

Données thermodynamiques : production, cohérence et impact sur le dimensionnement des procédés industriels

Rueil-Malmaison – 1er avril 2016

Un séminaire organisé par IFP Energies nouvelles dans le cadre des journées thématiques du groupe de travail Thermodynamique des Procédés de la SFGP

En règle générale, les bases de données servant à ajuster ou à valider les modèles thermodynamiques utilisés dans le dimensionnement des procédés sont le résultat d'une compilation de différentes sources, avec des précisions et des incertitudes qui diffèrent d'une source à l'autre. Il n'est par ailleurs pas acquis que l'ensemble des données soit thermodynamiquement cohérent, i.e. en bon accord avec les lois de la thermodynamique. Or, une bonne connaissance des incertitudes de mesure et une vérification de la cohérence thermodynamique sont indispensables pour produire une modélisation performante.

Ce séminaire, organisé par IFP Energies nouvelles dans le cadre des journées thématiques du GT Thermodynamique de la SFGP, vise à apporter des éléments de réponse aux questions suivantes :

- Quelles sont les données thermodynamiques utilisées dans le dimensionnement des procédés ? Quelle est la précision et l'incertitude de ces données expérimentales ? Que faire quand ces informations ne sont pas disponibles ?
- Quelles sont les méthodes à appliquer pour vérifier la cohérence d'un ensemble des données thermodynamiques ? Quel est l'apport des méthodes statistiques ?
- Comment inclure des pseudo-données obtenues par simulation moléculaire ? Quelles sont les limites des données obtenues par d'autres méthodes prédictives ?
- Comment utiliser les données disponibles et leur incertitude de façon pertinente dans le paramétrage des modèles ? Quel est la meilleure stratégie pour ajuster des paramètres spécifiques ?
- Quel est l'impact des incertitudes et des problèmes de cohérence dans le dimensionnement de procédés ? Quelles sont les bonnes pratiques à appliquer dans l'industrie ?

Dates à retenir

- 15 janvier 2016 : envoi du programme final
- 26 février 2016 : fin des inscriptions
- 11 mars 2016 : date limite pour les propositions de poster

Programme Préliminaire

Lieu : Rueil-Malmaison, Amphithéâtre Dahlias

08h45 – 09h15	Accueil
09h15 – 09h20	Mot de la Direction Scientifique d'IFPEN et mot des responsables du GT Thermodynamique
09h20 – 9h30	R. LUGO (IFPEN, GT Thermodynamique des Procédés) : Présentation de la journée et des intervenants
9h30 – 10h10	M. HAJIW, C. COQUELET (Mines Paristech) : Comment mesurer des propriétés thermophysiques et calculer leurs incertitudes ?
10h10 – 10h50	Ph. UNGERER (Materials Design) : Production de données thermodynamiques par simulation : quelles incertitudes ?
10h50 – 11h00	Présentation des posters
11h00 – 11h15	Pause-café
11h15 – 11h55	S. PINHO (FEUP) : Tests de cohérence pour les équilibres de phase et la conception des procédés
11h55 – 12h35	S. LASALA (Ensic, IPM) : Vers un ajustement intelligent des modèles
12h35 – 14h00	Déjeuner (buffet)
14h00 – 14h40	R. SANCERRY (Total) : Sur une méthode industrielle de vérification de la cohérence des données.
14h40 – 15h20	A. KUD (BASF) : Application des méthodes statistiques à la vérification de la cohérence des données thermodynamiques
15h20 – 16h00	Intervention d'un industriel : impact des incertitudes et des problèmes de cohérence des données sur le dimensionnement des procédés
16h00 – 17h00	Table ronde et conclusions