

ACADÉMIE DE MONTPELLIER

UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER



Atelier Rmarkdown

25 mars 2022

Par le Centre d'Écologie Fonctionnelle & Évolutive



École Pratique
des Hautes Études



Memoir Template

CEFE R users

Version: 2022-03-25

This document is reproducible thanks to:

- L^AT_EX and its class memoir (<http://www.ctan.org/pkg/memoir>).
- R (<http://www.r-project.org/>) and RStudio (<http://www.rstudio.com/>)
- bookdown (<http://bookdown.org/>) and memoirR (<https://ericmarcon.github.io/memoirR/>)



Name of the owner of the logo

<https://www.cefe.cnrs.fr/fr/>

An explanatory sentence. Leave an empty line for line breaks.

Contents

Contents	v
1 Notes Atelier Rmarkdown	1
1.1 Pourquoi utiliser Rmarkdown ?	1
1.2 Profil des utilisateurs de l'atelier	2
1.3 Compilation dans Rstudio	2
Le fichier .rmd	2
Comment gère-t-on la bibliographie ?	2
YAML ?	3
chunk ?	3
la gestion du cache	3
Mise en page	4
Et les tableaux ?	4
Les équations mathématiques ?	4
1.4 Écrire un article	4
1.5 Écrire un mémoire	4
2 Les pinèdes	7
2.1 de nos régions	7
3 2e partie : les pollinisateurs des pins	9
3.1 ça n'existe pas	9
4 Aperçu des données	11
5 Présentation de la PTR-ToF-MS	13
5.1 Une brève histoire de la PTR-ToF-MS	14
5.2 Instrumentation générale	15
5.3 Analyse et conclusion	16
Le plan d'expérience	16
5.4 Résultats de la MCR	17
5.5 Bibliographie	19
Bibliography	21
List of Figures	25

Notes Atelier Rmarkdown

Autrices et auteurs :

- Joris Huguenin
- Clara Gritti
- Camila Leandro
- Nathalie Zeballos
- Océane Cobelli Ce document est une prise de notes collaboratives de l'atelier Rmarkdown effectué au CEFÉ le 25 mars 2022.

1.1 Pourquoi utiliser Rmarkdown ?

Utiliser word, notamment pour des documents longs et complexes, peut rapidement être plus couteux en termes d'effort.

<https://bookdown.org/yihui/rmarkdown/>

WISYMIG & WISYMIM (sont sur un bateau ?) What you see is what you get (word, openoffice) VS What you see is what you mean (Rmarkdown). Sous R, nous pouvons écrire un script qui peut être exporté en .rmd. La fonction knitr (petit bouton sous Rstudio avec une pelotte de laine) permet ensuite de compiler et exporter sous différents formats (.tex (et .pdf), .docx, .html).

Pour plus d'informations https://stateofther.github.io/finistR2018/atelier3_advancedrmd.html

<https://ismayc.github.io/rbasics-book/5-rmdanal.html>

Avantage d'utiliser le package memoiR au lieu de simplement Markdown: Création d'un ensemble de fichiers (cf plus bas) pour gérer plus facilement des documents plus longs/complexes (thèse, livre), avec un fichier

rmd par chapitre (gain de temps pour knitter, interchanger position des chp etc).

1.2 Profil des utilisateurs de l'atelier

- scripts R : 8 TB / 5 BOF [sur 13 participants]
- projets R : 10 oui / 3 non [Joris nous parle importance de faire des projets à chaque début de projet, notamment pour l'utilisation de Git]
- Git (Github, GitLab, ...) : 4 [le CNRS va déployer un GitLab]
- BibTex : 10 oui / 3 non [Logiciels type Zotero,... // memoIR utilise très bien les documents .bib]
- Rmarkdown : 8.5 oui / 4.5 non
- LaTeX : 1 oui / 12 non
- Beamer : [outil pour construire des présentations ; avantages : facile à faire / désavantages : moins intuitif que powerpoint]
- MemoIR : personne ne l'a déjà utilisé

1.3 Compilation dans Rstudio

Écrire un fichier .rmd avec un peu de texte, de l'import de data, et un résultat sous forme de tableau ou graphe.

Déposer les fichiers .rmd ici : <https://mycore.core-cloud.net/index.php/s/cdMB0VkkYpIVk3> et les annexes dans les dossiers correspondants.

Le fichier .rmd

La cheatsheet : <https://www.rstudio.com/wp-content/uploads/2015/02/rmarkdown-cheatsheet.pdf>

Le guide de référence : <https://www.rstudio.com/wp-content/uploads/2015/03/rmarkdown-reference.pdf>

Comment gère-t-on la bibliographie ?

citr : package pour faire sa bibliographie (une recherche du nom de l'auteur permet d'insérer la référence). Pour en savoir plus : <https://github.com/crsh/citr> Après l'installation du package, il peut être nécessaire de quitter/rouvrir le projet pour que l'option "Insert citation" apparaisse dans le volet de "Addins". /! Le package peut ne pas être disponible pour certaines versions de R.

On n'est pas obligé d'installer citr si on a précisé le fichier .bib dans le YAML, on peut utiliser @... (fonctionne en mode "compas", pas en mode "normal"). Avec le @, on accède au .bib et à la bibliothèque principale de zotero.

Alternative, utiliser les clés de citation bibTex avec les logiciels de gestion de bibliographie :

Zotero -> extension Better BibTex [<https://retorque.re/zotero-better-bibtex/>], crée une clé de citation pour chaque biblio -> extraction d'un fichier bibtex lu par R (fichier .bib en UTF-8) -> on le range dans un dossier /biblio dans notre projet R -> pour l'importer dans le fichier Rmd on écrit dans l'en-tête du document (YAML) : "bibliography : biblio/nomdufichier.bib" ; on peut aussi ajouter des options pour les citations avec biblatexoptions

Pour Mendeley il y a cette aide en ligne <https://blog.mendeley.com/2011/10/25/howto-use-mendeley-to-create-citations-using-latex-and-bibtex/>. Sinon sélectionner les citations qui vous intéressent (CTRL + A sélectionne tout dans le dossier choisi), puis Edit -> Exporter.

Le choix du style de citations peut se faire dans les options au début.

YAML ?

Partie du haut qui donne les caractéristiques générales du document (titre, auteur, date, gestion de la bibliographie...).

chunk ?

<https://yihui.org/knitr/options/#cache>

Pour mettre du code dans le document

Il est possible d'utiliser le raccourci ctrl+alt+i pour insérer rapidement un chunk.

la gestion du cache

Dans un premier "chunk" qui peut s'appeler *setup* on peut ajouter un certain nombre de directives pour l'ensemble des chunks. Par exemple, comment afficher à chaque fois les images. Pour le cache c'est ici qu'on va introduire deux paramètres, qui permettent que le calcul se fasse qu'une seule fois et que le résultat soit enregistré, ainsi lors d'une prochaine compilation, il n'y a pas nécessité de tout recalculer (ça fait gagner du temps !).

- cache = TRUE
- cache.lazy = FALSE)

<https://bioinfo-fr.net/maitrisez-cache-de-rmarkdown>

Mise en page

Visualier le rendu sans knitter : petite icone compas en haut à droite (“Switch to visual markdown editor”).

`** blablabla **` -> rendu en gras : **blablabla**

`‘mean(data$colonneA)’` -> sort le résultat de la fonction demandée, ici la moyenne de la colonne A du fichier data

Et les tableaux ?

avec kable, kableExtra et flextable

kable = le package de base pour afficher des tableaux

kableExtra = package amélioré qui permet de mettre en forme les tableaux

Les équations mathématiques ?

dans MemoiR : packages amsmaths et amssyms (?), chargés dans le template.tex

1.4 Écrire un article

Rmd -> from template [choix parmi un éventail (i.e. PNAS, Plos, Elsevier publications...)]

`install.packages(“rticles”)`

`library(rticles)`

<https://pagedown.rbind.io/>

1.5 Écrire un mémoire

Nouveau projet -> Markdown (choisi memoir -> document type memoir)

Beaucoup de fichier et dossiers se créent ; ça peut impressionner, mais ça veut juste dire qu’il a “déjà travaillé”. Rien que compiler l’exemple permet d’avoir un guide pour créer son propre mémoire (ça prends plusieurs minutes).

Intérêt de faire des chapitres : mieux gérer un doc long (manuscrit de thèse par exemple), inverser ordre des chapitres rapidement (juste changer nom du fichier et R recompile dans le nouvel ordre), temps de compilation qui diminue.

chapitrer son document

Le référencement croisé

https://ericmarcon.github.io/memoir/gallery/memoir/bookdown_gitbook/index.html

<https://ericmarcon.github.io/travailleR/> [Excellente référence pour travailler sur R (pas que sur Markdown)]

Plusieurs fichiers créés, dont :

- index → YAML que dans ce fichier (préciser page de garde créée en tant que pdf au préalable)
 - * précision de la langue (pour accès aux accents etc), de l'abstract, des mots-clés dans ce fichier ; Il est en effet important de noter -langage: english (ou bien le langage utilisé dans le document)
 - * 1er chunk : NE PAS MODIFIER !
 - * 2ème chunk qui permet de gérer le style des figures
 - * 3ème chunk : knitr options → mettre la librairie ici
 - * Glossaire : permet de faire le lien avec les titres de nos différents chapitres
 - -unnumbered (ne pas commencer la pagination à cette section)
- syntax
- getting start
- etc.

Organisation de notre mémoire : le + efficace c'est de faire 1 fichier par chapitre, la numérotation des chapitres va permettre de compiler le tout dans le bon ordre (mais après, ça reste une préférence personnelle, on peut mettre tous les chapitres dans le même fichier si on préfère, ça sera un peu + long à compiler)

Références internes au document à mettre entre {}

Dans le sous-dossier latex

- template.tex → package intégrés pour écrire des formules mathématiques, options pour la bibliographie, options gitbook avec titre et url personnels (researchgate...)

Indiquer la langue qu'on utilise (dans template.tex) : sert à charger les bons caractères (notamment pour les accents) et possibilité d'avoir un correcteur orthographique

Template.tex = tout est déjà réglé en langage LaTeX, bien pratique si on veut juste modifier qqs options

- Fichiers after_body.tex = pour ajouter des annexes en fin de rapport

Package tinytex : gère le langage LaTeX dans R

Les pinèdes

2.1 de nos régions

C'est trop joli. Il y a plein de pins.



Figure 2.1: une image de pinède de pins d'Alep

Note de Joris : Attention, j'ai corrigé l'adresse de l'image. Puisque nous travaillons dans un projet, il faut juste écrire `images/pinede.jpg` et non pas `C:/Users/c.gritti/Documents/CEFE_book/...`

2e partie : les pollinisateurs des pins

3.1 ça n'existe pas

Par contre il y en a en dessous pour le romarin et le thym.

```
kable(export_TAG_3011_net[1:10, c(24, 73, 83)], align = "c") %>%
  kable_styling(latex_options = "striped")
```

```
library(sp)
library(raster)
library(rgdal)
# install.packages('Rtools') install.packages('citr')
# install.packages('devtools') library(devtools)
# devtools::install_github('crsh/citr') library(citr)
```

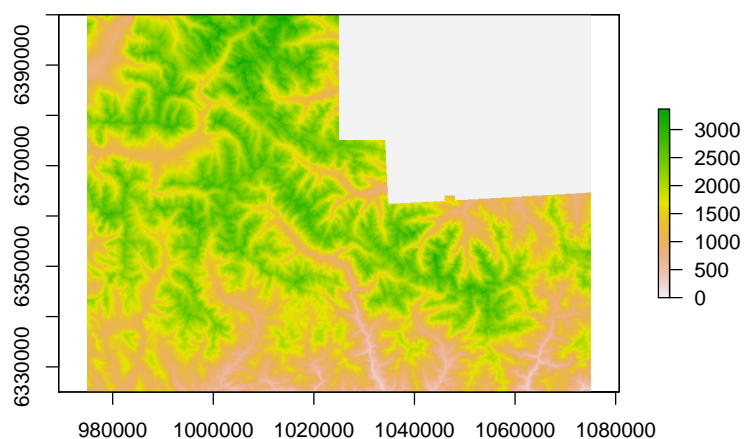
commune	nom_reconnu	abondance
Gruissan	Smilax aspera L., 1753	P
Gruissan	Quercus ilex L., 1753	1
Gruissan	Smilax aspera L., 1753	P
Gruissan	Aphyllanthes monspeliensis L., 1753	1
Gruissan	Quercus ilex L., 1753	P
Gruissan	Aphyllanthes monspeliensis L., 1753	P
Leucate	Quercus ilex L., 1753	P
Leucate	Sedum sediforme (Jacq.) Pau, 1909	P
Leucate	Smilax aspera L., 1753	P
Leucate	Helichrysum stoechas (L.) Moench, 1794	P

Aperçu des données

Nous avons un raster d'altitude à 25m pour la région des Alpes du Sud, téléchargé depuis le site de l'IGN ([IGN 2013](#)).

```
# data = read_excel('data/relevés_genepi_2021.xlsx', sheet  
# = 2)  
raster = raster("data/MNT25_PNM.tif")  
# limites = readOGR('data/pn2008.shp') crs(limites) =  
# CRS('EPSG:2154')
```

Ce raster peut être visualisé ci-dessous.



Présentation de la PTR-ToF-MS

De très nombreux projets de recherche issus du CeMEB nécessitent l'analyse de Composés Organiques Volatils (COV ou VOC en anglais) aussi communément appelés “odeurs”. Les COVs sont omniprésents dans la nature et permettent, avec les autres sens, une organisation du vivant en agissant comme vecteur d'information de la médiation chimique. Par l'acquisition d'un PTR-ToF-MS, la communauté souhaitait lever trois verrous techniques :

- l'appareil permet un fonctionnement en flux continu avec une résolution temporelle très fine (fréquence d'analyse allant jusqu'à 10 scans par seconde), permettant ainsi le suivi des cinétiques d'émissions de COV. Cet instrument simplifie drastiquement et affine les expériences cinétiques effectuées par des mesures moyennées de GC-MS;
- le PTR-ToF-MS possède une excellente résolution en masse qui facilite l'identification des molécules. Un **spectre** est composé de plus de 140 000 mesures de masses couvrant une large gamme des masses des COV biologiques (de 70 à 500 m/z). L'appareil possède donc une résolution environ mille fois supérieure par rapport à un simple quadripôle (PTR-MS ou GC-MS) qui fournit des m/z à l'unité de masse atomique (uma ou Dalton Da);
- le seuil de détection extrêmement bas, de l'ordre du ppt (part per trillion), permet une sensibilité adaptée à la mesure de traces.

5.1 Une brève histoire de la PTR-ToF-MS

Durant la décennie 1990, l'*Institut für Ionenphysik der Leopold-Franzens-Universität* d'Innsbruck en Autriche développe un nouvel instrument pour l'analyse chimique des gaz. En travaillant avec la *Universitätsklinik für Innere Medizin*, l'équipe menée par Lindinger développe un spectromètre en phase gazeuse qui ionise les molécules grâce à un gaz neutre ((Lindinger, Leiter, et al. 1991) et (Lindinger, Hirber, et al. 1993)). Ils comprennent rapidement l'avantage d'utiliser un proton (apporté à la réaction sous la forme H_3O^+) par rapport aux ions Kr^+ et Xe^+ . Ils publient une sorte de preuve de concept en 1994 (Lagg et al. 1994) et détaillent plus finement l'instrumentation et les réactions chimiques (Hansel et al. 1995)¹. En 1998 sort l'article qui fait désormais référence, (Lindinger, Hansel, et al. 1998), signé par le trio Lindinger, Hansel et Jordan (et sa version courte Lindinger and Jordan (1998)).

Ionicon commercialise la même année le premier PTR-MS. Cette technique se déploie rapidement dans les sciences de l'atmosphère, médicales et biotech ((Babcock and Adams 2001)) permettant la détection de traces de COV. Rapide et sensible, la PTR-MS élimine certains désavantages de la GC-MS. Cependant, la PTR-MS détecte de la masse nominale des ions. Un échantillon complexe peut contenir plusieurs ions isobares². Il convient alors de gagner en résolution de masse et séparer ces isobares. (Jordan et al. 2009) revient sur les tentatives les plus concluantes ((Blake et al. 2004), (Ennis et al. 2005), (Inomata et al. 2006) et (Tanimoto et al. 2007)) avant de proposer son approche : la PTR-ToF-MS. Développé en collaboration avec la précédente équipe, le minutieux article de (Graus et al. 2010) conclut superbement la vingtaine d'années de développement nécessaire à cette technique. Les années suivantes permettront simplement une amélioration des différentes parties de l'instrument.

Par ailleurs, c'est au tour des mathématiciens d'apporter leur contribution et en particulier à l'équipe de Cappellin avec deux articles. Le premier, (Cappellin, Biasioli, Fabris, et al. 2010), permet de mieux estimer la masse exacte de chaque ion détecté. Le seconde, (Cappellin, Biasioli, Granitto, et al. 2011), offre une méthodologie détaillée de l'utilisation du PTR-ToF-MS de l'acquisition à la fin de l'analyse. Puis en 2015, (Holzinger 2015) propose un logiciel pour l'analyse des data mais cette tentative n'a pas été suivie par la communauté d'utilisateurs. Il existe désormais un nombre important d'articles utilisant la PTR-ToF-MS. Bien entendu, des outils communs de chimiométrie ont été utilisés pour renforcer les résultats, (Deuscher et al. 2019). Mais cela sera abordé dans le chapitre suivant.

Je suppose que la prochaine avancée majeure viendra d'une technologie

¹avec des remerciements incroyables

²molécules possédant un nombre de nucléons identique.

permettant de discriminer les isomères³ (Claflin et al. 2021)⁴. Par exemple, cela permettrait de séparer les différents monoterpènes omniprésents dans les émissions végétales et qui nous concernent particulièrement en écologie chimique. Actuellement, ce désavantage est comblé par le couplage de la PTR-ToF-MS avec une seconde technique d'analyse chimique. Ce court historique montre toutefois que la collaboration entre physiciens, chimistes, biologistes et mathématiciens est fructueuse et promise à un bel avenir.

5.2 Instrumentation générale

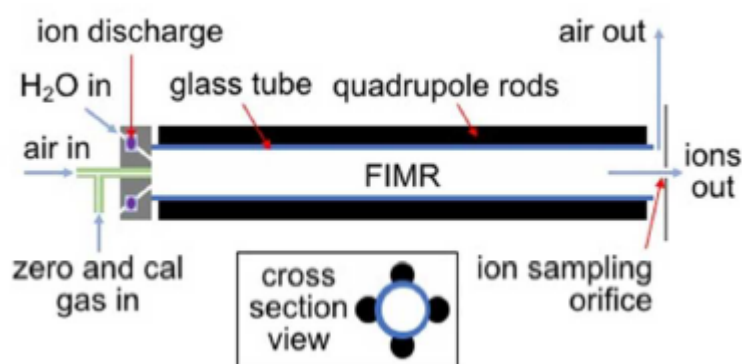


Figure 5.1: Schéma de la chambre d'ionisation (Reprinted with permission from Krechmer et al. (2018). Copyright 2021 American Chemical Society.)

Comme nous l'avons vu précédemment, le PTR-ToF-MS est conçu pour analyser finement la masse moléculaire des échantillons. Pour cela l'instrument aspire un débit d'air constant de 100 ml/min⁵. Cet *air in* sur la figure 5.1 peut être connecté à un gaz zéro pour diluer un échantillon trop concentré (pour éviter la saturation) ou à un gaz étalon pour l'étalonnage de l'instrument. Le flux d'air est ensuite injecté dans le réacteur (*FIMR* pour *focusing ion-molecule reactor*). Dans cette chambre, des ions H⁺ issus d'eau ultra pure sont également injectés à débit constant afin d'ioniser les molécules de l'échantillon (*Proton-Transfer-Reaction*).

Il est important de comprendre que, contrairement à une ionisation par électron⁶, il n'y a quasiment pas de fragmentation moléculaire. C'est une ionisation douce, comme en ESI (ElectroSpray Ionization) fréquemment utilisée en LC-MS. Les ions ont “une unité de masse molaire de plus”(un

³molécules partageant la même formule brute mais avec un agencement tridimensionnel différent.

⁴si un mémoire de master permettait la science fiction, j'aurais évidemment développé quelques idées à propos de capteurs de champs électromagnétiques ou de spectromètres optiques à la place des capteurs MS actuels.

⁵ou sccm, pour *standard cubic centimeters per minute*

⁶comme c'est le cas en ionisation électronique fréquemment utilisée en GC-MS.

proton) que les ions moléculaires. Par exemple, le linalol, un COV fortement produit par la lavande, a une masse molaire de 154,249 g/mol mais sera détecté à 155,256 g/mol. Par ailleurs, le nombre d'ions MH^+ détectés dépend du taux de protonation de la molécule M . Sous forme d'ions, l'échantillon peut être focalisé par un champ électromagnétique généré par un quadripôle et envoyé dans la partie ToF.

Une fois dans la colonne, l'énergie potentielle d'un pulse électromagnétique à 25kHz est convertie en énergie cinétique par les ions propulsés. À énergie constante, la masse fait la différence lors de la mesure du temps de vol (ToF, figure 5.2). Ainsi les ions les moins lourds arrivent en premiers sur le détecteur. Le comptage du nombre de coups sur le détecteur donne l'intensité par unité de temps. Un étalonnage, avec des ions moléculaires étalons, permet de convertir le *temps de vol* en *masse*, ce qui permet par la suite d'analyser les masses des échantillons inconnus.

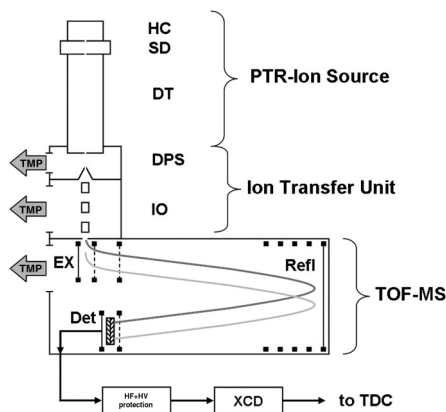


Figure 5.2: Schéma de la colonne ToF et du détecteur MS (Reproduit de l'article Graus et al. (2010))

Pour une compréhension plus exhaustive, je recommande la lecture des articles de Hansel et al. (1995) pour la partie PTR-MS, de Graus et al. (2010) pour la partie ToF et de Krechmer et al. (2018) spécifique à l'instrument utilisé au CEFÉ.

5.3 Analyse et conclusion

Le plan d'expérience

Pour illustrer cela, je présenterais une expérience sur les lavandes. Cette expérience s'inscrit dans un cadre d'un projet MUSE (Montpellier Université d'Excellence) porté par Magali Proffit et s'intéressant aux phénomènes de pollution à l'Ozone O_3 liés au changement climatique global. Nous nous sommes intéressés aux variations journalières des émissions de COV de lavandes isolés dans des chambres de prélèvements. Les acquisitions se

déroulaient durant 48h à cheval sur trois jours et deux nuits afin de décrire le rythme circadien des plantes.

Nous avons mis en place quatre chambres de mesure permettant chacune soit d'isoler un plant de lavande soit d'être un blanc. Ces chambres de mesure sont des cylindres en plastique, ventilés, de volumes équivalents et reliés à un flux d'air zéro d'un débit de 5 litres/min. La longueur et le volume des lignes reliant les chambres à l'instrument de mesure n'étaient pas identiques. Nous avons lancé des acquisitions sur les quatre chambres séquentiellement durant 48h. Nous avons répété ce processus deux fois, pour obtenir neuf plants au total dans notre plan d'expérience (cf. ??).

5.4 Résultats de la MCR

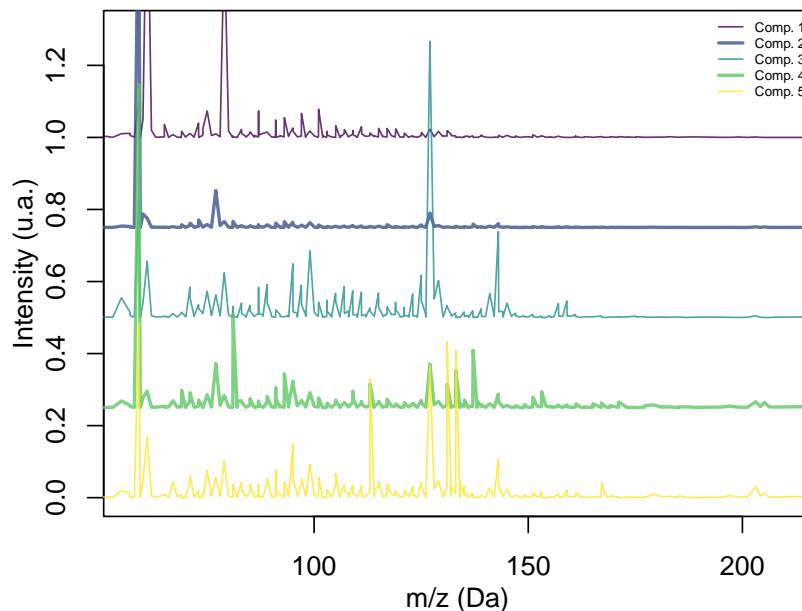


Figure 5.3: Spectres purs, loadings MCR

Les spectres issus de ces expériences sont ensuite analysés avec des outils de chimiométrie pour explorer au maximum toute la complexité des données à traiter. Certains algorithmes, comme la MCR-ALS, permettent le développement de modèles multivoies pour prendre en compte l'aspect cinétique de la PTR-ToF-MS.

J'ai utilisé l'algorithme de la MCR-ALS pour décomposer le spectre total en spectres purs (5.4). Ces spectres purs sont des ensembles de COV représentatifs d'un phénomène propre. En optimisant la MCR-ALS, j'ai fait ressortir, entre autres, l'évolution de deux spectres purs montrant un double cycle d'émission journalier (5.4). La première activité intervient peu après l'aube, atteint un pic d'émission autour de 8h et diminue rapidement pour retrouver un niveau comparable au niveau initial vers midi.

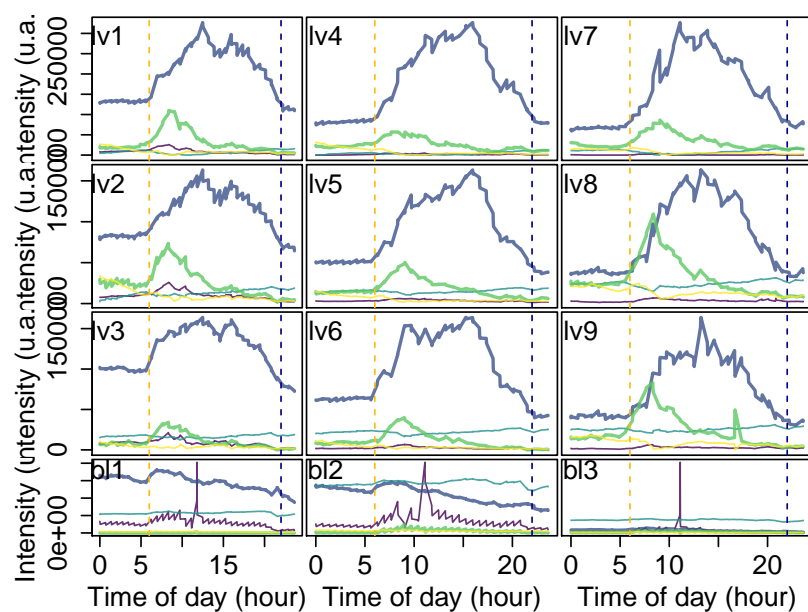


Figure 5.4: Evolution cinétique des spectres purs

La seconde activité plus tardive augmente jusqu'à un plateau atteint vers midi et se prolonge jusqu'à 16h pour décroître par la suite.

5.5 Bibliographie

This template is based on *Bookdown* and the *Memoir* LaTeX class to allow writing a book, a report, a PhD thesis, etc. in *R Markdown*.

The main file is *index.Rmd* which contains the description of the book in its header. All other *.Rmd* files in the folder contain a chapter. The *references.bib* file contains the bibliography.

This file will have to be deleted, as well as *81-getting_started.Rmd* and *82-syntax.Rmd*: they have to be replaced by the content of the book.

To get started, create a new R project from this folder. Then open *index.Rmd* and click on the *Build Book* button in the *Build* window of Rstudio.

Bibliography

- Babcock, L. and N. Adams (2001). *Advances in Gas Phase Ion Chemistry, Volume 4 - 1st Edition*. 1st ed. Vol. 4. URL: <https://www-elsevier-com.inee.bib.cnrs.fr/books/advances-in-gas-phase-ion-chemistry/babcock/978-0-444-50929-1> (visited on 08/12/2021) (cit. on p. 14).
- Blake, R. S., C. Whyte, C. O. Hughes, A. M. Ellis, and P. S. Monks (July 2004). “Demonstration of proton-transfer reaction time-of-flight mass spectrometry for real-time analysis of trace volatile organic compounds.” eng. In: *Anal Chem* 76.13, pp. 3841–3845. DOI: [10.1021/ac0498260](https://doi.org/10.1021/ac0498260) (cit. on p. 14).
- Cappellin, L., F. Biasioli, A. Fabris, E. Schuhfried, C. Soukoulis, T. D. Märk, and F. Gasperi (Feb. 2010). “Improved mass accuracy in PTR-TOF-MS: Another step towards better compound identification in PTR-MS.” en. In: *International Journal of Mass Spectrometry* 290.1, pp. 60–63. DOI: [10.1016/j.ijms.2009.11.007](https://doi.org/10.1016/j.ijms.2009.11.007). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1387380609003571> (visited on 05/03/2021) (cit. on p. 14).
- Cappellin, L., F. Biasioli, P. M. Granitto, E. Schuhfried, C. Soukoulis, F. Costa, T. D. Märk, and F. Gasperi (July 2011). “On data analysis in PTR-TOF-MS: From raw spectra to data mining.” en. In: *Sensors and Actuators B: Chemical* 155.1, pp. 183–190. DOI: [10.1016/j.snb.2010.11.044](https://doi.org/10.1016/j.snb.2010.11.044). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0925400510009135> (visited on 05/03/2021) (cit. on p. 14).
- Claffin, M. S., D. Pagonis, Z. Finewax, A. V. Handschy, D. A. Day, W. L. Brown, J. T. Jayne, D. R. Worsnop, J. L. Jimenez, P. J. Ziemann, J. de Gouw, and B. M. Lerner (2021). “An in situ gas chromatograph with automatic detector switching between PTR- and EI-TOF-MS: isomer-resolved measurements of indoor air.” In: *Atmospheric Measurement Techniques* 14.1, pp. 133–152. DOI: [10.5194/amt-14-133-2021](https://doi.org/10.5194/amt-14-133-2021). URL: <https://amt.copernicus.org/articles/14/133/2021/> (cit. on p. 15).
- Deuscher, Z., I. Andriot, E. Sémon, M. Repoux, S. Preys, J.-M. Roger, R. Boulanger, H. Labouré, and J.-L. Le Quéré (Jan. 2019). “Volatile compounds profiling by using proton transfer reaction-time of flight-mass spectrometry (PTR-ToF-MS). The case study of dark chocolates organoleptic differences.” en. In: *J Mass Spectrom* 54.1, pp. 92–119. DOI: [10.1002/jms.4317](https://doi.org/10.1002/jms.4317). URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/jms.4317> (visited on 05/17/2021) (cit. on p. 14).

- Ennis, C. J., J. C. Reynolds, B. J. Keely, and L. J. Carpenter (Dec. 2005). "A hollow cathode proton transfer reaction time of flight mass spectrometer." en. In: *International Journal of Mass Spectrometry* 247.1, pp. 72–80. DOI: [10.1016/j.ijms.2005.09.008](https://doi.org/10.1016/j.ijms.2005.09.008). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387380605002472> (visited on 08/12/2021) (cit. on p. 14).
- Graus, M., M. Müller, and A. Hansel (June 2010). "High resolution PTR-TOF: Quantification and formula confirmation of VOC in real time." en. In: *J Am Soc Mass Spectrom* 21.6, pp. 1037–1044. DOI: [10.1016/j.jasms.2010.02.006](https://doi.org/10.1016/j.jasms.2010.02.006). URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jasms.8b03774> (visited on 05/03/2021) (cit. on pp. 14, 16).
- Hansel, A., A. Jordan, R. Holzinger, P. Prazeller, W. Vogel, and W. Lindinger (Nov. 1995). "Proton transfer reaction mass spectrometry: on-line trace gas analysis at the ppb level." en. In: *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*. Honour Biography David Smith 149–150, pp. 609–619. DOI: [10.1016/0168-1176\(95\)04294-U](https://doi.org/10.1016/0168-1176(95)04294-U). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016811769504294U> (visited on 08/12/2021) (cit. on pp. 14, 16).
- Holzinger, R. (Sept. 2015). "PTRwid: A new widget tool for processing PTR-TOF-MS data." en. In: *Atmos. Meas. Tech.* 8.9, pp. 3903–3922. DOI: [10.5194/amt-8-3903-2015](https://doi.org/10.5194/amt-8-3903-2015). URL: <https://amt.copernicus.org/articles/8/3903/2015/> (visited on 05/17/2021) (cit. on p. 14).
- IGN (Feb. 2013). *RGE ALTI® Version 2.0 - Descriptif de contenu* (cit. on p. 11).
- Inomata, S., H. Tanimoto, N. Aoki, J. Hirokawa, and Y. Sadanaga (2006). "A novel discharge source of hydronium ions for proton transfer reaction ionization: design, characterization, and performance." en. In: *Rapid Communications in Mass Spectrometry* 20.6. eprint: <https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/rcm.2405>, pp. 1025–1029. DOI: [10.1002/rcm.2405](https://doi.org/10.1002/rcm.2405). URL: <https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/rcm.2405> (visited on 08/12/2021) (cit. on p. 14).
- Jordan, A., S. Haidacher, G. Hanel, E. Hartungen, L. Märk, H. Seehauser, R. Schottkowsky, P. Sulzer, and T. Märk (Sept. 2009). "A high resolution and high sensitivity proton-transfer-reaction time-of-flight mass spectrometer (PTR-TOF-MS)." en. In: *International Journal of Mass Spectrometry* 286.2–3, pp. 122–128. DOI: [10.1016/j.ijms.2009.07.005](https://doi.org/10.1016/j.ijms.2009.07.005). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1387380609002371> (visited on 04/30/2021) (cit. on p. 14).
- Krechmer, J., F. Lopez-Hilfiker, A. Koss, M. Hutterli, C. Stoermer, B. Deming, J. Kimmel, C. Warneke, R. Holzinger, J. Jayne, D. Worsnop, K. Fuhrer, M. Gonin, and J. de Gouw (Oct. 2018). "Evaluation of a New Reagent-Ion Source and Focusing Ion–Molecule Reactor for Use in Proton-Transfer-Reaction Mass Spectrometry." In: *Anal. Chem.* 90.20. Publisher: American Chemical Society, pp. 12011–12018. DOI: [10.1021/](https://doi.org/10.1021/)

- acs.analchem.8b02641. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.8b02641> (visited on 08/13/2021) (cit. on pp. 15, 16).
- Lagg, A., J. Taucher, A. Hansel, and W. Lindinger (June 1994). “Applications of proton transfer reactions to gas analysis.” en. In: *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes* 134.1, pp. 55–66. DOI: 10.1016/0168-1176(94)03965-8. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168117694039658> (visited on 08/12/2021) (cit. on p. 14).
- Lindinger, W., K. Leiter, and M. Andriollo (1991). “Industrial Multicomponent Gas Analysis.” In: *Ionen-Technik GmbH* 20.7, pp. 24–25 (cit. on p. 14).
- Lindinger, W., A. Hansel, and A. Jordan (Feb. 1998). “On-line monitoring of volatile organic compounds at pptv levels by means of proton-transfer-reaction mass spectrometry (PTR-MS) medical applications, food control and environmental research.” en. In: *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes* 173.3, pp. 191–241. DOI: 10.1016/S0168-1176(97)00281-4. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168117697002814> (visited on 08/12/2021) (cit. on p. 14).
- Lindinger, W., J. Hirber, and H. Paretzke (Nov. 1993). “An ion/molecule-reaction mass spectrometer used for on-line trace gas analysis.” en. In: *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes* 129, pp. 79–88. DOI: 10.1016/0168-1176(93)87031-M. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016811769387031M> (visited on 08/12/2021) (cit. on p. 14).
- Lindinger, W. and A. Jordan (Jan. 1998). “Proton-transfer-reaction mass spectrometry (PTR-MS): on-line monitoring of volatile organic compounds at pptv levels.” en. In: *Chem. Soc. Rev.* 27.5. Publisher: The Royal Society of Chemistry, pp. 347–375. DOI: 10.1039/A827347Z. URL: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/1998/cs/a827347z> (visited on 04/30/2021) (cit. on p. 14).
- Tanimoto, H., N. Aoki, S. Inomata, J. Hirokawa, and Y. Sadanaga (May 2007). “Development of a PTR-TOFMS instrument for real-time measurements of volatile organic compounds in air.” en. In: *International Journal of Mass Spectrometry* 263.1, pp. 1–11. DOI: 10.1016/j.ijms.2007.01.009. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387380607000231> (visited on 08/12/2021) (cit. on p. 14).

List of Figures

2.1	une image de pinède de pins d'Alep	7
5.1	Schéma de la chambre d'ionisation (Reprinted with permission from Krechmer et al. (2018). Copyright 2021 American Chemical Society.)	15
5.2	Schéma de la colonne ToF et du détecteur MS (Reproduit de l'article Graus et al. (2010))	16
5.3	Spectres purs, loadings MCR	17
5.4	Evolution cinétique des spectres purs	18

Abstract English abstract, on the last page.

This is a bookdown template based on LaTeX memoir class.

Keywords Keyword in English, As a list.

