

# Formation inter-entreprises

## Analyse de données spectroscopiques

### Formez-vous aux méthodes de traitement des données spectrales

#### Objectifs

Ce cours sur l'analyse de données spectroscopiques est destiné aux personnes qui veulent :

- > Connaître les bases des méthodes de Chimiométrie
- > Apprendre à traiter leurs données spectrales de manière autonome
- > Découvrir la méthodologie propre à l'analyse des spectres

Au cours de la formation, la théorie est amenée par une approche géométrique. Un focus est fait sur la mise en pratique des méthodes et l'interprétation des résultats.

Pour chaque méthode, un exercice d'application sera proposé sous le logiciel de chimiométrie Aspen Unscrambler™ (AspenTech).



Ce cours sur l'analyse de données spectroscopiques vous permettra de vous familiariser avec :

- > Les méthodes d'analyse exploratoire
- > Les techniques de prédiction quantitative et de discrimination
- > Les différents pré-traitements spectroscopiques.

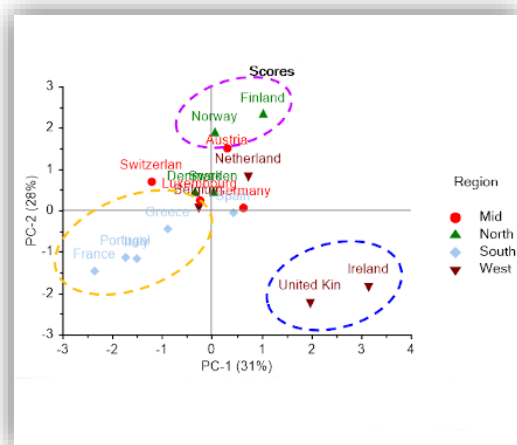
#### Informations pratiques

- |   |   |
|---|---|
|  Aucun prérequis  |  3 jours                                 |
|  R&D, contrôle qualité, développement de produits, optimisation de procédés, ...                      |  Sessions inter-entreprises              |
|  Données spectroscopiques   |  Chercheurs, scientifiques et ingénieurs |
|  Agriculture/Agro-alimentaire, Pétrochimie, Pharmaceutique, Biotechnologies, Chimie, Environnement... |   |

# Programme de formation

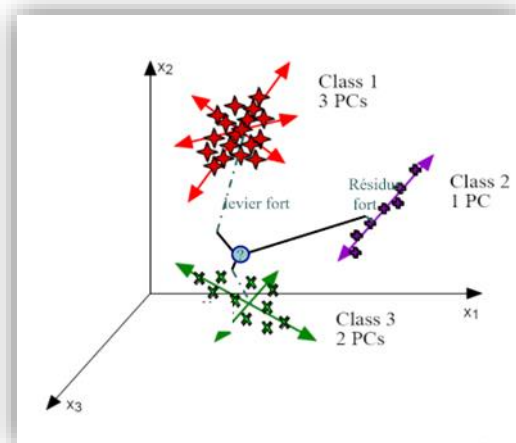
## Jour 1 : Analyse exploratoire

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



## Jour 2 : Modélisation prédictive quantitative et pré-traitements

- > 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
- > Pré-traitements des données spectroscopiques
  - > Correction des effets additifs
  - > Correction des effets multiplicatifs
  - > Application sur jeu de données et logiciel



## Jour 3 : Méthodes de discrimination

- > Principe de l'identification
- > PLS-DA (PLS - Discriminant Analysis)
- > SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogies)
  - > Questions-réponses sur points non maîtrisés
  - > QCM d'évaluation des acquis
  - > Questionnaire de satisfaction

**Qualiopi**  
processus certifié

🇫🇷 RÉPUBLIQUE FRANÇAISE

☎ : 04 67 67 97 87

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



## Prochaines sessions

2 au 4 avril 2024

10 au 12 décembre 2024

Si vous êtes en situation de handicap et avez besoin d'un accueil spécifique, merci de bien vouloir nous le préciser afin que nous puissions vous recevoir dans les meilleures conditions.