

**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 PHARMACETIQUE**

N° d'ordre :

Série :

Mémoire de Master

Filière : Génie des procédés

Spécialité : Génie pharmaceutique

**Etude de l'influence de la variation de la température sur les
paramètres d'interaction binaires du modèle NRTL en
utilisant un Algorithme Génétique (AG)**

Dirigé par :

Mme. BOUNNEB NARDJESS

Présenté par :

BOURBIA Abderrahim

BOUDOUDA Abdelmounaim Ayoub

BOUGHACHICHE Abderrahmen

DEGDEG Achraf

Année Universitaire 2024/2025

Session : Juin

Table de matières

Liste des figures.....	I
Liste de tableaux.....	III
Nomenclature.....	V
Introduction générale.....	1
 CHAPITRE I : Les modèles thermodynamiques de calcul du coefficient d'activité	
I.1 Introduction.....	4
I.2 Les types des modèles thermodynamiques.....	4
I.3 Classification des modèles de calcul du coefficient d'activités.....	4
I.4 Modèles semi-prédictifs.....	5
I.4.1 Modèle de Van Laar.....	5
I.4.2 Modèle de Margules.....	6
I.4.3 Modèle de Wilson.....	7
I.4.4 Modèle NRTL.....	8
I.4.5 Modèle UNIQUAC.....	10
I.5 Modèles prédictifs.....	11
I.5.1 Modèle UNIFAC et ses modifications.....	12
I.5.1.1 UNIFAC Original.....	12
I.5.1.2 UNIFAC modifié (Dortmund).....	13
I.5.2 Modèle GC-NRTL (Group Contribution Non Random Two Liquids).....	14
I.6 Conclusion.....	15

CHAPITRE II : Modélisation et optimisation des équilibres liquide-liquide binaires

II.1 Introduction.....	17
II.2 Notions thermodynamiques nécessaires à la modélisation des ELL.....	17
II.2.1 Potentiel chimique d'un système thermodynamique.....	17
II.2.2 Un système en équilibre liquide-liquide.....	18
II.3 Aspect modélisation et optimisation.....	20
II.3.1 Procédure d'optimisation des paramètres d'interaction moléculaires.....	20
II.3.1.1 Les variables de décision.....	20
II.3.1.2 La fonction objective.....	21
II.4 Algorithme Génétique « AG ».....	21
II.4.1 Sur quoi se base un algorithme génétique ?.....	22
II.5 L'Algorithme Génétique « AG » pour le calcul des équilibres.....	25

CHAPITRE III : Résultats et discussion

III.1 Introduction.....	28
III.2 Systèmes considérés.....	28
III.3 Les paramètres de l'Algorithme génétique.....	29
III.4 Résultats et discussion.....	30
III.4.1 Calcul des paramètres d'interaction A_{12} , A_{21} et les compositions pour les 5 premiers systèmes dans les deux phases.....	30
III.4.1.1 Système N°1 « Methanol (1) -Hexadecane (2) ».....	30
III.4.1.2 Système N°2 « 2-Pyrrol-Idone, 1-Methyl (1) - Heptane (2) »	31
III.4.1.3 Système N°3 « 2-Pentanone (1) – Eau (2) ».....	33
III.4.1.4 Système N°4 « Propanoic Acid, 3-Methoxy, Nitrile (1) - Hexadecane (2) »....	34
III.4.1.5 Système N°5 « Propanoic-Acid, 2-Methyl (1) - Eau (2) »	36

III.4.2 Effet de température sur les paramètres d'interactions A12, A21 du modèle NRTL...	37
III.4.2.1 Système N°1 « Methanol (1) – Hexadecane (2) ».....	37
III.4.2.2 Système N°2 « 2-Pyrrol-Idone, 1-Methyl (1) – Heptane (2) ».....	38
III.4.2.3 Système N°3 « Pentanone (1) – Eau (2) ».....	38
III.4.2.4 Système N°4 « Propanoic Acid, 3-Methoxy, Nitrile (1) – Hexadecane (2) »....	39
III.4.2.5 Système N°5 « Propanoic-Acid,2-Methyl (1) – Eau (2) ».....	39
III.4.2.6 Système N°6 « 2-Butanone, 3-Mehyl (1) – Eau (2) ».....	40
III.4.2.7 Système N°7 « Acetic Acid, Butyl Ester (1) – Eau (2) ».....	40
III.4.2.8 Système N°8 « 1,2-Ethanediol (1) – Benzene, Dimethyl (2) ».....	41
III.4.2.9 Système N°9 « Ethanol, 2-Methoxy (1) – Hexadecane (2) ».....	41
III.4.2.10 Système N°10 « 2-Butanone (1) – Eau (2) ».....	42
III.5 Conclusion.....	44
Conclusion générale.....	46
Références bibliographiques.....	47
Annexe	
Résumé	

ملخص :

تعتبر بيانات توازن السائل-السائل ضرورية لتصميم عمليات الفصل، وخاصة الاستخلاص بالمذيبات. يكون القياس التجريبي في بعض الأحيان معقدًا ومكلفًا بالنسبة لعدد كبير من الأنظمة الكيميائية ومن هنا تأتي الحاجة إلى نماذج تنبؤية موثوقة.

لقد تم تطوير العديد من النماذج الديناميكية الحرارية وتم الإبلاغ عنها في الأدبيات. ومن بين هذه النماذج، نموذج NRTL (سائلان غير عشوائيين) الذي أظهر قدرة كبيرة على التنبؤ ببيانات توازن السائل والسائل الموثوقة. ومع ذلك، فإن عيبه الرئيسي هو أنه يتطلب معلمات تفاعل جزيئي غير متوفرة لدرجات حرارة معينة. ولتحقيق هذه الغاية، يهدف هذا العمل إلى دراسة تأثير درجة الحرارة على معلمات التفاعل الثنائي من خلال تقريبها إلى معادلات متعددة الحدود والتي يتم اختبارها بعد ذلك لخمس أنظمة ثنائية سائل-سائل.

أثبت الاتفاق بين النتائج التجريبية و النتائج المتحصل عليها موثوقية نموذج NRTL ودقة معلمات التفاعل الثنائي المحسوبة ومائة الخوارزمية الجينية [AG].

الكلمات المفتاحية : نموذج NRTL , معلمات التفاعل, توازن السائل-السائل.

Résumé

Les données d'équilibre liquide-liquide sont indispensables à la conception des procédés de séparation, notamment l'extraction par solvant. La mesure expérimentale est parfois complexe et coûteuse pour un grand nombre de systèmes chimiques, d'où la nécessité de modèles prédictifs fiables.

De nombreux modèles thermodynamiques ont été développés et sont rapportés dans la littérature. Parmi ceux-ci, le modèle NRTL (Non Random Two Liquids) qui démontré une grande capacité pour prédire des données d'équilibre liquide-liquide fiables. Cependant, son principal inconvénient est qu'il nécessite des paramètres d'interaction moléculaire qui sont indisponibles pour certaines températures. Pour ceci, l'objectif de ce travail est d'étudier l'effet de la température sur les paramètres d'interaction binaires en approximant ces derniers à des équations polynomiales qui sont ensuite testées pour cinq systèmes liquide- liquide binaires.

L'accord entre les données expérimentales et les résultats obtenus a prouvé la fiabilité du modèle NRTL l'exactitude des paramètres d'interaction binaires calculés et la robustesse de l'algorithme génétique [AG].

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

Abstract

Liquid-liquid equilibrium data are indispensable for the design of separation processes, particularly solvent extraction. Experimental measurement is sometimes complex and expensive for a large number of chemical systems; hence the need for reliable predictive models.

Many thermodynamic models have been developed and are reported in the literature. Among these, the NRTL model (Non-Random Two Liquids) demonstrated a great ability to predict reliable liquid-liquid equilibrium data. However, its main disadvantage is that it requires molecular interaction parameters that are unavailable for certain temperatures. For this, the objective of this work is to study the effect of temperature on binary interaction parameters by approximating them to polynomial equations, which are then tested for five binary liquid-liquid systems.

The agreement between the experimental data and the obtained results proved the reliability of the NRTL model, the accuracy of the calculated binary interaction parameters, and the robustness of the genetic algorithm [AG].

Keywords: NRTL model, interaction parameters, liquid-liquid equilibrium.