Valérie Thoraval **04.72.32.50.60** 

contact@cpe-formation.fr cpe-formation.fr



# SCIENCES ANALYTIQUES ANALYSE DE DONNEES SPECTROSCOPIQUES – CHIMIOMETRIE

#### **OBJECTIFS**

Apprendre les méthodes de bases de la Chimiométrie en analyse quantitative et qualitative Etre rapidement autonome sur le traitement de vos données Assimiler les étapes clés de la méthodologie du traitement de données spectroscopiques

# **CONTENU PÉDAGOGIQUE**

# / THEORIE

# INTRODUCTION GÉNÉRALE - CHIMIOMÉTRIE

# ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES (ACP)

- > Principe théorique
- , Détection des échantillons aberrants

# MODÈLES LINÉAIRES DES RÉGRESSIONS MULTIVARIÉES (MLR, PCR, PLS)

- > Principe théorique des régressions multivariées (MLR, PCR, PLS)
- , Méthodes de validation des modèles
- » Détection des échantillons aberrants
- **)** Optimisation

# PRÉTRAITEMENTS DES DONNÉES SPECTROSCOPIQUES

- , Correction des effets additifs
- , Correction des effets multiplicatifs

### MÉTHODES DE DISCRIMINATION

- , PLS-DA (PLS Discriminant Analysis)
- SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogies)

# CONCLUSIONS SUR L'ANALYSE DE DONNÉES SPECTROSCOPIQUES

- , Démarche générale à suivre
- , Critères de choix de la méthode la plus pertinente

## / TRAVAUX DIRIGES

Applications pratiques et mises en œuvre sur des jeux de données avec des logiciels adaptés en analyse en composantes principales, modèles linéaires de régression multivariée et pré-traitement de données spectroscopiques.

 $Logiciels\ mis\ en\ \varpi uvre: The\ Unscrambler \ \ \ (Camo\ Analytics),\ SIMCA \ \ \ \ (Umetrics\ Sartorius)\ ou\ PLS\_Toolbox \ \ \ (Eigenvector\ Research\ Inc.)$ 

Les principes des méthodes sont introduits par une approche géométrique et l'accent est mis sur l'utilisation pratique des méthodes et l'interprétation des résultats.



## I FORMATION EN DISTANCIEL POSSIBLE

# 

#### DURÉE

3 jours 21 heures



#### SESSIONS

• 2 - 4 octobre 2024 en présentiel à Lyon



FRAIS D'INSCRIPTION (DÉJEUNER INCLUS)

2 115 € HT



#### PRÉREQUIS & PUBLIC CONCERNÉ

Techniciens Supérieurs, Ingénieurs, Chercheurs ayant à analyser des données issues de spectroscopies NIR, FTIR, UV/Vis, Raman CPE Lyon Formation Continue

Campus Saint-Paul – Bâtiment F • 10, Place des Archives – 69002 LYON

04.72.32.50.60