



# Conception d'un logiciel pour l'analyse de systèmes différentiels en thermodynamique industrielle

## Responsables.

- Olivier Cots,<sup>1</sup> enseignant-chercheur à l'INP-ENSEEIH de Toulouse ;
- Joseph Gergaud,<sup>2</sup> enseignant-chercheur à l'INP-ENSEEIH de Toulouse ;
- Nataliya Shcherbakova,<sup>3</sup> enseignant-chercheur à l'INP-ENSIACET de Toulouse.

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

**Mots-clés.** Différentiation automatique, Homotopie différentielle, Interface web, Simulation numérique, Systèmes dynamiques, Thermodynamique.

## Stage de Master 2 :

- **Durée :** 6 mois ;
- **Date limite de candidature :** 1<sup>er</sup> novembre 2022 ;
- **Date de début du stage :** mi-mars 2023 (négociable) ;
- **Rémunération :** 600 euros (environ)/mois.

**Contexte.** Ce stage vise à la création d'une version pilote d'un nouveau logiciel open-source fondé sur une démarche algorithmique innovante, en utilisant des concepts de la géométrie différentielle, des algorithmes de continuation différentielle couplés à la différentiation automatique des modèles thermodynamiques [1]. Ce logiciel permettra le calcul de diagrammes thermodynamiques modélisant l'interaction entre plusieurs constituants d'un mélange complexe. L'analyse de ces diagrammes est une étape incontournable pour la conception de nouveaux procédés industriels en génie chimique, pharmaceutique et agroalimentaire.

**Plan de réalisation.** L'outil de calcul développé dans le cadre de ce stage sera destiné dans un premier temps à l'utilisation par des membres proches des équipes participantes au projet (PSI LGC, RCAML LCA). Afin de permettre à un utilisateur non-expert de s'en servir il sera muni d'une interface graphique conviviale et intuitive. Plusieurs modèles thermodynamiques classiques (Wilson, NRTL, UNIQUAC, etc.) seront intégrés dans le logiciel, ainsi le futur utilisateur ne devra fournir que les paramètres et constantes du modèle.

Dans le cadre de ce stage, le stagiaire sera amené à :

---

1. [olivier.cots@toulouse-inp.fr](mailto:olivier.cots@toulouse-inp.fr)  
2. [joseph.gergaud@toulouse-inp.fr](mailto:joseph.gergaud@toulouse-inp.fr)  
3. [nshcherb@ensiacet.fr](mailto:nshcherb@ensiacet.fr)

- 
- mettre au point une librairie de modèles thermodynamiques et de mélanges multi-constituants déjà existants [2] ;
  - implémenter un algorithme permettant de trouver les points initiaux sur la frontière du domaine de définition du problème et de faire le suivi de chemin différentiel ;
  - créer une **interface graphique** simple, interactive et documentée, permettant :
    1. de définir le mélange ternaire à étudier,
    2. de régler les paramètres des méthodes numériques utilisées,
    3. de choisir les calculs à effectuer,
    4. de visualiser et d'exporter les résultats.
  - effectuer des tests sur une série de cas d'études.

### Compétences / Connaissances minimales requises.

- Des connaissances de base dans des langages de programmation web (Python, HTML/CSS, PHP, JavaScript) pour la réalisation de l'interface web est nécessaire ;
- Capacité à mettre en place une chaîne CI (intégration continue) avec des containers pour les tests et le déploiement de l'application ;
- Aucune connaissance spécifique en théorie des procédés ni en théorie et résolution numérique des équations différentielles ordinaires, n'est nécessaire ;

**Perspectives.** Ce stage s'inscrit dans le cadre du projet AMIES<sup>4</sup> "DACOTA" du CNRS, porté par l'équipe Algorithmes Parallèles et Optimisation (APO) de l'IRIT en collaboration avec le département Procédés et Systèmes Industriels du laboratoire de Génie Chimique (LGC). Ce stage pourrait par la suite être poursuivi sous la forme d'une thèse de doctorat.

## 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. Rodriguez-Donis, J. Abildskov, V. Gerbaud. A novel method for detecting and computing univolatility curves in ternary mixtures, 2017, Chemical Engineering Science, 173, 21–36.

---

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