



HAL
open science

MOOC CheMOOCS : principes et outils de la chimométrie pour tous

D. Bertrand, Julien Boccard, M.athieu Boiret, J.C. Boulet, Philippe Courcoux, Ludovic Duponchel, Martin Ecarnot, F. Gogé, Jean-Michel Roger

► To cite this version:

D. Bertrand, Julien Boccard, M.athieu Boiret, J.C. Boulet, Philippe Courcoux, et al.. MOOC CheMOOCS : principes et outils de la chimométrie pour tous. Doctorat. France. 2016. hal-02606294

HAL Id: hal-02606294

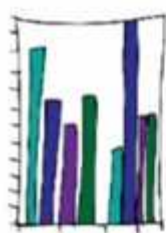
<https://hal.inrae.fr/hal-02606294>

Submitted on 16 May 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

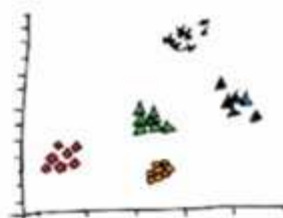
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Copyright



CheMOOCs

PRINCIPES ET OUTILS DE LA CHIMIOMÉTRIE POUR TOUS



À propos du cours

Peut-on estimer la composition chimique d'un échantillon en quelques secondes et sans le toucher ? Identifier son origine ? Oui ! C'est possible, en réalisant l'acquisition d'un spectre de l'échantillon et son traitement avec des outils de chimiométrie.

Ce mooc est destiné à vous rendre autonome en chimiométrie.

Nous l'avons orienté vers les applications de spectrométrie proche infrarouge, les plus répandues. Toutefois, la chimiométrie est ouverte à d'autres domaines spectraux : moyen infrarouge, ultra-violet, visible, fluorescence ou Raman, ainsi qu'à bien d'autres applications non-spectrales. Donc pourquoi pas dans votre domaine ?

Un parcours progressif vous amènera à savoir utiliser des méthodes d'exploration, de régression et de classification. A l'issue de ce tronc commun, vous pourrez approfondir vos connaissances et découvrir d'autres méthodes : résolution multivariée de courbes, analyse de multiblocs ...

Vous appliquerez vos connaissances en réalisant nos exercices d'application grâce au logiciel ChemFlow, gratuit et accessible via un simple navigateur internet depuis un ordinateur ou un smartphone. ChemFlow a été conçu pour être aussi convivial et intuitif que possible. Ainsi, il ne nécessite aucune connaissance en programmation.

A la fin de ce mooc, vous aurez acquis le savoir-faire nécessaire pour traiter vos propres données.

Bienvenue dans le monde fascinant de la chimiométrie.

Public

Ce mooc s'adresse aux personnes pour lesquelles les mots « spectroscopie », « chimiométrie » ou « analyse de données multivariées » sont déjà connus et suscitent un intérêt. Qu'elles soient :

- étudiants, pour une remise à niveau avant leur entrée en master ou en thèse impliquant la chimiométrie
- étudiants en mathématiques intéressés par des applications pratiques à l'algèbre matricielle
- stagiaires, niveau master/ingénieur, ou étudiants en thèse, ayant besoin d'utiliser ponctuellement des outils de chimiométrie
- techniciens utilisateurs de spectromètres, souhaitant mieux comprendre les traitements de leurs données
- ingénieurs ou chercheurs développant des méthodes rapides d'analyse, au laboratoire comme sur le terrain

Format

La durée totale du mooc est de 8 semaines. Il se compose d'une semaine d'introduction suivi de 6 semaines de tronc commun. La 8ème et dernière semaine est une option « pour en savoir plus ».

Vous découvrirez, chaque semaine du tronc commun, deux méthodes de chimiométrie.

Le cours est proposé sous la forme de vidéos, repris dans un polycopié détaillé.

Pour chacune des méthodes présentées vous pourrez :

- tester vos connaissances sur un quiz
- les mettre en application dans un exercice sur ChemFlow

Plan du cours

- **Semaine 0 : Introduction**
 - Présentation du mooc
 - Prise en main de la plateforme FUN
 - Découverte du logiciel ChemFlow
 - Notions de chimiométrie
- **Semaine 1 : Tronc commun**
 - Statistiques simples
 - ACP (1/2)
- **Semaine 2 : Tronc commun**

- ACP (2/2)
- Prétraitements (1/2)
- **Semaine 3 : Tronc commun**
 - Classification non supervisée
 - Régression linéaire
- **Semaine 4 : Tronc commun**
 - Régression aux moindres carrés partiels- PLSR (1/2)
 - Régression aux moindres carrés partiels- PLSR (2/2)
- **Semaine 5 : Tronc commun**
 - Prétraitements (2/2)
 - Bonnes pratiques de modélisation
- **Semaine 6 : Tronc commun**
 - Discrimination (1/2)
 - Discrimination (2/2)
- **Semaine 7 : "Pour en savoir plus" (en option)**
 - Optimisation : Sélection de variables (1 et 2) et Robustesse
 - Méthodes de décomposition spectrale : MCR et ICA
 - Analyse multiblocs : Données multiblocs et Analyses des données multiblocs

Prérequis

- **être francophone** : le mooc est en Français, seul le logiciel ChemFlow est accessible en Français et en Anglais
- **niveau Bac+2 en sciences** ou déjà une expérience pratique en spectroscopie ou chimie

Évaluation

L'évaluation porte uniquement sur le tronc commun. L'attestation de suivi avec succès sera délivrée à toute personne ayant plus de 50% de bonnes réponses.

L'évaluation se fera par des quiz à l'issue de chaque grain (30% de la note finale) et par un exercice de mise en application de plusieurs méthodes évoquées dans le mooc (70% de la note finale).

Équipe pédagogique

Présentation des contributeurs de CheMoocs, par ordre alphabétique.



Dominique BERTRAND

Ancien directeur de recherche à l'INRA, actuellement à la retraite. Dominique Bertrand est l'auteur de "La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques" (ed. Lavoisier). Il est aujourd'hui consultant en chimiométrie et datascience.



Julien BOCCARD

Collaborateur scientifique au sein du laboratoire des Sciences Analytiques de l'Université de Genève. Julien Boccard développe des outils associant chimiométrie et bioinformatique pour l'analyse et l'intégration des données métabolomiques.



Mathieu BOIRET

Chef de département spectroscopie et chimiométrie à Technologie Servier, Orléans. Mathieu Boiret est docteur en chimiométrie. Sa thèse porte sur le développement d'outils chimiométriques pour la détection des composés minoritaires en imagerie hyperspectrale Raman.



Jean-Claude BOULET

Ingénieur de recherche à l'INRA de Montpellier, UMR1083 Sciences Pour l'Oenologie. Jean-Claude Boulet est responsable de la chimiométrie pour la plateforme Polyphénols. Il est porteur du projet CheMoocs.



Philippe COURCOUX

Maître de conférences en Statistique et Informatique à ONIRIS Nantes. Philippe Courcoux travaille sur le développement de méthodes multidimensionnelles en sensométrie et chimiométrie.



Ludovic DUPONCHEL

Professeur à l'Université de Lille, rattaché au Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman, UMR CNRS 8516. Ludovic Duponchel est physico-chimiste de formation. Il est Président du Groupe Français de Chimiométrie - GFC.



Martin ECARNOT

Ingénieur d'études à l'INRA de Montpellier, UMR1334 AGAP, équipe Ge²Pop. Martin Ecarnot développe des méthodes de phénotypage par spectrométrie proche infrarouge et imagerie hyperspectrale sur du matériel végétal.



Fabien GOGÉ

Ingénieur à IRSTEA de Montpellier, à l'UMR ITAP. Fabien Gogé est chimiométricien et développeur d'applications de traitements de données scientifiques. Il a participé au développement de ChemFlow.



Mohamed HANAFI

Chercheur en statistique appliquée à ONIRIS Nantes. Mohamed Hanafi axe ses activités de recherche sur les plans théoriques et pratiques autour de l'analyse de données structurées en blocs.



Benoît JAILLAIS

Ingénieur de recherche à l'INRA de Nantes, Unité Sensométrie Chimiométrie. Benoît Jaillais développe des méthodes chimiométriques pour extraire l'information de collections d'images en s'appuyant sur des méthodes multiblocs.



Eric LATRILLE

Ingénieur de recherche à l'INRA au Laboratoire de Biotechnologie de l'Environnement à Narbonne. Eric Latrille développe des applications de traitements de données scientifiques. Il a participé au développement de ChemFlow.



Christophe LEBEGUE

Responsable formation SupAgro INRA à Montpellier. Christophe Lebègue est spécialiste en ingénierie de formation et pédagogie.



Sébastien PREYS

Docteur en chimiométrie et ingénieur agroalimentaire. Sébastien Preys est chef de projets au sein d'Ondalys, structure privée basée à Montpellier qui propose depuis 15 ans des services, études et formations en chimiométrie pour l'ensemble des filières industrielles.



Christelle REYNES

Ingénieur agronome et maître de conférences en biostatistiques à l'Université de Montpellier, rattachée à l'Institut de Génomique Fonctionnelle. Christelle Reynes développe des méthodes d'analyse de données en grande dimension, notamment de sélection de variables pour l'identification de biomarqueurs.



Jean-Michel ROGER

Ingénieur IPEF à IRSTEA de Montpellier, UMR ITAP. Jean-Michel Roger est spécialiste en robustesse des étalonnages. Il est membre du GFC et de l'International Council for Near Infrared Spectroscopy, lauréat du prix Tomas Hirschfeld 2016. Il est porteur du projet CheMoocs.



Virginie ROSSARD

Assistant Ingénieur à l'INRA au Laboratoire de Biotechnologie de l'Environnement à Narbonne. Virginie Rossard développe des applications et base de données de logiciels scientifiques. Elle a participé au développement de ChemFlow.



Serge RUDAZ

Docteur en pharmacie. Serge Rudaz développe de nouvelles stratégies analytiques pour les sciences pharmaceutiques. Promu professeur Associé en 2012, il dirige le groupe d'Analyse Biomédicale et Métabolomique (ABM) à l'Université de Genève.



Douglas RUTLEDGE

Professeur de Chimie Analytique à AgroParisTech. Douglas Rutledge enseigne la spectroscopie et la chimiométrie. Il travaille actuellement sur l'Analyse en Composantes Indépendantes et les méthodes multiblocs appliquées à la caractérisation des aliments.



Robert SABATIER

Professeur de Statistique à l'Université Montpellier. Robert Sabatier travaille sur des domaines de recherche concernant : l'analyse multivariée, les multiblocs, les algorithmes génétiques ainsi que le choix des variables.



Cécile TRÉDANIEL

Ingénieur pédagogique à l'INRA de Montpellier. Cécile Trédaniel est spécialisée dans la coordination de projets coopératifs.



Myrtille VIVIEN

Maître de conférences en Statistique à l'Université de Montpellier. Myrtille Vivien travaille sur le développement de méthodes factorielles pour l'analyse et la modélisation des multiblocs.

Partenaires

Ce mooc a été financé par :



Ce travail a bénéficié d'une aide de l'état générée par l'agence nationale de la recherche au titre du programme "Investissement d'avenir", portant la référence ANR-10-LABX-001-01 Labex Agro et coordonnée par Agropolis Fondation.



Conditions d'utilisation

Conditions d'utilisation du contenu du cours

L'utilisateur doit mentionner le nom de l'auteur et peut réutiliser le contenu sous condition de partage sous les mêmes conditions.



Conditions d'utilisation des contenus produits par les participants

Cette licence permet aux autres de remixer, arranger, et adapter votre œuvre à des fins non commerciales tant qu'on vous crédite en citant votre nom et que les nouvelles œuvres sont diffusées selon les mêmes conditions.

- [A propos](#)
- [Aide](#)
- [Contact](#)
- [Conditions générales d'utilisation](#)
- [Charte utilisateurs](#)
- [Politique de confidentialité](#)
- [Mentions légales](#)



POWERED BY
OPENedX