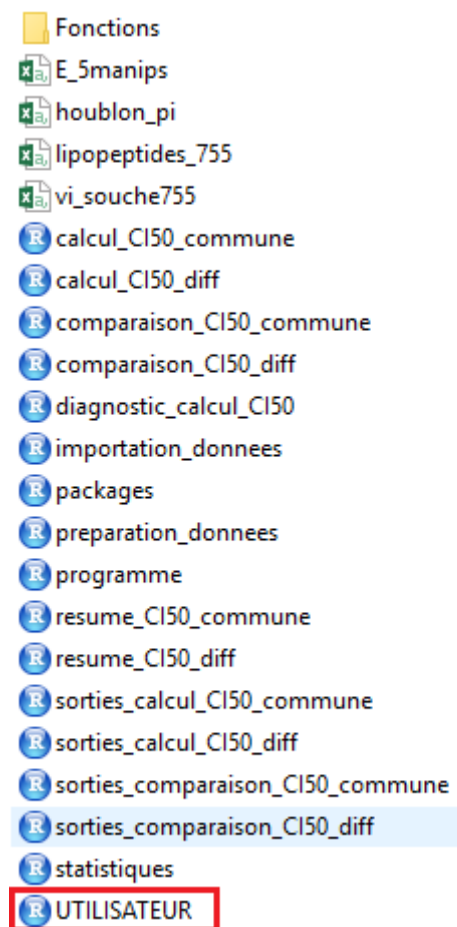


Instructions pour l'utilisation du programme R pour évaluer et comparer des néo-fongicides

Rédigé par Axel Belotti

I) Installation de R et du programme (première utilisation)

- 1) Installer R ou RStudio si ce n'est pas déjà fait.
- 2) Coller le dossier **Programme** dans le répertoire de votre choix.
- 3) Ouvrir le dossier **Programme**. Copier le fichier **UTILISATEUR.R** ailleurs sur le PC. Cela permettra de pouvoir récupérer le fichier initial en cas d'erreurs dans les modifications.

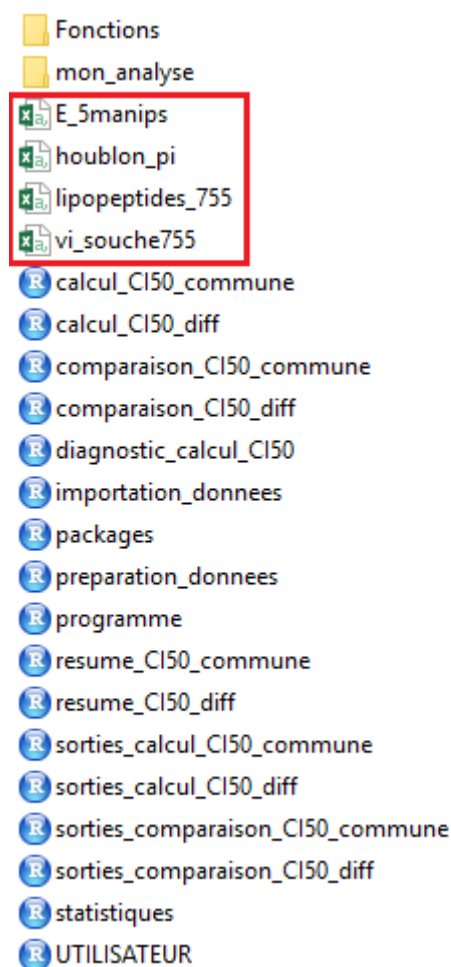


- 5) Les packages R suivant doivent être installés. Il faut les installer via la commande **install.packages()** à mettre dans la console. Par exemple, pour installer le package **minpack.lm**, il faut exécuter le code suivant dans la console : **install.packages("minpack.lm")**.

```
# LISTE DES PACKAGES DEVANT ETRE INSTALLES
# "Rcpp"
# "ggplot2"
# "scales"
# "ggthemes"
# "RColorBrewer"
# "boot"
# "minpack.lm"
# "doParallel"
# "dplyr"
# "nlstools"
```

II) Utilisation du programme

1) Le fichier de données en .csv à utiliser doit préalablement être ajouté au dossier **Programme**.



2) Ouvrir le fichier **UTILISATEUR.R**. Les champs suivants doivent être modifiés par l'utilisateur :





```

# DONNEES A ENTRER PAR L'UTILISATEUR (#### ??? ####)
# répertoire de travail
directory <- "C:/Users/axel.belotti/Desktop/R/Programme"      #### ??? ####
# nom du fichier contenant les données
file <- "lipopeptides_755.csv"                                #### ??? ####
# noms des colonnes utiles dans le fichier
conc <- "conc_mg_L" # concentrations                          #### ??? ####
OD <- "DO"          # densités optiques                      #### ??? ####
EO <- "HE"          # composés                               #### ??? ####
essay <- "manip"     # manipulations                         #### ??? ####
# labels pour les graphiques
#conc.unit <- "mg/L"                                         #### ??? ####
conc.label <- "concentration (mg/L)"                         #### ??? ####
conc.unit <- "mg/L"                                          #### ??? ####
OD.label <- "optical density"                                #### ??? ####
# paramètre graphique à augmenter quand le haut est mal représenté
opti.graph <- 100                                           #### ??? ####
# nombre de composés
nb.EO <- 5                                                  #### ??? ####
# nombre de manip
nb.essay <- 2                                               #### ??? ####
# nom du dossier qui va contenir les résultats de l'analyse
main.output <- "mon_analyse"                                #### ??? ####
# Choix méthodologies
# proportion pour la concentration inhibitrice
prop <- 50                                                  #### ??? ####
# CI50 partagée entre manip (TRUE ou FALSE)
same.IC50 <- TRUE                                           #### ??? ####
# étapes à réaliser (TRUE ou FALSE)
statistics.call <- TRUE # statistiques descriptives         #### ??? ####
estimation.call <- TRUE # calcul des CI50                   #### ??? ####
test.global.call <- FALSE # comparaison globale des CI50   #### ??? ####

```

Remarque : Seul le fichier **UTILISATEUR.R** doit être modifié par l'utilisateur et seuls les champs ci-dessus doivent être modifiés (à droite de <-).

- 3) Il faut ensuite sélectionner puis exécuter l'ensemble des lignes du fichier **UTILISATEUR.R**.
- 4) Dans le dossier **Programme**, on trouve maintenant un dossier **mon_analyse** qui contient jusqu'à quatre dossiers en fonction de ce qui a été demandé par l'utilisateur (étapes à réaliser).

-  calcul_CI50
-  comparaison_CI50
-  resume
-  statistiques_descriptives

Ce dossier contient quatre sous-dossiers contenant des graphiques et des tableaux correspondant à l'analyse statistique des données choisies.

III) Messages d'erreur ou avertissement / comportements étranges

En cas d'erreur du type "Erreur : calcul de CI50 ... impossible", cela signifie que le modèle n'est pas adéquat aux données. Cela peut parfois arriver lorsqu'il n'y a pas de points dans la pente. Il peut alors être intéressant de changer la valeur de **same.IC50** dans le fichier **UTILISATEUR.R** pour utiliser l'autre modèle ou de supprimer une partie des manipulations et/ou produits. En complément de ce message, un fichier **diagnostic.csv** peut être trouvé dans le dossier **calcul_CI50**. Ce fichier contient pour chaque produit et pour chaque manipulation des informations sur la possibilité ou non de calculer les paramètres du modèle. Cela peut indiquer quelle partie des données (produit / manip)

pose problème pour le calcul des CI50. Il peut alors être intéressant de supprimer ces produits / manip.

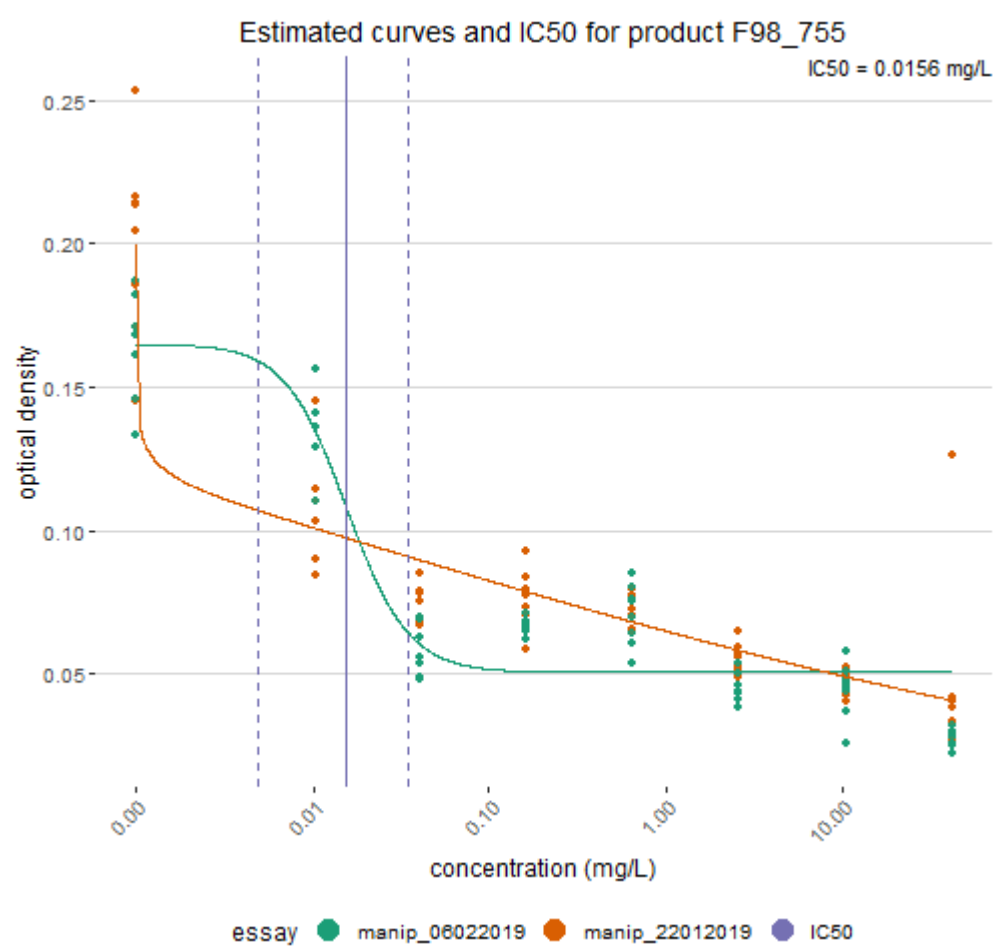
En plus des messages explicites en français, les messages suivants peuvent apparaître lors de l'utilisation du programme et sont à ignorer par l'utilisateur.

<p>Le chargement a nécessité le package : ggplot2 Le chargement a nécessité le package : scales Le chargement a nécessité le package : ggthemes Le chargement a nécessité le package : RColorBrewer Le chargement a nécessité le package : boot Le chargement a nécessité le package : doParallel Le chargement a nécessité le package : foreach Le chargement a nécessité le package : iterators Le chargement a nécessité le package : parallel Le chargement a nécessité le package : dplyr</p> <p>Attachement du package : 'dplyr'</p> <p>The following objects are masked from 'package:stats':</p> <p>filter, lag</p> <p>The following objects are masked from 'package:base':</p> <p>intersect, setdiff, setequal, union</p> <p>Le chargement a nécessité le package : nlstools</p> <p>'nlstools' has been loaded.</p> <p>IMPORTANT NOTICE: Most nonlinear regression models and data set examples related to predictive microbiology have been moved to the package 'nlsMicrobio'</p>	<p>Messages liés au chargement des packages</p>
<p>`stat_bin()` using `bin = 30`. Pick better value with `binwidth`.</p>	<p>Message lié à la construction de l'histogramme pour les résidus de la régression.</p>
<p>There were 50 or more warnings (use warnings to see the first 50)</p>	<p>Messages d'avertissement supplémentaires.</p>
<p>Le package 'ggplot2' avec la version R 3.5.3</p>	<p>Message liés au chargement d'un package</p>
<p>In nls.lm(par = start, fn = FCT, jac = jac, control = control, ... : lmdif: info = -1. Number of iterations has reached `maxiter' == 2.</p>	<p>Message lié à l'algorithme permettant de calculer les paramètres haut, bas, logCI50 et pente.</p>

La cohérence des résultats doit être contrôlée par l'utilisateur en utilisant notamment les sorties graphiques fournies par le programme.

Exemples :

- 1) Un intervalle de confiance avec une borne anormalement grande ou petite peut indiquer une incohérence des résultats obtenus pour ce produit et cette manipulation.
- 2) Dans le graphique suivant, la courbe orange obtenue pour la manipulation manip_22012019 indique que les parties bas et haut de la courbe dose-réponse n'ont pas pu être estimées.



En cas de questions, veuillez contacter Karin Sahmer.