

Fiche de poste – Doctorant·e en thèse

Intitulé du poste : Doctorant·e – Détection Et diagnostiC de L'embAllement theRmique combinant mécanique quANTique et IA (DECLARANT)

Durée : 36 mois (début souhaité : 12/2025)

Lieu : GREAH / ULHN - Université Le Havre Normandie, ED. PSIME (ref. nationale n° 591)

Encadrement principal : Nathalie Verdière, MCF. HDR, LMAH, ULHN et Sébastien Leveneur, MCF. HDR, LSPC, INSA Rouen

Co-encadrement : Thanh Phong Tran, MCF, GREAH, ULHN

Contexte du projet :

Cette thèse porte sur le développement de méthodes de détection et de diagnostic dans le cadre des risques thermiques associés aux procédés de valorisation de la biomasse^{1,2}. Cette valorisation se développe rapidement depuis plusieurs années et présente des défis similaires, voire supérieurs, à ceux des procédés à base de pétrole³, notamment en ce qui concerne les risques d'emballement thermique. Les méthodes traditionnelles d'évaluation des risques thermiques, telles que les modèles cinétiques d'ordre zéro dans des conditions conservatrices, ne tiennent pas compte des effets de pression ou des environnements d'exploitation complexes⁴. De plus, elles reposent sur des approches basées sur une compréhension approfondie des équations différentielles non linéaires (ou variationnelles) régissant le comportement du processus. La complexité numérique associée à la sensibilité aux incertitudes des paramètres est considérable. Ainsi, tout changement dans les conditions de réaction nécessite des mises à jour complètes. La prise en compte de l'effet de pression et de la composition des phases gazeuse et liquide porterait cette complexité numérique à un niveau encore plus élevé.

Ces modèles ne permettent donc pas de prédire correctement les phénomènes d'emballement thermique dans différentes conditions opératoires. Il est devenu nécessaire de développer de nouveaux modèles cinétiques dans différents modes thermiques et intégrant l'évolution de la pression et la composition de la phase gazeuse. Dans cette thèse DECLARANT, ce problème sera tout d'abord traité en reprenant des modèles cinétiques multifactoriels. Puis, tirant parti de l'intelligence artificielle (IA) et de l'apprentissage machine (ML), des algorithmes de détection et de diagnostic seront développés afin d'optimiser et de contrôler les processus exothermiques. Ces algorithmes seront entraînés sur le jumeau numérique de l'expérience fourni par les modèles cinétiques. Les travaux de cette thèse s'appuieront sur les connaissances existantes en intégrant l'évaluation des risques dans la conception des procédés afin d'améliorer simultanément la sécurité et l'efficacité. Ils évalueront en particulier l'hydrogénation et l'oxydation du furfural, des procédés connus pour leur forte exothermie et leur potentiel de réactions secondaires dangereuses, telles que la production de gaz ou d'intermédiaires instables.

Cette thèse, qui se situe à l'interface des mathématiques appliquées, de l'automatique et de l'ingénierie chimique, a pour ambition de favoriser la collaboration interdisciplinaire entre les trois laboratoires de recherche (GREAH - Groupe de Recherche en Electrotechnique et Automatique du Havre, LMAH - Laboratoire de Mathématiques Appliquées ; LSPC - Laboratoire de sécurité des procédés chimiques) des deux établissements normands (ULHN - Université Le Havre Normandie ; INSA de Rouen - Institut National des sciences appliquées de Rouen). Les travaux de cette thèse seront réalisés dans le cadre du projet ANR AAPG2025 «QUANTum mechAnicS for prediction and arTificial Intelligence for early thermal runaway deteCtion and mitigation» (QUANTASTiC, sélectionné et financé).

Objectifs de la thèse :

L'objectif principal du projet de thèse est de proposer des méthodes pour réduire le risque d'emballement thermique. Ce projet est basé sur les hypothèses suivantes : (i) Le couplage des signaux permet de prévenir le risque thermique à un stade précoce et d'améliorer les stratégies d'atténuation ; (ii) Les modèles cinétiques multifactoriels peuvent identifier l'équilibre optimal entre la sécurité et la production, en déterminant les conditions de fonctionnement idéales pour une efficacité maximale et un risque minimal.

Afin de tester ces deux hypothèses, les objectifs sont (1) de développer des modèles cinétiques multifactoriels; (2) d'innover dans la détection et le diagnostic d'alerte précoce en couplant le signal de température avec la pression et/ou la composition de la phase gazeuse à l'aide d'une intelligence artificielle entraînée sur le jumeau numérique; (3) d'optimiser et de contrôler les processus exothermiques à l'aide de modèles de substitution et d'essais en laboratoire avec des agents d'atténuation.

Cette approche permettra d'intensifier les processus de valorisation de la biomasse qui sont sensibles à l'emballement thermique en raison de leur forte exothermie. Cela facilitera le développement de nouveaux processus sûrs et efficaces qui sont essentiels pour la transition vers des matières premières chimiques plus durables.

Profil recherché :

Formation :

Candidat·e issu·e d'un profil en automatique ou en mathématiques (niveau M2 ou équivalent). Une connaissance des méthodes de diagnostic et le l'IA sera appréciée ainsi qu'une bonne pratique de la programmation.

Compétences attendues :

- Bonne maîtrise de l'intelligence artificielle (IA), du machine learning (ML) et des langages de programmation Python/Matlab
- Excellentes capacités d'analyse, de synthèse et de rédaction
- Autonomie, rigueur scientifique et aptitude au travail en équipe
- Langues : niveau B2/C1 en anglais et/ou en français

Une connaissance des méthodes de diagnostic et le l'IA sera appréciée ainsi qu'une bonne pratique de la programmation.

Conditions :

- **Contrat doctoral** de 36 mois, co-financé par GREAH (EA 3220) et ANR issus de l'AAPG 2025 (Projet – QUANTASTiC, sélectionné et financé)
- **Rémunération** selon la grille en vigueur (environ 2300 € brut/mois)
- Possibilité de missions complémentaires d'enseignement ou de valorisation (en fonction du profil et des opportunités)

Procédure de candidature :

Les candidat·es sont invité·es à envoyer les documents suivants, **en un seul fichier PDF**, avant le **06 novembre 2025 à 16h00 (heure de Paris)** à l'adresse suivante :

nathalie.verdiere@univ-lehavre.fr, sebastien.leveneur@insa-rouen.fr,
thanh-phong.tran@univ-lehavre.fr

- Un CV détaillé
- Une lettre de motivation
- Les relevés de notes du Master 1 et 2
- Le mémoire de Master ou un autre écrit scientifique si disponible
- Lettres de recommandation (facultatif mais apprécié)

Contact pour toute question : Thanh Phong TRAN, thanh-phong.tran@univ-lehavre.fr

Job Description – PhD Candidate

Position Title: PhD Candidate – Detection and Diagnosis of Thermal Runaway Combining Quantum Mechanics and AI (DECLARANT)

Duration: 36 months (preferred start date: 12/2025)

Location: GREAH / Université Le Havre Normandie – PSIME (ref. national n° 591)

Main supervisor: Nathalie Verdière, Assoc. Prof. HDR, LMAH, ULHN et Sébastien Leveneur, Assoc. Prof. HDR, LSPC, INSA Rouen

Co-supervisor(s): Thanh Phong Tran, Assoc. Prof, GREAH, ULHN

Project context:

This PhD focuses on the development of detection and diagnostic methods for thermal risks associated with biomass upgrading processes^{1,2}. Biomass upgrading has been developing rapidly for several years, and presents similar, if not greater, challenges than petroleum-based processes³, particularly with regard to thermal runaway risks. Traditional thermal risk assessment methods, such as zero-order kinetic models under conservative conditions, do not take into account pressure effects or complex operating environments⁴. What's more, they rely on approaches based on a thorough understanding of the non-linear (or variational) differential equations governing process behavior. The numerical complexity associated with sensitivity to parameter uncertainties is considerable. As a result, any change in reaction conditions requires comprehensive updates. Considering the effect of pressure and the composition of the gas and liquid phases would bring this numerical complexity to an even higher level.

It has become necessary to develop new kinetic models for different thermal modes, integrating pressure evolution and gas phase composition. In this DECLARANT thesis, this problem will first be addressed by taking up multifactorial kinetic models. Then, taking advantage of artificial intelligence (AI) and machine learning (ML), detection and diagnostic algorithms will be developed to optimize and control exothermic processes. These algorithms will be trained on the numerical twin of the experiment provided by the kinetic models. This thesis will build on existing knowledge by integrating risk assessment into process design to simultaneously improve safety and efficiency. In particular, it will evaluate the hydrogenation and oxidation of furfural, processes known for their high exothermicity and potential for dangerous side reactions, such as the production of gases or unstable intermediates.

This PhD thesis, positioned at the intersection of applied mathematics, control engineering, and chemical engineering, aims to foster interdisciplinary collaboration between three research laboratories - GREAH (Research Group in Electrotechnics and Automation of Le Havre), LMAH (Laboratory of Applied Mathematics), and LSPC (Laboratory of Chemical Process Safety) - from two academic institutions in Normandy: ULHN (Le Havre Normandy University) and INSA Rouen (National Institute of Applied Sciences of Rouen). The research work will be carried out as part of the ANR AAPG2025 project *“QUANTum mechAnicS for prediction and arTificial Intelligence for early thermal runaway deteCtion and mitigation”* (QUANTASTiC), which has been selected and funded.

PhD objectives:

The main objective of the thesis project is to propose methods for reducing the risk of thermal runaway. This project is based on the following hypotheses: (i) Signal coupling can prevent thermal risk at an early stage and improve mitigation strategies; (ii) Multifactor kinetic models can identify the optimal balance between safety and production, determining the ideal operating conditions for maximum efficiency and minimum risk.

In order to test these two hypotheses, the objectives are (1) to develop multifactorial kinetic models; (2) to innovate in early warning detection and diagnosis by coupling the temperature signal with pressure and/or gas phase composition using artificial intelligence trained on the digital twin; (3) to optimize and control exothermic processes using surrogate models and laboratory tests with mitigating agents.

This approach will make it possible to intensify biomass valorization processes that are sensitive to thermal runaway due to their high exothermicity. This will facilitate the development of new, safe and efficient processes that are essential for the transition to more sustainable chemical feedstocks.

Candidate profile:**Education:**

Candidate with a profile in automation or mathematics (M2 level or equivalent). Knowledge in diagnostic methods and AI is appreciated, along with good programming skills.

Expected skills:

- Strong command of Artificial Intelligence (AI), Machine Learning (ML), and programming languages Python/Matlab
- Excellent analytical, synthesis, and writing skills
- Autonomy, scientific rigor, and ability to work in a team
- Languages: B2/C1 level in English and/or French

Knowledge of diagnostic methods and AI will be appreciated, as well as solid programming skills.

Conditions:

- 36-month doctoral contract funded by GREAH (EA 3220) et ANR issus de l'AAPG 2025 (Projet – QUANTASTiC, selected and funded)
- Salary in accordance with current regulations (approximately 2300 € brut/month)
- Possibility of complementary teaching or outreach assignments (depending on profile and opportunities)

Application procedure:

Candidates are invited to submit the following documents, in a single PDF file, by **06th November 2025 at 16:00 (Paris time)** to:

nathalie.verdiere@univ-lehavre.fr, sebastien.leveneur@insa-rouen.fr,
thanh-phong.tran@univ-lehavre.fr

- A detailed CV
- A cover letter
- Academic transcripts from the first and second year of the Master's program
- Master's thesis or another scientific writing sample (if available)
- Recommendation letters (optional but appreciated)

For further information: Thanh Phong TRAN, thanh-phong.tran@univ-lehavre.fr

References

1. Casson Moreno V, Danzi E, Marmo L, Salzano E, Cozzani V. Major accident hazard in biodiesel production processes. *Saf Sci.* 2019;113:490-503.
2. Wang Y, Plazl I, Vernières-Hassimi L, Leveneur S. From calorimetry to thermal risk assessment: γ -Valerolactone production from the hydrogenation of alkyl levulinates. *Process Safety and Environmental Protection.* 2020;144:32-41.
3. Gathergood N, Granados ML, Alonso DM. Furfural: An entry point of lignocellulose in biorefineries to produce renewable chemicals, polymers, and biofuels. *Furfural: An Entry Point of Lignocellulose in Biorefineries to Produce Renewable Chemicals, Polymers, and Biofuels.* Published online January 1, 2018:1-357.
4. Vernières-Hassimi L, Dakkoune A, Abdelouahed L, Estel L, Leveneur S. Zero-Order Versus Intrinsic Kinetics for the Determination of the Time to Maximum Rate under Adiabatic Conditions (TMRad): Application to the Decomposition of Hydrogen Peroxide. *Ind Eng Chem Res.* 2017;56(45):13040-13049.
5. Kummer A, Varga T. What do we know already about reactor runaway? – A review. *Process Safety and Environmental Protection.* 2021;147:460-476.
6. Dakkoune A, Vernières-Hassimi L, Lefebvre D, Estel L. Early detection and diagnosis of thermal runaway reactions using model-based approaches in batch reactors. *Comput Chem Eng.* 2020;140:106908.
7. Zerkaoui S, Druaux F, Leclercq E, Lefebvre D. Indirect neural control for plant-wide systems: Application to the Tennessee Eastman Challenge Process. *Comput Chem Eng.* 2010;34(2):232-243.
8. Ravanbod L, Verdière N, Jauberthie C. Determination of Set-Membership Identifiability Sets. *Mathematics in Computer Science* 2014 8:3. 2014;8(3):391-406.
9. Verdière N, Orange S. Diagnosability and detectability of multiple faults in nonlinear models. *J Process Control.* 2018;69:1-7.
10. Jauberthie C, Verdière N, Trave-Massuyes L. Functional Diagnosability of Possibly Uncertain Systems. *IEEE Control Syst Lett.* Published online 2024.
11. Zhou J, Lefebvre D, Li Z. Scheduling for batch processes based on clustering approximated timed reachability graphs. *ISA Trans.* 2024;152:290-298.