



## Sujet de post-doctorat

Développement d'une méthode avancée de fusion de données en physico-chimie afin de repousser les limites d'analyse d'instruments conventionnels pour des échantillons complexes.

### 1. Contexte

Le sujet du post-doctorat s'inscrit dans le projet ICEEL Carnot Transverse intitulé **TRANSFUSION** pour *Techniques de chimiométrie Avancées de Fusion de données pour repousser les limites d'analyse d'appareils conventionnels*. Nous observons aujourd'hui **un intérêt important pour les nanosciences dans de nombreux domaines** comme la physique, la chimie ou la biologie. Afin de répondre à cette demande, **l'instrumentation se doit d'être toujours plus performante**. Les spectroscopies vibrationnelles, la microscopie à force atomique (AFM) et les microscopies électroniques sont de formidables techniques d'analyse pour la caractérisation d'échantillons complexes. Elles permettent d'accéder à une grande richesse d'informations moléculaire et élémentaire. Le couplage de microscopes à des spectromètres a ainsi rendu possible la génération de cartographies représentant les distributions spatiales des espèces ou des éléments chimiques caractérisant un échantillon complexe. Ainsi, de nombreux progrès instrumentaux assurent aujourd'hui l'acquisition de plus en plus de spectres sur un laps de temps de plus en plus court. **L'interprétation de ces données nécessite la mise en œuvre d'outils mathématiques performants pour en extraire rapidement les informations les plus pertinentes et ce sans a priori**. Au premier abord, nous pourrions penser que la gestion de cette masse de données croissante est un désavantage, mais elle est en réalité un véritable atout pour résoudre un problème analytique posé, pour peu que des outils de chimiométrie adaptés soient mis en place. En outre, les données d'aujourd'hui sont protéiformes, organisées ou non. La **chimiométrie** est une science née dans les années 70 sous l'impulsion de deux physico-chimistes Svante Wold et Bruce R. Kowalski<sup>1</sup>. Cette science applique et développe des méthodes mathématiques et statistiques pour concevoir ou sélectionner des procédures de mesure et des expériences optimales, mais aussi, pour fournir une meilleure caractérisation, modélisation et compréhension de systèmes réactionnels et/ou d'échantillons complexes. Pour atteindre ces objectifs, la chimiométrie intègre plusieurs approches fondamentales issues des mathématiques : réduction en dimension de données<sup>2</sup>, classifications<sup>3</sup>, démélange<sup>4</sup>, modélisation<sup>5</sup>, prédiction<sup>6</sup>, fusion de données<sup>7</sup> ou encore topologie<sup>8</sup>.

L'imagerie spectroscopique et microscopique en ont d'ailleurs profité dernièrement avec des méthodes de fusion de données pour la résolution multivariée de courbes capable d'extraire simultanément les spectres de produits purs ou d'éléments ainsi que leurs cartographies chimiques<sup>4,7</sup> ou élémentaires<sup>9,10</sup> associées. **Néanmoins, malgré la richesse de l'information moléculaire et/ou élémentaire couplé à des développements d'outils de chimiométrie performants, certaines techniques sont encore mal adaptées à l'imagerie d'échantillons de taille micrométrique et submicrométrique**. Au-delà des conditions expérimentales, leurs résolutions spatiales est inhérente à l'instrumentation utilisée. L'augmentation de la résolution spatiale est donc toujours un enjeu majeur pour permettre une meilleure caractérisation des échantillons analysés. Deux approches se sont donc dégagées pour repousser les limites spatiales. La première est centrée sur le développement instrumental où les coûts économiques peuvent devenir rapidement exorbitants, contrairement à la seconde qui tente, quant à elle, de diminuer la résolution spatiale par une approche algorithmique.

L'objectif du projet **TRANSFUSION** est de développer des outils numériques innovants et performants permettant de repousser les limites instrumentales actuelles lors de la génération de données spatiales couplées à des informations de chimie élémentaire, moléculaire et mécanique. L'amélioration concernera à la fois la taille du plus petit objet observable, l'identification de sa composition ainsi que le temps de calcul. L'autre intérêt réside dans la transversalité disciplinaire des outils attendus, ceci à travers leur capacité à prendre en compte des environnements variables et des données de natures multiples et multi-échelle, applicables, dans la présente phase pilote, dans une large mesure aux domaines scientifiques des composantes ICEEL partenaires, à savoir : Génie des procédés et énergies (**LERMAB**), Ressources et environnement (**LIEC, GeoRessources, et LCPME**), Matériaux (**LMOPS**) et Technologies Industrielles (**TJFU**), où les plateformes instrumentales actuelles ont **besoin de proposer une caractérisation plus fine et plus rapide des échantillons analysés pour leurs utilisateurs du publique, comme du privé.**

## 2. Description du sujet postdoctoral

Le consortium a choisi de travailler sur quatre méthodes d'analyse : l'imagerie hyperspectrale Raman (LMOPS, LCMPE), la sonde de Castaing (GeoRessources), la Microscopie à Force Atomique (LCPME, LIEC) couplée au Raman (LCPME), sur lesquels des méthodes de fusion de données (LIEC) seront développées pour caractériser des échantillons de type biomasse (LERMAB), matériaux innovants (TJFU, LCPME) et biologique (LIEC, LCPME). Le choix s'est porté sur ces techniques pour deux raisons principales :

- Elles sont **sensibles, sélectives et que pour certaines, elles possèdent une quantification précise et juste** des éléments ou des molécules caractérisant l'échantillon.
- Elles permettent **une caractérisation** moléculaire, élémentaire ou mécanique d'échantillons en surface et/ou en volume autour **d'une résolution spatiale latérale et azimutale de 1 µm.**

Par conséquent, une première partie du travail sera de lever cette limite spatiale sur les différentes techniques en utilisant des méthodes de super-résolution. Ce concept repose sur la fusion de plusieurs images dites de basse résolution (BR) d'un même objet observé sous différents points de vue dans le but d'obtenir une image dite de haute résolution (HR). Comprendre le principe de super-résolution, c'est formuler pour chacun des instruments le lien qui existe entre les images BR et une image HR. Les tout premiers travaux de super-résolution en imagerie hyperspectrale Raman ont permis de passer d'une résolution de 600 à 200 nanomètres<sup>7</sup>. La candidate ou le candidat devra réfléchir à la construction ou à l'achat de mires spécifiques pour d'une part, déterminer la résolution spatiale intrinsèque de ces appareils et d'autre part, caller les algorithmes de super-résolution déjà éprouvés au LIEC. La seconde partie du travail concernera l'extraction de l'information la plus pertinente de ces appareils pour la caractérisation d'échantillons complexes. Pour ce faire, plusieurs stratégies en chimométrie peuvent être envisagées. L'utilisation de méthodes multivariées de courbes pour extraire des signaux particuliers ou encore des méthodes d'apprentissage. L'objectif in fine étant de proposer une méthode de fusion de données pour caractériser au mieux un échantillon complexe aussi bien spatialement, que chimique.

## 3. Domaines de compétences

La candidate ou le candidat devra avoir des compétences solides en physico-chimie (notamment en spectroscopies), et en mathématique (chimométrie). Elle ou il devra également avoir un goût particulier et une certaine autonomie pour l'expérimentale, mais aussi pour la programmation (MATLAB, PYTHON, R ou tout autre langage). Le contrat porte sur 1 année (avec potentiellement une possibilité d'être renouvelée une fois) à hauteur de 2130 € brut.

Contact : marc.offroy@univ-lorraine.fr