

## Objectifs

- Apprendre les bases de l'analyse de données multivariées, également appelée Chimométrie
- Savoir analyser vos propres données multivariées à l'issue du cours.
- Utiliser seul le logiciel d'analyse de données étudié

## Programme

### Jour 1 : Analyse multivariée exploratoire

- Introduction générale - Chimométrie
- Analyse en Composantes Principales (ACP)
  - Principe théorique
  - Détection des échantillons aberrants (outliers)
  - Application sur jeu de données et logiciel

### Jour 2 : Modélisation prédictive quantitative et prétraitements

- Modèles linéaires de régression multivariée (MLR, PCR, PLS)
  - Principe théorique des régressions multivariées (MLR, PCR, PLS)
  - Méthodes de validation des modèles
  - Détection des échantillons aberrants (outliers)
  - Optimisation
  - Application sur jeu de données et logiciel
- Prétraitements des données
  - Standardisation
  - Normalisations en ligne
  - Prétraitements spectroscopiques
  - Application sur jeu de données et logiciel

### Jour 3 : Méthodes de discrimination

- Principe de la discrimination
- PLS-DA (PLS - Discriminant Analysis)
- SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogies)
  - Application sur jeu de données et logiciel

## Contact

Ondalys

4, rue Georges Besse

34 830 Clapiers

Tél : 04.67.67.97.87 / fax : 04.67.67.97.88

✉: [contact@ondalys.fr](mailto:contact@ondalys.fr)

## Les plus

- Les principes des méthodes sont introduits par une approche géométrique
- L'accent est mis sur l'utilisation pratique des méthodes et l'interprétation des résultats
- Exercices d'application sur un jeu de données pour chaque méthode
- Utilisation d'un logiciel de chimométrie : The Unscrambler<sup>®</sup> (CAMO), SIMCA<sup>®</sup> (Umetrics Sartorius) ou PLS Toolbox<sup>®</sup> (Eigenvector Research Inc.)



## Public concerné

- Pré-requis : Aucun
- Profil : Techniciens, ingénieurs ou chercheurs
- Domaines : R&D, développement de produits, contrôle et optimisation de procédés, contrôle qualité...
- Type de données : Instrumentales, données physico-chimiques, paramètres procédés,...
- Secteurs d'activité : Agriculture/Agro-alimentaire, Pétrochimie, Pharmaceutique, Biotechnologies, Chimie, Environnement...

## Infos pratiques

- Durée du stage : 3 jours
- Nombre de participants : 8 personnes maximum
- Une convention de stage sera établie entre l'entreprise et Ondalys
- N° organisme de formation : 91-34-05332-34 auprès du Préfet de la région Languedoc-Roussillon