M2 Mycologie

Outils bioinformatiques



Galaxy

- préférer le serveur Europe : https://usegalaxy.eu
- créer un compte pour le transfert de fichiers et les notifications
- vérifier disponibilité des données partagées ("data only...")
- temps de calcul variable (queue, batch job intercurrents, événements), sensibilité aux paramètres par défaut, disponibilité des utilitaires

Quelques ordres de grandeur

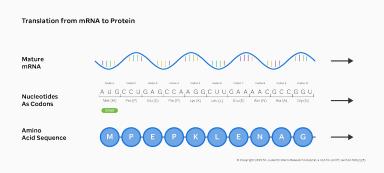
Podospora anserina

- génome 36 Mb (Fasta)
- données de séquençage 2 x 500-800 Mb (Fastq)
- 10k gènes annotés
- assemblage nouvelles souches : entre 4 et 8h (12 coeurs 3.5 GHz)
- phylogénie ITS seuls : 4h (phyml)
- phylogénie codes barres : 12 à 15h (phyml)

Implications informatiques

- serveur de calcul avec beaucoup de RAM (assemblage) et GPU (phylogénie)
- écriture de scripts shell et Python (ou R) pour les prétraitements et le développement de "workflow"
- serveur de stockage : 400 génomes ADN (+ 96 protéines) = 24 Go (en 2022)
- scripts de recherche/blast automatique (NCBI, JGI, etc.)

Recherche de motifs



- blast (shell ou en ligne au NCBI)
- scripts (Python, Perl, R, Bash, etc.)

Alignement de séquence

```
--MIDAKSEHKIAPWKIEEVNALKELLKSANVIALIDMMEVPAVOLOEIRDK
           ---METKYKAHVAPWKIEEVKTLKGLIKSKPVVAIVDMMDVPAPOLOEIRDK
RLAO METJA
                  -MAHVAEWKKKEVEELANLIKSYPVIALVDVSSMPAYPLSQMRRL
RLAO PYRAB
                  -MAHVAEWKKKEVEELAKLIKSYPVIALVDVSSMPAYPLSOMRRL
RLAO PYRHO
RLAO PYRFU
                  -MAHVAEWKKKEVEELANLIKSYPVVALVDVSSMPAYPLSOMRRL
RLAO PYRKO
                  -MAHVAEWKKKEVEELANTIKSYPVIALVDVAGVPAYPLSKMRDK
RLAO HALMA MSAESERKTETIPEWKQEEVDAIVEMIESYESVGVVNIAGIPSROLODMRRD
          MSESEVRQTEVIPQWKREEVDELVDFIESYESVGVVGVAGIPSROLQSMRRE
RLAO HALVO
RLAO HALSA
           MSAEEORTTEEVPEWKROEVAELVDLLETYDSVGVVNVTGIPSKOLODMRRG
RLAO THEAC
                   -MKEVSQQKKELVNEITORIKASRSVAIVDTAGIRTROIODIRGK
                  -MRKINPKKE IVSELAQDITKSKAVAIVDIKGVRIRQMQDIRAK
RLAO THE VO
                  -MTEPAOWKIDFVKNLENEINSRKVAAIVSIKGLRNNEFOKIRNS
RLAO PICTO
```

- clustal
- mafft (*)
- muscle¹
- visualisateurs : jalview, seaview

¹https://bioinformaticsreview.com/20151018/multiple-sequence-alignment/

Mapping et assemblage (de novo)



- bowtie2
- bwa²
- unicycler (spades) (*)
- abyss³

²Benchmarking short sequence mapping tools

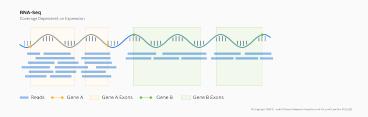
³A biologist's guide to de novo genome assembly using next-generation sequence data

Phylogénie moléculaire



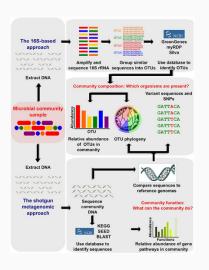
- fasttree
- IQ-TREE (*)
- RaXML
- MEGA
- NGPhylogeny
- visualisateurs : seaview (phylip), figtree, itol (payant)

RNA-Seq



- TopHat2 + HTSeq (ou assimilé)
- kallisto + DESeq2 (R) (*)
- Blast2Go (payant, version académique limitée)

Métagénomique



- species^a vs. gene-centric
- FROGS (workflow Galaxy, base de données ITS)
- Kraken (bases de données pré-existantes) (*)

^aChapter 12: Human Microbiome Analysis, PLoS Computational Biology 8(12):e1002808

Références bibliographiques

- 1. Ernesto Picardi (2021) RNA Bioinformatics, Springer
- 2. Ziheng Yang & Bruce Rannala (2012) 'Molecular phylogenetics: principles and practice', *Nature Reviews Genetics* 13, 303–314
- 3. Scot A. Kelchner & Michael A. Thomas (2006) 'Model Use in Phylogenetics: Nine Key Questions', *TRENDS in Ecology and Evolution* 22, 87–94
- 4. Mostafa M. Abbas, Qutaibah M. Malluhi & Ponnuraman Balkrishnan (2014) 'Assessment of de novo assemblers for draft genomes: a case study with fungal genomes', *BMC Genomics* 15, 1–12
- Bo Li, Victor Ruotti, Ron M. Stewart, James A. Thomson & Colin N. Dewey (2010) 'RNA-Seq gene expression estimation with read mapping uncertainty', *Bioinformatics* 26, 493–500