

## **Extraction, calibration et visualisation des données**

### **Validation et statistiques**

Sébastien Schramm

[sebastien.schramm@univ-lorraine.fr](mailto:sebastien.schramm@univ-lorraine.fr)

Le traitement des données issues de l'acquisition par spectrométrie de masse à très haute résolution est une étape clé pour l'interprétation des résultats. En effet, l'extraction des données, leur calibration et l'attribution des compositions élémentaires, peuvent conduire à des interprétations erronées si leur mise en œuvre est mal maîtrisée. D'autres part, le volume de données produites par ces analyses nécessite bien souvent leur mise en forme graphique afin d'en extraire les informations pertinentes de la manière la plus exhaustive possible. Ce cours portera donc sur la présentation et l'explication des outils permettant, à partir d'un spectre de masse acquis en mode full scan, d'exploiter les analyses. Seront abordés les notions de signal/bruit, de calibration de données et de sa robustesse basée sur l'analyse statistique. Les méthodes d'attribution des compositions élémentaires, les différentes représentations de données pour l'exploration et/ou la comparaison d'échantillons (diagrammes de Van Krevelen, Kendrick, classifications...) et l'analyse statistique multivariée seront également exposées.