

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

**Prédiction de la solubilité L-S par les
modèles thermodynamiques UNIFAC et
GC-NRTL .**

Dirigé par:

Dr. MOUDJARI Youcef

Présenté par :

SOHBI Zoubaida

BICHAOUI Hadjer

GOURARI Imen

Année Universitaire 2022/2023.

Session : juin

Table de matière

Liste des tableaux	i
Liste des figures	ii
Nomenclature	iii
Introduction générale	1

Chapitre I

Revue Bibliographique et aspects théoriques

Introduction.....	1
I. Représentation thermodynamique des équilibres liquide- solide.....	3
I.1 Notion de la Solubilité.....	3
I.2 Définition d'une phase.....	4
I.3 Condition d'équilibre.....	4
I.4 Modèle de Coefficients d'activité.....	7
I.4.1 Modèle semi prédictifs.....	8
I.4.1.1 Modèle de Van Laar et Margules.....	8
I.4.1.2 Modèle de Wilson.....	9
I.4.1.3 Modèle NRTL.....	11
I.4.1.4 Modèle UNIQUAC.....	12
I.4.2 Modèle prédictifs.....	13
Introduction.....	13
I.4.2.1 Modèle ASOG.....	14
I.4.2.2 Modèle UNIFAQ.....	15
I.4.2.3 UNIFAQ Gmehling (modèle de Dortmund).....	19
I.4.2.4 UNIFAQ Larsen (modèle de Lyngby).....	20
Références bibliographique.....	22

Chapitre II

Modèle *GC-NRTL*

Introduction.....	24
II.1 Aspect théorique du modèle (<i>GC- NRTL</i>)	24
II.1.1 Origine du modèle (<i>GC- NRTL</i>).....	24
II.1.2 Le concept de contribution de groupes	25
II.1.3 Groupements fonctionnels.....	25
II. 2 L'équation (<i>GC- NRTL</i>).....	27
II. 2.1 Contribution combinatoire.....	28
II. 2.2 La contribution résiduelle.....	31
II. 3 Motivations d'utiliser (<i>GC- NRTL</i>)	32
II. 3.1 Les limites de l'UNIFAC	32
II. 3.2 la fiabilité de modèle <i>NRTL</i>	33
Références bibliographique	34

Chapitre III

Résultats et discussion

III.1 Prédiction de la solubilité	35
III.1. 2 Propriétés des corps purs	35
III.1. 3 Systèmes considérés	36
III.1. 4 Résultat obtenus	54
Discussion des résultats obtenus	73
Références bibliographique	74
Conclusion générale.....	75

Annexe

الملخص :

الهدف الأساسي لهذا العمل هو الدراسة بتعمق في كيفية استعمال النموذج الترموديناميكي لحساب وتقدير ذوبانية الجزيئات المعقدة في مذيبات مختلفة. ولهذا استعملنا خمس مواد ذات استخدامات مختلفة وهي :

Ibuprofène, Acide benzoïque, Paracétamol, Acide salicylique, Naphtalèn .

النماذج المستعملة هي UNIFAC ، GC-NRTL ، وهما نماذج تنبؤية قائمة على مفهوم مساهمة المجموعات يحتوي هذا العمل على تقدير وتنبؤ 18 نظام ثنائي (صلب-سائل) عن طريق مقارنة GC-NRTL و UNIFAC النتائج تظهر بأن الذوبانية المقدره بنموذج GC-NRTL في اتفاق جيد مع نظيرتها التجريبية. أين نجد الفارق المطلق $AAD = 0.4261\%$ بالعكس مع النتائج المتحصل عليه عن طريق النموذج فان $AAD = 1.6602\%$

الكلمات المفتاحية: توازن صلب-سائل الذوبانية. GC-NRTL المعاملات التفاعلية UNIFAC

Résumé :

L'objectif principal de ce travail est d'étudier, et d'approfondir, l'utilisation de modèles thermodynamique pour prédire la solubilité de molécules complexes dans différents solvants. Pour cela, cinq molécules à différents usages sont prises pour référence : l'ibuprofène, le paracétamol, l'acide salicylique, l'acide benzoïque et le naphthalène. Les modèles étudiés sont GC-NRTL et UNIFAC qui sont des modèles prédictifs basés sur le concept de contribution de groupe.

ce travail consiste à la prédiction des diagrammes de phases des équilibres liquide-solide pour 18 systèmes binaires par les modèles GC-NRTL et UNIFAC. La comparaison de ces résultats nous a montré que les solubilités prédites par GC-NRTL sont en très bon accord avec celles expérimentales dont la déviation absolue moyenne AAD est égale **0.4261 %**, contrairement à celles obtenues par UNIFAC dont AAD est **1.6602 %**..

Les résultats de cette étude ont permis de mieux évaluer les capacités et limites de modèle GC-NRTL.

Mots-clés : Equilibre L - S, Solubilité, GC-NRTL, paramètres d'interaction entre groupes, UNIFAC.

Abstract:

The main objective of this work is to study, and to deepen, the use of thermodynamic models to predict the solubility of complex molecules in different solvents. For this, five molecules with different uses are taken as reference:

ibuprofen, paracetamol, salicylic acid, benzoic acid and naphthalene.

The models studied are GC-NRTL and UNIFAC which are predictive models based on the concept of group contribution. this work consists in the prediction of phase diagrams of liquid-solid equilibrium for 18 binary systems by the GC-NRTL and UNIFAC models.

The comparison of these results showed us that the solubility's predicted by GC-NRTL are in very good agreement with those experimental whose average absolute deviation AAD is equal to 0.4261%, contrary to those obtained by UNIFAC whose AAD is 1.6602%.

The results of this study made it possible to better assess the capabilities and limitations of the GC-NRTL model.

Keywords: L - S equilibrium, Solubility, GC-NRTL, interaction parameters between groups, UNIFAC.