

Séminaires précongrès 19 janvier

Titre du séminaire

MCR-ALS : une méthode de résolution multivariée de courbes. Application aux spectroscopies.

Enseignant

Dr L. Duponchel
Infrared and Raman Spectroscopy Laboratory (LASIR – UMR 8516)
Université Lille 1 Sciences et Technologies
Bât. C5 – 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex France
Ludovic.duponchel@univ-lille1.fr

Description

L'instrumentation spectroscopique génère une masse de données croissante de manière quasi-automatique sur un laps de temps toujours plus court. Au premier abord, nous pouvons penser que la complexité croissante de ces données est un frein mais c'est en fait une réelle opportunité de résoudre le problème analytique posé pour peu que des méthodes chimiométriques de traitements soient développées. Il est aussi largement démontré que la seule manière d'obtenir une vision exhaustive et non biaisée du système complexe étudié est d'explorer simultanément toutes les variables spectrales à disposition ce qu'apporte la chimiométrie et ses traitements dits multivariés. Ce séminaire sera centré sur une des méthodes les plus prometteuses pour l'exploration de données spectrales à savoir la résolution multivariée de courbes (Multivariate Curve Resolution). Il est ainsi possible à partir d'un ensemble de spectres décrivant un système complexe, d'extraire sans a priori sur ce dernier l'ensemble des spectres des composés purs et leurs contributions relatives au sein de chaque mélange. Nous développerons ainsi les points suivants dans ce séminaire :

- Présentation générale du concept de résolution multivariée de courbes (son potentiel, son intérêt par rapport à d'autres techniques chimiométriques de résolution).
- Importance d'une exploration multivariée des données expérimentales préalablement à la résolution.
- Présentation de l'algorithme MCR-ALS.
- Importance des pré-traitements des données spectrales.
- La problématique de l'évaluation du rang mathématique (nombre d'espèces pures). Spécificité des acquisitions spectrales continues et d'imagerie.
- Le problème de déficience de rang.
- L'application de contraintes lors de la résolution et la notion d'ambiguïté rotationnelle.
- Critères de qualité des résolutions multivariées de courbes.
- L'analyse multi-expériences.
- L'état de l'art de la résolution multivariée de courbes et ses perspectives.
- Installation de codes Matlab gratuits pour la résolution multivariée de courbes.

Afin de présenter le potentiel de cette méthode de résolution multivariée de courbes et sa grande adaptabilité, nous explorerons des structures de données différentes issues d'expériences d'imagerie hyperspectrale, de spectroscopie résolue en temps et bien plus encore.

Public

Tout public (étudiants master, doctorants, post-doctorants, enseignants-chercheurs, chercheurs, techniciens et ingénieurs de l'industrie).

Prérequis

Notions de spectroscopie.

Méthode

Exposés théoriques (auditoire)