

SECPlot

Traitement et visualisation de données spectroélectrochimiques

Logiciel académique gratuit • Windows et Linux

SECPlot charge un jeu de données à trois dimensions — une intensité mesurée pour chaque longueur d'onde et chaque trame —, le montre en surface ou en carte, et le décompose en spectres et en profils temporels des espèces qui le composent.

Une manipulation de spectroélectrochimie, ce sont des milliers de spectres. SECPlot les montre d'un coup, en surface 3D ou en carte 2D, l'axe des trames passant en temps d'un clic : la bascule est purement visuelle, les données ne sont jamais modifiées.

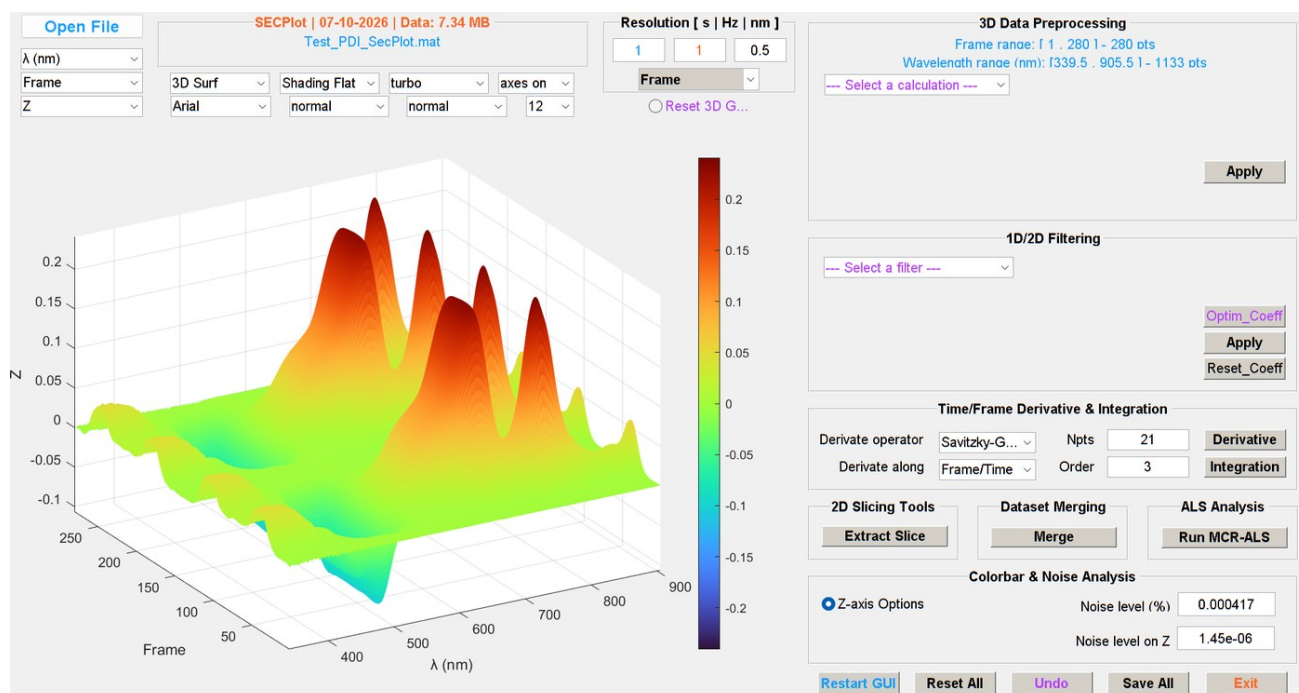


Figure 1 — La fenêtre principale : un jeu de 280 trames et 1133 longueurs d'onde affiché en surface 3D, les panneaux de traitement à droite.

Traitements

- opérations algébriques et corrections de ligne de base sur tout le jeu de données
- filtres 1D et 2D (Savitzky-Golay, gaussien, moyenne, médian), avec mesure du niveau de bruit
- dérivée et intégrale selon le temps ou les trames
- coupes à longueur d'onde fixe (cinétiques) ou à trame fixe (spectres), avec détection de pics
- fusion de deux acquisitions en un seul jeu, et reconstruction des mesures en faisceau haché
- résultats écrits en fichiers texte et dans Excel

Résolution multivariée de courbes (MCR-ALS)

Le jeu de données s'écrit comme un produit : les profils de concentration C de quelques composantes par leurs spectres S , plus un résidu. SECPlot propose le nombre de composantes à partir des valeurs singulières et dit sur quoi il s'appuie ; le choix vous reste.

- profils de départ choisis automatiquement (variables les plus pures), pointés à la main ou mesurés à partir de fenêtres de présence
- contraintes sur l'un ou l'autre facteur : non-négativité, unimodalité, fenêtres de présence, trames de blanc tenues à zéro
- traitement selon les trames ou selon les longueurs d'onde, les profils étant reprojetés quand on change d'axe
- l'issue nommée : convergence, divergence, ou solution qui ne fait que reproduire la décomposition en valeurs singulières

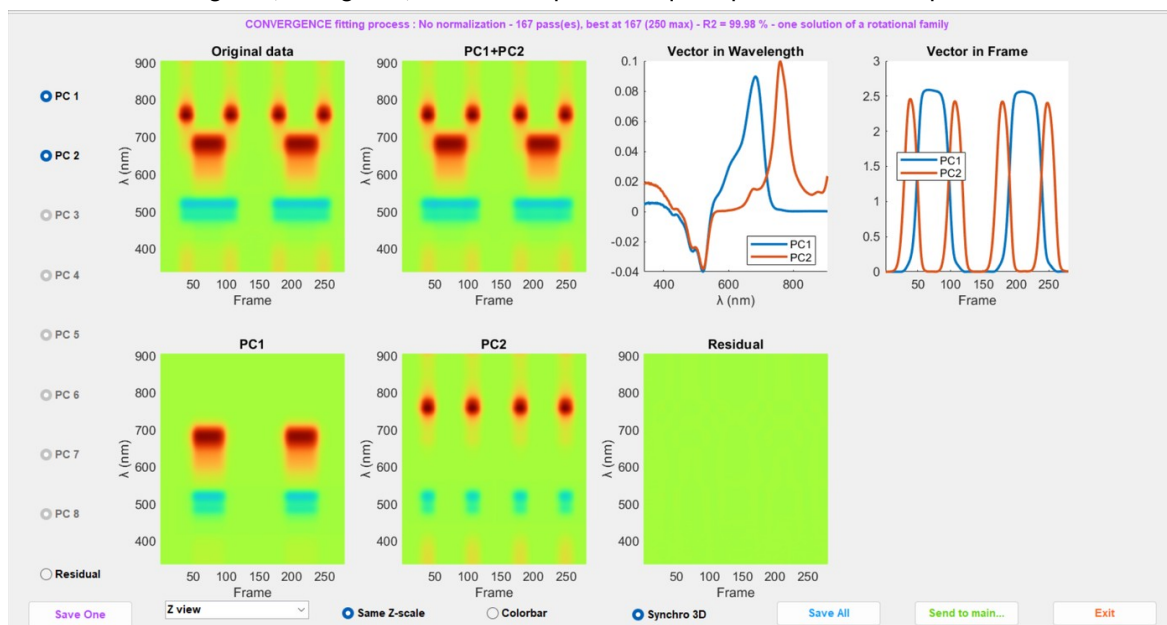


Figure 2 — Deux composantes résolues : les données, leur reconstruction, chaque composante et le résidu en cartes ; spectres et profils temporels à droite.

Contrôlé

Chaque version est comparée à plus de 900 cas enregistrés, qui couvrent les lecteurs de fichiers, les filtres, les opérations matricielles et la résolution. Un changement qui déplace un résultat est soit une correction, dite comme telle, soit un défaut.

Pour commencer

Un mode d'emploi en français et en anglais explique chaque bouton et chaque champ, et l'ordre de travail dans la fenêtre de résolution. Aucune connaissance en informatique n'est requise. L'interface est en anglais.

Gratuit pour tous

SECPlot est gratuit pour tous, étudiants comme chercheurs. Il est distribué en exécutables Windows et Linux 64 bits qui ne demandent que le MATLAB Runtime, gratuit : aucune licence MATLAB n'est nécessaire. Sa licence d'utilisation gratuite permet de l'installer sur autant de postes que souhaité et de le transmettre tel quel. La version de démonstration s'utilise sans formalité : tout se fait et s'affiche, rien ne s'enregistre ; la version complète est accordée, gratuitement elle aussi, aux utilisateurs inscrits avec une adresse académique.

SECPlot est fourni sans **AUCUNE GARANTIE**.

Pour obtenir SECPlot : écrire aux développeurs, à l'adresse echem-tools@univ-angers.fr.

Signaler un problème : Help ► Report a problem... prépare le message, que vous envoyez vous-même.

Remerciements : si SECPlot contribue à une publication, à une thèse ou à un projet financé (ANR, ERC, programme européen...), les auteurs vous seraient reconnaissants de le mentionner, par exemple dans les remerciements : « Les données ont été traitées avec SECPlot (O. Alévêque et E. Levillain, MOLTECH Anjou, UMR 6200 CNRS, Université d'Angers), logiciel gratuit disponible sur demande à echem-tools@univ-angers.fr. »

Olivier Alévêque et Eric Levillain — MOLTECH Anjou, UMR 6200 CNRS, Université d'Angers