

PARENT Aldric

2^{ème} année ICM



École nationale supérieure des mines de Saint-Étienne

158 Cours Fauriel, 42023 Saint-Étienne, cedex 2



Rapport de stage Assistant- Ingénieur

Du 03 Juin au 30 août 2024

Entreprise d'accueil : Institut d'Astrophysique Spatiale (IAS)

Adresse(s) : Bâtiment 120-121 Université Paris Saclay, Rue Jean Teillac, 91405, ORSAY Cedex

Tuteur Entreprise : M. François POULET, Astronome, enseignant-chercheur

M. Clément ROYER, Post-doctorant

Enseignant référent : M. Marc Fisher, Assistant professor of chemical engineering and data science

I. REMERCIEMENTS

Je souhaite avant tout remercier François et Clément pour leur encadrement, leur disponibilité constante et la qualité des connaissances qu'ils m'ont transmises. Votre exigence et votre sens du détail m'ont poussé à toujours chercher à m'améliorer, à explorer de nouvelles pistes et à réfléchir à des idées innovantes. J'ai beaucoup apprécié les discussions enrichissantes que nous avons eues, ainsi que le partage de votre expérience, tant sur les sujets spécifiques à ce stage que sur des thèmes plus généraux liés à l'espace. Un grand merci à vous.

Je tiens également à exprimer ma gratitude envers l'ensemble du personnel du laboratoire, et plus particulièrement aux chercheurs et doctorants des équipes planétologie et astrochimie, pour leur soutien et leur collaboration.

Merci à Julie et Marius, mes camarades de bureau, pour les semaines agréables passées à travailler avec vous. Votre présence a grandement contribué aux aspects plus informels et conviviaux de ce stage.

Enfin, je remercie sincèrement M. Marc Fisher pour son accompagnement académique, ses réponses précises à mes questions et son intérêt pour le sujet traité. Ce fut un réel plaisir d'échanger avec vous.

I. REMERCIEMENTS	2
II. SOMMAIRE	3
III. INTRODUCTION.....	5
<i>I.1 Présentation du Laboratoire</i>	<i>5</i>
<i>I.2 L'équipe Planétologie</i>	<i>5</i>
<i>I.3 Objectifs du Stage.....</i>	<i>6</i>
IV. TRVAIL EFFECTUÉ.....	7
<i>II.1 Contexte scientifique.....</i>	<i>7</i>
a. Planète Mars	7
b. Mission Mars 2020.....	7
c. L'instrument Supercam	8
d. Le modèle de Shkuratov	8
e. Procédure d'ajustement	9
<i>II.2 Travail effectué.....</i>	<i>11</i>
a. Optimisation du simplexe.....	11
b. Test de la procédure sur des spectres de laboratoire.....	13
c. Test de la procédure sur une cible Martienne – Étude de Hastaa Sol106	18
d. Test de la procédure sur une deuxième cible Martienne – Étude de Chiniak Sol565	26
e. Critiques, perspectives et améliorations	29
V. PERSPECTIVES FUTURES.....	31
<i>III.1 Analyse de l'environnement de travail.....</i>	<i>31</i>
a. Aspects matériels.....	31
b. Aspects sociaux et humains.....	31
c. Aspects organisationnels de mon travail	31
<i>III.2 Perspectives professionnelles futures</i>	<i>32</i>
a. Première expérience dans le spatial	32
b. Première expérience dans le secteur de la recherche	32
VI. CONCLUSIONS	34
VII. BIBLIOGRAPHIE ET FIGURES	35
<i>V.1 Figures.....</i>	<i>35</i>
<i>V.2 Bibliographie.....</i>	<i>36</i>

I.1 Présentation du Laboratoire

L'Institut d'Astrophysique Spatiale (IAS) est une unité mixte de recherche créée en 1989, associant le CNRS et l'Université Paris-Saclay, située sur le campus universitaire d'Orsay. Le laboratoire rassemble 140 personnes, comprenant des chercheurs, enseignants-chercheurs, ingénieurs, techniciens, personnels administratifs, doctorants, et post-doctorants. L'IAS mène des recherches en astrophysique couvrant un large éventail de domaines, parmi lesquels on retrouve la physique du soleil et des galaxies, la cosmologie, l'étude de la formation et de l'évolution des planètes du système solaire et des exoplanètes et enfin l'étude de la matière extraterrestre, du gaz et des poussières interstellaires.



Figure 1 : Photo du laboratoire. Crédits : IAS

Reconnu comme l'un des grands laboratoires spatiaux européens, l'IAS fonde une grande partie de ses recherches sur les observations réalisées depuis l'espace, grâce à des instruments embarqués à bord des missions spatiales d'envergure. Les équipes scientifiques et techniques du laboratoire participent à la définition, à la conception, à l'intégration et à la vérification des performances de ces instruments avant leur lancement. Une fois les missions en cours, l'unité prend en charge l'exploitation opérationnelle de certains instruments, la collecte des données, et leur mise à disposition pour la communauté scientifique, tant au niveau national qu'international. Les projets de l'IAS sont principalement réalisés en collaboration avec d'autres laboratoires spatiaux, en France et à l'étranger. L'institut est impliqué dans la majorité des missions d'astrophysique du CNES et de l'Agence Spatiale Européenne (ESA), et collabore régulièrement avec d'autres agences spatiales comme la NASA aux États-Unis ou la JAXA au Japon.

Les personnels de l'Institut d'Astrophysique Spatiale (IAS) jouent un rôle actif dans l'enseignement à l'Université Paris-Saclay aux niveaux Licence, Master et Doctorat, avec un focus particulier sur des formations en astrophysique, instrumentation et ingénierie spatiale. L'IAS contribue aussi au Master professionnalisant « Outils et Systèmes de l'Astronomie et de l'Espace » et participe à trois écoles doctorales. Chaque année, des centaines d'heures de cours et travaux pratiques sont dispensées, offrant aux étudiants un accès à un environnement informatique spécialisé. L'IAS forme de nombreux doctorants, accueille des stagiaires et apprentis, et participe à la promotion des métiers scientifiques auprès des collégiens.

I.2 L'équipe Planétologie

Lors de mon stage, j'ai été accueilli et encadré au sein de l'équipe Planétologie du laboratoire par François POULET (astronome enseignant-chercheur) et Clément ROYER (post-doctorant). L'équipe se concentre sur l'étude des surfaces planétaires et des satellites du système solaire pour mieux comprendre leur formation, leur évolution et leur potentiel astrobiologique. Les recherches sont axées sur trois domaines principaux :

- l'évolution des corps planétaires,
- l'analyse des exoplanètes et de leurs atmosphères
- l'étude des conditions initiales du Système Solaire à travers la matière primitive.

Elle est fortement impliquée dans plusieurs missions spatiales majeures, telles que Bepi-Colombo, JUICE, et ARIEL, et a contribué de manière significative à des missions comme MarsExpress et Rosetta.

I.3 Objectifs du Stage

Ce stage est effectué dans le cadre de ma deuxième année de formation Ingénieur Civil des Mines (ICM) à l'école des Mines de Saint-Étienne. Étant passionné par l'aérospatial et l'astrophysique et me dirigeant vers un master d'astrophysique en double diplôme pour la suite de mes études, j'ai souhaité effectuer ce stage dans un laboratoire d'études spatiales.

J'ai travaillé sur la mission Mars 2020 et plus précisément sur les données issues de l'instrument Supercam (IRS) embarqué à bord du rover Perseverance qui explore le sol martien depuis 2021. Ce stage est dans la continuité d'un travail entamé il y a plusieurs années qui consiste en l'ajustement de modèles de transfert radiatif existants en les associant à une méthode bayésienne de type Markov Chain Monte Carlo (MCMC) pour les appliquer aux spectres de réflectance IRS issus de cibles martiennes. Cette approche vise à évaluer des caractéristiques minéralogiques des sols martiens, telles que la quantité de minéraux et la taille des grains. Bien que ces modèles aient déjà montré leur efficacité pour estimer la minéralogie des zones étudiées par Perseverance, une lacune persiste concernant la connaissance des incertitudes associées aux paramètres obtenus. Ainsi, l'utilisation de la statistique bayésienne pour générer des distributions de ces paramètres permet de quantifier les incertitudes sur les abondances minéralogiques fournies par le modèle. Cette estimation est essentielle pour améliorer la précision et la fiabilité des résultats, et pour affiner notre compréhension du passé géologique et biologique de Mars.

L'objectif de mon stage était donc de comprendre, prendre en main, tester et approfondir le travail mené pour améliorer les résultats (précision des ajustements, minéraux trouvés, étalement des distributions...) et ainsi permettre une meilleure exploitation de cette méthode pour l'étude du sol martien.

Ce rapport débutera par une brève mise en contexte scientifique (géologie de Mars et mission Mars 2020) ainsi qu'une description du travail déjà effectué (modèle de Shkuratov, MCMC). Je présenterai ensuite la méthodologie appliquée ainsi que les résultats obtenus. Pour finir, j'expliquerai ce que m'a apporté ce stage et en quoi il m'a permis d'affiner mon projet professionnel.

II.1 Contexte scientifique

a. Planète Mars

Mars, planète de notre système solaire, est d'un grand intérêt pour les astronomes en raison de ses similitudes et de ses particularités par rapport à notre planète. Bien que son atmosphère soit très mince et composée principalement de dioxyde de carbone (CO₂), elle présente un cycle saisonnier semblable au nôtre. Mars possède deux satellites naturels, Phobos et Deimos, dont l'origine reste débattue. Historiquement, Mars a suscité de nombreux fantasmes, certains croyant même en l'existence de vie sur la planète, jusqu'aux observations de la sonde Mariner 4 en 1965 qui ont révélé son caractère désertique et géologiquement inactif. (1)

Mars a traversé plusieurs ères géologiques : le Noachien, marqué par une atmosphère dense et la présence d'eau liquide (2), l'Hespérien, caractérisé par une intense activité volcanique et une perte progressive de l'atmosphère (3), et l'Amazonien, durant lequel l'activité géologique a fortement diminué. Aujourd'hui, la surface martienne est principalement basaltique, recouverte de poussière silicatée riche en oxyde de fer, ce qui lui donne sa couleur rouge. Cette poussière, soulevée par les tempêtes, influence les mesures de réflectance de surface. Ces mesures de réflectance réalisées directement depuis la surface martienne, comparées aux observations orbitales comme celles de la sonde Mars Reconnaissance Orbiter, offrent une approche plus précise et détaillée pour étudier la composition minéralogique de la planète, notamment en contournant l'effet des aérosols et en observant de près les assemblages minéralogiques.

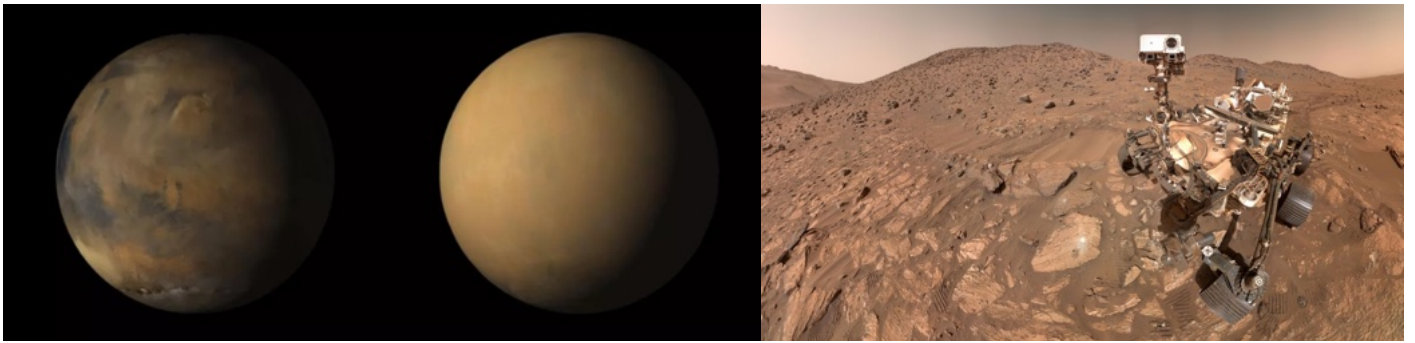


Figure 2 : Planète Mars (à droite) - rover Perseverance (à gauche). Credit : NASA/JPL-Caltech/MSSS

b. Mission Mars 2020

Le rover Perseverance, arrivé sur Mars le 18 février 2021 dans le cadre de la mission Mars 2020, explore le cratère Jezero, un site d'intérêt géologique et exobiologique en raison de la présence de minéraux argileux qui suggèrent une présence d'eau passée. La mission Mars 2020 a quatre principaux objectifs (4):

- approfondir la compréhension de la géologie martienne
- rechercher des traces d'habitabilité passée et d'éventuelles biosignatures
- prélever des échantillons de roches pour un futur retour sur Terre
- tester des technologies en vue d'une exploration humaine de Mars.

Le rover est équipé de divers instruments avancés, dont des caméras multispectrales, un analyseur des conditions météorologiques, un générateur d'oxygène, et plusieurs spectromètres et imageurs pour l'étude des roches et de la sous-surface martienne.

c. L'instrument Supercam

Parmi les instruments embarqués, nous allons nous concentrer sur SuperCam. Cet ensemble a été conçu pour analyser la minéralogie de surface du cratère Jezero. Développé et calibré en partie par des laboratoires français comme l'IRAP, le LESIA et l'IAS, SuperCam comprend six instruments :

- LIBS : spectromètre à plasma induit par laser – *Composition élémentaire*
- **IRS : spectromètre infrarouge passif – *Minéralogie***
- VIS : spectromètre d'imagerie visible – *Texture et morphologie des roches*
- TRR/TRL : spectromètres Raman/luminescence résolues dans le temps – *Minéralogie*
- Un microphone – *Enregistrement des impacts du laser, phénomènes atmosphériques, bruits du rover*
- Une caméra – *Contexte géologique des roches*

Le spectromètre proche-infrarouge passif, IRS, est au cœur de ce stage car c'est lui qui nous fournit les données à étudier. Son rôle est d'analyser la composition du régolithe et des roches martiennes, d'identifier d'éventuelles biosignatures et traces d'altération aqueuse passée, ainsi que d'évaluer la morphologie des sols (5). Il capture des spectres de réflectance de cibles situées à 2-3 mètres de distance, dans une gamme de longueurs d'onde allant de $1,3\ \mu\text{m}$ à $2,6\ \mu\text{m}$, avec une résolution spectrale de 5 à 20 nm et une résolution spatiale d'environ un millimètre à 2 mètres de distance. Ces spécifications permettent d'identifier les signatures minéralogiques.



Figure 3 : Instrument Supercam. Crédit : CNES/VR2PLANETS

Voici des exemples de spectres de réflectance issus de Mars. Celui-ci provient du sol106, c'est-à-dire le 106ème jour de mission du rover sur la planète rouge (une journée martienne est appelée sol). Plus précisément, il est issu du site géologique 'Hastaa'. Sur l'image visible de gauche on distingue 10 cibles de mesures (petits cercles rouges). L'image de droite renseigne les spectres de réflectance de chaque cible.

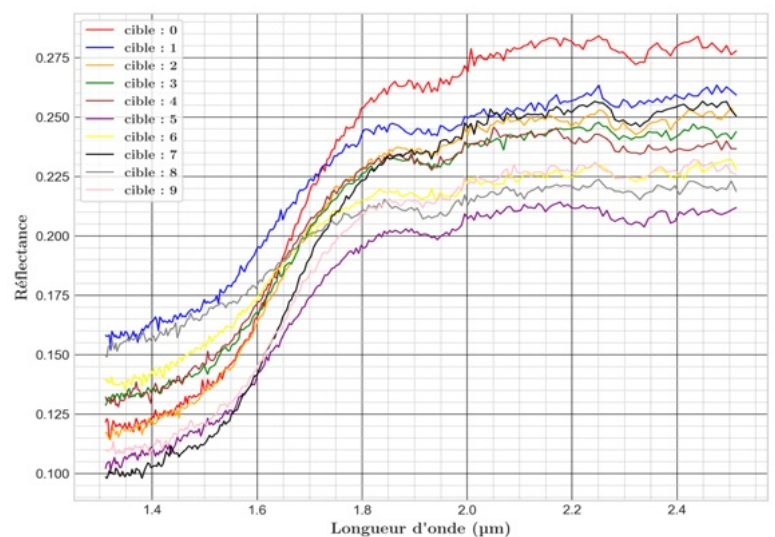
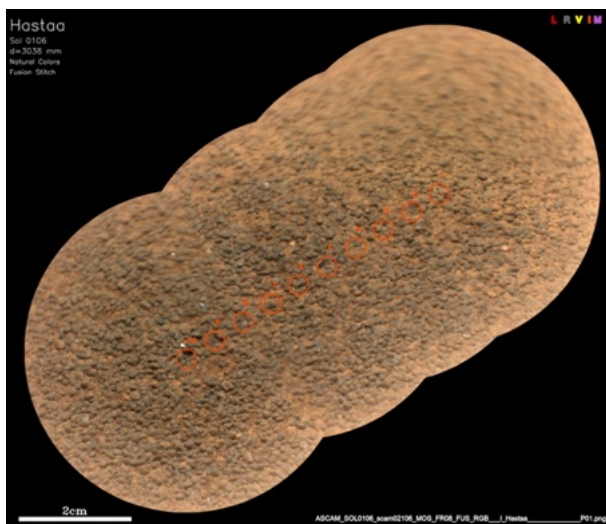


Figure 4 : Photo du site Hastaa (à droite) et spectres de réflectance associés (à gauche)

d. Le modèle de Shkuratov

L'exploitation des spectres de réflectance du spectromètre IRS nécessite l'application d'un modèle de transfert radiatif. Un modèle de transfert radiatif est un outil mathématique/physique permettant de simuler et comprendre la propagation d'un rayonnement électromagnétique au travers d'un milieu. Il prend en compte des phénomènes physiques tels que l'absorption, la diffusion, l'émission et la réflexion du rayonnement par les particules et les

molécules présentes dans le milieu. Dans mon cas, j'étudierai le rayonnement infrarouge issu de cibles présentes sur le sol martien. Ce modèle va nous permettre de relier l'albédo (rapport entre la quantité de lumière réfléchie et la quantité de lumière incidente) de la surface étudiée avec certaines de ses caractéristiques minéralogiques. Si le calcul d'une réflectance à partir d'une composition minéralogique est maîtrisé depuis les années 1980 grâce au modèle de Hapke (6), il a fallu attendre 1998 pour qu'un nouveau modèle, publié par Y. Shkuratov et L. Starukhina (7), permette l'inversion, c'est-à-dire la déduction d'une composition minéralogique à partir d'une réflectance de surface. Le modèle de Shkuratov rend mieux compte de la réalité physique car il prend en compte la porosité des grains et distingue et quantifie la diffusion vers l'arrière de la diffusion vers l'avant, cette dernière étant plus importante (le modèle de Hapke considérait une diffusion isotrope et ne prenait pas en compte la porosité des grains).



Figure 5 : Représentation du modèle de Shkuratov avec 3 éléments

Il convient aussi de définir un type de mélange permettant de modéliser l'agencement des différents composants. Le modèle de Shkuratov considère quatre types de mélange :

- Mélange dit "sableux" de particules dont la taille est largement supérieure à la longueur d'onde ($\gg \lambda$), qu'elles soient transparentes ou non.
- Mélange de particules transparentes de taille $\gg \lambda$, contenant des inclusions de tailles $\ll \lambda$.
- Particules de taille $\gg \lambda$, entourées de fins vernis absorbants ($\ll \lambda$).
- Particules de taille $\gg \lambda$ hétérogènes aux échelles $\ll \lambda$.

Mon étude se concentrera uniquement sur les mélanges de type sableux, car ils sont les plus simples. De plus, seuls les deux premiers types de mélange sont utilisés dans le cadre des modélisations du sol martien. Il permet de considérer le sol comme une surface homogène. Dans ce cas, l'albédo de diffusion est calculé indépendamment pour chaque grain puis est moyenné pour obtenir le spectre de réflectance du mélange.

e. Procédure d'ajustement

Ce modèle théorique va à présent être associé à une procédure d'ajustement pour permettre d'obtenir la composition minéralogique associée au spectre de réflectance d'une cible. On commence par choisir une liste de composants supposés présents dans notre échantillon (généralement entre 3 et 6 composants).

On définit alors :

- Les paramètres variables que l'on cherche à optimiser :
 - o Abondance de chaque composé
 - o Taille de grain de chaque composé
- Les constantes :
 - o Constantes optiques de chaque composé
- Le spectre réel de notre cible issu du spectromètre IRS
- Le spectre modélisé que l'on obtient à l'issue de la procédure d'ajustement

Ainsi si l'on suppose la présence de 4 éléments dans notre échantillon, nous aurons 8 paramètres à optimiser (4 abondances et 4 tailles de grains).

La procédure est alors la suivante : on choisit des valeurs de paramètres dans une plage physiquement acceptable. On forme alors un vecteur de paramètres qui, implémenté dans notre modèle théorique, nous permet d'obtenir un premier spectre théorique de réflectance. On essaie ensuite d'ajuster ce spectre théorique au spectre réel grâce à une procédure d'optimisation. On recherche à reproduire le plus fidèlement possible le spectre réel en modifiant la valeur des paramètres. Une fois l'ajustement satisfait, un vecteur de paramètres optimisé est renvoyé par la procédure. Ce vecteur nous permet alors de tracer le spectre théorique final de notre cible. Les valeurs du vecteur de paramètres sont les abondances et tailles de grains des différents composants dont nous avons supposé l'existence au début du problème. Cette procédure est représentée sur le schéma suivant :

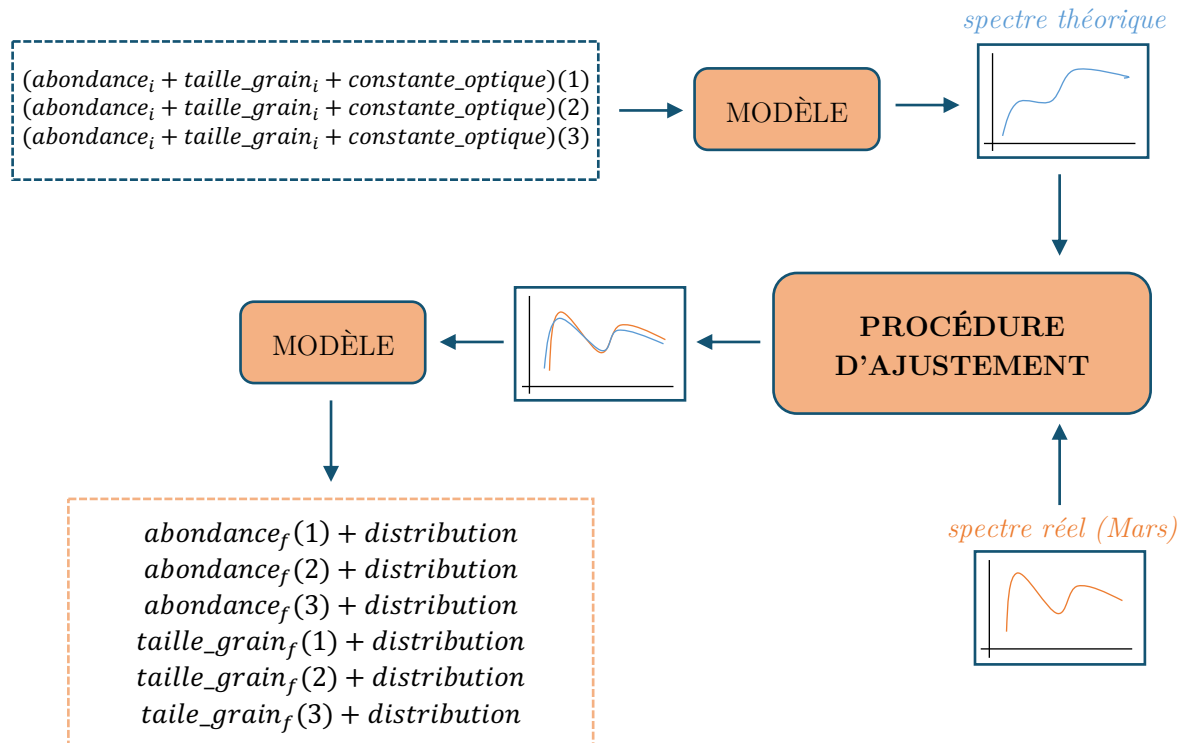


Figure 6 : Schéma de la procédure d'ajustement

Mon objectif était donc d'améliorer la procédure d'ajustement. En effet, je disposais au début de mon stage d'une procédure comme décrite précédemment, codée en Python par une précédente stagiaire du laboratoire. Le programme fonctionnait mais ne renvoyait pas toujours des résultats satisfaisants.

La procédure d'ajustement, cœur du programme, était la suivante :

- Maximisation de la fonction de vraisemblance (ou likelihood) pour obtenir une première estimation des paramètres optimaux
- Application d'un algorithme de Markov Chain Monte Carlo (MCMC), où les marcheurs sont initialisés au vecteur de paramètres optimaux renvoyé par l'étape précédente, avec une petite perturbation ajoutée à la position de chaque marcheur pour que chacun d'eux parte avec une position indépendante.
- Exploration des marcheurs dans l'espace des paramètres
- Au bout d'un nombre d'itérations choisi, la MCMC cesse

Le choix s'est porté sur un algorithme de Markov Chain Monte Carlo (MCMC) car ces méthodes figurent parmi les techniques d'inférence bayésienne les plus couramment utilisées. Leur principe repose sur deux concepts clés : les méthodes Monte Carlo et les chaînes de Markov. Les méthodes Monte Carlo consistent à générer aléatoirement des échantillons et à les accepter ou rejeter selon certains critères, dans le but de converger vers une estimation fiable.

Les chaînes de Markov, quant à elles, sont des processus stochastiques où chaque état suivant dépend uniquement de l'état actuel, sans tenir compte des états précédents.

La méthode MCMC combine ces deux principes : on commence par un point initial dans l'espace des paramètres, avec une distribution a priori donnée. Ensuite, un nouveau point est proposé en utilisant une fonction de proposition. Ce point est accepté ou rejeté selon un critère d'acceptation, qui compare les distributions à posteriori du point proposé et du point actuel. Si le point est accepté, il devient le point de départ pour l'itération suivante ; sinon, le point actuel reste inchangé. Ce processus est répété pour un grand nombre d'itérations, permettant d'explorer l'espace des paramètres de manière exhaustive.

Dans ce contexte, l'algorithme spécifique utilisé est l'échantillonneur d'ensemble invariant affine (8), un algorithme de MCMC particulièrement efficace pour les problèmes où les paramètres présentent de fortes corrélations. Cet algorithme fait appel à plusieurs "marcheurs" qui explorent simultanément l'espace des paramètres. Chaque marcheur propose de nouveaux points en ajoutant un bruit gaussien à sa position actuelle, ce qui permet d'explorer l'espace des paramètres de manière plus variée. Le critère d'acceptation se base sur le rapport des distributions à posteriori entre le nouveau point proposé et la position actuelle du marcheur. Si ce rapport est supérieur ou égal à un nombre aléatoire uniformément tiré entre 0 et 1, le nouveau point est accepté ; sinon, il est rejeté. L'approche bayésienne permet ainsi de générer une distribution des paramètres estimés, prenant en compte les incertitudes inhérentes au modèle et aux données observées.

II.2 Travail effectué

a. Optimisation du simplexe

Problème : l'ajustement trouvé par la méthode du simplexe était insuffisant en termes de précision. Par conséquent, l'application d'un algorithme de MCMC sur un ajustement préliminaire, jugé moyen, perdait de sa pertinence.

Ma première tâche a été d'améliorer la procédure du simplexe, permettant de déterminer un vecteur de paramètres optimaux pour l'initialisation de l'algorithme de MCMC. Pour rappel, l'algorithme du simplexe, en particulier la méthode de Nelder-Mead, est une technique d'optimisation qui permet de minimiser ou maximiser une fonction dans un espace de paramètres, sans nécessiter le calcul des dérivées. Dans notre cas, la fonction à maximiser est une fonction de vraisemblance qui évalue l'ajustement du spectre théorique au spectre réel.

En Python, la bibliothèque *scipy.optimize* propose une méthode appelée *minimize*, très utile pour la minimisation ou maximisation de fonctions. On peut choisir parmi plusieurs méthodes d'optimisation, telles que : 'Nelder-Mead', 'BFGS', 'Newton-CG', 'L-BFGS-B', 'SLSQP', 'trust-constr', etc. Le choix a été fait d'utiliser 'Nelder-Mead' car cette méthode ne nécessite pas de calcul de dérivées. Cependant, cette méthode ne permet pas de prendre en compte des contraintes sur les paramètres. Or, c'est justement l'un des aspects importants de notre étude. En effet, les paramètres que nous étudions (abondance et taille de grain) doivent respecter certaines bornes et contraintes.

Bornes :

- Abondances : $0 \ll a \ll 1$
- Taille de grain : *borne inférieure : $5\mu\text{m}$ (limite liée à l'optique géométrique)*
borne supérieure : en fonction du composé, entre 200 et $1000\mu\text{m}$

Contraintes :

- Sommes des abondances égale à 1 : $\sum a = 1$

Bien qu'il soit possible d'implémenter des bornes pour les paramètres, il n'était pas possible d'implémenter la contrainte, ce qui a conduit à ce que, pour certains ajustements, le programme renvoie un vecteur de paramètres avec une somme des abondances parfois supérieure à 1, ce qui est physiquement impossible.

J'ai donc testé d'autres méthodes, telles que 'L-BFGS-B', 'SLSQP' ou encore 'trust-constr', spécialement développée pour la gestion des contraintes. Mais à chaque fois, un élément rendait les ajustements insatisfaisants. Pour les méthodes basées sur les gradients, telles que celles de Newton, le calcul des gradients ou des matrices hessiennes rendait la procédure très complexe à implémenter d'un point de vue informatique, en raison de la complexité des fonctions manipulées. Globalement, ce qui me posait problème dans l'ensemble de ces méthodes est le fonctionnement "en boîte noire". On ne peut maîtriser que très peu de paramètres des méthodes, ce qui rend leur application difficile pour des problèmes complexes. Une autre difficulté à prendre en compte est la gestion des minima locaux. En effet, le programme peut trouver un vecteur de paramètres pour lequel la fonction semble minimale, mais peut-on être certain que ce point représente un minimum global et non local ? Là encore, il est difficile de conclure.

Pour toutes ces raisons, j'ai décidé de coder entièrement et à la main une méthode du simplexe. Mes motivations derrière ce choix ont été, d'une part, de bien comprendre le fonctionnement de l'algorithme de Nelder-Mead ; deuxièmement, de contrôler chaque étape de l'algorithme ; et enfin, d'implémenter des contraintes et rendre l'algorithme "global", c'est-à-dire tenter de se prémunir des minima locaux. Le fonctionnement général de cette méthode est le suivant :

1. **Initialisation** : Le simplexe est initialisé avec $n+1$ points, qui sont choisis de manière à couvrir l'espace des paramètres de manière adéquate. Chaque point représente un ensemble de valeurs des paramètres de la fonction à optimiser.
2. **Évaluation** : Une fonction coût est évaluée à chaque sommet du simplexe, ce qui donne un ensemble de valeurs de la fonction correspondant à chaque point.
3. **Manipulation du Simplexe** :
 - **Réflexion** : Le point le plus élevé (celui où la fonction a la plus grande valeur, si on cherche à minimiser) est déplacé en réfléchissant le simplexe par rapport à son centre de gravité. L'idée est de trouver un nouveau point qui pourrait donner une meilleure valeur de la fonction.
 - **Expansion** : Si la réflexion conduit à une amélioration significative, le simplexe est étendu dans cette direction pour explorer encore plus loin.
 - **Contraction** : Si la réflexion ne donne pas de bons résultats, une contraction est effectuée, réduisant la taille du simplexe pour explorer plus près du meilleur point actuel.
 - **Réduction** : Si aucune des étapes précédentes n'améliore la situation, le simplexe est réduit autour du meilleur point trouvé, afin de se concentrer sur une région plus petite.
4. **Convergence** : Le processus continue jusqu'à ce que le simplexe se soit contracté suffisamment autour du point optimal, ou jusqu'à ce qu'une autre condition d'arrêt soit atteinte (dans mon cas un nombre défini d'appel de la fonction coût).

À ce principe de base, j'ai donc ajouté une fonction de vérification des bornes et des contraintes. Cette fonction était appelée chaque fois que le vecteur de paramètres était modifié pour vérifier si le nouveau vecteur satisfaisait bien les contraintes du problème.

Pour globaliser l'algorithme, j'ai mis en place une réinitialisation probabilisée. En effet, la convergence de ce type de méthode peut dépendre du point de départ choisi. Ainsi, une fois que l'algorithme a convergé vers un minimum global potentiel, le programme est réinitialisé avec un point ayant une forte probabilité de ne pas avoir encore été exploré. Cela permet de s'assurer que le programme explore bien l'ensemble de l'espace des paramètres et ne se bloque pas dans des extrema locaux.

Finalement, j'ai réussi à obtenir un programme fonctionnel qui permet de réaliser des ajustements. Voici, ci-contre, un exemple d'ajustement effectué sur un spectre de laboratoire.

On peut voir que l'ajustement n'est pas si mauvais. Les signatures sont bien reproduites, à l'exception du début et de la fin du spectre. J'ai pu comparer les performances de mon algorithme avec un algorithme du simplexe codé il y a longtemps par mon tuteur dans un autres langage. J'arrivais à reproduire ses résultats avec un bon niveau de précision. Cependant mon programme n'était pas du tout optimisé d'un point de vue temps de calcul et espace mémoire, ce qui rendait son usage peu intéressant.

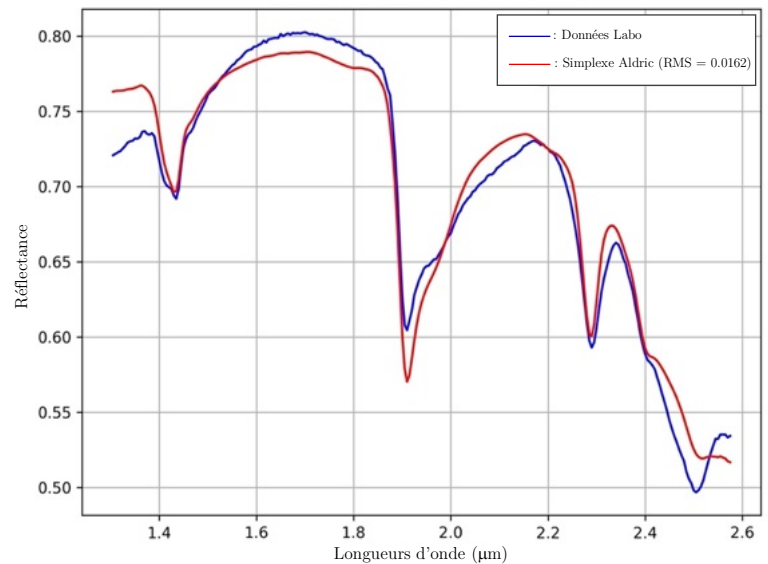


Figure 7 : Exemple d'ajustement simplexe Aldric

Mais ce travail n'a pas été vain car il m'a conduit à une nouvelle idée. Le principal problème avec l'utilisation de la fonction minimize (bibliothèque *scipy.optimize*) était l'obtention de sommes d'abondances supérieures à 1. J'ai pu contourner ce problème en implémentant la contrainte non pas directement dans la procédure d'optimisation, mais dans la fonction de coût dont on recherche le minimum. Ainsi, à chaque appel de la fonction de coût, un test vérifie si la somme des abondances est inférieure à 1. Si ce n'est pas le cas, une pénalité importante est associée au point considéré, ce qui écarte naturellement la procédure des régions peu intéressantes en termes d'optimisation. Cela m'a permis de continuer à utiliser une bibliothèque très efficace (en termes de temps de calcul et d'espace mémoire) tout en résolvant le problème initial. Les résultats de cette amélioration seront abordés dans la partie suivante.

b. Test de la procédure sur des spectres de laboratoire

Problème : jusqu'à présent les tests ont été menés sur des cibles martiennes pour lesquelles il est impossible de connaître la composition minéralogique exacte

En effet, lors de l'implémentation du programme, ce dernier a directement été testé sur des cibles martiennes dont on ne connaît pas la composition exacte (il faudra attendre une mission de retour d'échantillon pour obtenir de telles données). Ainsi, il était difficile de juger de la fiabilité et de la confiance que l'on peut accorder à l'algorithme. L'idée est alors de tester la procédure sur des spectres de laboratoire dont on connaît la composition pour pouvoir régler et affiner la procédure.

Les échantillons étudiés ont été formés par mélange de trois minéraux (dont voici, ci-contre, les spectres) :

- **Magnésite** : famille des carbonates
- **Nontronite** : minéral argileux de la famille des phyllosilicates et plus précisément des smectites (riches en fer)
- **Olivine** : famille des silicates, ici de l'olivine Fo70 sera considérée (olivine composée à 70% de Forstérite)

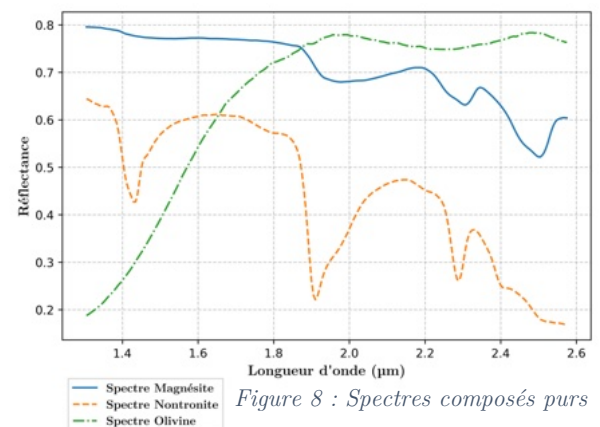
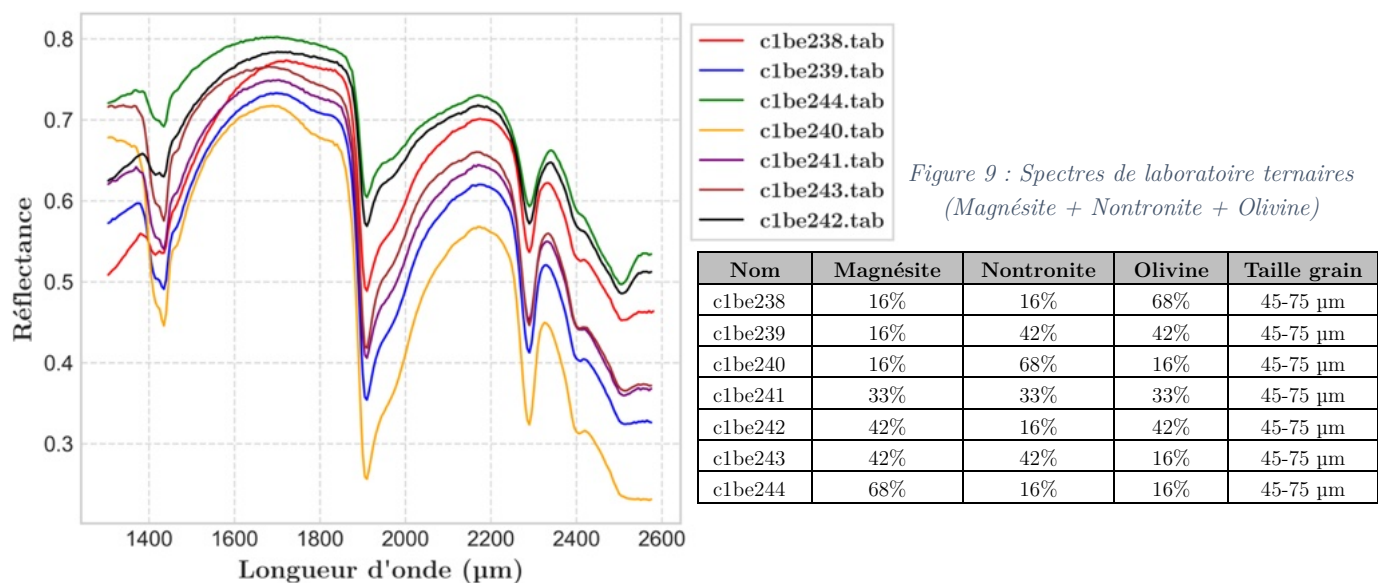


Figure 8 : Spectres composés purs

Les spectres étudiés étaient les suivants :



L'application de la procédure au spectre 243, par exemple, donne les résultats suivants :

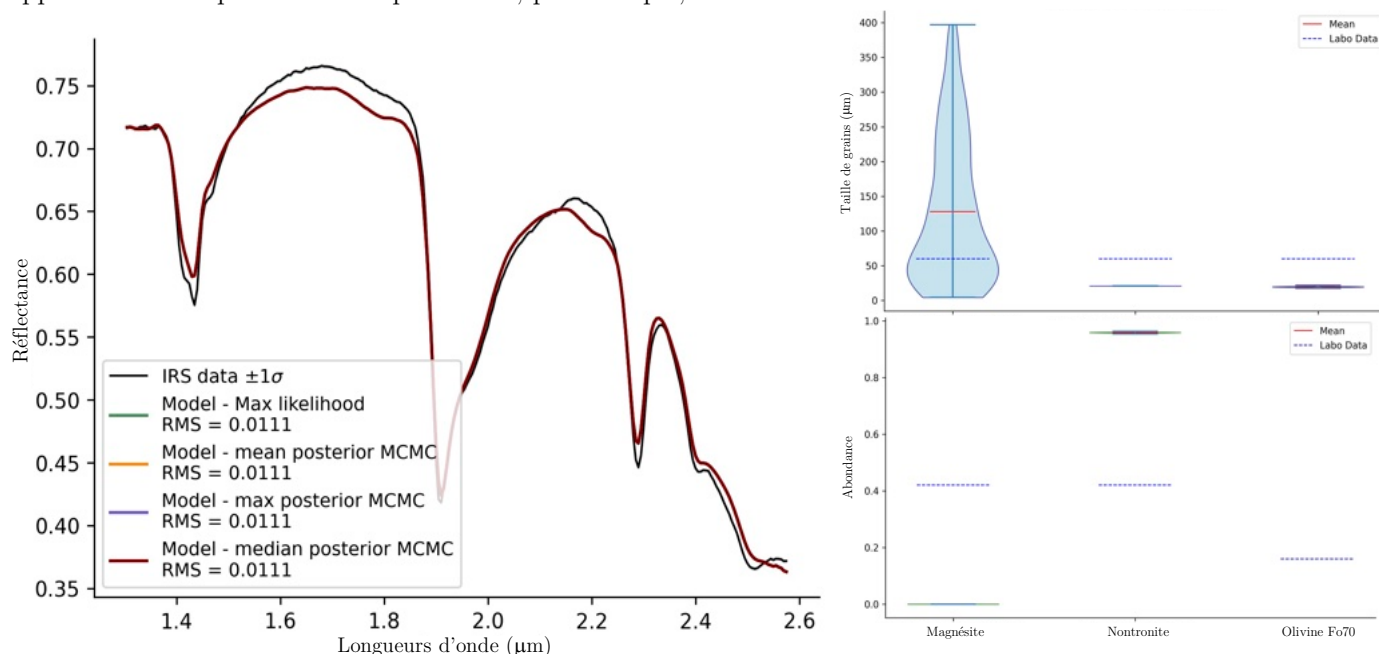


Figure 10 : Ajustement du spectre 243 (à gauche) et distributions des paramètres (à droite)

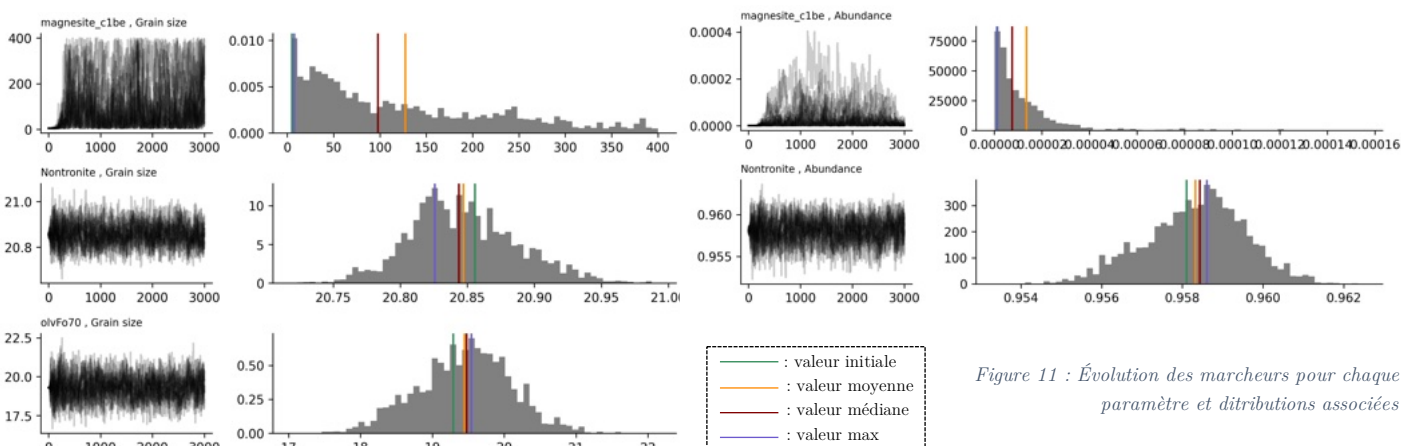


Figure 11 : Évolution des marcheurs pour chaque paramètre et distributions associées

Voici les interprétations que nous avons pu tirer de cette étude. Tout d'abord il est important de préciser que nous effectuons un ajustement à trois éléments. Nous devrions donc avoir 6 paramètres (3 abondances et 3 tailles de grains) cependant seulement 5 sont optimisés (2 abondances et 3 tailles de grains). Cela vient de la contrainte : somme des abondances égale à 1. En effet, pour être certain de respecter la contrainte, une des abondances n'est pas optimisée mais calculée en faisant : $1 - \text{somme des autres abondances}$. Ainsi on est certain d'avoir une somme des abondances égale à 1, ce qui est évidemment nécessaire d'un point de vue physique.

L'ajustement trouvé est plutôt bon (RMS de 1,11%), l'intérêt est surtout de bien reproduire les pics caractéristiques de certains composés. Concernant la composition trouvée, la procédure ne détecte pas de Magnésite, détecte environ 95% de Nontronite et 5% d'Olivine Fo70. Nous avons pu donner une explication possible au fait que la Magnésite n'est pas détectée. En effet, si l'on compare les spectres des composés purs de Magnésite et Nontronite (cf. Figure 8) on remarque que les deux spectres sont très similaires en termes de signatures (les amplitudes des signatures de la Nontronite étant plus importantes). La seule distinction concerne ce qui se passe au-delà de 2.5 microns : le spectre de Magnésite croît tandis que celui de Nontronite décroît. Or on peut voir sur la Figure 10 que le spectre est justement mal ajusté au-delà de 2.5 microns. D'où le fait que la magnésite ne soit pas détectée (car en termes d'amplitude, les spectres de laboratoire se rapprochent du spectre de Nontronite). Le fait que la Magnésite ne soit pas détectée (alors qu'elle est bien présente !) explique aussi le fait que sa taille de grain ne soit pas contrainte. Pour confirmer cette idée, différents tests ont été menés en demandant à la procédure d'ajustement d'accorder plus d'importance à l'ajustement de la bande à 2.5 microns. Le résultat est que la Magnésite est détectée de façon plus importante, cependant cela dégrade l'ajustement sur le reste du spectre et donc l'ajustement global.

On s'est ensuite demandé comment faire pour améliorer cet ajustement ainsi que la détection de la Magnésite. En étudiant l'ajustement de plus près on remarque que lorsque le spectre théorique est le plus éloigné du spectre de laboratoire, il se situe toujours en dessous de ce dernier. Ainsi une hypothèse a été avancée sur le fait qu'il existe peut-être une incertitude sur le niveau de réflectance moyen du spectre de laboratoire. Pour tester cette hypothèse j'ai mené des tests en multipliant le spectre réel par un facteur 0.9 (abaissant ainsi le niveau de réflectance moyen du spectre).

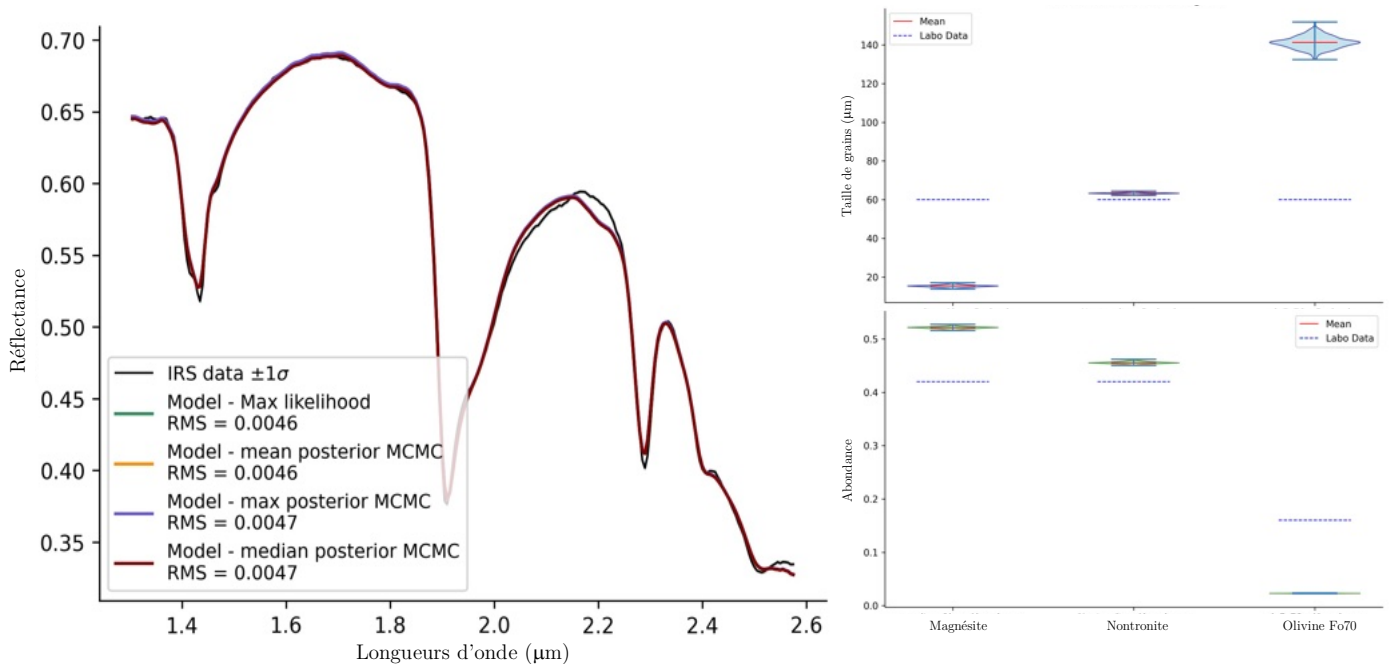


Figure 12 : Ajustement du spectre 243 avec un facteur multiplicatif de 0.9 (à gauche) et distributions des paramètres (à droite)

On remarque que l'ajustement est meilleur (on passe d'un RMS de 1.11% à 0.47%) et que la magnésite est détectée. Cela renforce l'hypothèse selon laquelle il y aurait une incertitude sur le niveau de réflectance moyen. Pour confirmer cela, le test a été mené sur l'ensemble des spectres de laboratoire. On obtient alors :

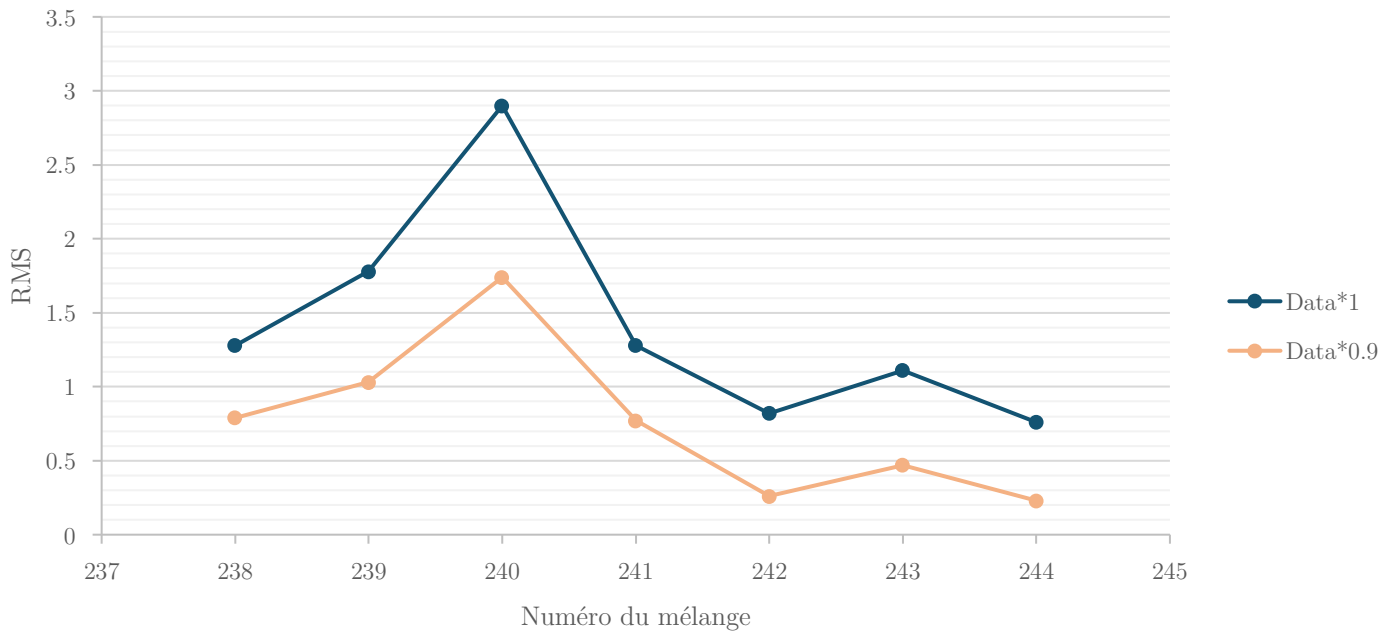


Figure 13 : Comparaison des ajustements entre spectres corrigés et spectres non corrigés

On remarque bien une amélioration du RMS d'un ordre de grandeur similaire pour l'ensemble des cibles.

On s'est ensuite demandé si la valeur de 0,9 du facteur multiplicatif, destiné à corriger l'incertitude sur le niveau de réflectance, était optimale. Pour ce faire, nous avons réalisé plusieurs simulations en faisant varier le facteur correctif entre 0,3 et 1,0 avec un pas de 0,1. Nous avons obtenu les résultats suivants :



Figure 14 : Evolution du RMS du spectre 243 en fonction de la valeur du facteur multiplicatif

On retrouve bien sur ce graphique les valeurs de RMS de 1.11 et 0.46 trouvées dans les tests précédents. De plus cela confirme le fait que la valeur 0.9 du facteur multiplicatif semble être la valeur optimale, du moins c'est la valeur permettant d'obtenir le meilleur ajustement.

D'autre part, cette procédure a aussi été testée sur des spectres de laboratoires composés de deux éléments : de la magnésite et de la Nontronite. Voici les différents spectres :

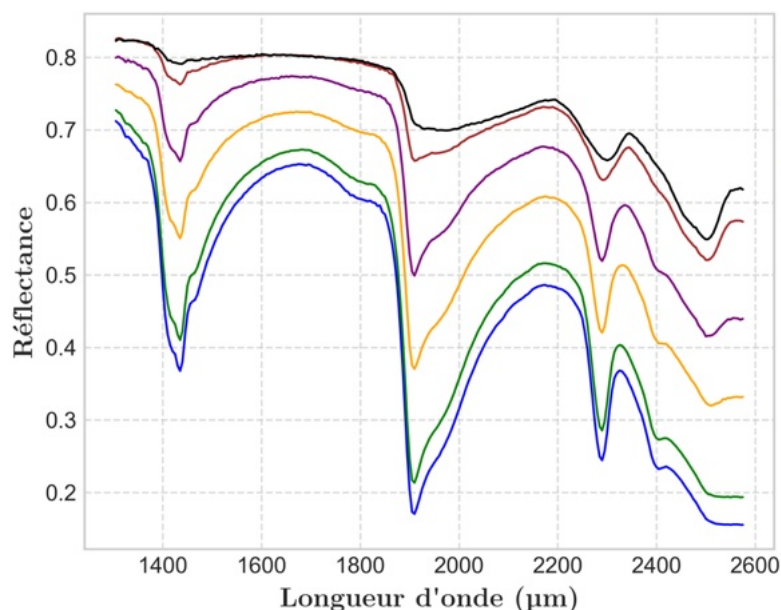


Figure 15 : Spectres binaires (magnétite + nontronite)

Nom	Magnésite	Nontronite	Taille de grain
c1b_1	5%	95%	45-75 μm
c1b_2	10%	90%	45-75 μm
c1b_3	50%	50%	45-75 μm
c1b_4	70%	30%	45-75 μm
c1b_5	90%	10%	45-75 μm
c1b_6	95%	5%	45-75 μm

Ces tests, en simplifiant la composition des cibles, ont permis de juger de la qualité de la procédure en traçant une figure représentant l'abondance théorique en fonction de l'abondance réellement trouvée par le programme. Pour effectuer ces ajustements, les hypothèses suivantes ont été appliquées :

- Multiplication du spectre de laboratoire par 0.9
- Application de la procédure « Nelder-Mead » de la bibliothèque *scipy.optimize*
- Départ d'une situation de départ à 50% de Magnésite – 50% de Nontronite

En appliquant la procédure à l'ensemble des cibles, on obtient alors :

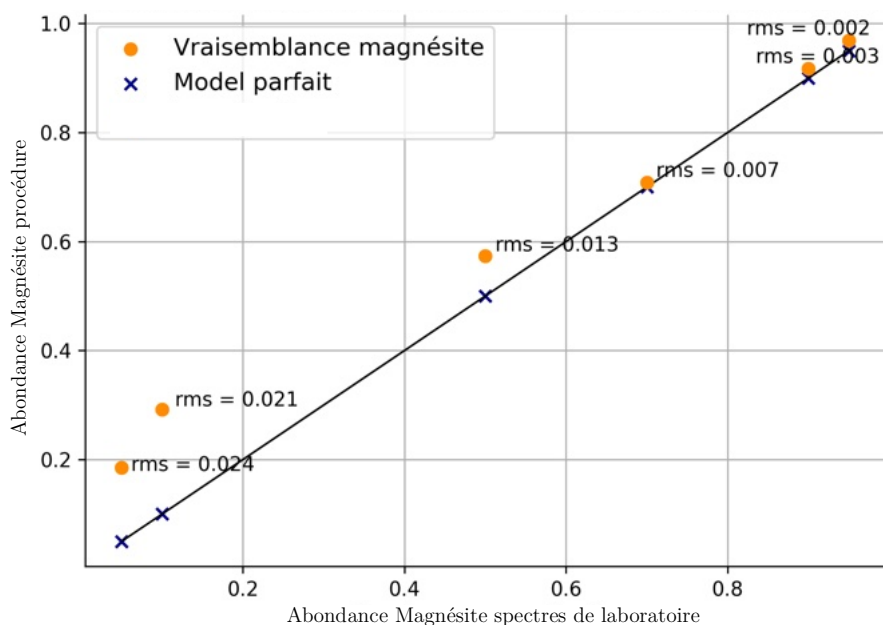


Figure 16 : Abondances procédure en fonction des abondances réelles

On peut voir que les ajustements sont bons (RMS allant de 0.2% à 2.4%). On remarque que moins il y a de Magnésite, moins bon est l'ajustement. En effet si la Magnésite est présente en faible quantité, le programme aura tendance à surestimer sa présence, donnant alors de mauvais ajustements.

De plus, les abondances de Magnésite trouvées sont proches de celles attendues avec une tendance générale de la procédure à surestimer la quantité de Magnésite trouvée. A l'inverse, étant donné qu'il n'y a que deux composants, la quantité de Nontronite est donc sous-estimée.

De façon générale, cela permet de valider la précision et le bon fonctionnement de l'algorithme. La procédure permet en effet de trouver des ajustements précis et des abondances proches de la réalité.

c. Test de la procédure sur une cible Martienne – Étude de Hastaa Sol106

Problème : les tests précédemment effectués sur cette cible donnaient des ajustements pouvant être améliorés

Sur Hastaa la précédente procédure implémentée par la précédente stagiaire donnait un ajustement avec un RMS de 0.24% (pouvant être amélioré). De plus l'une des bandes caractéristiques n'était pas bien reproduite et certaines tailles de grains dépassaient une limite physiquement acceptable. Grâce au travail précédemment effectué (optimisation du simplexe et tests sur des spectres de laboratoire) nous allons appliquer notre nouvelle procédure et essayer d'améliorer l'ajustement et les distributions des paramètres.

Hastaa est une zone de régolithe observée par le rover lors du Sol106 (106^{ème} jour de mission). La figure suivante nous montre une image visible comprenant un zoom sur les cibles étudiées, au nombre de 10 (à droite), ainsi que la localisation du Sol106 sur le parcours mené par le rover depuis le début de la mission (à gauche).



Figure 17 : Localisation de Hastaa sur le parcours du rover (à gauche) et image des cibles (à droite)

Les 10 spectres de réflectances associés aux 10 cibles sont représentées ci-dessous :

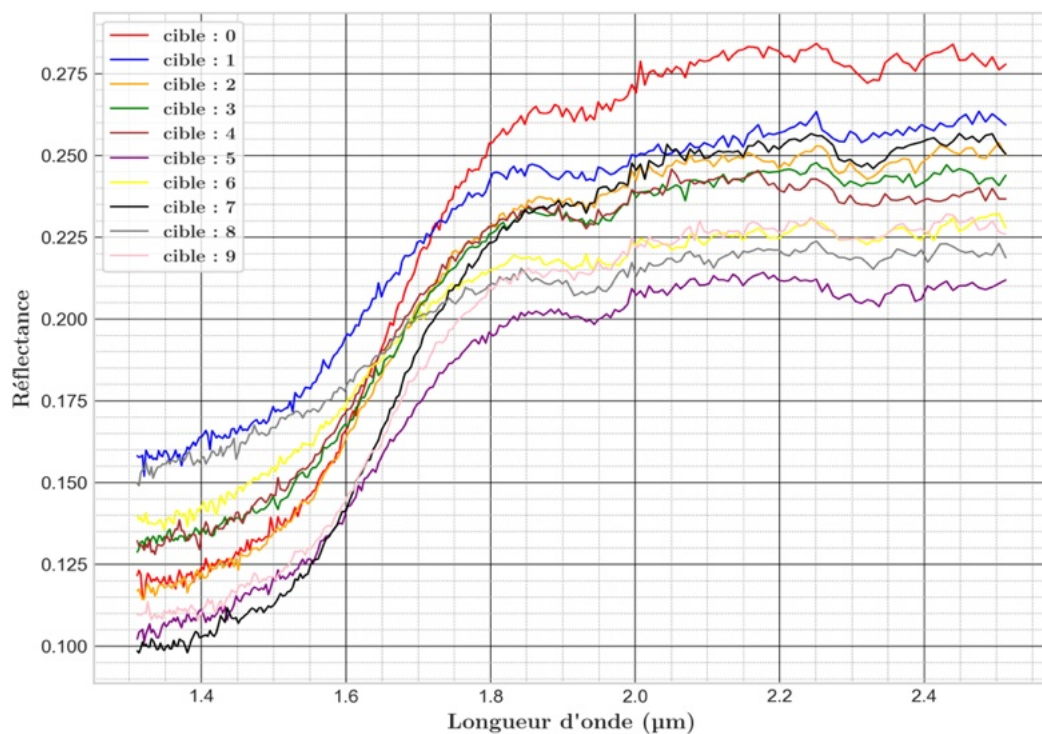


Figure 18 : Spectres de réflectance issus des cibles de Hastaa

Pour ces ajustements, nous avons supposé la présence de 6 éléments :

- **Augite** : Minéral de la famille des pyroxènes, présent dans les roches ignées mafiques et métamorphiques.
- **Pigeonite** : Pyroxène similaire à l'augite, avec moins de calcium, trouvé dans les roches volcaniques.
- **Nontronite** : Minéral argileux de la famille des phyllosilicates, riche en fer, formé par altération hydrothermale.
- **Serpentine** : Groupe de phyllosilicates formés par altération de roches ultramafiques.
- **Olivine Fo70** : Silicate avec 70% de forstérite, présent dans les roches ultramafiques.
- **Olivine Fo40** : Silicate avec 40% de forstérite, plus riche en fer, trouvé dans les roches ultramafiques.

Ce choix a été fait en se basant sur la comparaison des spectres des composés purs avec ceux des cibles de Hastaa, ainsi que sur l'expertise et les conseils de mes tuteurs. Dans ce cas, le spectre de données réelles n'a pas été multiplié par 0.9 étant donné que les ajustements ne présentaient pas de défauts de niveau de réflectance moyen. Je vais d'abord présenter l'ajustement de deux cibles individuelles, les cibles 2 et 4, qui présentent chacune des configurations géologiques différentes et intéressantes à étudier.

- Ajustement de la cible 4 :

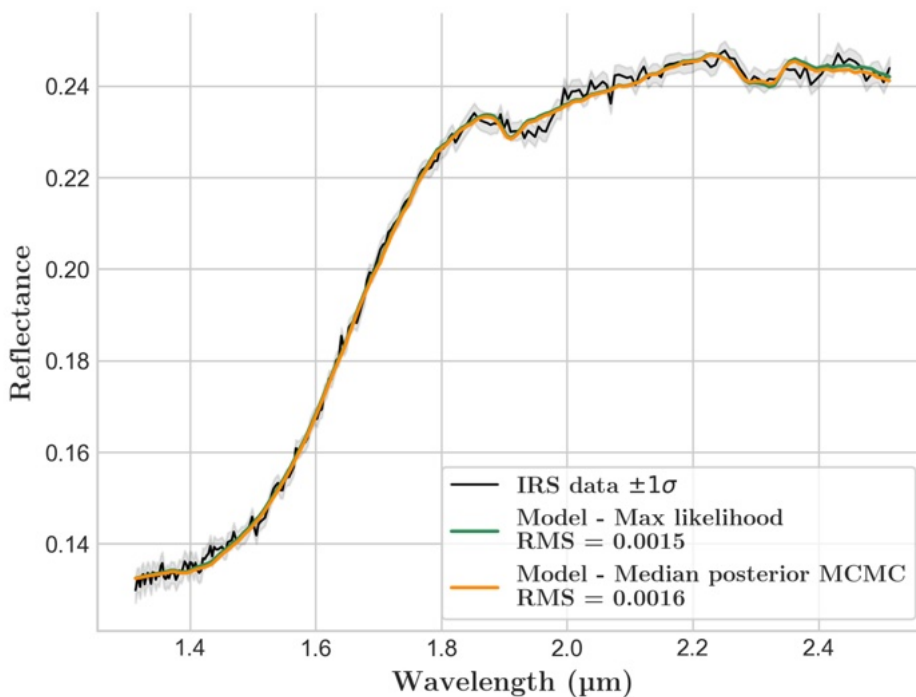


Figure 19 : Ajustement de la cible 4 - Hastaa

Hypothèses :

- pas de multiplication du spectre de données réelles par 0.9
- procédure Simplexe (Nelder-Mead de *scipy.optimize*) puis algorithme de MCMC initialisé au résultat renvoyé par le simplexe
- 4000 itérations avec 40 marcheurs
- facteur de remplissage de 0.8

Les résultats de paramètres obtenus sont les suivants :

Minéraux	Abondance	Taille de Grain (μm)
Augite	21.98%	721.8
Pigeonite	3.45%	69.4
Nontronite	2.55%	115.6
Serpentine	33.94%	16.5
Olivine Fo70	1.34%	665.7
Olivine Fo40	36.74%	345.1

On peut voir que la procédure produit un très bon ajustement avec un RMS de 0.16%. Les signatures spectrales importantes sont bien reproduites.

La cible semble présenter une majorité d'Augite, de Serpentine et d'Olivine Fo40. L'Olivine Fo70 est détectée en très faible quantité (comme en témoigne le fait que la taille des grains d'Olivine Fo70 est difficilement contrainte) cependant sa présence est nécessaire pour obtenir un ajustement de cette qualité. On peut probablement en déduire que l'Olivine est présente sous une forme proche de l'Olivine Fo40 avec une teneur en forstérite légèrement supérieure à 40%.

Les minéraux altérés (Nontronite et Serpentine) sont nécessaires pour reproduire la bande à 1.9 microns caractéristique d'une altération aqueuse et donc de la présence passée d'eau liquide au niveau de cette cible.

A propos de la procédure d'optimisation, on peut voir que les paramètres sont assez bien contraints tout en assurant une plage d'exploration des paramètres suffisante pour se prémunir des extremums locaux. La procédure s'effectue rapidement (4000 itérations) et est robuste au point de départ choisi.

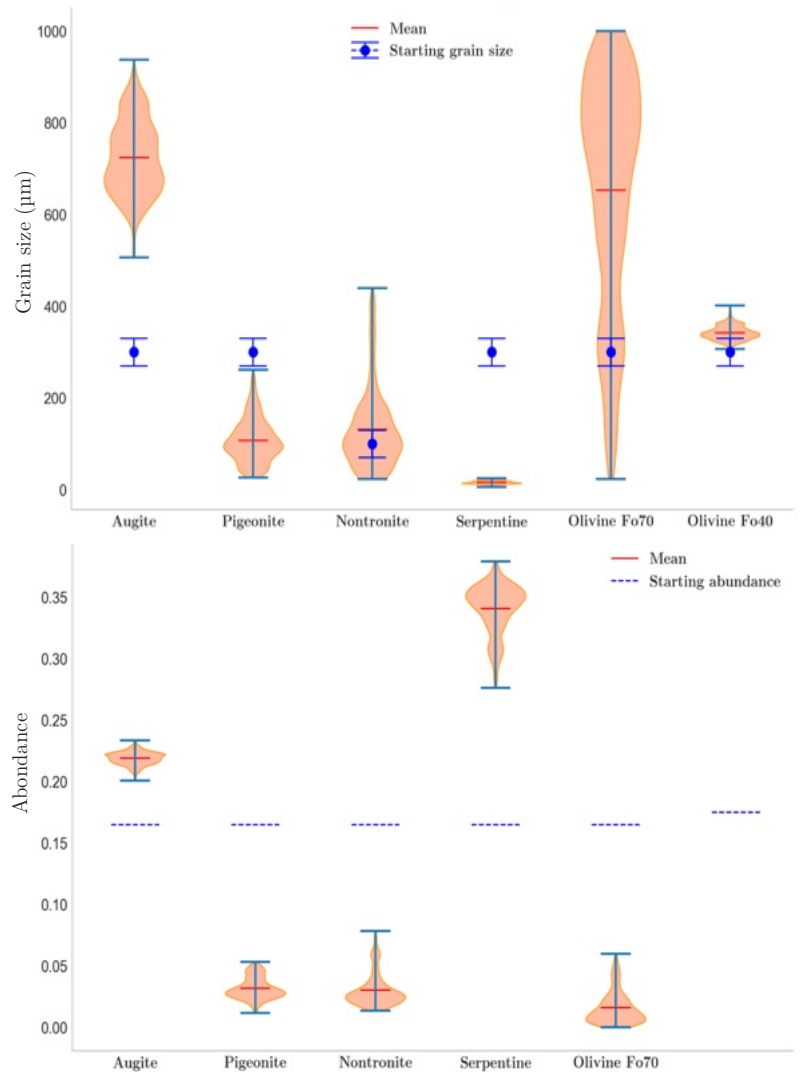
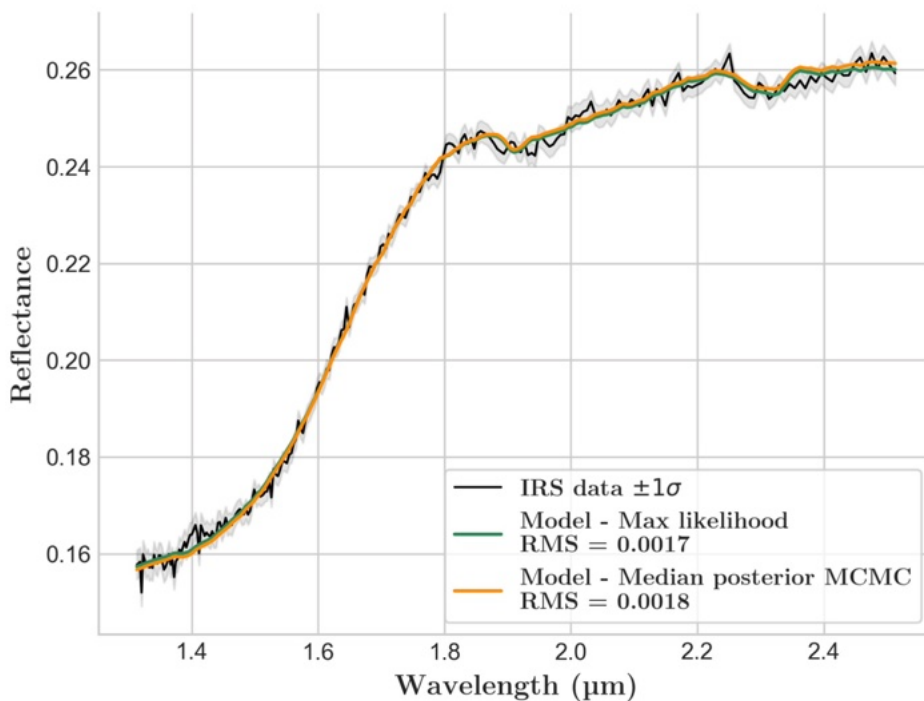


Figure 20 : Distribution des paramètres, tailles de grains (en haut) et abondances (en bas) de la cible 4 de Hastaa

• Ajustement de la cible 2 :



Hypothèses :

- pas de multiplication du spectre de données réelles par 0.9
- procédure Simplexe (Nelder-Mead de *scipy.optimize*) puis algorithme de MCMC initialisé au résultat renvoyé par le simplexe
- 4000 itérations avec 40 marcheurs
- facteur de remplissage de 0.8

Figure 21 : Ajustement de la cible 2 - Hastaa

Les résultats de paramètres obtenus sont les suivants :

Minéraux	Abondance	Taille de Grain (μm)
Augite	25.37%	506.2
Pigeonite	28.98%	10.9
Nontronite	7.71%	10.6
Serpentine	3.66%	177.2
Olivine Fo70	0.7%	576.4
Olivine Fo40	33.58%	336.9

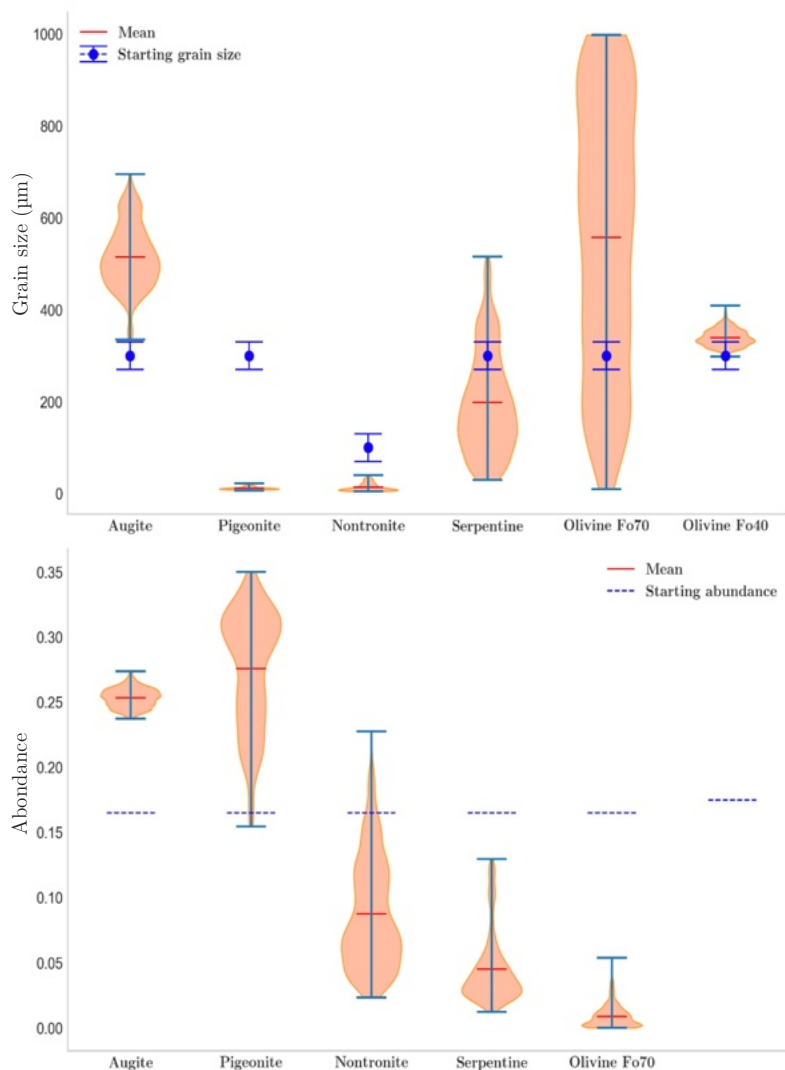


Figure 22 : Distribution des paramètres, tailles de grains (en haut) et abondances (en bas) de la cible 2 de Hastaa

On peut voir que la procédure produit toujours un très bon ajustement (RMS de 0.18%).

Les minéraux trouvés en majorité sont cette fois-ci : l'Augite, la Pigeonite et l'Olivine Fo40. La taille de grain d'Olivine Fo70 est encore moins contrainte mais ceci est cohérent avec le fait qu'elle n'est quasiment plus détectée (0.7%).

Les minéraux altérés sont toujours présents et nécessaires pour reproduire les bandes d'altération aqueuse.

Il est intéressant d'effectuer une comparaison avec la cible précédente. Cette fois-ci la procédure détecte très peu de serpentine (3.66%) alors que cela semblait être un composant majoritaire de la cible précédente (détecté à plus de 30%). On peut donc s'interroger sur la raison de si grandes disparités de composition alors que les cibles ne sont distantes que de quelques centimètres. Une explication pourrait émerger en faisant le parallèle avec la taille de grain renvoyé. Quand peu de Serpentine est trouvée, de gros grains sont détectés et inversement, quand beaucoup de Serpentine est trouvée, on obtient de petits grains. Cela peut nous amener à penser à une dégénérescence entre taille de grain et abondance. Nous y reviendrons juste après.

Ainsi l'étude particulière de ces deux cibles a permis de voir que le travail mené en amont sur la procédure d'ajustement a permis d'améliorer les ajustements des spectres tout en ayant des résultats de paramètres dans des domaines physiques valides. Cela a permis aussi de mettre en lumière un point intéressant à étudier : une possible dégénérescence.

J'ai ensuite continué avec l'étude globale des 10 cibles permettant d'avoir une idée plus générale de la composition d'Hastaa. Voici les résultats obtenus lors de l'étude des 10 cibles :

Cibles	RMS (%)	Augite		Pigeonite		Nontronite		Serpentine		Olivine Fo70		Olivine Fo40	
		%	Taille (µm)	%	Taille (µm)	%	Taille (µm)	%	Taille (µm)	%	Taille (µm)	%	Taille (µm)
1	0.22	12.61	419.1	2.92	162.8	2.24	188.8	30.69	29.79	3.9	872.5	47.64	327.9
2	0.18	25.37	506.2	28.98	10.9	7.71	10.6	3.66	177.2	0.7	576.4	33.58	336.9
3	0.23	23.45	524.6	14.94	26.6	9.07	16.4	7.39	135.3	11.31	754.3	33.84	307.6
4	0.16	21.98	721.8	3.45	69.4	2.55	115.6	33.94	16.5	1.34	665.7	36.74	345.1
5	0.19	25.03	930.6	0.37	525.7	2.29	406.2	4.37	330.9	29.23	5.8	38.71	341.3
6	0.18	28.69	899.1	1.66	244.1	1.65	347.2	4.73	379	21.18	7.7	42.09	359.6
7	0.16	31.14	656.6	14.50	23.6	0.66	277	23.72	26.1	2.06	491.1	27.92	281.2
8	0.21	18.26	476	17.98	18	0.02	403.1	6.08	391.2	8.01	856.7	49.65	337.3
9	0.19	31.07	775.9	6.04	83.7	19.19	6.4	4.26	184.3	15.78	9.1	23.66	398.8
10	0.19	24.33	523.8	13.92	23.5	11.68	17.2	3.22	455.1	9.28	899.2	37.57	374.8
Moyenne		24.19	643.37	10.48	118.83	5.71	178.85	12.21	212.54	10.28	513.85	37.14	341.05
Médiane		24.68	590.60	9.98	48.00	2.42	152.20	5.41	180.75	8.65	621.05	37.16	339.30
Écart type		5.70	181.76	9.14	161.70	6.15	168.20	12.21	165.69	9.40	372.54	8.06	32.90

Figure 23 : Tableau présentant les résultats sur les 10 cibles Hastaa

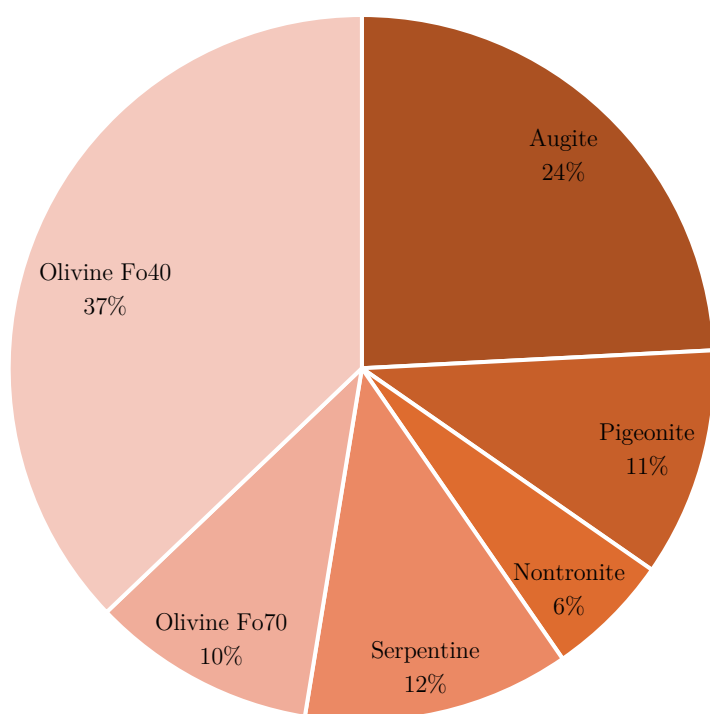


Figure 25 : Graphique présentant les abondances moyennes d'Hastaa

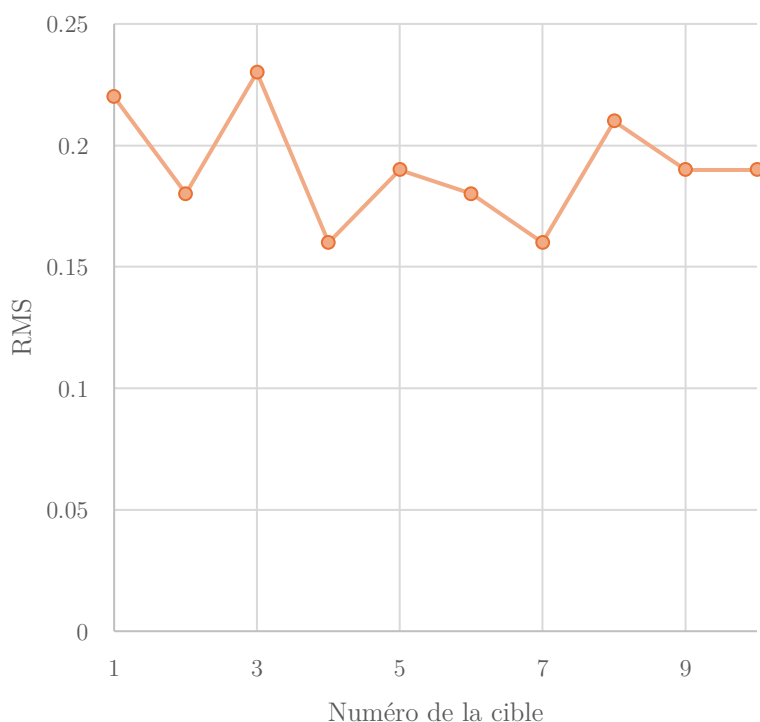


Figure 24 : Évolution du RMS en fonction des cibles de Hastaa

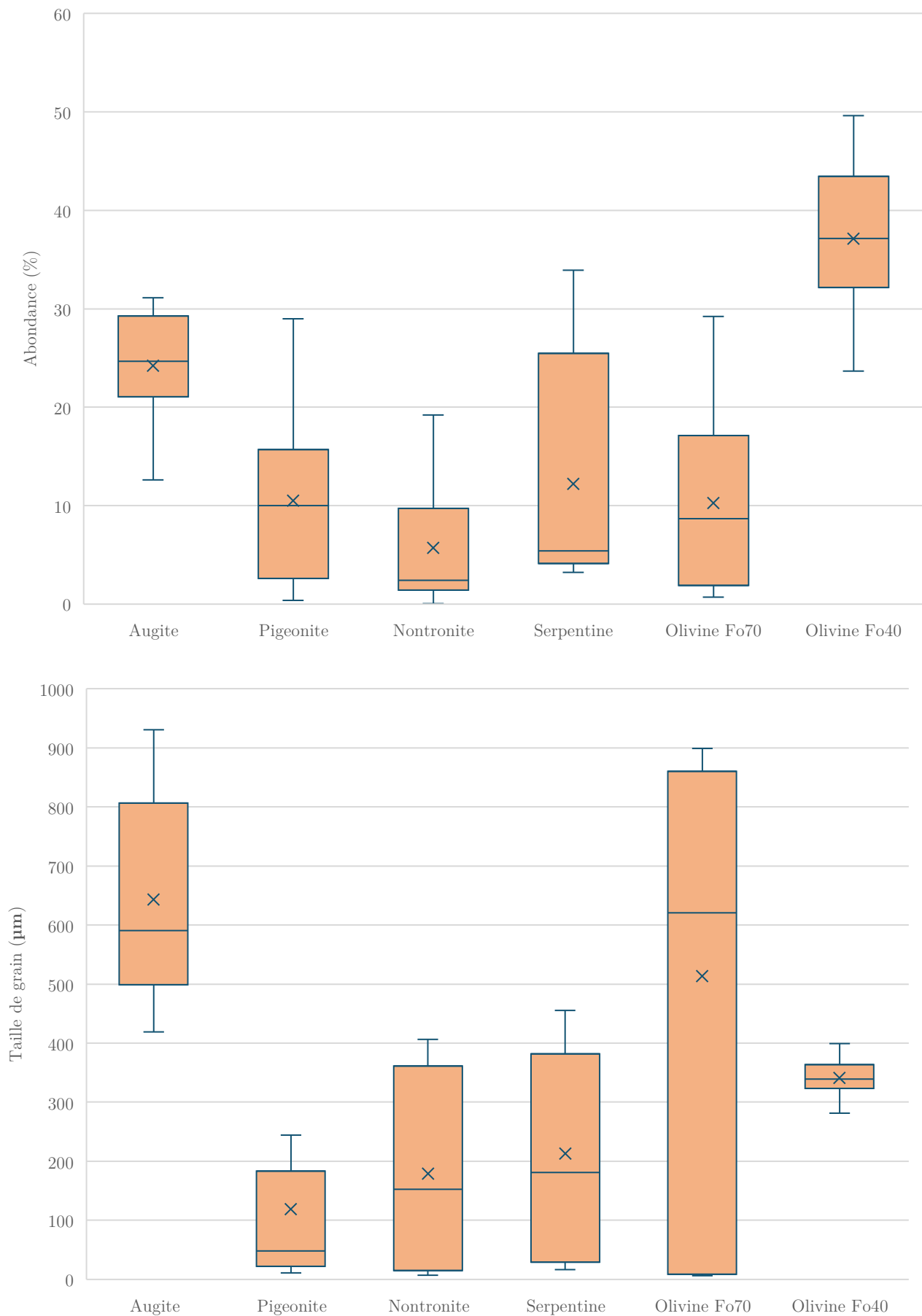


Figure 26 : Résultats statistiques en abondance (en haut) et tailles de grains (en bas) des différents composés de Hastaa

Globalement, on obtient de très bon ajustements (RMS moyen de 0.19%). En moyenne, la procédure détecte un peu moins de 50% d'Olivine (Olivine Fo70 et Olivine Fo40), un peu moins de 20% de minéraux résultant de l'altération aqueuse (Nontronite et Serpentine) en enfin un peu plus de 30% de silicates (Augite et Pigeonite). Un des problèmes de la précédente procédure d'ajustement était la détection de grains d'Augite de taille supérieure à 1000 microns (soit un millimètre) ce qui est impossible car ces grains sont normalement invisibles à l'œil nu. Ici on trouve une taille de grain d'Augite en moyenne d'environ 650 microns, ce qui reste élevé mais bien inférieur aux résultats précédents.

On remarque que la moyenne et la médiane de l'abondance de l'Augite, la Pigeonite et l'Olivine Fo40 sont presque confondues, ce qui montre que ces minéraux sont assez bien contraints.

Ce qui était observé précédemment pour l'Olivine Fo70 est confirmé ici, une faible abondance corrélée avec une taille de grain difficilement contrainte. On peut donc globalement supposer la présence d'Olivine avec une teneur en forstérite légèrement supérieure à 40%.

Revenons à présent sur la possible dégénérescence entre abondance et taille de grain de certains composés. Pour cela, traçons la taille de grain en fonction de l'abondance. Voici les résultats :

Figure 27 : Étude de la dégénérescence pour la Serpentine (à gauche) et la Nontronite (à droite)

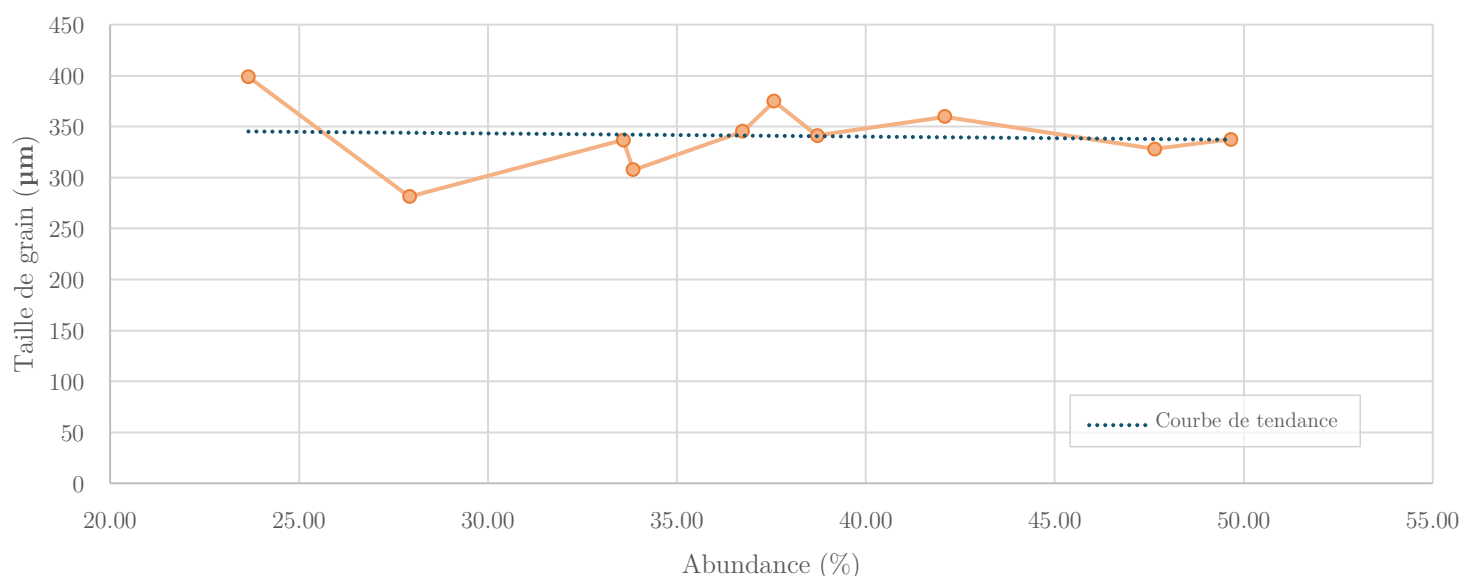
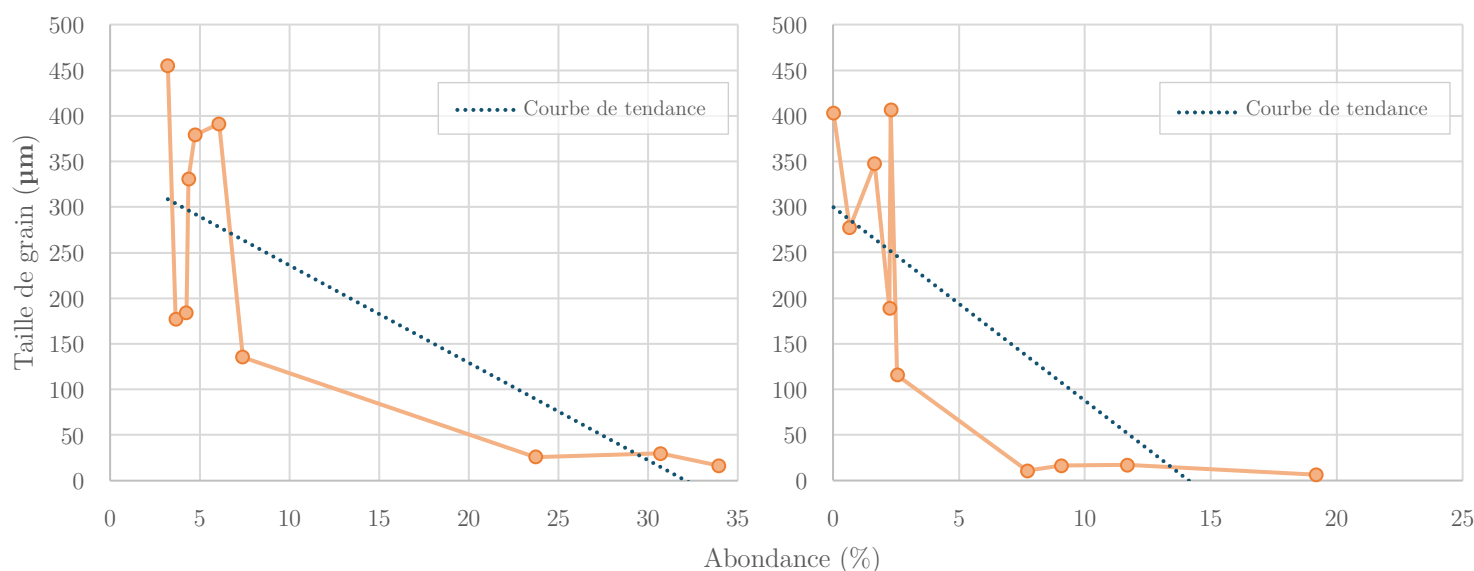


Figure 28 : Étude de la dégénérescence de l'Olivine Fo40

Ainsi on remarque que l'hypothèse d'une dégénérescence entre taille de grains et abondance pour les minéraux résultant de l'altération aqueuse semble se confirmer. En effet, pour ces minéraux, de faibles abondances impliquent de grandes tailles de grains et inversement. On peut voir que pour l'Olivine Fo40, qui semble être le minéral le mieux contraint de l'étude, ce phénomène n'est pas observé. Ainsi, la grande disparité de composition que l'on peut observer entre les différentes cibles, pourrait s'expliquer par cette possible dégénérescence.

Enfin, j'ai voulu mener une dernière étude sur la part des minéraux résultats de l'altération aqueuse sur cette cible :

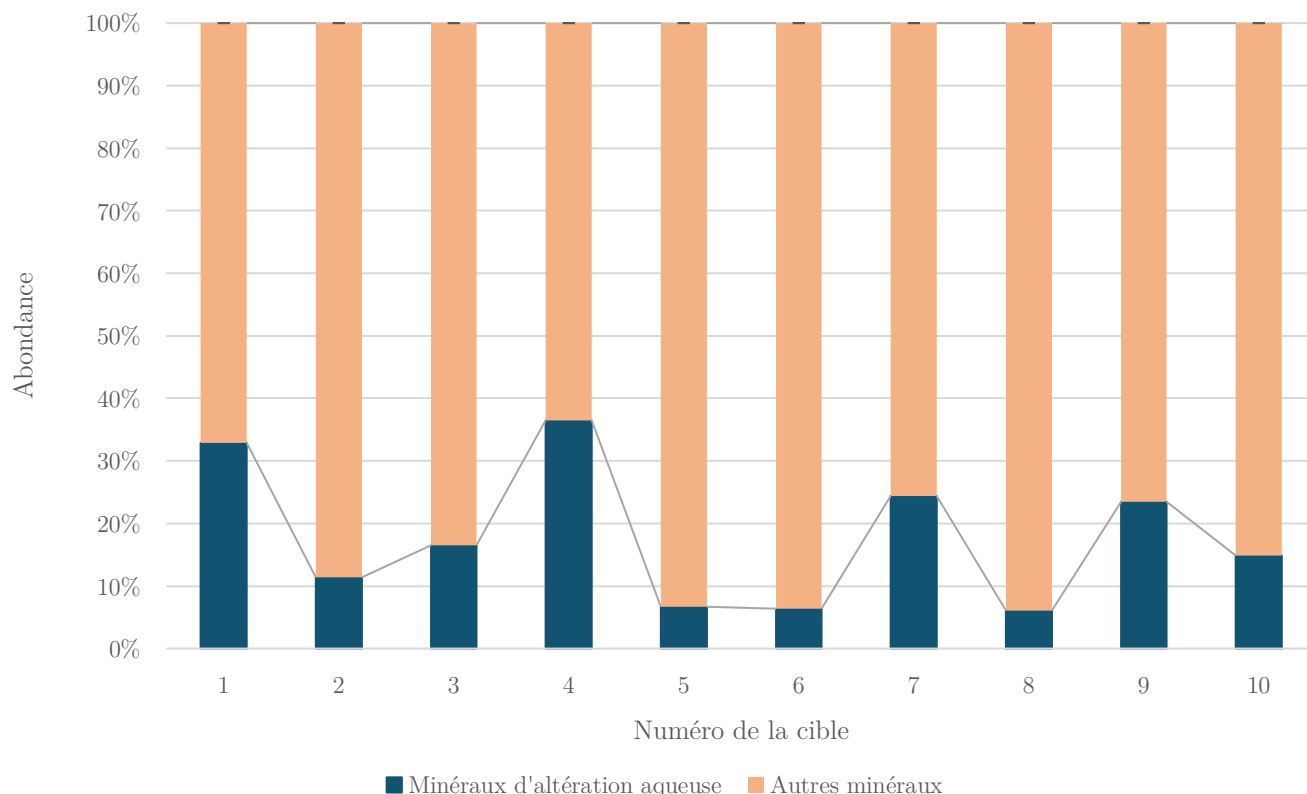


Figure 29 : Part des minéraux résultant de l'altération aqueuse sur la cible Hastaa

Ainsi Hastaa semble présenter en moyenne 18% de minéraux résultant d'une altération aqueuse. Cela conforte l'hypothèse de la présence passée d'eau liquide à la surface de Mars. D'autre part j'ai remarqué une anti-corrélation

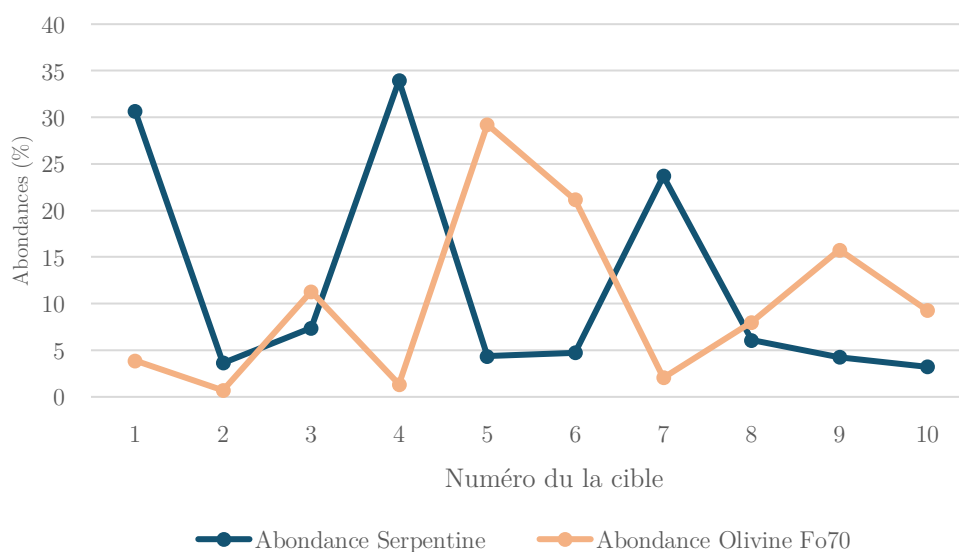


Figure 30 : Comparaison entre la proportion de Serpentine et d'Olivine Fo70

Ainsi j'ai pu observer que globalement, quand peu de serpentine est détectée, une quantité importante d'Olivine riche en forstérite est trouvée (c'est-à-dire une Olivine riche en magnésium). Or la formation de serpentine peut résulter de l'altération aqueuse d'éléments riches en magnésium (comme certains types d'Olivine). Cependant, après discussion avec mes tuteurs, ce phénomène d'altération est vrai en théorie mais ici, cela semble peu probable, étant donné que le champ de vue de l'instrument est composé de plusieurs grains de régolithe dont l'origine n'est pas forcément corrélée. De plus, j'ai montré précédemment que la présence d'Olivine Fo70 est assez incertaine, les distributions étant peu contraintes.

d. Test de la procédure sur une deuxième cible Martienne – Étude de Chiniak Sol565

Problème : les tests précédemment effectués sur cette cible donnaient de mauvais positionnements de certaines signatures spectrales.

Chiniak est une cible qui fut observée lors du Sol565 de la mission. Elle est située dans l'affleurement d'Amalik à la base du delta du cratère Jezero. On peut voir sur la figure suivante le positionnement de cette cible ainsi qu'une image de cette dernière.

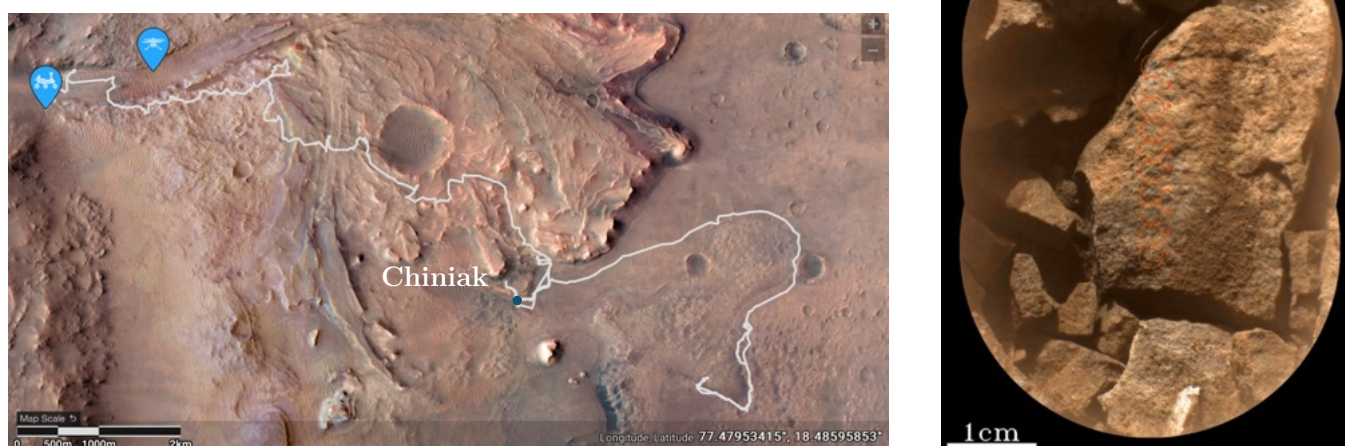


Figure 31 : Localisation de Chiniak sur le parcours du rover (à gauche) et image des cibles (à droite)

Les 10 spectres de réflectances associés aux 10 cibles sont représentées ci-dessous :

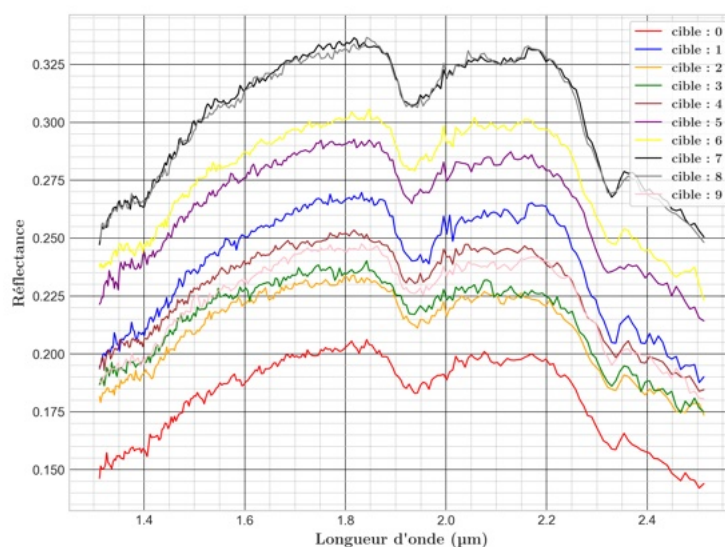


Figure 32 : Spectres de réflectance issus des cibles de Chiniak

Pour ces ajustements, nous avons supposé la présence de 5 éléments :

- **Nontronite, Serpentine, Olivine Fo40** (Cf étude précédente pour les descriptions)
- **Magnésite** : Minéral de la famille des carbonates, riche en magnésium, souvent formé par altération de roches ultramafiques.
- **Ferrihydrite** : Minéral de la famille des oxydes de fer, amorphe ou mal cristallisé, souvent formé dans des environnements aqueux riches en fer.

Ici encore, les spectres de données réelles n'ont pas été multipliés par 0.9 étant donné qu'il n'y avait pas de problèmes de niveau de réflectance moyen. Nous allons dans un premier temps nous intéresser à la première cible de Chiniak. En appliquant la procédure, voici l'ajustement que l'on obtient :

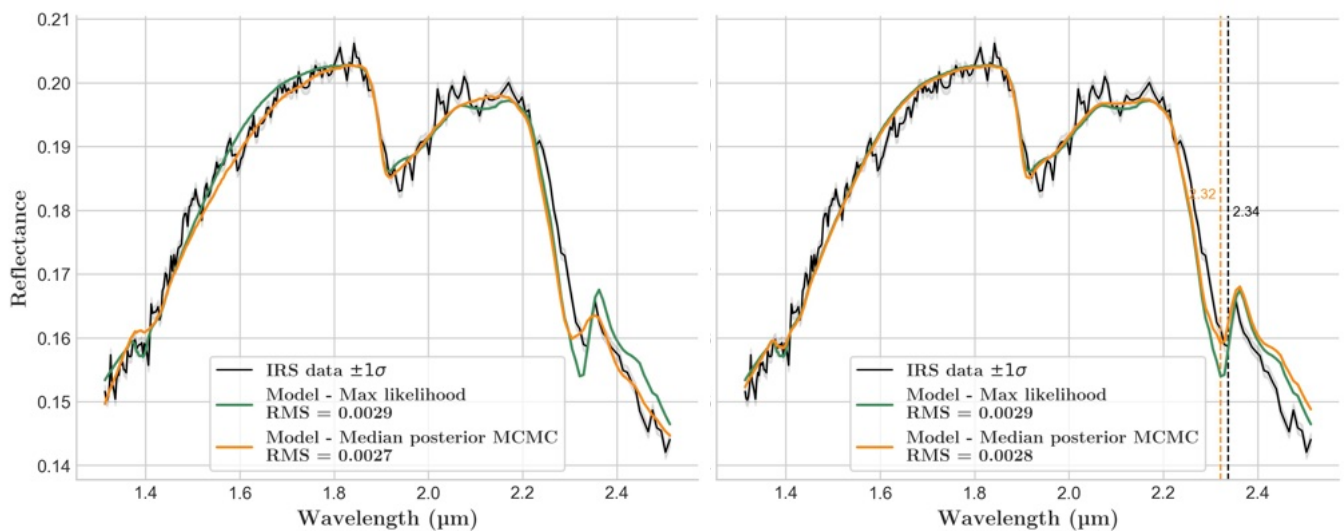


Figure 33 : Premier ajustement de la cible 1 de Chiniak sans marqueurs (à gauche) et avec (à droite)

En première analyse (sur la figure de gauche), on pourrait penser que l'ajustement est très bon (c'est tout d'abord ce que j'ai pensé). En effet, le RMS est de 0.27%, les paramètres sont bien contraints, pas de soucis de niveau de réflectance moyen. Cependant, en partageant ce résultat avec mes tuteurs, ces derniers m'ont indiqué un problème que l'on peut rencontrer en ajustement spectral : le spectre est piqué, c'est-à-dire qu'une position d'un des pics n'est pas bien reproduite. Ici cela concerne la position du pic à 2.34 microns (visible grâce aux marqueurs de la figure de droite). Cela s'explique simplement par le fait que parmi les composés considérés, aucun ne possède de bandes à la position 2.34 microns comme on peut le voir sur les spectres ci-contre (l'Olivine Fo40 ne possède pas de bande à 2.34).

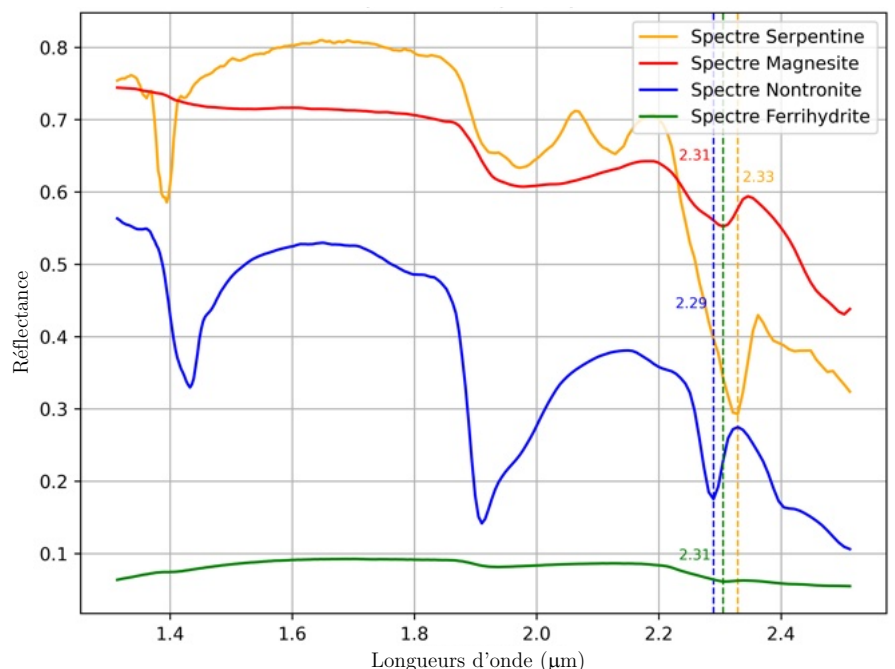


Figure 34 : Spectres de composés purs avec marqueurs

Or dans une procédure d'ajustement de spectres, la position des bandes est un facteur important étant donné qu'elles sont des caractéristiques directes des composés géologiques que l'on souhaite modéliser. Comme nous ne disposons pas de composé présentant un pic à 2.24 microns, ce problème ne venait pas d'une erreur dans le choix des composés.

Une idée a été avancée par mes tuteurs : un possible problème de calibrage de l'instrument lors du traitement des données. Ainsi il se pourrait que les spectres soient décalés de quelques nanomètres. Pour tester cette hypothèse, j'ai artificiellement décalé les spectres de 10nm en amont de la procédure. De plus j'ai demandé au programme d'accorder plus d'importance à l'ajustement fait entre 2.30 et 2.35 microns (rajout d'un poids). Le résultat suivant est alors obtenu :

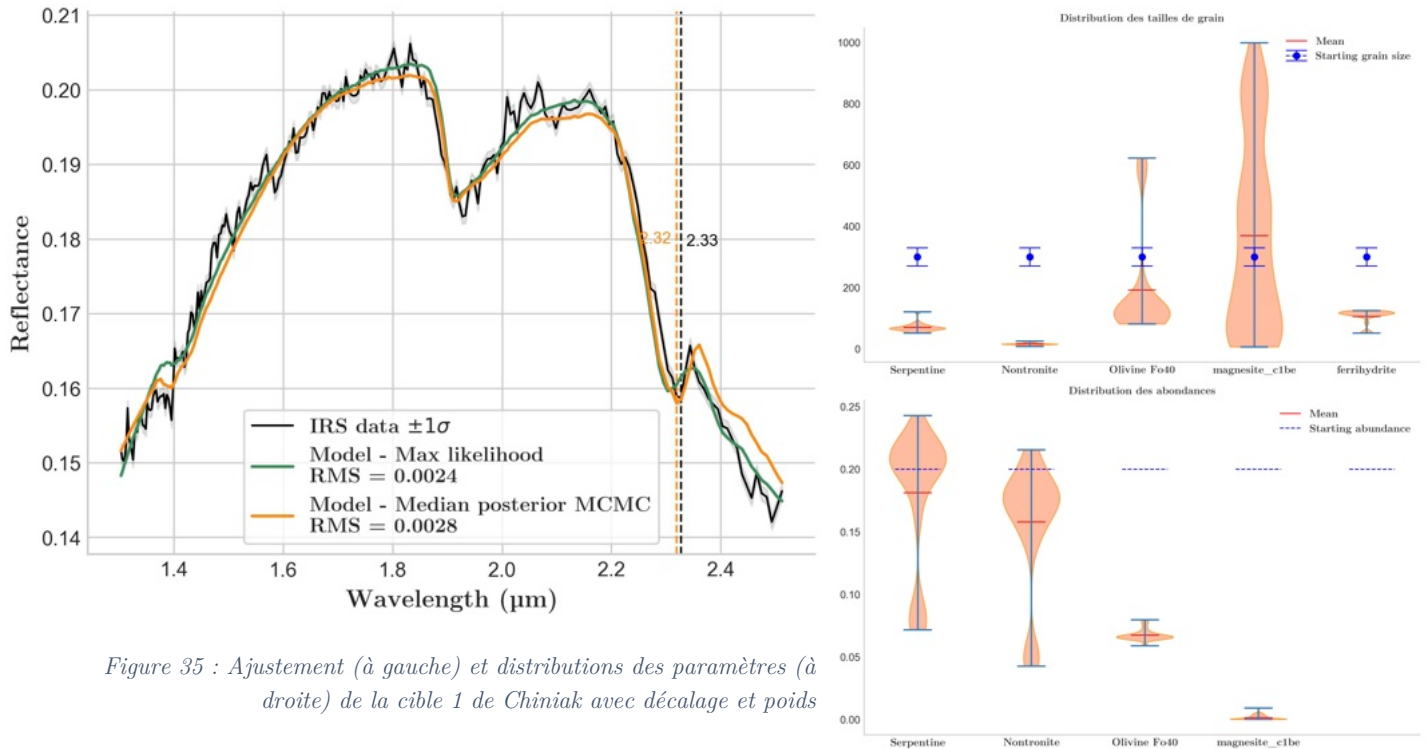


Figure 35 : Ajustement (à gauche) et distributions des paramètres (à droite) de la cible 1 de Chiniak avec décalage et poids

Ainsi on peut voir que le décalage spectral et l'ajout de poids ont permis de solutionner le problème de positionnement de la bande à 2.33 microns, tout en garantissant un bon ajustement (RMS de 0.28%), à l'exception de la fin du spectre.

Le problème est que pour obtenir cet ajustement, j'ai fait de nombreux tests pour réussir à déterminer les facteurs de décalage et poids optimaux. Ainsi quand j'ai voulu tester cette configuration de procédure sur d'autres cibles pour en tirer des données statistiques, je n'arrivais pas à obtenir de bons ajustements à chaque fois. Voici ci-contre un exemple en appliquant la même procédure que pour la cible 1 sur la cible 4.

Ainsi je pouvais mener des ajustements spectre par spectre mais je n'ai pas réussi à trouver une configuration permettant de trouver de bons ajustements sur l'ensemble des cibles de Chiniak.

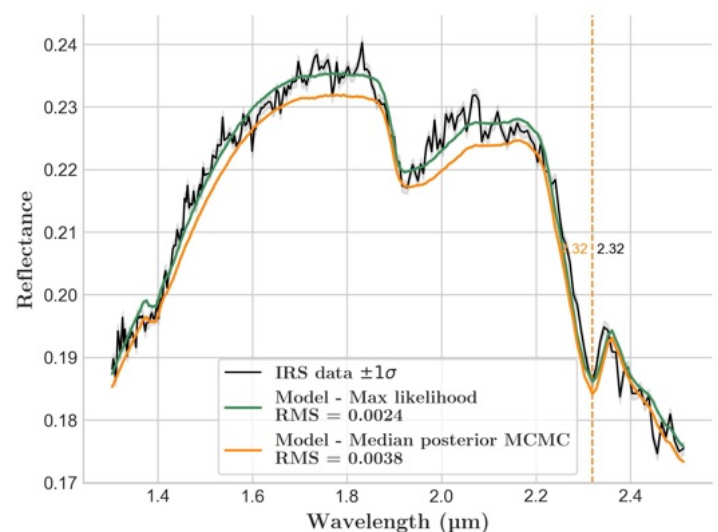


Figure 36 : Ajustement de la cible 4 de Chiniak

e. Critiques, perspectives et améliorations

Si aujourd'hui la procédure fonctionne et permet d'obtenir des résultats intéressants, elle peut sans aucun doute encore être améliorée.

Procédure d'ajustement :

Tout d'abord, à propos de la procédure d'ajustement. Si j'ai pu travailler à l'amélioration du simplexe, j'ai en revanche gardé le même type d'algorithme de MCMC, une méthode classique d'optimisation. Je pense qu'un travail en profondeur sur l'algorithme de MCMC pourrait permettre de trouver une méthode améliorant la procédure. Je me suis un peu renseigné sur le sujet, j'ai notamment essayé durant un temps, d'implémenter un algorithme de MCMC dit "tempéré", c'est-à-dire avec différents groupes de marcheurs chacun ayant des pas différents. Cette méthode permet de balayer rapidement l'ensemble de la plage de paramètres, puis de réduire au fur et à mesure le pas des marcheurs quand ils s'approchent de région intéressantes (à savoir des extrema). J'ai réussi à obtenir un code ne renvoyant pas d'erreurs, cependant son application était beaucoup trop longue pour être intéressante (car plusieurs chaînes de marcheurs exploraient l'espace des paramètres en parallèle, ce qui revenait à plusieurs procédures MCMC comme celle utilisée durant mon stage fonctionnant en même temps). Néanmoins je pense que cette piste mérite d'être explorée (je n'y pas passé assez de temps). Je ne sais pas si cela améliorera la qualité des résultats mais cela améliorera au moins le temps d'exécution et l'efficacité du programme.

Efficacité de la procédure :

Toujours en termes d'efficacité, l'application de la procédure développée reste longue. Si la partie simplexe s'effectue très rapidement (quelques secondes en passant par la fonction *minimize* de *scipy.optimize*), la partie MCMC peut en revanche prendre plusieurs minutes. Évidemment, le temps d'exécution va dépendre du nombre d'itérations et du nombre de marcheurs choisis, cependant, plus ces nombres seront élevés, plus les résultats seront précis et fiables. Ainsi il est souvent nécessaire de devoir compter plusieurs minutes pour l'exécution de la procédure. Cela étant dit, mon ordinateur, sur lequel j'ai mené mes tests, n'était pas très performant et j'imagine qu'avec une machine plus puissante, le temps d'exécution sera réduit. De plus, un point intéressant à explorer et travailler serait la parallélisation de la procédure (toujours dans l'idée d'un gain de temps d'exécution). En effet on pourrait imaginer travailler avec plusieurs chaînes de marcheurs travaillant en parallèle, chacune utilisant un cœur de l'ordinateur pour explorer sa plage de paramètres. Là encore, cette tâche nécessiterait un travail conséquent sur l'optimisation d'algorithmes et l'optimisation de programmes informatiques.

Structuration de la procédure :

Ensuite, en termes de structure de code, l'idée a été évoquée avec mes tuteurs de transformer le programme en un programme orienté objets. En effet, une contrainte aujourd'hui dans l'utilisation de la procédure est le temps de préparation nécessaire à l'étude d'une nouvelle cible, d'un nouveau spectre. Il faut s'assurer en amont que les données sont bien calibrées, que l'on dispose des bonnes constantes optiques, qu'il n'y a pas de problèmes d'unité entre les données manipulées... Ainsi j'ai travaillé à la simplification du programme et à une tentative de centralisation des données à modifier entre chaque test mais cela reste difficile à structurer sans architecture de type programmée objet. Cependant une telle reprogrammation nécessiterait de presque réécrire le code dans son ensemble, ce qui est faisable mais nécessiterait un travail important. Aujourd'hui le code principal fait appel à 8 autres fichiers de code pour pouvoir fonctionner correctement.

Évolution de la procédure :

En travaillant sur les moyens d'améliorer la procédure, il m'est venu une idée plutôt en accord avec les tendances et évolutions technologiques actuelles. En effet, je me suis demandé si l'intelligence artificielle pourrait être utilisée pour l'ajustement de spectre. J'avoue ne pas avoir de connaissances dans ce domaine ce qui fait que je n'ai pas assez de recul pour dire si cette idée est concrètement réalisable, néanmoins je la partage ici dans ce rapport. Je me suis demandé s'il ne serait pas possible d'entraîner un réseau de neurones en lui fournissant une quantité importante de

spectres de composés purs que l'on trouve sur Mars, puis des spectres de mélange de laboratoire dont on connaît la composition exacte et enfin des données relatives au contexte des cibles que l'on observe (données issus d'autres instruments, de précédentes missions...) pour que l'intelligence artificielle puisse analyser les spectres fournis. Ainsi la procédure ne reposerait pas uniquement sur un modèle scientifique mais pourrait prendre en compte des données historiques, des données de "terrains", des données réellement observées. Encore une fois, cela n'est qu'une idée et je ne me rends pas compte de la faisabilité de cette dernière. Si cette possibilité était explorée, j'imagine qu'il faudrait plus qu'un stage pour la mettre en place.

III.1 Analyse de l'environnement de travail

a. Aspects matériels

Mon travail ne nécessitait pas de matériel spécifique, à l'exception d'un ordinateur qui m'a été fourni pour programmer. Toutefois, j'ai préféré utiliser mon ordinateur personnel, sur lequel j'avais mes habitudes de programmation. J'ai eu la chance d'effectuer ce stage dans un laboratoire doté de nombreuses infrastructures matérielles : laboratoires d'étalonnage et de tests pour des instruments destinés aux sondes et véhicules spatiaux, bureaux de travail, salles de réunion, espaces de pause, le tout dans un environnement agréable. Sur le plan informatique, j'ai eu accès à une messagerie pour communiquer avec mes tuteurs, ainsi qu'à des espaces de stockage, de partage et de visioconférence, facilitant ainsi la communication et le travail en équipe.



Figure 37 : Photo de mon environnement de travail

b. Aspects sociaux et humains

Le rayonnement important du laboratoire permet d'y retrouver une grande diversité d'acteurs : chercheurs, post-doctorants, doctorants, ingénieurs, techniciens, stagiaires... Cela résulte aussi de la part importante des travaux du laboratoire dédiés à l'instrumentation. Ainsi ce laboratoire de recherche n'est pas un laboratoire de recherche fondamentale (purement théorique) ce qui laisse place à la pratique et au travail de techniciens et d'ingénieurs. J'ai bien apprécié cet environnement de travail au sein duquel plusieurs types de métiers se côtoient.

Les différents services et thèmes de recherche du laboratoire sont répartis par étages. Le laboratoire dispose aussi d'un important service administratif permettant de gérer les questions de direction, les ressources humaines, la communication, la commande de matériel...

Durant mon stage j'ai principalement été amené à échanger avec mes tuteurs (enseignant-chercheur et post-doctorants), avec des doctorants de l'équipe planétologie (équipe au sein de laquelle j'ai travaillé) et enfin avec d'autres stagiaires travaillant dans le même bureau. La temporalité du stage (juin, juillet, août) n'a pas facilité les échanges et la communication étant donné que la grande majorité du personnel du laboratoire ont pris leurs congés durant cette période. Néanmoins, j'ai toujours eu accès aux informations dont j'avais besoin grâce à la grande réactivité de mes tuteurs.

c. Aspects organisationnels de mon travail

Mon travail a débuté par une phase de "formation" ou d'apprentissage. En effet ce stage représentait ma première expérience dans un environnement de recherche. Si mes formations scolaires m'ont permises de comprendre et d'appréhender rapidement les questions et la partie "technique" du travail, à savoir la programmation, j'ai beaucoup appris d'un point de vue scientifique grâce à la lecture de nombreux articles de recherche. Je me suis tout d'abord familiarisé avec l'environnement de la planète Mars et les différentes missions et travaux déjà menés en lien avec mon sujet de stage. Je me suis ensuite renseigné sur les thèmes d'optimisation et d'ajustement de spectres appliqués à un contexte spatial. J'avais déjà un bon aperçu de ce qu'il pouvait se faire dans ce domaine grâce à un cours de méthodes numériques auquel j'ai pu assister dans ma formation d'ingénieur. J'ai ainsi pu perfectionner mes connaissances et compétences sur ce sujet en appliquant directement la théorie. Là encore ce travail s'est effectué au travers de la lecture de plusieurs articles de recherche, pas toujours facilement compréhensibles car très théoriques.

Après avoir acquis un peu de recul sur le sujet, j'ai débuté l'aspect plus "pratique" de ma mission en commençant la programmation. J'ai beaucoup travaillé en autonomie, cependant mon travail a toujours été découpé en différents objectifs que je devais essayer d'atteindre. Ce découpage a facilité mon travail ainsi que mon organisation dans la gestion des tâches à effectuer. Ainsi j'ai pu reprendre étape par étape la procédure déjà implémentée en m'interrogeant à chaque fois sur les problèmes et les voies d'améliorations possibles. Ce travail a toujours été ponctué de tests pratiques permettant de suivre l'avancement de ce dernier. J'essayais toujours dans mon organisation personnelle de consacrer une partie de mes journées de travail à la théorie par la lecture d'articles ou de contenus scientifiques et une autre partie à la pratique en essayant d'implémenter par la programmation certaines solutions. C'était parfois difficile pour moi de maintenir cet équilibre étant donné j'avais toujours plus envie de me tourner vers la pratique que je maîtrise mieux. Cependant je me suis vite rendu compte que sans un minimum d'étude théorique, j'avais du mal à interpréter les résultats que j'obtenais grâce à la pratique. De plus, dans un processus d'amélioration, j'ai réalisé que les idées potentiellement intéressantes venaient souvent de l'étude théorique préalable.

Je n'ai pas eu de difficultés à me motiver dans mon travail étant donné que cette expérience était ma première expérience "professionnelle" dans le secteur du spatial. Cela m'a permis d'énormément apprendre sur le sujet.

III.2 Perspectives professionnelles futures

a. Première expérience dans le spatial

Comme mentionné précédemment, ce stage m'a offert une première expérience dans le domaine spatial, un secteur qui me passionne depuis plusieurs années. J'ai réellement apprécié mettre mes compétences scientifiques en application sur des sujets concrets. On a vite tendance à banaliser ce que l'on fait quotidiennement, c'est pourquoi j'aimais parfois essayer de prendre du recul en réalisant que certaines des données que je manipulais venaient d'un rover, en ce moment sur une autre planète, à plusieurs dizaines de millions de kilomètres de la Terre.

Ces trois mois de travail confortent sans aucun doute ma volonté de travailler plus tard dans ce secteur. Au-delà du sujet en lui-même, l'environnement dans lequel j'ai évolué m'a beaucoup plu. Quel plaisir d'avoir pu discuter avec des personnes passionnées, désireuses de partager leurs connaissances avec d'autres. J'ai pu énormément apprendre (c'était un de mes objectifs) sur les sujets que j'ai traités mais aussi des connaissances plus générales sur le spatial qui me serviront sans aucun doute dans mon futur professionnel. J'ai pu notamment en apprendre davantage sur le déroulement d'une mission spatiale, les liens entre agences spatiales gouvernementales, laboratoires de recherche et entreprises privés. J'ai aussi découvert la méthodologie appliquée au développement d'un instrument scientifique destiné à un engin spatial, les différentes phases de cadrages, conceptions, tests et certifications. Tout cela en prenant conscience des enjeux actuels du secteur de l'espace : quelles sont les volontés d'exploration actuelles, les besoins scientifiques du moment, les prochaines grandes missions sur lesquelles je serai peut-être amené à travailler plus tard.

b. Première expérience dans le secteur de la recherche

Ce stage a également marqué ma première expérience dans un laboratoire de recherche. J'y ai découvert de nouvelles méthodes de travail, une organisation différente et des défis inédits à relever. J'ai apprécié renouer avec un travail scientifique exigeant rigueur, précision et attention. Ressentir que l'on produit des résultats qui pourraient être utilisés ultérieurement est extrêmement gratifiant. C'était la première fois que je sentais réellement l'utilité de mon travail (même si, pour beaucoup, le secteur spatial reste très obscur). Cela confère une réelle valeur à mon parcours académique.

En ce qui concerne la mission en elle-même, j'ai apprécié le travail de programmation réalisé durant ces trois mois. Cependant, je ne me vois pas passer l'intégralité de ma carrière derrière un bureau à programmer. J'aspire également à des tâches plus "matérielles", où je pourrais manipuler, concevoir et tester des éléments concrets. C'est pourquoi le domaine de l'instrumentation spatiale m'attire particulièrement. Grâce à cette expérience, j'ai découvert l'aspect du "traitement des données" de l'instrument. J'aimerais maintenant, pourquoi pas, explorer ce qui se passe en amont de l'utilisation et de l'exploitation de l'instrument, notamment le cadrage des objectifs auxquels un instrument doit répondre, les choix de conception en fonction des contraintes, son étalonnage, ainsi que les différents tests effectués.

Cette expérience m'a rassuré sur mon choix de débiter un master d'astrophysique à partir de septembre 2024. Cette formation me permettra de consolider et renforcer mes acquis théoriques tout en m'apportant de nouvelles opportunités d'expériences pratiques au travers de futurs stages.

VI. CONCLUSIONS

Je ressors pleinement satisfait de ce stage à l'Institut d'Astrophysique Spatiale d'Orsay. J'ai appris énormément, tant sur des domaines spécifiques comme l'ajustement de spectres que sur des connaissances générales sur le milieu du spatial. Si j'avais peur avant de débiter ce stage de n'obtenir aucun résultat, de ne pas réussir à produire des résultats intéressants, je suis finalement content de ce que j'ai proposé dans ce rapport. Il reste encore énormément à faire sur le sujet et j'espère que mon travail pourra être approfondi, développé et exploité par d'autres à l'avenir.

Je repars aussi avec de nombreux conseils. Si je suis plutôt à l'aise avec les aspects techniques (ici la programmation), j'ai plus de mal quand il s'agit de prendre du recul sur des questions d'interprétations scientifiques des résultats. Il est intéressant de voir que parfois, certains tests me paraissaient très éloignés du sujet d'étude pourtant les résultats permettaient de trouver de nouvelles pistes à explorer et approfondir.

La rédaction de ce rapport m'a aussi beaucoup apporté. En effet, j'ai découvert la difficulté de synthétiser un travail scientifique. Trouver le juste milieu entre un niveau d'explication suffisant pour que mon travail puisse être compris même dans ses aspects les plus pointus et spécifiques et des explications concises pour ne pas perdre le lecteur est une tâche ardue. J'ai aussi pris conscience de la quantité de travail qu'il faut fournir pour produire ne serait-ce que quelques pages de contenu scientifique. C'est assez impressionnant. J'ai effectué des centaines et des centaines de tests pour finalement n'en garder que quelques-uns à présenter ici. Sans parler des nombreuses pistes que j'ai exploré qui n'ont abouti à rien. Il faut alors faire preuve d'abnégation et de persévérance, quand rien ne fonctionne, tout semble bloquer pour réussir à rebondir, trouver un nouveau point à étudier, déceler une nouvelle idée à exploiter.



Figure 38 : Photo prise lors du Sol168 par la Right MastCam du Rover. Crédit : NASA/JPL-Caltech/ASU

V.1 Figures

Figure 1 : Photo du laboratoire. Crédits : IAS.....	5
Figure 2 : Planète Mars (à droite) - rover Perseverance (à gauche). Credit : NASA/JPL-Caltech/MSSS	7
Figure 3 : Instrument Supercam. Crédit : CNES/VR2PLANETS	8
Figure 4 : Photo du site Hastaa (à droite) et spectres de réflectance associés (à gauche)	8
Figure 5 : Représentation du modèle de Shkuratov avec 3 éléments	9
Figure 6 : Schéma de la procédure d'ajustement.....	10
Figure 7 : Exemple d'ajustement simplexe Aldric.....	13
Figure 8 : Spectres composés purs.....	13
Figure 9 : Spectres de laboratoire ternaires (Magnésite + Nontronite + Olivine)	14
Figure 10 : Ajustement du spectre 243 (à gauche) et distributions des paramètres (à droite)	14
Figure 11 : Évolution des marcheurs pour chaque paramètre et ditributions associées	14
Figure 12 : Ajustement du spectre 243 avec un facteur multiplicatif de 0.9 (à gauche) et distributions des paramètres (à droite)	15
Figure 13 : Comparaison des ajustements entre spectres corrigés et spectres non corrigés.....	16
Figure 14 : Evolution du RMS du spectre 243 en fonction de la valeur du facteur multiplicatif.....	16
Figure 15 : Spectres binaires (magnétite + nontronite).....	17
Figure 16 : Abondances procédure en fonction des abondances réelles	17
Figure 17 : Localisation de Hastaa sur le parcours du rover (à gauche) et image des cibles (à droite)	18
Figure 18 : Spectres de réflectance issus des cibles de Hastaa.....	18
Figure 19 : Ajustement de la cible 4 - Hastaa.....	19
Figure 20 : Distribution des paramètres, tailles de grains (en haut) et abondances (en bas) de la cible 4 de Hastaa	20
Figure 21 : Ajustement de la cible 2 - Hastaa.....	20
Figure 22 : Distribution des paramètres, tailles de grains (en haut) et abondances (en bas) de la cible 2 de Hastaa	21
Figure 23 : Tableau présentant les résultats sur les 10 cibles Hastaa	22
Figure 24 : Évolution du RMS en fonction des cibles de Hastaa	22
Figure 25 : Graphique présentant les abondances moyennes d'Hastaa	22
Figure 26 : Résultats statistiques en abondance (en haut) et tailles de grains (en bas) des différents composés de Hastaa	23
Figure 27 : Étude de la dégénérescence pour la Serpentine (à gauche) et la Nontronite (à droite).....	24
Figure 28 : Étude de la dégénérescence de l'Olivine Fo40	24
Figure 29 : Part des minéraux résultant de l'altération aqueuse sur la cible Hastaa	25
Figure 30 : Comparaison entre la proportion de Serpentine et d'Olivine Fo70.....	25
Figure 31 : Localisation de Chiniak sur le parcours du rover (à gauche) et image des cibles (à droite).....	26
Figure 32 : Spectres de réflectance issus des cibles de Chiniak	26
Figure 33 : Premier ajustement de la cible 1 de Chiniak sans marqueurs (à gauche) et avec (à droite)	27
Figure 34 : Spectres de composés purs avec marqueurs	27
Figure 35 : Ajustement (à gauche) et distributions des paramètres (à droite) de la cible 1 de Chiniak avec décalage et poids.....	28
Figure 36 : Ajustement de la cible 4 de Chiniak	28
Figure 37 : Photo de mon environnement de travail.....	31
Figure 38 : Photo prise lors du Sol168 par la Right MastCam du Rover. Crédit : NASA/JPL-Caltech/ASU	34

V.2 Bibliographie

1. **R. B. Leighton, B. C. Murray, et al.** Mariner IV Photography of Mars : Initial Results. *Science*. 1965, Vol. 149, 3684, pp. 627-630.
2. **A. O. Warren, E. S. Kite, et al.** Through the Thick and Thin : New Constraints on Mars Paleopressure History 3.8 - 4 Ga from Small Exhumed Craters. *Journal of Geophysical Research*. 2019, Vol. 124, 11, pp. 2793-2818.
3. **R. Lundin, S. Barabash, et al.** Solar Wind-Induced Atmospheric Erosion at Mars : First Results from ASPERA-3 on Mars Express. *Science*. 2004, Vol. 305, 5692, pp. 1933-1936.
4. **K. A. Farley, K. H. Williford, et al.** The Mars 2020 Perseverance Rover Mast Camera Zoom (Mastcam-Z) Multispectral, Stereoscopic Imaging Investigation. *Space Science Reviews*. 2021, Vol. 217, no. 1, p. 24.
5. **T. Fouchet, J.-M. Reess, et al.** The SuperCam infrared spectrometer for the perseverance rover of the Mars2020 mission. *Icarus*. 2022, Vol. 373.
6. **Hapke, B.** Bidirectional reflectance spectroscopy. 1. Theory. *Journal of Geophysical Research*. 1981, Vol. 86, pp. 4571-4586.
7. **Y. Shkuratov, L. Starukhina, et al.** A Model of Spectral Albedo of Particulate Surfaces : Implications for Optical Properties of the Moon. *Icarus*. 1999, Vol. 137, no. 2, pp. 235-246.
8. **Weare, J. Goodman and J.** Ensemble samplers with affine invariance. *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*. 2010, Vol. 5, no. 1, pp. 65-80.