

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

UNIVERSITE CONSTANTINE 3



**Faculté de Génie des Procédés
Département : Génie Chimique**

N° d'ordre :... ..

Série :... ..

Mémoire de Master

Filière : Génie des procédés

Spécialité : Génie Chimique

**Modélisation des équilibres L-S par un modelé
Prédictif base sur le concept de contribution de
groupes**

Dirigé par:

Dr : MOUDJARI YUCEF

Présenté par :

**KEMMOUCHE Chahinez
MEKHLOUFI Dounya
MOSBAH Ouissam**

Année Universitaire 2023/2024.

Session : (juin)

Résumé:

L'objectif principal de ce travail consiste à la prédiction des diagrammes de phases des équilibres liquide-solide pour seize 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 relative absolue moyenne AAD est égale 5,3601 %, contrairement à celles obtenues par UNIFAC dont AAD est 8,3617 %.

les mots clés : GC-NRTL , UNIFAC , équilibres liquide solide , solubilité, Contribution des groupes

Summary:

The main objective of this work consists of the prediction of phase diagrams of liquid-solid equilibria for sixteen binary systems by the GC-NRTL and UNIFAC models. The comparison of these results showed us that the solubilities predicted by GC-NRTL are in very good agreement with those experimental ones whose average absolute relative deviation AAD is equal to 5.3601%, unlike those obtained by UNIFAC whose AAD is 8.3617 %.

key words: GC-NRTL, UNIFAC, liquid solid equilibria, solubility, Contribution of groups

الملخص:

التنافية الستة عشر للأنظمة (سائل صلب) الحالة توازن بأنظمة والتنبؤ التقدير إلى يهدف العمل هذا بواسطة نماذج

و UNIFAC مقارنة هذه النتائج تظهر بأن الذوبانية المقدرة بنموذج GC-NRTL في اتفاق جيد م GC-NRTL

يساوي 5,3601% بالعكس مع النتائج AAD نظيرتها التجريبية أين نجد متوسط الفارق النسبي المطلق 8,3617% يساوي AAD أين نجد UNIFAC المتحصل عليها عن طريق نموذج

الكلمات المفتاحية

GC-NRTL، UNIFAC، وزن صلب_سائل، مساهمة المجموعات، المعاملات التفاعلية

TABLE DE MATIERE

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

CHAPITRE I

I. Représentation thermodynamique des équilibres liquide – solide.....	3
I. 1. Définition d'une phase.....	3
I.2. Le diagramme de phase.....	3
I.3. Théorie de cristallisation.....	4
I.4. La solubilité.....	5
I.5. Equilibre des phases.....	5
I. 6. Condition d'équilibres.....	5
I.7. Les modèles de coefficient d'activité.....	10
I.7.1 Modèles semi-prédictifs.....	10
I.7.1.1 Modèle UNIQUAC.....	11
I.7.1.2 Modèle NRTL.....	12
I.7.2 Les modèles prédictifs.....	13
I.7.2.1 Modèle UNIFAC.....	14
I.7.2.2 Modèle (GC- NRTL)	17
Références bibliographiques	

CHAPITRE II

II.1 Aspect théorique du modèle (GC-NRTL)	20
II.1.1 Origine du modèle (GC-NRTL)	20
II.1.2 Groupements fonctionnels.....	20
II.2 Développement du modèle (GC-NRTL)	21
II.2.1 L'équation (GC-NRTL)	21
II.2.1.1 La partie combinatoire.....	22
II.2.1.2 La partie résiduelle.....	25
II.3 Motivations d'utiliser (GC-NRTL)	26
II.3.1 les limite de le UNIFAC.....	26
II.3.2 la fiabilité de modèle NRTL.....	27
Références bibliographiques	

CHAPITRE III

III.1 Prédiction de la solubilité.....	28
III.1.2 Propriétés des corps purs.....	28
III.1.3 Systèmes considérés.....	29
III.2 Résultats obtenus.....	46
III.2.1 Discussion des résultats obtenus.....	62
Références bibliographiques	
Conclusion générale.....	64
Annexe	