

1-Positionnement thématique :

PHYSIQUE (Physique Ondulatoire), INFORMATIQUE (Informatique pratique), SCIENCES INDUSTRIELLES (Traitement de Signal)

2-mots-clés :

Analyse semi-aveugle

Factorisation en matrice non négative

Spectrophotométrie

Traitement du signal

Photodétecteur

3- Bibliographie commentée :

La détermination de la composition d'un milieu est primordiale dans de nombreux domaines tels que la santé et l'agroalimentaire. Une méthode de détermination la composition est l'analyse spectrale dont Newton ouvre le champ des possibilités en 1672 en décomposant la lumière blanche avec un prisme. Les propriétés photométriques de la matière permettent de faire un lien entre un élément physique et son spectre [1] : un élément est entièrement déterminé par son spectre : c'est la signature spectrale. On doit la connaissance de ce phénomène grâce aux travaux de trois physiciens principaux : Bore, Plank et Einstein qui mettent au point la base de la théorie quantique et de la spectroscopie). Les spectres rendent compte des interactions entre particules et ondes qui sont des échanges énergétiques quantifiés [2]. Ces interactions se font à des longueurs d'onde différentes : leur détection nécessite donc des capteurs de natures différentes (caméras multispectrales (2004), spectroscopie RMN (1946), spectrophotométrie...)

Nous avons privilégié la spectrophotométrie [3] comme moyen de détermination. Nous avons rencontré un chercheur du CNRS, Cédric Fevott, qui mène des études sur la méthode de factorisation en matrice non négative [4], une méthode de plus en plus utilisée dans de larges domaines tel que la télédétection [5], [6]. Il a partagé avec nous l'une de ses interrogations : pourquoi cette méthode pourtant efficace n'est-elle pas utilisée comme moyen de détermination des composants d'un milieu ? Ainsi, nous nous sommes lancés dans l'idée d'appliquer cette méthode. Cependant, très vite nous avons rencontré des difficultés quant à l'acquisition de spectres d'éléments solides ou gazeux lors d'expériences, faute de moyens dans notre établissement. Nous avons donc choisi de restreindre notre étude au cas des solutions aqueuses et homogènes. D'autre part, détecter les interactions se faisant à des longueurs d'onde en dehors du domaine visible (de 400 à 800nm) nécessite l'achat de caméras multispectrales ou bien l'usage de spectroscopie RMN par exemple : il est donc difficile d'employer de tels moyens sur site ou bien de développer pour le public des systèmes de détermination de composition rapides et à prix abordable. De ce fait, nous avons opté pour une nouvelle restriction : Nous allons observer les interactions dans le domaine du visible.

Nous allons donc déterminer la nature d'un composé coloré en phase aqueuse et homogène mais également sa concentration (par l'intermédiaire de la loi de Beer-Lambert et de la forme de son spectre). Nous nous sommes appuyés sur la méthode de factorisation en matrice non négative dont le principe est le suivant : on se dote tout d'abord d'une matrice « dictionnaire », notée D, qui fait office de référence : Pour

chaque solution référence (ex Bleu de Patenté pour nos expériences), on crée un tableau de nombres où est enregistrée la valeur de l'absorbance en fonction d'une longueur d'onde donnée. Dans un second temps, on acquiert le spectre de l'échantillon à analyser que l'on renseigne dans une matrice E, puis un algorithme de factorisation en matrice non négative va nous renvoyer la matrice, notée X, représentant la combinaison linéaire de coefficients de D donnant le spectre le plus proche de celui de l'échantillon : ceci nous donne les concentrations en chacun des composants. Dans ce sens, nous pouvons parler d'analyse semi-aveugle : il n'y a nullement besoin de connaître à l'avance les constituants de l'échantillon.

Afin de mesurer les spectres des échantillons, nous allons mettre au point un système d'acquisition rapide au coût abordable composé d'un système optique adapté [7] et de photodétecteurs [8]. Nous allons traiter les signaux renvoyés par les photodétecteurs à l'aide d'un montage d'échantillonnage et de filtrage électronique.

4-Problématique retenue :

Comment déterminer de manière semi-aveugle la constitution d'un milieu coloré en phase liquide homogène à partir d'une analyse spectrophotométrique et d'un algorithme de factorisation en matrice non négative ?

5-Objectifs du travail :

Ma collaboration dans ce projet consistera en :

- La mise en place d'un système d'échantillonnage et de filtrage adapté à l'acquisition des signaux électriques des capteurs (traitement du signal).
- Procéder à des tests de performance de différents photodétecteurs afin de déterminer le capteur le plus adapté à notre spectrophotomètre.
- Préparation de solutions chimiques « échantillons » à analyser.
- Assemblage des constituants du spectrophotomètre.

6-Liste des références bibliographiques :

[1] MARIA BARBI (Université Pierre et Marie Curie) : Introduction à l'analyse Spectrale : <https://www.lptmc.jussieu.fr/IntroAnalyseSpectrale>

[2] XAVIER MERCIER : Spectroscopie Electronique : Notions de base et fondamentales (Journées du réseau Plasmas Froids du CNRS, 9 au 12 octobre 2012) http://plasmasfroids.cnrs.fr/IMG/pdf/Mercier_2012.pdf

[3] Fiche de Spectrophotométrie de l'Université d'Angers : <http://biochimej.univ-angers.fr/Spectrophotometrie.htm>

[4] DJANOUAD BENACHIR, Méthode de séparation aveugle de sources pour le démêlage d'image de télédétection, Thèse soutenue le 17 novembre 2014,

[5] Hyperspectral Remote Sensing Data Analysis and Future Challenges **IEEE Geoscience and remote sensing magazine**, juin 2013

[6] Méthode de séparation aveugle de sources pour le démêlage d'image de télédétection, Thèse soutenue le 17 novembre 2014, Djanouad Benachir

[7] GEORGES BRUHAT : Optique, aux éditions Dunod,

[8] Photodétecteurs : ALBERT PAUL MALVINO : Electronic Principles, 6th edition, aux éditions Dunod

<http://www.abcelectronique.com/divers/dossiers/photodetecteurs/chap3.phtml>

<http://www.photo-lovers.org/sensor.shtml.fr>

Thèse de Xavier Luciani intitulée : « Analyse numérique des spectres de fluorescence 3D issus de mélanges non linéaires »