

Identification et quantification de matériaux complexes par spectroscopie électromagnétique et apprentissage automatique

Période du stage : 4 janvier 2027 – 30 juin 2027

Date limite de candidature : 23 octobre 2026

Contexte : La caractérisation électromagnétique vise à déterminer les propriétés diélectriques des matériaux, notamment leur permittivité complexe, à partir de mesures fréquentielles ou temporelles. Dans le cas de matériaux composites, l'enjeu peut également être d'identifier et de quantifier leurs constituants. Dans les domaines radiofréquence et térahertz, cette extraction constitue un problème inverse dont la difficulté dépend de plusieurs éléments, comme le dispositif et l'écart entre le modèle direct et le système réel. Ce problème peut être abordé à différents niveaux, depuis des méthodes classiques comme l'inversion d'un modèle de propagation à des méthodes d'apprentissage exploitant directement les données expérimentales. Les compétences et les données disponibles au CROMA permettent d'étudier ces approches dans un cadre commun et sur plusieurs bandes de fréquence.

État de l'art : Les méthodes classiques pour les matériaux homogènes reposent sur l'inversion d'un modèle de propagation afin d'extraire les propriétés diélectriques à partir de mesures expérimentales ; cette approche est notamment bien établie en spectroscopie THz en domaine temporel [1]. Pour les matériaux composites, des lois de mélange ou modèles de milieu effectif permettent de relier la permittivité effective aux propriétés et aux fractions des constituants, mais leur domaine de validité dépend notamment de la nature et de la structure du mélange [2]. En parallèle, des approches d'apprentissage automatique telles que support vector regression (SVR) ou réseaux de neurones (neural network, NN) ont montré leur capacité à identifier ou quantifier les constituants de mélanges à partir de spectres THz [3]. Ces différentes familles de méthodes offrent ainsi des compromis distincts entre hypothèses physiques, flexibilité et besoin en données. Des travaux récents explorent également des approches hybrides [4] combinant modèle physique et apprentissage, afin d'améliorer la robustesse ou la précision de l'inversion tout en limitant la dépendance à de grands jeux de données.

Résultats et impact attendus : L'objectif du stage est de développer une chaîne de traitement reproductible permettant de comparer ces approches sur des données expérimentales déjà disponibles au laboratoire ; des acquisitions complémentaires pourront être réalisées si nécessaire.

Une première étape portera sur des matériaux homogènes, pour lesquels la méthode d'extraction à partir du modèle physique fonctionne parfaitement, afin de valider la chaîne d'extraction des paramètres électromagnétiques. Le travail sera ensuite étendu à des matériaux cellulosiques de composition connue comportant un nombre croissant de constituants (entre 2 et 5). Le jeu de données sera issu d'un travail de thèse antérieur [2] dans lequel des modèles de milieux effectifs (loi de mélanges) ont par ailleurs été mis en œuvre [5]. Enfin, les méthodes seront évaluées sur des pastilles constituées d'une matrice de polyéthylène haute densité (high-density polyethylene, HDPE) et de plusieurs composés à identifier et/ou à quantifier, notamment du glucose, du saccharose... Les méthodes étudiées comprendront des modèles physiques de référence fondés sur différentes lois de mélange, une sélection limitée de méthodes d'apprentissage supervisé éprouvées, notamment SVR et NN, ainsi que des approches hybrides simples exploitant conjointement modèles physiques et données, par exemple pour sélectionner ou combiner plusieurs lois de mélange. Les performances seront évaluées en termes de précision d'extraction des paramètres diélectriques et de quantification, possiblement d'identification, de robustesse et de capacité à être généralisées à des compositions non utilisées lors de l'apprentissage. Le stage devra aboutir à une chaîne de traitement documentée et à une étude comparative permettant d'identifier les méthodes adaptées aux différents niveaux de complexité des matériaux étudiés.

Encadrement : Le stage sera co-encadré par Paolo RICCI (paolo.ricci@univ-savoie.fr), enseignant-chercheur contractuel à l'Université Savoie Mont Blanc, et par Frédéric GARET (frederic.garet@univ-savoie.fr), professeur à l'Université Savoie Mont Blanc. Les encadrants apporteront des compétences complémentaires en problèmes inverses, méthodes numériques et apprentissage automatique, ainsi qu'en spectroscopie térahertz et caractérisation électromagnétique des matériaux. Ils assureront le cadrage scientifique du stage avec des points réguliers, l'accès aux jeux de données et aux moyens expérimentaux si nécessaire, ainsi que les échanges avec les spécialistes des équipes concernées du CROMA, par exemple de l'équipe DHREAMS pour la partie RF.

[1] Duville et al., "A reliable method for extraction of material parameters in terahertz time-domain spectroscopy," *IEEE JSTQE*, 2(3), 739–746, 1996.

[2] Guers, "Optimisation des matériaux cellulosiques pour des applications en ...," PhD thesis, UGA, 2019.

[3] Yan et al., "Fingerprint terahertz spectroscopy combined with machine learning for multicomponent mixture analysis," *Vib. Spectrosc.*, 128, 103581, 2023.

[4] Monteagudo Honrubia et al., "A Machine Learning approach for enhancing permittivity mixing rules of binary liquids with a Gaussian modification ...," *J. Mol. Liq.*, 399, 124290, 2024.

[5] Guers et al., "Impact de l'humidité sur les pertes dans les papiers en radiofréquences et térahertz," *JNM* 2017, 2017.