

Exploration stochastique de milieux hétérogènes fragiles

Vers un microscope mathématique pour optimiser la caractérisation multi-échelle de matériaux anciens

Julien Randon-Furling, Centre Borelli (ENS Paris-Saclay, CNRS)

Loïc Bertrand et **Vitor Brasiliense**, Laboratoire de Photophysique et photochimie supramoléculaires et macromoléculaires (CNRS, ENS Paris-Saclay)

Le stage proposé s'intéresse aux processus stochastiques, plus particulièrement à des algorithmes stochastiques d'exploration d'un espace bi- ou tri-dimensionnel, afin d'optimiser la recueil d'information dans l'étude d'échantillons du patrimoine culturel (artefacts archéologiques, œuvres d'art...).

L'intégration d'une composante aléatoire dans un processus d'exploration est classique dans des contextes de recherche sous contrainte, qu'il s'agisse de détection d'objets [1, 2] dans le monde physique ou d'approximation d'extrema dans l'espace abstrait des valeurs d'une fonction [3, 4]. Notre objectif est de tirer parti de ce type de processus pour concevoir, et tester expérimentalement, des algorithmes d'analyse d'échantillons patrimoniaux, contexte dans lequel à la fois le coût d'analyse et le risque d'altération du matériau étudié font peser des contraintes fortes plaidant généralement contre une exploration exhaustive.

La spectroscopie Raman est largement utilisée pour analyser des objets anciens (archéologie, conservation du patrimoine, paléontologie). Des modalités de microscopie basées sur cette spectroscopie existent, conduisant à des images spectrales qui sont généralement analysées en comparant les contrastes à certaines longueurs d'onde définies. Plusieurs configurations existent pour collecter ces images. Le plus souvent, elles sont obtenues à partir d'une excitation laser, par balayage, c'est-à-dire en déplaçant le système d'étude par rapport à un faisceau de petit diamètre (typiquement 1–5 μm). Ce balayage prend traditionnellement la forme d'une grille régulière, sans distinction selon l'intérêt des zones. Les zones spatiales d'intérêt (anglais : R.O.I., *region of interest*) ne sont identifiées que dans un second temps. Un usage classique est alors de déterminer un spectre moyen sur ces zones, interprété en termes chimiques [5, 6].

La plupart des systèmes d'étude présentent néanmoins certaines régularités morphologiques et chimiques. Afin d'accélérer l'analyse, de minimiser la quantité de données collectées et de réduire les effets de l'irradiation [7], il pourrait être intéressant d'intégrer des *a priori* spatiaux ou sur les espèces chimiques présentes afin, par exemple, d'adopter d'autres trajectoires que celle d'une grille régulière lors du balayage d'un échantillon.

L'objectif de ce projet de stage est ambitieux, il s'agit d'initier la mise en place des outils instrumentaux et numériques requis pour élaborer un *microscope mathématique* sur la plateforme Raman du PPSM. En particulier, il s'agira de définir des systèmes artificiels ayant (i) différentes propriétés spatiales et topographiques intéressantes, et (ii) dont la sensibilité à la lumière pourra être modulé *a priori* et son effet mesuré optiquement, pour enfin (iii) imaginer des scénarios intéressants couplant chimie et mathématiques. Nous pourrions ainsi tester numériquement et physiquement différentes trajectoires de collecte de données au regard des informations escomptées, tout en évaluant précisément les effets de l'irradiation sur l'échantillon [8]. À partir de ces résultats, des stratégies de balayage optimales pourront être

proposées, minimisant les risques d'endommagement des échantillons, qui pourront par la suite être appliquées à des objets du patrimoine.

Références

- (1) KOOPMAN, B. O. *Operations research* **1957**, 5, 613-626.
- (2) BÉNICHOU, O. ; COPPEY, M. ; MOREAU, M. ; SUET, P. ; VOITURIEZ, R. *Physical Review Letters* **2005**, 94, 198101.
- (3) KIEFER, J. ; WOLFOWITZ, J. *The Annals of Mathematical Statistics* **1952**, 462-466.
- (4) BOTTOU, L. in *Neural Networks : Tricks of the Trade : Second Edition*, MONTAVON, G., ORR, G. B., MÜLLER, K.-R., éd. ; Springer Berlin Heidelberg : Berlin, Heidelberg, 2012, p. 421-436.
- (5) *Raman, Infrared, and Near-Infrared Chemical Imaging* ; ŠAŠIĆ, S., OZAKI, Y., éd. ; John Wiley & Sons : New York, NY, 2011.
- (6) BITOSSI, G. ; GIORGI, R. ; MAURO, M. ; SALVADORI, B. ; DEI, L. *Applied Spectroscopy Reviews* **2005**, 40, 187-228.
- (7) BERTRAND, L. ; SCHÖDER, S. ; JOOSTEN, I. ; WEBB, S. M. ; THOURY, M. ; CALLIGARO, T. ; ANHEIM, É. ; SIMON, A. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* **2023**, 164, 117078.
- (8) BERTRAND, L. ; SCHÖEDER, S. ; ANGLOS, D. ; BREESE, M. B. ; JANSSENS, K. ; MOINI, M. ; SIMON, A. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* **2015**, 66, 128-145.