

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE 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

Prédiction de la solubilité par des modèles basés sur le concept de contribution de groupes.

Dirigé par:

Dr : MOUDJARI YOUSSEF

Présenté par :

BESSIKRI Lamia
BOUGANDOURA Nadjet
BOURAHLA Chourouk

Année Universitaire 2024/2025.

Session : (juin)

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. Notion de la Solubilité.....	3
I.2. Définition d'une phase.....	4
1.3. Conditions d'équilibre	4
I.4. Modèles de Coefficient d'activité.....	8
I.4.1.1 Modèles de Van Laar et Margule.....	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 Modèles prédictifs.....	13
I.4.2.1 Modèle ASOG.....	14
I.4.2.2 Model de UNIFAC.....	15
I.4.2.3 UNIFAC Gmehling (modèle de Dortmund).....	14
I.4.2.4 UNIFAC Larsen (modèle de Lyngby).....	17

CHAPITRE II

II.1 Aspect théorique du modèle (GC-NRTL)	22
II.1.1 Origine du modèle (GC-NRTL)	22
II.1.2 Le concept de contribution de groupes	23
II.1.3 Groupements fonctionnels	23
II.2. L'équation (GC-NRTL)	25
II.2.2 La partie combinatoire.....	25
II.2.1.2 La partie résiduelle.....	29
II.3 Motivations d'utiliser (GC-NRTL)	30
II.3.1 les limite de le UNIFAC.....	30
II.3.2 la fiabilité de modèle NRTL.....	31

CHAPITRE III

III.1 Prédiction de la solubilité.....	32
III.1.2 Propriétés des corps purs.....	32
III.1.3 Systèmes considérés.....	33
III.1.4 Résultats obtenus.....	46
III.2.1 Discussion des résultats obtenus.....	59
Conclusion générale.....	60
Références bibliographiques	
Annexe	

الملخص :

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

Naproxen ,Pyréne ,Fluoréne , Paracétamol, Acide salicylique, Naphtalène.

النمذج المستعملة هي: UNIFAC ، GC-NRTL وهما نماذج تنبؤية قائمة على مفهوم مساهمة المجموعات

يحتوي هذا العمل على تقدير وتتبّؤ 12 نظام ثنائى (صلب-سائل) عن طريق مقارنة UNIFAC و GC-NRTL

النتائج تظهر بأن الذوبانية المقدرة بنموذج GC-NRTL في اتفاق جيد مع نظيرتها التجريبية. أين نجد الفارق المطلق

$AARD = 52.337\%$ $AARD = 85.685\%$ فان UNIFAC بالعكس مع النتائج المتحصل عليه عن طريق النموذج

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, six molécules à différents usages sont prises pour référence : Naproxen ,Pyréne ,Fluoréne , Paracétamol, Acide salicylique et Naphtalène.. 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 12 systèmes binaires par les modèles GC-NRTL et UNIFAC. La comparaison de ces résultats nous a montré que les solubilités prédictes par GC-NRTL sont en très bon accord avec celles expérimentales dont la déviation absolue moyenne AAD est égale **52.337 %**, contrairement à celles obtenues par UNIFAC dont AAD est **85.685 %..**

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.