
Traitement des données issues d'analyses de nanoparticules individuelles par spectrométrie de masse : quelques pistes de progrès

Pierre-Emmanuel Peyneau*¹

¹Univ Gustave Eiffel – GERS-LEE, F-44344 Bouguenais – France

Résumé

La détection des pics présents dans un signal résolu en temps est une étape-clé en *single particle* ICP-MS (sp-ICP-MS). Pourtant, le traitement du signal mesuré en mode *single particle* n'a jusqu'ici fait l'objet que de peu de recherches. La plupart des utilisateurs de cette technique mettent en œuvre un algorithme itératif proposé il y a une dizaine d'années par Pace et coll. dans doi:10.1021/ac201952t : cette méthode repose sur le calcul de la moyenne μ et de l'écart-type σ des données de la série temporelle, puis sur la détermination de toutes les valeurs dépassant $\mu + n \sigma$ (n est fréquemment choisi égal à 3) ; ces valeurs sont alors mises de côté avant que la procédure ne soit de nouveau appliquée sur le sous-ensemble restant, jusqu'à ce qu'il ne soit plus constitué que de données dont aucune ne dépasse $\mu + 3 \sigma$. Cette méthode est fréquemment utilisée sans que ni ses fondements, ni ses limites n'aient jamais été véritablement discutés et évalués. En dépit de ce manque de recul, les modules *single particle* proposés par les fabricants d'ICP-MS dans leurs logiciels de traitement des données reposent pourtant en partie sur cette méthode de détection. En me basant sur des signaux résolus en temps simulés numériquement et sur des données obtenues avec des dispersions de nanoparticules d'or, je montrerai dans quels cas l'algorithme "classique" et la méthode de traitement des données proposée par certains fabricants peuvent être mis en défaut (analyte présent dans l'échantillon à la fois sous forme dissoute et sous forme colloïdale, proportion substantielle de pics composites). Je discuterai ensuite de l'apport de plusieurs techniques d'analyse des séries temporelles mesurées (corrélation temporelle du signal, spectrogramme). Je montrerai enfin les avantages que revêtent différentes méthodes relevant de l'apprentissage automatique pour traiter des données sp-ICP-MS assez complexes, et la façon dont ces algorithmes peuvent être entraînés à partir de signaux simulés numériquement.

Mots-Clés: nanoparticule, single particle ICP, MS, traitement du signal, apprentissage automatique

*Intervenant