
Chimiométrie pour l'analyse du Skydrol

Tristan Carrel*¹

¹Laboratoire de Mathématiques et Applications – Université de Poitiers, Centre National de la Recherche Scientifique – France

Résumé

L'analyse de grande quantité de données est un domaine mathématique en expansion qui suscite de l'intérêt dans divers domaines tels que le renseignement, la médecine, l'écologie, la sociologie, etc. Des méthodes mathématiques ont été créées afin de résoudre ce problème tout en transformant les données en de nouvelles informations, dont leur nombre est réduit. Lorsque ces méthodes sont appliquées à des données psycho-chimiques, elles font partie de la chimiométrie. Dans notre cas, nous effectuons une étude de spectre infrarouge du Skydrol. Les données que l'on récupère par la spectroscopie sont donc des points discrétisés d'une fonction. Il nous est alors nécessaire d'avoir une méthode d'analyse de données pour pouvoir déterminer certaines informations physiques et chimiques, invisibles à l'œil nu sur le spectre d'un échantillon de Skydrol. Nous parlerons tout d'abord des méthodes existantes et classiques, l'Analyse en Composantes Principales (ACP) et la PLS (Partial Least Squares), puis d'une méthode plus spécifique : l'ACP pénalisée. Nous comparerons leurs applications sur le cas du Skydrol. L'analyse topologique de données est un domaine en expansion que nous pouvons également appliquer dans la chimiométrie. Nous verrons une nouvelle méthode de lissage qui s'adapte à la forme des données étudiées.

*Intervenant