



SCIENCES ANALYTIQUES

ANALYSE DE DONNEES SPECTROSCOPIQUES – CHIMIOMETRIE

OBJECTIFS

Apprendre les méthodes de bases de la Chimométrie 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 œuvre : 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.



/ 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