

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

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

OBJECTIFS : Connaître les méthodes qui permettent de caractériser des microéchantillons ou des traces, des contaminants par spectroscopie infrarouge.

Sessions cette
année :

Intra-entreprise

Public :
Techniciens,
ingénieurs

Prix :
Nous consulter

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 facteurs
Régression 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 Mahalanobis
Ratio résiduel

ATOMER

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

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

OBJECTIFS : Connaître les méthodes qui permettent de caractériser des microéchantillons ou des traces, des contaminants par spectroscopie infrarouge.

Sessions cette
année :

Intra-entreprise

Public :
Techniciens,
ingénieurs

Prix :
Nous consulter

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