

stage M2/ingénieur

Algorithmes de graphes pour l'étude de systèmes complexes en chimie et biologie.

Lieu : INSA Rouen Normandie

Rémunération : gratification légale (environ 550 Euros par mois)

Durée : 6 mois, début dès que possible, fin au plus tard en juillet 2018

Contexte du stage

Le stage aura lieu au Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen (LMI – EA3226 FR CNRS 3335) dans le cadre du projet XTERM financé par la Région Normandie et l'Union Européenne. Le projet XTERM rassemble des chercheurs de plusieurs disciplines des établissements normands autour des systèmes complexes. Le LMI intervient principalement sur les concepts et aspects fondamentaux des systèmes complexes. Dans ce cadre, le stage concerne l'analyse de systèmes de réactions chimiques complexes par la théorie des graphes. Le stage sera encadré par Jean-Guy Caputo et Arnaud Knippel.

Un système de réactions chimiques comme la combustion du méthane ou la glycolyse comprend un grand nombre d'équations reliant les composants entre eux. Nous poursuivons une étude qualitative de ces systèmes basée sur la théorie des graphes (algorithmes de parcours, de plus-court chemins, de recherche de circuits...). Un modèle de graphe a été proposé et plusieurs algorithmes ont été testés pour répondre à des questions du type :

- Quels seront les effets de l'augmentation de la concentration d'un composé A ?
- Quels autres composés vont voir leur concentration augmenter ?
- Quelle est la chaîne de réactions qui sera la plus active pour produire un composé B à partir d'un composé A ?
- Peut-on sous certaines conditions déterminer certaines constantes de réactions, connaissant les autres ?

Objectifs du stage

Un premier code a été développé pour valider les approches et réaliser des tests sur de petits graphes. Le stage consistera à développer un logiciel permettant de manipuler les graphes correspondant à notre modèle et à mettre en œuvre les algorithmes pour des systèmes de réactions de plus grande taille, ainsi qu'améliorer certains algorithmes et proposer de nouvelles fonctionnalités.

Profil du candidat :

Ecole d'ingénieur ou Master 2 en mathématiques appliquées, informatique ou recherche opérationnelle, avec de bonnes connaissances en algorithmique, théorie des graphes, et l'expérience d'au moins un langage de programmation objet.

Candidature :

Envoyer un message électronique accompagné d'un CV et d'une lettre de motivation à Jean-Guy Caputo et Arnaud Knippel : caputo@insa-rouen.fr, arnaud.knippel@insa-rouen.fr