

Identification automatisée des constituants d'un produit complexe à partir d'une analyse spectrométrique

Contexte industriel. Les lubrifiants sont des produits utilisés pour réduire le frottement entre des surfaces. Ils sont utilisés dans de nombreux systèmes (moteurs d'automobiles, boîtes de vitesse, etc.). Les composants majoritaires des lubrifiants sont les huiles de base ; elles composent à elles seules entre 70% et 95% de lubrifiant. Les additifs, quant à eux, permettent d'améliorer les caractéristiques et d'adapter les huiles à l'application finale. L'élaboration de la formule d'un lubrifiant nécessite une connaissance parfaite des composants (huiles de base et additifs) disponibles sur le marché, ainsi que des produits déjà existants, afin de disposer d'informations précises sur l'évolution de l'environnement technologique. TOTAL investit dans des moyens d'analyse spectrométrique de pointe permettant d'obtenir une caractérisation détaillée des produits. Les techniques employées fournissent des mesures sous la forme de spectres mono ou bidimensionnels de grande taille. L'utilisation de méthodes de traitement automatique est nécessaire pour extraire les informations présentes dans ces données complexes et d'identifier à partir de la signature spectrale d'un produit les différents composants qui le constituent.

Développements attendus. L'analyse de substances chimiques multi-constituants à partir de mesures spectrométriques se reformule comme un problème de traitement du signal connu sous le nom de séparation de sources ou de représentation parcimonieuse. Des résultats préliminaires ont permis de démontrer la faisabilité de ce type d'approche dans le cas des spectres monodimensionnels. Ce travail a notamment conduit à l'acquisition d'une base de données de validation contenant des spectres bidimensionnels de produits dont la composition est parfaitement connue. Cependant, ces premiers résultats ont également mis en évidence un certain nombre de points à explorer afin de construire un outil répondant aux attentes des concepteurs de lubrifiants : définir un algorithme permettant d'identifier de façon fiable des composants déjà référencés en bibliothèque, notamment en exploitant la seconde dimension spectrale pour mieux discriminer des composants chimiquement proches, fournir des informations sur la fiabilité des résultats obtenus (indice de confiance) et sur le pourcentage du signal reconstruit, s'assurer que l'outil développé est robuste par rapport à la variabilité expérimentale et aux fluctuations possibles entre lots de matières premières. Les algorithmes développés seront intégrés dans un outil d'aide à la caractérisation au sein du laboratoire d'analyse chimique.

Laboratoire d'accueil : Ecole Centrale Nantes, Laboratoire des Sciences du Numérique de Nantes (LS2N), Equipe SIMS (Signal, Image et Son), 1 rue de la Noë, 44321 Nantes Cedex 3.

Encadrement.

Saïd MOUSSAOUI (Professeur, ECN), Email : said.moussaoui@ec-nantes.fr

Laurent GROSSET (Ing. Recherche, TOTAL Solaize) : laurent.grosset@total.com

Candidatures : Envoi aux encadrants (mail ci-dessous) d'une lettre de motivation, un CV et du relevé de notes du dernier diplôme obtenu (Master 2 et/ou Ingénieur dans les domaines en lien avec le traitement du signal et des images).