

Written on 06 March 2018



2 minutes of reading



Actualités

Recherche fondamentale

Analyse et caractérisation

Mathématiques et informatique

Traitement du signal / Science des données

IFPEN a développé **BARCHAN**, un **outil d'analyse pour le recalage robuste entre deux chromatogrammes 2D**. Basé sur des techniques récentes de traitement d'images et d'optimisation, BARCHAN permet de gagner un facteur supérieur à 10 dans le temps de traitement et de quantification des chromatogrammes 2D.

Dans l'industrie alimentaire, la cosmétique ou les matériaux, dans les sciences chimiques, biologiques ou forensiques*, l'analyse d'un produit consiste à identifier, caractériser et quantifier ses différents constituants élémentaires. On parle de mélanges " complexes » dans le cas de produits composés de centaines ou de milliers de molécules différentes, présentes en différentes proportions.

Leur analyse fine requiert l'usage d'outils analytiques et d'algorithmes de traitement de données. Les premiers visent à séparer au mieux les différents constituants moléculaires, les seconds à traiter les mesures obtenues et à en calculer les informations nécessaires pour dresser la carte d'identité de chacun des produits.

La chromatographie gazeuse est l'un des nombreux outils analytiques disponibles (comme les spectrométries ou spectroscopies, la résonance magnétique, etc. [Lynch-2003]). Il en existe divers avatars, qui combinent, notamment de manière multidimensionnelle, différents types de chromatographie. La **chromatographie bidimensionnelle** [Vendeuvre-2004], permettant de séparer

les constituants moléculaires d'échantillons d'hydrocarbures selon deux propriétés physico-chimiques complémentaires, en est un exemple. La carte d'identité qui en résulte (un chromatogramme bidimensionnel ou 2D) est représentée dans la figure 1.

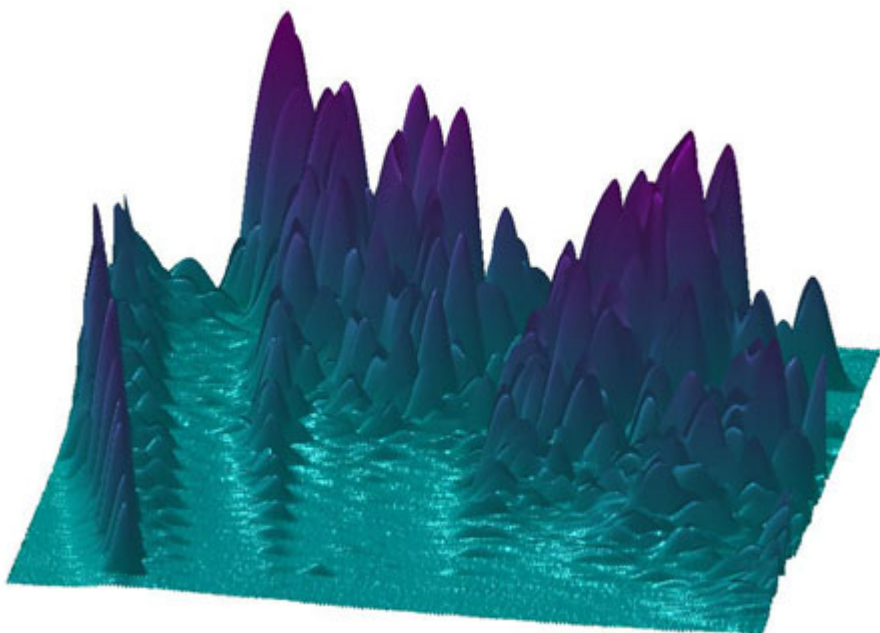


Figure 1 : Paysage chromatographique

Elle se présente sous la forme d'un paysage constitué de dunes et de collines, chacune correspondant à une molécule, dont les propriétés et la proportion sont identifiées par ses coordonnées géographiques et son altitude. Les alignements de collines sont caractéristiques de molécules d'une même famille chimique. Dans les premiers chromatogrammes 2D obtenus à IFPEN au début des années 2000, certaines de ces collines dessinaient une allure incurvée, formant des paysages qui faisaient penser aux déserts de sable, avec des vagues de dunes en forme de croissants, sculptées par le vent, que l'on appelle **barkhane** ou **barcane** (il en existe jusque sur la planète Mars).

Si ces cartes d'identité géographiques révèlent de précieuses informations sur les produits analysés, le foisonnement des collines rend difficile la comparaison de deux composés similaires dans des échantillons différents. D'une analyse à l'autre, des collines peuvent avoir légèrement bougé, certaines sont masquées par de vraies montagnes (correspondant à une molécule très abondante dans un produit mais pas dans l'autre). Parfois, l'objet d'intérêt est un chapelet de toutes petites collines alignées, qui représentent des familles de molécules à l'état de traces. Comparer deux chromatogrammes revient alors à comparer deux cartes partielles d'un même lieu, établies à des moments géologiques distincts, ce qui requiert un travail manuel fastidieux d'identification des lieux analogues et de recalcul de leurs distances respectives.

BARCHAN (Blob Alignment for Robust CHromatographic ANalysis [Couprie-2017]) est un outil de recalage robuste entre deux chromatogrammes 2D, basé sur des techniques récentes de traitement d'images et d'optimisation. Il s'appuie sur une **identification automatique des collines (ou blobs)** les plus importantes de chacun des chromatogrammes, et calcule la transformation

continue optimale (ou morphing) permettant la superposition des deux cartes. Ceci reste possible même si des collines se sont transformées en montagnes, si le niveau du sol a changé [Ning-2014], si les cartes ne sont pas à la même échelle topographique, ou si l'une d'entre elles présente des régions entières non explorées (pas de collines identifiées). Cette analyse automatisée transforme plusieurs heures de travail manuel en une poignée de minutes.

Les cartes ainsi transformées peuvent ensuite être retouchées à la main par les chimistes analytiques pour ajuster avec précision quelques détails géographiques subtils (quelques molécules spécifiques) dont le recalage ne peut pas être automatisé. Au final, BARCHAN permet de gagner des facteurs de plusieurs dizaines dans le temps de traitement et de quantification des chromatogrammes 2D. Cette technique est également utile pour comparer des chromatogrammes issus d'appareils de chromatographie différents, facilitant ainsi le croisement ou le recoupement de résultats entre laboratoires ou équipes de recherche.

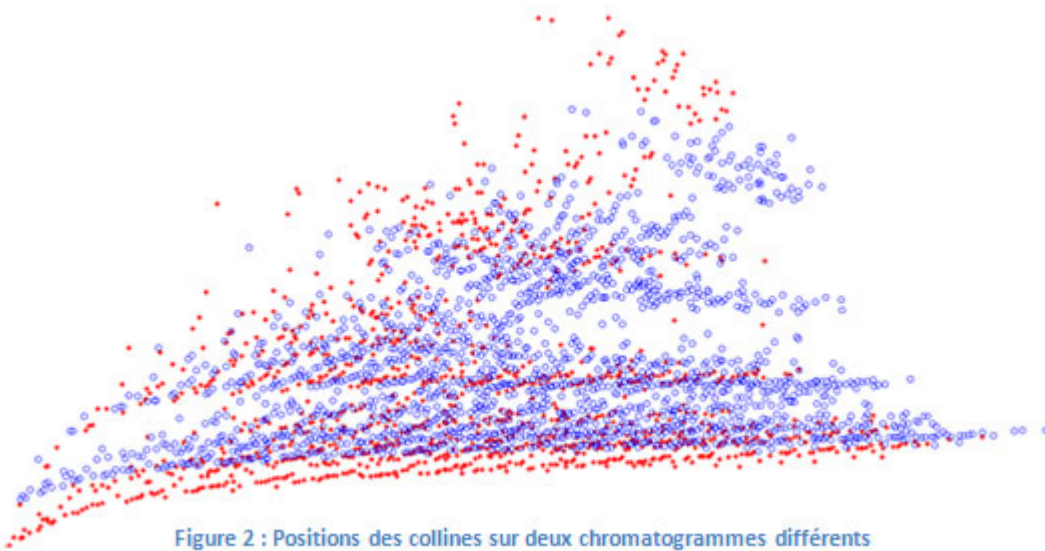


Figure 2 : Positions des collines sur deux chromatogrammes différents

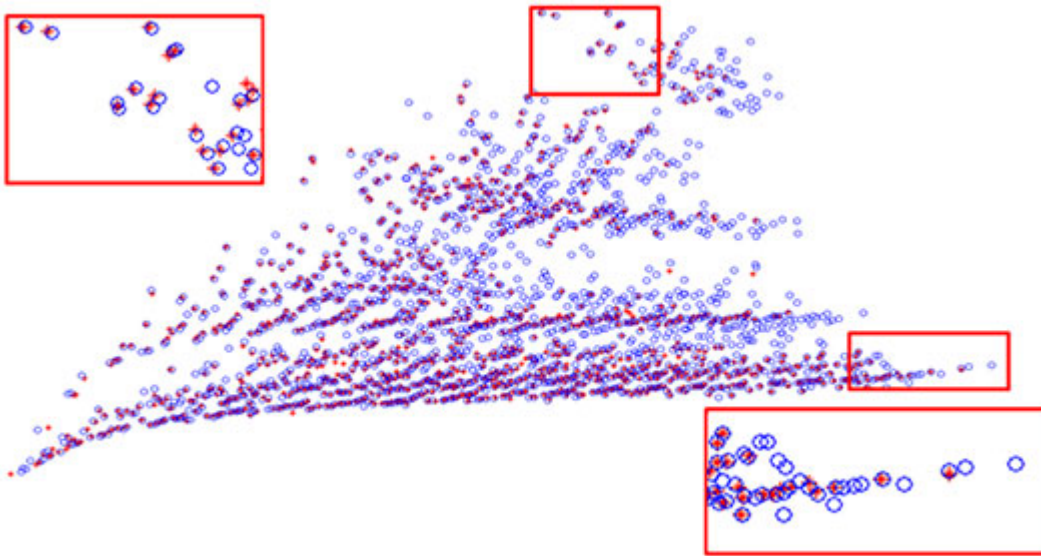


Figure 3 : Recalage obtenu avec BARCHAN

Ce travail est le plus récent résultat d'une collaboration continue, sur plus d'une dizaine d'années, depuis la première thèse à IFPEN sur ces méthodes [Vendeuvre-2004], entre les équipes des directions de recherche Physique et Analyse et Mécatronique et Numérique.

* Les sciences forensiques désignent l'ensemble des méthodes d'analyses (imagerie, chimie, biologie, informatique) qui concourent à un travail d'enquête, dans la recherche d'indices et de preuves matérielles. Leur nom dérive du forum romain, où les suspects étaient soumis à audition publique.

Contact scientifique : laurent.duval@ifpen.fr

Publications

1. [Couprie-2017] BARCHAN: Blob Alignment for Robust CHromatographic ANalysis (GCxGC), Camille Couprie, Laurent Duval, [Maxime Moreaud](#), Sophie Hénon, Mélinda Tebib, Vincent Souchon, Journal of Chromatography A, 2017
>> <https://dx.doi.org/10.1016/j.chroma.2017.01.003>
2. [Ning-2014] Chromatogram baseline estimation and denoising using sparsity (BEADS), Xiaoran Ning, Ivan Selesnick, Laurent Duval, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, December 2014
>> <https://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2014.09.014>
3. BEADS: Baseline Estimation And Denoising with Sparsity - Known BEADS uses in data processing and signal trend removal/detrending - References and code: Matlab, R, C++, Laurent Duval
>> <http://www.laurent-duval.eu/siva-beads-baseline-background-removal-filtering-sparsity.html>

4. [Vendeuvre-2004] Comparison of conventional gas chromatography (1D-GC) and comprehensive two- dimensional gas chromatography (GCxGC) for the detailed analysis of petrochemical samples, Colombe Vendeuvre, Fabrice Bertoncini, Laurent Duval, Jean-Luc Duplan, Didier Thiébaud, Marie-Claire Hennion, Journal of Chromatography A, 2004
>> <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2004.05.071>

5. [Lynch-2003] Physico-Chemical Analysis of Industrial Catalysts. A Practical Guide to Characterisation, John Lynch, 2003, éditions Technip
>> <http://www.editionstechnip.com/fr/catalogue-detail/735/physico-chemical-analysis-of-industrial-catalysts.html>

Voyage au cœur des dunes pour des produits en quête d'identité, ou comment le traitement d'images accélère leur caractérisation
06 March 2018

Link to the web page :