

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<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



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'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

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



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

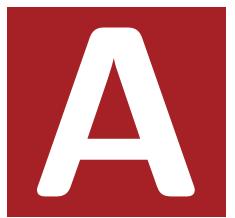
## 5.1 Plan

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.

