



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales

Avis de Soutenance

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Monsieur ABDERRAHIM DIANE

Discipline : Chimie

Spécialité : Chimie analytique / Chimiométrie

Sujet de la thèse

Data Science in Favor of Chemical and Spectral Data: An Integrative Approach Combining NIRS with Machine Learning and Signal Preprocessing Techniques for Rapid and Accurate Analytical Analysis

Formation Doctorale " Sciences et Génie de la matière, de la Terre et de la Vie "

Thèse présentée et soutenue **le samedi 08 février 2025 à 10h** à l'Amphi A à la Faculté des Sciences et Techniques de Fès, devant le jury composé de :

NOM ET PRÉNOM	TITRE	ÉTABLISSEMENT	
El Mestafa EL HADRAMI	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Président
Rachid MAMOUNI	PES	Faculté des Sciences d'Agadir	Rapporteur
Fouad FETHI	PES	Faculté des Sciences d'Oujda	Rapporteur
Mouhcine FADIL	MCH	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Rapporteur
Abdellah FARAH	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Examineur
Rabie REDA	MC	Université Mohamed 6 Polytechnique MaScir	Invité
Taoufiq SAFFAJ	PES	Faculté des Sciences et Techniques de Fès	Directeur de thèse
Bouchaib IHSSANE	PES	Ecole Normale Supérieure de Rabat	Co-Directeur de thèse

Laboratoire de recherche : Laboratoire de Chimie Organique Appliquée

Etablissement : Faculté des Sciences et Techniques de Fès



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales

Résumé de la thèse

Les méthodes analytiques conventionnelles présentent plusieurs limitations, notamment des contraintes liées à la prise de décision en temps réel, des procédures lourdes, des problèmes de toxicité dus à l'utilisation de réactifs chimiques dangereux, et des difficultés de manipulation de matrices complexes. Ces contraintes sont amplifiées par la nécessité de développer des méthodes d'analyse avancées et durables pour répondre aux besoins évolutifs de la recherche et de l'industrie modernes. Dans un scénario où la matrice d'un échantillon est remplie d'interférences, les techniques traditionnelles de chimie humide peinent à discerner précisément l'analyte d'intérêt. Les méthodes conventionnelles, comme le titrage, sont entravées par la composition complexe de la matrice, prolongeant les temps d'analyse et augmentant les coûts. Dans ces situations, où l'analyse en temps réel est cruciale pour une prise de décision rapide, les limites des approches conventionnelles deviennent évidentes. C'est ici que la spectroscopie optique (OS) se révèle être une solution optimale. Les techniques de spectroscopie optique, telles que la spectroscopie dans le proche infrarouge (NIRS), offrent des avantages indéniables pour l'analyse des matrices. Leur nature non destructive permet un contrôle en temps réel sans nécessiter une préparation approfondie de l'échantillon, atténuant ainsi les défis posés par les matrices complexes. De plus, ces techniques permettent une évaluation rapide et simultanée de plusieurs composants, offrant une compréhension globale de la composition de l'échantillon. Dans le domaine des matrices complexes, la spectroscopie proche infrarouge se distingue par son efficacité, offrant une solution analytique supérieure pour démêler les subtilités que les méthodes conventionnelles peinent à traiter. Ce projet de doctorat a exploré l'intégration de la spectroscopie proche infrarouge comme alternative aux méthodes conventionnelles pour l'analyse qualitative et quantitative de matrices complexes. Combinée à des méthodes chimiométriques, à l'apprentissage automatique, à l'apprentissage profond et au traitement du signal, la spectroscopie proche infrarouge a présenté des niveaux de précision variés, classés en trois catégories : élevée, acceptable et faible. Cette variance a été attribuée à plusieurs facteurs, notamment le type et la concentration de l'analyte, les interférences, la matrice analysée, la gamme spectrale et les méthodes de traitement des données. En somme, cette étude doctorale a démontré la faisabilité de développer des méthodes innovantes basées sur la synergie entre



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales

la NIRS, la chimiométrie, le ML et le DL pour réaliser une analyse en temps réel, fiable et précise de matrices complexes. Cette méthode peut être considérée comme une alternative précise aux méthodes analytiques conventionnelles, permettant une analyse rapide, non destructive, non invasive et en temps réel des matrices chimiques. Elle favorise la prise de décision en temps réel, facilite l'analyse analytique, réduit l'exposition aux risques et promeut une chimie analytique durable.

Mots clés: NIRS; chimiométrie; Machine Learning, Deep Learning; Traitement de signal



Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques et Sciences Médicales