

## IFPEN –SEME LYON 2017

Etudes chimiométriques autour de l'exploitation de données multimodales.

Dans le domaine du pétrole, il est courant d'analyser des échantillons à l'aide de spectres dans les longueurs d'onde du Proche Infra Rouge (PIR). Ces spectres sont faciles à obtenir et se présentent sous forme d'une courbe plus ou moins chahutée. A l'aide de techniques de régression adaptées (comme la 'Partial Least Square' ou PLS), on relie ces spectres à d'autres propriétés des échantillons, plus difficiles ou plus coûteuses à mesurer, par exemple la teneur en certains composés chimiques.

En Spectroscopie Résolue Spatialement (SRS), des spectres PIR sont acquis simultanément à différents angles et à différents moments pendant le déroulement d'une réaction chimique. La technique SRS a pour but de renseigner à la fois sur les phénomènes

- d'absorption de la lumière liés à la chimie de l'échantillon traversé, comme classiquement en PIR.
- de diffusion de la lumière liés cette fois-ci à la physique du milieu.

Ces deux phénomènes sont étroitement corrélés l'un à l'autre. Ils se retrouvent simultanément dans les signaux mais s'expriment de manière très différente.

A cela s'ajoute la structure même des données à disposition qui ont été acquises dans le temps au cours de la réaction chimique sur un certain nombre de 'batchs' différents, c'est-à-dire des essais réalisés dans des conditions distinctes.

L'objectif des outils mathématiques à mettre en place est dans ce cas de pouvoir :

-soit prédire des propriétés chimiques de l'échantillon indépendamment des évolutions physiques du milieu.

-soit prédire des propriétés physiques indépendamment des évolutions chimiques.

Les techniques de régression à mettre en œuvre doivent combiner des informations et des signaux spectraux de natures différentes et évoluant au cours du temps. On pense a priori à des extensions des techniques de régression PLS aux cas d'entrées 'multiblock' ou N-way.

Mots clés : Chimiométrie, régression PLS, MultiBlock, N-Way