

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^{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



À travers ce rapport, je dédicace cette année de M2 à Thomas M. Kyle,
lauréat du prix Ignobel 1991 pour la découverte de 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

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.



École Pratique
des Hautes Études

