

# Formation

## Acquisition de spectres et développement de modèles quantitatifs

Formez-vous aux acquisitions de routine  
et à l'analyse des spectres avec la méthode PLS sous OPUS

### Objectifs

Cette session de formation à la prise de mesures avec OPUS et au développement de modèles PLS (Partial Least Square Regression) avec QUANT2 appliquée aux données spectroscopiques est destinée aux personnes souhaitant :

- Connaître les principes de base de la spectroscopie
- Acquérir des spectres avec OPUS
- Apprendre à développer un modèle PLS (régression aux moindres carrés partiels), méthode de prédiction quantitative sur QUANT2
- Assimiler les étapes clés de la méthodologie du traitement de données spectroscopiques

Au cours de la formation, 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.

Les exercices d'application sont proposés sur un jeu de données réel. La formation est donnée sous le module QUANT2 du logiciel OPUS.



#### PRE-REQUIS

Aucun prérequis



#### DUREE

2 jours



#### DONNEES

Données spectroscopiques



#### TYPE DE SESSION

Sessions intra-entreprises



#### PUBLIC CONCERNÉ

Chercheurs, scientifiques et ingénieurs

R&D, contrôle qualité,  
développement de produits,  
optimisation de procédés, ...



#### SECTEURS D'APPLICATION

Agriculture/Agro-alimentaire,  
Pétrochimie, Pharmaceutique,  
Biotechnologies, Chimie,  
Environnement...

## Programme de formation

- > Bases de la spectroscopie proche-infrarouge
  - ✓ Principe de la spectroscopie vibrationnelle
  - ✓ Spécificité de la spectroscopie NIR
  - ✓ Différents modes de mesure
  - ✓ Intérêt de la spectroscopie à Transformée de Fourier
- > Modélisation avec OPUS QUANT2
  - ✓ Intérêt de l'analyse multivariée
  - ✓ Méthodes de prétraitement des données
  - ✓ Principe de l'analyse factorielle (ACP)
  - ✓ Principe de la régression PLS
  - ✓ Création de méthode PLS avec OPUS QUANT2
  - ✓ Optimisation des paramètres du modèle
  - ✓ Validation de méthode PLS
  - ✓ Visualisation des résultats et critères de performance
  - ✓ Prédiction de nouveaux échantillons
  - ✓ Bonnes pratiques d'étalonnage
- ✓ Application sur jeu de données et logiciel OPUS / QUANT2
  - > Questions-réponses sur points non maîtrisés
  - > QCM d'évaluation des acquis
  - > Questionnaire de satisfaction



Si un de vos collaborateurs est en situation de handicap et a besoin d'un accueil spécifique, merci de bien vouloir nous le préciser afin que nous puissions adapter la formation en conséquence.

☎ : 04 67 67 97 87

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