Slide

IFPEN est un acteur majeur de la recherche et de la formation dans les domaines de l’énergie, du transport et de l’environnement. L’innovation technologique est au cœur de son action, de la recherche jusqu’à l’industrie. Son engagement pour un mix énergétique durable se traduit par des actions pour améliorer l’efficacité énergétique, réduire les émissions de CO₂ et de polluants, et limiter l’empreinte environnementale, tout en répondant à la demande mondiale en mobilité, énergie et produits chimiques. En 2024, IFPEN a été classé 3ᵉ déposant de brevets parmi les centres de recherche publics en France. Une part importante du budget R&I est consacrée à la recherche fondamentale pour développer les bases scientifiques nécessaires à l’innovation pour la transition énergétique. IFPEN, c’est aussi près de 1100 ingénieurs et techniciens dédiés à la recherche, et plus de 550 publications scientifiques et communications à congrès.

Durant cette année, j’étais au sein du département caractérisation des matériaux, qui traite tout ce qui est caractérisation chimique, morphologique et mécanique des matériaux, ainsi que l’étude des mécanismes liés aux matériaux catalytiques en fonctionnement. Le laboratoire de microscopie électronique fait régulièrement face à de nouveaux besoins en analyse, traitement d’images et extraction de données quantitatives. Mon alternance portait sur l’usage de l’intelligence artificielle pour le traitement d’images microscopiques, avec pour objectif de développer des outils de reconnaissance d’objets basés sur des réseaux de neurones.

Slide

La dispersion des phase….

Pour ce projet, on avait 131 images, dont 112 utilisées pour les tests. Chaque image avait un masque binaire correspondant aux objets à détecter. Ces masques venaient d’une segmentation en niveaux de gris avec des ajustements manuels. Ils présentaient des biais : certains objets non pris en compte, contours pas toujours précis. On a décidé de faire avec, plutôt que de réannoter toutes les images.

Slide

Après l’entraînement du modèle sur notre base d’apprentissage, l’inférence sur les données de test montre la détection des éléments de platine avec un code couleur selon le niveau de confiance. On a fixé un seuil : seuls les objets avec un score supérieur à 30 % sont pris en compte. En termes de métriques, le modèle gardait un taux de faux négatifs bas, mais détectait plus d’objets que ceux présents dans la base d’annotation. Cela vient en grande partie des biais dans les annotations, qui ne prenaient pas toujours en compte tous les objets ou leurs contours exacts.

Slide

Au vu de la manière dont les annotations de nos images ont été réalisées, le modèle a bien appris à ne pas détecter d’objets dans les zones épaisses, qui apparaissent comme des régions très blanches sur l’image. Cette absence de détection s’explique par le fait que nous avons estimé que les atomes isolés (≤ 0,2 nm) ne peuvent pas être repérés dans ces zones, contrairement aux nanoparticules (> 0,5 nm) qui restent visibles, ce qui peut introduire un biais dans le comptage. Cependant, certains éléments situés aux bords de ces zones épaisses continuent d’être identifiés par le modèle. Pour cela, nous avons calculé la différence entre la valeur moyenne des pixels de l’objet et celle de ses voisins proches. Les objets présentant une différence proche de zéro sont difficilement distinguables du fond et peuvent être considérés comme des faux positifs.

Slide

Voici une représentation plus complète de la différence de valeur entre l’objet et le fond sur l’ensemble des images de test. On retrouve les différentes classes d’objets : les objets dont la valeur est inférieure à 0,2 correspondent aux atomes isolés, ceux compris entre 0,2 et 0,5 sont des clusters, et ceux dont la valeur dépasse 0,5 sont classés comme des nanoparticules. On peut même attribuer des sous-classes : par exemple, parmi les atomes isolés, ceux dont la différence d’intensité par rapport au fond est supérieure à 10 pourraient correspondre à des atomes isolés superposés, ce qui les rend plus brillants et plus facilement distinguables du fond, comparé à ceux dont la différence est inférieure à 10.

Slide

Passons maintenant au deuxième projet sur lequel j’ai travaillé. L’objectif était de développer un modèle capable de détecter automatiquement les feuillets déposés sur un support de catalyseur de type alumine. Le nombre de feuillets par paquet, ainsi que leur longueur, sont des caractéristiques importantes liées à l’activité catalytique. Le but était donc de pouvoir compter le nombre de feuillets par empilement et d’estimer la longueur de chaque empilement. Pour ce projet, on disposait cette fois-ci de 531 images, dont 424 utilisées pour l’entraînement.

Slide

Pour ce projet, on ne pouvait pas utiliser Detectron2 ni les modèles classiques de segmentation, car les images étaient trop bruitées et les feuillets souvent coupés. En plus, ils apparaissaient sous plusieurs orientations, ce qui posait problème car ces modèles ne sont pas invariants à la rotation. On a donc choisi de traiter le sujet sans segmentation, avec un modèle adapté : MMRotate. Sa force, c’est qu’il prend en compte l’orientation des objets. Contrairement aux modèles classiques qui prédisent des boîtes alignées aux axes, MMRotate génère des boîtes orientées, plus adaptées aux objets inclinés ou dispersés dans différentes directions.

Slide

Après avoir effectué l'entraînement du modèle et réalisé des tests sur une image, on observe que le modèle génère majoritairement des boîtes englobantes pour chaque empilement de feuillets. Pour rappel, l’objectif est d’estimer la longueur des empilements ainsi que le nombre de feuillets par empilement. Concernant la longueur, nous avons choisi d’utiliser la diagonale de la boîte englobante comme approximation de la longueur du plus grand feuillet dans chaque empilement.

Slide

Pour détecter le nombre de feuillets par empilement, on a utilisé un modèle de régression XGBoost. Un modèle DenseNet a été entraîné pour extraire des caractéristiques liées au nombre de feuillets dans chaque boîte détectée. Ces caractéristiques ont été combinées avec d’autres plus classiques, comme la forme, les contours, les points clés et la texture locale et globale. En combinant tout ça et en les donnant au modèle de régression, on a pu apprendre à estimer le nombre de feuillets. Par exemple, sur cette image, le modèle a prédit 5 feuillets.

Slide

Pour évaluer l’exactitude des résultats, on a comparé les inférences du modèle avec les mesures manuelles sur les mêmes images. En termes de longueur moyenne des empilements, les résultats sont très proches. Par contre, le modèle détecte plus de feuillets par empilement. Cela s’explique en partie par le fait que l’empilement moyen est un entier, souvent 1 ou 2, et qu’en arrondissant, on retrouve des valeurs similaires à celles mesurées manuellement.

Slide

Le troisième projet avait pour objectif d’identifier les pics dans les signaux chromatogrammes et d’attribuer à chacun le nom du composant correspondant. Pour cela, on disposait de 320 chromatogrammes, chacun contenant 45 000 points. Pour réduire la complexité, chaque chromatogramme a été divisé en 45 segments de 1 000 points. Chaque point avait deux caractéristiques : le temps et l’intensité. On a construit les labels de sortie en associant à chaque point un 1 s’il correspondait à un pic, et 0 sinon.

Slide

Pour ce projet, on m’a proposé d’utiliser un modèle développé par un doctorant à IFPEN. Mais comme c’était un modèle de régression, il ne produisait qu’un seul nombre en sortie, alors qu’on avait besoin d’une sortie de 1 000 points pour 1 000 points en entrée. On a donc modifié l’architecture IPA en ajoutant une couche BiLSTM, ce qui permet de mieux capter les relations temporelles sur des signaux longs, tout en gardant une sortie de même longueur que l’entrée.

Slide

En termes de métriques, le modèle localise bien les pics : dans cet exemple, les pics sont détectés au bon endroit sur tout le segment. Une fois les pics repérés, on obtient leur temps de rétention, c’est-à-dire le moment où le composé correspondant apparaît. En général, le nom du composé est attribué selon ce temps. Le problème, c’est que ce temps peut varier d’une analyse GC à l’autre, et parfois deux substances peuvent se chevaucher, ce qui crée des confusions. Pour contourner ça, on a créé un fichier Excel de référence avec les composants et leur indice de rétention. En utilisant les temps de rétention des alcanes — des molécules faites uniquement de carbone et d’hydrogène — on a pu calculer le temps de rétention théorique de chaque composé. Ensuite, on demande à l’utilisateur d’indiquer quel pic correspond au toluène. Le décalage entre ce pic et sa valeur de référence permet d’ajuster toutes les valeurs du fichier. Ces valeurs corrigées sont ensuite utilisées par un algorithme du plus proche voisin, qui attribue à chaque pic le composé dont le temps de rétention est le plus proche. Voici un exemple où le modèle détecte bien les pics et leur attribue le bon nom.

Slide

Pour le dernier projet, les échantillons étaient sous forme de billes avec une forte hétérogénéité. L’objectif était de mieux comprendre cette hétérogénéité et de la modéliser statistiquement à partir de descripteurs comme la taille des cristaux, la taille des pores et la répartition des zones à densité variable. Sur les images à grandissement ×250, on distingue des zones denses avec gros cristaux agglomérés, des zones creuses (noires), et des zones intermédiaires avec cristaux bien individualisés et pores visibles. Le but était d’abord de détecter ces zones sur les images à faible grandissement, puis de segmenter les cristaux sur les images à ×15 000.

Slide

Comme les images n’étaient pas annotées, on a d’abord exploré des techniques de segmentation non supervisée, notamment K-means, qui regroupe les pixels selon leur intensité en un nombre défini de classes. Cela permettait d’obtenir des masques utiles pour estimer la proportion d’espace poreux et de cristaux. En revanche, ces masques ne permettaient pas de bien délimiter les différentes zones. On a donc procédé à une annotation manuelle des zones et des cristaux pour pouvoir entraîner un modèle supervisé.

Slide

Pour les images à faible grandissement, on avait très peu d’exemples. Elles ont donc été divisées en quatre, avec un chevauchement de 50 pixels. Des techniques d’augmentation ont ensuite permis d’obtenir un total de 240 images.

Detectron2 a été entraîné d’abord sur les images à faible grandissement pour détecter les zones, puis sur celles à fort grandissement pour segmenter les cristaux.

Slide

On voulait, à partir des statistiques issues des détections, générer une microstructure 3D reflétant l’hétérogénéité de la bille. Pour cela, un modèle booléen 3D développé à IFPEN a été utilisé. Ce modèle demandait certaines données en entrée, il fallait donc une méthode pour inférer des propriétés 3D à partir d’une section 2D. On est parti sur une technique supposant que la distribution des particules est invariante sous rotation autour de l’axe vertical. La taille du cube a été calculée selon le rapport entre les volumes et les fractions volumiques des trois zones, puis multipliée par 4 ou 5 pour modéliser la matrice avec des cristaux d’au moins 3 pixels de rayon. À partir des détections sur les images à ×250, on calcule la fraction volumique des phases et les trois demi-axes. À partir des images à ×15 000, on calcule le rayon moyen des cristaux. Et à partir du masque non supervisé, on obtient la fraction volumique des agrégats de la phase intermédiaire, et on initialise la fraction volumique de la matrice avec cette valeur.

Slide

Pour conclure, une interface web a été développée en fin d’alternance pour intégrer les modèles et les rendre accessibles aux non-experts en informatique. Concernant la détection des éléments de platine dans les images STEM-HAADF et des feuillets, les annotations n’étaient pas très fiables. Il a donc fallu passer par des étapes de post-traitement et des comparaisons avec les statistiques manuelles, et les performances des modèles sont plutôt bonnes, logiques et cohérentes. Pour le dernier projet, le développement se faisait en local, avec une limite à une résolution de 100 nm. On n’arrivait pas à descendre plus bas car cela nécessitait des boîtes 3D plus grandes. Même si on arrivait à générer une microstructure 3D, le module déjà développé à IFPEN présentait un bug et ne traitait pas les grandes microstructures. Les travaux futurs consisteraient à corriger ce bug et à héberger les modèles sur des serveurs pour viser des résolutions plus ambitieuses. De plus, toujours dans le cadre du dernier projet, on est parti sur une technique supposant que la distribution des particules est invariante sous rotation autour de l’axe vertical pour calculer la taille moyenne des zones en 3D à partir des données 2D. Or, cela n’est pas toujours vrai. Par manque de temps, on a utilisé cette méthode, mais il serait intéressant de l’améliorer pour la rendre plus précise.

Slide

Pour finir, je tiens à remercier chaleureusement mes encadrants. Merci à Virgile pour son suivi et ses précieux conseils tout au long de mon alternance. Merci également au chef du département caractérisation des matériaux, ainsi qu’à tous les ingénieurs et techniciens avec qui j’ai collaboré et grâce à qui nous avons pu disposer des données à traiter. Un grand merci aussi à mon tuteur académique, Mohamad El Amine BECHAR, et à l’ensemble du corps professoral et administratif de l’ISEN pour la qualité de l’enseignement tout au long de mon parcours.