

Sujet de thèse : Détection Et diagnostiC de L'embAllement theRmique combinant mécanique quANTique et IA (DECLARANT)

Directeurs de thèse : Nathalie Verdière (LMAH) en co-direction avec Dimitri Lefebvre (GREAH) et Thanh Phong Tran (GREAH).

Laboratoire d'accueil : GREAH

Etablissement : Normandie Université - Université Le Havre Normandie

Financement : allocation régionale de Normandie et AAPG ANR QUANTASTIC (sous réserve de résultat favorable de projet ANR).

Date de début : 01/10/2025.

Quotité de travail : Temps complet

Rémunération : ~2300 € brut/mois

Mots-clés : Emballlement thermique, Modélisation, Détection et diagnostic, Intelligence artificielle, Apprentissage Machine

Profil recherché : 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.

Les candidat.e.s sont invité.e.s à envoyer CV, lettre de motivation, lettre de recommandation et résultats académiques des 2 dernières années à

nathalie.verdiere@univ-lehavre.fr, dimitri.lefebvre@univ-lehavre.fr,
thanh-phong.tran@univ-lehavre.fr

Date limite de candidature : 15/06/2025 à 16:00, heure de Paris.

Contexte de recherche

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.

Objectifs

Les objectifs sont de i) développer des modèles cinétiques multifactoriels; ii) 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; 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.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet AAPG ANR 2025 «QUANTum mechAnicS for prediction and arTificial Intelligence for early thermal runaway deteCtion and mitigation» (QUANTASTIC), en collaboration entre trois établissements : Laboratoire de Chimie (LCH-UMR 5182) CNRS-École Normale Supérieure de Lyon, Université Lyon 1; Laboratoire de Sécurité des Procédés Chimiques (LSPC-UR 4707) INSA-Université de Rouen; et GREAH (EA 3220), Université Le Havre Normandie.

Programme et déroulement prévu

1. L'étape de modélisation et simulations de modèles cinétiques en mode normal et dégradé à partir de données expérimentales

Divers critères d'emballement ont été établis pour évaluer l'état de sécurité des réacteurs au cours des dernières décennies⁵. Ces critères incluent le critère de divergence, le critère adiabatique et le critère de température cible, utilisés pour distinguer les états d'emballement des états non-emballés. Ces critères doivent être robustes, faciles à mettre en œuvre et éviter les fausses alertes. Bien que l'effet de pression et la mesure en ligne de la composition de la phase gazeuse ne soient généralement pas inclus dans les critères d'emballement thermique, nous pensons qu'ils jouent un rôle essentiel dans la réduction des risques d'emballement thermique. En collaboration avec LSPC, INSA de Rouen et LCH, CNRS-École Normale Supérieure de Lyon, des modèles cinétiques multifactoriels, c'est-à-dire incluant différents modes thermiques, la présence de matériaux à changement de phase (PCM), la pression et la composition de la phase gazeuse seront développés pour être ensuite exploitées dans le cadre du diagnostic.

2. L'étape de développement des méthodes de la détection et du diagnostic afin d'optimiser et de contrôler les processus exothermiques

Pour développer des méthodes de la détection et du diagnostic, nous explorerons les méthodes d'IA et de ML^{6,7} comme une alternative améliorée aux approches conventionnelles basées sur la connaissance et les techniques algébriques pour la détection et le diagnostic des emballements thermiques. Actuellement, les techniques de calcul symbolique permettent de partitionner l'espace des paramètres, en distinguant les états nominaux et non nominaux du système⁸. Ces techniques fournissent également des critères exacts pour la détection et le diagnostic de défauts multiples à l'aide de mesures du système⁹. Bien que certaines études prennent en compte le bruit des mesures et les incertitudes des paramètres, les approches exactes ne permettent pas une exploration complète des plages de valeurs des défauts ou la prise en compte de tous les scénarios possibles de défauts multiples^{8,10}. Ce projet consiste à développer et améliorer des modèles de substitution tels que les réseaux neuronaux artificiels, les machines à vecteurs de support ou d'autres outils d'apprentissage automatique. En particulier, il vise

- Au niveau de la détection à utiliser des techniques de regroupement¹¹ ou d'autres approches pour diviser l'espace d'état en différentes régions. Chaque région sera étiquetée comme normale, acceptable et critique, en fonction de paramètres clés, par exemple la température et la pression.
- Au niveau du diagnostic à séparer les causes profondes de l'emballement thermique sur la base de l'historique des paramètres clés.

English version

PhD topic: Detection and Diagnosis of Thermal Runaway Combining Quantum Mechanics and AI (DECLARANT)

PhD supervisors: Nathalie Verdière (LMAH), co-supervised by Dimitri Lefebvre (GREAH) and Thanh Phong Tran (GREAH).

Host laboratory: GREAH

Institution: Normandie University – University of Le Havre Normandy

Funding: regional allocation of Normandy and AAPG ANR QUANTASTIC (subject to favorable result of ANR project).

Start date: 01/10/2025.

Proportion of work: Full-time

Remuneration: ~2300€ gross/month

Keywords: Thermal runaway, Modeling, Detection and diagnosis, AI, Machine learning

Profile required: 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.

Candidates are invited to send CV, letter of motivation, letter of recommendation and academic results for the last 2 years to

nathalie.verdiere@univ-lehavre.fr, dimitri.lefebvre@univ-lehavre.fr,
thanh-phong.tran@univ-lehavre.fr

Application deadline: 15/06/2025 at 16:00, Paris time.

Research 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.

Objectives

The objectives are to i) develop multifactorial kinetic models; ii) 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. This approach will enable the intensification of biomass upgrading 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.

This thesis is part of the AAPG ANR 2025 project “QUANTum mechAnicS for prediction and arTificial Intelligence for early thermal runaway deteCtion and mitigation” (QUANTASTIC), in collaboration between three institutions: Laboratoire de Chimie (LCH-UMR 5182) CNRS-École Normale Supérieure de Lyon, Université Lyon 1; Laboratoire de Sécurité des Procédés Chimiques (LSPC-UR 4707) INSA-Université de Rouen; and GREAH (EA 3220), Université Le Havre Normandie.

Program and schedule

1. Modelling stage and kinetic model simulations in normal and degraded modes based on experimental data

Various runaway criteria have been established to assess the safety status of reactors over the last few decades⁵. These criteria include the divergence criterion, the adiabatic criterion and the target temperature criterion, used to distinguish runaway states from non-packaged states. These criteria must be robust, easy to implement and avoid false alarms. Although the pressure effect and on-line measurement of gas phase composition are not generally included in thermal runaway criteria, we believe they play an essential role in reducing the risk of thermal runaway. In collaboration with LSPC, INSA de Rouen and LCH, CNRS-École Normale Supérieure de Lyon, multifactorial kinetic models, i.e. including different thermal modes, the presence of phase change materials (PCM), pressure and gas phase composition, will be developed for subsequent use in diagnostics.

2. Developing detection and diagnostic methods to optimize and control exothermic processes

To develop detection and diagnosis methods, we will explore AI and ML methods^{6,7} as an improved alternative to conventional knowledge-based approaches and algebraic techniques for thermal runaway detection and diagnosis. Currently, symbolic computation techniques allow partitioning of the parameter space, distinguishing between nominal and non-nominal system states⁸. These techniques also provide accurate criteria for the detection and diagnosis of multiple faults using system measurements⁹. Although some studies take into account measurement noise and parameter uncertainties, exact approaches do not allow for a complete exploration of fault value ranges or consideration of all possible multiple fault scenarios^{8,10}. This project involves developing and improving surrogate models such as artificial neural networks, support vector machines or other machine learning tools. In particular, it aims to

- At the detection level, to use clustering techniques¹¹ or other approaches to divide the state space into different regions. Each region will be labeled as normal, acceptable and critical, depending on key parameters such as temperature and pressure.
- At the diagnostic level to separate the root causes of thermal runaway based on the history of key parameters.

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, Jaubertie 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. Jaubertie 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.