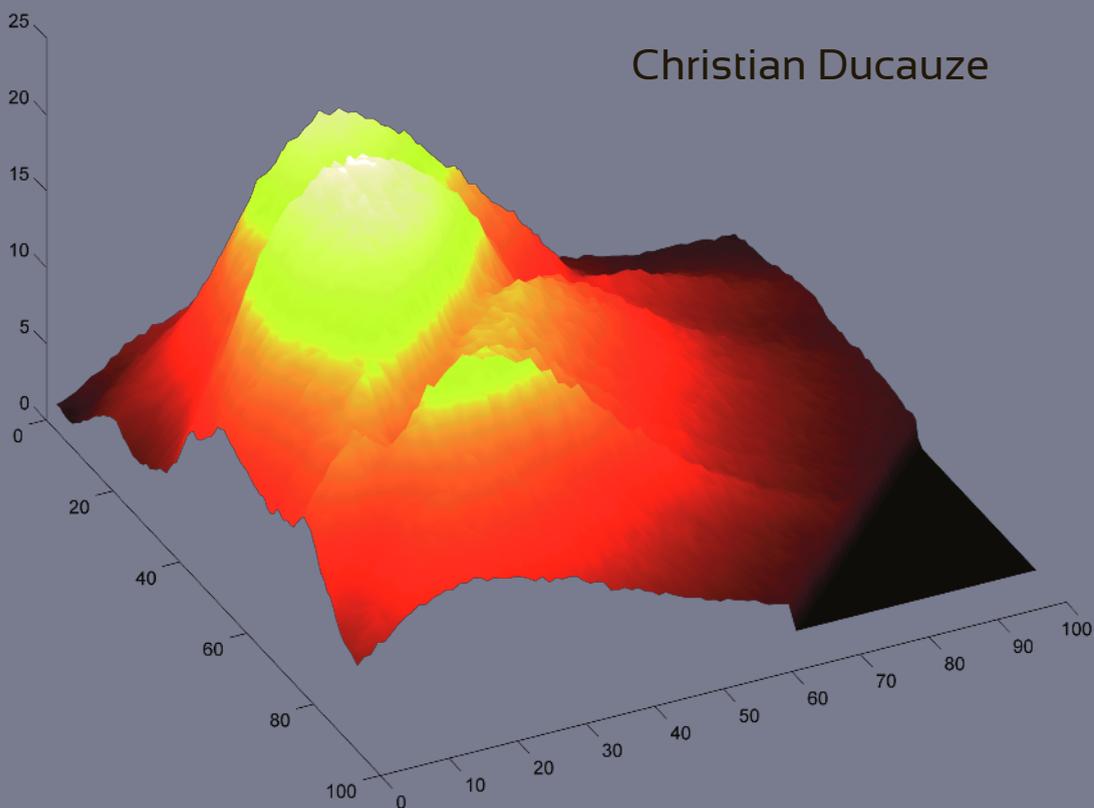


# Chimie analytique, analyse chimique et chimiométrie

Concepts, démarche et méthodes

Christian Ducauze





**Chimie analytique,  
analyse chimique  
et chimiométrie**

**Concepts, démarche  
et méthodes**

## **Chez le même éditeur**

*Méthodes électrochimiques d'analyse*

J.-L. Burgot, 2012

*Interprétation des spectres de masse en couplage GC-MS : Cours et exercices corrigés*

S. Bouchonnet, 2012

*Chimie analytique en solution : Principes et applications*

J.-L. Brisset, A. Addou, M. Draoui, D. Moussa, F. Abdelmalek, 2<sup>e</sup> édition, 2011

*Chimie analytique et équilibres ioniques*

J.-L. Burgot, 2<sup>e</sup> édition, 2011

*Manuel de spectrométrie de masse à l'usage des biochimistes*

F. Rusconi, 2011

*Méthodes instrumentales d'analyse chimique et applications : méthodes chromatographiques, électrophorèses, méthodes spectrales et thermiques*

G. Burgot, J.-L. Burgot, 3<sup>e</sup> édition, 2011

*La spectrométrie de masse en couplage avec la chromatographie en phase gazeuse*

S. Bouchonnet, 2009

# Chimie analytique, analyse chimique et chimiométrie

Concepts, démarche  
et méthodes

Christian Ducauze

  
**TEC & DOC**

[editions.lavoisier.fr](http://editions.lavoisier.fr)

*Direction éditoriale* : Fabienne Roulleaux  
*Édition* : Solène Le Gabellec  
*Fabrication* : Estelle Perez  
*Couverture* : Isabelle Godenèche  
*Composition* : Nord Compo, Villeneuve-d'Ascq  
*Impression* : Présence graphique, Monts

© 2014, Lavoisier, Paris

ISBN : 978-2-7430-1573-2

# Table des matières

Avant-propos.....	XI
Préface.....	XV

## Chapitre 1

### Introduction à la chimie analytique : ses définitions, son contenu et sa démarche

1. Un peu d'histoire.....	1
2. Chimie analytique et analyse chimique .....	3
3. Démarche de l'analyticien .....	6
3.1. Présentation générale de la démarche .....	7
3.2. Trajet théorique. ....	8
3.2.1. Modélisation .....	9
3.2.2. Organisation de la collecte des données. ....	13
3.2.3. Échantillonnage. ....	16
3.3. Trajet pratique. ....	18
3.3.1. Mise en œuvre de la procédure analytique. ....	20
3.3.2. Structuration de l'information chimique. ....	26
3.3.3. Prédiction, solution et décision .....	30
4. Conclusion : place des méthodes chimiométriques .....	31

## Chapitre 2

### L'analyse chimique : de la prise d'essai à la donnée analytique

1. Définition d'une analyse chimique .....	37
2. Élaboration d'une donnée analytique : approche classique .....	38
3. Réflexion sur la démarche de l'analyste et ce qui fonde l'usage de statistiques paramétriques .....	42
4. Exemple : étude des résultats d'une analyse par une approche classique utilisant des statistiques paramétriques .....	48
5. Nouvelle approche des résultats précédents au moyen de statistiques non paramétriques .....	56
6. Conclusion : spécificité des méthodes chimiométriques .....	62

### Annexes au chapitre 2

1. Étude d'un exemple .....	64
2. Test d'élimination de Dixon .....	64
3. Table de la loi normale. ....	65
4. Table de la loi de Student. ....	65

*Chapitre 3***L'analyse chimique :  
choix et validation d'une méthode d'analyse**

1. Choix d'une méthode d'analyse . . . . .	77
2. Performances et critères de choix d'une méthode d'analyse . . . . .	81
3. Mise au point de la méthode d'analyse choisie par le laboratoire . . . . .	85
3.1. Objectifs du laboratoire d'analyse . . . . .	85
3.2. Principales étapes de la mise au point . . . . .	86
3.2.1. Préparation du matériau de référence du laboratoire (MRL) . . . . .	86
3.2.2. Estimation du biais de la méthode . . . . .	86
3.2.3. Élimination du biais de la méthode . . . . .	88
4. Validation de la méthode d'analyse retenue . . . . .	94
4.1. Étude de la réponse sur des solutions étalons . . . . .	94
4.2. Étalonnage de la méthode d'analyse . . . . .	98
5. Contrôle de la qualité des analyses au laboratoire . . . . .	100
6. En conclusion . . . . .	102

*Chapitre 4***Méthodes d'analyse : panorama des principales méthodes  
physicochimiques d'analyse et de leurs performances**

1. Méthodes de traitement de l'échantillon . . . . .	106
1.1. Objectifs de cette étape de l'analyse . . . . .	106
1.2. Principales voies de minéralisation . . . . .	107
1.3. Quelques exemples de minéralisation . . . . .	108
1.3.1. La méthode de Kjeldahl (voie humide). Dosage des protéines dans le lait . . . . .	108
1.3.2. Détermination des éléments minéraux dans les végétaux et les matrices environnementales (voie sèche) . . . . .	110
1.3.3. Analyse des éléments traces dans des sédiments marins . . . . .	111
1.3.4. Recherche de métaux lourds dans le lait . . . . .	112
1.4. Méthodes d'extraction . . . . .	113
1.4.1. Propriétés des solvants : notion de polarité . . . . .	114
1.4.2. Quelques techniques d'extraction . . . . .	116
1.5. Réflexion sur cette étape de l'analyse . . . . .	118
2. Méthodes chromatographiques . . . . .	119
2.1. Principe, mise en œuvre et techniques . . . . .	119
2.2. Description succincte de quelques mécanismes . . . . .	122
2.3. Données chromatographiques . . . . .	125
2.4. Intérêt et performances des méthodes chromatographiques . . . . .	128
2.4.1. Améliorations du pouvoir de séparation . . . . .	128
2.4.2. Améliorations des moyens de détection . . . . .	131
2.5. Choix et mise en application d'une méthode chromatographique . . . . .	134
3. Méthodes de mesure . . . . .	136
3.1. Panorama des méthodes . . . . .	136
3.2. Caractérisation et dosage des ions en solution . . . . .	139

3.3. Dosage des éléments minéraux : spectrométrie atomique . . . . .	148
3.4. Identification et dosage des composés organiques (molécules) . . . . .	150
3.4.1. Spectrométrie de masse . . . . .	151
3.4.2. Résonance magnétique nucléaire . . . . .	152
3.4.3. Spectrométries de la molécule . . . . .	158
3.5. Analyse des molécules biologiques et systèmes complexes . . . . .	164
3.6. Réflexion globale sur les méthodes de mesure . . . . .	166
4. Conclusion et perspectives . . . . .	169

### Chapitre 5

#### Optimisation de la collecte des données : stratégies et méthodes

1. Modélisation d'un problème analytique . . . . .	174
2. Principales stratégies de collecte des données . . . . .	176
3. Principe et intérêt des plans d'expériences . . . . .	181
3.1. Présentation générale de la méthode . . . . .	181
3.2. Plan d'expérience optimal pour une pesée . . . . .	183
3.3. Ordre des essais dans un plan d'expérience optimal . . . . .	189
4. Plans factoriels complets et plans fractionnaires . . . . .	191
4.1. Plan d'expérience choisi pour déterminer une droite d'étalonnage . . . . .	192
4.2. Plans factoriels complets usuels . . . . .	193
4.3. Plans factoriels fractionnaires . . . . .	201
5. Application d'une stratégie de plans d'expériences à l'optimisation d'une méthode de dosage . . . . .	206
5.1. Analyse fonctionnelle de la méthode . . . . .	206
5.2. Étude des sources de variabilité : hiérarchisation, dépendance et interactions . . . . .	210
5.3. Construction des plans d'expériences . . . . .	221
Mise en œuvre des deux plans d'expériences . . . . .	226
6. Méthodologie de la surface de réponse et autres stratégies . . . . .	227

#### Annexes au chapitre 5

1. Intérêt d'un plan en 8 essais obtenu par la méthode de Plackett et Burman . . . . .	233
2. Impact du choix d'un plan d'expérience sur la détermination des coefficients d'un modèle . . . . .	235

### Chapitre 6

#### Structuration des données et modélisation : méthodes de classification, de classement et de régression

1. Rappels de statistique classique . . . . .	241
1.1. Test de Student . . . . .	242
1.1.1. Principe du test . . . . .	243
1.1.2. Exemple d'application . . . . .	245
1.2. Analyse de variance (ANOVA) . . . . .	247
1.2.1. Principe et méthodes . . . . .	248

1.2.2. Deux applications de l'analyse de variance . . . . .	251
1.3. Méthodes de régression . . . . .	257
1.3.1. Régression linéaire simple . . . . .	258
1.3.2. Régression linéaire multiple (RLM) . . . . .	260
2. Méthodes d'analyse des données . . . . .	262
2.1. Analyse en composantes principales (ACP) . . . . .	264
2.1.1. Matrice de variance-covariance des données. . . . .	266
2.1.2. Espace des individus . . . . .	267
2.1.3. Espace des caractères . . . . .	269
2.1.4. Recherche des composantes principales, des axes et facteurs principaux . . . . .	270
2.1.5. Mise en œuvre de la méthode et interprétation des résultats. . . . .	272
2.2. Analyse factorielle discriminante . . . . .	274
2.3. Analyse canonique . . . . .	275
2.4. Méthodes de classification . . . . .	278
2.4.1. Méthodes de classification non hiérarchique . . . . .	278
2.4.2. Méthodes de classification hiérarchique. . . . .	280
2.5. Application des méthodes de l'analyse statistique multidimensionnelle : étude de deux exemples d'exploration des données (Data mining). . . . .	281
2.5.1. Analyse des données chimiques recueillies sur un ensemble de céramiques . . . . .	281
2.5.2. Analyse du spectre infrarouge de différentes huiles végétales. . . . .	287
3. Conclusion : validation des modèles et prédiction. . . . .	293

### Annexes au chapitre 6

1. Rappels de calcul matriciel . . . . .	298
1.1. Matrices : définitions . . . . .	298
1.2. Principales opérations . . . . .	299
1.2.1. Addition et soustraction . . . . .	299
1.2.2. Multiplication d'une matrice par un scalaire. . . . .	299
1.2.3. Transposition d'une matrice . . . . .	299
1.2.4. Multiplication d'une matrice par une autre . . . . .	300
1.3. Inversion d'une matrice. . . . .	301
1.3.1. Calcul du déterminant d'une matrice. . . . .	301
1.3.2. Calcul de l'inverse d'une matrice . . . . .	302
1.4. Intérêt de la notation matricielle pour l'étude de systèmes linéaires. . . . .	303
2. Table du $F$ de Fisher-Snedecor . . . . .	304

### Chapitre 7

#### Stratégies d'échantillonnage : prélèvement, préparation et conservation des échantillons

1. Représentativité d'un échantillon . . . . .	307
2. Échantillonnage aléatoire simple . . . . .	311
3. Autres stratégies d'échantillonnage . . . . .	316
4. Préparation et conservation des échantillons . . . . .	319

---

4.1. Nombre et taille des prélèvements élémentaires . . . . .	319
4.2. Du prélèvement élémentaire à l'échantillon de laboratoire . . . . .	320
4.3. Conservation des échantillons . . . . .	325
5. Échantillonnage en vue d'un contrôle de qualité . . . . .	326
5.1. Validation d'une information chimique . . . . .	327
5.2. Risques de première et de deuxième espèce . . . . .	328
5.3. Contrôle de réception . . . . .	330
5.4. Contrôle en cours de fabrication . . . . .	333
6. Conclusion : réflexion à propos de l'expertise chimique... . . . . .	336

**Annexe au chapitre 7**

Conclusion... . . . .	343
Bibliographie... . . . .	347
Index... . . . .	355



# *Avant-propos*

Je dédie cet ouvrage à tous mes élèves de l'Institut national agronomique Paris-Grignon, devenu aujourd'hui : AgroParisTech. Tant par leur curiosité scientifique que par leur rigueur, ils m'ont aidé à concevoir un enseignement de chimie analytique générale, en réponse à leur besoin de formation. Possédant de solides bases scientifiques, ces étudiants exigeaient en effet un enseignement qui aille à l'essentiel et soit, plus qu'une somme de connaissances, une initiation au mode de raisonnement de chacune des disciplines étudiées à l'Agro, en vue d'acquérir la capacité de réfléchir à différentes échelles, de la molécule au macro-système, en passant par l'être vivant. N'ayant pas déterminé quel serait leur futur métier, les élèves-ingénieurs de l'Agro étaient aussi demandeurs d'une formation suffisamment large, qui leur permettrait d'appréhender ensuite le domaine de leur choix. N'étant pas chimistes de formation, ceux qui avaient choisi d'apprendre la chimie analytique attendaient donc essentiellement de découvrir son mode de raisonnement, pour le mettre en œuvre, avec des méthodes spécifiques, mais surtout pour être capables de l'appliquer à des domaines parfois éloignés, la finance par exemple, comme plusieurs d'entre eux ont choisi de le faire ultérieurement.

Ce livre est donc le fruit d'une expérience originale menée avec mes élèves, dans une période où la chimie analytique était en plein renouveau. Il veut s'inscrire dans la durée en proposant une réflexion méthodologique approfondie sur la discipline, prise dans sa globalité, pour faire comprendre son mode de raisonnement et ne retenir que les bases théoriques, méthodes et outils indispensables à sa bonne pratique. Il s'adresse de ce fait à un large public :

- aux ingénieurs et techniciens des laboratoires d'analyses qui souhaitent prendre du recul par rapport à leurs pratiques habituelles, pour les évaluer et pouvoir améliorer la pertinence et l'efficacité de leur travail ;
- aux universitaires qui, enseignant tout ou partie de cette matière, veulent pouvoir confronter leur point de vue à une approche globale et structurée de la discipline et disposer d'un ouvrage de référence, utilisable comme support de leur enseignement ;
- aux étudiants qui, après une formation scientifique générale, souhaitent se spécialiser en chimie analytique et ont besoin pour cela d'un manuel où puiser à leur guise, sans en faire une lecture suivie, des connaissances utiles, où trouver aussi, grâce à une lecture plus approfondie, les bases indispensables du raisonnement nécessaire à une bonne pratique de la discipline ;
- à tous les chercheurs et experts qui, s'ils doivent avoir recours à des données chimiques pour étayer leurs investigations, ont intérêt à avoir

compris la différence qu'il faut faire entre un résultat d'analyse et l'information qu'ils veulent obtenir, la lecture du premier chapitre de cet ouvrage leur étant alors particulièrement recommandée ;

- enfin, à tous les professionnels et responsables de projets qui, ayant à s'appuyer sur des résultats d'analyses pour prendre une décision, ont intérêt à établir une collaboration fructueuse avec le laboratoire qui les leur fournit, en particulier au moment où il faut poser le problème et réfléchir au bénéfice attendu d'une information chimique, lorsqu'il faut réfléchir à l'erreur d'échantillonnage ou lorsqu'il faut sélectionner des facteurs expérimentaux.

Faire comprendre la chimie analytique demande de répondre à quelques questions clés :

- Quelle est la définition de la chimie analytique et quelle est sa démarche ? (Chapitre 1)
- Qu'est-ce qu'une donnée analytique ? Comment est-elle élaborée ? (Chapitre 2)
- Que représente une analyse chimique ? Comment décrire les performances d'une méthode d'analyse ? Quels seront alors les critères retenus pour choisir une méthode et s'assurer de la qualité des données qu'elle fournit ? (Chapitre 3)
- Quelles sont les méthodes d'analyse actuellement disponibles pour obtenir les données souhaitées et comment faire un choix ? (Chapitre 4)
- Quelles sont les stratégies et de quelles méthodes dispose-t-on pour organiser la collecte des données ? (Chapitre 5)
- A quelles méthodes faut-il faire appel pour structurer les données qu'on a recueillies et en tirer une information interprétable ? (Chapitre 6)
- Comment passer de données analytiques obtenues sur un échantillon de laboratoire à l'information qu'on attend sur un milieu de plus grande dimension ? (Chapitre 7)

Ce livre répond à ces questions fondamentales, en sept chapitres, complétés par un index alphabétique et une bibliographie succincte mais choisie, dans laquelle sont répertoriés dix ouvrages importants qui devraient figurer dans toute bibliothèque de laboratoire.

On peut donc le considérer comme un vade-mecum de chimie analytique, avec plusieurs grilles de lecture possibles, suivant l'objectif qu'on se fixe, en particulier si l'on veut acquérir le mode de raisonnement de la discipline ou mieux connaître ses méthodes.

Ce livre rend ainsi hommage à la mémoire du Professeur Robert Kellner qui, jusqu'au bout de ses forces<sup>1</sup>, a œuvré pour la création d'un cursus européen de

---

1. Niinistö L, te Nijenhuis B (1998). *European Analytical Column* 38. *Fresenius J Anal Chem.* **361**, 69-70.

<http://resources.metapress.com/pdf-preview.axd?code=hdte6ext8ygpe46t&size=largest>

chimie analytique et la rédaction d'un ouvrage<sup>2</sup> qui serait le socle commun des connaissances de l'analyticien. Il a été effectivement conçu avec la volonté d'atteindre cet objectif.

Sa réalisation et son achèvement doivent beaucoup aux nombreux experts qui ont encouragé mon entreprise et m'ont apporté leur soutien à travers leurs conseils et leurs critiques, leurs suggestions et corrections. Je veux leur exprimer ici ma très profonde gratitude pour le travail qu'ils ont accompli et associer leurs noms à la publication de cet ouvrage.

Il doit beaucoup tout d'abord à Arlette Baillet-Guffroy, Professeur à la faculté de Pharmacie de l'université Paris-Sud, mon amie et ma muse, qui a cru à la nécessité et à l'urgence d'écrire ce livre, qui m'y a encouragé et m'a patiemment accompagné, tout au long de sa rédaction, l'enrichissant du fruit de ses nombreuses questions au cours de nos longues discussions.

Il doit aussi beaucoup à mes collègues et amis d'AgroParisTech, les Professeurs Marc Danzart, Douglas N. Rutledge et Hervé This, ainsi qu'à mes anciens élèves, les Docteurs Catherine Gomy et Christophe Pérès, qui ont tous fait une lecture méticuleuse et complète de mon premier manuscrit, pour l'évaluer et m'aider à l'améliorer. Ayant compris son intérêt, ils m'ont aidé à le corriger en détail grâce à des commentaires sans complaisance, de judicieuses suggestions et quelques apports significatifs, comme les logigrammes des chapitres 1 (figures 1.3 et 1.6) et 3 (figure 3.8), proposés par C. Gomy, ou l'exemple fourni par D.N. Rutledge (chapitre 6, paragraphe 2.5.2). Merci aussi à S. Besançon qui a participé à l'élaboration de l'exemple du chapitre 5 (paragraphe 5).

Mon manuscrit initial a été également soumis à Monsieur le Professeur Jacques Delage, Directeur honoraire de l'Institut national agronomique Paris-Grignon, consulté en tant que scientifique non spécialiste mais qui a toujours manifesté un intérêt marqué pour la chimie analytique à l'Agro. Je tiens à lui exprimer mon affectueuse gratitude et à le remercier respectueusement pour son aide, son rapport détaillé et ses conseils avisés, pris en compte dans la version finale.

Ce livre doit beaucoup à tous mes amis, collègues et spécialistes de la discipline, qui ont accepté de me donner leur avis, m'ont encouragé et ont significativement contribué, par leurs corrections et leurs remarques, à l'élaboration du manuscrit final. Je remercie ici chaleureusement le Docteur Christian Brevard, les Professeurs Nguyen Q. Dao, Maurice Leroy et Maryvonne L. Martin, ainsi que F. Massias et le Docteur Georges Oppenheim, qui ont tous accompli un travail de lecture remarquable.

Je voudrais dire enfin l'honneur que m'a fait le Professeur B.G.M. Vandeginste, en acceptant de préfacier ce livre. J'en suis fier et lui exprime ma très vive reconnaissance.

---

2. Kellner R, Mermet J-M, Otto M, Widmer HM (1998). *Analytical Chemistry*. Wiley-VCH, Weinheim.

Pour terminer, je n'oublierai pas de remercier tous ceux qui ont contribué à la réalisation de ce livre, les Docteurs Christophe Cordella et Luc Eveleigh, ainsi que Jason Lannoy, et de saluer la rigueur et l'efficacité de l'équipe d'édition de Lavoisier, en particulier de Solène Le Gabellec et Fabienne Roulleaux.

Et, avec toute mon affection, je voudrais dire un très grand merci à mon épouse Gislaine, pour ses encouragements, sa patience et le soutien efficace qu'elle m'a apporté depuis la mise en œuvre jusqu'à la parution de cet ouvrage.

# Préface

Nous ne sommes pas nombreux à nous souvenir de cette époque enthousiasmante où la chimie analytique autrefois considérée comme un savoir-faire, pour ne pas dire un art, devint une science à part entière. Cette mutation eut lieu au siècle dernier, dans les années soixante-dix, initiée par deux développements majeurs : le premier fut l'augmentation des capacités de calcul combinée à la possibilité de produire un très grand nombre de données contenant une information chimique – pour extraire cette information, on devait pouvoir disposer de méthodes d'analyse de données – le deuxième fut la banalisation dans les laboratoires de méthodes instrumentales de complexité croissante qui lançaient de nouveaux défis à l'analyticien, en particulier de méthodes couplées, comme la HPLC-DAD, et de méthodes non spécifiques, comme la spectroscopie dans le proche infra-rouge. Une science qui venait de naître, la chimiométrie, fut alors mise en œuvre sur ces deux fronts pour relever les défis. Des méthodes statistiques multivariées associées à une bonne connaissance de la chimie ouvrirent de nouvelles perspectives pour extraire des informations à partir de données chimiques. Bien qu'elle ait été initiée par de nouveaux développements en chimie analytique, la chimiométrie allait voir son champ d'application s'étendre rapidement à un domaine beaucoup plus vaste que celui de la chimie au sens large, comprenant en particulier la chimie des aliments et la chimie organique.

C. Ducauze, Professeur à l'Institut national agronomique Paris-Grignon (maintenant, AgroParisTech), comprit immédiatement l'importance de ce mouvement qui se développait aussi bien en Europe qu'aux États-Unis, porté par quelques pionniers, tels que les Professeurs D.L. Massart à Bruxelles, G. Kateman à Nimègue, S. Wold à Umea ou le Professeur B. Kowalski à Seattle. Des acteurs de premier plan de cette nouvelle discipline furent alors régulièrement invités par la Chaire de chimie analytique de l'INA PG dont le Professeur C. Ducauze était alors titulaire. Il introduisit la chimiométrie en France à son tout début et créa parallèlement un réseau d'excellence qui permit à ses étudiants d'accéder à ce nouveau champ disciplinaire. Durant plus de vingt ans, l'École européenne de chimie analytique, fondée par le Professeur C. Ducauze en 1986, fut un centre d'excellence dont purent bénéficier de nombreux ingénieurs et cadres de l'industrie française.

Depuis, la chimiométrie a évolué pour devenir une science en elle-même, apte à résoudre des problèmes de données dans de nombreux domaines autres que celui de la chimie analytique, tels que les biosciences (métabolomique, protéomique), la médecine, la pharmacologie, l'expertise judiciaire, la chimie environnementale.

À ce jour, son champ d'investigation va bien au-delà de la chimie pour couvrir l'analyse de toutes sortes de données dans tous les domaines de la science. Mais cela n'entre pas dans le propos du Professeur C. Ducauze, qui est un analyticien « pur-sang », et ce n'est pas une grande surprise de le voir replacer la chimiométrie dans son propre champ d'expertise : la chimie analytique.

Ayant eu à diriger moi-même un département pour le développement des méthodes analytiques dans l'un des plus importants centres de recherches d'une société multinationale, je pus constater les difficultés qu'éprouvaient les analystes à maîtriser les statistiques indispensables pour effectuer un étalonnage correct, un contrôle de qualité ou la validation d'une méthode. Il reste des progrès à faire, pour détecter par exemple les principales sources de variation d'une méthode (et les maîtriser), pour optimiser convenablement une méthode, pour mettre en évidence des valeurs aberrantes (et savoir quoi en faire), pour quantifier des critères de qualité des méthodes, telles que leur exactitude, leur répétabilité, leur fidélité et leur limite de détection ! Certes, cette tâche n'est pas aisée car elle exige une solide formation en chimiométrie, et donc en statistiques, qui fait souvent défaut dans les laboratoires de chimie analytique.

Dans le domaine de la chimie analytique il y a effectivement tant de sujets à discuter que l'auteur a dû faire des choix pour ne retenir que l'essentiel et le présenter dans son livre. Il a clairement choisi de s'adresser à l'analyticien travaillant dans l'environnement d'un laboratoire de routine ou de recherche.

Ce livre ne prétend pas aborder de façon exhaustive la chimiométrie ou les méthodes d'analyse chimique et les toutes dernières techniques n'y sont pas détaillées, l'auteur ayant considéré qu'elles relèvent d'ouvrages spécialisés dans ce domaine ou d'experts auxquels il est conseillé de faire appel en cas de besoin. En revanche, le lecteur trouvera dans ce livre l'ensemble des méthodes venant en appui de la procédure analytique (procédure opératoire standard) tout au long de son cycle de vie qui commence avec la définition de ses critères de qualité (dépendant du problème à résoudre) et se termine avec sa mise à disposition au sein d'un laboratoire. Avant que cette procédure puisse être opérationnelle, il faut l'optimiser, la valider et, si besoin, la transférer du laboratoire où elle a été développée au laboratoire de routine, en prévoyant pour ce transfert des critères suivis au moyen d'un système de contrôle de qualité permettant de vérifier que les performances sont conformes aux critères de validation retenus.

La part de la procédure analytique prise en charge par l'analyticien dépend bien sûr des responsabilités qui lui sont confiées. À son commencement, la procédure peut englober le plan d'échantillonnage. À l'autre bout, elle peut inclure l'extraction à partir des données collectées d'une information chimique sur le milieu étudié (par exemple, une rivière, un sol, un matériau, un lot de pilules, un aliment, etc.). Quand bien même il ne serait pas responsable de ces étapes, l'analyticien devrait être au moins impliqué dans la totalité de la procédure (en tant que membre de l'équipe conduisant le projet) pour être en mesure de veiller à la pertinence des données analytiques en fonction du problème posé. Cette

tâche demande d'avoir acquis une bonne connaissance des procédures d'échantillonnage, de la préparation de l'échantillon, des méthodes d'analyse instrumentales, ainsi bien sûr que des bases nécessaires dans le domaine des méthodes chimiométriques, qu'il s'agisse de l'organisation de la collecte des données ou de leur analyse. C'est l'objectif que ce livre permettra d'atteindre.

Ce livre aidera les étudiants à acquérir les connaissances nécessaires pour atteindre un niveau d'excellence dans leur futur métier. Il aidera aussi les professionnels de l'analyse à améliorer la qualité de leur travail. Étant le fruit de l'expérience pratique de l'auteur, acquise tout au long de sa carrière, ce livre constituera un ouvrage de référence, tout particulièrement utile pour les enseignants de chimie analytique.

Docteur Ir. Bernard Vandeginste

