the six solvents tested. However, among these solvents, pentanone proved to be the most effective for this extraction, especially at a temperature of 298K, according to its highest partition coefficient compared to the other solvents.

The agreement between the experimental data and the results obtained proved the reliability of the NRTL model and also confirmed the robustness of the chosen optimization method "Genetic Algorithm".

Keywords: Liquid-liquid extraction, liquid-liquid balance, interaction parameter genetic algorithm, phenol, DMA, NRTL.

ملخص

اختبرنا ستة أنظمة ثلاثية NRTL. مهمتنا هي التنبؤ ببيانات التوازن لاستخراج الفيول السائل من الماء باستخدام نموذج مختلفة: النفثالين/الفيول/الماء، حمض الخليك/الفيول/الماء، الأمين/الفيول/الماء، البننتانول/الفيول/الماء، الأنيلين/الفيول/الماء والبنزين/الفيول/الماء، في درجات حرارة مختلفة وضغط جوي. تم استخدام بيانات التوازن المتوقعة بين المراحل للتحقيق في جدوى استخراج الفيول من الماء

قيم معامل التقسيم المحسوب أكبر من 1. لذلك، فإن استخراج الفيول من الماء ممكن عمليًا للمذيبات الستة التي تم اختبارها. ومع ذلك، من بين هذه المذيبات، أثبت البننتانول أنه الأكثر فعالية لهذا الاستخراج، خاصة عند درجة حرارة 298 كلفن، لأن معامل التقسيم أعلى من المذيبات الأخرى

وأكدت أيضًا متانة طريقة NRTL أثبتت الاتفاقية بين البيانات التجريبية والنتائج التي تم الحصول عليها موثوقية نموذج «التحسين المختارة» الخوارزمية الجينية

الكلمات الرئيسية: استخراج سائل سائل، توازن سائل، معمة تفاعل، خوارزمية جينية، فيول،

.DMA, NRTL