

Spectroscopie optique de A à Z sous R

Bernard Panneton, ing. PhD – pannetonb@gmail.com

Alain Clément, PhD – Chercheur

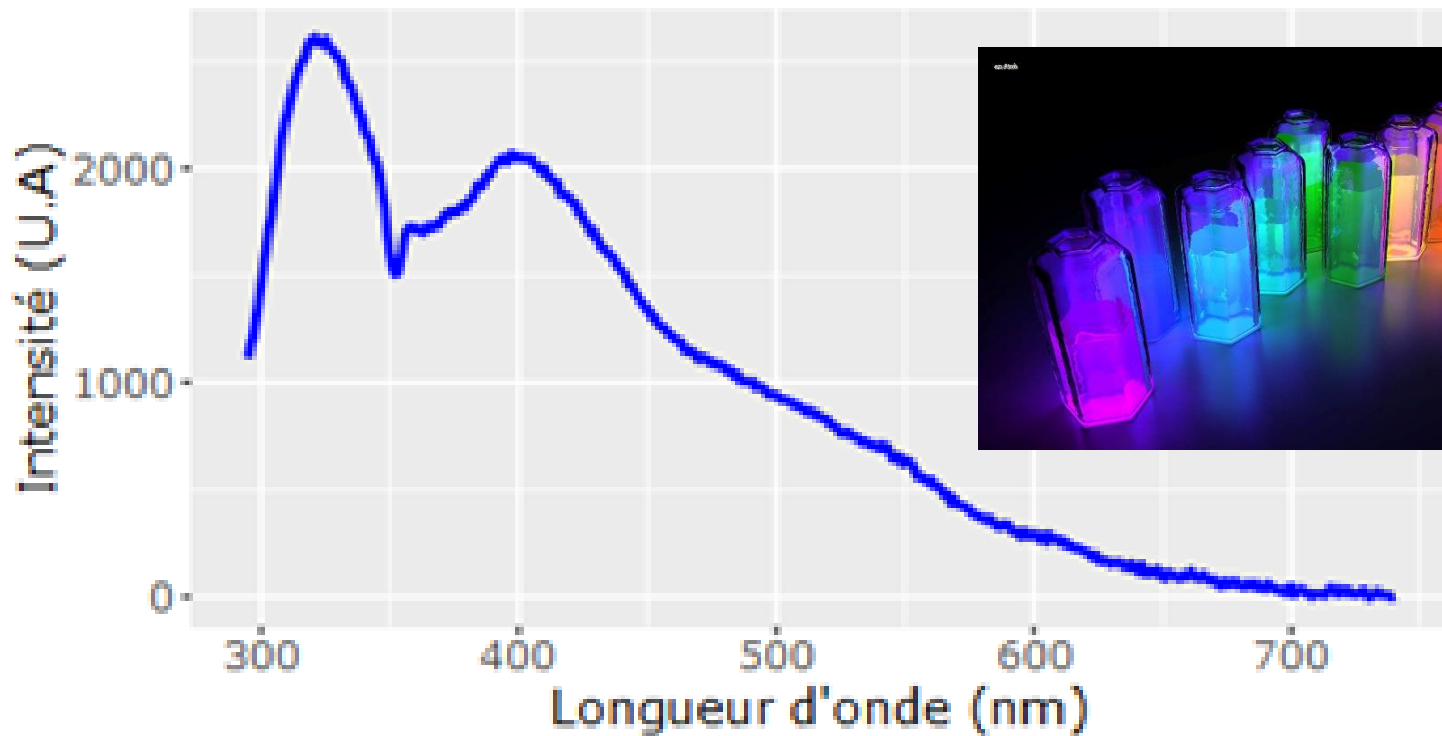
Centre de R&D de St-Hyacinthe, Agriculture et Agroalimentaire Canada
alain.clement@canada.ca

<https://github.com/PannetonB/R-a-Quebec>

La spectroscopie optique

- On envoie de la lumière vers un échantillon. Cette lumière interagit avec la matière et altère la lumière incidente. On récupère la lumière résultante pour mesurer son spectre avec un spectromètre

EX1



Motivation

Nos besoins

- Mettre en place des **pipelines d'acquisition élaborés**:
 - Plusieurs types de spectre (transmittance, fluorescence, Raman...)
 - Plusieurs spectromètres
 - Plusieurs sources lumineuses
 - Automatisation du positionnement des échantillons
- **Éliminer la manipulation directe des données brutes**
 - « Copier – Coller » dans un chiffrier est le meilleur chemin pour générer des erreurs!
- **Environnement flexible de traitement des données** et pour le développement de modèles.
- Rendre la **chaîne acquisition – validation – traitement accessible** à des utilisateurs sans connaissance préalable de la spectroscopie (application sur le terrain)

Motivation

Limitations des solutions commerciales

- **Acquisition de données**

- Manque de souplesse pour l'acquisition
- Structure et format de stockage des données uniques au logiciel
 - Souvent 1 spectre par fichier!
- Difficile de coordonner l'acquisition de spectres sur plus d'un instrument et plus d'une source lumineuse.

- **Traitement des données**

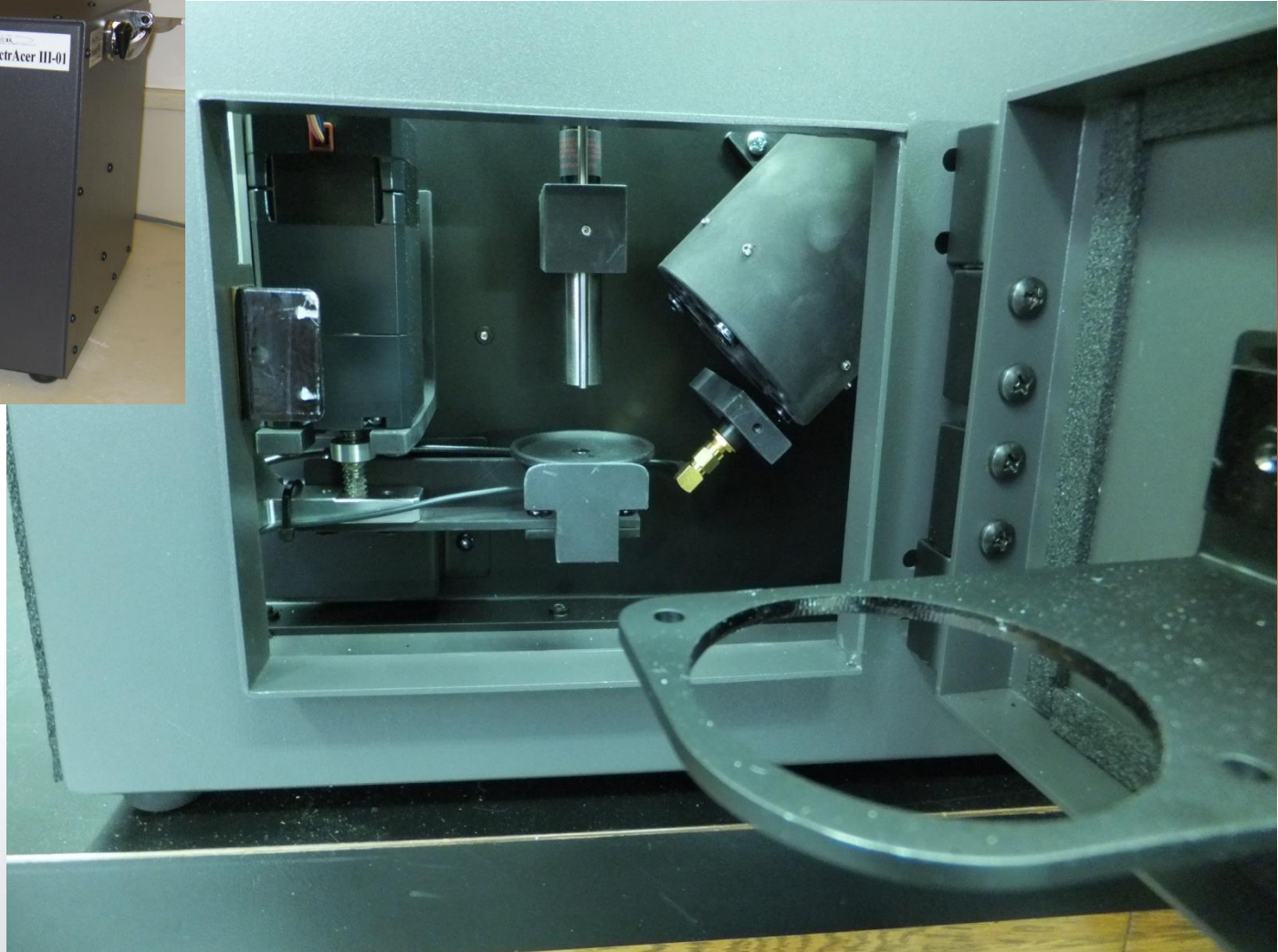
- Excellents logiciels commerciaux disponibles
- Coûteux
- Généraliste donc plus difficile de créer des pipelines de travail (beaucoup de clics!)
- Importation des données pas toujours facile

Pourquoi R

- Excellent environnement pour l'analyse des données
 - python est là mais je connaissais R...
- Aucun frais de déploiement sur autant de stations de travail que nécessaire

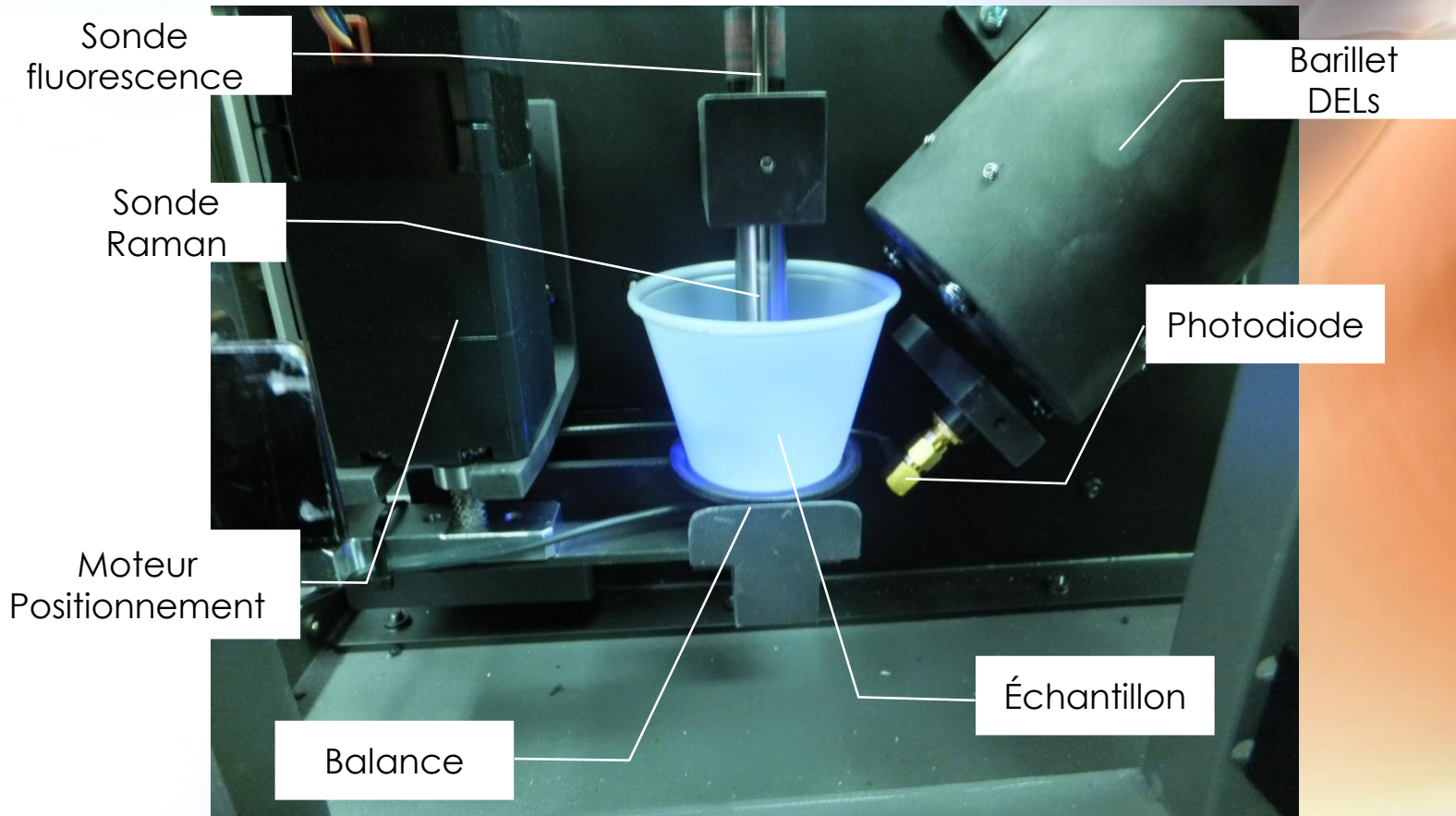
Exemple d'application

SpectrAcer III - Inspection du sirop d'érable



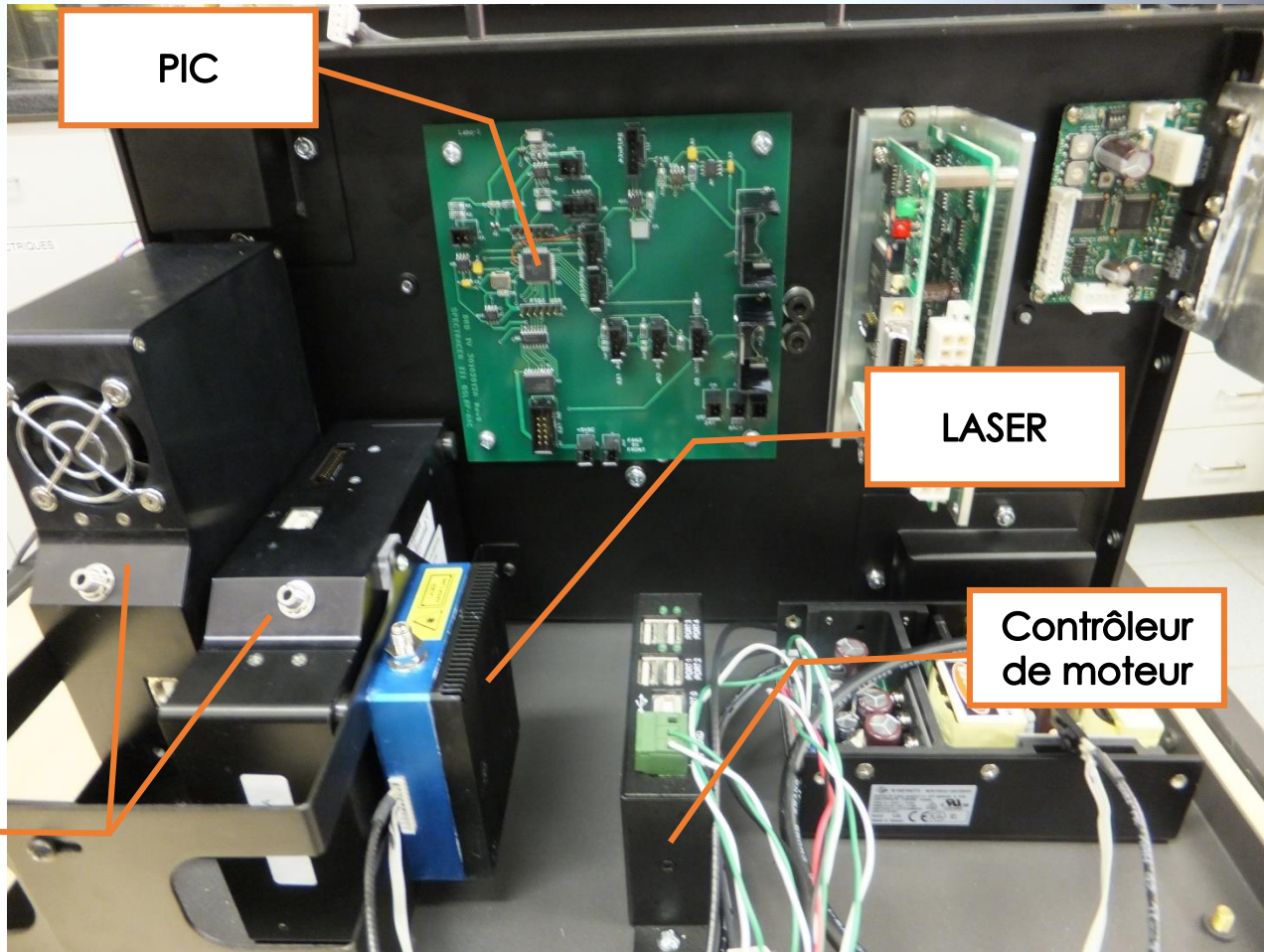
SpectrAcer III

Inspection du sirop d'érable



SpectrAcer III

Inspection du sirop d'érable



SpectrAcer III – Interface usager

SpectrAce_R_III 0.10 - B. Panneton - Mars 2019

Messages à l'utilisateur
Analyse complétée
Échantillon conforme

Identifications
Usager: Bernard Panneton
Site: CRDA

Répertoire pour les données

NON DÉFINI!

ID d'échantillon
1826-02582

Démarrer l'analyse

Températures
Détecteur Raman: -10°C
Boîtier: 24.5°C

Console
SpectrAcer III
Fri May 03 14:49:31 2019
Démarrage
Échantillon: 1826-02582

Console vers fichier Nom de fichier

Fichier de sortie pour la console
D:/Bernard/Documents/Consultant/ACER_2019/Progs/Console_03_05_2019_14h49.txt

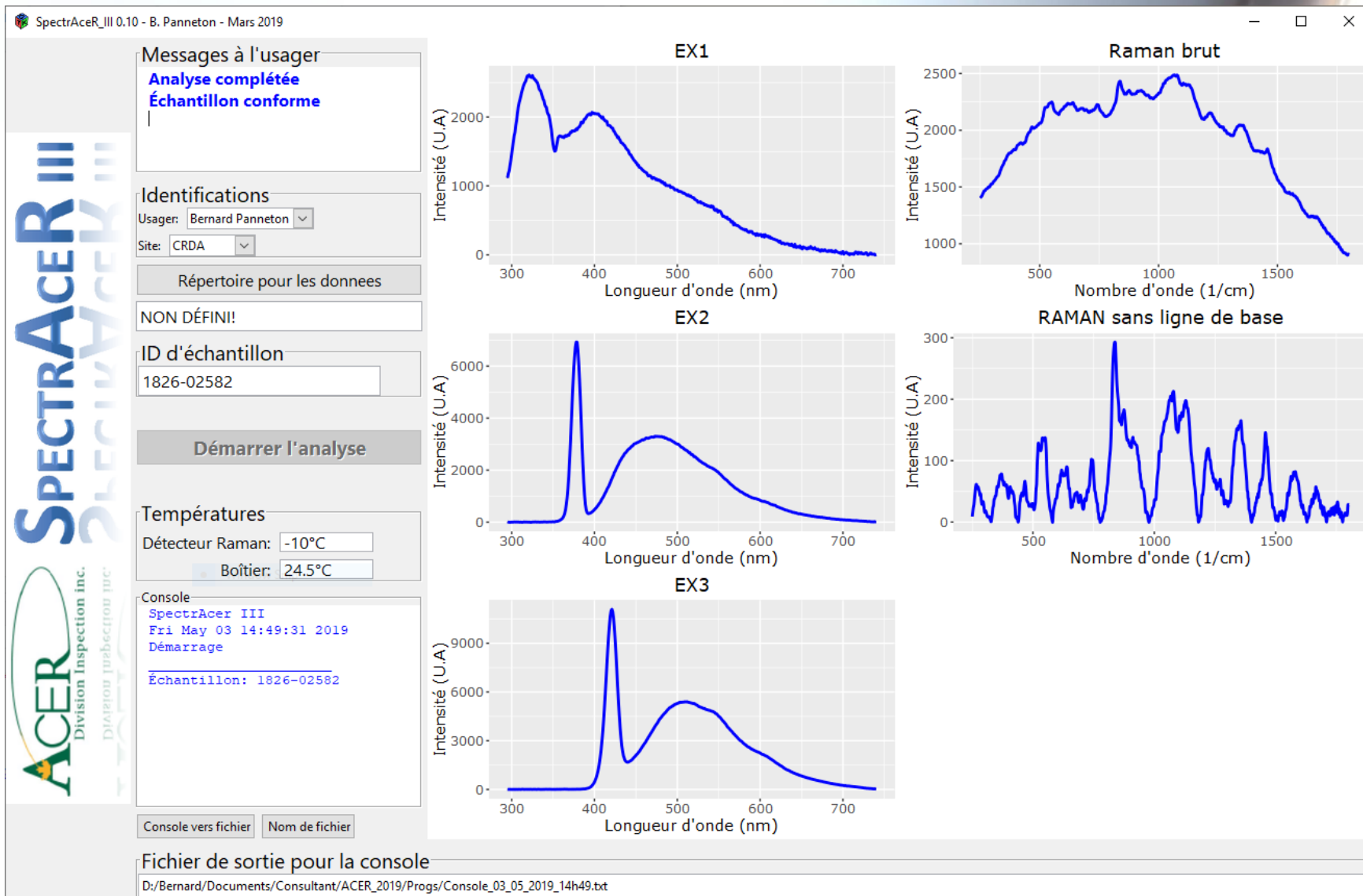
EX1
Intensité (U.A.) vs Longueur d'onde (nm)

Raman brut
Intensité (U.A.) vs Nombre d'onde (1/cm)

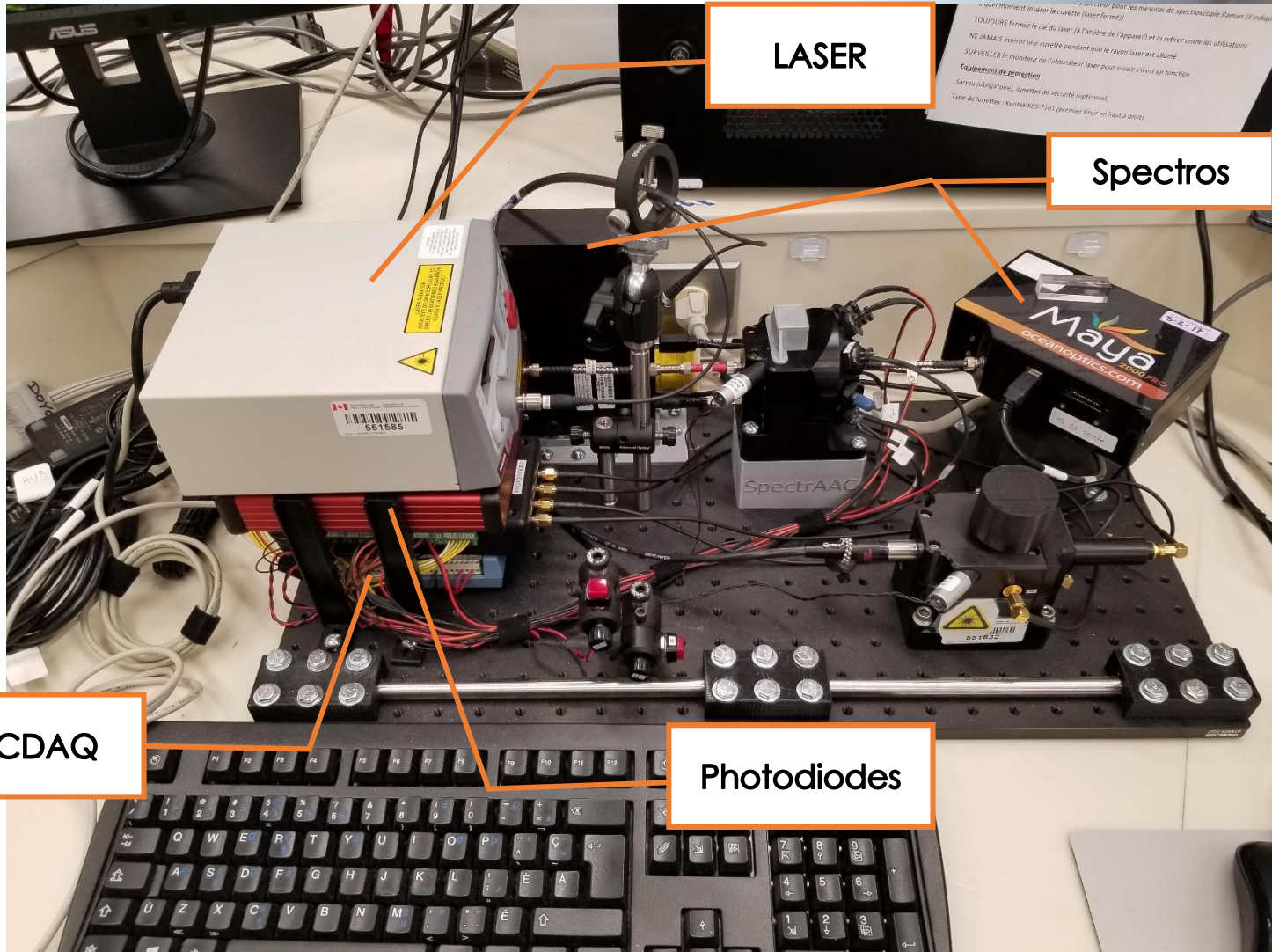
EX2
Intensité (U.A.) vs Longueur d'onde (nm)

RAMAN sans ligne de base
Intensité (U.A.) vs Nombre d'onde (1/cm)

EX3
Intensité (U.A.) vs Longueur d'onde (nm)

The screenshot displays the SpectrAcer III software interface. On the left, a sidebar contains the company logo and navigation options. The main area is divided into several sections: a message box indicating a successful analysis, an identification section with user and site information, a 'Start Analysis' button, a temperature control section, and a console window showing system logs and the sample ID. On the right, three Raman spectra are displayed: EX1 (Intensity vs Wavelength), Raman brut (Intensity vs Wavenumber), EX2 (Intensity vs Wavelength), and RAMAN sans ligne de base (Intensity vs Wavenumber). EX3 (Intensity vs Wavelength) is also shown at the bottom right.

Exemple d'application - SpectrAAC



PolySpecteur – Interface usager

The screenshot displays the RStudio interface for the PolySpecteur application. The console on the left shows the following text:

```
Acquisition de fluorescence pour la DEL 1.  
Acquisition d'un noir pour la DEL 2.  
Acquisition de fluorescence pour la DEL 2.  
Acquisition d'un noir pour la DEL 3.  
Acquisition de fluorescence pour la DEL 3.  
Acquisition d'un noir pour la DEL 4.  
Acquisition de fluorescence pour la DEL 4.  
Acquisition d'un noir pour la DEL 5.  
Acquisition de fluorescence pour la DEL 5.  
Acquisition d'un noir pour la DEL 6.  
Acquisition de fluorescence pour la DEL 6.  
Acquisition d'un noir pour la DEL 7.  
Acquisition de fluorescence pour la DEL 7.  
Facteur de correction: 2.35e+07  
Facteur de correction: 6.75e+06  
Facteur de correction: 3.45e+06  
Facteur de correction: 2.31e+06  
Facteur de correction: 1.83e+06  
Facteur de correction: 5.01e+06  
Facteur de correction: 2.05e+06  
Appuyer sur Retour/Enter pour continuer.
```

Below this, there are instructions for editing parameters and choosing an instrument:

```
Éditer les (P)aramètres, (N)ouveau fichier de paramètres ou (C)ontinuer (P/  
Choisir un instrument par son numéro:  
1: Instrument_1  
2: Instrument_2  
3: SAAC2_HR01  
4: SAAC2_HR02  
5: SAAC2_HS01  
6: SAAC2_HS02  
5
```

Next, instructions for sample placement and acquisition parameters:

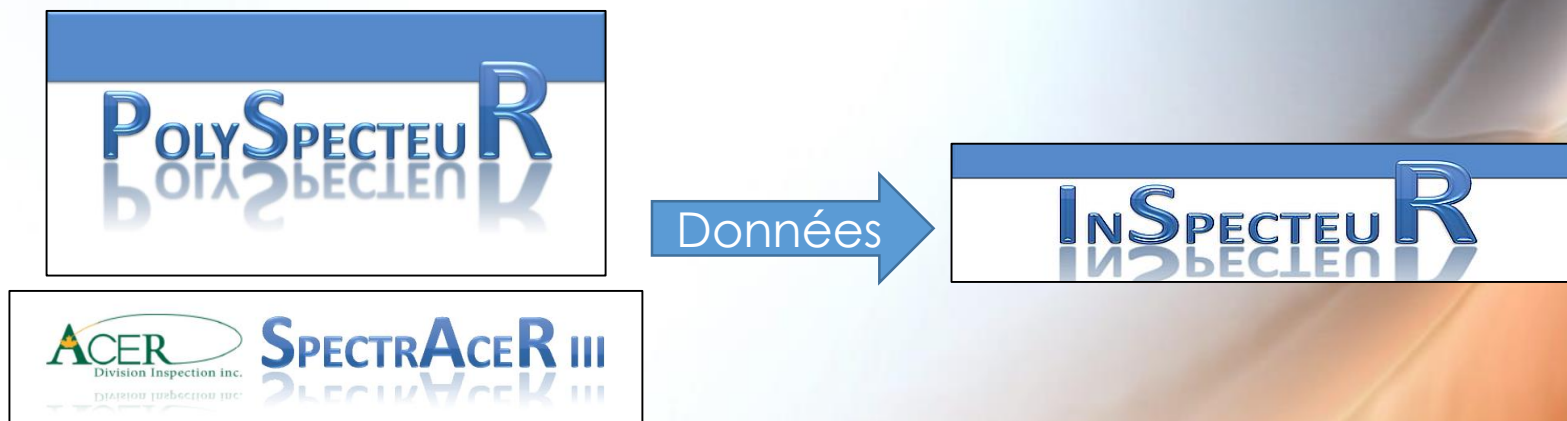
```
Placer l'échantillon 1 à la position 1  
Délai pour noir: 2.712027  
Acquisition d'un noir.  
Acquisition de fluorescence à 444 nm.  
Acquisition d'un noir.  
Acquisition de fluorescence à 420 nm.  
Acquisition d'un noir.  
Acquisition de fluorescence à 394 nm.  
Acquisition d'un noir.  
Acquisition de fluorescence à 361 nm.  
Acquisition d'un noir.  
Acquisition de fluorescence à 344 nm.  
Acquisition d'un noir.  
Acquisition de fluorescence à 321 nm.  
Acquisition d'un noir.  
Acquisition de fluorescence à 275 nm.
```

Finally, the instruction: "Retirer l'échantillon 1 puis appuyer sur Enter."

The plot viewer on the right displays seven fluorescence spectra, each with a title and a y-axis scale:

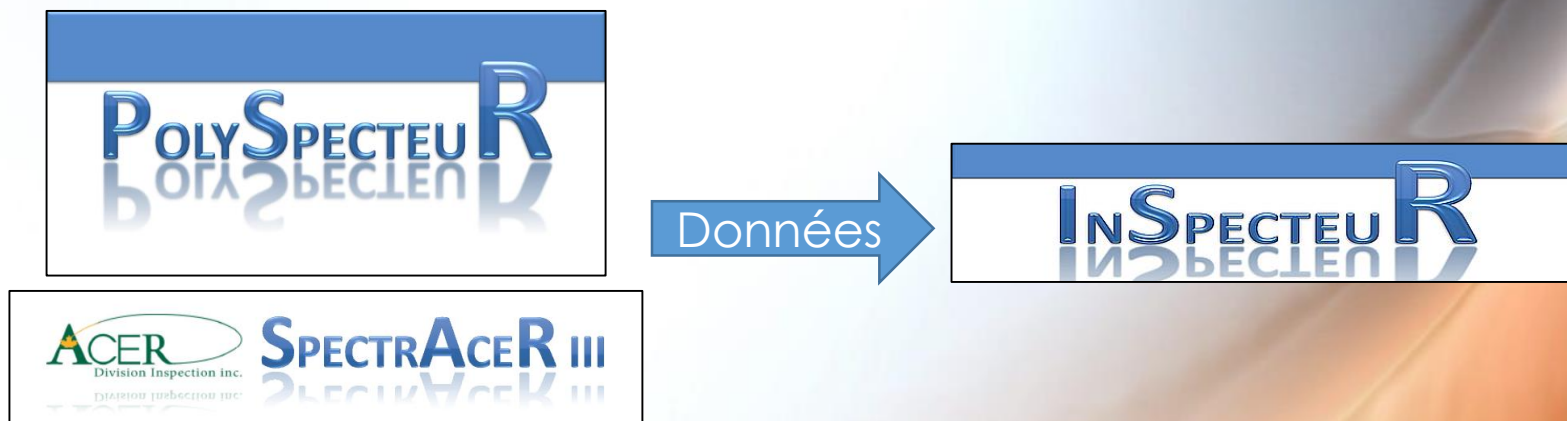
- Échantillon 1 à 444 - Rep = 1 (y-axis: 0.00 to 0.06)
- Échantillon 1 à 420 - Rep = 1 (y-axis: 0.00 to 0.04)
- Échantillon 1 à 394 - Rep = 1 (y-axis: 0.00 to 0.12)
- Échantillon 1 à 361 - Rep = 1 (y-axis: 0.000 to 0.010)
- Échantillon 1 à 344 - Rep = 1 (y-axis: 0.000 to 0.010)
- Échantillon 1 à 321 - Rep = 1 (y-axis: 0.0000 to 0.0015)
- Échantillon 1 à 275 - Rep = 1 (y-axis: -1e-04 to 2e-04)

Écosystème de spectroscopie



- Interface usager
 - Rstudio
 - GUI sous gWidgets2 et RGtk2
- OOInterface.r
 - Java library
 - Package rJava
- MCDAQ.r
 - A C++ dll
 - .C du package base
- RS232
 - Commande de moteurs
 - Commande d'un laser
 - Package serial ou tcltk
- GUI
 - Packages gWidgets2 et RGtk2
- Packages de chimiométrie
 - ChemoSpec,
 - chemometrics,
 - prospectr,
 - caret,
 - stats

Écosystème de spectroscopie



- Interface usager
 - Rstudio
 - GUI sous gWidgets2 et RGtk2
- OOInterface.r
 - Java library
 - Package rJava
- MCDAQ.r
 - A C++ dll
 - .C du package base
- RS232
 - Commande de moteurs
 - Commande d'un laser
 - Package serial ou tcltk
- GUI
 - Packages gWidgets2 et RGtk2
- Packages de chimiométrie
 - ChemoSpec,
 - chemometrics,
 - prospectr,
 - caret,
 - stats

rJava

JAVA – Méthodes de la classe Wrapper

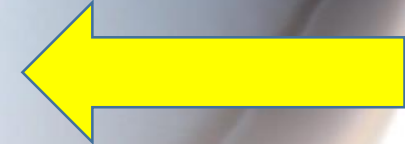
openAllSpectrometers

```
public int openAllSpectrometers()
```

Returns:

int the number of spectrometers found.

Returns -1 if an I/O error occurred. In this case, call `getLastException()` to determine the nature of the error.



Accéder à Java depuis R

```
library(rJava)
```

Initialiser un objet de la classe Wrapper

```
ooi_home=Sys.getenv("OOI_HOME")  
mypath=file.path(ooi_home,"OmniDriver.jar")  
.jinit()  
.jaddClassPath(mypath)  
mywrap<-.jnew("com.oceanoptics.omnidriver.api.wrapper.wrapper")
```

Utiliser les méthodes de la classe Wrapper

```
nbspectro <- mywrap$openAllSpectrometers()  
xaxis=mywrap$getwavelengths(as.integer(1:nbspectro$number))
```

rJava

JAVA – Méthodes de la classe Wrapper

openAllSpectrometers

```
public int openAllSpectrometers()
```

Returns:

int the number of spectrometers found.

Returns -1 if an I/O error occurred. In this case, call `getLastException()` to determine the nature of the error.

Accéder à Java depuis R

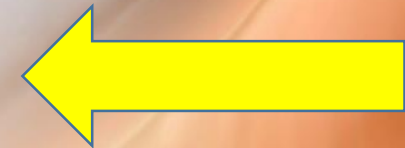
```
library(rJava)
```

Initialiser un objet de la classe Wrapper

```
ooi_home=Sys.getenv("OOI_HOME")  
mypath=file.path(ooi_home,"OmniDriver.jar")  
.jinit()  
.jaddClassPath(mypath)  
mywrap<- .jnew("com.oceanoptics.omnidriver.api.wrapper.wrapper")
```

Utiliser les méthodes de la classe Wrapper

```
nbspectro <- mywrap$openAllSpectrometers()  
xaxis=mywrap$getwavelengths(as.integer(1:nbspectro$number))
```



rJava

JAVA – Méthodes de la classe Wrapper

openAllSpectrometers

```
public int openAllSpectrometers()
```

Returns:

int the number of spectrometers found.

Returns -1 if an I/O error occurred. In this case, call `getLastException()` to determine the nature of the error.

Accéder à Java depuis R

```
library(rJava)
```

Initialiser un objet de la classe Wrapper

```
ooi_home=Sys.getenv("OOI_HOME")  
mypath=file.path(ooi_home,"OmniDriver.jar")  
.jinit()  
.jaddClassPath(mypath)  
mywrap<- .jnew("com.oceanoptics.omnidriver.api.wrapper.wrapper")
```



Utiliser les méthodes de la classe Wrapper

```
nbspectro <- mywrap$openAllSpectrometers()  
xaxis=mywrap$getwavelengths(as.integer(1:nbspectro$number))
```


rJava

JAVA – Méthodes de la classe Wrapper

openAllSpectrometers

```
public int openAllSpectrometers()
```

Returns:

int the number of spectrometers found.

Returns -1 if an I/O error occurred. In this case, call `getLastException()` to determine the nature of the error.

Accéder à Java depuis R

```
library(rJava)
```

Initialiser un objet de la classe Wrapper

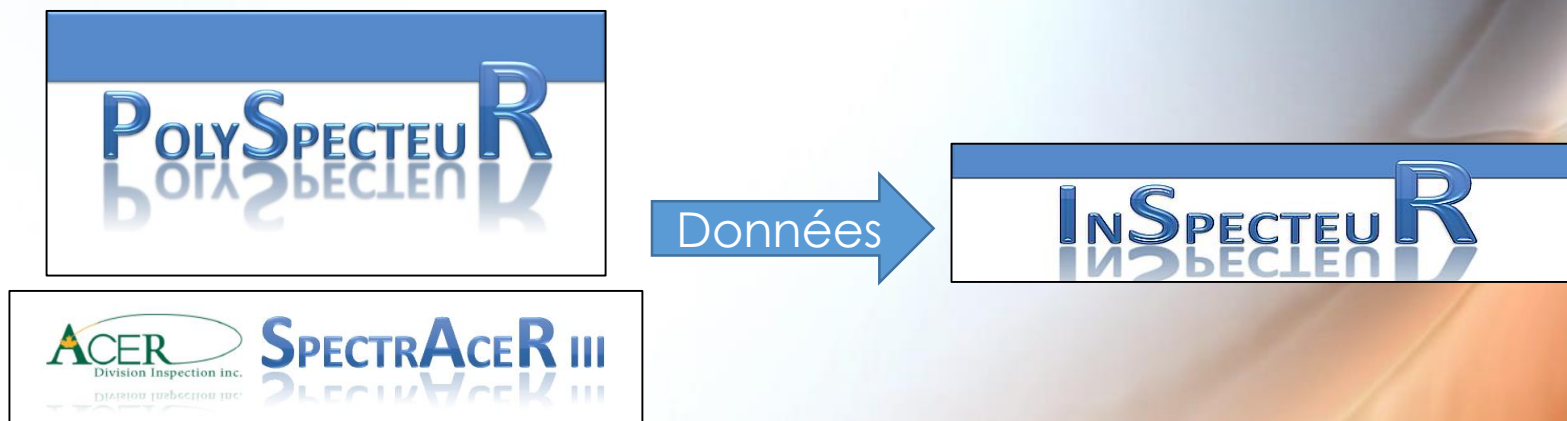
```
ooi_home=Sys.getenv("OOI_HOME")  
mypath=file.path(ooi_home,"OmniDriver.jar")  
.jinit()  
.jaddClassPath(mypath)  
mywrap<-jnew("com.oceanoptics.omnidriver.api.wrapper.wrapper")
```

Utiliser les méthodes de la classe Wrapper

```
nbspectro <- mywrap$openAllSpectrometers()  
xaxis=mywrap$getwavelengths(as.integer(1:nbspectro$number))
```



Écosystème de spectroscopie



- Interface usager
 - Rstudio
 - GUI sous gWidgets2 et RGtk2
- OOInterface.r
 - Java library
 - Package rJava
- MCDAQ.r
 - A C++ dll
 - .C du package base
- RS232
 - Commande de moteurs
 - Commande d'un laser
 - Package serial ou tcltk
- GUI
 - Packages gWidgets2 et RGtk2
- Packages de chimiométrie
 - ChemoSpec,
 - chemometrics,
 - prospectr,
 - caret,
 - stats

Interface .C (base package)

.C() is simpler than .Call() and can be useful if you already have standard C code.¹

- **Fonction de la librairie**

- `int cbDConfigBit(int BoardNum, int PortType, int BitNum, int Direction)`

- **Fonction d'interface cbw64.dll -> MC_cbw64_CWrapper.c**

- `void BP_cbDConfigBit(int *BoardNum, int *PortType, int *BitNum, int *Direction, int *out)`
// Direction = 1 pour out; = 2 pour in
{
 int y;
 y=cbDConfigBit(*BoardNum, *PortType, *BitNum, *Direction);
 *out=y;
}

- **Compiler**

- `system("R CMD SHLIB MC_cbw64_CWrapper.c -L. cbw64.dll")`

- **Librairie R**

- `dyn.load(« ...//Progs//C//MC_cbw64_CWrapper.dll »)`
 - `Config_IO_Bit<-function(bnum, type, bit, direct){
 err=.C("BP_cbDConfigBit",BoardNum=as.integer(bnum), PortType=as.integer(type),
 BitNum = as.integer(bit), Direction=as.integer(direct), out=as.integer(0))$out
 if (err!=0) return(paste("Échec de la configuration du bit ", as.character(bit),
 " sur le module ", as.character(bnum),sep=""))
 else return("O.K")
}`

¹<http://r-pkgs.had.co.nz/src.html>

Interface .C (base package)

- **Fonction de la librairie**

- `int cbDConfigBit(int BoardNum, int PortType, int BitNum, int Direction)`

- **Fonction d'interface cbw64.dll -> MC_cbw64_CWrapper.c**

- `void BP_cbDConfigBit(int *BoardNum, int *PortType, int *BitNum, int *Direction, int *out)`
// Direction = 1 pour out; = 2 pour in
{
 int y;
 y=cbDConfigBit(*BoardNum, *PortType, *BitNum, *Direction);
 *out=y;
}

- **Compiler**

- `system("R CMD SHLIB MC_cbw64_CWrapper.c -L. cbw64.dll")`

- **Librairie R**

- `dyn.load(« ...//Progs//C//MC_cbw64_CWrapper.dll »)`
- `Config_IO_Bit<-function(bnum, type, bit, direct){
 err=.C("BP_cbDConfigBit",BoardNum=as.integer(bnum), PortType=as.integer(type),
 BitNum = as.integer(bit), Direction=as.integer(direct), out=as.integer(0))$out
 if (err!=0) return(paste("Échec de la configuration du bit ", as.character(bit),
 " sur le module ", as.character(bnum),sep=""))
 else return("O.K")
}`

Interface .C (base package)

- **Fonction de la librairie**

- `int cbDConfigBit(int BoardNum, int PortType, int BitNum, int Direction)`

- **Fonction d'interface cbw64.dll -> MC_cbw64_CWrapper.c**

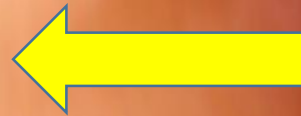
- `void BP_cbDConfigBit(int *BoardNum, int *PortType, int *BitNum, int *Direction, int *out)`
// Direction = 1 pour out; = 2 pour in
{
 int y;
 y=cbDConfigBit(*BoardNum, *PortType, *BitNum, *Direction);
 *out=y;
}

- **Compiler**

- `system("R CMD SHLIB MC_cbw64_CWrapper.c -L. cbw64.dll")`

- **Librairie R**

- `dyn.load(« ...//Progs//C//MC_cbw64_CWrapper.dll »)`
- `Config_IO_Bit<-function(bnum, type, bit, direct){
 err=.C("BP_cbDConfigBit",BoardNum=as.integer(bnum), PortType=as.integer(type),
 BitNum = as.integer(bit), Direction=as.integer(direct), out=as.integer(0))$out
 if (err!=0) return(paste("Échec de la configuration du bit ", as.character(bit),
 " sur le module ", as.character(bnum),sep=""))
 else return("O.K")
}`



Interface .C (base package)

- **Fonction de la librairie**

- `int cbDConfigBit(int BoardNum, int PortType, int BitNum, int Direction)`

- **Fonction d'interface cbw64.dll -> MC_cbw64_CWrapper.c**

- `void BP_cbDConfigBit(int *BoardNum, int *PortType, int *BitNum, int *Direction, int *out)`
// Direction = 1 pour out; = 2 pour in
{
 int y;
 y=cbDConfigBit(*BoardNum, *PortType, *BitNum, *Direction);
 *out=y;
}

- **Compiler**

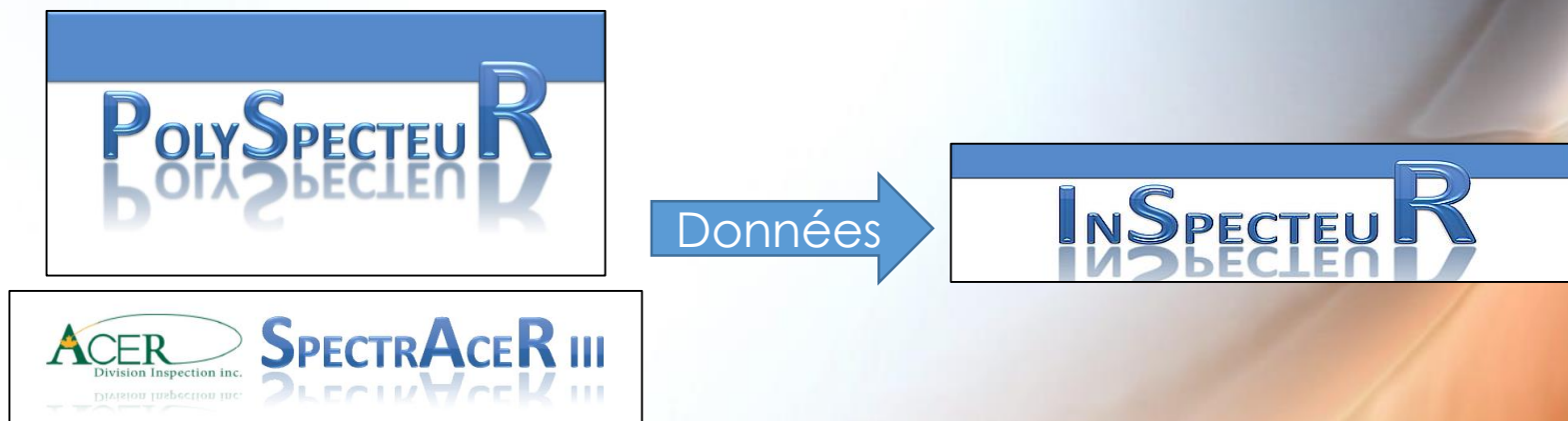
- `system("R CMD SHLIB MC_cbw64_CWrapper.c -L. cbw64.dll")`

- **Librairie R**

- `dyn.load(« ...//Progs//C//MC_cbw64_CWrapper.dll »)`
- `Config_IO_Bit<-function(bnum, type, bit, direct){
 err=.C("BP_cbDConfigBit",BoardNum=as.integer(bnum), PortType=as.integer(type),
 BitNum = as.integer(bit), Direction=as.integer(direct), out=as.integer(0))$out
 if (err!=0) return(paste("Échec de la configuration du bit ", as.character(bit),
 " sur le module ", as.character(bnum),sep=""))
 else return("O.K")
}`



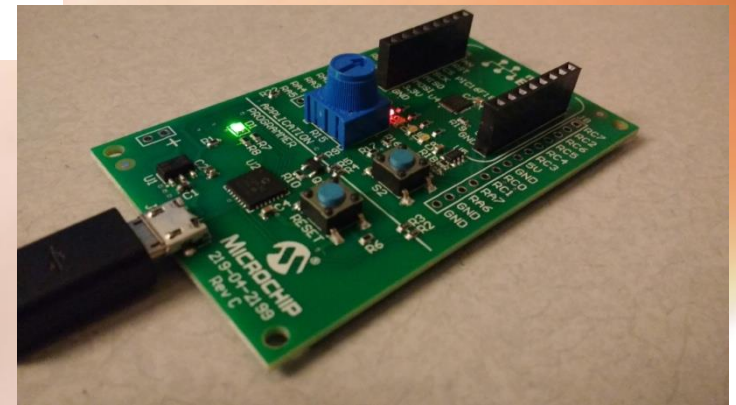
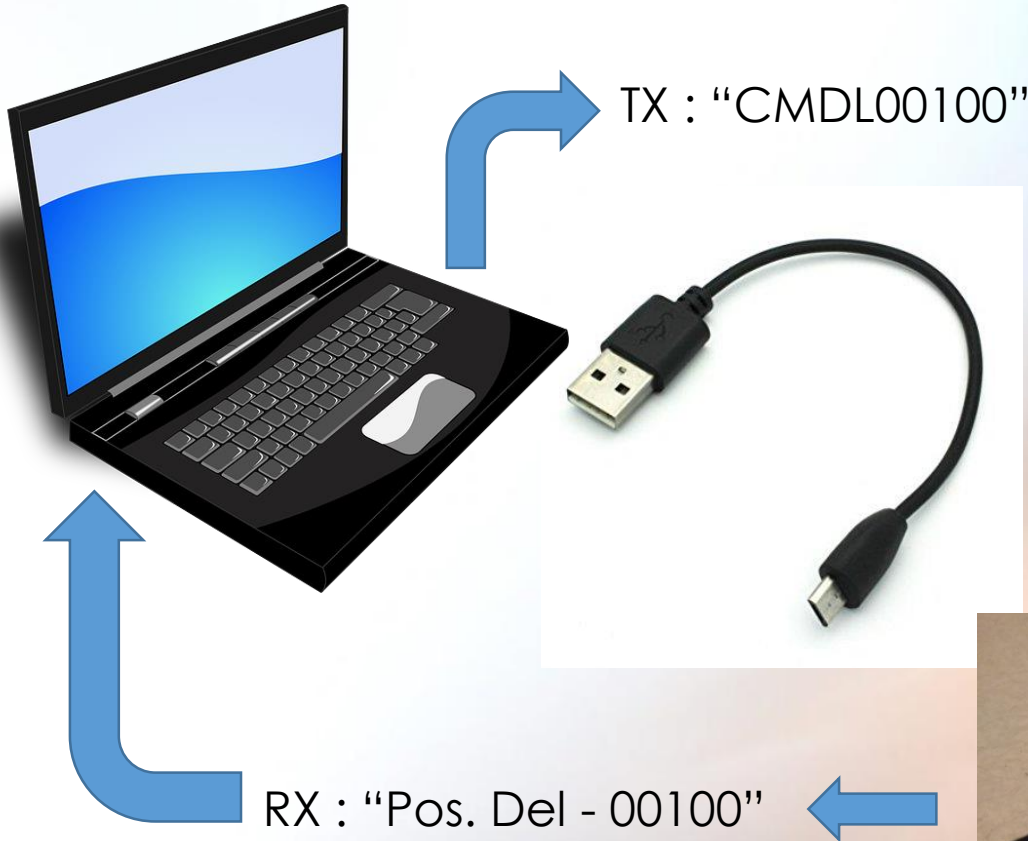
Écosystème de spectroscopie



- Interface usager
 - Rstudio
 - GUI sous gWidgets2 et RGtk2
- OOInterface.r
 - Java library
 - Package rJava
- MCDAQ.r
 - A C++ dll
 - .C du package base
- RS232
 - Commande de moteurs
 - Commande d'un laser
 - Package serial ou tcltk
- GUI
 - Packages gWidgets2 et RGtk2
- Packages de chimiométrie
 - ChemoSpec,
 - chemometrics,
 - prospectr,
 - caret,
 - stats

Communication série – RS232

Package serial



Voir <https://fr.wikipedia.org/wiki/RS-232>
pour le paramétrage.

Communication série – RS232

Package serial

```
baud_rate = c(9600, 4800, 14400) #valeurs possibles de baudrate.
tout=2 #toute les commandes devraient s'exécuter en dedans de 2 secondes

#obtenir une liste des ports
listports=listPorts()

#Avec deux boucles (ports com puis baudrate), on ouvre un port et on teste des
#baudrates jusqu'à ce qu'on obtienne une réponse 'PIC' à la commande
#'C$ID00000'. On balaye les ports dans l'ordre inverse de 'listports' car
#souvent le bon port est le dernier attribué pour passer le caractère '$' dans
#la commande: '\\x24' Le double \ est nécessaire pour éviter que R interprète
#'\x24' comme '$' avant de passer la commande.
commande='C\\x24ID00000' #

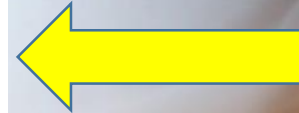
for (cp in rev(listports)){
  nom_port<-"SAIII_PIC" #nom
  # on teste les baudrate
  for (br in baud_rate){

    #Configuration du port
    le_com <- serialConnection(name=nom_port, port=cp,
                              mode=paste(br,',n,8,1',sep=''),
                              newline = TRUE,
                              translation = 'crlf',
                              handshake='none')

    open(le_com)
    sys.sleep(0.1)

#Envoie la commande
#Besoin d'ajouter crlf?
dum <- write.serialConnection(le_com,commande)

#Read
le_t=0
dum=NULL
while (is.null(dum) & le_t<tout){
  dum <- read.serialConnection(le_com)
  if (debug_me) cat('Réponse à ',commande,': ',dum,'\n')
  sys.sleep(0.1)
  le_t=le_t+0.1
}
}
```



Communication série – RS232

Package serial

```
baud_rate = c(9600, 4800, 14400) #valeurs possibles de baudrate.
tout=2 #toute les commandes devraient s'exécuter en dedans de 2 secondes

#obtenir une liste des ports
listports=listPorts()

#Avec deux boucles (ports com puis baudrate), on ouvre un port et on teste des
#baudrates jusqu'à ce qu'on obtienne une réponse 'PIC' à la commande
#'C$ID00000'. On balaye les ports dans l'ordre inverse de 'listports' car
#souvent le bon port est le dernier attribué pour passer le caractère '$' dans
#la commande: '\\x24' Le double \ est nécessaire pour éviter que R interprète
#'\x24' comme '$' avant de passer la commande.
commande='C\\x24ID00000' #

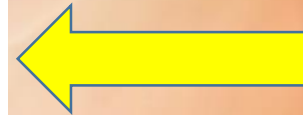
for (cp in rev(listports)){
  nom_port<-"SAIII_PIC" #nom
  # on teste les baudrate
  for (br in baud_rate){

    #Configuration du port
    le_com <- serialConnection(name=nom_port, port=cp,
                              mode=paste(br,',n,8,1',sep=''),
                              newline = TRUE,
                              translation = 'crlf',
                              handshake='none')

    open(le_com)
    sys.sleep(0.1)

#Envoie la commande
#Besoin d'ajouter crlf?
dum <- write.serialConnection(le_com,commande)

#Read
le_t=0
dum=NULL
while (is.null(dum) & le_t<tout){
  dum <- read.serialConnection(le_com)
  if (debug_me) cat('Réponse à ',commande,': ',dum,'\n')
  sys.sleep(0.1)
  le_t=le_t+0.1
}
```



Communication série – RS232

Package serial

```
baud_rate = c(9600, 4800, 14400) #valeurs possibles de baudrate.
tout=2 #toute les commandes devraient s'exécuter en dedans de 2 secondes

#obtenir une liste des ports
listports=listPorts()

#Avec deux boucles (ports com puis baudrate), on ouvre un port et on teste des
#baudrates jusqu'à ce qu'on obtienne une réponse 'PIC' à la commande
#'C$ID00000'. On balaye les ports dans l'ordre inverse de 'listports' car
#souvent le bon port est le dernier attribué pour passer le caractère '$' dans
#la commande: '\\x24' Le double \ est nécessaire pour éviter que R interprète
#'\x24' comme '$' avant de passer la commande.
commande='C\\x24ID00000' #

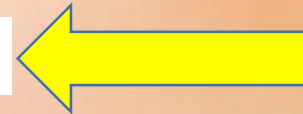
for (cp in rev(listports)){
  nom_port<-"SAIII_PIC" #nom
  # on teste les baudrate
  for (br in baud_rate){

    #Configuration du port
    le_com <- serialConnection(name=nom_port, port=cp,
                              mode=paste(br,',n,8,1',sep=''),
                              newline = TRUE,
                              translation = 'crlf',
                              handshake='none')

    open(le_com)
    sys.sleep(0.1)

#Envoie la commande
#Besoin d'ajouter crlf?
dum <- write.serialConnection(le_com,commande)

#Read
le_t=0
dum=NULL
while (is.null(dum) & le_t<tout){
  dum <- read.serialConnection(le_com)
  if (debug_me) cat('Réponse à ',commande,': ',dum,'\n')
  sys.sleep(0.1)
  le_t=le_t+0.1
}
```



Communication série – RS232

Package serial

```
baud_rate = c(9600, 4800, 14400) #valeurs possibles de baudrate.
tout=2 #toute les commandes devraient s'exécuter en dedans de 2 secondes

#obtenir une liste des ports
listports=listPorts()

#Avec deux boucles (ports com puis baudrate), on ouvre un port et on teste des
#baudrates jusqu'à ce qu'on obtienne une réponse 'PIC' à la commande
#'C$ID00000'. On balaye les ports dans l'ordre inverse de 'listports' car
#souvent le bon port est le dernier attribué pour passer le caractère '$' dans
#la commande: '\\x24' Le double \ est nécessaire pour éviter que R interprète
#'\x24' comme '$' avant de passer la commande.
commande='C\\x24ID00000' #

for (cp in rev(listports)){
  nom_port<-"SAIII_PIC" #nom
  # on teste les baudrate
  for (br in baud_rate){

    #Configuration du port
    le_com <- serialConnection(name=nom_port, port=cp,
                              mode=paste(br,',n,8,1',sep=''),
                              newline = TRUE,
                              translation = 'crlf',
                              handshake='none')

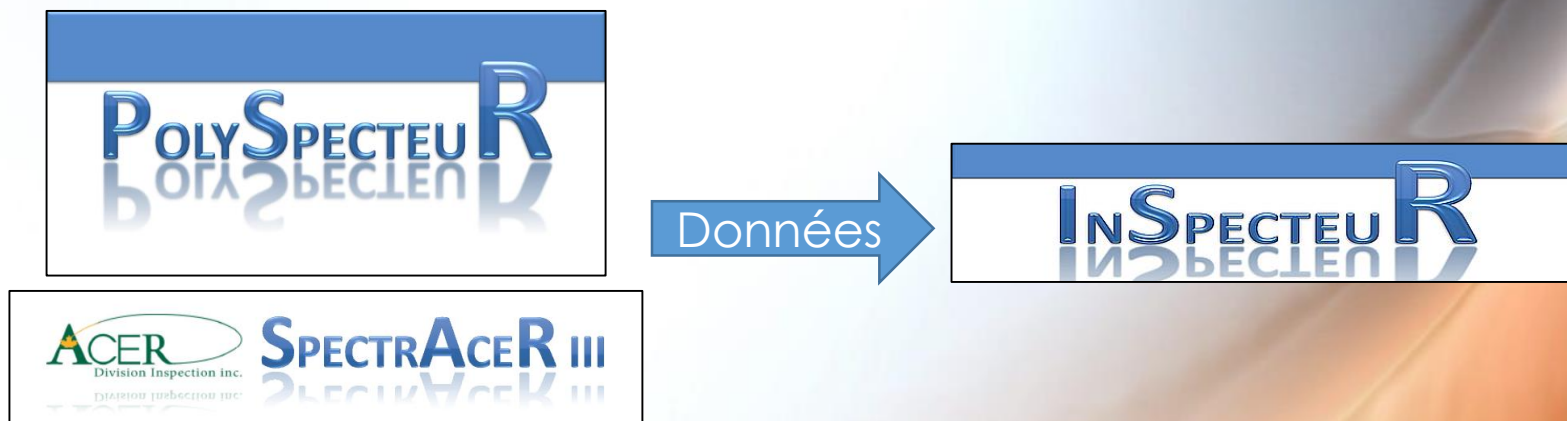
    open(le_com)
    sys.sleep(0.1)

#Envoie la commande
#Besoin d'ajouter crlf?
dum <- write.serialConnection(le_com,commande)

#Read
le_t=0
dum=NULL
while (is.null(dum) & le_t<tout){
  dum <- read.serialConnection(le_com)
  if (debug_me) cat('Réponse à ',commande,': ',dum,'\n')
  sys.sleep(0.1)
  le_t=le_t+0.1
}
}
```



Écosystème de spectroscopie



- Interface usager
 - Rstudio
 - GUI sous gWidgets2 et RGtk2
- OOInterface.r
 - Java library
 - Package rJava
- MCDAQ.r
 - A C++ dll
 - .C du package base
- RS232
 - Commande de moteurs
 - Commande d'un laser
 - Package serial ou tcltk

- GUI
 - Packages gWidgets2 et RGtk2
- Packages de chimiométrie
 - ChemoSpec,
 - chemometrics,
 - prospectr,
 - caret,
 - stats

Data selection Apply models PrePro PCA PLSDA PLS

D:\Bernard\mesProgs\R\InSpectoR\Data\Insectes_MAF_Avril2018\Y_Test_Maf.txt

OPEN a Y file

Spectral data files - Select

X Data Files

EX277_Test_Maf_B.txt

EX277_Test_Maf_I.txt

EX297_Test_Maf_B.txt

EX297_Test_Maf_I.txt

EX321_Test_Maf_B.txt

EX321_Test_Maf_I.txt

Define new factor

Aggregate spectra

Define subset

Find duplicate samples from Col. 1

Remove selected samples

Merge Y data files

Properties

X-axis min

0

X-axis max

0

Y-axis min

0.0

Y-axis max

0.0

Hints

----- PLOT AREA -----

Right click to select 'Select', 'Zoom' modes and 'Copy' or 'Save'

Select mode: click for nearest or drag rectangle.

Zoom mode: click to zoom around or drag rectangle.

Right click and select Zoom all.

Right click to Copy/Save

----- TABLE AREA -----

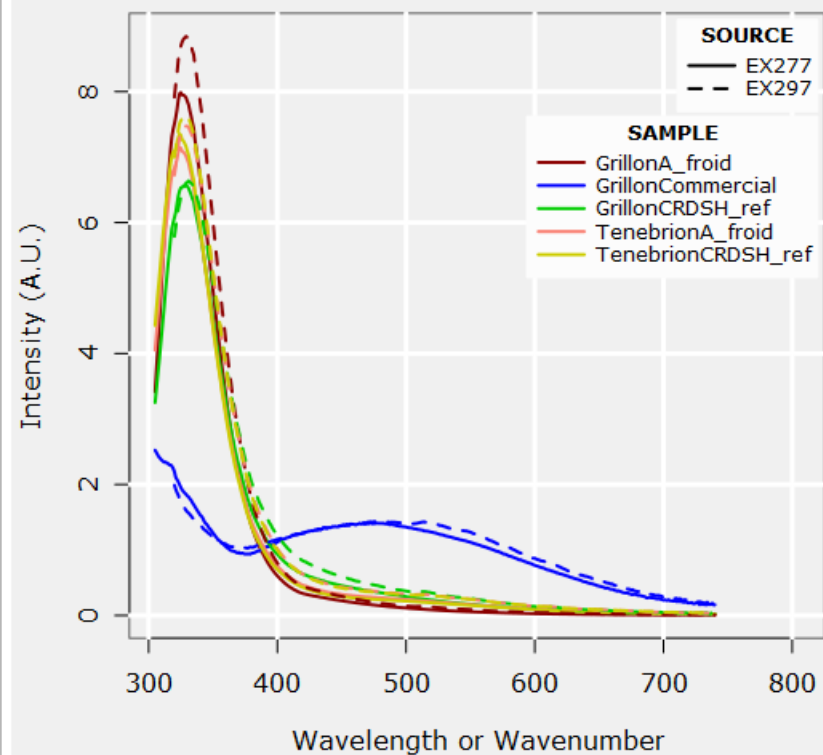
Click/CtrlClick/ShiftClick in table to select samples

Click on a column for sorting and plot by factor. If column

Y data

nt.1	PosRep	Classe1	Classe2	NoSeqFile	NoSeq
nt_1	1	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	129	129
nt_1	2	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	130	130
nt_1	3	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	131	131
nt_1	4	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	132	132
nt_1	1	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	133	133
nt_1	2	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	134	134
nt_1	3	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	135	135
nt_1	4	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	136	136
nt_1	1	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	137	137
nt_1	2	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	138	138
nt_1	3	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	139	139
nt_1	4	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	140	140
nt_1	1	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	141	141
nt_1	2	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	142	142
nt_1	3	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	143	143
nt_1	4	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	144	144
nt_2	1	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	145	145
nt_2	2	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	146	146
nt_2	3	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	147	147
nt_2	4	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	148	148
nt_2	1	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	149	149
nt_2	2	TenebrionCRDSH_refS46	TenebrionCRDSH_ref	150	150

Pre-treated data



Data selection | Apply models | PrePro | PCA | **PLSDA** | PLS

Modeling definitions
Spectral data set(s) for PLSDA
X Data Files
EX277
EX297

Factor to predict
Pick a factor: Classe_2

Train control options
Prop. of data for training: 0.6
Resampling method: cv
Number of folds: 5
Number of repetitions: 1

Training options
Nb of LVs (max): 4
PreProcessing: None
Prediction method: softmax
Performance metric: Kappa

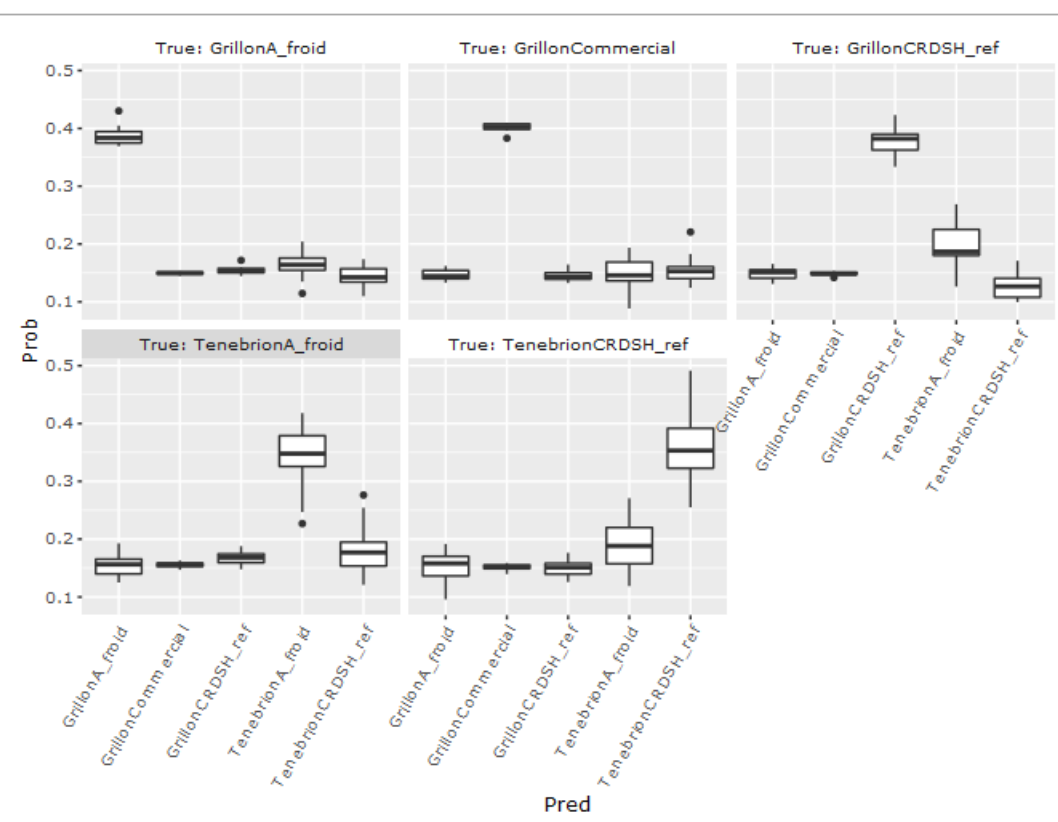
Aggregation options
Aggregation operator: concatenate

Compute model
Save model

Output area
Output controls
Accuracy - VL plot
Confusion matrix
 Validation Test
Probs boxplot
 Validation Test
Show probs
Plot B-coeff

Console output

Specificity	0.9730
Pos Pred Value	0.9231
Neg Pred Value	0.9863
Prevalence	0.2525
Detection Rate	0.2424
Detection Prevalence	0.2626
Balanced Accuracy	0.9665



Console to txt | Pick an output file name | Output file name: D:/Bernard/Documents/Default_PLSDA_Ouput.txt



Data selection Apply models PrePro PCA PLSDA PLS

Spectral data set for PCA
EX277

Estimated number of significant PCs
4

Choose plot type
Scores

Pick PC1 (X-axis for score biplot or first loading)
1

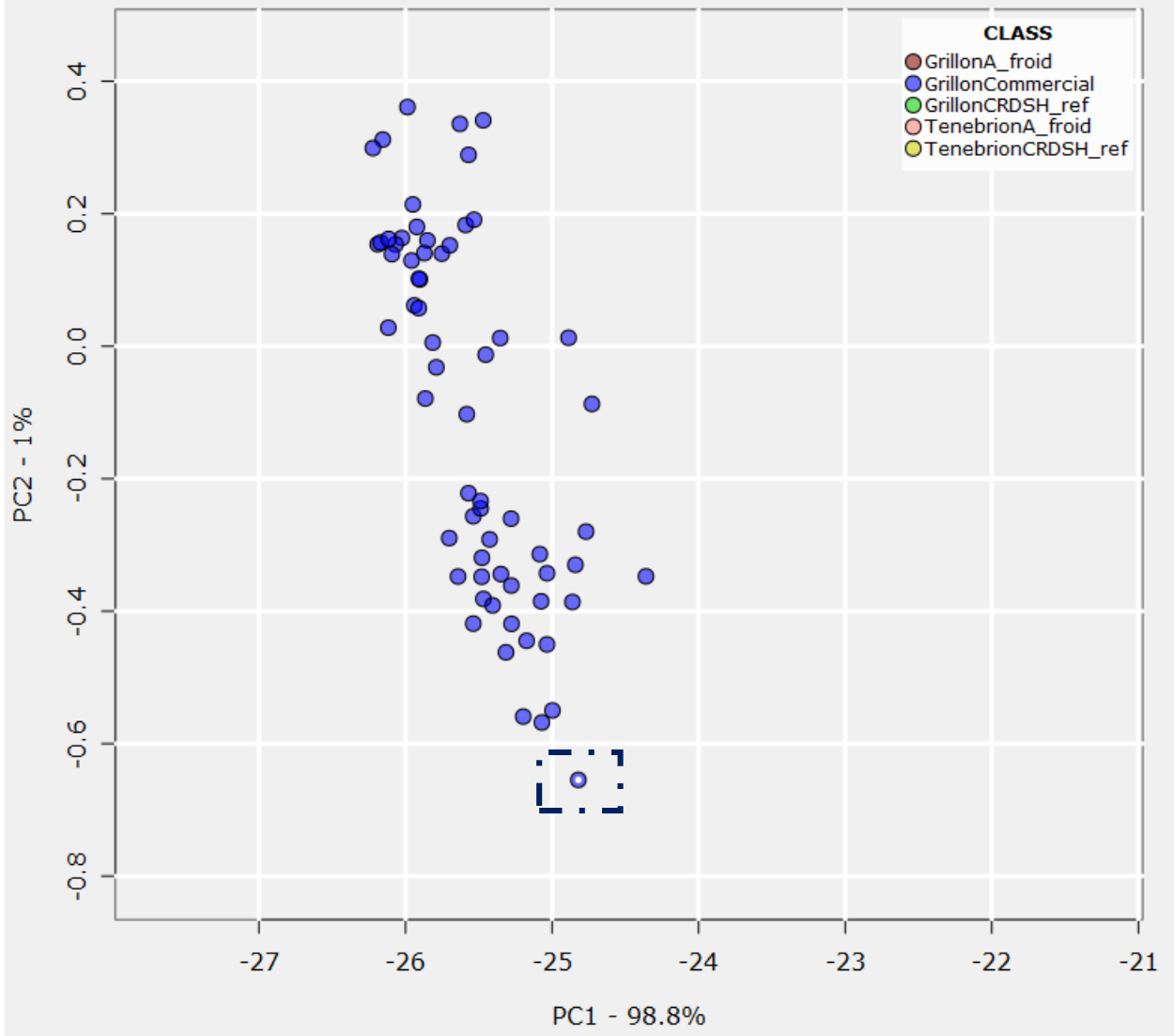
Pick PC2 (Y-axis for score biplot or last loading)
2

Point coloring options
Grouping for score plot Classe_2

Point labeling options
Labels for score plot None
Criteria All

Data ellipse plotting
Pick option None

- Update plot
- Remove selected from subset
- Save scores
- Save PCA model



Interaction de base avec graphiques

```
ggacp <- gwidgets2::ggraphics(cont=pca_tab,  
                              width=100, height=100,  
                              expand=TRUE, no_popup=TRUE)  
#Handle to find sample associated with mouse click on graph  
gwidgets2::addHandlerChanged(ggacp, interact_w_pca_plot)
```

```
*****  
interact_w_pca_plot <- function(h,...)  
  # Manage user interaction with graphics  
  # IF isSelectionMode is TRUE (isZoomMode and isZoomAll are false):  
  #   This finds samples isolated by dragging a rectangle with mouse.  
  #   Just clicking cancel selection.
```

```
}else #this is a rectangle  
{  
  gwidgets2::enabled(subset_from_ACPPlotbut) <- TRUE  
  #Find points in rectangle  
  with (sc_plot_params, {  
    indices <- which(Xsc>h$x[1] & Xsc<h$x[2]  
                    & Ysc>h$y[1] & Ysc<h$y[2])  
    #redraw the points with a small black dot  
    gwidgets2::visible(ggacp) <- TRUE  
    points(Xsc[indices],Ysc[indices],pch=20, cex=0.75, col="white")  
    ISR_env$selectedScores <- c(indices,ISR_env$selectedScores)  
    ISR_env$selectedScores=sort(ISR_env$selectedScores[!duplicated(ISR_env$selectedScores)])  
  }  
}
```

```
> h  
$`obj`  
Object of class GGraphics  
  
$action  
NULL  
  
$x  
[1] -0.3218085  1.3297872  
  
$y  
[1]  6.886076 12.126582
```

Interaction de base avec graphiques

```
ggacp <- gwidgets2::ggraphics(cont=pca_tab,  
                              width=100, height=100,  
                              expand=TRUE, no_popup=TRUE)  
#Handle to find sample associated with mouse click on graph  
gwidgets2::addHandlerChanged(ggacp, interact_w_pca_plot)
```

```
*****  
interact_w_pca_plot <- function(h,...)  
  # Manage user interaction with graphics  
  # IF isSelectionMode is TRUE (isZoomMode and isZoomAll are false):  
  #   This finds samples isolated by dragging a rectangle with mouse.  
  #   Just clicking cancel selection.
```

```
}else #this is a rectangle  
{  
  gwidgets2::enabled(subset_from_ACPPlotbut) <- TRUE  
  #Find points in rectangle  
  with (sc_plot_params, {  
    indices <- which(Xsc>h$x[1] & Xsc<h$x[2]  
                    & Ysc>h$y[1] & Ysc<h$y[2])  
    #redraw the points with a small black dot  
    gwidgets2::visible(ggacp) <- TRUE  
    points(Xsc[indices],Ysc[indices],pch=20, cex=0.75, col="white")  
    ISR_env$selectedScores <- c(indices,ISR_env$selectedScores)  
    ISR_env$selectedScores=sort(ISR_env$selectedScores[!duplicated(ISR_env$selectedScores)])  
  }  
}
```

```
> h  
$`obj`  
Object of class GGraphics  
  
$action  
NULL  
  
$x  
[1] -0.3218085  1.3297872  
  
$y  
[1]  6.886076 12.126582
```

Interaction de base avec graphiques

```
ggacp <- gwidgets2::ggraphics(cont=pca_tab,  
  width=100, height=100,  
  expand=TRUE,no_popup=TRUE)  
#Handle to find sample associated with mouse click on graph  
gwidgets2::addHandlerChanged(ggacp,interact_w_pca_plot)
```

```
*****  
interact_w_pca_plot <- function(h,...)  
  # Manage user interaction with graphics  
  # IF isselectMode is TRUE (isZoomMode and isZoomAll are false):  
  #   This finds samples isolated by dragging a rectangle with mouse.  
  #   Just clicking cancel selection.
```

```
}else #this is a rectangle  
{  
  gwidgets2::enabled(subset_from_ACPPlotbut) <- TRUE  
  #Find points in rectangle  
  with (sc_plot_params, {  
    indices <- which(Xsc>h$x[1] & Xsc<h$x[2]  
      & Ysc>h$y[1] & Ysc<h$y[2])  
    #redraw the points with a small black dot  
    gwidgets2::visible(ggacp) <- TRUE  
    points(Xsc[indices],Ysc[indices],pch=20, cex=0.75, col="white")  
    ISR_env$selectedScores <- c(indices,ISR_env$selectedScores)  
    ISR_env$selectedScores=sort(ISR_env$selectedScores[!duplicated(ISR_env$selectedScores)])  
  }  
}
```

```
> h  
$`obj`  
Object of class GGraphics  
  
$action  
NULL  
  
$x  
[1] -0.3218085  1.3297872  
  
$y  
[1]  6.886076 12.126582
```

Package inspectrar

<https://github.com/PannetonB/inspectrar>

Using InSpectoR

A GUI for working with spectral data

Bernard Panneton

2019-05-01

- 1 Introduction
- 2 Structure of the data set
 - 2.1 File naming convention
 - 2.1.1 Y data file
 - 2.1.2 X data files
 - 2.2 File content
 - 2.2.1 Y data file
 - 2.2.2 X data files
- 3 Using the *InSpectoR* GUI
 - 3.1 *Data selection* tab
 - 3.1.1 Loading a data set
 - 3.1.2 Selecting X data types
 - 3.1.3 Visualising spectra
 - 3.1.4 Manipulating the data set
 - 3.2 *PrePro* tab
 - 3.2.1 Set wavelength/wavenumber limits
 - 3.2.2 Scaling on a per spectrum basis
 - 3.2.3 Parameters for the Savitzky-Golay filtering
 - 3.3 *PCA* tab
 - 3.3.1 *Choose plot type* frame
 - 3.3.2 *Pick PC1* and *Pick PC2*
 - 3.3.3 *Point coloring options*
 - 3.3.4 *Point labeling options*
 - 3.3.5 *Data ellipse plotting*
 - 3.3.6 Interacting with the plot area
 - 3.3.7 Saving PCA results

