



Étude numérique des structures géométriques des diagrammes thermodynamiques

Responsables :

- Olivier Cots, maître de conférences à l'INP-ENSEEIH de Toulouse,
olivier.cots@toulouse-inp.fr ;
- Joseph Gergaud, professeur à l'INP-ENSEEIH de Toulouse,
joseph.gergaud@toulouse-inp.fr ;
- Nataliya Shcherbakova,
maître de conférences à l'INP-ENSIACET de Toulouse,
nataliya.shcherbakova@toulouse-inp.fr ;

Entreprise / Laboratoire : INP-ENSEEIH-IRIT (UMR CNRS 5505)

Mots-clés : algorithme de continuation différentielle, package Julia, géométrie de surfaces, théorie des singularités, thermodynamique de l'état d'équilibre.

Stage 3^e année ENSEEIH. Durée : 6 mois. **Rémunération :** 600 euros (environ)/mois.

Contexte. Ce stage fait partie du projet *Différentiation Automatique, Contrôle Optimal et Thermodynamique* d'AMIES¹ du CNRS, qui vise au développement d'une nouvelle approche algorithmique pour le calcul des diagrammes thermodynamiques de mélanges ternaires en utilisant les notions de la géométrie différentielle des surfaces en 3D. Les objectifs de stage sont :

- développer un code permettant le calcul des diagrammes d'isovolatilité sans une connaissance préalable de leur structure en utilisant la technologie de la différentiation automatique couplée avec la méthode de suivi de chemin différentiel et le paquetage Juia.
- tester l'algorithme sur des cas d'études des mélanges réels.

Compétences / Connaissances minimales requises :

- des bonnes bases en mathématiques appliquées ;
- des bonnes bases en programmation. Le développement logiciel sera réalisé dans l'environnement git avec la génération de la documentation, des test unitaires et l'intégration continue ;
- aucune connaissance spécifique en thermodynamique et théorie de singularité n'est nécessaire ;

Perspectives. Ce stage pourrait par la suite être poursuivi sous la forme d'une thèse de doctorat. Pour cela le stagiaire devra candidater aux bourses de thèse de l'IRIT.

RÉFÉRENCES

- [1] O. Cots, N. Shcherbakova, J. Gergaud. SMITH : differential homotopy and automatic differentiation for computing thermodynamic diagrams of complex mixtures. *Computer Aided Chemical Engineering*, ESCAPE 31, **50** (2021), pp. 1081-1086.
- [2] J. M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E. Gomes de Azevedo. "Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria. III ed., Prentice Hall, 1998.
- [3] N. Shcherbakova, I. Rodríguez-Donis, J. Abildskov, V. Gerbaud. A novel method for detecting and computing univolatility curves in ternary mixtures, 2017, *Chemical Engineering Science*, 173, 21–36.

1. Agence pour les Mathématiques en Interaction avec l'Entreprise et la Société : <https://www.agence-maths-entreprises.fr/>