HAL
open science

Introduction à la thermodynamique des mélanges : un cours en ligne et une mise en situation au cours d'un projet utilisant le logiciel MATLAB

Martial Sauceau, Fabien Baillon, Jacques Schwartzentruber

To cite this version:

Martial Sauceau, Fabien Baillon, Jacques Schwartzentruber. Introduction à la thermodynamique des mélanges : un cours en ligne et une mise en situation au cours d'un projet utilisant le logiciel MATLAB. SFGP 2013 -14ème Congrès français en génie des procédés, Oct 2013, Lyon, France. Art.2013130719-8 p. hal-01769830

HAL Id: hal-01769830

https://hal.science/hal-01769830v1

Submitted on 7 Nov 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Récents Progrès en Génie des Procédés, Numéro 104 - 2013
ISSN: 1775-335X ; ISBN: 978-2-910239-78-7, Ed. SFGP, Paris, France

Introduction à la thermodynamique des mélanges : un cours en ligne et une mise en situation au cours d'un projet utilisant le logiciel MATLAB®

SAUCEAU Martial[a*], BAILLON Fabien[a], SCHWARTZENTRUBER Jacques[b]

[a] Université de Toulouse; Mines Albi; CNRS; Centre RAPSODEE
Campus Jarlard ; F-81013 Albi Cedex 09, France

[b] Conseil Général de l'Industrie, de l'Énergie et des Technologies
Ministère de l'Économie, de l'Industrie et de l'Emploi ; 120, rue de Bercy ; F-75572 Paris Cedex 12, France

Résumé

La thermodynamique de l'équilibre est une discipline essentielle pour l'ingénieur et a des applications dans tous les domaines industriels. Dans cet enseignement, nous traitons plus particulièrement d'équilibre liquide-vapeur. L'objectif est de conduire les étudiants à comprendre et manipuler des concepts qui peuvent paraître à première vue abstraits, voire abscons, mais sont néanmoins particulièrement importants dans la conception de procédés.

Cet enseignement commence par des séances de cours et de TD assez classiques et se termine par un projet. L'enseignement reprend les concepts développés dans un cours en ligne mis à disposition des étudiants [Schwartzentruber, 2013a]. Le projet, au cours duquel les étudiants travaillent par binôme, a ensuite pour objectif de simuler une situation pouvant se produire dans une équipe travaillant sur un projet de conception de procédé. Cette mise en situation va s'appuyer sur une sensibilisation à l'importance des données expérimentales et à l'ajustement de paramètres de corrélations d'enthalpie libre d'excès (Margules, Van Laar et NRTL [Renon et Prausnitz, 1968]) sur ces données. Ils doivent pour cela développer un programme utilisant le logiciel MATLAB® [MATLAB®, 2013].

Au final, l'évaluation est composée de différentes parties : deux comptes-rendus pour chaque binôme et une évaluation individuelle. Le premier compte-rendu intermédiaire est destiné à s'assurer de l'avancement des élèves. Le compte-rendu final est composé de deux parties : une lettre de réponse au chef de projet qui ne doit contenir que les informations pertinentes et un rapport technique de 5 pages plus détaillé. Une attention particulière est accordée à l'importance du vocabulaire et la différence entre communication dans l'entreprise et communication scientifique. L'évaluation individuelle a pour objectif d'évaluer l'acquisition des notions principales vues en cours, mais également la connaissance du projet. Elle permet de discriminer ces acquis au sein des binômes.

Mots-clés : enseignement, thermodynamique, mélange, projet, MATLAB®, modélisation

1. Introduction

La thermodynamique de l'équilibre est une discipline essentielle pour l'ingénieur et a des applications dans tous les domaines industriels : toute installation industrielle produit ou consomme de l'énergie, et est le siège de phénomènes physico-chimiques évoluant vers un état d'équilibre qui peut être prédit par la thermodynamique.

Dans cet enseignement, nous traitons de la "thermodynamique de l'équilibre". L'objectif est plus particulièrement d'introduire les concepts essentiels de la thermodynamique des mélanges et de les appliquer en particulier à la représentation des équilibres liquide-vapeur.

Cet enseignement, qui se déroule au premier semestre de la première année à l'école des Mines d'Albi (niveau L3), présente plusieurs particularités. Il reprend les notions abordées dans un cours qui est

[*] Auteur à qui la correspondance devrait être adressée : martial.sauceau@mines-albi.fr

entièrement disponible en ligne [Schwartzentruber, 2013a]. De plus, afin de faciliter l'apprentissage des concepts évoqués, les étudiants sont mis en situation au cours d'un projet dans lequel ils doivent répondre à une demande du chef de projet (personne fictive qui émet la demande initiale et qui reçoit le rapport final) dans le cadre de la conception d'un procédé. Nous allons par la suite détailler les objectifs, le contenu et la méthode pédagogique mis en œuvre dans cet enseignement.

2. Un enseignement centré sur une mise en situation

2.1 Un ensemble cohérent

Cet enseignement se déroule au premier semestre de la première année à l'école des Mines d'Albi (niveau L3). Il s'inscrit dans un grand ensemble qui est entièrement disponible en ligne. En effet, il est consécutif à un premier enseignement de thermodynamique dédié aux bases de la thermodynamique [Schwartzentruber, 2013b]. Il sera suivi par un autre enseignement consacré aux techniques séparatives, avec en particulier la distillation et l'extraction liquide-liquide [Schwartzentruber, 2013a].

2.2 Une organisation classique

Le séquencement et la durée des séances de cet enseignement sont présentés sur la table 1. L'enseignement et les informations relatives au séquencement sont disponibles au sein d'une plateforme pédagogique [Cours de Thermodynamique, 2013]. Cette plateforme repose sur l'application gratuite Moodle, qui est un environnement d'apprentissage libre (Learning Management System ou LMS) [Moodle, 2013].

Il s'appuie sur trois séances de cours en amphithéâtre qui concerne la promotion entière. Un premier TD d'introduction, encadré avec un enseignant par groupe, est inséré entre les cours 2 et 3.

L'ensemble se poursuit par le projet articulé autour de trois séances en présentiel. Au cours de ce projet, les étudiants travaillent par binôme sur des postes informatiques mis à leur disposition et les séances sont encadrées par deux enseignants par groupe (12 binômes).

Table 1. Séquencement et durée des différents éléments de l'enseignement

Ordre	Séance en présentiel	Durée	Étudiants
1	Cours 1	2 h	Promotion
2	Cours 2	2 h	Promotion
3	TD 1	2 h	Groupe de TD
4	Cours 3 et introduction du projet	2 h	Promotion
5	Projet 1	2 h	Groupe de TD en binôme
6	Projet 1	2 h	Groupe de TD en binôme
7	Projet 3 et évaluation	2 h	Groupe de TD en binôme

2.3 Le contenu de cours disponible en ligne

Comme évoqué précédemment les séances de cours s'appuient sur les concepts développés dans le cours en ligne mis à disposition des étudiants. Dans le cadre de cet enseignement, les parties abordées sont les suivantes [Schwartzentruber, 2013a] :

1. définitions et formalismes des mélanges : notion de phase, corps purs, mélanges, composition d'une phase, potentiel chimique d'un constituant dans une phase, concept de fugacité ;
2. mélanges de gaz parfaits et air humide : mélange de gaz parfaits, application à l'air humide ;
3. équilibres liquide-vapeur de mélanges binaires : comportement expérimental, solution idéale, les écarts à l'idéalité, enthalpie libre d'excès de mélanges binaires ;
4. interprétation des équilibres de phase de mélanges : les courbes d'enthalpie libre, interprétation des équilibres de phases, azéotropie, immiscibilité liquide-liquide, calculs d'équilibre et stabilité ;
5. mise en œuvre pratique.

Cette dernière partie en fin de dernière séance sert d'introduction au projet. En effet, elle décrit la méthode à suivre lorsque l'on dispose de données expérimentales, méthode qui sera justement mise en œuvre lors du projet.
Le cours en ligne traite également de la représentation des équilibres liquide vapeur de mélanges multi-constituants, des équilibres liquide-liquide et liquide-solide et des équilibres sous haute pression : ces contenus, illustrés par des simulations en ligne, sont mis à la disposition des étudiants qui, dans le cadre de stages ou de projets ultérieurs, auraient besoin de compléter leur connaissances.

2.4 Un premier TD d'introduction

Ce premier TD a pour objectif de familiariser les étudiants avec les notions vues en cours. En particulier, les égalités de fugacités sont écrites dans des cas simples d'équilibres liquide-liquide et liquide-vapeur. Elles sont utilisées pour calculer des coefficients d'activité et des compositions de phases.

2.5 Un projet d'approfondissement

Les notions abordées dans le cours sont plutôt perçues comme "théoriques", voire souvent un peu absconses (potentiel chimique, fugacité, coefficient d'activité, …). Un projet a donc été mis en place afin de faire manipuler effectivement ces notions pour les rendre familières. La description de ce projet sera développée dans la partie suivante.

3. Une mise en situation : le projet avec le logiciel MATLAB®

3.1 Une mise en situation pour de futurs ingénieurs

L'objectif principal de ce projet est de mettre les étudiants en situation : il leur faut répondre à une demande du chef de projet dans le cadre de la conception d'un procédé. Ce chef de projet est une personne fictive qui ne fait qu'émettre la lettre et recevoir le rapport final. Cette mise en situation va s'appuyer sur une sensibilisation à l'importance des données expérimentales et à l'ajustement de paramètres de modèles sur ces données. Les étudiants vont ainsi comprendre que les notions abordées en cours ne se cachent pas très profondément sous les données expérimentales et être sensibilisés à l'importance d'utiliser des jeux de paramètres pertinents pour représenter le comportement d'un mélange.
Un autre objectif important du projet réside dans le domaine de la communication. En effet, les étudiants devront mettre en œuvre des éléments de communication technique (données expérimentales, représentation de ces données, courbes ajustées, …) et un accent tout particulier est mis sur la précision du vocabulaire. Par ailleurs, ils doivent comprendre, via les deux rapports, la différence entre communication dans l'entreprise (concision) et communication scientifique (précision), et savoir distinguer quelles sont les informations pertinentes à fournir à chacun des publics.
Enfin, les étudiants sont obligés à fournir un effort de programmation de résolution numérique de problèmes imbriqués, ce qui à ce stade de leur formation, n'est pas forcément évident. Même si les grands codes commerciaux (et même une application numérique disponible dans le cours en ligne) permettent de faire sans effort ce genre de calcul, notre expérience nous montre que les étudiants ont absolument besoin d'avoir traité par eux-mêmes au moins un cas simple avant d'être en mesure d'utiliser de façon adaptée ces outils.

3.2 Le point de départ : la demande du chef de projet

Chaque binôme d'étudiants reçoit un courrier d'une page qui est en fait une demande d'étude de leur chef de projet (rôle joué par l'enseignant). Il leur est demandé une modélisation mathématique de données d'équilibre expérimentales isobares sous pression réduite pour un mélange binaire donné. Ils doivent pour cela développer un programme utilisant le logiciel MATLAB® [MATLAB®, 2013] afin de représenter ces données en utilisant des corrélations d'enthalpie libre d'excès comportant des paramètres ajustables : Margules, Van Laar et NRTL [Renon et Prausnitz, 1968].
Par ailleurs, un document de conseils pour réaliser l'étude est également mis à la disposition des étudiants. Il décrit les différentes étapes à suivre, qui sont :

- la représentation des données expérimentales,
- le calcul et tracé de l'enthalpie libre d'excès et des coefficients d'activité en fonction de la composition,

- l'écriture des modèles et ajustement des paramètres,
- le recalcul des points d'équilibres,
- la détermination de la position de l'azéotrope.

Il faut également noter qu'un enseignement dédié à une initiation à MATLAB® a eu lieu au préalable. Cet enseignement s'appuie également sur un cours disponible en ligne, auquel les étudiants peuvent se référencer tout au long du projet [Louisnard, 2013].

3.3 L'importance des données expérimentales

Il est normalement nécessaire de rechercher si des données sont déjà publiées et donc disponibles ou, dans le cas contraire, de réaliser des mesures. Cependant, pour faciliter la tâche des étudiants, les données ont déjà été recueillies et mises en forme dans un fichier MATLAB® fourni. Les différents binômes traitent des données différentes.

La première chose demandée aux étudiants est de représenter les données expérimentales sous forme graphique (lentille d'équilibre : courbes de bulle et de rosée). Cela doit permettre en particulier de repérer d'éventuelles erreurs de saisie et de voir l'allure de la lentille. Il est en particulier précisé que toutes les données d'équilibre expérimentales doivent être tracées avec des points non reliés entre eux, les données expérimentales étant des informations discontinues. Cette exigence peut paraître triviale, mais elle permet de sensibiliser les jeunes élèves ingénieurs à des codes souvent implicites de la communication scientifique.

3.4 Calcul et tracé de l'enthalpie libre d'excès et des coefficients d'activité

Chaque point expérimental (T,x,y) représente en fait une expérience d'équilibre liquide-vapeur. Cela signifie que chaque donnée vérifie les relations d'équilibre pour chaque constituant i :

$$f_i^{(V)} = f_i^{(L)} \text{ avec } i = 1 \text{ ou } 2 \tag{1}$$

Ceci s'écrit aussi, la vapeur pouvant être considérée comme un gaz parfait sous ces pressions réduites :

$$\gamma_i^{\exp} x_i^{\exp} P_i^{(S)}(T) = y_i^{exp} P \text{ avec } i = 1 \text{ ou } 2 \tag{2}$$

Cette équation (2) et la connaissance des pressions de saturation pour chaque constituant en fonction de la température (à partir de l'équation d'Antoine des corps purs, dont les paramètres figurent dans les données fournies) permettent donc pour chaque donnée expérimentale d'équilibre de trouver γ_1^{exp} et γ_2^{exp}.

L'enthalpie libre d'excès $g^{E,exp}/RT$ s'obtient alors très simplement par :

$$g^{E,\exp} / RT = x_1^{exp} \ln\gamma_1^{\exp} + x_2^{exp} \ln\gamma_2^{\exp} \tag{3}$$

Il est alors possible de calculer et tracer les coefficients d'activité γ_1^{exp} et γ_2^{exp}, ainsi que l'enthalpie libre d'excès $g^{E,exp}/RT$ en fonction de la composition du liquide.

3.5 Écriture des modèles et ajustement des paramètres

L'étape suivante consiste à écrire les fonctions permettant de représenter la fonction g^E/RT, ainsi que γ_1 et γ_2. Trois formes fonctionnelles sont utilisées : l'équation de Margules, l'équation de Van Laar et l'équation NRTL (Non Random Two Liquids), les trois ayant deux paramètres ajustables (le paramètre α_{ij} de l'équation NRTL est fixé selon la nature du mélange).

Il est alors possible de passer à la phase d'ajustement des paramètres. Il faut donc définir, pour chaque expression, une "fonction objectif " qui calcule l'écart entre les valeurs expérimentales et calculées de g^E/RT et les étudiants doivent chercher à minimiser cette fonction par rapport aux paramètres ajustables par la fonction « fminsearch » de MATLAB® (optimisation non linéaire sans contrainte). Une fois cette minimisation réalisée, les étudiants disposent de deux paramètres ajustés pour chacun des modèles qui permettent une représentation correcte de g^E/RT, γ_1 et γ_2. Ils sont donc en mesure de choisir le modèle qui représente le mieux les valeurs de $g^{E,exp}/RT$.

3.6 Recalcul des points d'équilibres

L'objectif est maintenant de comparer les lentilles d'équilibre expérimentales et calculées. À la pression des données expérimentales, et pour une composition du liquide x_1 choisie, il s'agit donc de résoudre en T l'équation obtenue en sommant les relations 2 pour i=1 et i=2 :

$$P = \gamma_1 x_1 P_1^{(S)}(T) + \gamma_2 x_2 P_2^{(S)}(T) \tag{4}$$

Cette résolution numérique est réalisée facilement grâce à la fonction « fzero » de MATLAB® et on déduit facilement y_1 à partir de l'équation (2) pour i=1. Les étudiants doivent ensuite porter sur le même diagramme la lentille d'équilibre expérimentale (points non reliés) et la lentille d'équilibre calculée (ligne sans marques). Ils doivent enfin conclure sur la capacité du modèle choisi à représenter l'équilibre liquide-vapeur du système considéré, en déterminant les écarts absolus moyens en température et en composition vapeur, entre les données expérimentales et la modélisation :

$$\Delta T = \frac{1}{N_P} \sum_{k=1}^{N_p} \left| T_k^{\exp} - T_k^{cal} \right| \tag{5}$$

$$\Delta y_1 = \frac{1}{N_P} \sum_{k=1}^{N_p} \left| y_{1,k}^{\exp} - y_{1,k}^{cal} \right| \tag{6}$$

N_p est le nombre de points expérimentaux et k l'indice du point expérimental.

3.7 Détermination de la position de l'azéotrope

Par ailleurs, les étudiants doivent également déterminer la position d'un éventuel azéotrope. Il y a azéotropie si, à l'équilibre, $y_1=x_1$: il suffit de résoudre cette équation en x_1 pour trouver la position précise de l'azéotrope. Il faut donc construire une nouvelle fonction et l'annuler en lui appliquant la fonction « fzero » de MATLAB®. Cette fonction utilise celle définie pour le calcul de l'équilibre (imbrication de résolutions numériques).

La position de l'azéotrope calculée à partir de courbes d'équilibre ajustées est normalement beaucoup plus précise que celle interpolée à partir des données expérimentales. De plus, et même si le mélange ne présente pas d'azéotrope à la pression des données expérimentales, cette technique permet d'estimer, par extrapolation, si un azéotrope est susceptible d'apparaître à une pression plus élevée. Les étudiants doivent aussi répondre à cette question et c'est l'occasion pour eux de s'interroger sur le sens d'une telle extrapolation dans un domaine pour lequel aucune donnée expérimentale n'est disponible.

3.8 Une organisation alternant des séances en présentiel et du travail personnel

3.8.1 Une première séance de prise en main

La première séance est consacrée à la prise en main des données expérimentales et à l'écriture des modèles. Afin d'avoir un avancement similaire pour tous les binômes, il est demandé aux étudiants de rendre pour la deuxième séance une feuille recto/verso par binôme avec une représentation de la « lentille » expérimentale et une représentation des γ et du $g^{E,exp}/RT$ pour les trois corrélations avec un jeu de paramètres arbitraires.

3.8.2 Une deuxième séance consacrée à l'ajustement des paramètres et au recalcul de l'équilibre

Après le ramassage des copies, des explications sont données sur l'ajustement des paramètres. Les étudiants travaillent ensuite sur la mise au point de la procédure de minimisation pour un seul modèle. Dans la deuxième partie de la séance, des explications complémentaires sont apportées sur la méthode à mettre en œuvre pour le recalcul de l'équilibre.

Pour la dernière séance, les étudiants doivent calculer ΔT et Δy_1 pour le modèle choisi.

3.8.3 Une dernière séance pour finaliser le projet et l'évaluation individuelle

La dernière séance est divisée en deux parties : la finalisation du projet et l'évaluation individuelle.

C'est en effet pour les étudiants l'occasion de terminer la partie précédente qui les a conduits à calculer, à partir de la pression et de la composition x_1 du liquide, la température et la composition y_1 de la vapeur à l'équilibre avec ce liquide. En ce qui concerne la partie relative à l'azéotropie, les enseignants répondent aux questions mais ne donnent pas d'explication supplémentaire.

Enfin, la deuxième partie de la séance est consacrée à une évaluation individuelle. Cette évaluation sera précisée par la suite.

4. Des échanges avec les étudiants lors des séances et par un forum

Les échanges entre les enseignants et les étudiants ont bien sûr lieu pendant les séances en présentiel. Cependant, il est également possible d'échanger en dehors des séances et, pour cela, les étudiants ont pour obligation d'utiliser le forum mis à leur disposition sur la plateforme pédagogique [Cours de thermodynamique, 2013]. L'objectif est de canaliser les sollicitations, mais surtout de permettre la mise à disposition à l'ensemble des étudiants des échanges qui ont lieu.

5. Une évaluation basée sur le projet, mais aussi individuelle

Comme nous l'avons vu, l'évaluation est composée de différentes parties : deux comptes-rendus pour chaque binôme et une évaluation individuelle.
Le premier compte-rendu intermédiaire est à rendre en début de deuxième séance et est destiné à s'assurer de l'avancement homogène des binômes d'étudiants. Il contient principalement les résultats relatifs aux données expérimentales et la vérification que les fonctions des modèles sont bien écrites. L'accent est mis sur la différentiation entre données expérimentales discrètes (points non reliés) et modélisation continue (lignes sans marques). Il représente 10 % de la note finale.
Le compte-rendu final est à rendre environ une semaine après la dernière séance, ce qui laisse aux étudiants le temps de finaliser leur projet. Il est composé de deux parties : une lettre de réponse au chef de projet de une page qui doit contenir uniquement les informations pertinentes et un rapport technique de cinq pages détaillant les méthodes, les raisons du choix du modèle et les résultats intermédiaires. Comme nous l'avons évoqué précédemment, une importance particulière est accordée à la différence entre communication dans l'entreprise (concision) et communication scientifique (précision). Ce compte-rendu représente quant à lui 40 % de la note finale.
Enfin, l'évaluation individuelle est réalisée sous forme d'un QCM et d'exercices lors de la dernière séance de projet. Elle a pour objectif d'évaluer l'acquisition des notions principales vues en cours, mais également la connaissance du projet. Elle permet de discriminer ces acquis au sein des binômes. Cette évaluation compte pour 50 % de l'évaluation finale.

6. Conclusion

Notre principal objectif, en concevant cet enseignement, a été de rendre l'étudiant le plus actif possible, afin de le conduire à une certaine familiarité avec des concepts souvent considérés comme abscons, et dont la mise en œuvre pratique est très difficile à expliquer dans un cours magistral. Cet enseignement est aussi une occasion de mettre en œuvre des méthodes de calcul numérique qui font l'objet d'un enseignement qu'ils suivent à peu près à la même période, et de les initier à des règles élémentaires de communications technique et scientifique, dont nous pouvons constater qu'elles sont trop rarement enseignées. Enfin, la mise en situation au sein d'une équipe projet permet de bien faire comprendre la différence entre communication d'entreprise (concise et efficace) et la communication scientifique (précise et complète).
Cet enseignement qui a lieu en première année (L3) de la formation d'ingénieur de l'école des Mines d'Albi vient compléter deux enseignements dédiés respectivement aux bases de la thermodynamique et de MATLAB®. Son séquencement a du être ajusté ces dernières années, mais il reçoit aujourd'hui un très bon accueil de la part des étudiants.

Remerciements
Des remerciements sont adressés aux collègues qui participent activement au bon déroulement de cet enseignement : Jean-Louis Dirion, Javier Escudero, Fabienne Espitalier, Jean-Jacques Letourneau, Elisabeth Rodier. Merci également aux nombreux doctorants et post-doctorants qui viennent compléter chaque année l'équipe pédagogique.

Références

Cours de Thermodynamique, 2013, https://campus.mines-albi.fr/course/view.php?id=335
Louisnard O., 2013, Initiation à MATLAB®, http://nte.mines-albi.fr/MATLAB/co/MATLAB_web.html
MATLAB®, 2013, http://www.mathworks.fr/products/matlab
Moodle, 2013, https://moodle.org
Renon H., et J. M. Prausnitz, 1968, Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures, AIChE J. 14, 135
Schwartzentruber J., 2013a, De la Thermodynamique aux Procédés : concepts et simulations, http://nte.mines-albi.fr/Thermo/co/ThermoPro.html
Schwartzentruber J., 2013b, Les Bases de la Thermodynamique : les principes fondamentaux et leurs applications directes, http://nte.mines-albi.fr/ThermoBase/co/ThermoBase.html

Introduction to the thermodynamics of mixtures: an online course and a work situation during a project using the software MATLAB®

SCHWARTZENTRUBER Jacques[a], BAILLON Fabien[b], SAUCEAU Martial[b*]

[a] Conseil Général de l'Industrie, de l'Énergie et des Technologies
Ministère de l'Économie, de l'Industrie et de l'Emploi ; 120, rue de Bercy ; F-75572 Paris Cedex 12, France

[b] Université de Toulouse; Mines Albi; CNRS; Centre RAPSODEE
Campus Jarlard ; F-81013 Albi Cedex 09, France

Abstract

Equilibrium thermodynamics is a major topic in process engineering and has applications in all industrial fields. In this paper, we describe a course devoted to phase equilibrium thermodynamics. The objective is in particular to introduce the concepts of the thermodynamics of mixtures and apply them to the representation of binary liquid-vapor equilibria.

This course is based on lectures and tutorials to introduce the basic concepts, and ends with a project. The concepts are also developed in an online course available to students [Schwartzentruber, 2013]. In the project, the students are put in the position of a team member who has to answer to a query from his project leader in the context of a process design. This scenario will be based on the awareness and the importance of experimental data; students will have to perform non linear parameter fitting on equilibrium data, comparing several activity coefficient models (Margules, Van Laar and NRTL). For this purpose, they need to develop a program using MATLAB® [MATLAB®, 2013].

Finally, the evaluation is composed of different parts: two reports for each group of students and an individual assessment. The first intermediate report is intended to ensure the progress of students. The final report consists of two parts: an answer of one page to the project manager restricted to the relevant information and a technical report of five pages which details methods, justifications and intermediate results. A particular attention is given to the vocabulary and the difference between communication within a company (efficient and concise) and scientific communication (precise and complete). Individual assessment aims to evaluate the acquisition of basic concepts, but also knowledge of the project.

Keywords: teaching, thermodynamics, mixture, MATLAB®, project, modeling