

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENTS SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE CONSTANTINE 3



**FACULTE DE GENIE DES PROCÉDES
DEPARTEMENT DE GENIE PHARMACEUTIQUE**

N° d'ordre :

Série :

Mémoire de Master

**ETUDE PREDICTIVE DES EQUILIBRES LIQUIDE-LIQUIDE
BINAIRES EN UTILISANT LE MODELE UNIFAC A L'AIDE
D'UN ALGORITHME GENETIQUE**

Filière : Génie de procédés

Spécialité : Génie pharmaceutique

Dirigé par :

Mme BOUNEB Nardjess

Présenté par :

MOUAT Aida

BARA Manel

MAZOUZ Roumeissa

ANNÉE UNIVERSITAIRE 2022/2023

SESSION : JUIN

Table des matières

Liste des figures	I
Liste des tableaux	II
Nomenclature.....	IV
Introduction générale	1
Références bibliographiques citée dans l'introduction générale	

Chapitre I : Les équilibres liquide-liquide

I.1. Introduction	5
I.2. Etat d'équilibre thermodynamique	5
I.3. Le potentiel chimique d'un système thermodynamique	5
I.4. Les équilibres liquide-liquide (ELL)	7
I.4.1 Les conditions d'équilibre	7
I.4.2. Calcul des équilibres liquide- liquide	9
I.4.3 La représentation graphique des ELL	9
I.4.3.1. Le diagramme de phases	10
I.4.3.2.Types de diagrammes d'équilibre liquide-liquide pour un système binaire	10
a) Diagrammes d'équilibre liquide-liquide de type ELL-1	10
b) Diagrammes d'équilibre liquide-liquide de type ELL-2	11
c) Diagrammes d'équilibre liquide-liquide de type ELL-3	12
I.5. Conclusion	12

Références bibliographiques chapitre I

CHAPITRE II : LES MODELES THERMODYNAMIQUES

II.1. Introduction	16
II.2. Les modèles thermodynamique pour calculer le coefficient d'activité	16
II.2.1. Modèle Semi-prédictifs	17
II.2.1.1. Modèle de Margules	17
II.2.1.2. Modèle de Van Laar	17
II.2.1.3. Modèle de Wilson	18

II.2.1.4. Modèle NRTL (Non-Random Two Liquid)	18
II.2.1.5. Modèle UNIQUAC.....	20
II.2.2. Les modèles prédictifs de contribution de groupes.....	20
II.2.2.1. Principe de contribution de groupes.....	20
II.2.2.2. Modèle UNIFAC de FREDENSLUND (1975).....	21
a. Partie combinatoire	21
b. La partie résiduelle	22
II.2.2.3.Modification du modèle UNIFAC (Gmehling et al. Dortmund)	22
a. Terme combinatoire.....	23
b. Terme résiduel.....	23
II.2.2.4.UNIFAC Modifiée (Lyngby)	23
II.2.2.5.Les avantages du modèle UNIFAC	24
II.3. Conclusion	24

Références bibliographiques chapitre II

CHAPITRE III : MODELISATION ET METHODES D'OPTIMISATION

III.1. Introduction	28
III.2.Modélisation	28
III.2.1. Variable de décision	29
III.2.2.Fonction objective	29
III.3. Algorithme Génétique « AG »	29
III.3.1. Définition et principe de base	29
III.3.2. Le codage	30
III.3.2.1.Codage binaire	30
III.3.2.2. Codage réel	30
III.3.3. La population initiale	31
III.3.4. Les principaux Operateurs d'un AG	31
III.3.4.1. La sélection	31
III.3.4.2. Le Croisement	31
III.3.4.3. Mutation	32
III.4. Un AG pour la prédiction d'ELL d'un mélange binaire	32

Références bibliographiques chapitre III

CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV.1. Introduction	36
IV.2. Les systèmes considérés	36
IV.2.1. Système N ⁰ 1 : Pentane (1) -eau (2)	37
IV.2.2. Système N ⁰ 2 : Phénol (1) - eau (2)	38
IV.2.3. Système N ⁰ 3 : Toluène (1) - eau(2)	40
IV.2.4. Système N ⁰ 4 : Aniline (1) -eau (2)	41
IV.2.5. Système N ⁰ 5 : Phénol (1) - Octane(2)	43
IV.2.6. Système N ⁰ 6 : Ethanol (1) – Hexadecane (2)	44
IV.2.7. Système N ⁰ 7 : 2-Propanone(1)-Hexadecane(2)	46
IV.2.8.Système N ⁰ 8 : Methanol (1)-Hexadecane(2)	47
IV.2.9.Système N ⁰ 9 : AceticAcid, Methyl ester (1)-eau (2)	49
IV.3.Evaluation des résultats	50

Références bibliographiques chapitre IV

Conclusion générale	54
---------------------------	----

Résumé

الملخص:

الهدف من هذا العمل هو دراسة والتعمق في استخدام نموذج UNIFAC لتنبؤ بيانات التوازن الثنائي بين السائل والسائل. لهذا، تم النظر في 9 أنظمة.

تم إجراء التنبؤ ببيانات التوازن باستخدام مصفوفة (بخار-السائل) القديمة لمعاملات تفاعل المجموعة لنموذج UNIFAC وأيضاً تم باستخدام المصفوفة الجديدة التي تم إنشاؤها من خلال تراجع البيانات التجريبية للأنظمة (السائلة والسائلة).

أثبت التوافق بين البيانات التجريبية والنتائج المتحصل عليها مصداقية نموذج UNIFAC ودقة معاملات التفاعل بين مجموعات المصفوفة القديمة لغالبية الأنظمة.

الكلمات المفتاحية: نموذج UNIFAC ، معاملات التفاعل، توازن (سائل- سائل).

Résumé

L'objectif de ce travail est d'étudier, et d'approfondir, l'utilisation du modèle UNIFAC pour prédire les données d'équilibres liquide- liquide binaires. Pour cela, 9 systèmes ont été considérés.

La prédiction des données d'équilibre a été réalisée en utilisant l'ancienne matrice liquide-vapeur des paramètres d'interaction entre groupes du modèle UNIFAC et aussi en utilisant la nouvelle matrice établie en régressant les données expérimentales des systèmes liquide- liquide.

L'accord entre les données expérimentales et les résultats obtenus a prouvé la fiabilité du modèle UNIFAC et l'exactitude des paramètres d'interaction entre groupes de l'ancienne matrice pour la majorité des systèmes.

Mots clés : modèle UNIFAC, paramètres d'interaction, équilibre liquide-liquide.

Abstract

The objective of this work is to study, and deepen, the use of the UNIFAC model to predict binary liquid-liquid equilibrium data. For this, 9 systems were considered.

The prediction of the equilibrium data was carried out using the old liquid-vapor matrix of group interaction parameters of the UNIFAC model and also using the new matrix established by regressing the experimental data of the liquid-liquid systems.

The agreement between the experimental data and the results obtained proved the reliability of the UNIFAC model and the accuracy of the interaction parameters between groups of the old matrix for the majority of systems.

Key words: UNIFAC model, interaction parameters, liquid-liquid equilibrium.