

**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

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

Dirigé par:

Dr : MOUDJARI YUCEF

Présenté par :

**BESSIKRI Lamia
BOUGANDOURA Nadjat
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 |
| I.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 بتعمق في كيفية استعمال النموذج الترموديناميكي لحساب وتقدير ذوبانية الجزيئات المعقدة في مذيبات مختلفة. ولهذا استعملنا ستة مواد ذات استخدامات مختلفة وهي:

Naproxen ,Pyrène ,Fluorène , Paracétamol, Acide salicylique, Naphtalène.

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

يحتوي هذا العمل على تقدير وتنبؤ 12 نظام ثنائي (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 $AARD = 52.337\%$ بالعكس مع النتائج المتحصل عليه عن طريق النموذج UNIFAC فإن $AARD = 85.685\%$

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 ,Pyrène ,Fluorène , 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 prédites 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.