Oral UC2 Big Data et données “-omiques”

ALLYNDREE J., CLERC T., LACOSTE L., LORTHIOS T.

Section 1

Méthode de sélection

Méthode de sélection

La méthode utilisée pour sélectionner les métabolites et protéines repose sur le package `MultiVarSel` et utilise la *méthode du Lasso*.

Section 2

Sélection des métabolites

Sélection des métabolites

Seuil défini à 0.94

Infos sur les données de métabolisme

- Nombre de colonne dont la moyenne est nulle : 0
- Nombre de colonne où la variable est constante : 0
- Nombre de NAs dans le dataframe : 0

Matrices Y et X

Lignes	Valeur	Colonnes	Valeur
X	9	X	3
Y	9	Y	199

Test de Blancheur

Test réalisé :

$H_0 : \{E$ suit un bruit blanc et donc $\Sigma = Id\}$
contre
$H_1 : \{E$ ne suit pas un bruit blanc et $\Sigma \neq Id\}$
P-valeur du test de blancheur : 0.0303858. Donc on rejette H_0 et E ne suit pas un bruit blanc, les colonnes ne sont pas indépendantes et $\Sigma \neq Id$.

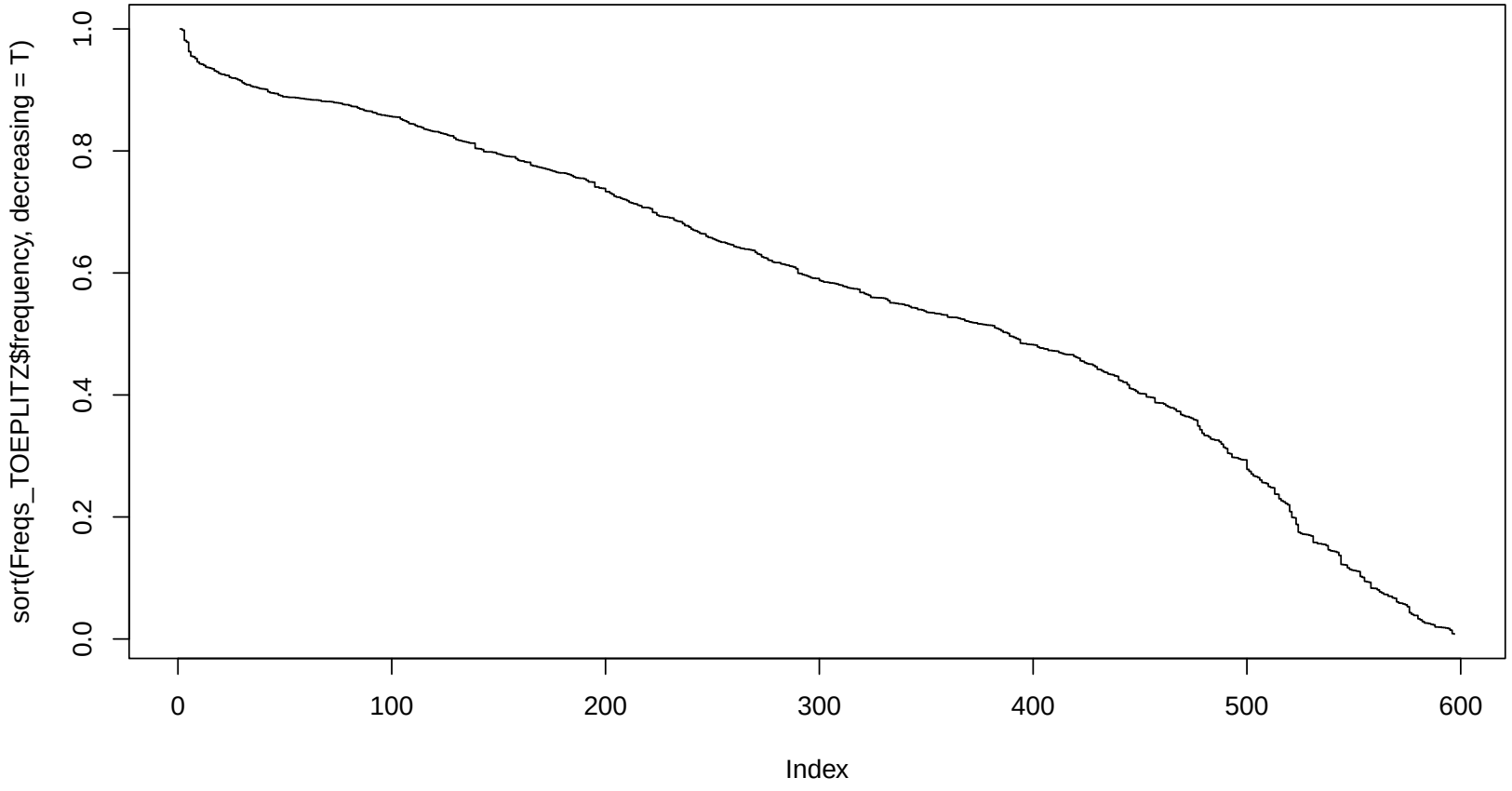
Structure du bruit des résidus

```
             Pvalue        Decision
AR1           0.035 NO WHITE NOISE
nonparam      0.741    WHITE NOISE
ARMA 2 1      0.029 NO WHITE NOISE
```

Test réalisé pour chaque méthode :

$H_0 : \{E\Sigma_{méthode}^{-1/2}$ suit un bruit blanc et donc $\Sigma_{corrigé} = Id\}$
contre
$H_1 : \{E\Sigma_{méthode}^{-1/2}$ ne suit pas un bruit blanc et $\Sigma_{corrigé} \neq Id\}$
On voit donc que lorsque l'on applique la structure non paramétrique la P-valeur de 0.741 nous indique que parmi les fonctions testées c'est la structure non paramétrique qui permet de blanchir la matrice.

Sélection de variables



Les 50 métabolites les plus fréquents

Liste des fréquences

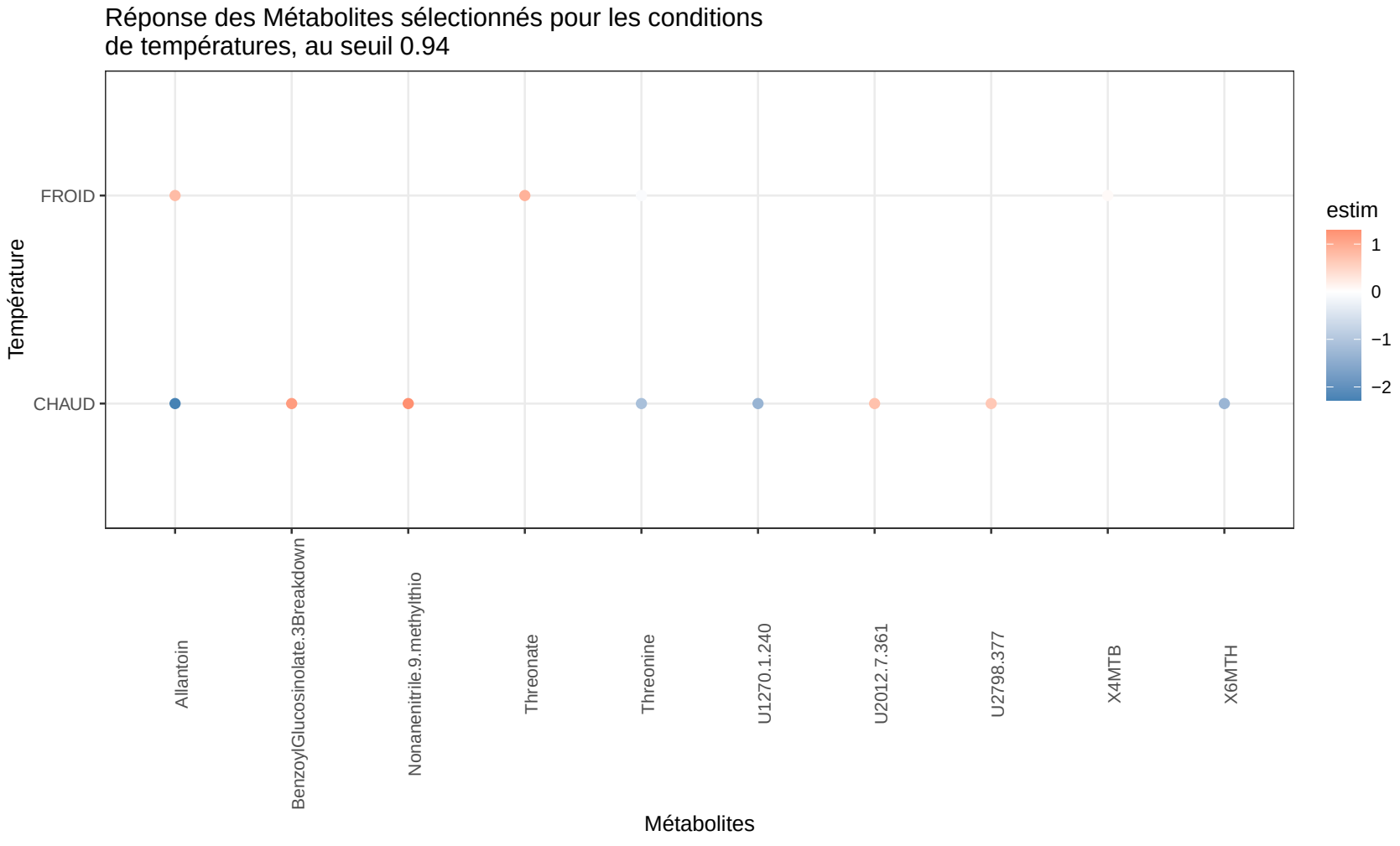
1, 0.998, 0.9812, 0.9784, 0.9628, 0.9554, 0.9544, 0.9516, 0.9458, 0.9428, 0.9422, 0.9402, 0.9372, 0.9366, 0.9356, 0.9346, 0.9312, 0.9298, 0.9272, 0.9258, 0.9256, 0.924, 0.9238, 0.9206, 0.9196, 0.9194, 0.9184, 0.9166, 0.9152, 0.912, 0.9098, 0.9084, 0.9082, 0.9062, 0.905, 0.9048, 0.9036, 0.9022, 0.9018, 0.9016, 0.9008, 0.897, 0.8954, 0.895, 0.8942, 0.894, 0.8914, 0.8906, 0.8888, 0.8888

Les 50 métabolites les plus fréquents

Liste des noms de métabolites

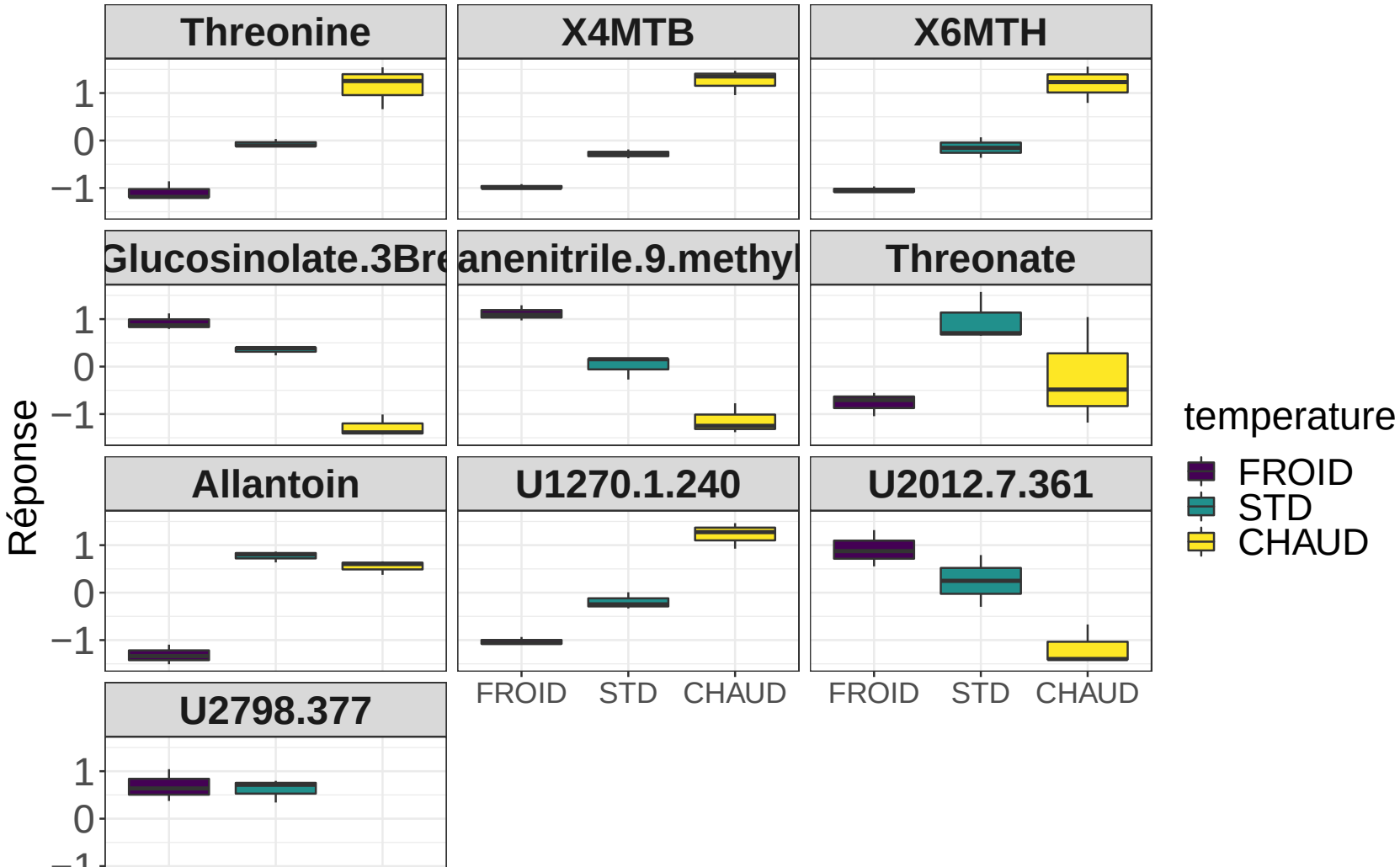
Alanine, Asparagine, Leucine, Threonine, Threonine, Tryptophan, Tryptophan, Valine, gamma.Tocopherol, Eicosanoate, Quercetin, Quercitrin, X4MTB, X4MTB, X5MTP, X6MTH, X6MTH, X7MTH, BenzoylGlucosinolate.3Breakdown, Hexanenitrile.6methylthio, Nonanenitrile.9.methylthio, U2609.4.361, U3122.4.202.I3M., U3122.4.202.I3M., UGlucosinolate140.1, UGlucosinolate140.1, Pentonate.4, Threonate, Allantoin, Allantoin, Xylitol, Galactinol, Glucopyranose..H2O., U1093.6.147, U1270.1.240, U1270.1.240, U1767.3.243, U1852.0.217, U2012.7.361, U2197.2.494, U2315.2.245, U2529.8.361, U2688.5.333, U2692.9.361, U2798.377, U2839.3.312, U2882.5.297, U3080.7.361, U3218.5.297, U3279.7.361

Réponses des métabolites dépassant le seuil 0.94



Boxplots des réponses des métabolites dépassant le seuil 0.94

```
Using temperature as id variables
```



Métabolites retenus au seuil 0.94

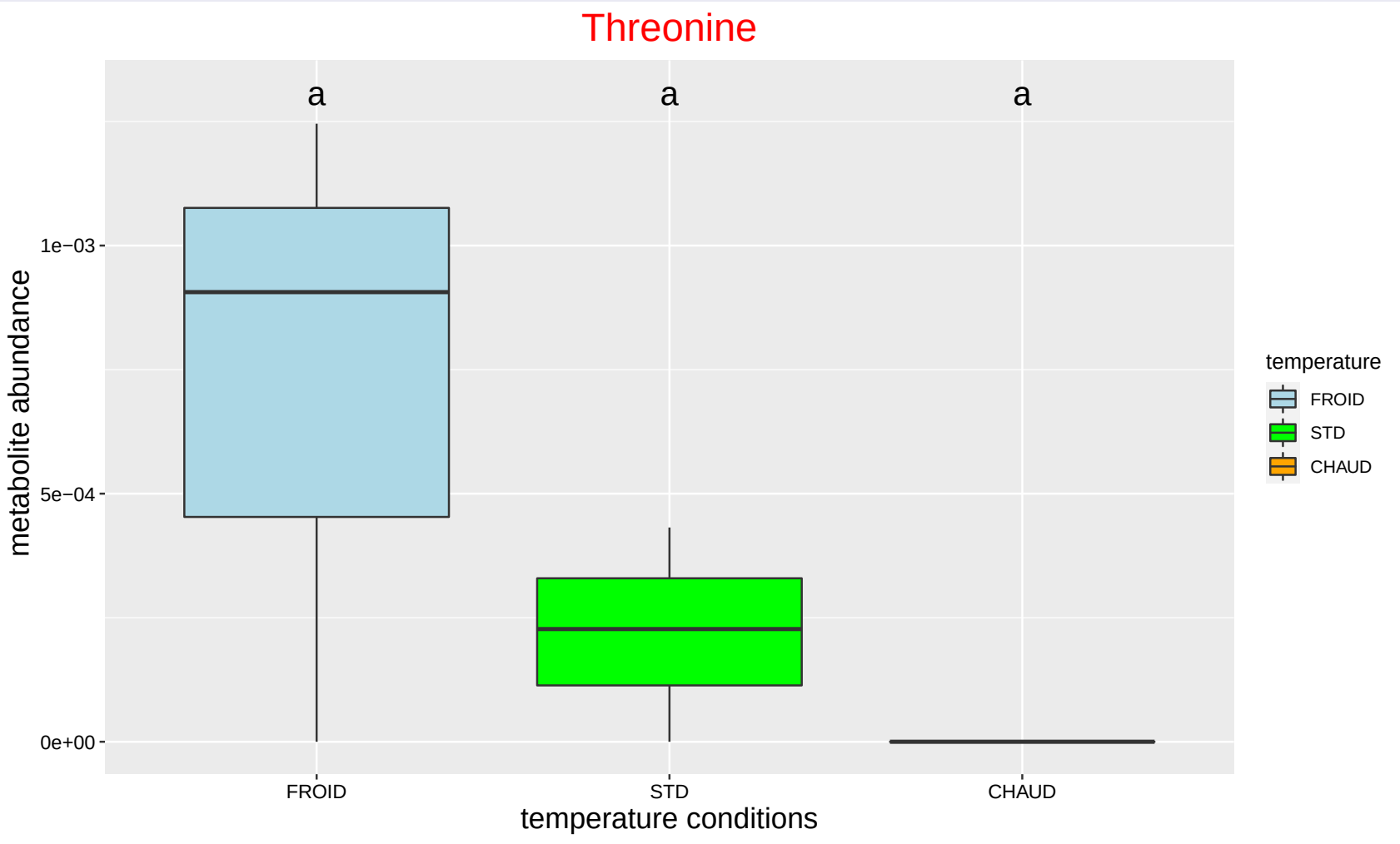
Table des métabolites retenues

Metabolites
Threonine
X4MTB
X6MTH
BenzoylGlucosinolate.3Breakdown
Nonanenitrile.9.methylthio
Threonate
Allantoin
U1270.1.240
U2012.7.361
U2798.377

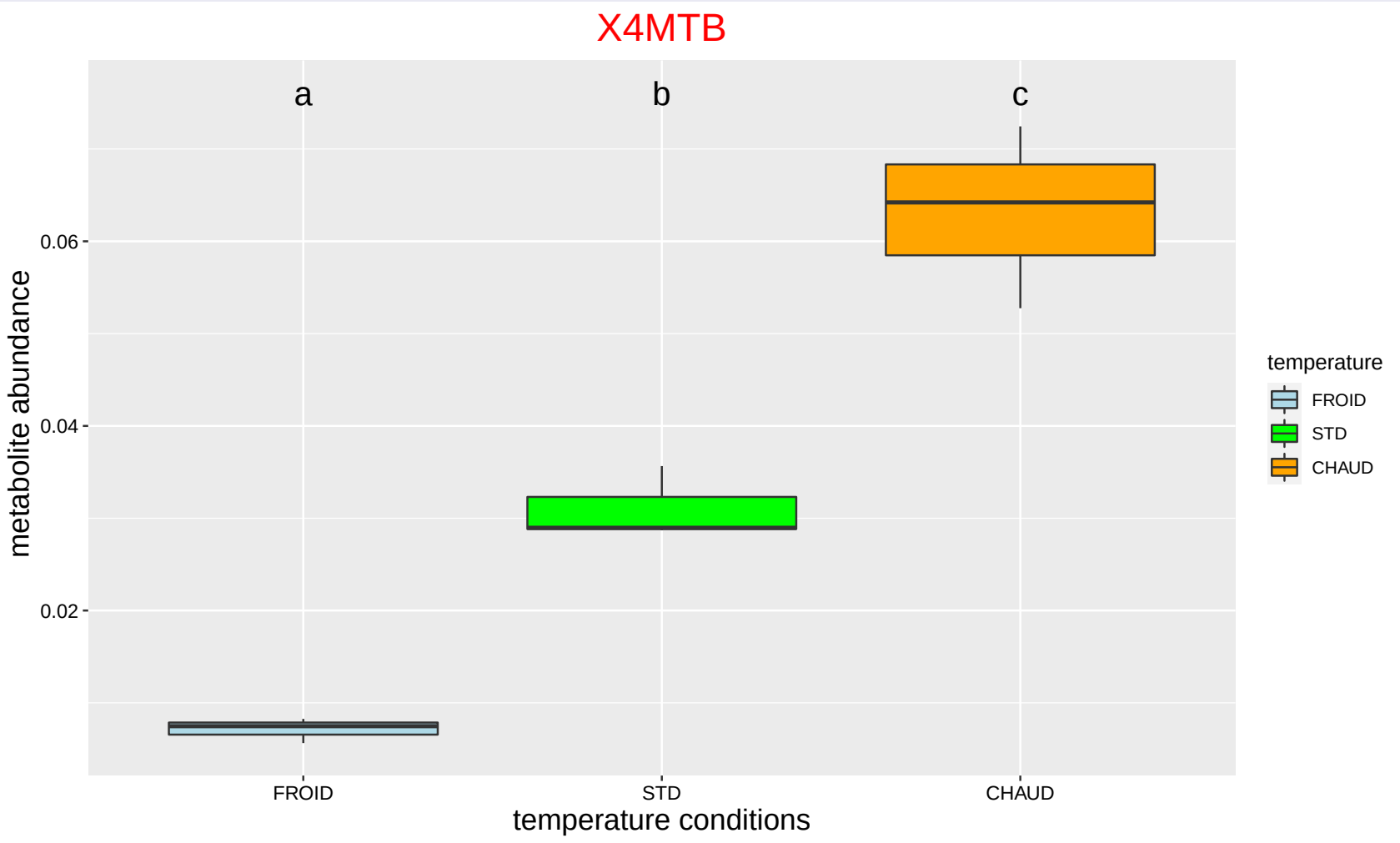
Boxplots de Tukey (avec cld)

Les graphiques suivants présentent les boxplots pour les métabolites sélectionnés par la méthode du lasso

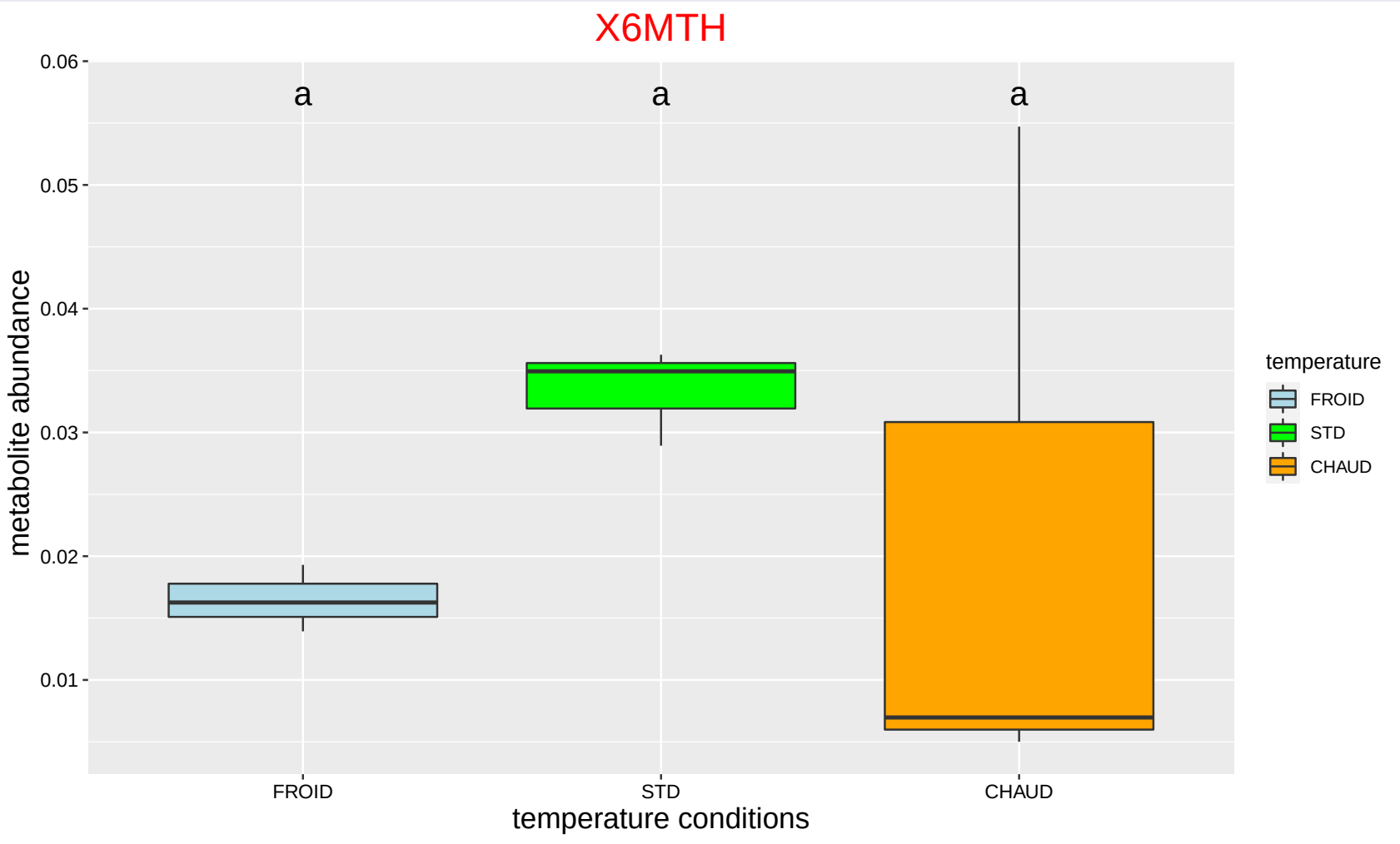
Threonine


Threonine
a
a
a
1e−03
5e−04
0e+00
metabolite abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

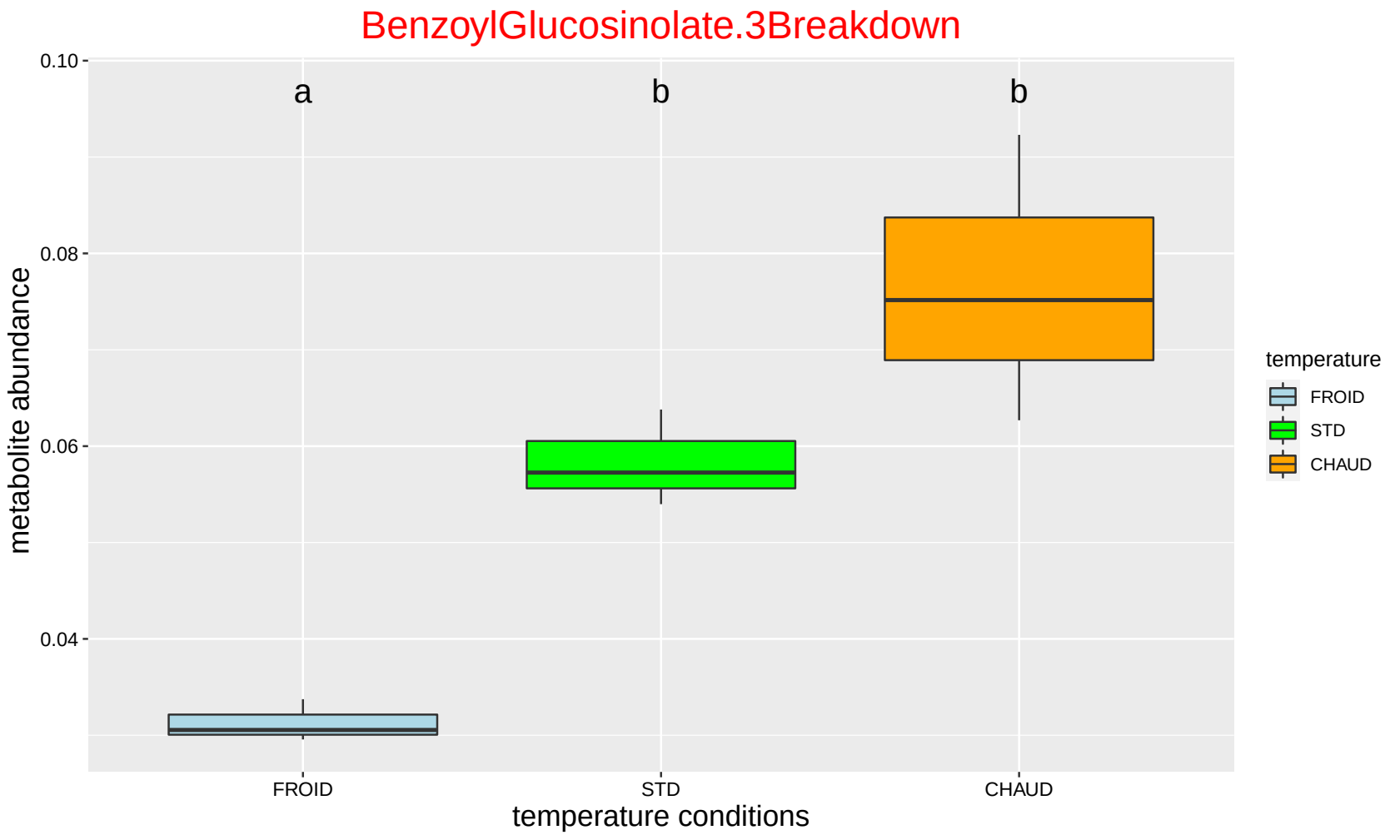
X4MTB


X4MTB
a
b
c
0.06
0.04
0.02
metabolite abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

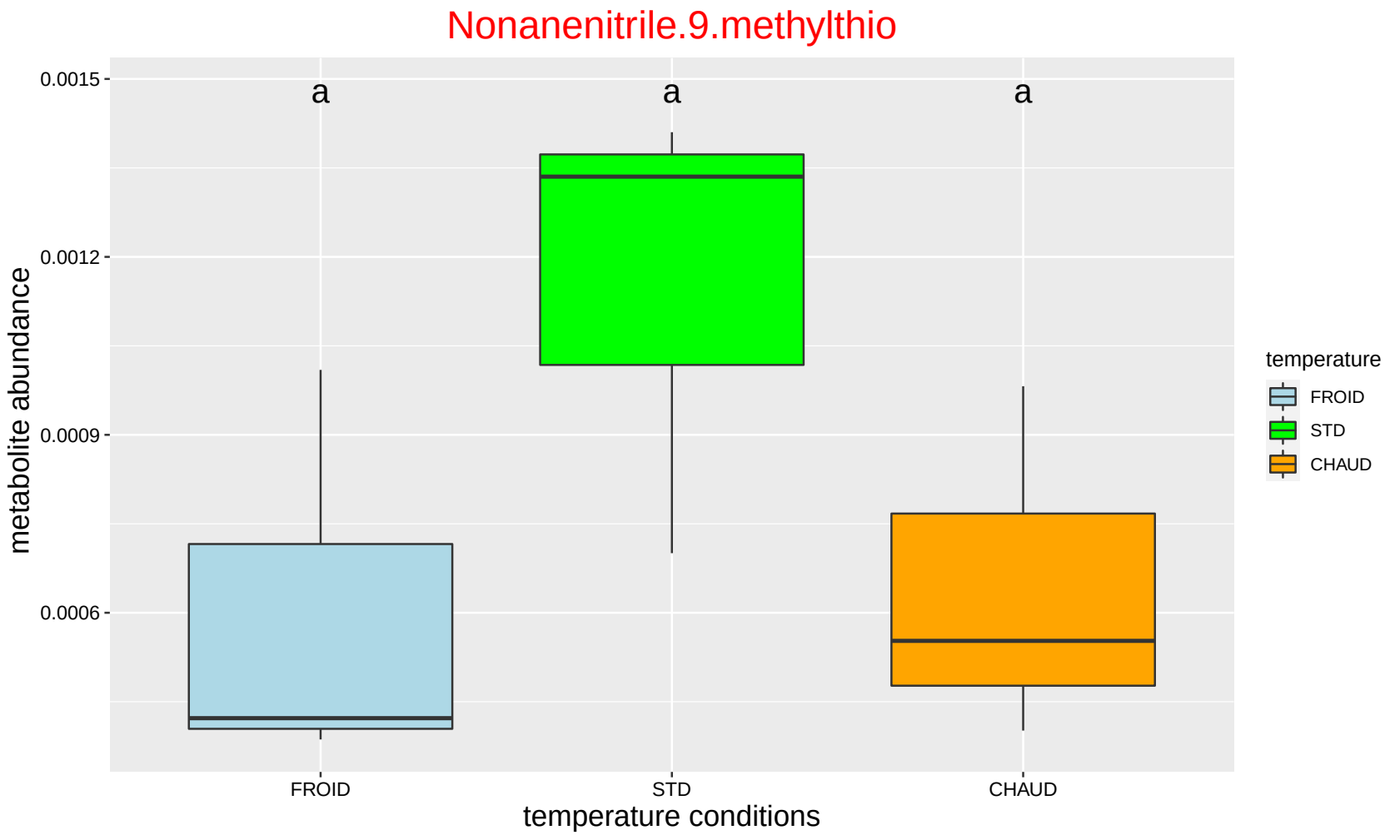
X6MTH


X6MTH
0.06
0.05
0.04
0.03
0.02
0.01
metabolite abundance
a
a
a
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

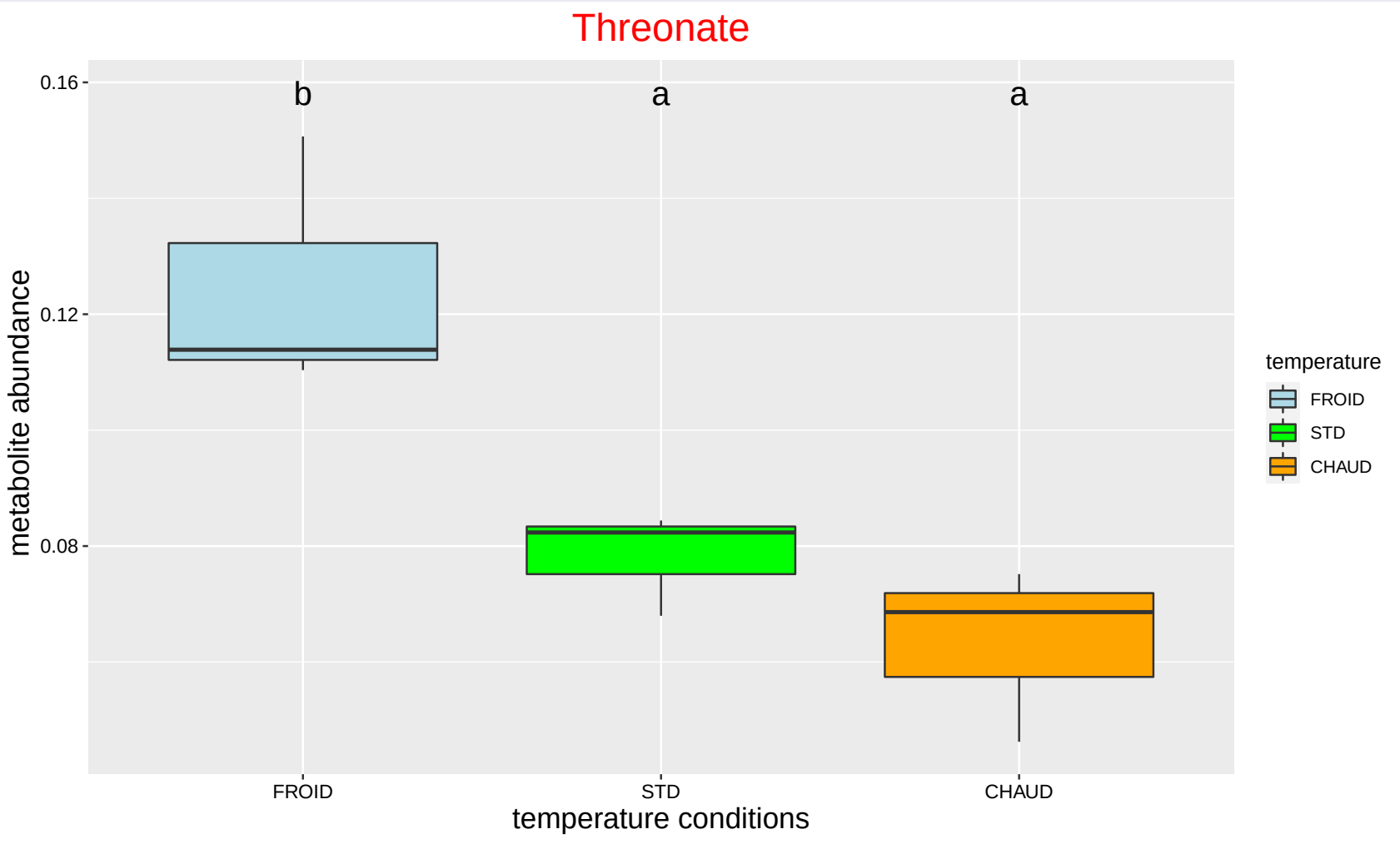
BenzoylGlucosinolate.3Breakdown



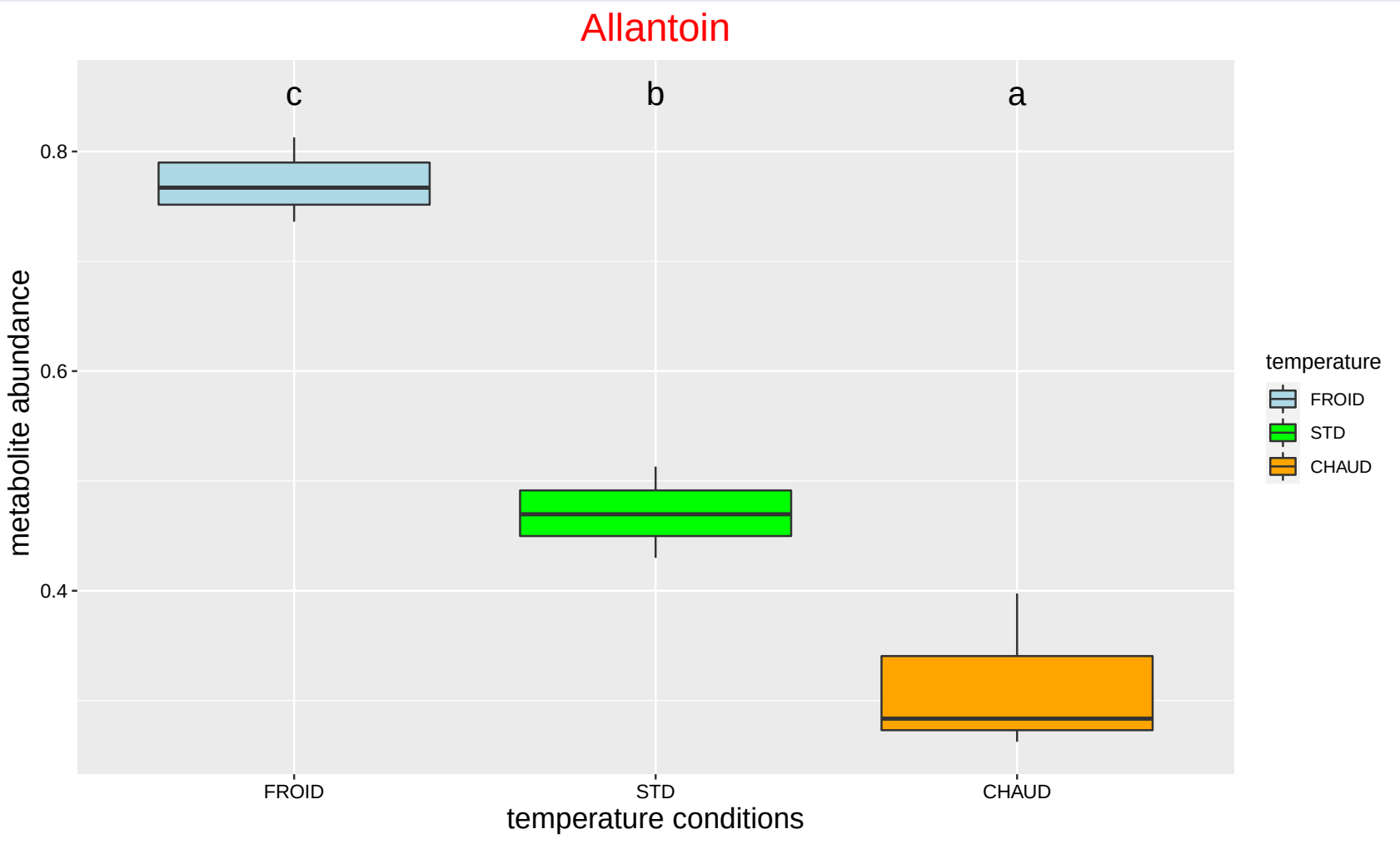
Nonanenitrile.9.methylthio



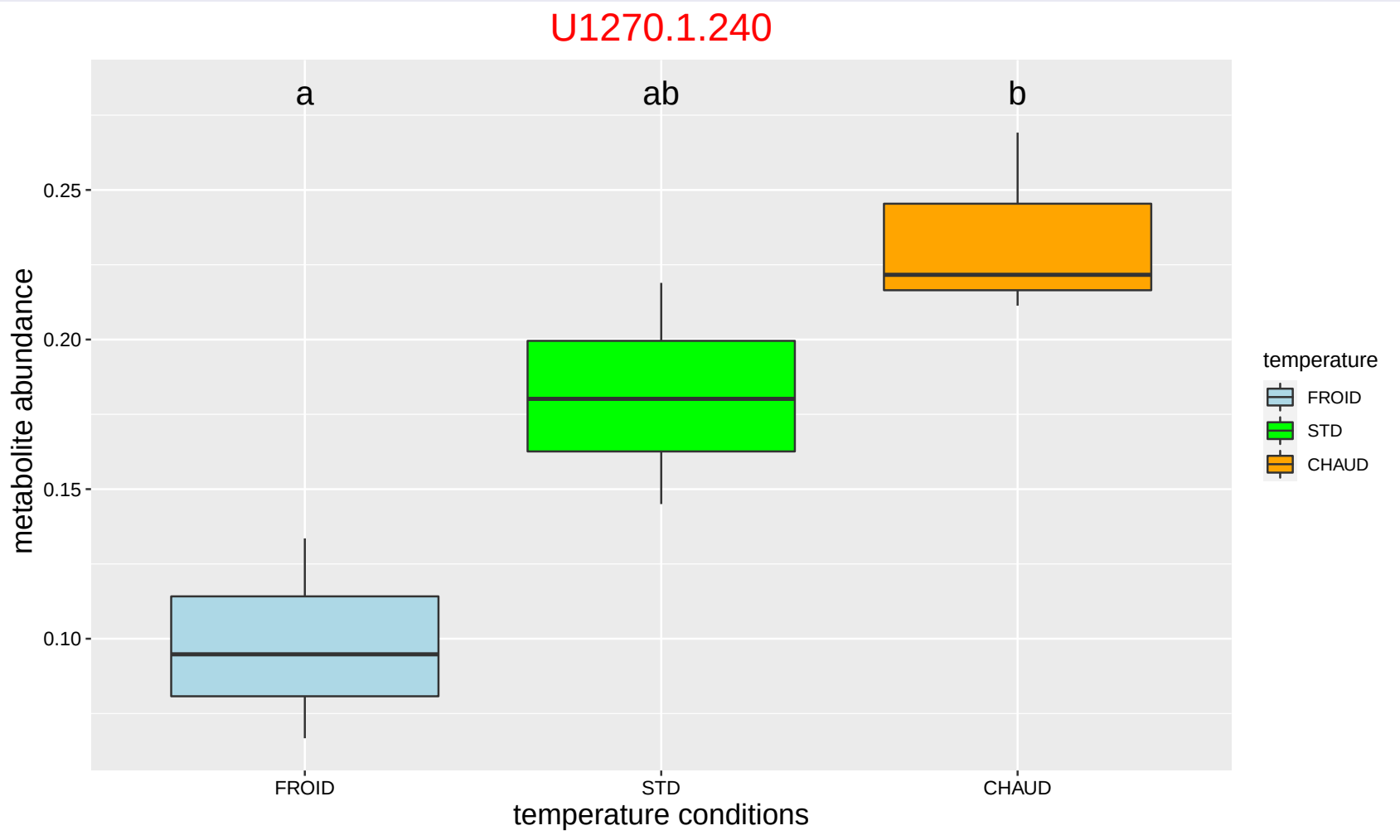
Threonate


Threonate
0.16
0.12
0.08
metabolite abundance
b
a
a
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

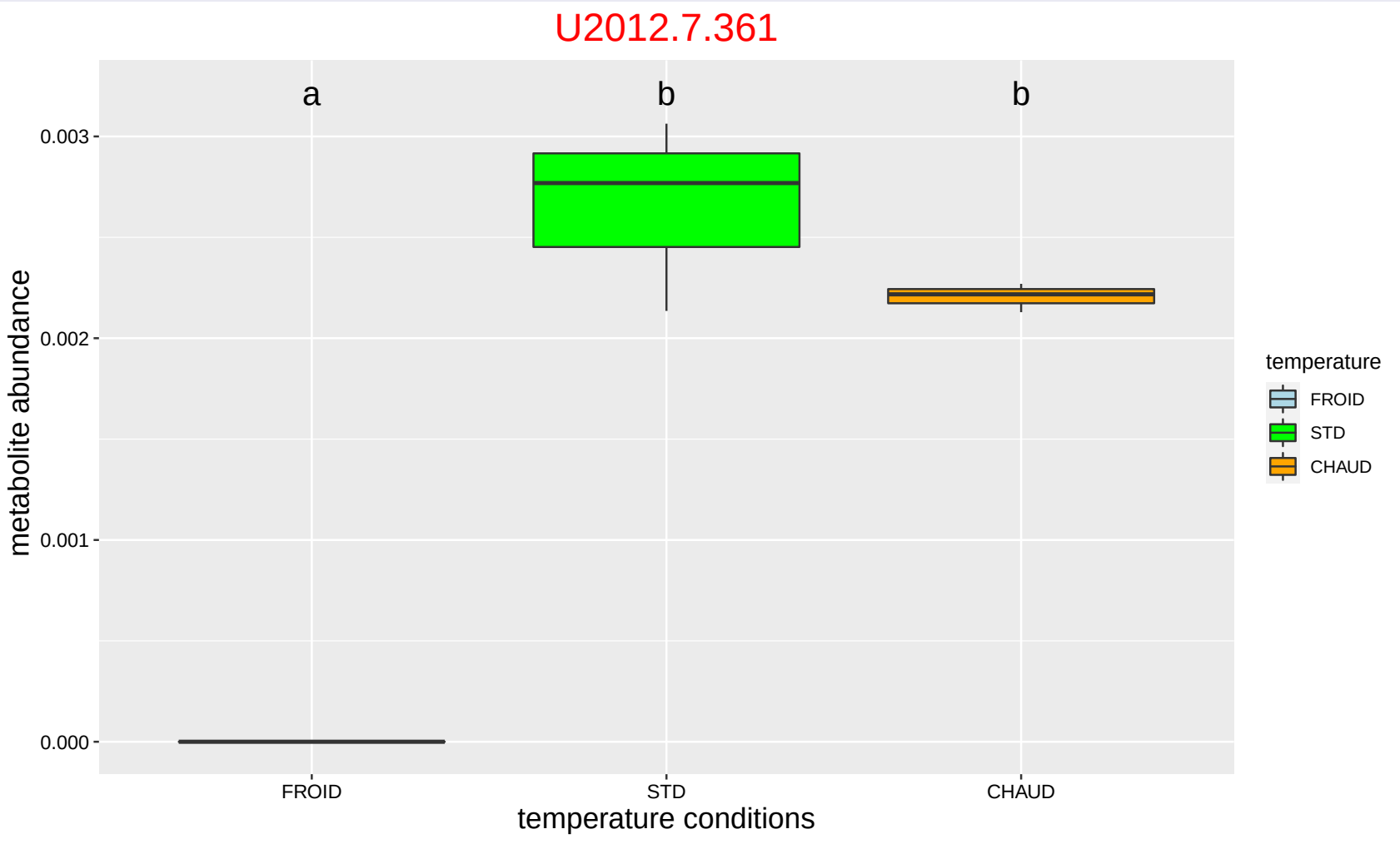
Allantoin


Allantoin
c
b
a
0.8
0.6
0.4
metabolite abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

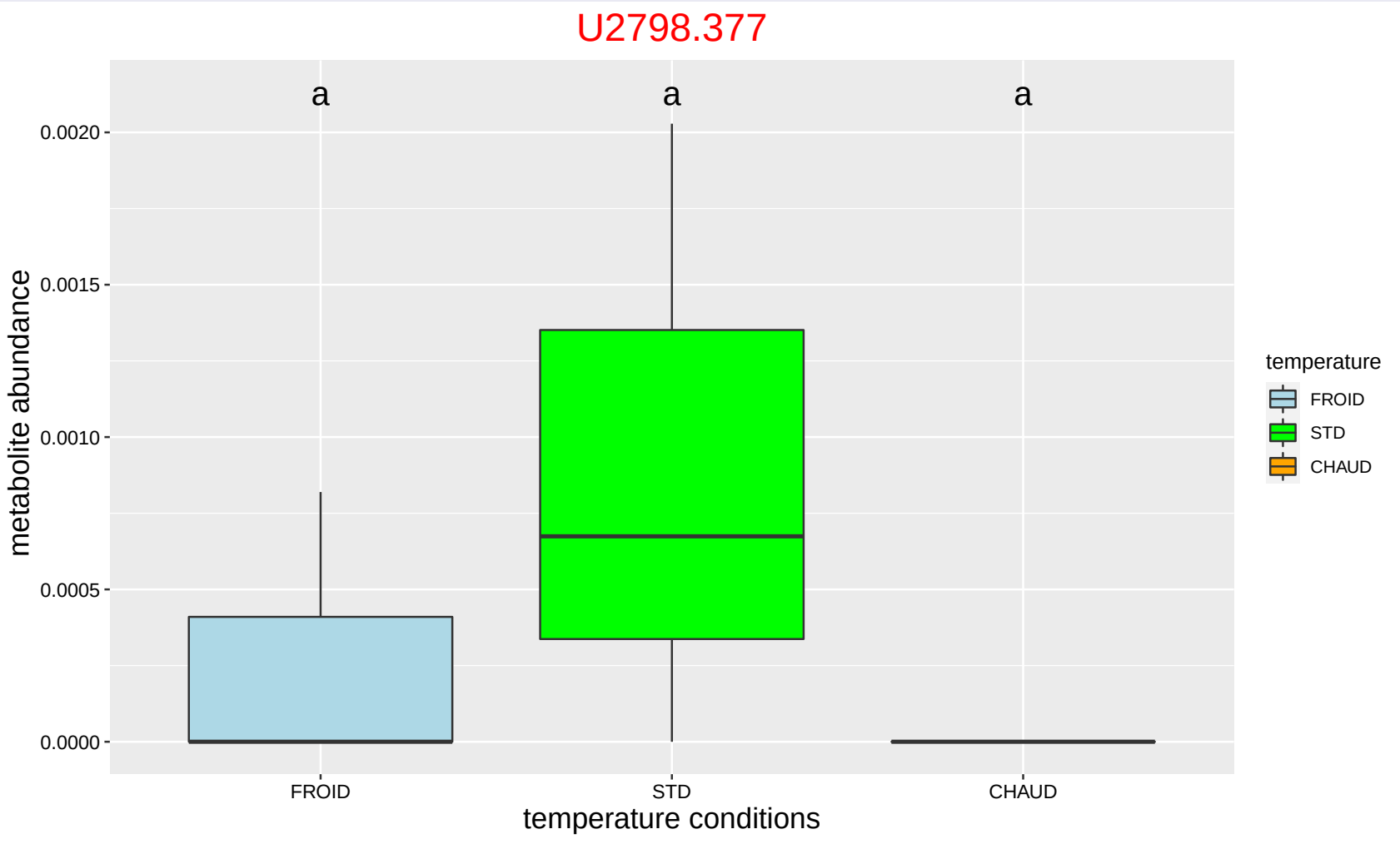
U1270.1.240


U1270.1.240
a
ab
b
0.25
0.20
0.15
0.10
metabolite abundance
temperature
FROID
STD
CHAUD
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions

U2012.7.361


U2012.7.361
a
b
b
0.003
0.002
0.001
0.000
metabolite abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

U2798.377


U2798.377
a
a
a
0.0020
0.0015
0.0010
0.0005
0.0000
metabolite abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

Exportation des Métabolites sélectionnés par GLM Lasso

Le fichier **metabolites_selection_lasso_0.94.csv** existe déjà.

Section 3

Sélection des protéines

Sélection des protéines

Seuil défini à 0.95

Infos sur les données de métabolisme

- Nombre de colonne dont la moyenne est nulle : 0
- Nombre de colonne où la variable est constante : 0
- Nombre de NAs dans le dataframe : 0

Matrices Y et X

Lignes	Valeur	Colonnes	Valeur
X	9	X	3
Y	9	Y	724

Test de Blancheur

Test réalisé :

$H_0 : \{E$ suit un bruit blanc et donc $\Sigma = Id\}$
contre
$H_1 : \{E$ ne suit pas un bruit blanc et $\Sigma \neq Id\}$
P-valeur du test de blancheur : 0.0624035. Donc on rejette H_0 et E ne suit pas un bruit blanc, les colonnes ne sont pas indépendantes et $\Sigma \neq Id$.

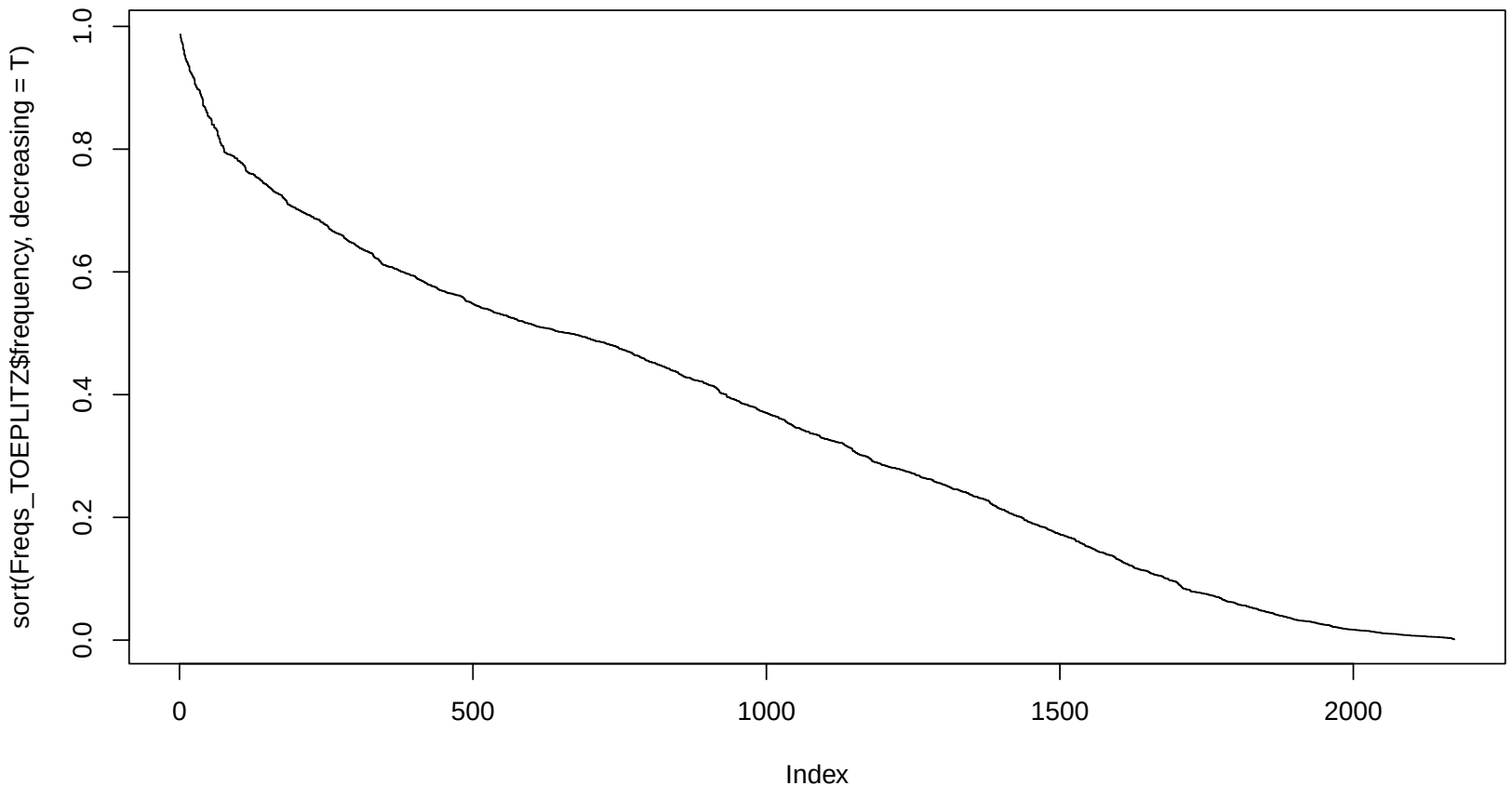
Structure du bruit des résidus

	Pvalue	Decision
AR1	0.187	WHITE NOISE
nonparam	1	WHITE NOISE
ARMA 2 1	0.179	WHITE NOISE

Test réalisé pour chaque méthode :

$H_0 : \{E\Sigma_{méthode}^{-1/2}$ suit un bruit blanc et donc $\Sigma_{corrigé} = Id\}$
contre
$H_1 : \{E\Sigma_{méthode}^{-1/2}$ ne suit pas un bruit blanc et $\Sigma_{corrigé} \neq Id\}$
On voit donc que lorsque l'on applique la structure non paramétrique la P-valeur de 1 nous indique que parmi les fonctions testées c'est la structure non paramétrique qui permet de blanchir la matrice.

Sélection de variables



Les 50 Protéines les plus fréquents

Liste des fréquences

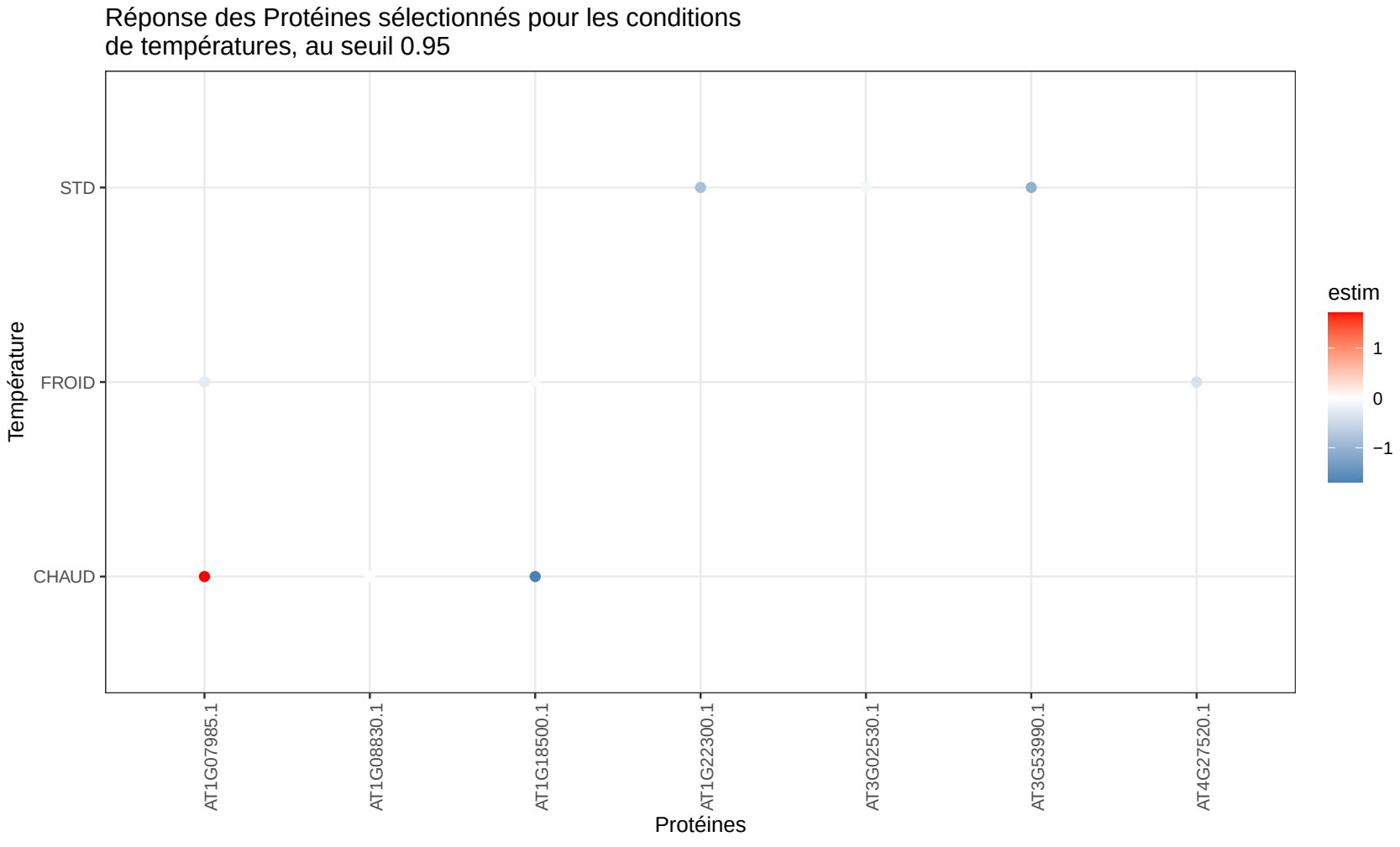
0.9868, 0.981, 0.976, 0.9734, 0.9712, 0.9636, 0.9612, 0.9544, 0.952, 0.9474, 0.9452, 0.9422, 0.9418, 0.9388, 0.936, 0.9348, 0.9282, 0.926, 0.925, 0.9228, 0.9212, 0.9192, 0.9168, 0.9162, 0.9134, 0.9058, 0.9054, 0.9016, 0.9006, 0.898, 0.8976, 0.8972, 0.8966, 0.895, 0.891, 0.8882, 0.8856, 0.8842, 0.8814, 0.8708, 0.8704, 0.8692, 0.868, 0.865, 0.863, 0.86, 0.8592, 0.8538, 0.8532, 0.8528

Les 50 métabolites les plus fréquents

Liste des noms de protéines

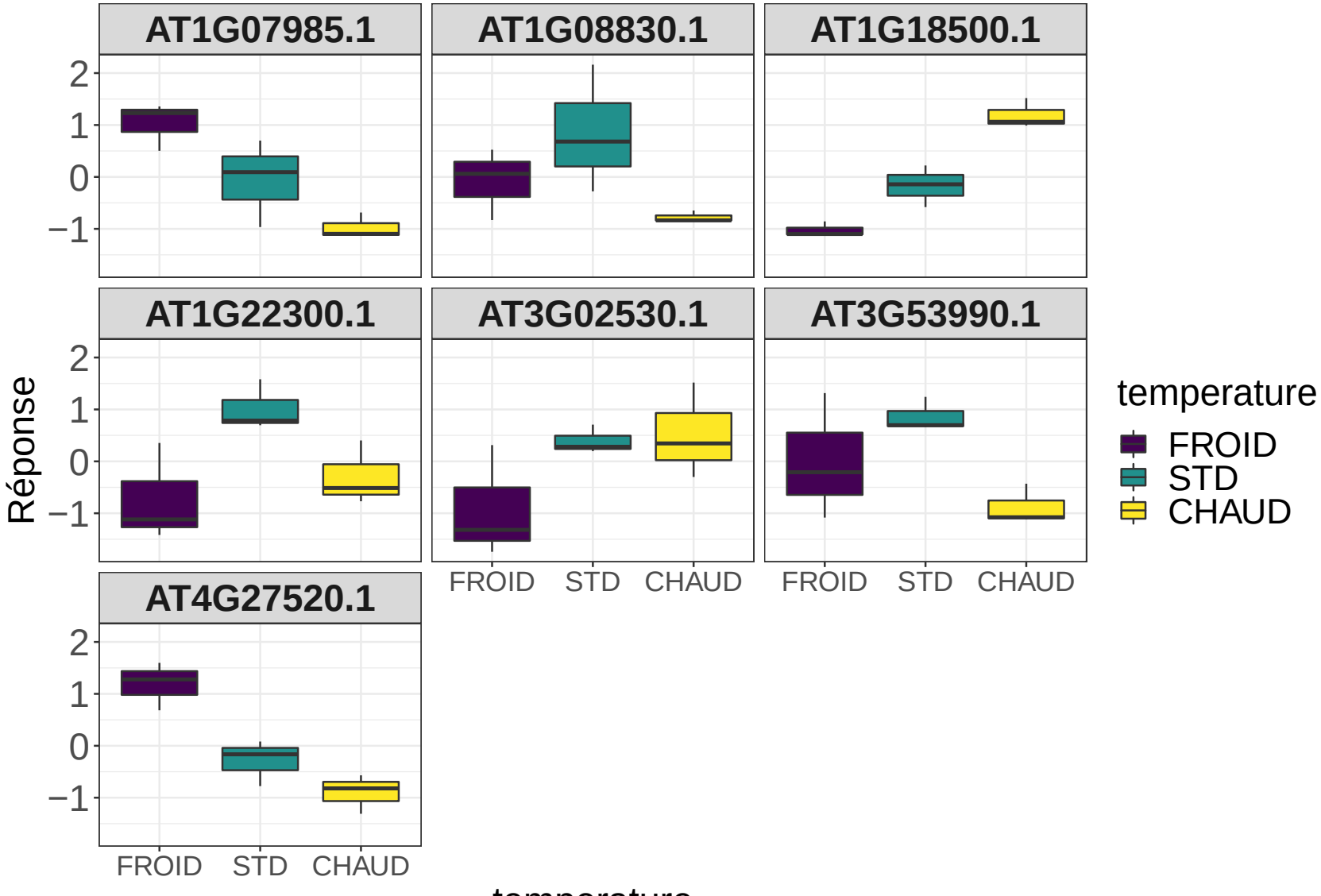
AT1G03030.1, AT1G04480.1, AT1G07985.1, AT1G07985.1,
AT1G08110.1, AT1G08830.1, AT1G14950.1, AT1G18500.1,
AT1G18500.1, AT1G20260.1, AT1G20620.1, AT1G22300.1,
AT1G43170.1, AT1G53750.1, AT1G64110.1, AT1G68010.1,
AT1G68010.1, AT1G69800.1, AT1G72680.1, AT1G77090.1,
AT1G77120.1, AT2G02930.1, AT2G25970.1, AT2G32120.1,
AT2G37660.1, AT2G38380.1, AT3G02530.1, AT3G02560.1,
AT3G05190.1, AT3G13300.1, AT3G21720.1, AT3G26060.1,
AT3G53990.1, AT3G54400.1, AT4G02340.1, AT4G16155.1,
AT4G16210.1, AT4G16760.1, AT4G27520.1, AT4G34670.1,
AT4G36360.1, AT5G04885.1, AT5G04885.1, AT5G11520.1,
AT5G20950.1, AT5G26830.1, AT5G42740.1, AT5G52840.1,
AT5G66190.1, AT5G66190.1

Réponses des Protéines dépassant le seuil 0.95



Boxplots des réponses des Protéines dépassant le seuil 0.95

```
Using temperature as id variables
```



Protéines retenues au seuil 0.95

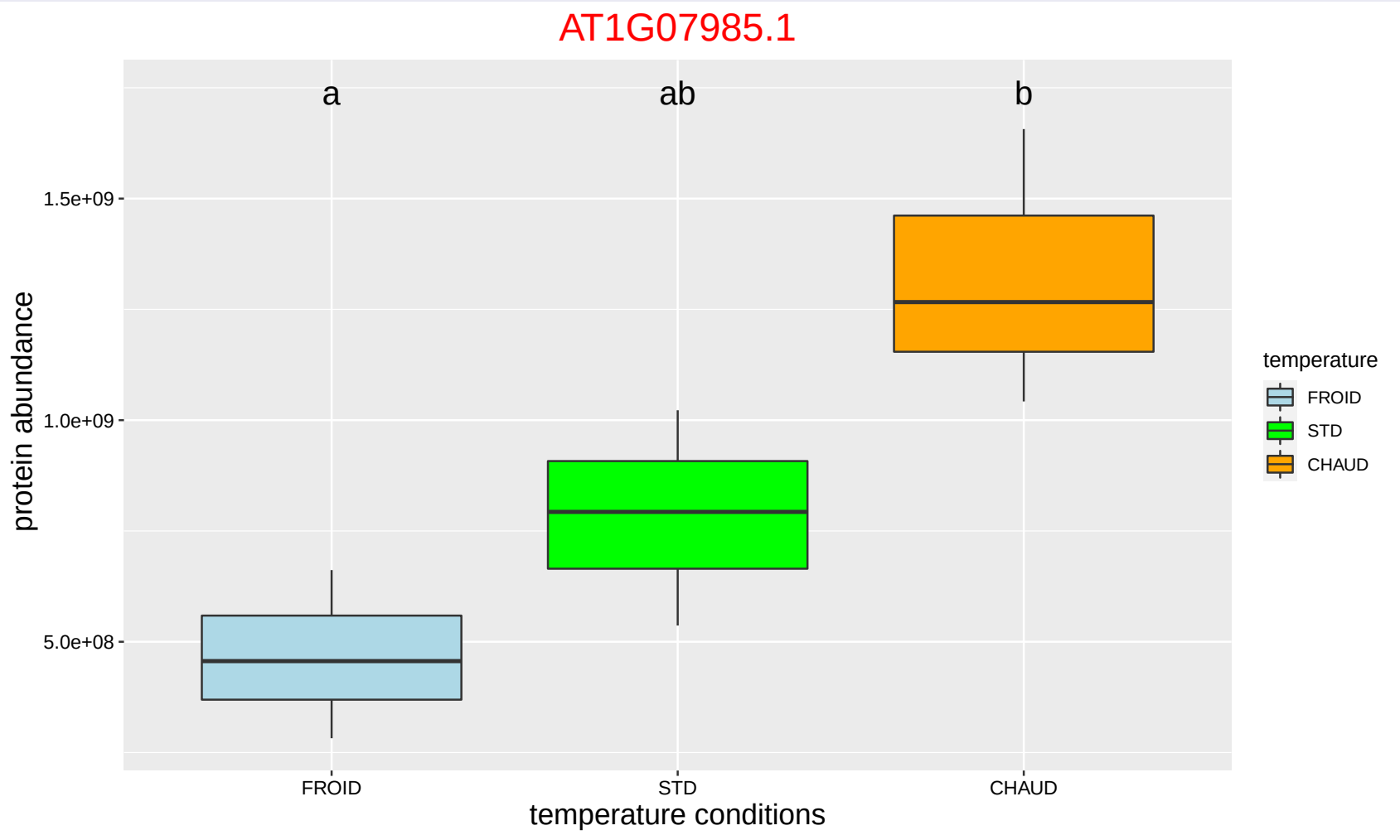
Table des protéines retenues

Proteines
AT1G07985.1
AT1G08830.1
AT1G18500.1
AT1G22300.1
AT3G02530.1
AT3G53990.1
AT4G27520.1

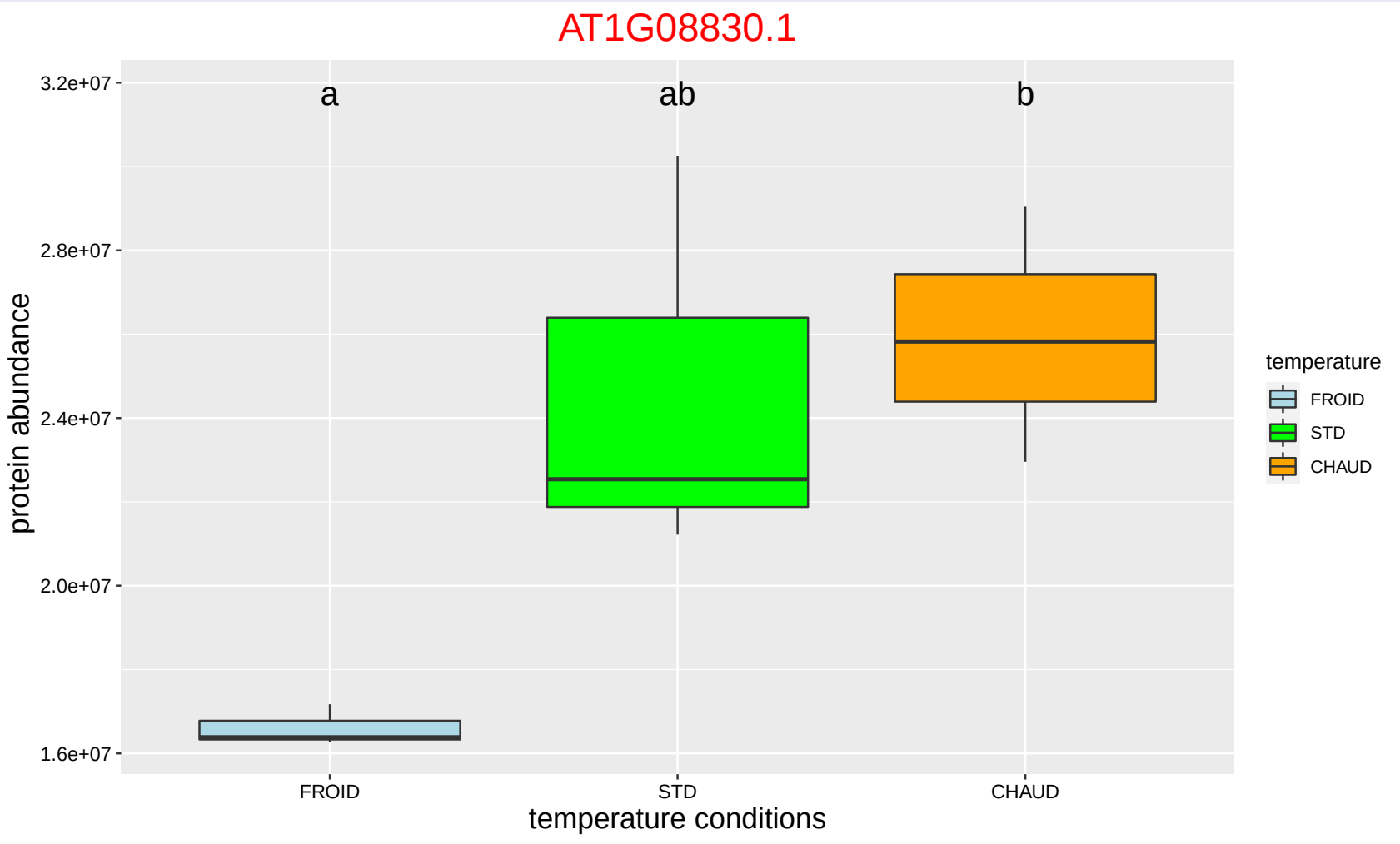
Boxplots de Tukey (avec cld)

Les graphiques suivants présentent les boxplots pour les protéines sélectionnées par la méthode du lasso

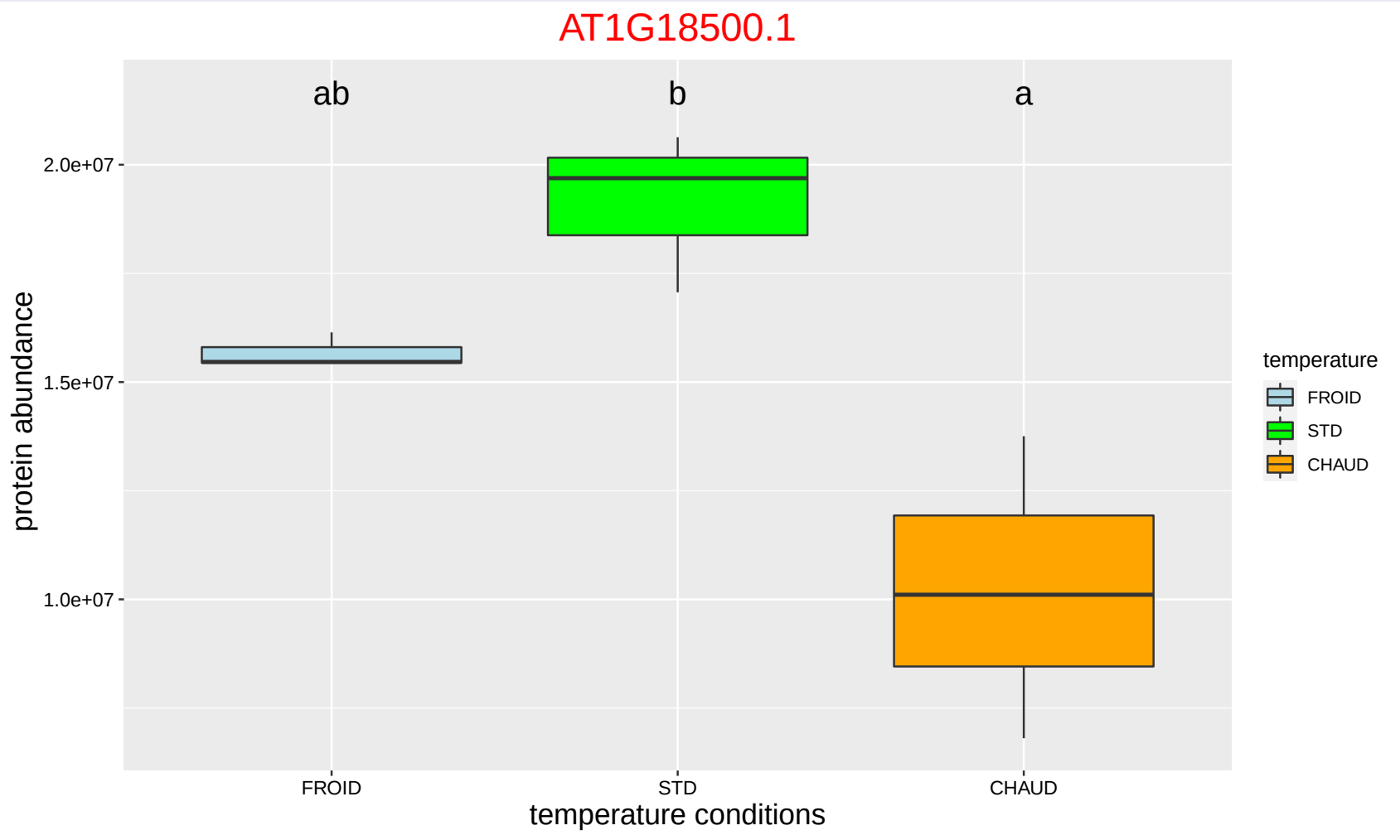
AT1G07985.1


AT1G07985.1
a
ab
b
1.5e+09
1.0e+09
5.0e+08
protein abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

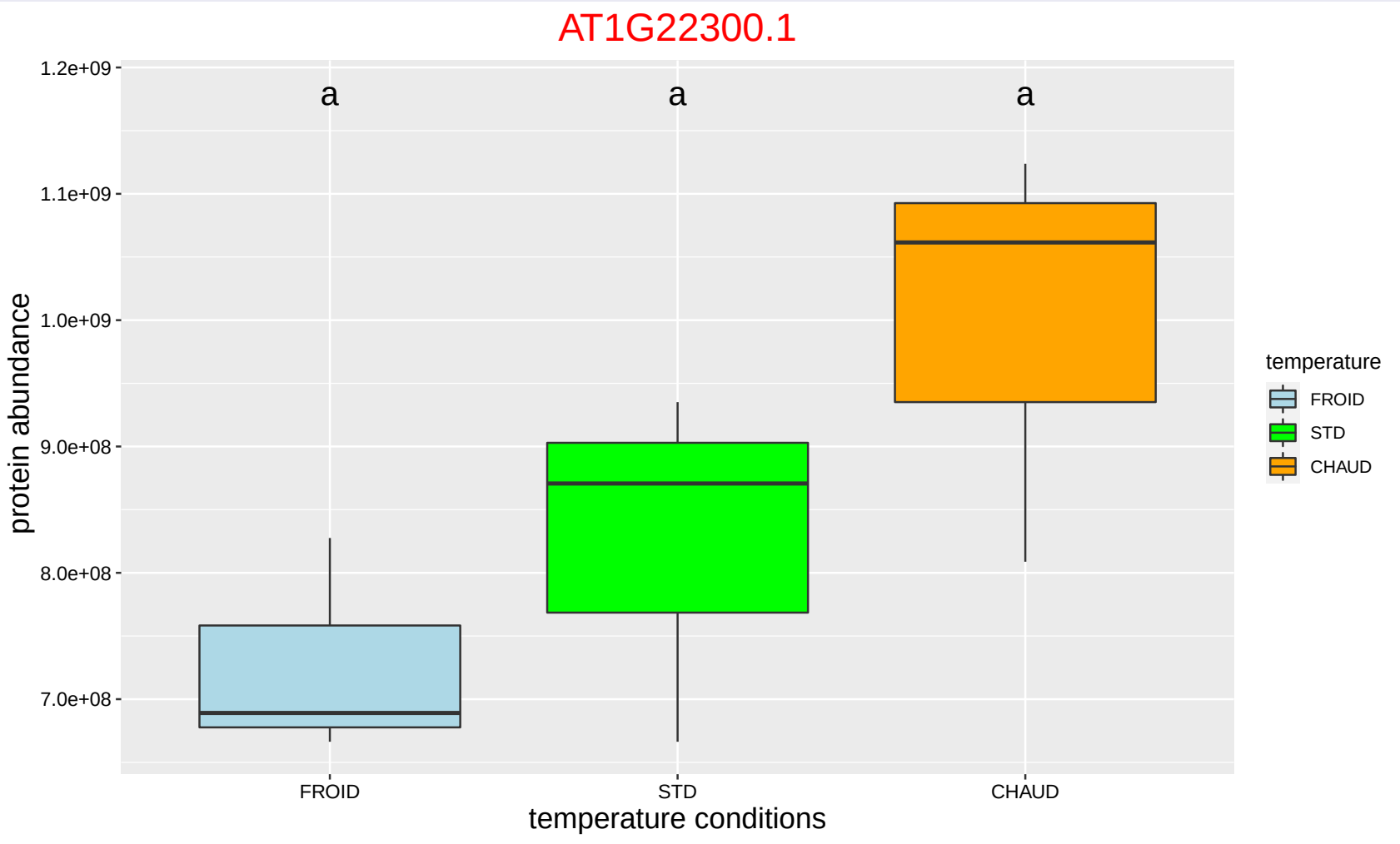
AT1G08830.1


AT1G08830.1
a
ab
b
3.2e+07
2.8e+07
2.4e+07
2.0e+07
1.6e+07
protein abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

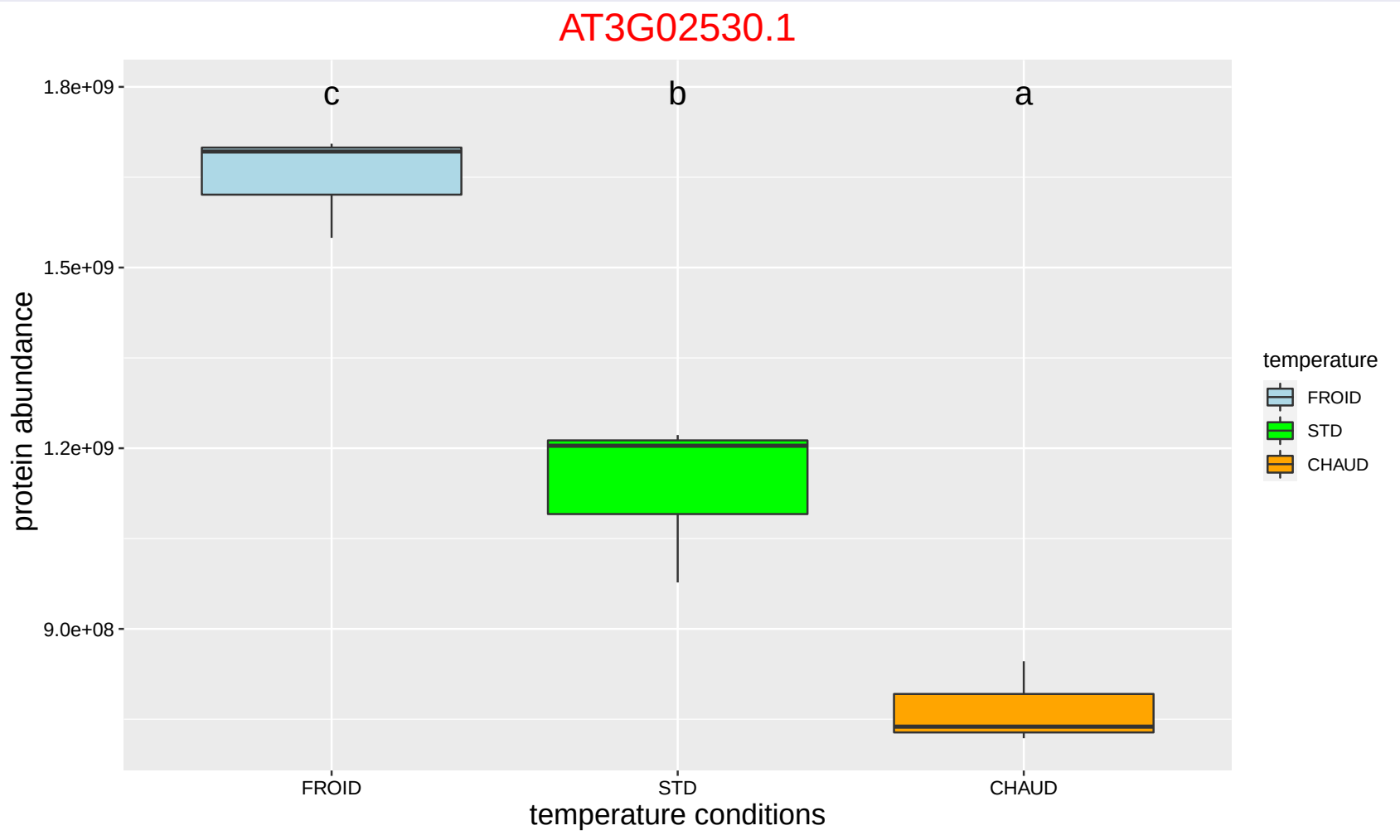
AT1G18500.1


AT1G18500.1
ab
b
a
2.0e+07
1.5e+07
1.0e+07
protein abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

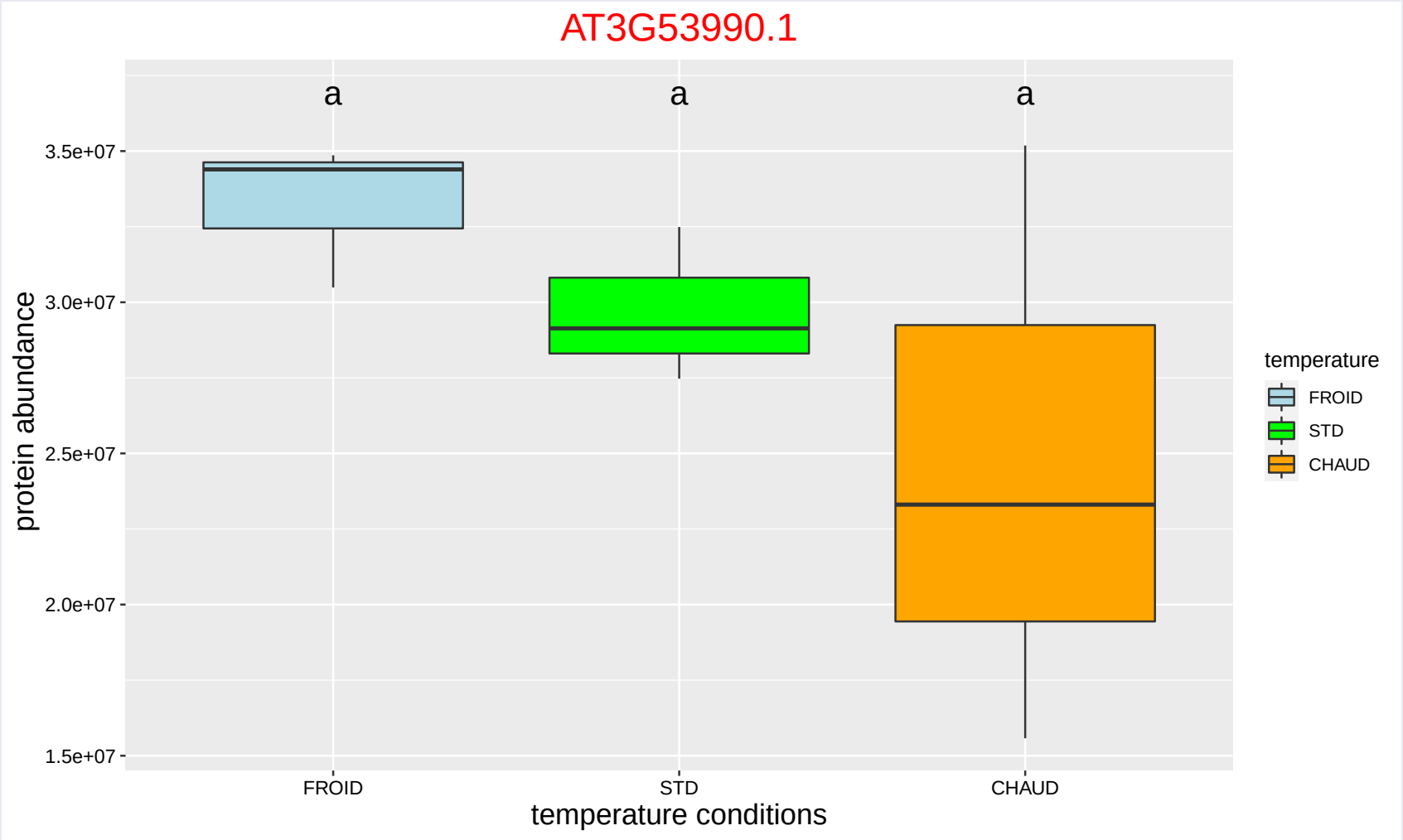
AT1G22300.1


AT1G22300.1
1.2e+09
1.1e+09
1.0e+09
9.0e+08
8.0e+08
7.0e+08
protein abundance
a
a
a
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

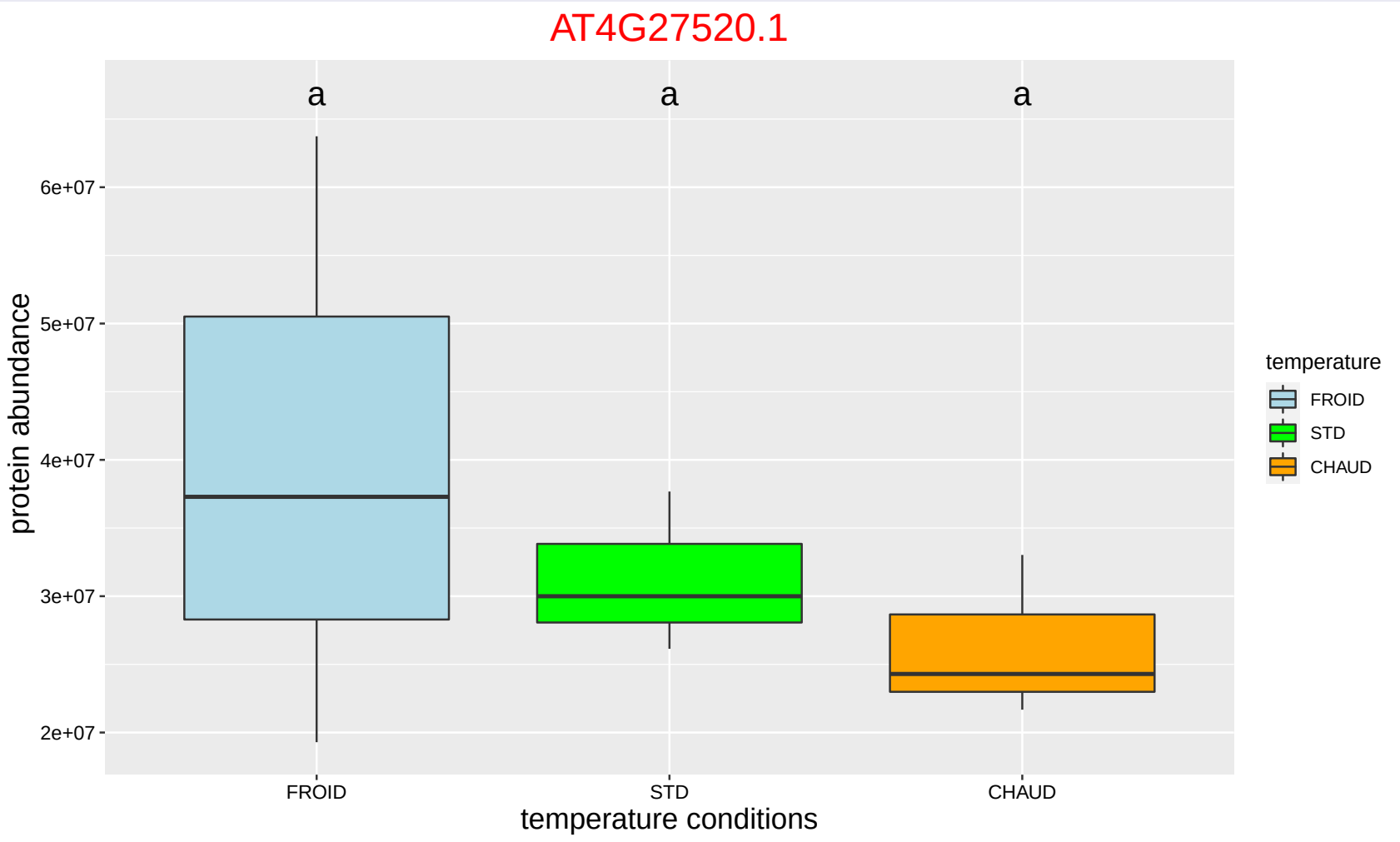
AT3G02530.1


AT3G02530.1
1.8e+09
1.5e+09
1.2e+09
9.0e+08
protein abundance
c
b
a
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

AT3G53990.1


AT3G53990.1
a
a
a
3.5e+07
3.0e+07
2.5e+07
2.0e+07
1.5e+07
protein abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

AT4G27520.1


AT4G27520.1
a
a
a
6e+07
5e+07
4e+07
3e+07
2e+07
protein abundance
FROID
STD
CHAUD
temperature conditions
temperature
FROID
STD
CHAUD

Exportation des Protéines sélectionnés par GLM Lasso

Le fichier **proteines_selection_lasso_0.95.csv** existe déjà.

Section 4

Métabolites KEGG

Section 5

Protéines ThaleMine, UniProt