



La chimiométrie pour tous, principes et outils

[www.chemproject.org](http://www.chemproject.org)

ChemProject

 CheMoocs

 ChemFlow

 ChemData

 Ressources



## ChemProject ...

### ... un environnement complet conçu par et pour des chimiométriciens

**ChemProject** est destiné à permettre au plus grand nombre de pratiquer la chimiométrie. Il s'appuie sur 3 piliers, en proposant des connaissances, un outil et une base de données :

#### Un MOOC : CheMoocs



**CheMoocs** vous apportera les connaissances théoriques en chimiométrie. Il est diffusé sur la plate-forme **FUN**. Le programme complet et les dates de la prochaine session sont données [ici](#).

#### Un logiciel : ChemFlow



**ChemFlow** implémente des principales méthodes rencontrées en chimiométrie ; il est gratuit, et accessible depuis un navigateur internet. Pour en savoir plus sur comment accéder à ChemFlow

#### Une base de données : ChemData



**ChemData** contient des données publiques que vous pouvez télécharger et traiter. Pour découvrir les données mises à votre disposition, c'est par [ici](#).

# 2016: CheMooc Saison 1



## CheMoocs - Session 1

Agreenium - 66002

Terminé - nov 10, 2016

20 grains, dont 13 en tronc commun et 7 dans 3 parcours optionnels

1600 participants, 20% sont allés au bout

30 personnes mobilisées, collègues chimimétriciens de toute la France

# 2017: CheMooc-Basic et Advanced




## ChemooCs-basic : les bases de la chimométrie

Agreenium - 66002  
Terminé - déc 05, 2017

Voir les Cours archivés

Votre note finale : **2%**. Note requise pour l'attestation : **50%**.



## ChemooCs-advanced : chimométrie avancée, validation de méthodes

Agreenium - 66002  
Terminé - déc 10, 2017

Voir les Cours archivés

Les derniers détails du cours sont en cours de préparation. Votre note finale sera disponible sous peu.

22 grains, sur deux parcours :  
basics  
advanced

1800 + 1200 participants

30 personnes mobilisées, collègues  
chimométriciens de toute la France  
+  
collègues validation de méthodes

Une application web SAAS dédiée à la chimométrie :  
gratuite, libre, ouverte, accessible à travers un navigateur, sécurisée,  
sans ligne de commande



Tools

- search tools
- Import Data
- Convert data format
- Utils
- Statistics
- Plots
- Calibration/Validation
- Pretreatments
- Exploration
- Regressions
- Clustering
- Discrimination
- Variable selection
- Orthogonal projections
- Calibration transfert
- Unmixing/ Curve Resolution
- Multitable/Multway Analysis

Workflows

- All workflows

ChemFlow

## Chemometrics without programming

### Welcome !


This project was supported by Agropolis Foundation under the reference ID-1401-005 through the "investissements d'avenir" programme (Labex Agro: ANR-10-LABX-0001-01).  
Source code available, more information, more help, visit our website at [chemproject.org](http://chemproject.org)

History

- search datasets
- MCR  
94 shown, 8 deleted  
1.07 MB
- 102: MCR-ALS on d1\_mcr.tabular:optimization results
- 101: MCR-ALS on d1\_mcr.tabular:concentration profiles
- 100: MCR-ALS on d1\_mcr.tabular:spectra profiles
- 99: PCA model:d1\_mcr.tabular
- 98: PCA eigenvalues(%):d1\_mcr.tabular
- 97: PCA explained variance(%):d1\_mcr.tabular
- 96: PCA eigenvectors:d1\_mcr.tabular
- 95: PCA scores:d1\_mcr.tabular
- 94: PCA model:d1\_mcr.tabular
- 93: PCA eigenvalues(%):d1\_mcr.tabular
- 92: PCA explained variance(%):d1\_mcr.tabular

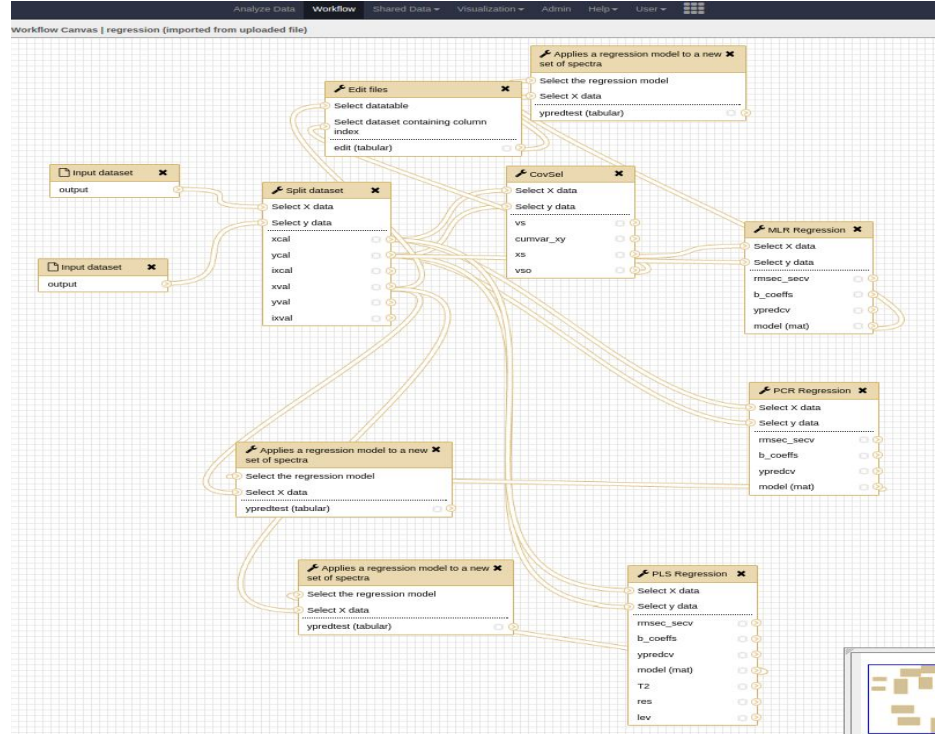
Galaxy is an open, web-based platform for data intensive biomedical research. The Galaxy team is a part of BX at Penn State, and the Biology department at Johns Hopkins University. The Galaxy Project is supported in part by NHGRI, NSF, The Huck Institutes of the Life Sciences, The Institute for CyberScience at Penn State, and Johns Hopkins.

# Les + de ChemFlow

 Création, édition et exécution de *workflows* sous forme graphique

 *Partage* entre utilisateurs

*Science reproductible* :  
Traçabilité et reproductibilité des opérations



# Quelques chiffres sur ChemFlow

---



**GenoToul**

<https://vm-chemflow.toulouse.inra.fr>

600+ comptes créés en 2016

400+ nouveaux comptes en 2017

47 000 requêtes à l'automne 2017

dont 20 000 sur le mois de novembre

une moyenne de 1000 requêtes par jour avec une pointe à 4720.

## 2 objectifs :

- Continuer à animer le Mooc
  - forum, webinaire, tutorat, etc.
  - 1 mois de CDD
- Développer le Mooc
  - Ajout de nouveaux grains
- Développer ChemFlow
  - Structuration logicielle
  - Ajout de nouveaux modules
  - 6 mois de CDD

## 2 objectifs :

- Continuer à animer le Mooc
  - forum, webinaire, tutorat, etc.
  - 1 mois de CDD
- Développer le Mooc
  - Ajout de nouveaux grains
- Développer ChemFlow
  - Structuration logicielle
  - Ajout de nouveaux modules
  - 6 mois de CDD

- > PARAFAC, CCSWA, STATIS
- > ASCA, ANOVA-PCA
- > algorithmes génétiques
- > réseaux de neurones, SVM
- > régressions locales
- > plans d'expérience
- > imagerie hyperspectrale



**Besoins: 10 à 135 K€**

- ❖ 2 CDD
- ❖ tournage des vidéos

## Financement:

- ❖ 2015-2016 : Agropolis Fondation (200 K€)
- ❖ 2017 : INRA (15 K€)
- ❖ 2018 + : Mécénat d'entreprise avec Supagro Fondation

→ **don sans contrepartie**

→ **60% de déduction d'impôt**

---

**Merci de votre attention**