

ACADEMIE DE MONTPELLIER
UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER
MASTER
STATISTIQUE POUR LES SCIENCES DE LA VIE

MÉMOIRE sur le stage :

Développement d'outils d'analyses
pour les données de PTR-ToF-MS

Du 1^{er} mars au 31 août 2021
au Centre d'Écologie Fonctionnelle & Évolutive
sous la direction de N. Barthes et J.-M. Roger
par :

JORIS HUGUENIN

soutenu le 10 septembre 2021, devant la commission d'examen :

J.-N. BACRO
C. REYNES
R. SABATIER

Professeur
Maître de Conférence
Professeur



École Pratique
des Hautes Études



l'institut Agro
agriculture • alimentation • environnement



À travers ce rapport, je dédicace cette année de M2 à *Thomas M. Kyle*, lauréat du prix Ignobel 1991 pour la découverte de l'élément le plus lourd de l'Univers : l'Administratium. Je salue les efforts cumulés mis en oeuvre pour honorer le trentième anniversaire de ce prix et remercie ceux qui ont su faire preuves de patience.



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

CEFE : Centre Écologie Fonctionnelle et Évolutive

PACE : Plateforme d'Analyse Chimique en Écologie

Table des matières

Table des matières	v
Remerciements	vii
1 Contexte	1
1.1 plan	1
1.2 blabla initial	1
2 Présentation de la PTR-ToF-MS	3
2.1 plan	3
2.2 blabla initiale	3
3 Plan d'expérience en écologie chimique	5
3.1 plan	5
4 Introduction au package proVOC	7
4.1 plan	7
5 Méthodes Multivariées	9
5.1 Plan	9
A Rapport d'activité	11
Bibliographie	13
Table des figures	15

Remerciements

Merci à tous

C H A P I T R E

1

Contexte

1.1 plan

Contexte

- présentation labo
- projets
- stage
- expériences
- congrès

1.2 blabla initial

RStudio en version supérieure à 1 doit être utilisé. Le package **bookdown** doit être installé.

CHAPTER

2

Présentation de la PTR-ToF-MS

2.1 plan

- Théorie du PTR-MS + explication des datas
- instrumentation générale
- présentation des spectres
- tailles des matrix

2.2 blabla initiale

La syntaxe de *R Markdown* étendue par *Bookdown* est rappelée ici, en Anglais.
Les références bibliographiques ([XIE 2015](#)) sont supportées.

Plan d'expérience en écologie chimique

3.1 plan

Plan d'expérience

- retour sur les manips (poules amandes / lavandes / figuiers)
- critiques

Introduction au package proVOC

4.1 plan

- package proVOC
- explication général
- science reproductible
- analyse AUC
- spectre circulaire
- regression linéaire
- rapport automatique

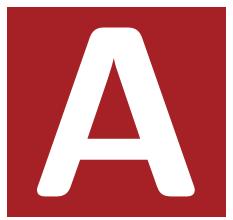
Méthodes Multivariées

5.1 Plan

Méthodes multivariées

- ACP
- MCR
- ICA

A N N E X E



Rapport d'activité

Bibliographie

XIE, Y. (2015). *Dynamic Documents with R and knitr*. en-us. 2nd. Boca Raton, Florida : Chapman et Hall/CRC. URL : <https://yihui.org/knitr/> (visité le 07/07/2021) (cf. p. 3).

Table des figures

Abstract English abstract, on the last page.

This is a bookdown template based on LaTeX memoir class.

Keywords Keyword in English, As a list.

