

Nouveau projet : Artificial Intelligence for Mass Spectrometry (AIMS)

vendredi 6 février 2026 10:45 (20 minutes)

Projet AIMS : Artificial Intelligence for Mass Spectrometry

Ce projet vise à optimiser les processus d'analyse des spectres acquis par le spectromètre EVE (MeV Nps ToF-SIMS), disponible sur la plateforme MOSAIC-Andromède (IJCLab). Cet instrument, unique dans le domaine du MeV, utilise un faisceau de nanoparticules d'or pour caractériser la composition chimique et la structure de surface à l'échelle nanométrique, avec des applications dans divers domaines de recherche interdisciplinaires. L'objectif principal d'AIMS est de développer des algorithmes d'IA dédiés à la reconnaissance automatique des pics et qui visent à identifier les signatures spectrales caractéristiques des composés analysés par ToF-SIMS, afin d'optimiser les processus d'analyse hors-ligne et de faciliter l'interprétation des données pour les utilisateurs non experts.

La méthodologie repose sur la constitution d'une base de données représentative, incluant des familles d'échantillons (organiques et inorganiques), construite par rééchantillonnage et/ou simulation de spectres expérimentaux (internes ou utilisateurs). Cette base, évolutive, servira à l'entraînement des modèles d'apprentissage automatique, notamment des réseaux de neurones convolutifs 1D dans un premier temps. Les algorithmes validés seront déployés pour l'analyse de nouvelles données et pourront être adaptés à d'autres instruments, tels que les pièges à ions (ISOLTRAP à ISOLDE/CERN, HINA à IJCLab).

Cette approche collaborative couvre des applications en biologie, astrochimie, astrophysique nucléaire, physique nucléaire et science des matériaux.

Orateur: BOUVET, Françoise (IJCLab - CNRS)

Classification de Session: Journées R&T 2025