

DÉVELOPPEMENT DE NOUVELLES MÉTHODES CHIMIOMÉTRIQUES D'ANALYSE, APPLICATION À LA CARACTÉRISATION SPECTROSCOPIQUE DE LA QUALITÉ DES ALIMENTS¹

par Rui José Dos Santos Climaco Pinto

Hervé This². – La thèse présentée par Rui Pinto fait un lien entre des connaissances en chimie, notamment en spectroscopie, et des méthodes statistiques originales dont la portée dépasse le domaine de la chimie analytique : il s'agit, en effet, de développer une recherche finalisée en considérant les spécificités et les contraintes liées soit aux instruments de mesure, soit aux outils de traitement de l'information (capacités de stockage, temps de calcul...). De ce fait, la thèse illustre parfaitement le travail d'un chimiométricien accompli.

Ce travail de thèse a été valorisé par de plus de sept publications, des communications à des congrès, et d'autres articles sont en cours de préparation ou de publication.

La thèse proprement dite met en lumière les travaux les plus notables de l'auteur. Un tiers du document est composé de rappels méthodologiques et résume les principaux résultats du travail de thèse.

L'auteur commence par présenter les méthodes statistiques et les procédures de validation les plus populaires en chimiométrie et, par la suite, aborde les éléments originaux de sa recherche. Une thématique abordée dans la thèse concerne ce que Rui Pinto nomme le « paradigme PCT » : l'objectif de la PCT (*principal component transform*) et de son extension Seg-PCT (*Segmented PCT*) est d'effectuer une compression exacte des données pour palier notamment l'insuffisance des moyens de traitement lorsque l'on dispose de très grandes bases de données, ce qui constitue problème récurrent en statistique. La PCT permet, très simplement et très efficacement, de traiter des matrices de très grandes dimensions. L'utilité pratique de cette méthode est indéniable, face à la recrudescence des techniques analytiques complexes comme la RMN (résonance magnétique nucléaire) ou les techniques de bio-informatique. La solution proposée est d'une grande simplicité mais il fallait y penser ! De plus, monsieur PINTO développe de manière détaillée comment cette analyse peut être intégrée dans le cadre d'autres méthodes d'analyse (PLS, OP-PLS, ...).

Un autre développement intéressant concerne l'ANOVA-PCA et les autres méthodes fondées sur une démarche de tableaux multiples. Cette méthode se propose de retrouver dans une matrice de spectres l'influence de différents facteurs. En ce sens, elle généralise l'ANOVA mono-variée, outil classique de la statistique. L'avantage de ces méthodes est, entre autres, l'aspect visuel des résultats ce qui est très pertinent dans beaucoup d'applications. Rui Pinto propose dans sa thèse une modification originale de la méthode pour l'utiliser comme un modèle de discrimination. Pour ce

¹ Thèse de doctorat de l'Institut des Sciences et Industries du Vivant et de l'Environnement (AgroParis Tech), spécialité : Chimie analytique, présentée et soutenue le 22 juin 2009.

² Correspondant de l'Académie d'Agriculture de France, physico-chimiste INRA, directeur scientifique de la Fondation Science et Culture alimentaire, UMR 214, laboratoire de chimie analytique, Agro-Paris-Tech, 16, rue Claude Bernard, 75005 Paris. Courriel : herve.this@paris.inra.fr

faire, il considère les classes à discriminer comme les niveaux d'un facteur. Ensuite, pour pouvoir projeter un nouvel individu dans l'espace de l'ANOVA-PCA, il propose de le dupliquer un grand nombre de fois et de lui ajouter « toutes les combinaisons possibles des niveaux des autres facteurs ». La matrice obtenue devient « compatible » avec celles qui ont servi à l'apprentissage de l'ANOVA-PCA et peut ainsi être introduite dans le modèle. L'auteur montre que cette méthode pourrait être également utilisée pour le classement de nouveaux individus.

Dans une dernière partie de la thèse, l'auteur relate des développements autour de la spectroscopie et son utilisation pour l'étude de produits aqueux et des huiles végétales. Un court chapitre est consacré à l'utilisation d'une méthode de couplage chauffage / spectro MIR, grâce à un cristal ATR chauffant. La méthode analytique présentée est très puissante ; elle permet de s'abstraire facilement des spectres des solvants (eau, alcool) qui disparaissent au cours du séchage ou de suivre l'évolution des huiles en cours d'oxydation.