

NEWSLETTER

Association Française de Résonance Paramagnétique Electronique

N°2 FÉVRIER 2017

ACTUALITÉS

- Le nouveau site web de EF-EPR est disponible (<http://efepr.uantwerpen.be/efepr/>).
- Le Compte rendu du dernier CA de l'ARPE est en ligne.
- Prochain prix de thèse de l'ARPE en 2018.

AGENDA

- 21 mars 2017: Workshop thématique de l'ARPE & réunion technic'ARPE.
- 22 Mars 2017 : Journée scientifique de l'ARPE.
- Juin 2018 : Ecole de l'ARPE.

CONGRÈS ET ECOLES D'ÉTÉ

- ESR conference RS à Oxford du 2 au 6 avril 2017.
- Ecole thématique du groupe MRM, «Dynamique des systèmes macro- moléculaires» 18-21 juin 2017, Carry-Le-Rouet.
- Ecole thématique du FrenchBic, «Techniques physico-chimiques pour l'étude des métaux en biologie, de la molécule à la cellule» 1-5 octobre 2017, Carry-Le-Rouet.

CONTACTS

- C. Duboc (carole.duboc@univ-grenoble-alpes.fr)
- M. Orio (maylis.orio@univ-amu.fr)
- S. Choua (sylvie.choua@unistra.fr)
- M. Martinho (mmartinho@imm.cnrs.fr)
- Webmaster : G. Gerbaud (ggerbaud@imm.cnrs.fr)
- <http://www.a-rpe.fr/>



Edito

Technic'ARPE, un réseau d'aide technique pour la RPE.
Par Emilien Etienne, ingénieur de recherche au BIP (Bioénergétique et Ingénierie des Protéines), Aix-Marseille Université.



Le réseau technic'ARPE va fêter ses 4 ans! L'objectif de ce réseau ouvert à tous est de fédérer au niveau national les expertises techniques autour de la RPE, et de créer un lieu d'échange, centré sur des problématiques expérimentales voire numériques. En résumé, si vous devez (aimez) régulièrement mettre «les mains dans le cambouis», si vous vous sentez un peu seul avec votre machine, ce réseau est pour vous! Jusqu'à cette année, ce réseau se matérialisait essentiellement par l'existence d'une liste de diffusion (technicarpe@services.cnrs.fr, inscription et information sur le site de l'ARPE, rubrique technic'ARPE). Le 21 mars prochain, la première demi-journée du technic'ARPE se tiendra à Paris, en marge de la journée scientifique annuelle de l'ARPE. De plus amples informations seront prochainement diffusées sur technicarpe@services.cnrs.fr, donc, si ce n'est pas déjà fait, n'hésitez plus et inscrivez-vous à cette liste!

Les journées de l'ARPE 21 & 22 Mars

L'ARPE organise à Paris dans les locaux de Chimie-ParisTech:

En parallèle le mardi après-midi 21 mars 2017:

- Un workshop thématique « Santé-Biologie-Médecine »
- La première réunion du réseau technic'ARPE .

Le mercredi 22 mars 2017 de 10h00 à 16h30.

- La journée scientifique annuelle de l'ARPE incluant l'assemblée générale.

N'oubliez pas de vous inscrire avant le 10 mars 2017
sur le site de l'ARPE.

Ces journées sont pour vous, venez nombreux !

Les polynômes de Tchebychev et l'imagerie RPE



Mariem El Afrit,
Université Pierre
et Marie Curie, Institut de
Recherche de Chimie de
Paris (IRCP), Centre de Re-
cherche et de Restauration
des Musées de France (C2RMF)

Au sein de l'équipe PCMTH (PhysicoChimie des Matériaux Témoin de l'Histoire) qui associe des chercheurs de l'IRCP (l'Institut de Recherche de Chimie Paris) et du C2RMF (Centre de Recherche et de Restauration des Musées de France), mon travail de thèse se focalise sur l'imagerie par RPE et la fusion de ces données avec d'autres images telles que celles obtenues par tomographie X ; l'objectif est de pouvoir manipuler un unique objet numérique combinant les informations en provenance de ces différents appareils. Chacun de ces différents appareils s'appuie sur une chaîne de traitement spécifique, avec des formats de données différents, souvent propriétaires, et toujours opaques dans leurs algorithmes ou en tout cas dans l'implémentation de ces derniers. Nous rencontrons ainsi de nombreux obstacles non seulement pour obtenir une fusion satisfaisante et fiable des images, mais aussi déjà pour obtenir les images avant fusion: les utilisateurs passent beaucoup de temps à ajuster de nombreux paramètres de reconstruction (pour la RPE, cela se fait au travers du logiciel XEPR fourni par le construc-

teur des imageurs RPE, Bruker) avec pour seul guide la qualité subjective des images obtenues. Ainsi, plusieurs approches visant à rationaliser et automatiser les processus sont à l'étude dans différents laboratoires, par exemple [1], et en ce qui nous concerne nous visons à unifier les chaînes de traitement (depuis les données brut jusqu'aux images fusionnées, y compris donc l'imagerie), en utilisant une technique optimisée d'interpolation généraliste fondée sur les polynômes de Tchebychev. Ce paradigme général, initié par le groupe d'analyse numérique de Nick Trefethen à l'Université d'Oxford, est implémenté dans une boîte à outils Matlab dénommée «Chebfun» qui, au delà de l'assise théorique, a l'énorme avantage d'être libre et d'exposer toutes les implémentations des algorithmes. Nous avons appliqué cette technique à la RPE en commençant par remplacer chaque spectre par sa représentation sous la forme d'un «chebfun», l'objet central du paradigme Chebfun et qui peut se décrire comme une combinaison linéaire de polynômes de Tchebychev de première espèce, jouissant de propriétés particulières comme celle garantissant que les opérations effectuées dessus donneront les mêmes résultats que s'ils avaient été réalisés sur les fonctions non approximées, et ce à la précision du calcul en virgule flottante. Cette application à la RPE a nécessité un travail d'adaptation de Chebfun à l'I-RPE [2], et nous avons notamment mis au point une toute nouvelle backprojec-

tion (étape fondamentale en tomographie permettant de passer des objets à n dimensions à ceux à $n+1$ dimensions, par exemple des spectres unidimensionnels aux images bi-dimensionnelles) qui s'affranchit de la transformée de Fourier et permet de rester dans l'espace de Tchebychev (ainsi, des spectres sous forme de chebfuns donnent après traitement des images sous forme de chebfuns aussi). Les images résultantes sont au moins d'aussi bonne qualité que les reconstructions classiques (Figure 1) qui elles nécessitent, comme nous l'avons dit, de nombreux ajustements fins. Nous travaillons aujourd'hui au filtrage du bruit dans ce paradigme Chebfun et à l'extension de notre backprojection aux images tri-dimensionnelles.

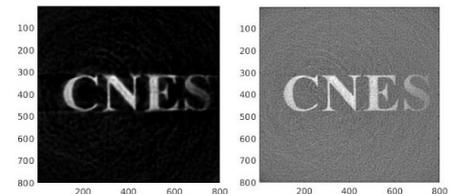


Figure 1 : Le mot CNES (Centre National d'Études Spatiales) est imprimé avec une imprimante laser sur un morceau de papier (1x5 cm²) et dissimulé dans un tube RPE rempli avec du sable (opaque pour la lumière visible mais transparent pour la RPE). L'image à gauche est la reconstruction avec les polynômes de Tchebychev et celle à droite est la reconstruction classique avec le logiciel XEPR.

[1] Maya Abou Fadel. Apports de la chimométrie à la spectroscopie de Résonance Paramagnétique Électronique : nouvelles perspectives de traitement et données spectrales à dimensions spatiales (imagerie) et / ou temporelles. *PhD thesis, Université de Lille - Sciences et Technologies, Polytech'Lille, 2015.*

[2] Mariem El Afrit, Yann Le Du, Rafaël Del Pino, and Guolin Zhang. Data merging for the cultural heritage imaging based on Chebfun approach. *Supercomputing frontiers and innovations, 3(3), 2016.*



Carnet rose

Les premiers bébés de l'ARPE, Anna et Thibaut, sont nés le 5 octobre 2016 à Marseille. Toutes nos félicitations aux parents, Maylis Orio & Sylvain Bertaina !