

ACADÉMIE 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<sup>er</sup> 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





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



# Remerciements

Merci à tous





# 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.



# 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 manip (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





## 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.

