

# UTILISATION DES METHODES CHIMIOMETRIQUES EN SPECTROMETRIE (1/2)

REF. FO CARA CHIM - 2 jours (14 heures)

**Objectif(s) :** Connaître les méthodes qui permettent de caractériser des microéchantillons ou des traces, des contaminants par spectroscopie infrarouge.

**Sessions en 2012  
à Paris :**  
9-10 octobre

**Public :**  
Techniciens,  
ingénieurs

**Prix :**  
900 € H.T.

**Déjeuners :**  
39 € H.T.

## PROGRAMME

Aspects théoriques :

- ◆ 1. Principe d'analyse quantitative en spectroscopie infrarouge.
- ◆ 2. Les facteurs physico-chimiques qui influencent la précision.
- ◆ 3. L'algorithme CLS par rapport aux algorithmes utilisés dans le logiciel Quant+ (PCR et PLS)
- ◆ 4. Différentes étapes du calcul PCR & PLS  
Analyse en composantes principales (PCA)
  - \* Reproduction des données spectrales – calculs des scores
  - \* Calcul du nombre optimal de facteursRégression multiple linéaire  
Prédiction des valeurs inconnues de propriétés.
- ◆ 5. Différences entre les algorithmes utilisés par le Quant+ (PCR+, PLS1, PLS2)
- ◆ 6. Traitement statistique d'erreur  
Erreur relative d'estimation et de prédiction (SEE, SEP)  
Résidus spectraux  
Statistiques F  
Distance de Mahalonobis  
Ratio résiduel

**ATOMER**

Formation Continue - N° d'organisme de formation : 11 95 02 857 95  
Tél. : +33 (0)1 39 84 15 87 - E-mail : contact@atomer.fr  
13, rue de la Coque F-95410 GROSLAY

# UTILISATION DES METHODES CHIMIOMETRIQUES EN SPECTROMETRIE (2/2)

REF. FO CARA CHIM - 2 jours (14 heures)

**Objectif(s) :** Connaître les méthodes qui permettent de caractériser des microéchantillons ou des traces, des contaminants par spectroscopie infrarouge.

**Sessions en 2012  
à Paris :**  
9-10 octobre

**Public :**  
Techniciens,  
ingénieurs

**Prix :**  
900 € H.T.

**Déjeuners :**  
39 € H.T.

## PROGRAMME

**Aspects pratiques :**

- ◆ 7. Préparation des étalons,  
Le choix du nombre d'étalons,  
Le choix de la gamme des valeurs associées.
- ◆ 8. Acquisition des spectres.  
Critères de choix des paramètres d'acquisition,  
Le choix de la technique d'échantillonnage,
- ◆ 9. Mise en place de la méthode d'étalonnage  
Le choix des paramètres de calcul, leur signification,  
Les traitements possibles des spectres et leur intérêt.  
Le choix d'affichage des résultats (étalonnage & validation – fonction Review).
- ◆ 10. Les résultats d'étalonnage et leur interprétation.  
Fichiers d'étalonnage – impression des résultats,  
Le transfert des données d'étalonnage entre les spectromètres différents,  
Corrections possibles des données d'étalonnage.
- ◆ 11. Validation de la méthode d'étalonnage et analyse des échantillons de concentration inconnue.  
Interprétation des résultats d'analyse.  
Utilisation des fichiers méthode (\*.md) en vue de prédiction,  
Rapport d'analyse – impression des résultats

**ATOMER**

Formation Continue - N° d'organisme de formation : 11 95 02 857 95  
Tél. : +33 (0)1 39 84 15 87 - E-mail : contact@atomer.fr  
13, rue de la Coque F-95410 GROSLAY