



Retour sur... la ligne de base. BEADS : correction et filtrage conjoints de mesures analytiques exploitant positivité et parcimonie

conférence par Laurent Duval - ingénieur de recherche à l'IFPEN

Institut des Sciences Analytiques

lundi 9 octobre 2017 - 13h45.

Résumé

Les mesures physico-chimiques expérimentales sont parfois altérées par des perturbations stochastiques ou systémiques, inhérentes aux protocoles expérimentaux et aux méthodes d'acquisition. Nous nous intéressons ici à la séparation de trois "composantes" souvent présentes dans les données analytiques : une mesure d'intérêt formée d'une combinaison de "pics" positifs (à quantifier), une dérive ou ligne de base, et du bruit.

BEADS est une méthode d'optimisation permettant d'extraire conjointement la mesure d'intérêt, débruitée et corrigée de la ligne de base. En l'absence de modèles paramétriques naturels pour cette dernière, nous adoptons une modélisation globale légère, s'appuyant sur l'aspect "positif" des pics, et sur la parcimonie de leurs dérivées.

Le problème de filtrage de la ligne de base et de débruitage est alors reformulé comme la minimisation d'une fonction comportant un terme de fidélité aux données et de pénalités promotrices de positivité et de parcimonie. Les performances seront illustrées notamment sur des chromatogrammes 1D et 2D, en évoquant d'autres usages récents (spectrométrie de masse, Raman, XAS/XRD). Des perspectives en déconvolution seront enfin abordées.

Références

Chromatogram baseline estimation and denoising using sparsity (BEADS), Xiaoran Ning, Ivan W. Selesnick, Laurent Duval, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2014
<http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2014.09.014>

<http://www.laurent-duval.eu/lcd-publications.html#publications-2014-beads>

inscription

En raison d'un nombre de places limité merci de vous inscrire à contact@isa-lyon.fr.