

---

# CONFERENCE INVITEE - La chimiométrie en imagerie LIBS : vers une analyse élémentaire non ciblée plus exhaustive

Ludovic Duponchel<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR) – CNRS : UMR8516, Université des Sciences et Technologies de Lille - Lille I – Bâtiment C5 59655 Villeneuve d’Ascq Cedex, France

## Résumé

L'imagerie spectroscopique est certainement l'outil le plus utilisé aujourd'hui pour la caractérisation d'échantillons complexes. En effet, les avancées instrumentales nous permettent aujourd'hui d'augmenter les résolutions spatiales et les cadences d'acquisition, générant toujours plus de données issues de surfaces d'échantillon toujours plus grandes. Dans la plupart de nos expériences d'imagerie hyperspectrale, nous acquérons une série de mesures prédéfinies (comme par exemple à différentes longueurs d'onde dans une gamme spectrale) pour chaque position spatiale de l'échantillon. L'exploitation de ces données implique naturellement la génération d'une image en intégrant une mesure spécifique sur l'ensemble de la région d'intérêt dans l'échantillon. Cette stratégie d'exploration est naturellement ciblée, car l'expérimentateur présélectionne une mesure spécifique parmi toutes les mesures prises à chaque position de l'échantillon. Le but n'est pas de remettre en question ce principe fondamental de l'imagerie, qui reste simple et très efficace, mais plutôt de reconnaître que, dans ce cadre, nous n'exploitons qu'une petite partie des données acquises. Au-delà de cette première observation, le caractère ciblé de cette approche pose également problème lorsque nous souhaitons mener une exploration complète de nos échantillons pour en découvrir toute la complexité. L'objectif de cette présentation est donc d'introduire quelques concepts de machine learning (c'est-à-dire de chimiométrie) qui nous permettent d'aller plus loin dans une exploration sans hypothèses préalables sur les échantillons, en tirant parti du caractère multivarié de l'ensemble des données acquises. Nous commencerons par introduire des outils traditionnels de clustering et de séparation de sources, en passant par l'exploration de données spectrales multimodales. Nous introduirons ensuite une approche innovante pour la détection de spectres rares dans de grands ensembles de données. Enfin, nous démontrerons que même Facebook peut proposer des solutions pour traiter des ensembles de données d'imagerie contenant plus de 10 millions de spectres LIBS pour un seul échantillon.

---

\*Intervenant