



## Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement  
et de l'Environnement

EDSMRE

**ETABLISSEMENT : Université de Lille**

**Laboratoire(s) de Rattachement :** LASIRE CNRS (UMR 8516)

**Domaine scientifique, Spécialité :** Chimie théorique, physique, analytique

**Direction de thèse :** Ruckebusch, Cyril, PU, [cyril.ruckebusch@univ-lille.fr](mailto:cyril.ruckebusch@univ-lille.fr)

**Co-encadrement (personnel non HDR) :** Vitale, Raffaele, MCF, [raffaele.vitale@univ-lille.fr](mailto:raffaele.vitale@univ-lille.fr)

**Titre de la thèse : Vers une acquisition de données spectrales basée sur leur pertinence chimiométrique**

Aujourd'hui, de nombreuses plateformes spectroscopiques sont capables de générer des quantités massives de données sur la base desquelles il est possible de caractériser des systèmes et des phénomènes complexes avec un niveau de détail élevé. Par exemple, les microscopes modernes permettent d'étudier des échantillons réels non seulement avec une résolution spatiale sans précédent, mais aussi en fournissant, pour chaque pixel des images qu'ils produisent, des informations de nature physico-chimique sous forme de spectres infrarouges, Raman, ou encore de déclins d'intensité de fluorescence. Néanmoins, tous ces progrès pourraient se révéler d'utilité limitée en pratique, principalement pour deux raisons :

1. parmi l'ensemble des spectres enregistrés, seul un nombre très limité d'entre eux porte l'information spectrale essentielle, celle qui est la plus importante pour l'analyse chimiométrique, telle que la classification multivariée (par exemple, pour le diagnostic du cancer), la reconnaissance d'objets (pour la détection de microplastiques ou la détermination de contrefaçons pharmaceutiques) ou le démelange linéaire (pour le suivi de réactions et l'extraction des espèces chimiques) ;
2. en général, les instruments conventionnels ne peuvent pas analyser les données acquises à la volée, c'est-à-dire tant que l'acquisition des spectres est en cours. Ceci empêche de collecter des données de manière ciblée ou de les traiter en ligne, deux stratégies qui pourraient réduire considérablement le temps de mesure puisque, de cette manière, la procédure d'acquisition pourrait être idéalement interrompue dès que toute l'information essentielle susmentionnée a été mesurée.

Ce projet de thèse de doctorat vise à surmonter ces deux problèmes et, idéalement, à ouvrir la voie à la conception d'outils instrumentaux innovants intégrant des algorithmes pour l'acquisition de données basée sur leur pertinence chimiométrique. Plus concrètement, le candidat sera amené à :

1. concevoir des méthodologies pour l'estimation et la sélection de l'information essentielle dans trois scénarios d'application différents (classification multivariée, démelange spectral et analyse exploratoire) ;
2. adapter ces méthodologies pour des calculs à la volée afin de permettre l'identification en temps réel du nombre réduit de mesures à effectuer pour récupérer plus rapidement la quantité maximale d'informations significatives.





**Ecole Doctorale - 104**

Sciences de la Matière, du Rayonnement  
et de l'Environnement

En pratique, cela implique le développement de nouvelles approches pour la réduction, la compression et le traitement rationnel de flux de données instrumentales qui évoluent dans le temps.

## Références

Lu, Y. *et al.*, On-the-fly decoding luminescence lifetimes in the microsecond region for lanthanide-encoded suspension arrays, *Nat. Comm.*, 2014 (5), article number 3741, doi:10.1038/ncomms4741

Vitale, R. *et al.*, On-The-Fly Processing of continuous high-dimensional data streams, *Chemometr. Intell. Lab.*, 2017 (161), 118-129, doi:10.1016/j.chemolab.2016.11.003

Li, J. *et al.*, On-the-fly estimation of a microscopy point spread function, *Opt. Express*, 2018 (26), 26120-26133, doi:10.1364/OE.26.026120

Ghaffari, M. *et al.*, Essential spectral pixels for multivariate curve resolution of chemical images, *Anal. Chem.*, 2019 (91), 10943-10948, doi:10.1021/acs.analchem.9b02890

Ruckebusch, C. *et al.*, Perspective on essential information in multivariate curve resolution, *Trend. Anal. Chem.*, 2020 (132), article number 116044, doi:10.1016/j.trac.2020.116044

Komatsuzaki, T. *et al.*, On-the-fly Raman image microscopy by reinforcement machine learning, SPIE Photonics Europe, Proceedings Volume PC12144, *Biomedical Spectroscopy, Microscopy and Imaging II*, 2022, doi:10.1117/12.2622529

**Date de recrutement envisagée : 01/10/2023**

**Contact (adresse e-mail) : [cyril.ruckebusch@univ-lille.fr](mailto:cyril.ruckebusch@univ-lille.fr)**

