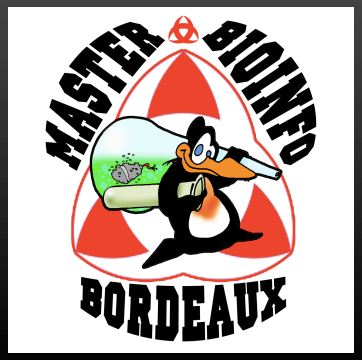


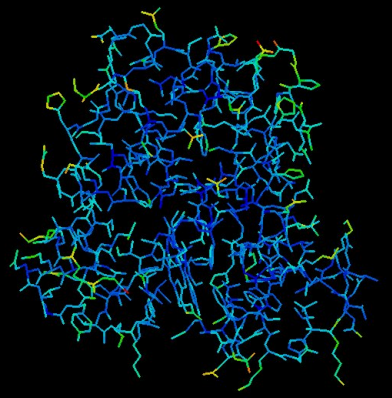
DATAMINING : CLASSIFICATION DE PROTÉINES

Détermination d'une classification de protéines à partir de grands jeux de données.

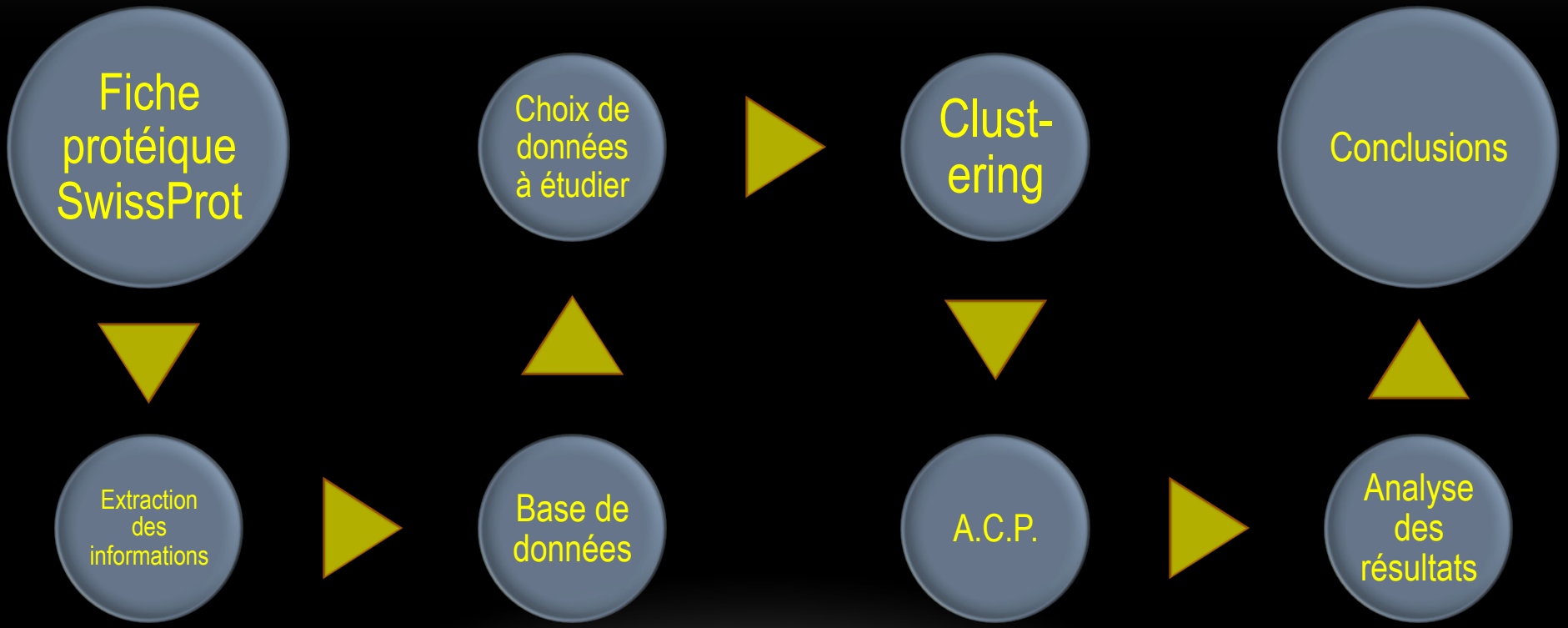
Merce Clémentine Beauquis Sébastien
Gilbert Florian
Hugo Campbell Sills Rai Ghadi

INTRODUCTION

- ✓ Déterminer différentes classes de protéines, à partir de grands jeux de données en utilisant des techniques de datamining
- ✓ Protéines : Macromolécule biologique composée d'un enchaînement d'acides aminés, ayant une activité biologique.
- ✓ Nous avons fait le choix de réaliser notre étude seulement sur sur les enzymes



1. PIPE-LINE D'ÉTUDE



1.1 ELABORATION DE LA BASE DE DONNÉES

1.2 FICHES SWISSPROT ET EXTRACTION DES DONNÉES

- ✓ Récupération des fiches grâce à un script Bio-Python
- ✓ Extraction des données choisies grâce à BioJava

Exemple de code BioJava :

```
SimpleNamespace namespace = new SimpleNamespace("biojava");
RichSequenceIterator richSequenceIterator =
RichSequence.IOTools.readGenbankProtein(bufferReader, namespace);
while (richSequenceIterator.hasNext()) {
        RichSequence richSequence = richSequenceIterator.nextRichSequence();
        nomProteine=richSequence.getName();
        sequence = this.genBank.seqString();
}
```

1.3 REMPLISSAGE DE LA BASE DE DONNÉES

- ✓ Utilisation d'une instance de JPA (Java Persistance API), éclipseLink
- ✓ Facilité de mise en place et rapidité à appréhender l'API

Exemple de code :

```
EntityManagerFactory entityManagerFactory =Persistence.createEntityManagerFactory("dataMining");
EntityManager entityManager = entityManagerFactory.createEntityManager();
entityManager.getTransaction().begin();
if (entityManager.find(EntryInformation.class, entryInformation.getIdProtein())!=null){
                entityManager.merge(entryInformation);
}else{
                entityManager.persist(entryInformation.getEntryInformation());
}
entityManager.getTransaction().commit();
entityManager.close();
```

1.4 CHOIX DES DONNÉES À ÉTUDIER ET CLUSTERING

- ✓ Étude basée sur la possible corrélation entre la composition en acides aminés d'une enzyme avec la présence de structure secondaire ou de domaine identifiable de cette molécule.
- ✓ Les clusters sont réalisés en classant les protéines en groupe logique et de taille égale

1.5 ANALYSES EN COMPOSANTES PRINCIPALES

- ✓ Réalisée grâce à un script Java trouvé sur _____
- ✓ Produit des fichiers de sortie comportant:
  - La matrice de la somme des carrés et produits en croix
  - Les eigens Vectors
  - Les eigens values de chaque vecteur
  - Ainsi que les coordonnées de chaque point pour les représenter sur les axes

1.6 REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DES RÉSULTATS D'ACP

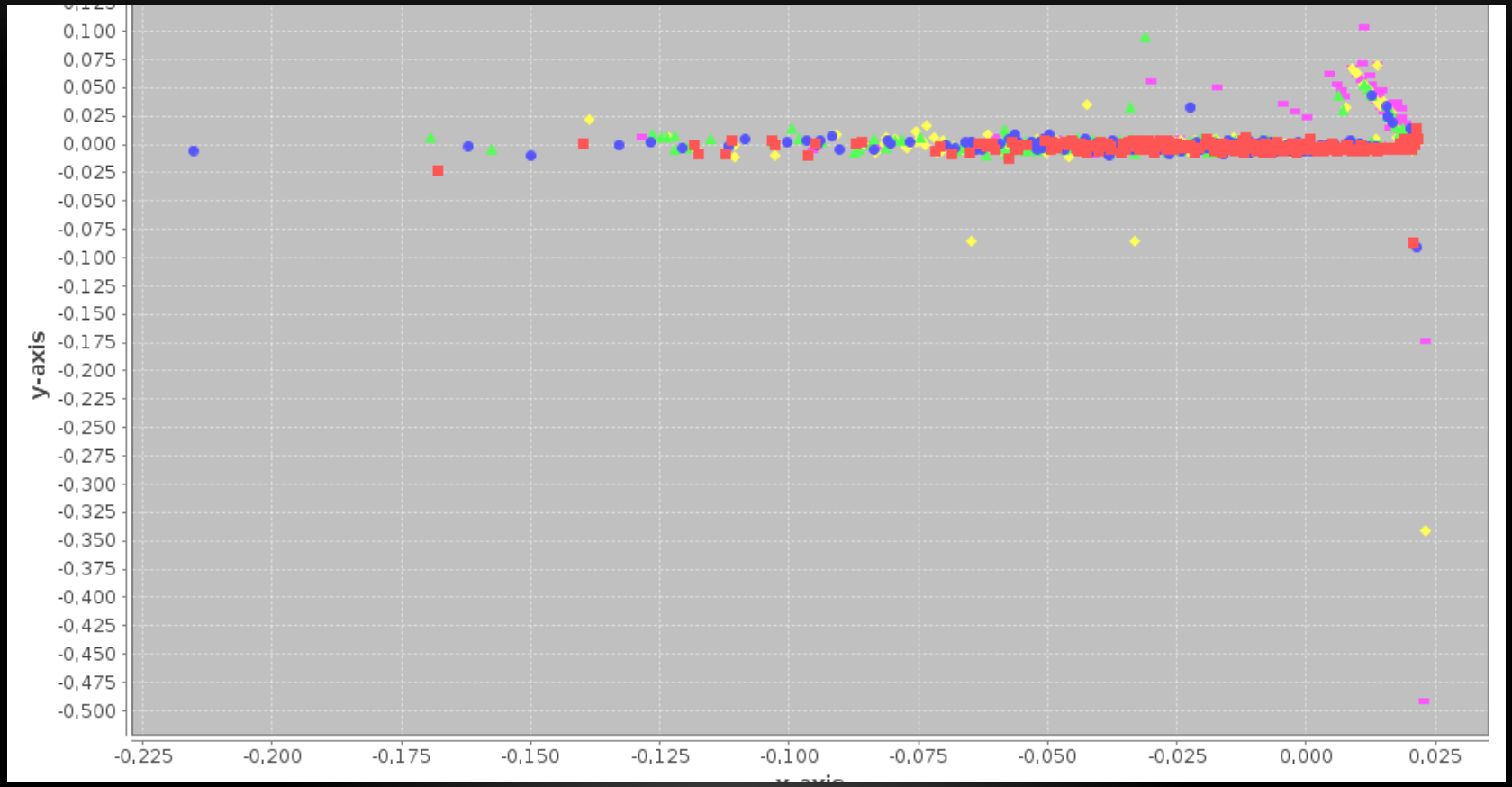
- ✓ Les résultats d'ACP sont représentés grâce à la bibliothèque JFreeChart.
- ✓ Facilité d'approche de la bibliothèque, ainsi que multiple possibilités

Exemple de code:

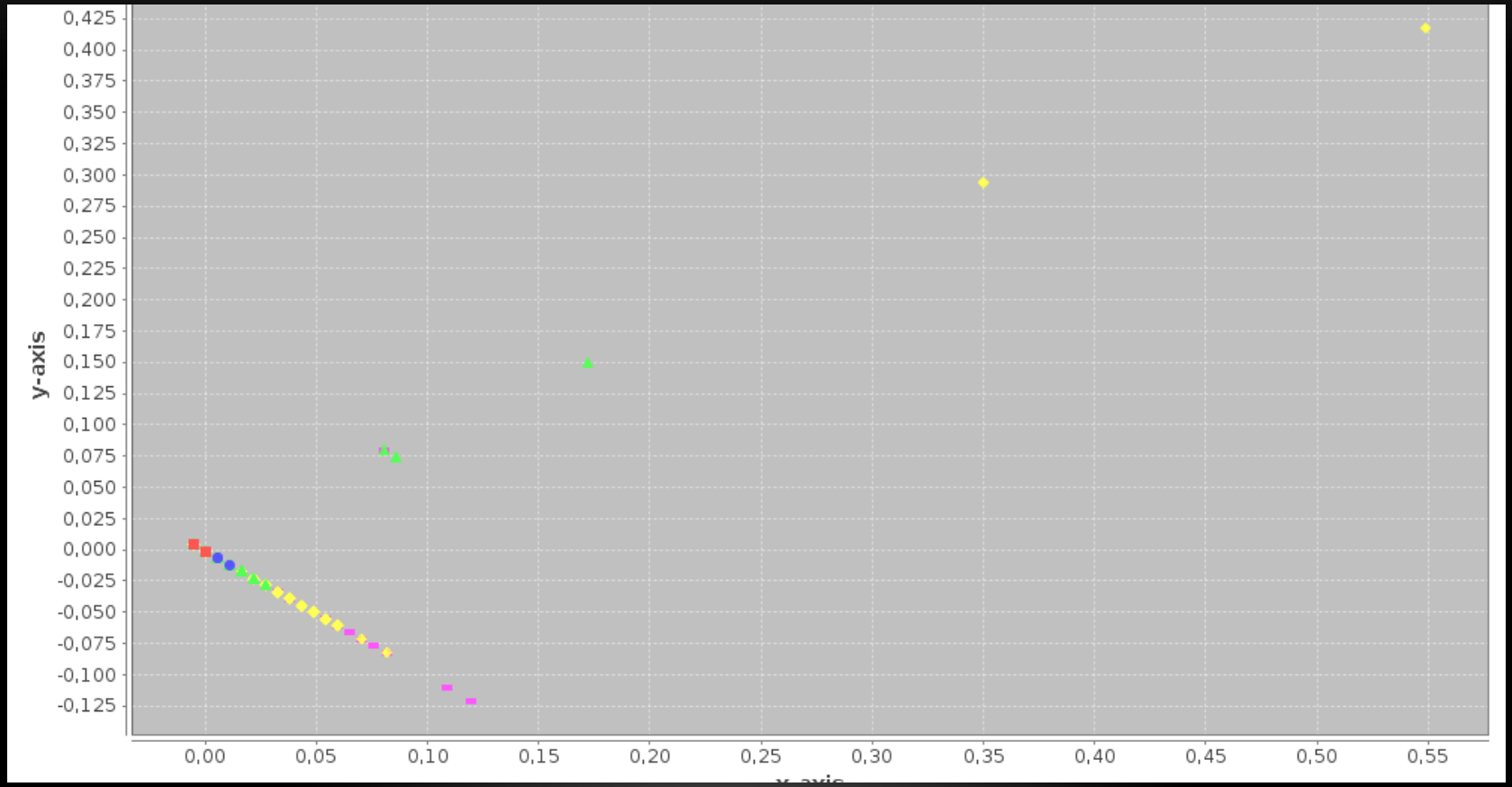
```
YSeries series = new XYSeries("Average Size");
series.add(20.0, 10.0);
series.add(40.0, 20.0);
series.add(70.0, 50.0);
XYDataset xyDataset = new XYSeriesCollection(series);
JFreeChart chart = ChartFactory.createAreaXYChart
                ("Sample XY Chart",  // Title
                 "Height",           // X-Axis label
                 "Weight",           // Y-Axis label
                 xyDataset,          // Dataset
                 true               // Show legend
                );
```

2. ANALYSE DES RÉSULTATS

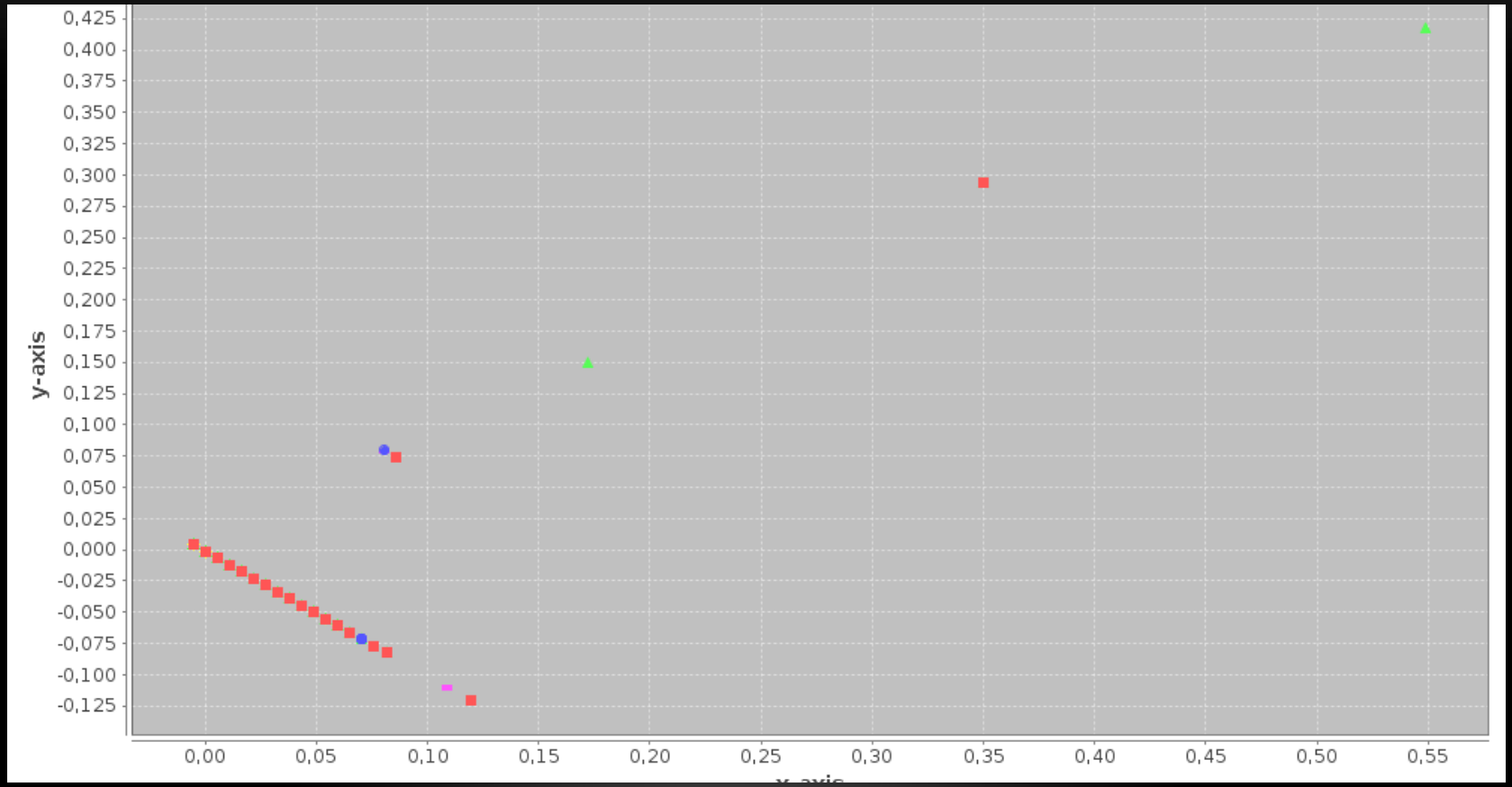
2.1 HYDROPHOBICITÉ DE L'ENZYME VS DOMAINES ET STRUCTURES SECONDAIRES



2.2 NOMBRE D'HÉLICES VS DOMAINES



2.3 NOMBRE DE FEUILLETS VS DOMAINES



CONCLUSION