


4.00 crédits	30.0 h	Q2
--------------	--------	----

Enseignants	Desmet Lieven ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	<i>Le(s) prérequis de cette Unité d'enseignement (UE) sont précisés à la fin de cette fiche, en regard des programmes/formations qui proposent cette UE.</i>
Thèmes abordés	Le but du cours est de familiariser les étudiants avec les concepts de la chimiométrie.
Acquis d'apprentissage	<p>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</p> <p>1 - L'objectif de ce cours est d'amener les étudiants à compléter leurs connaissances de l'utilisation de méthodes statistiques multivariées en chimie : analyse en composantes principales, moindres carrés partiels (PLS), clustering, analyse discriminante et application à la calibration multivariée en chimie analytique.</p>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	L'évaluation sera en partie basée sur le travail en continu des étudiants (e.g. sous la forme de devoirs et/ou d'une présentation) et sur un examen écrit final.
Méthodes d'enseignement	<p>Le cours est un cours magistral de 30h donné en présentiel et ponctué d'exercices appliqués réalisés durant celui-ci à partir de cas d'étude concrets. Il est actuellement prévu qu'il se donne en présentiel.</p> <p>L'entièreté du cours se donnera en salle informatique en insistant sur (1) les aspects théoriques nécessaires à la compréhension des méthodes présentées, (2) des exemples d'application sur base d'étude de cas. Les séances pratiques se feront avec le logiciel R, sous forme de documents RMarkdown.</p>
Contenu	<p>Ce cours vise à compléter les compétences des étudiants en Chimie pour le traitement (prétraitement et l'analyse statistique) de données chimiques par l'application de méthodes multivariées. Il se basera sur des applications réelles de l'industrie et de la recherche afin d'illustrer l'importance de l'utilisation de tels outils pour le prétraitement, l'exploration, la visualisation, la modélisation et la conduite de procédés pour des données de chimie analytique.</p> <p>Les principales étapes de prétraitement du signal seront étudiées, ainsi que les méthodes exploratoires ainsi que de régression et discrimination multivariées suivantes : PCA, clustering, PCR, PLS, LDA,</p>
Ressources en ligne	Chaque étudiant doit obligatoirement s'inscrire au cours LCHM1320 sur Moodle. Les communications entre enseignant et étudiants se feront majoritairement par le biais de cet outil.
Bibliographie	<ul style="list-style-type: none"> • Wehrens, R. (2011). <i>Chemometrics with R</i>. Heidelberg, Germany: Springer. • Varmuza, K., & Filzmoser, P. (2016). <i>Introduction to multivariate statistical analysis in chemometrics</i>. CRC press. • Husson, F., Lê, S., & Pagès, J. (2011). <i>Exploratory multivariate analysis by example using R</i> (Vol. 15). Boca Raton: CRC press. • James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2013). <i>An introduction to statistical learning</i> (Vol. 112, p. 18). New York: springer.
Autres infos	Les slides du cours seront disponibles sur Moodle.
Faculté ou entité en charge:	CHIM

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Mineure en chimie	MINCHIM	4		
Approfondissement en sciences chimiques	APPCHIM	4	LCHM1381	