

# STAGE DE MASTER M2 AESE (5 mois)

2022-2023

**Titre du stage :** Analyse de spectre moléculaires à l'aide de l'apprentissage profond.

**Encadrant(s):** Cyril Richard, Vincent Boudon, Jean-Baptiste Thomas, Olivier Lalignat

Laboratoire / Département / Équipe : ICB/ICQ/MARS et ImVIA

## Résumé:

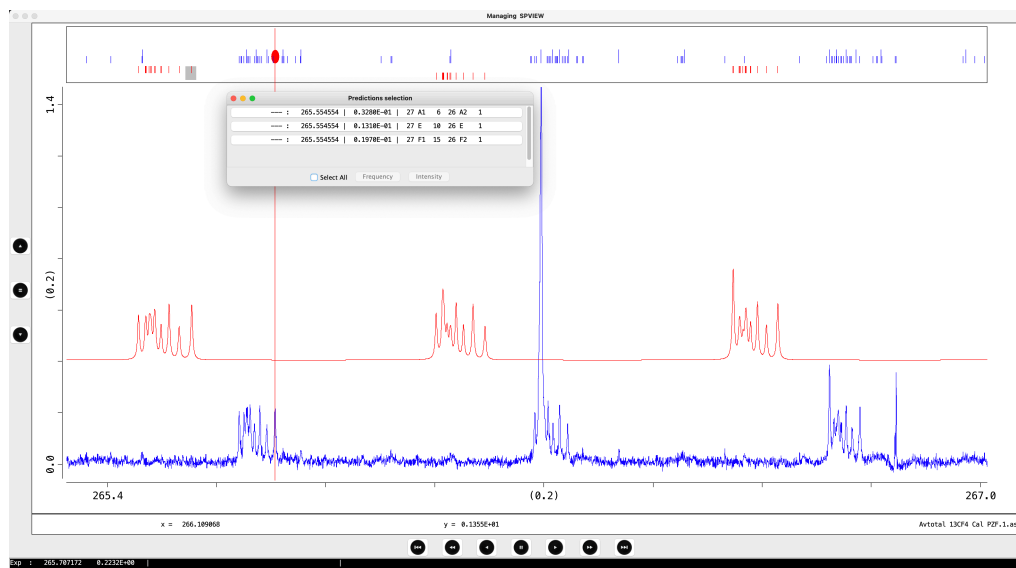
La spectroscopie moléculaire à haute résolution requiert un important travail informatique de données expérimentales brutes. En particulier, il est nécessaire d'attribuer des nombres quantiques à des milliers de raies moléculaires, en identifiant des motifs dans les spectres. Actuellement, ce travail est fait de manière semi-manuelle, à l'aide de programmes maison. Le temps dédié à cet exercice fastidieux peut être particulièrement long, alors que les tâches en question sont relativement simples.

Les opérations à réaliser à ce stade ne nécessitent pas de connaissances avancées en spectroscopie et pourraient parfaitement être implémentées dans un système à « apprentissage » automatique.

Le stage consistera à développer un outil basé sur de l'apprentissage profond. Cet outil devra s'insérer dans nos programmes existants, afin d'automatiser la phase d'attribution des raies spectrales. Le code devra être testé sur différents types de spectres expérimentaux, certains étant plus complexes que d'autres, avec des mélanges de différentes molécules, des températures plus ou moins élevées, *etc.*

Ce type d'approche a déjà été expérimenté par d'autres équipes de spectroscopistes, mais de manière limitée et avec un succès mitigé. Le développement d'un tel outil pleinement fonctionnel donnerait lieu à une publication d'un retentissement certain pour la communauté.

Nous n'avons pas a priori sur le choix du langage à utiliser, qui sera laissé à l'appréciation du stagiaire.



Outil actuel d'attribution « manuelle » des raies spectrales (en rouge le modèle, en bleu l'expérience).

L'équipe d'encadrement se compose de physiciens et de traiteurs de signaux. Le candidat idéal va valider un Master ou un cursus d'ingénieur en informatique ou en traitement du signal numérique. Il possède de bonnes connaissances en machine learning, en particulier sur les méthodes d'apprentissage profond. Il est capable d'en comprendre la théorie et de l'adapter en pratique sur un problème concret. Une curiosité envers les aspects physique du projet serait vu positivement.

**Type de projet (théorie / expérience) :** Développement

**Compétences requises :** Développement, *deep learning*