

stage M2/ingénieur

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

Lieu : INSA Rouen Normandie

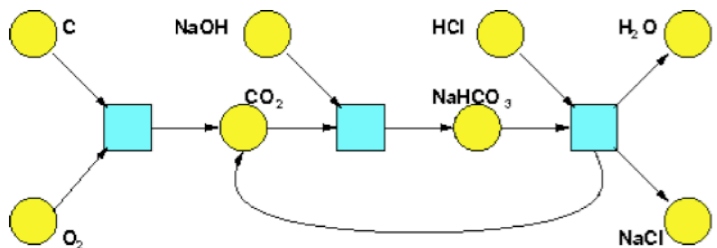
Rémunération : gratification légale (environ 550 Euros par mois)

Durée : 4 à 6 mois, début dès que possible, fin au plus tard en septembre 2019

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.

Un système de réactions chimiques comme la combustion du méthane ou la glycolyse (production du sucre dans le corps) comprend un grand nombre de réactions chimiques avec des constantes de réactions qui peuvent avoir des ordres de grandeurs très différents, ce qui rend particulièrement difficile l'étude numérique de ce type de systèmes. Parfois les constantes de réaction ne sont même pas connues de façon suffisamment précise. Nous poursuivons une étude qualitative de ces systèmes basée sur la théorie des graphes (variantes d'algorithmes de parcours, de plus-court chemins, de recherche de circuits particuliers, de flots...). Un modèle de graphe a été proposé et plusieurs algorithmes ont été testés pour obtenir des informations qualitatives comme par exemple : les effets de l'augmentation de la concentration d'un composé sur l'ensemble du système, la détermination de la chaîne de réactions la plus active pour produire un composé B à partir d'un composé A... Il est aussi possible en étudiant certains sous-graphes, de préciser la valeur de certaines constantes de réactions.



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