

## DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **06 novembre 2025**

Nom de famille et prénom de l'auteur. e : **Monsieur Clément NOEL**

Titre de la thèse : Identification et traitement avancé des spectres d'émission : application à l'imagerie élémentaire LIBS

### Résumé



La spectroscopie d'émission induite par laser (LIBS, Laser-Induced Breakdown Spectroscopy) est une méthode d'analyse élémentaire reposant sur la génération d'un plasma par ablation laser et l'étude du rayonnement émis par ce plasma. Grâce à sa sensibilité, sa polyvalence et sa capacité à réaliser des mesures dans l'air ambiant, la LIBS connaît un essor rapide, notamment dans sa déclinaison en mode imagerie, permettant une cartographie 2D des concentrations élémentaires à l'échelle micrométrique. L'un des défis majeurs actuels est de rendre cette technique accessible à d'autres communautés scientifiques (géologie, médecine, environnement), tout en assurant la fiabilité des résultats produits. Un autre défi consiste à automatiser l'analyse des spectres, car les jeux de données deviennent de plus en plus volumineux. Pour ce faire, plusieurs verrous doivent être levés, tels que la complexité du traitement des données spectrales, la quantification des éléments et l'automatisation de l'identification des raies d'émission. Une brève comparaison avec d'autres disciplines spectroscopiques permet de mieux cerner les spécificités et les limites des approches actuelles en LIBS. Dans d'autres domaines de la spectroscopie, comme la spectroscopie d'émission optique (OES) ou la spectrométrie de masse, plusieurs approches semi-automatiques ou entièrement automatisées ont été développées pour l'identification des raies spectrales. Ces méthodes s'appuient généralement sur des bases de données bien référencées et sur des critères simples, comme la position des raies ou leur intensité relative, souvent suffisants dans des contextes maîtrisés ou peu complexes. En LIBS, bien que certains outils tentent de transposer ces approches, leur efficacité reste limitée. En effet, les spectres LIBS se distinguent par leur forte densité en raies, leur variabilité d'intensité liée à des effets de matrice ou d'auto-absorption, ainsi que la grande variété possible d'échantillons, et donc de composition, en imagerie. Ces particularités rendent les méthodes classiques trop peu robustes pour une identification fiable et automatisée, en particulier dans des contextes complexes ou sans connaissance a priori de l'échantillon analysé. Face à la complexité croissante des spectres LIBS et au besoin d'autonomie pour des utilisateurs non spécialistes, une

nouvelle méthodologie nommée ALIAS (Automated Line Identification for Atomic Spectroscopy) a été développée dans le cadre de cette thèse. ALIAS vise à automatiser l'identification des raies spectrales sur un spectre moyen, obtenu à partir de données d'imagerie, en combinant plusieurs méthodes issues de la littérature (similarité cosinus, corrélation, filtrage spectral, etc.) avec de nouvelles méthodes spécifiques aux défis posés par la LIBS. L'algorithme a été conçu pour fonctionner sur des spectres complexes, couvrant de larges gammes dynamiques et spectrales, sans information préalable sur la composition de l'échantillon. ALIAS constitue ainsi, à notre connaissance, l'une des premières méthodologies conçues spécifiquement pour l'identification automatique dans le contexte exigeant de la LIBS. La robustesse de l'algorithme a été évaluée sur des cas simples, comme un échantillon de référence, puis sur des cas complexes issus de travaux publiés par l'équipe, incluant des matériaux géologiques, de construction et environnementaux. Les résultats montrent qu'ALIAS est capable de fournir une identification fiable, y compris dans des contextes où les méthodes existantes échouent ou nécessitent une expertise poussée. L'algorithme se présente ainsi comme un outil prometteur pour accompagner la démocratisation de la LIBS dans des domaines variés, et comme un socle méthodologique en vue d'intégrer des techniques d'intelligence artificielle pour le traitement automatisé des spectres dans un futur proche.

**Mots-clés :** LIBS, imagerie élémentaire, identification, algorithme, traitement de données avancé, environnement