

## ***R : APPLICATIONS***

### **Applications de R pour l'analyse de données spectroscopiques SM et RMN : XCMS et Batman**

**6 au 9 juin 2017**

**Responsable :**

**Alain PARIS**

UMR 7245 « Molécules de Communication et Adaptation des Microorganismes (MCAM) »

Département : «Département Régulations, développement, diversité moléculaire»

Tél : 01 40 79 54 12 ; fax : 01 40 79 31 40 ; courriel : [alain.paris@mnhn.fr](mailto:alain.paris@mnhn.fr)

**Intervenants :** Alain PARIS (MNHN), Séverine ZIRAH (MNHN), doctorants et post-doctorants dont les noms seront communiqués ultérieurement.

**Intervenant invité :** Paul BENTON (Scripps Center for Metabolomics and Mass Spectrometry, La Jolla, CA, USA)

**Lieu :** Salle informatique de Phanérogamie

---

**Objectifs :** Ce module présente deux applications de R pour l'analyse de données spectroscopiques : XCMS pour l'analyse de profils chimiques obtenus par spectrométrie de masse et Batman pour l'analyse de profils chimiques obtenus par spectroscopie de résonance magnétique nucléaire. L'utilisation d'outils statistiques multivariés sera réalisée en appui pour illustrer la détection de biomarqueurs métaboliques.

---

**Mardi 6 juin 2017**

09h30 à 12h30 : **Alain PARIS et Séverine ZIRAH** (MNHN)

*Analyse de profils chimiques sous R : analyse de données de chromatographie liquide / spectrométrie de masse (LCMS) et applications en métabolomique.*

14h00 à 17h30 : **Alain PARIS et Séverine ZIRAH** (MNHN)

*Introduction à la bibliothèque XCMS. Bases de données pour l'identification de composés.*

### **Mercredi 7 juin2017**

09h30 à 12h30 : **Paul BENTON** (Scripps Center for Metabolomics and Mass Spectrometry, La Jolla, CA, USA)

*The XCMS package.*

14h00 à 17h30 : **Paul BENTON** (Scripps Center for Metabolomics and Mass Spectrometry, La Jolla, CA, USA)

*Other packages for the analysis of LCMS data: CAMERA and pcaMethods.*

### **Jeudi 8 juin2017**

09h30 à 12h30 : **Alain PARIS et Séverine ZIRAH** (MNHN)

*Analyse de profils chimiques sous R : analyse de données de RMN du proton et applications en métabolomique. Discrétisation des profils RMN et sélection des variables informatives.*

14h00 à 17h30 : **Alain PARIS et Séverine ZIRAH** (MNHN)

*Analyses multivariées non supervisées et supervisées sous R : ACP, les méthodes PLS, analyses par classification hiérarchique, analyses de positionnement multidimensionnel (MDS), analyses discriminantes (AFD, PLS-DA, sPLS-DA, SDA). Description des bibliothèques R ad hoc.*

### **Vendredi 9 juin 2017**

09h30 à 12h30 : **Alain PARIS et Séverine ZIRAH** (MNHN)

*Analyses multi-tableaux (PLS2, analyses de corrélations canoniques, analyses semi-supervisées) et représentation en réseau des variables informatives.*

14h00 à 17h30 :

*Workflow4Metabolomics, présentation de la chaîne de traitements et consultation des bases de données réalisée sur Galaxy.*