



Modélisation thermodynamique  
des procédés industriels

# **Equilibre binaire isobare Chloroforme-Ethyl acetate**

Elaboré par :

Amine TAYARI  
Fida HANI  
Marwa KEZDAGHLI LAGHA  
(Groupe 8)

Encadré par :

M. Mourad CHERIF

Année universitaire : 2015-2016

## Sommaire

Liste des figures .....	2
<b>Chapitre 1</b> : Introduction.....	2
<b>Chapitre 2</b> : Caractéristiques de chaque composé .....	4
1) Chloroforme .....	4
a) Présentation et formule .....	4
b) Synthèse .....	4
c) Propriétés .....	5
d) Utilités .....	5
2) Ethyl acetate.....	6
a) Présentation et formule .....	6
b) Synthèse .....	6
c) Propriétés .....	6
d) Utilités .....	7
<b>Chapitre 3</b> : Etude expérimentale de l'équilibre .....	8
1) Données Expérimentales.....	8
2) Détermination des tensions de vapeur saturante .....	9
3) Traçage de la lentille d'équilibre .....	11
4) Calcul de l'enthalpie libre d'excès expérimentale, de $\gamma_1$ et de $\gamma_2$ .....	14
<b>Chapitre 4</b> : Etude de l'équilibre par le modèle réel de Wilson .....	22
1) Equation de Wilson .....	22
2) Calcul numérique de l'équilibre par le modèle de Wilson : .....	22
a) Ajustement des paramètres : .....	23
b) Recalcule des points d'équilibre : .....	27
c) Détermination de l'azéotropie : .....	32
3) Interface Graphique .....	36
<b>Chapitre 5</b> : Conclusion .....	38

## Liste des figures

<b>Figure 1:</b> Formule développée du Chloroforme.....	4
<b>Figure 2:</b> Formule développée de L'éthyle acétate.....	6
<b>Figure 3:</b> Lentille d'équilibre liquide vapeur d'un mélange binaire .....	11
<b>Figure 4:</b> Lentille d'équilibre expérimentale du mélange Chloroforme Ethyl acetate (Nagata).....	13
<b>Figure 5:</b> Lentille d'équilibre expérimentale du mélange Chloroforme Ethyl acetate (El Ghannam) ...	14
<b>Figure 6:</b> Variation de $\gamma_1$ et $\gamma_2$ en fonction de la composition de la phase liquide $x_1$ (Nagata).....	18
<b>Figure 7:</b> Variation de $(GmEx)/RT$ en fonction de la composition liquide $x_1$ (Nagata) .....	19
<b>Figure 8:</b> Variation de $\gamma_1$ et $\gamma_2$ en fonction de la composition de la phase liquide $x_1$ (El Ghannam)..	19
<b>Figure 9:</b> Variation de $(GmEx)/RT$ en fonction de la composition liquide $x_1$ (El Ghannam) .....	20
<b>Figure 10:</b> Variation de $\gamma_1$ et $\gamma_2$ en fonction de $x_1$ (El Ghannam) sans erreurs de saisie .....	20
<b>Figure 11:</b> Variation de $(GmEx)/RT$ en fonction de $x_1$ (El Ghannam) sans erreurs de saisie .....	21
<b>Figure 12:</b> Variation de $(GmE\ exp)/RT$ et $(GmE\ modèle)/RT$ en fonction de $x_1$ (Nagata).....	26
<b>Figure 13:</b> Variation de $(GmE\ exp)/RT$ et $(GmE\ modèle)/RT$ en fonction de $x_1$ (El Ghannam).....	26
<b>Figure 14:</b> Lentille d'équilibre calculée et expérimentale isobare (Nagata) .....	30
<b>Figure 15:</b> Lentille d'équilibre calculée et expérimentale isobare (El Ghannam) .....	30
<b>Figure 16:</b> Variation de la composition $y_1$ en fonction de $x_1$ à $P=1\text{atm}$ (Nagata) .....	33
<b>Figure 17:</b> Variation de la composition de $y_1$ en fonction de $x_1$ à $P=1\text{atm}$ (El Ghannam) .....	34
<b>Figure 18:</b> Variation de la composition $y_1$ en fonction de $x_1$ à $P=5\text{atm}$ (Nagata) .....	34
<b>Figure 19:</b> Variation de la composition $y_1$ en fonction de $x_1$ à $P=5\text{atm}$ (El Ghannam) .....	35
<b>Figure 20:</b> Page d'accueil de l'interface graphique .....	36
<b>Figure 21:</b> Interface intermédiaire .....	36
<b>Figure 22:</b> Interface de consultation des données expérimentales fournies.....	37
<b>Figure 23:</b> Interface de consultation de l'étude du mélange binaire.....	37

## Chapitre 1 : Introduction

De nos jours, les techniques de simulations numériques sont de plus en plus présentes, au sein d'une myriade de disciplines scientifiques, en tant qu'outils exploratoires fort performants. Cela s'avère véridique surtout dans le domaine de génie des procédés, où toute transformation chimique peut en théorie être traduite en modélisation moléculaire.

Cette approche se réfère à un ensemble d'équations mathématiques construit sur la base de données expérimentales acquises sur le système réel. Il s'agit alors de la détermination d'une représentation la plus proche possible du fonctionnement d'un système réel afin d'en analyser le comportement ou de réagir à un comportement.

A l'ombre de ce sujet, nous avons élaboré ce mini projet de modélisation des procédés industriels qui a pour ambition d'apporter un tour d'horizon complet de l'étude de l'équilibre thermodynamique d'un mélange binaire liquide vapeur « Chloroforme Ethyl acetate » expérimentalement et par le biais de la technique de modélisation de Wilson.

Lors de cette étude ultérieurement exposée, nous avons d'emblée présenté les caractéristiques de chaque élément étudié à savoir : le chloroforme et l'Ethyle acétate. Ensuite, nous avons mené l'étude expérimentale du mélange via deux outils informatiques différents qui sont le logiciel tableur de la suite bureautique Microsoft Office Excel et le langage du calcul numérique de la visualisation et de la programmation MATLAB, tout en mettant en œuvre les formules et les équations qui régissent notre système en question. En définitive, nous avons établi le modèle de Wilson qui permettra au bout de cette étude la détermination au juste possible des coordonnées du point azéotropique.

## Chapitre 2 : Caractéristiques de chaque composé

### 1) Chloroforme

#### a) Présentation et formule

Le chloroforme est un liquide hautement volatil. Cependant, les vapeurs de chloroforme ne forment pas de mélanges explosifs avec l'air. Le chloroforme est un excellent solvant pour de nombreux matériaux organiques tels que graisses, huiles, résines, cires, etc. Il est totalement miscible avec de nombreux solvants organiques et dissout l'iode et le soufre.

Le chloroforme forme de nombreux mélanges azéotropiques avec d'autres liquides tels que l'acétone, l'éthanol, l'eau et le méthanol.

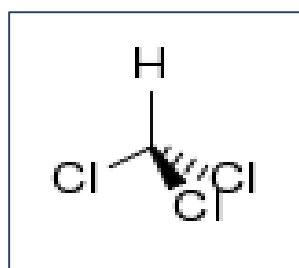


Figure 1: Formule développée du Chloroforme

#### b) Synthèse

La production de chloroforme est liée à celle d'autres chlorocarbones. En effet, on produit le chloroforme par chlorations successives du méthane ou de l'éthanol. Un autre procédé utilisant le méthanol comme réactif au lieu du méthane est le mélange de chloration/hydrochloration qui permet d'éviter la séparation de l'acide chlorhydrique du méthane lors du recyclage du réactif non utilisé.

Il peut être obtenu industriellement par réaction du fer et d'acide sur le tétrachlorométhane. On peut aussi obtenir du chloroforme plus simplement en traitant l'acétone par le dichlore en présence d'une base. Il se forme par l'intermédiaire de la trichloracétone, substance que la base scinde facilement en chloroforme et en sel acétique.

Néanmoins, cette dernière synthèse peut être assez dangereuse. En effet, il y a un risque de former du phosgène, un gaz très toxique voire mortel qui a été utilisé comme gaz de combat lors de la première guerre mondiale.

## c) Propriétés

### i. Propriétés Physiques :

Nom de la substance	Détails
Chloroforme	Formule CHCL3
	Etat Physique Liquide
	Masse molaire 119,4
	Densité 1,4890
	Point de fusion - 63,5 °C
	Point d'ébullition 61,3 °C

### ii. Propriétés chimiques :

Convenablement stabilisé au moment de sa fabrication par l'addition d'antioxydants (généralement 0,6 à 1 % d'éthanol), le chloroforme ne s'oxyde que très lentement à froid.

Exposé de façon prolongée à l'air ou à la lumière, il se décompose en donnant notamment du chlorure d'hydrogène, du chlore et du dichlorure de carbonyle.

À température élevée (290 °C pour le liquide et 450 °C pour les vapeurs), la pyrolyse du chloroforme conduit à la formation de divers produits toxiques parmi lesquels on a pu caractériser le chloroforme, le chlorure d'hydrogène, le chlore, le dichlorure de carbonyle et le monoxyde de carbone.

Le chloroforme résiste bien à l'eau à température ordinaire mais il s'hydrolyse à chaud en donnant notamment naissance à de l'acide formique et de l'acide chlorhydrique.

Le chloroforme peut réagir violemment avec l'aluminium, le magnésium, les métaux alcalins et alcalinoterreux, les bases fortes comme la soude et la potasse ainsi que les alcoolates alcalins. Il peut déclencher une réaction explosive avec l'acétone en présence d'une substance basique.

## d) Utilités

Le chloroforme est utilisé dans des domaines divers à savoir : la fabrication d'hydrocarbures chloroformés, l'extraction des huiles essentielles et des alcaloïdes, l'extraction des antibiotiques, hormones, nicotine, quinine, vitamines, dans l'industrie des produits pharmaceutiques. Il peut être également utilisé en tant qu'un solvant et un agent de purification dans l'industrie des matières plastiques.

## 2) Ethyl acetate

### a) Présentation et formule

L'acétate d'éthyle est un liquide incolore, volatil, d'odeur fruitée perceptible à des concentrations de l'ordre de 3,9 ppm. Il est soluble dans l'eau (83 g/L à 20 °C). Son hydro-solubilité diminue lorsque la température augmente (64 g/L à 25 °C).

L'acétate d'éthyle est miscible à de nombreux solvants organiques à savoir : éthanol, acétone, oxyde de diéthyle, chloroforme etc.

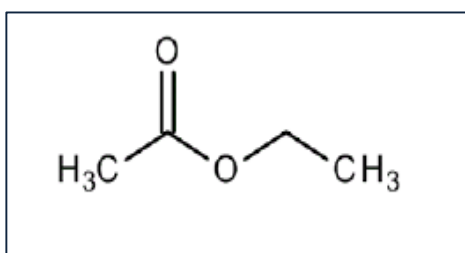
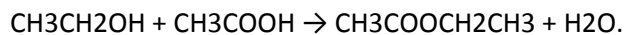


Figure 2: Formule développée de L'éthyle acétate

### b) Synthèse

L'acétate d'éthyle est synthétisé par le procédé d'estérification de Fischer, résultant d'une réaction entre l'acide acétique et l'éthanol. Un acide, tel l'acide sulfurique, catalyse la réaction :



Étant donné que cette réaction est réversible et engendre un équilibre chimique, le rendement est faible à moins que l'eau soit éliminée. En laboratoire, l'acétate d'éthyle peut être séparé de l'eau en utilisant le procédé de Dean-Stark.

### c) Propriétés

#### i. Propriétés physique :

Nom de la substance	Détails
<b>Acétate d'éthyle</b>	<b>Formule</b> C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>
	<b>Etat Physique</b> Liquide
	<b>Masse molaire</b> 88,12
	<b>Densité</b> 0,90

<b>Acétate d'éthyle</b>	<b>Point de fusion</b>	- 83 °C
	<b>Point d'ébullition</b>	77,1 °C

## *ii. Propriétés chimiques :*

Dans les conditions normales, l'acétate d'éthyle est un produit stable. Toutefois, il s'hydrolyse assez facilement au contact de l'eau, y compris l'humidité de l'air, en formant de l'acide acétique et de l'éthanol. Cette réaction est plus rapide en présence de catalyseurs, en particulier les acides et les bases.

L'acétate d'éthyle réagit vigoureusement avec les oxydants puissants, et la réaction peut être violente avec risque d'incendie et d'explosion. Il se décompose (hydrolyse) avec les acides forts et les bases fortes : la réaction est exo thermique et peut être vive.

Il n'est pas corrosif pour les métaux usuels : fer, aluminium, acier, cuivre, nickel et leurs alliages. Toutefois, l'acide acétique libéré en cas d'hydrolyse de l'acétate d'éthyle peut provoquer la corrosion de certains métaux, notamment du cuivre. L'acétate d'éthyle dégrade certains caoutchoucs et matières plastiques.

## **d) Utilités**

L'acétate d'éthyle est un solvant utilisé dans de nombreuses applications, notamment en tant qu' : un solvant de la nitrocellulose, de peintures, vernis, encres d'imprimerie, adhésifs et matières plastiques, un constituant de diluants spéciaux, un solvant d'extraction dans l'industrie alimentaire, un solvant de procès dans l'industrie pharmaceutique, la synthèse organique, la fabrication de poudre sans fumée, etc.



## Chapitre 3 : Etude expérimentale de l'équilibre

### 1) Données Expérimentales

Les données expérimentales d'équilibre du mélange liquide-vapeur pour le système en question « Chloroforme Ethyl acetate » à la pression atmosphérique étaient fournies dans le but de mener l'étude nécessaire pour la conception d'un système de valorisation des effluents incluant une séparation des deux composés du mélange binaire.

La finalité capitale de l'étude du système binaire « Chloroforme Ethyl acetate » est de confirmer, vers la fin, s'il se présente, à une pression prédéfinie, un azéotrope et d'en déterminer ses coordonnées le plus précisément possible.

Nous soulignons que les composés du mélange binaire seront numérotés comme suit :

N°	Formule	Nom de la substance
1	CHCl <sub>3</sub>	Chloroforme
2	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	Ethyl acetate

Nous procéderons postérieurement à une étude expérimentale au sein de laquelle nous nous servirons de deux types de données fournies :

- Données relatives à l'expérience de Nagata (1962):

x <sub>1</sub>	y <sub>1</sub>	T [K] expérimentale (Nagata)
0,071	0,064	350,65
0,11	0,102	350,75
0,14	0,134	350,85
0,174	0,171	350,95
0,223	0,227	350,95
0,259	0,27	350,65
0,301	0,323	350,45
0,365	0,408	349,95
0,448	0,522	349,15
0,504	0,596	348,25
0,528	0,628	347,85

x1	y1	T [K] expérimentale (Nagata)
0,581	0,7	346,65
0,65	0,78	344,95
0,704	0,839	343,55
0,751	0,879	342,05
0,79	0,91	340,85
0,856	0,95	338,75
0,922	0,978	336,85

■ Données relatives à l'expérience El-Ghannam (1972):

x1	y1	T [K] expérimentale (El Ghannam)
0,045	0,039	350,35
0,13	0,12	350,65
0,201	0,21	350,55
0,274	0,295	350,45
0,311	0,327	350,25
0,349	0,389	350,15
0,368	0,422	349,75
0,385	0,44	349,65
0,438	0,518	349,15
0,504	0,602	348,35
0,558	0,665	347,45
0,611	0,718	346,55
0,651	0,785	345,35
0,754	0,882	342,15
0,831	0,935	339,95
0,894	0,96	337,65
0,946	0,979	335,25

## 2) Détermination des tensions de vapeur saturante

La pression de vapeur saturante est la pression à laquelle la phase gazeuse d'une substance est en équilibre avec sa phase liquide ou solide à une température donnée dans un système fermé. Elle est calculée par la corrélation d'Antoine :

$$\ln(p^{\sigma}) = A - \frac{B}{C + T}$$

Tels que : A, B et C représentent les paramètres du modèle d'Antoine,  $p^{\sigma}$  en (mmHg) et  $T$  en (K).

### ► But recherché

Etant donné que chaque ligne du tableau des données expérimentales fournies représente une expérience d'équilibre liquide-vapeur qui, dans le cas d'un corps pur, ne peut se produire qu'à la pression de saturation correspondant à la température considérée, nous pouvons, donc, suite à la corrélation d'Antoine calculer les pressions de vapeur saturante à chaque température.

### ► Etapes suivies

Pour ce faire, nous avons eu recours à Excel, un logiciel tableur de la suite bureautique Microsoft Office, qui nous a permis d'effectuer les calculs nécessaires.

### ► Résultats issus

Les valeurs obtenues sont alors consignées dans les tableaux qui suivent :

#### ■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

x1	y1	T [K] expérimentale (Nagata)	ln (p1*)	ln (p2*)	p1* [mmHg]	p2* [mmHg]
0,071	0,064	350,65	7,116455936	6,6439339	1232,076	768,1107
0,11	0,102	350,75	7,119363695	6,64717221	1235,664	770,6021
0,14	0,134	350,85	7,122269546	6,65040831	1239,26	773,0999
0,174	0,171	350,95	7,12517349	6,65364221	1242,864	775,6041
0,223	0,227	350,95	7,12517349	6,65364221	1242,864	775,6041
0,259	0,27	350,65	7,116455936	6,6439339	1232,076	768,1107
0,301	0,323	350,45	7,110634684	6,63745066	1224,925	763,147
0,365	0,408	349,95	7,09604802	6,62120383	1207,187	750,8484
0,448	0,522	349,15	7,072609221	6,59509315	1179,221	731,497
0,504	0,596	348,25	7,046092184	6,5655471	1148,362	710,2003
0,528	0,628	347,85	7,034256051	6,55235679	1134,85	700,8941
0,581	0,7	346,65	6,998558581	6,51256718	1095,054	673,5533
0,65	0,78	344,95	6,947496329	6,45563058	1040,541	636,2748
0,704	0,839	343,55	6,905006718	6,40823408	997,2552	606,8211
0,751	0,879	342,05	6,859035953	6,35693521	952,4484	576,4769
0,79	0,91	340,85	6,821922386	6,31550553	917,7476	553,0816
0,856	0,95	338,75	6,756241116	6,24215398	859,4057	513,9644
0,922	0,978	336,85	6,695997482	6,17483918	809,1607	480,5057

■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

x1	y1	T [K] expérimentale (El Ghannam)	ln (p1*)	ln (p2*)	p1* [mmHg]	p2* [mmHg]
0,045	0,039	350,35	7,107721187	6,63420573	1221,361	760,6746
0,13	0,12	350,65	7,116455936	6,6439339	1232,076	768,1107
0,201	0,21	350,55	7,113546266	6,64069339	1228,496	765,6257
0,274	0,295	350,45	7,110634684	6,63745066	1224,925	763,147
0,311	0,327	350,25	7,104805775	6,63095858	1217,806	758,2086
0,349	0,389	350,15	7,101888444	6,62770922	1214,258	755,7489
0,368	0,422	349,75	7,090199901	6,61468954	1200,148	745,9731
0,385	0,44	349,65	7,087272951	6,61142906	1196,64	743,5448
0,438	0,518	349,15	7,072609221	6,59509315	1179,221	731,497
0,504	0,602	348,35	7,049046322	6,56883901	1151,76	712,5421
0,558	0,665	347,45	7,022388489	6,53913014	1121,462	691,6846
0,611	0,718	346,55	6,995570918	6,50923649	1091,787	671,3137
0,651	0,785	345,35	6,959563181	6,46908786	1053,173	644,8952
0,754	0,882	342,15	6,862115166	6,36037193	955,3857	578,4615
0,831	0,935	339,95	6,793888247	6,28420255	892,3766	536,0367
0,894	0,96	337,65	6,721458945	6,2032934	830,0276	494,3745
0,946	0,979	335,25	6,644651797	6,11743963	768,6624	453,7016

Le calcul des valeurs de la pression de vapeur saturante nous servira par la suite dans le calcul de l'enthalpie libre d'excès du mélange binaire, objet de notre étude.

### 3) Traçage de la lentille d'équilibre

Après avoir calculé les pressions de vapeur saturante relatives au système d'étude « Chloroforme Ethyl acetate », il est indispensable de tracer la lentille d'équilibre constituée des deux courbes mises en relief dans la figure démonstrative qui suit :

\*La courbe (a) : Intitulée la courbe de rosée, elle représente l'ensemble des points où apparaît la première goutte de liquide lorsqu'on refroidit de la vapeur.

\*La courbe (b) : Intitulée la courbe de d'ébullition, elle représente l'ensemble des points où apparaît la première goutte de vapeur lorsqu'on chauffe le liquide.

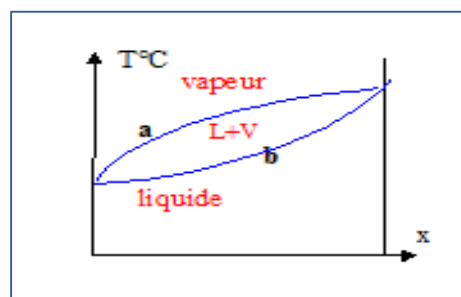


Figure 3: Lentille d'équilibre liquide vapeur d'un mélange binaire

### ► But recherché

Afin de repérer les éventuelles erreurs de saisie pouvant avoir lieu, nous allons tracer la lentille d'équilibre isobare et conclure ainsi quant à l'allure de la courbe relative à notre mélange binaire.

### ► Etapes suivies

En vue de tracer le diagramme de la lentille isobare liquide vapeur en question, nous avons utilisé le logiciel du calcul scientifique MATLAB.

Tout d'abord, nous avons procédé à l'introduction des données expérimentales fournies, sous MATLAB, par la fonction nommée « **donnee\_exp\_avant** » :

#### ■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

```
function [X,Y,T]=donnee_exp_avant()

%Données relatives à Nagata

X= [0.071 0.11 0.14 0.174 0.223 0.259 0.301 0.365 0.448 0.504 0.528 0.581
0.65 0.704 0.751 0.79 0.856 0.922];

Y= [0.064 0.102 0.134 0.171 0.227 0.27 0.323 0.408 0.522 0.596 0.628 0.7
0.78 0.839 0.879 0.91 0.95 0.978] ;

T= [350.65 350.75 350.85 350.95 350.95 350.65 350.45 349.95 349.15 348.25
347.85 346.65 344.95 343.55 342.05 340.85 338.75 336.85];

end
```

#### ■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

```
function [X,Y,T]=donnee_exp_avant()

%Données relatives à El_Ghannam

X= [0.045 0.13 0.201 0.274 0.311 0.349 0.368 0.385 0.438 0.504 0.558 0.611
0.651 0.754 0.831 0.894 0.946];

Y= [0.039 0.12 0.21 0.295 0.327 0.389 0.422 0.44 0.518 0.602 0.665 0.718
0.785 0.882 0.935 0.96 0.979] ;

T= [350.35 350.65 350.55 350.45 350.25 350.15 349.75 349.65 349.15 348.35
347.45 346.55 345.35 342.15 339.95 337.65 335.25];

end
```

L'appel à la fonction « **Courbelentille** » ci-dessous permet le traçage ultérieur du diagramme de la lentille d'équilibre du mélange binaire:

```
Function Courbelentille( )

[X,Y,T]=donnee_exp_avant()

%Tracer la lentille d'équilibre : courbe de bulle et de rosée
[AX,H1,H2]=plotyy(X,T,Y,T)
hold on
legend('T=f(x1)', 'T=f(y1)')
xlabel('x1,y1')
ylabel('T(K)')
title('Variation de la température en fonction des fractions molaires
liquide x1 et vapeur y1')
grid on

set (H1,'LineStyle','*')
set (H2,'LineStyle','*')

end
```

#### ► Résultats issus

Nous obtenons alors les courbes d'ébullition et de rosée expérimentales suivantes :

#### ■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

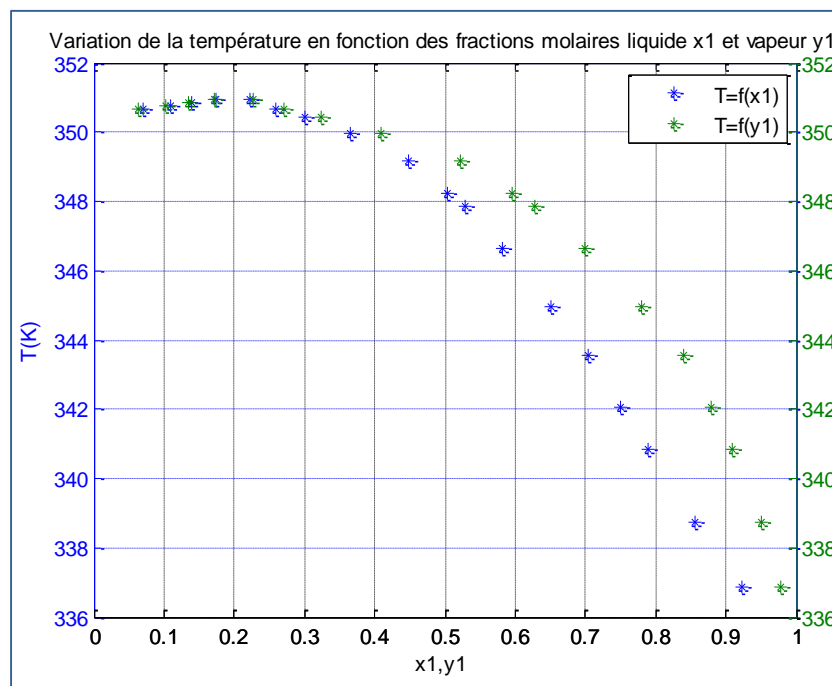


Figure 4: Lentille d'équilibre expérimentale du mélange Chloroforme Ethyl acetate (Nagata)

■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

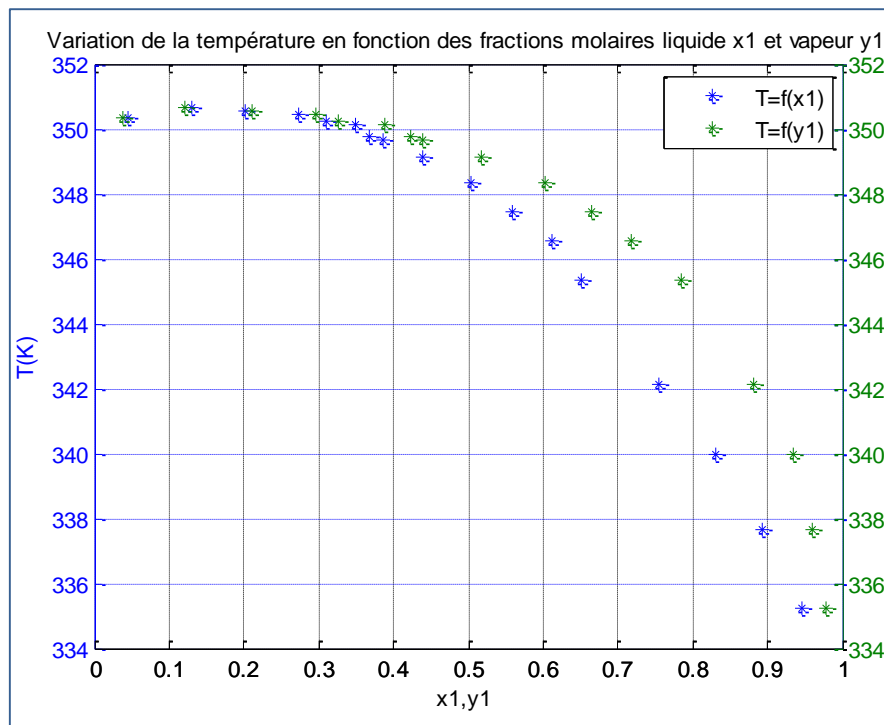


Figure 5: Lentille d'équilibre expérimentale du mélange Chloroforme Ethyl acetate (El Ghannam)

Nous constatons que les courbes d'ébullition et de rosée ne sont pas monotones. Néanmoins, elles présentent une déviation. Alors, nous pouvons prévoir que le mélange est azéotrope. En effet, nous soulignons qu'un mélange azéotrope est un mélange liquide qui bout à température fixe en gardant une composition fixe. C'est un mélange qui présente, pour une composition particulière, une phase vapeur ayant la même composition que la phase liquide avec laquelle elle est en équilibre.

#### 4) Calcul de l'enthalpie libre d'excès expérimentale, de $y_1$ et de $y_2$

Comme mentionné précédemment, chaque ligne des tableaux des données expérimentales disponibles est relative à l'expérience de l'équilibre liquide-vapeur. Elle vérifie, donc, le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} y_1 * p = x_1 * \gamma_1 * p_1^\sigma \\ y_2 * p = x_2 * \gamma_2 * p_2^\sigma \end{cases}$$

Ces deux équations d'équilibres ainsi que la connaissance des pressions de saturation pour chaque composant en fonction de la température permettent pour chaque donnée expérimentale de trouver les activités  $\gamma_1, \gamma_2$ . Nous pouvons également déterminer l'enthalpie libre d'excès  $\frac{G_m^{Ex}}{RT}$  qui s'exprime par :

$$\frac{G_m^{Ex}}{RT} = x_1 \ln(\gamma_1) + x_2 \ln(\gamma_2)$$

#### ► But recherché

A cette étape, nous calculerons les valeurs des activités de chacun des composants du mélange binaire :  $\gamma_1, \gamma_2$  et par conséquent  $\frac{G_m^{Ex}}{RT}$ , et nous tracerons leurs courbes correspondantes.

#### ► Etapes suivies

Pour ce faire, nous avons défini un nombre de fonctions dont nous expliquons l'utilité ci-dessous : D'abord, nous avons créé la fonction « **Calcul\_G\_gama1\_gama2** » ayant comme entrée la fraction molaire liquide  $x_1$ , la fraction molaire vapeur  $y_1$ , la température  $t$  et la pression  $p$  :

```
function [gam1,gam2,G]= CalculG_gama1_gama2 (x,y,t,p)

A1=15.9732;
B1=2696.79;
C1=-46.16;
A2=16.1516;
B2=2790.5;
C2=-57.15;

psig1=exp(A1-(B1/(C1+t)));
psig2=exp(A2-(B2/(C2+t)));
gam1=(y*p)/(x*psig1);
gam2=((1-y)*p)/((1-x)*psig2);
G=x*log(gam1)+(1-x)*log(gam2);
end
```

Cette dernière est appelée dans le code de la fonction « **calcul** » explicitée ci-après qui renvoie des vecteurs contenant les valeurs de  $\gamma_1, \gamma_2$  et  $\frac{G_m^{Ex}}{RT}$  calculées pour chaque ligne du tableau de données :

```
function [gma1,gma2,GG]=calcul() %Calcul la fonction GmExp/RT dans un
vecteur GG
p=759.975; %Valeur de la pression en mmHg
[X,Y,T]=donnee_exp_avant();
n=length(T);
```



```
%Initialisation des vecteurs gama1,gama2 et GG
gma1=zeros(1,n);
gma2=zeros(1,n);
GG=zeros(1,n);

for i=1:n
    tt=T(i);
    xx=X(i);
    yy=Y(i);
    [gam1,gam2,G] = CalculG_gama1_gama2 (xx,yy,tt,p); %CalculG_gama1_gama2 :
    fonction qui calcule GmEexp/RT à partir des données expérimentales

    gma1(i)=gam1;
    gma2(i)=gam2;
    GG(i)=G;
end

end
```

En définitive, nous définissons deux fonctions «**Courbe\_gama1\_gama2\_Exp** » et « **Courbe\_G** » qui tracent, respectivement, les courbes de  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$  superposées ainsi que celle de  $\frac{G_m^{Ex}}{RT}$  :

```
function Courbe_gama1_gama2_Exp() %La courbe de gama1, gama2
expérimentales

[gma1,gma2,~]=calcul();
[X,~,~]=donnee_exp_avant();

figure(1)
plot(X,gma1,'*')
hold on
plot(X,gma2,'r*')
hold on
grid on
legend('Gama1=f(x1)', 'Gama2=f(x1)')
xlabel('x1')
ylabel('Gama1,Gama2')
title(' Variation de Gama1 et Gama2 en fonction de la fraction molaire
liquide x1 ')
end
```

```
function Courbe_G() %La courbe de GmEexp/RT

[~,~,GG]=calcul();
[X,~,~]=donnee_exp_avant();

figure(1)
plot(X,GG,'*')
hold on
grid on
legend('GmEexp/RT=f(x1)')
xlabel('x1')
ylabel('GmEexp/RT')
title(' Variation de GmEexp/RT en fonction de la fraction molaire liquide
x1 ')
end
```

### ► Résultats issus

Nous avons calculé explicitement les valeurs de  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$  ainsi que celle de  $\frac{G_m^{Ex}}{RT}$  en utilisant le logiciel Excel et nous avons obtenu les résultats expérimentaux qui suivent :

- Données relatives à l'expérience de Nagata :

$\gamma_1$	$\gamma_2$	$G_m^E/RT$
0,556011	0,996863	-0,04459
0,570304	0,995074	-0,06617
0,586967	0,989881	-0,08334
0,600928	0,983408	-0,10243
0,622439	0,974805	-0,12555
0,643022	0,974721	-0,13334
0,665773	0,964501	-0,14771
0,703707	0,943615	-0,16511
0,750925	0,899654	-0,1867
0,782593	0,871602	-0,19171
0,796501	0,85457	-0,19431
0,836153	0,807857	-0,19337
0,876438	0,750774	-0,18606
0,908202	0,681197	-0,18142
0,933914	0,640624	-0,16223
0,953873	0,588889	-0,14851
0,981411	0,513421	-0,11206
0,99626	0,446096	-0,06642

- Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

$\gamma_1$	$\gamma_2$	$G_m^E/RT$
0,539271	1,005357	-0,02269
0,569377	1,000781	-0,07254
0,646322	0,981439	-0,1027
0,667977	0,967038	-0,13489
0,656158	0,979054	-0,14563
0,69761	0,943804	-0,16332
0,726155	0,931723	-0,16245
0,725818	0,93069	-0,16755
0,762184	0,891041	-0,18378

$\gamma_1$	$\gamma_2$	$G_m^E/RT$
0,78814	0,855835	-0,19721
0,807611	0,832748	-0,20013
0,817984	0,820679	-0,19963
0,870138	0,725978	-0,20232
0,930503	0,63019	-0,1679
0,958212	0,545295	-0,13796
0,983197	0,580093	-0,07287
1,023188	0,65141	-0,00146

En l'occurrence, l'appel à ces fonctions pour les deux types de données fournies nous génère les courbes postérieures :

- Données relatives à l'expérience de Nagata :

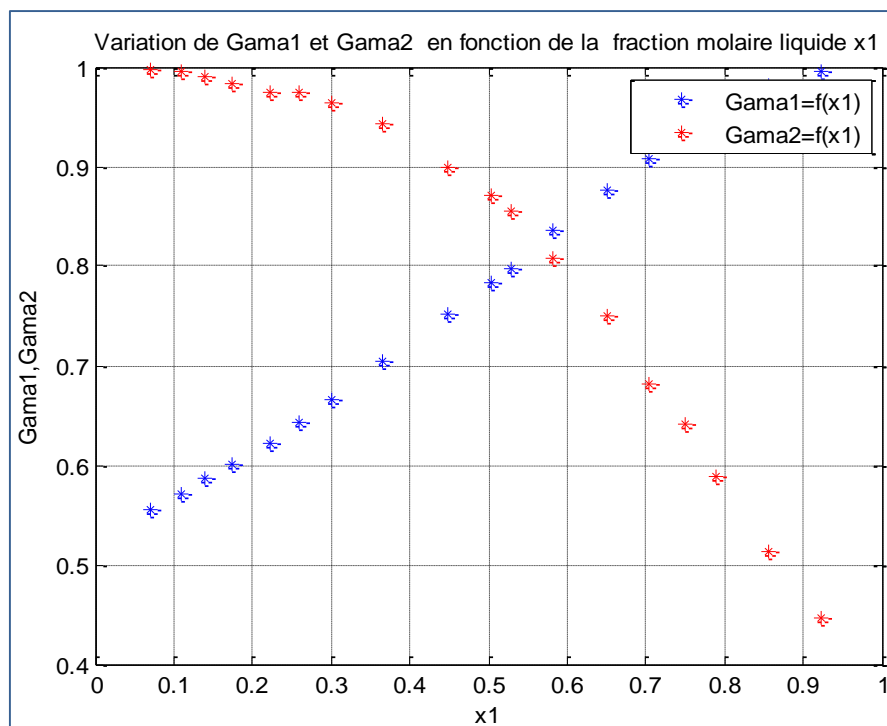


Figure 6: Variation de  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$  en fonction de la composition de la phase liquide  $x_1$  (Nagata)

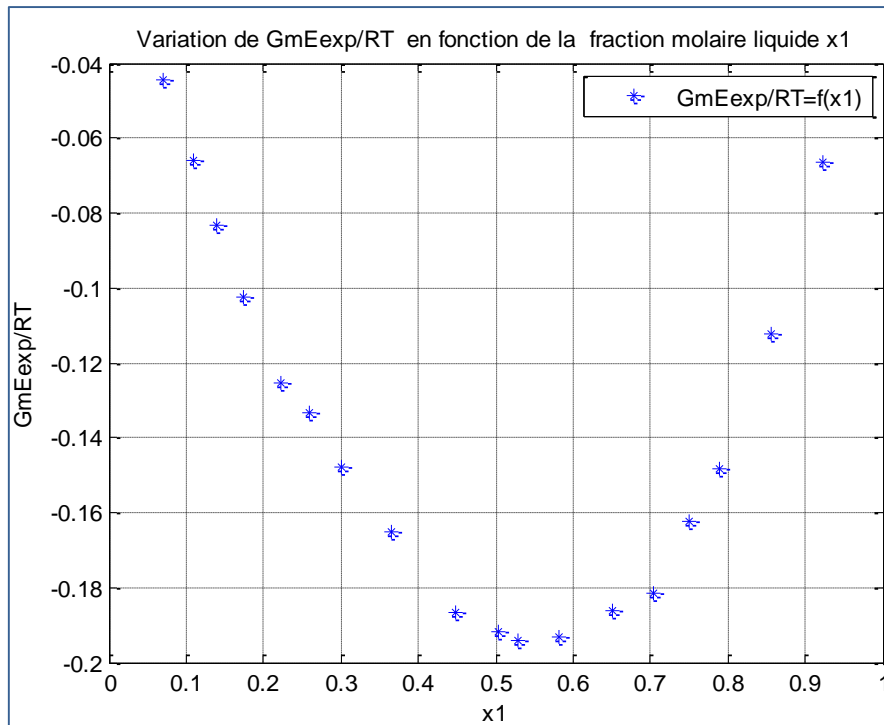


Figure 7: Variation de  $(GmEx)/RT$  en fonction de la composition liquide  $x_1$ (Nagata)

■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

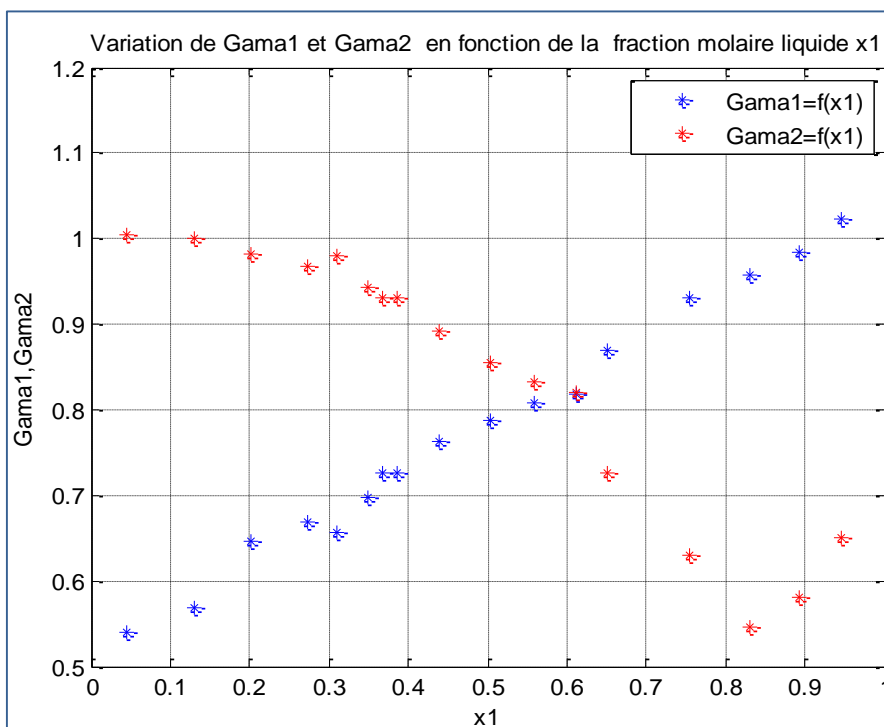


Figure 8: Variation de  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$  en fonction de la composition de la phase liquide  $x_1$  (El Ghannam)

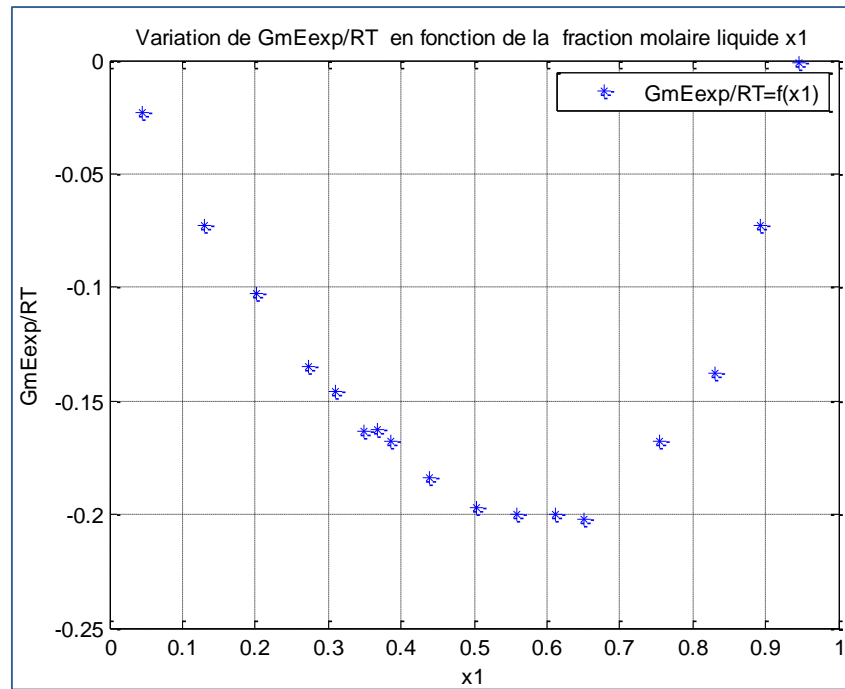


Figure 9: Variation de  $(GmEx)/RT$  en fonction de la composition liquide  $x_1$  (El Ghannam)

Sachant que l'un de nos buts signalés précédemment du traçage des représentations graphiques des données expérimentales fournies est le repérage d'éventuelles erreurs de saisie, nous constatons alors que les graphiques relatifs aux données de l'expérience d'El Ghannam présentent des points erronés pouvant fausser les calculs ultérieurs. En conséquence, nous les avons éliminés et nous avons obtenu les nouvelles courbes suivantes :

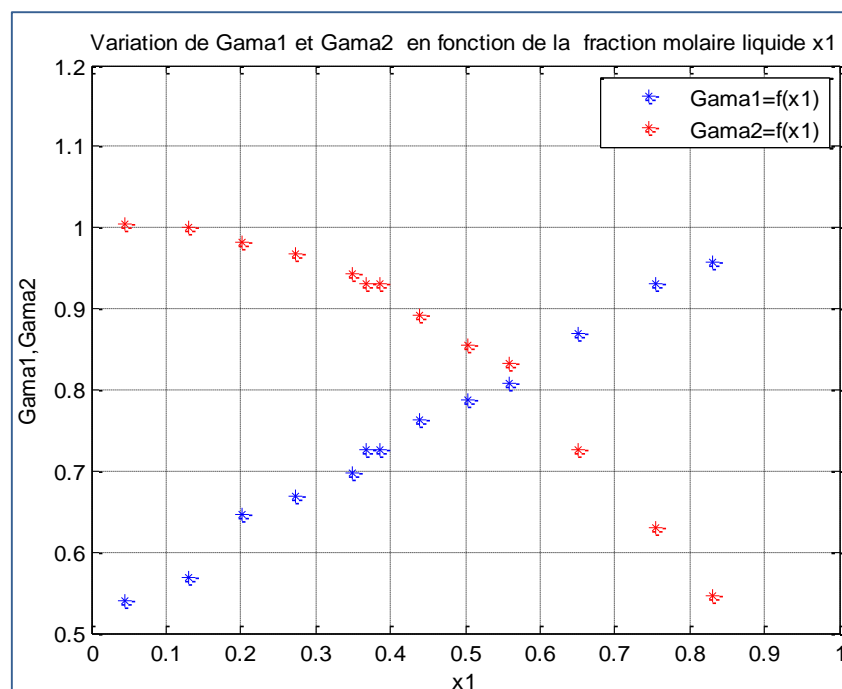


Figure 10: Variation de  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$  en fonction de  $x_1$  (El Ghannam) sans erreurs de saisie

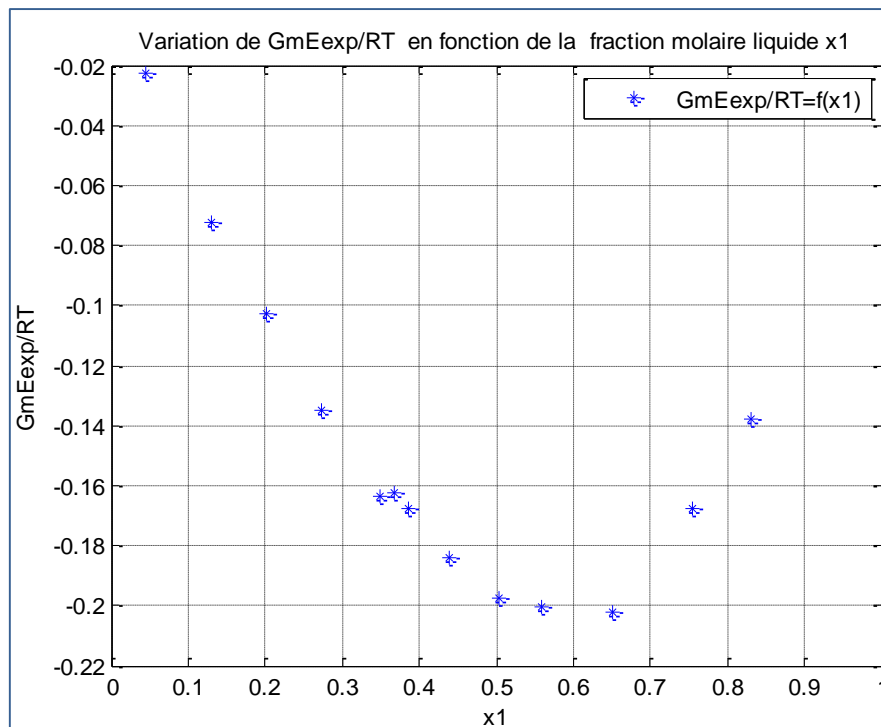


Figure 11: Variation de  $(GmE_{ex})/RT$  en fonction de  $x_1$ (El Ghannam) sans erreurs de saisie

Après avoir évalué les paramètres nécessaires à l'étude expérimentale de l'équilibre liquide-vapeur du mélange binaire « Chloroforme Ethyl acetate », nous aborderons dans le chapitre qui suit une autre étude via le modèle théorique réel de Wilson.

## Chapitre 4 : Etude de l'équilibre par le modèle réel de Wilson

### 1) Equation de Wilson

Le modèle de Wilson est un modèle semi-théorique fondé sur le concept de composition locale et sur la théorie de Flory.

Wilson propose, en prenant appui sur des considérations semi-théoriques, de représenter l'enthalpie libre du mélange de molécules différant par leur taille mais également par leur interaction. En effet, l'énergie de Gibbs molaire d'excès est donnée par la formule subséquente :

$$\frac{g^{ex}}{RT} = - \sum_{i=1}^n x_i \ln \left[ \sum_{j=1}^n \Lambda_{ij} x_j \right]$$

La formule ci-dessus fait allusion à :

$$\Lambda_{ij} = \frac{v_j^l}{v_i^l} \exp \left[ - \frac{\lambda_{ij} - \lambda_{ii}}{RT} \right] \quad \text{Avec } \Lambda_{ii}=1, \forall i.$$

De plus, " $\lambda_{ij} - \lambda_{ii}$ " est un terme d'énergie déterminé empiriquement et, en première approximation, indépendant de la température.

L'expression du coefficient d'activité est donnée par:

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left[ \sum_{j=1}^n x_j \Lambda_{ij} \right] - \sum_{k=1}^n \frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_{j=1}^n x_j \Lambda_{kj}}$$

### 2) Calcul numérique de l'équilibre par le modèle de Wilson :

### a) Ajustement des paramètres :

De prime abord, nous avons calculé et par la suite tracé l'enthalpie libre d'excès  $G_m^E/RT$  en fonction de la composition de la phase liquide et vapeur du mélange binaire en question, par le biais des données expérimentales.

#### ► But recherché

Notre dessein majeur, lors de cette partie, est de présenter  $G_m^E/RT$  par l'expression analytique produite par le modèle réel ci-dessus. En conséquence, Le modèle de Wilson n'exige que deux paramètres ajustables au sein de notre étude (un système binaire) lesquels :  $\lambda_{12}$  et  $\lambda_{21}$  qui sont indépendantes de la température.

#### ► Etapes suivies

En nous servant de l'éditeur de logiciels de calcul MATLAB, nous avons mis en place un programme visant l'obtention de la meilleure représentation de la courbe expérimentale de  $G_m^E/RT$ .

De ce fait, ce programme renvoie les paramètres ajustables qui permettent un écart minimal entre les données expérimentales disponibles d'emblée et celles calculées via le modèle réel choisi.

Un portefeuille de fonctions a été créé à cet essor. En effet, un calcul de  $G_m^E/RT$  à partir des données expérimentales s'impose en premier lieu, au niveau de la fonction MATLAB intitulée « **Calcul ()** » :

```
function [gma1,gma2,GG]=calcul()    %Calcul la fonction GmEexp/RT dans un
vecteur GG

p=759.975; %Valeur de la pression en mmHg
[X,Y,T]=donnee_exp();
n=length(T);
%Initialisation des vecteurs gama1,gama2 et GG
gma1=zeros(1,n);
gma2=zeros(1,n);
GG=zeros(1,n);

for i=1:n
    tt=T(i);
    xx=X(i);
    yy=Y(i);
    [gam1,gam2,G] = CalculG_gama1_gama2 (xx,yy,tt,p); %CalculG_gama1_gama2 :
    fonction qui calcule GmEexp/RT à partir des données expérimentales
    gma1(i)=gam1;
    gma2(i)=gam2;
    GG(i)=G;
end
end
```



Alors, le résultat renvoyé par cette dernière constitue une entrée pour la fonction « **fonc\_diff\_Gexp\_Gmod** » qui sert à calculer l'écart entre les valeurs relatives à l'expérience et le modèle réel.

Un tel écart est à minimiser, ultérieurement, dans la fonction saisie « **mintotal** » qui utilise la fonction MATLAB prédéfinie « **fminsearch** » permettant, en conséquence, d'obtenir au sein de la fonction « **generlam** » les paramètres ajustables  $\lambda_{12}$  et  $\lambda_{21}$  qui représentent au mieux les données expérimentales :

```
function f=fonc_diff_Gexp_Gmod(vect,GG,X,T) %La fonction Gexp - Gmodèle

v1=239; %Volume molaire critique du composé 1
v2=286; %Volume molaire critique du composé 2
R=1.987; %Constante des gaz parfaits

vv1=v1/v2;
vv2=v2/v1;

for i=1:length(X)
x1=X(i);
t1=T(i);
ff=(GG(i)-(-x1*log(x1+vv2*exp(-(vect(1))/(R*t1))*(1-x1))-(1-x1)*log((1-x1)+vv1*exp(-(vect(2))/(R*t1)*x1))))^2; %Calcul des écarts entre la valeur
expérimentale et modèle

VV(i)=ff;
end

f=norm(VV);

end
```

```
function mm=mintotal(GG,X,T)

x0=[0 0];
xx = fminsearch(@(vect) fonc_diff_Gexp_Gmod(vect,GG,X,T),x0);
mm=xx;

end
```

```
function ll=generlam() %Génération d'un vecteur contenant lamda1,lamda2

[~,~,GG]=calcul();
[X,~,T]=donnee_exp();
mm=mintotal(GG,X,T);
ll=mm;

end
```

Finalement, afin de visualiser l'amélioration prévue des données disponibles, nous avons mis en place deux fonctions lesquelles : « **valG** » calculant les valeurs de  $G_m^E/RT$  à partir des paramètres ajustables obtenues et « **modele\_wil** » comparant, sur un même graphique, les valeurs expérimentales de  $G_m^E/RT$  et celles ainsi calculées :

```
function vectG = valG() %Calcul de la valeur de GmE/RT par le modèle de
Wilson

[X,T]=donnee_wilson();
n=length(X);
%Intialisation de G
vectG=zeros(1,n);

ll=generlam();
lam1=ll(1);
lam2=ll(2);

for i=1:n
    vect=[lam1 lam2];
    g=exprG(vect,i,X,T);
    vectG(i) = g;
end

end
```

```
function modele_wil() %La superposition des deux courbes de GmEexp/RT et
GmE/RT calculée par le modèle de Wilson

[~,~,GG]=calcul();
vectG=valG();

[X,~,~]=donnee_exp();
[X2,~]=donnee_wilson();

figure(1)

plot(X,GG, '*')
hold on
plot(X2,vectG, 'g')
grid on
legend('GmEexp/RT=f(x1)', 'GmEmodèle/RT =f(x1)')
xlabel('x1(mol)')
ylabel('GmEexp/RT, GmEmodèle/RT')
title(' Variation de GmEexp/RT et de GmEmodèle/RT en fonction de la
fraction molaire liquide x1 ')

end
```

### ► Résultats issus

Le graphique obtenu de  $G_m^E/RT$  après l'ajustement des paramètres est représenté via les figures suivantes :

#### ■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

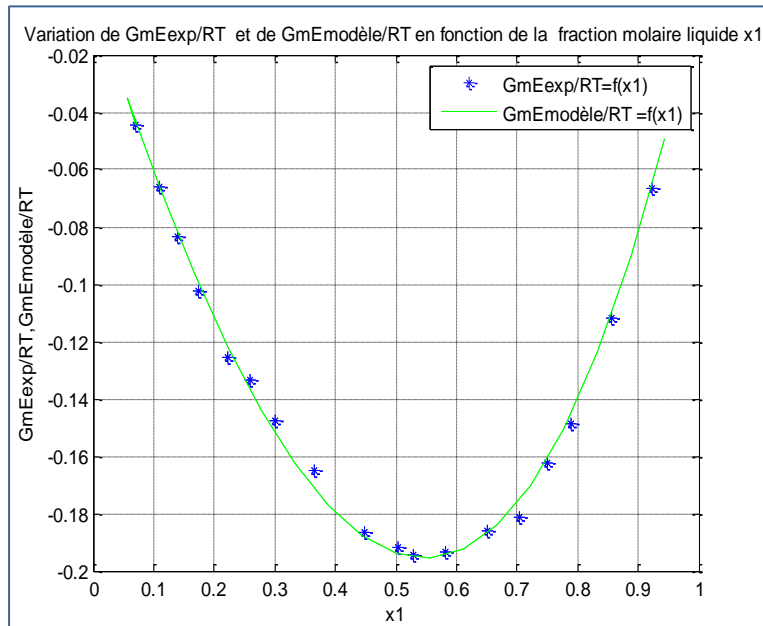


Figure 12: Variation de  $(G_m^E \text{ exp})/RT$  et  $(G_m^E \text{ modèle})/RT$  en fonction de  $x_1$  (Nagata)

#### ■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

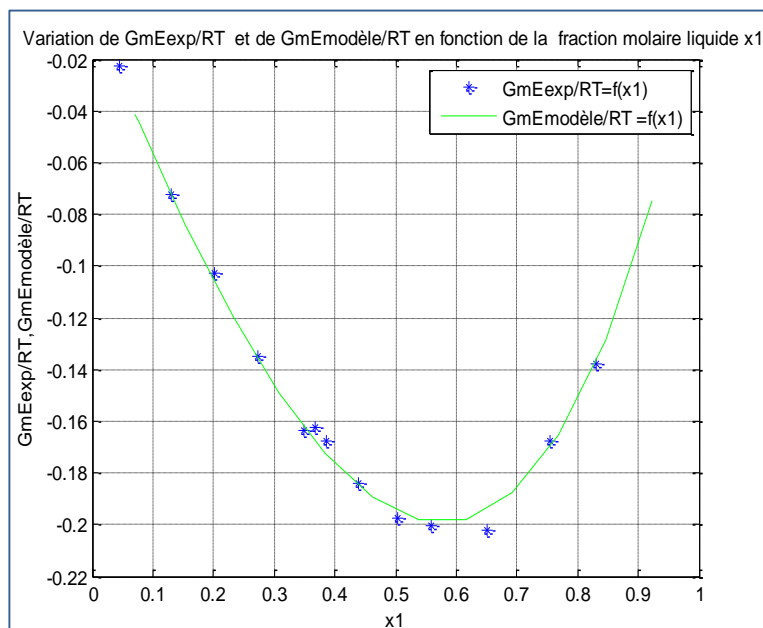


Figure 13: Variation de  $(G_m^E \text{ exp})/RT$  et  $(G_m^E \text{ modèle})/RT$  en fonction de  $x_1$  (El Ghannam)

Nous constatons que ces graphiques valident les paramètres ajustables obtenues  $\lambda_{12}$  et  $\lambda_{21}$  étant donnée que l'écart existant entre les valeurs expérimentales et calculées est minime vu que les données représentées sont presque superposées.

### b) Recalcul des points d'équilibre :

Une fois que nous avons obtenu une meilleure estimation des paramètres par le biais du modèle réel de Wilson, un recalcul des points d'équilibre du mélange binaire étudié, s'avère inéluctable.

#### ► But recherché

Notre objectif est ainsi de déterminer les nouvelles valeurs des températures d'équilibre liquide vapeur  $T_{eq}$  ainsi que la composition de la phase vapeur  $y_1$ .

#### ► Etapes suivies

Nous mettons en exergue que l'état d'équilibre du mélange binaire en question est parfaitement déterminé par les variables subséquentes : la température  $T$ , la pression  $P$  et les compositions de la phase liquide  $x_i$  et de la phase vapeur  $y_i$  en équilibre. De telles variables sont liées par le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \gamma_1(T, p, x) \times x_1 \times p_1^\sigma = y_1 \times p \\ \gamma_2(T, p, x) \times x_2 \times p_2^\sigma = y_2 \times p \\ x_1 + x_2 = 1 \\ y_1 + y_2 = 1 \end{cases}$$

Les formules ci-dessus ainsi que celles relatives aux  $y_i$  énoncées précédemment nous permettent la détermination d'une fonction en  $T$  que nous devons résoudre pour obtenir la valeur de  $T_{eq}$ .

Pour ce fait, nous avons saisi une fonction MATLAB nommée « **Formule\_T** » :

```
function f=Formule_T(T,lamda1,lamda2,x1,p) %La formule permettant la
determination de la temperature de l'equilibre

%Propriétés physiques du composé 1
A1=15.9732;
B1=2696.79;
C1=-46.16;

%Propriétés physiques du composé 2
A2=16.1516;
B2=2790.5;
C2=-57.15;
```

```

R= 1.987; %Constante des gaz parfaits
v1=239; %Volume molaire critique du composé 1
v2=286; %Volume molaire critique du composé 2

val1=(v2/v1)*exp(-lamda1/(R*T));
val2=(v1/v2)*exp(-lamda2/(R*T));
psigma1=exp((A1-(B1/(C1+T))));
psigma2=exp((A2-(B2/(C2+T))));
f1=x1*exp((-log(x1+val1*(1-x1))+(1-x1)*((val1/(x1+((1-x1)*val1)))-
(val2/((1-x1)+val2*x1)))))*psigma1;
f2=(1-x1)*exp((-log((1-x1)+val2*x1)-x1*((val1/(x1+((1-x1)*val1)))-
(val2/((1-x1)+val2*x1)))))*psigma2;

f=p-f1-f2; %La fonction à annuler en T

end

```

L'appel de la fonction « **Formule\_T** » par la fonction ci-dessous « **Equilibre\_T\_y** » nous permet, en premier lieu, en utilisant la fonction MATLAB prédéfinie « fzero » d'obtenir la valeur de  $T_{eq}$  qui servira ultérieurement pour le calcul de la composition de la phase vapeur  $y_1$ :

```

function [Te,y1] = Equilibre_T_y( x1 , p ) %Determination de la
température et de la fraction molaire vapeur de l'équilibre

%Propriétés physiques du composé 1
A1=15.9732;
B1=2696.79;
C1=-46.16;

%Propriétés physiques du composé 2
A2=16.1516;
B2=2790.5;
C2=-57.15;

%Initialisation de la température d'ébullition
Teb1=211.95;
Teb2=350.25;
Tinit=(Teb1+Teb2)/2;

l1=generlam();
lamda1=l1(1);
lamda2=l1(2);

Te = fzero(@(T) Formule_T(T,lamda1,lamda2,x1,p),Tinit); %Determination de
la température d'équilibre

v1=239;
v2=286;
R= 1.987;

val1=(v2/v1)*exp(-lamda1/(R*Te));

```

Après avoir recalculé les points d'équilibre, nous avons créé la fonction «**Superposition\_Lentille** » dont le but est de comparer sur le même graphe le diagramme de la lentille d'équilibre expérimentale et la lentille d'équilibre calculée :

```
Function Superposition_Lentille(p)

[X1,~]=donnee_wilson()

[X,Y,T]=donnee_exp()

np=length(X1);

for i=1:np
[t, y1]=Equilibre_T_y( X1(i) , p );
Y1(i)=y1;
TT(i)=t;
end

[AX,H1,H2]=plotyy(X,T,Y,T)

hold on

set(H1,'LineStyle','*')
set(H2,'LineStyle','*')

plot(X1,TT,'b');
hold on

grid on

plot(Y1,TT,'g');

hold on

legend('T=f(x1exp)', 'T=f(x1mod)', 'T=f(y1mod)', 'T=f(y1exp)')
xlabel('x1exp,x1mod,y1exp,y1mod')
ylabel('T(K)')
title('Variation de la température en fonction des fractions molaires
expérimentale et du modèle liquide x1 et vapeur y1')

end
```

### ► Résultats issus

Les courbes issues de la fonction «**Superposition\_Lentille** » sont représentées dans les figures ultérieures :

■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

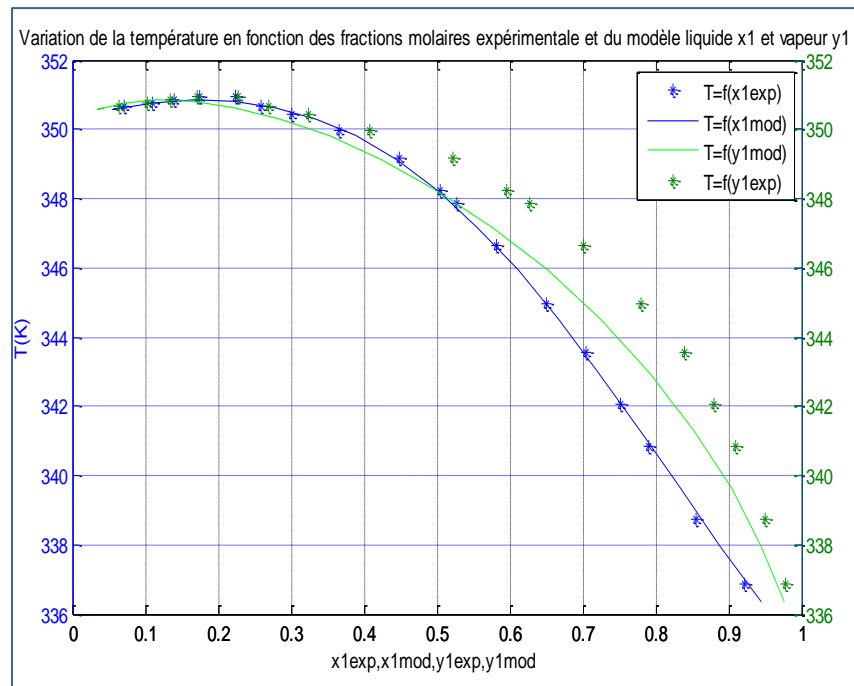


Figure 14: Lentille d'équilibre calculée et expérimentale isobare (Nagata)

■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

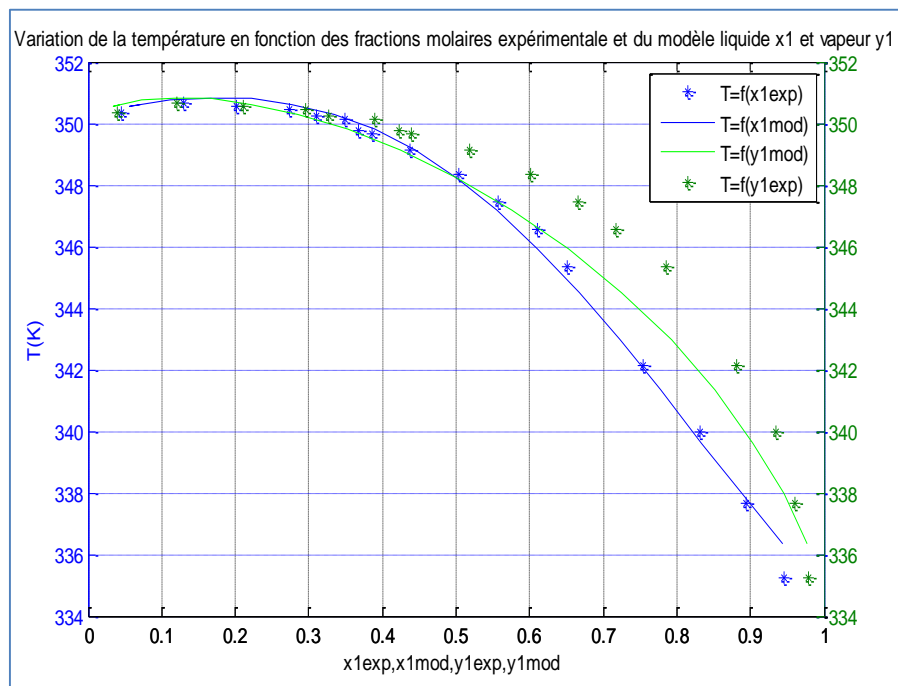


Figure 15: Lentille d'équilibre calculée et expérimentale isobare (El Ghannam)

Nous remarquons que les deux diagrammes (calculé et expérimentale) de la lentille d'équilibre isobare sont superposables. De plus, étant donné qu'il y est question d'un mélange binaire s'écartant de l'idéalité, la présence d'une azéotropie, plus visible dans la lentille d'équilibre relative au modèle, nous permet de conclure quant au bon choix du modèle adopté.

En outre, l'obtention des écarts absolus moyens en température et en composition vapeur proches de zéro, entre les données expérimentales et la modélisation, par la fonction qui suit « **ecartTY** » nous a permis également de justifier la capacité du modèle de Wilson de représenter l'équilibre liquide vapeur du mélange binaire, objet de notre étude :

```
function [ Dltat,Dltay ] = ecartTY( p )

[X,Y,T]=donnee_exp();
np=length(X);
Dltatinit=0;
Dltayinit=0;

for i=1:np

    [TT, y1]=Equilibre_T_y( X(i) , p );

    Dltatinit=abs(TT-T(i))+Dltatinit;

    Dltayinit=abs(y1-Y(i))+Dltayinit;
end

Dltat=( Dltatinit/np);

Dltay=( Dltayinit/np);

end
```

Les écarts absolus moyens issus pour une pression P=759.975mmHg tendent vers zéro :

■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

```
>> [DeltaT,Deltay]=ecartTY(759.957)

DeltaT =

    0.4569

Deltay =

    0.0575
```



■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

```
>> [DeltaT,Deltay]=ecartTY(759.957)

DeltaT =

    0.0772

Deltay =

    0.0596
```

Nous remarquons que les données expérimentales de Nagata permettent d'avoir des écarts absolus moyens plus proches de zéro que celles d'EL Ghannam.

### c) Détermination de l'azéotropie :

Nous arrivons ainsi, lors de notre étude du système « Chloroforme Ethyl acetate », à la détermination de l'azéotrope relatif à l'équilibre en question. En effet, la situation d'azéotropie est assez fréquente, et a d'importantes implications pratiques.

L'azéotrope est, par définition, un point de rencontre entre la courbe de bulle et de rosée. Ces deux courbes ne se croisent pas, mais elles sont simplement tangentes l'une à l'autre.

#### ► But recherché

Par conséquent, dans de cette partie, nous veillerons sur la détermination de la présence d'un point azéotrope en deux pressions différentes lesquelles :  $P=1$  atm et  $P=5$  atm.

#### ► Etapes suivies

Sachant qu'un azéotrope est un équilibre liquide-vapeur tel le liquide et la vapeur aient la même composition, nous avons créé une fonction MATLAB intitulée « **Azeo** » qui permet de représenter la composition de la phase vapeur en fonction de la composition de la phase liquide. L'intersection de cette dernière avec la première bissectrice permet le repérage de l'azéotrope :

```
function Azeo(p)

[X,~,~]=donnee_exp();
np=length(X);
Ycal=zeros(1,np);
```

```

for i=1:np
    [~, y1]=Equilibre_T_y( X(i) , p );
    Ycal(i)=y1;
end

plot(X,Ycal, 'r-');

legend('y1calculée=f(x1)')
xlabel('x1 (mol)')
ylabel('y1calculée (mol)')
title('Variation de y1 en fonction de la fraction molaire liquide x1')
hold on
grid on
plot(X,X, 'b-');

```

### ► Résultats issus

Les courbes résultant pour une pression **P=1 atm** sont les suivantes:

#### ■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

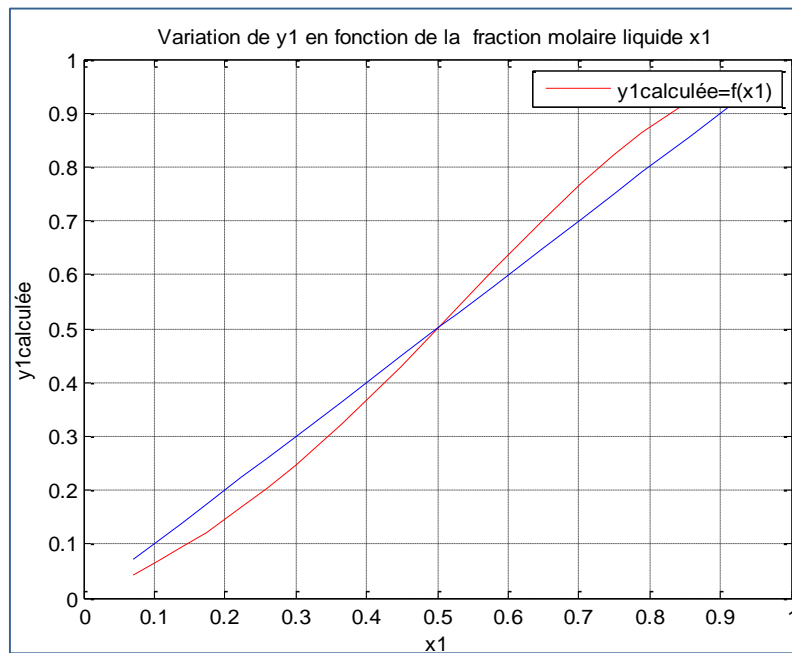


Figure 16: Variation de la composition  $y_1$  en fonction de  $x_1$  à  $P=1\text{atm}$  (Nagata)

Conséquemment, nous obtenons un point azéotrope ayant les coordonnées :

Coordonnées de l'azéotrope	
0.5	0.5

► Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

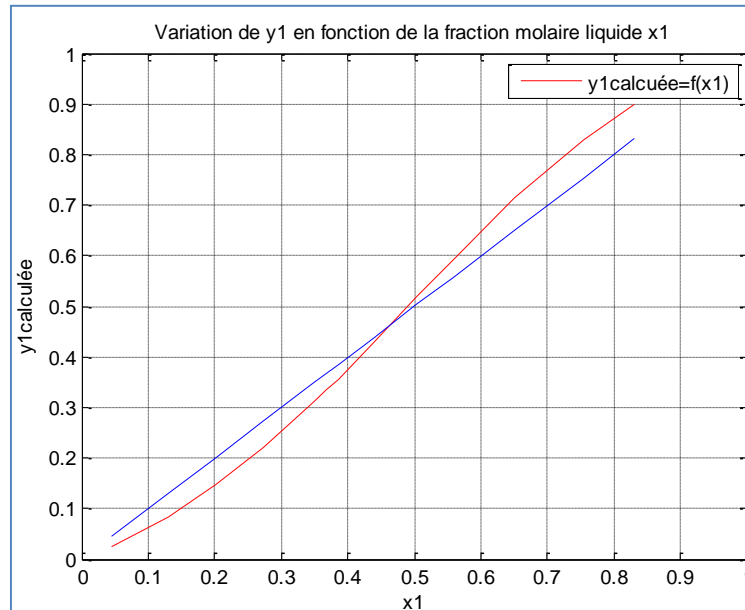


Figure 17: Variation de la composition de  $y_1$  en fonction de  $x_1$  à  $P=1\text{atm}$  (El Ghannam)

Le point azéotrope, dans ce cas, a les coordonnées qui suivent :

Coordonnées de l'azéotrope	
0.485	0.485

Par ailleurs, les courbes issues pour une pression **P=5 atm** sont représentées ci-dessous:

■ Données relatives à l'expérience de Nagata :

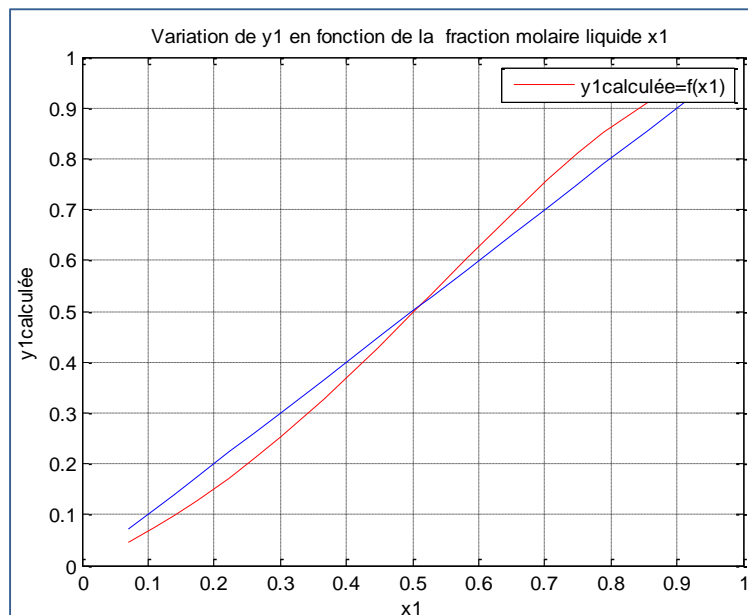


Figure 18: Variation de la composition  $y_1$  en fonction de  $x_1$  à  $P=5\text{atm}$  (Nagata)

Alors, nous obtenons un point azéotrope ayant les coordonnées :

Coordonnées de l'azéotrope	
0.49	0.49

■ Données relatives à l'expérience d'El Ghannam :

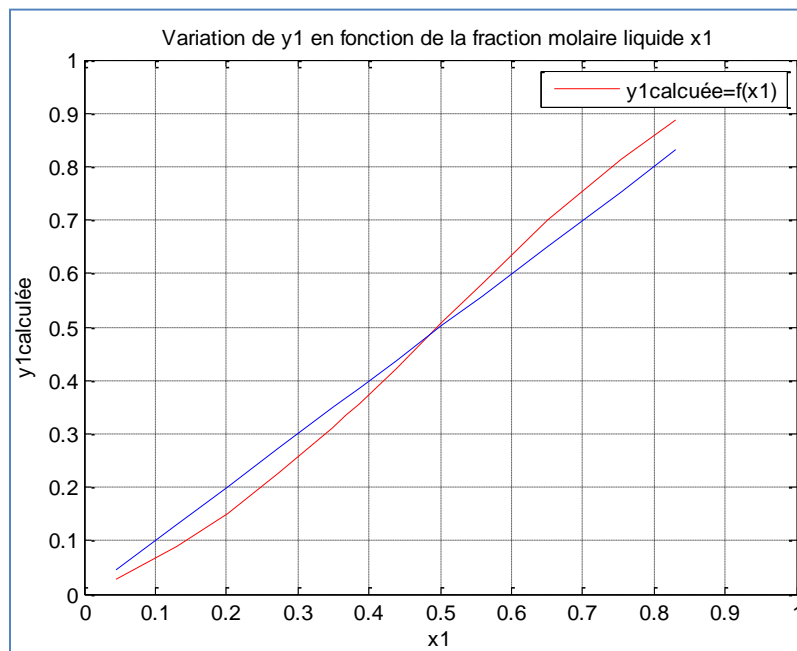


Figure 19: Variation de la composition  $y_1$  en fonction de  $x_1$  à  $P=5\text{atm}$  (El Ghannam)

Le point azéotrope, dans ce cas, a les coordonnées qui suivent :

Coordonnées de l'azéotrope	
0.49	0.49

En conséquence, nous constatons que, d'après les coordonnées obtenues du point azéotrope, la composition du mélange binaire change si on change de pression et ce pour les deux données relatives à Nagata et El Ghannam.

### 3) Interface Graphique

Pour une meilleure visualisation des résultats issus de l'étude de l'équilibre liquide-vapeur et expérimentale et par le biais du modèle réel de Wilson, nous avons eu recours à la réalisation d'une interface graphique via MATLAB dont la page d'accueil est la suivante :



Figure 20: Page d'accueil de l'interface graphique

Un clic de souris sur le bouton « Commencer » permet l'accès à la deuxième interface ci-dessous jugée intermédiaire. Elle présente le choix d'accès à trois cas de figures à savoir : la consultation des données expérimentales, la consultation de l'étude du mélange binaire en question et la visualisation du rapport contenant l'étude avec plus de détails :

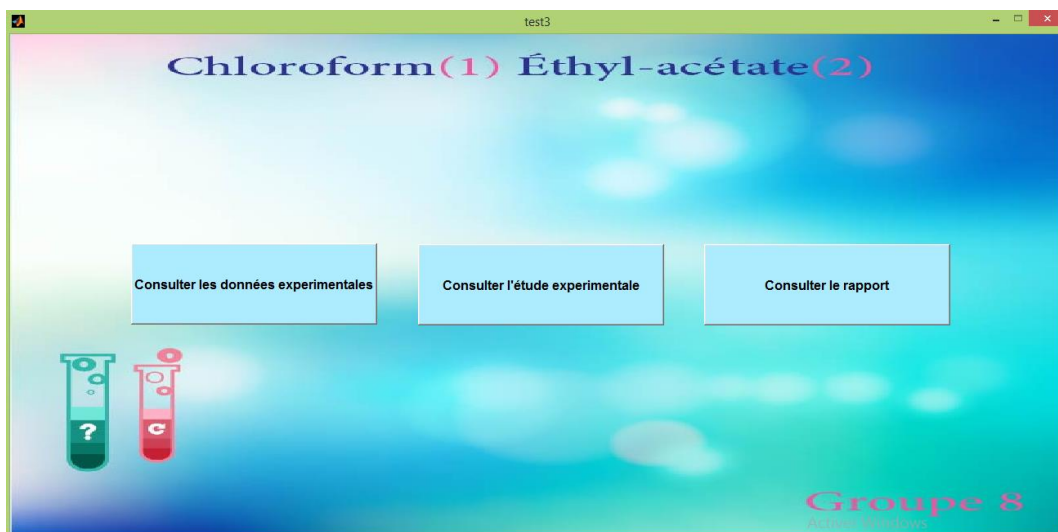


Figure 21: Interface intermédiaire

Une fois appuyé sur le bouton « Consulter les données expérimentales », une troisième interface met en relief les deux tableaux de données expérimentales fournies (Nagata et El Ghannam) ainsi que les propriétés physiques de chaque élément du système binaire :

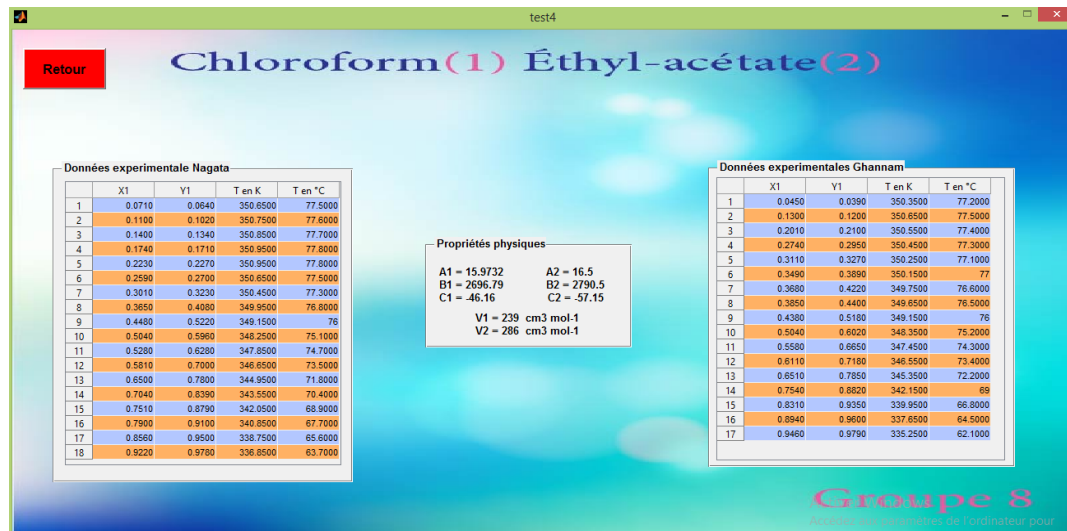


Figure 22: Interface de consultation des données expérimentales fournies

Le bouton « Retour » sert à revenir à l'interface intermédiaire et en cliquant sur le bouton « Consulter l'étude expérimentale », nous pouvons obtenir les grandeurs thermodynamiques d'équilibre déterminées au sein de l'étude menée ainsi que les différentes courbes visualisant les propriétés du mélange « Chloroforme Ethyl acetate » y compris les coordonnées du point azéotropique :

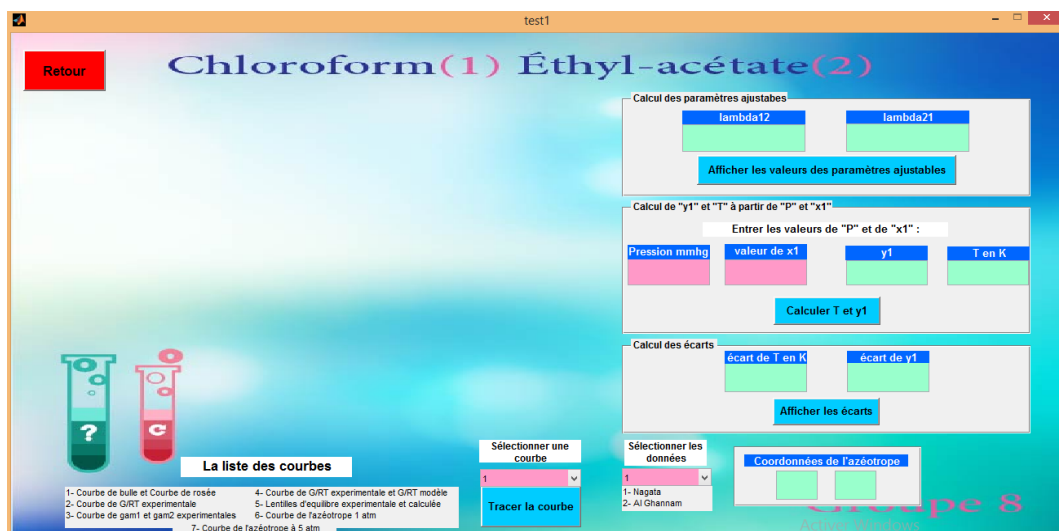


Figure 23: Interface de consultation de l'étude du mélange binaire

## Chapitre 5 : Conclusion

L'ultime finalité visée par ce projet est de simuler des procédés par le logiciel MATLAB en vue d'établir un bon modèle thermodynamique qui, non seulement, capitalise et augmente la connaissance que l'on a d'un mélange binaire mais également qui détermine d'une manière optimale les grandeurs thermodynamiques recherchées.

A dessein de parvenir au but ciblé, nous avons combiné entre l'approche expérimentale et l'approche numérique lors de l'étude du mélange binaire «Chloroforme Ethyl acetate » tout en s'appuyant sur le formalisme mathématique du modèle de Wilson.

Pour ce faire, nous avons recalculé, via le modèle de Wilson, l'enthalpie libre d'excès  $\frac{G_m^{Ex}}{RT}$  et les activités  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$  pour arriver finalement à la représentation de la lentille d'équilibre isobare et la détermination des coordonnées du point azéotrope.

En plus des objectifs formellement prescrites dans ce projet, ce dernier s'avère une chance pour enrichir nos connaissances en ce qui concerne les équilibres binaires, nos acquis en programmation MATLAB et nos compétences dans la manipulation du logiciel tableur Excel.