**Cours LSTAT2340 – Traitement statistique de données Omiques**

**Projet 6: Prétraitement de données 1H-NMR**

**Objectif**

Dans ce projet, vous utilisez le package PEPSNMR pour prétraiter des données RMN et vous comparez, via différents indices, la qualité de votre prétraitement à un prétraitement manuel.

**Votre deliverable**

Vous déposez sur Moodle

1. Votre fichier de spectres prétraités avec le cycle PEPSNMR complet
2. Vos codes R Markdown de prétraitements et de calcul d’indices (MIC)
3. Le fichier html lié aux prétraitements avec le cycle PEPSNMR complet (attention ne dessinez pas trop de spectres pour que le fichier ne soit pas trop volumineux)
4. Le fichier html avec la comparaison (MIC) des différents prétraitements.

**Description des données**

* Les données de ce projet sont identiques à celles du projet P5 mais ici vous partez des données brutes (les FID) plutôt que des spectres déjà prétraités.
* Dans les 81 spectres de la base nous vous avons mis sur moodle (FID.zip) uniquement 27 FIDs : les FIDs de la semaine 1 pour les 3 patients. Il y a donc un échantillon par patient analysé 9 fois. Chaque FID est dans un répertoire. N’allez pas chipoter dedans, PEPSNMR se débrouillera pour aller chercher les infos où elles sont si vous donnez le chemin d’accès au répertoire où vous mettez les 27 sous répertoires.
* Vous disposez par ailleurs de la base de données Endo\_carrelatin\_manual\_27data.csv qui comprennent les mêmes spectres traités manuellement.

**Votre mission précise**

* Prétraitez ces données avec PEPSNMR de deux manières pour obtenir in fine des spectres à 238 buckets. (Vous partez du code PretraitNMR\_serum\_FULL\_PEPS.Rmd comme base pour faire cela). Utilisez toutes les options de prétraitement de PEPSNMR (vous pouvez jouer avec leurs paramètres.
* Vous obtenez à la sortie une matrice de spectres en format csv. Ouvrez là et allez ajouter une cellule qui manque dans le coin en haut à gauche et puis modifiez les noms des spectres en prenant les mêmes noms de spectres que ceux qui sont dans Endo\_carrelatin\_manual\_27data.csv. En principe les spectres sont dans un ordre identique.
* Comparez ces 2 matrices de spectres au prétraitement manuel (Endo\_carrelatin\_manual\_27data.csv). Vous utilisez pour cela le code Compare\_MIC\_humanSerum.Rmd (après avoir fait les modifications nécessaires) qui permet de les calculer.
* Vous ajoutez quelques lignes d’interprétation sur ce que vous observez : avez-vous réussi à faire mieux que le prétraitement manuel avec PEPSNMR ? Si pas, tentez de trouver quels spectres sont concernés et peut-être quelle phase de PEPS n’a pas bien fonctionné. Et si PEPS a mieux fonctionné mais pas le prétraitement manuel essayez de localiser où.

**Délais**

Votre travail doit être remis le lundi de la semaine 9 (ou avant bien-sûr). Vous pouvez nous envoyer des questions durant les congés de Pâques.