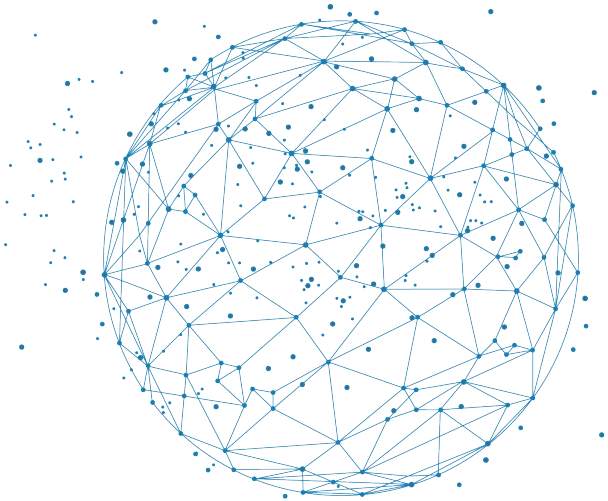
Formation EBAII Niveau 2 - Science ouverte et principes FAIR dans un projet de bioinformatique

Thomas Denecker, Charlotte Berthelier



Science ouverte et principes FAIR dans un projet de bioinformatique

Comment rendre un projet bioinformatique plus reproductible ?

Roscoff, 4-9 juin 2023

Charlotte Berthelier, Thomas Denecker & l'équipe formation de l'IFB

Une présentation sous le signe de l'Open

Attribution - Partage dans les Mêmes Conditions 2.0 France (CC BY-SA 2.0 FR)

This is a human-readable summary of (and not a substitute for) the license. Avertissement.

Vous êtes autorisé à :

Partager — copier, distribuer et communiquer le matériel par tous moyens et sous tous formats

Adapter — remixer, transformer et créer à partir du matériel pour toute utilisation, y compris commerciale.

L'Offrant ne peut retirer les autorisations concédées par la licence tant que vous appliquez les termes de cette licence.

Selon les conditions suivantes :

Attribution — Vous devez créditer l'Œuvre, intégrer un lien vers la licence et indiquer si des modifications ont été effectuées à l'Oeuvre. Vous devez indiquer ces informations par tous les moyens raisonnables, sans toutefois suggérer que l'Offrant vous soutient ou soutient la façon dont vous avez utilisé son Oeuvre.

Partage dans les Mêmes Conditions — Dans le cas où vous effectuez un remix, que vous transformez, ou créez à partir du matériel composant l'Oeuvre originale, vous devez diffuser l'Oeuvre modifiée dans les même conditions, c'est à dire avec la même licence avec laquelle l'Oeuvre originale a été diffusée.

Pas de restrictions complémentaires — Vous n'êtes pas autorisé à appliquer des conditions légales ou des mesures techniques qui restreindraient légalement autrui à utiliser l'Oeuvre dans les conditions décrites par la licence.

https://creativecommons.org/licenses/by-sa/2.0/fr/

=

Un contenu trouvable simplement, accessible, décrit et réutilisable

Les slides

https://doi.org/10.6084/m9.figshare.23275349.v3

Le code

https://github.com/IFB-ElixirFr/FAIR_EBAII_n2

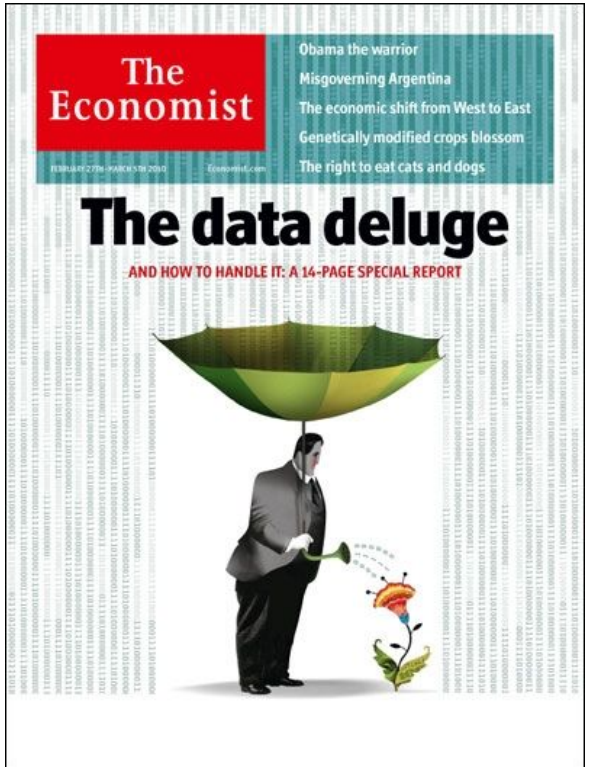
DOI 10.5281/zenodo.4800637

Site web

https://ifb-elixirfr.github.io/FAIR_EBAII_n2/

Contexte

De plus en plus de données



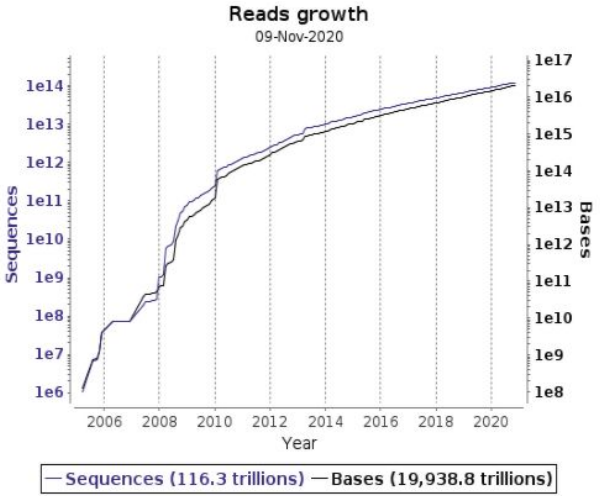
Data is the new oil
Clive Humby

Data is the new oil? No: Data is the new soil.
David Mccandless

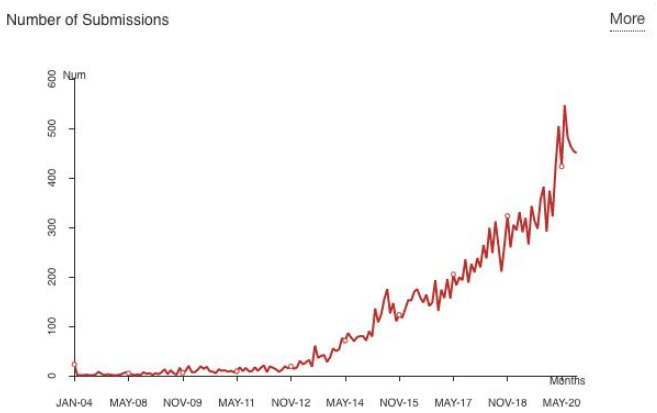
Quelques chiffres au quotidien

https://www.domo.com/data-never-sleeps#

En biologie, c'est pareil !



ENA
European Nucleotide Archive



PRIDE
PRoteomics IDEntifications Database

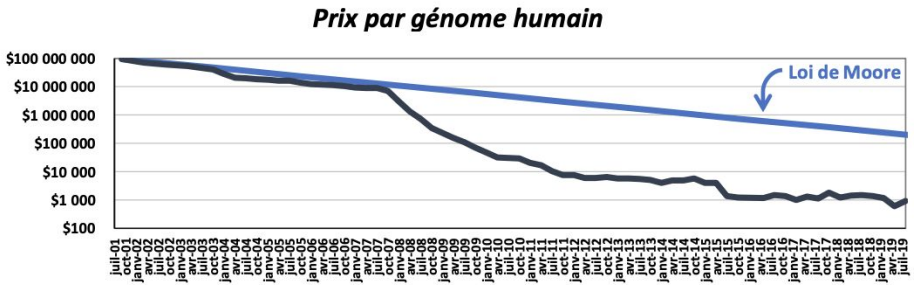
Data deluge en biologie

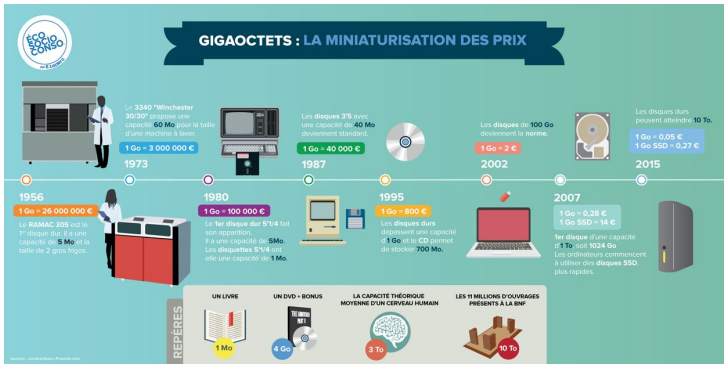
Type de données	Base de données	Volumes de données
Mesures de l'expression des gènes	ArrayExpress	72 938 experiments 2 429 810 assays 56,68 TB of archived data
Mesures de l'expression des gènes	GEO	5 570 704 échantillons
Structure 3D des protéines	PDB	177 009 Structures
Séquence nucléotidiques	GenBank	241 830 635 séquences et 1 731 302 248 418 bases
Données d'identification ou de quantification des protéines	Pride	580 917 268 spectres de masse
Séquence nucléotidiques (COVID-19)	GISAID (EpiCoV)	15 158 725 séquences virales

MAJ : Mars 2023

Comment ?

Cout





Vitesse

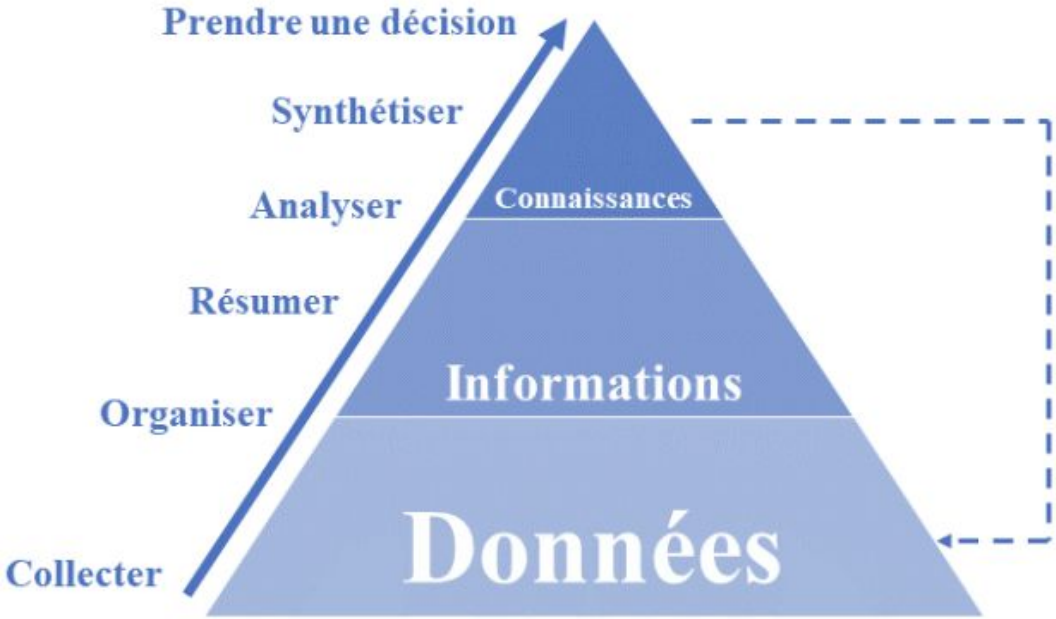
Dans les années 90

4 ans pour le premier milliard de nucléotides du génome humain

Aujourd'hui

Le génome complet en moins de 24h

Pourquoi ? Créer de la connaissance !



Pourquoi générer toujours plus de données ?

Pourquoi ne pas simplement exploiter les données déjà disponibles ?

- La description des données est encore trop souvent incomplète ;
- Les données ne sont pas facilement récupérables ;
- Il n'y a souvent pas de contrôle systématique des erreurs par des experts ;
- Les données ne sont pas générées exactement de la façon souhaitée ;
- Une question de confiance.

Conclusion : Plus simple ? Plus rapide ? Plus sûr ?

Une question de confiance

Lin, D., Crabtree, J., Dillo, I. et al. The TRUST Principles for digital repositories. Sci Data 7, 144 (2020). https://doi.org/10.1038/s41597-020-0486-7

Les 3 “R” de la confiance

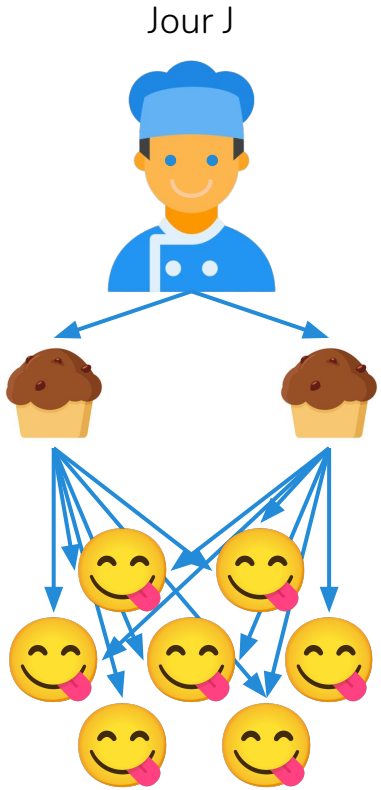
éplicabilité

épétabilité

eproductibilité

Souvent utilisées mais souvent confondues et notamment par la langue (Plesser, 2018)

Réplicabilité

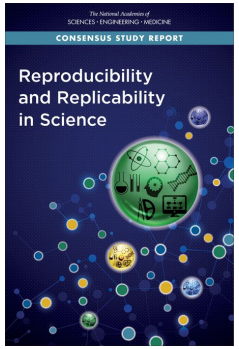



NORME INTERNATIONALE ISO 5725-4

Exactitude (justesse et fidélité) des résultats et méthodes de mesure —

Partie 4 Méthodes de base pour la détermination de la justesse d'une méthode de mesure normalisée

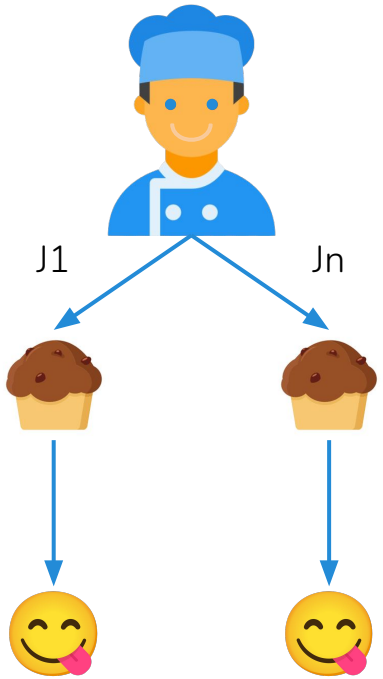
“L’étroitesse de l’accord entre les résultats individuels successifs obtenus sur le même échantillon soumis à l’essai dans le même laboratoire et dans les conditions suivantes : même analyste, même appareil, même jour ”



https://doi.org/10.17226/25303

“Obtaining consistent results across studies aimed at answering the same scientific question, each of which has obtained its own data”

Répétabilité

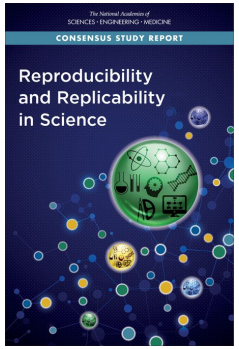



NORME INTERNATIONALE ISO 5725-4

Exactitude (justesse et fidélité) des résultats et méthodes de mesure —

Partie 4: Méthodes de base pour la détermination de la justesse d'une méthode de mesure normalisée

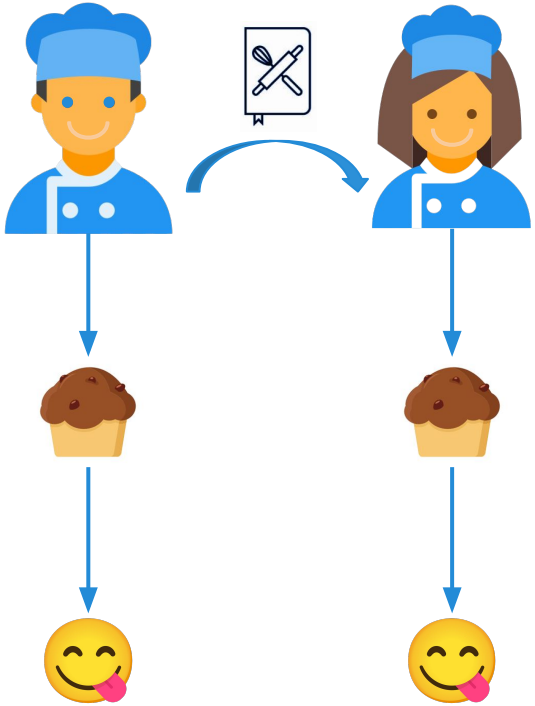
“L’étroitesse de l’accord entre les résultats individuels obtenus sur le même échantillon soumis à l’essai dans le même laboratoire et dont au moins l’un des éléments suivants est différent : l’analyste, l’appareil, le jour”



“*The measurement can be obtained with stated precision by the same team using the same measurement procedure, the same measuring system, under the same operating conditions, in the same location on multiple trials. For computational experiments, this means that a researcher can reliably repeat her own computation ”*

https://doi.org/10.17226/25303

Reproductibilité




NORME INTERNATIONALE

ISO 5725-4

Exactitude (justesse et fidélité) des résultats et méthodes de mesure —

Partie 4: Méthodes de base pour la détermination de la justesse d'une méthode de mesure normalisée

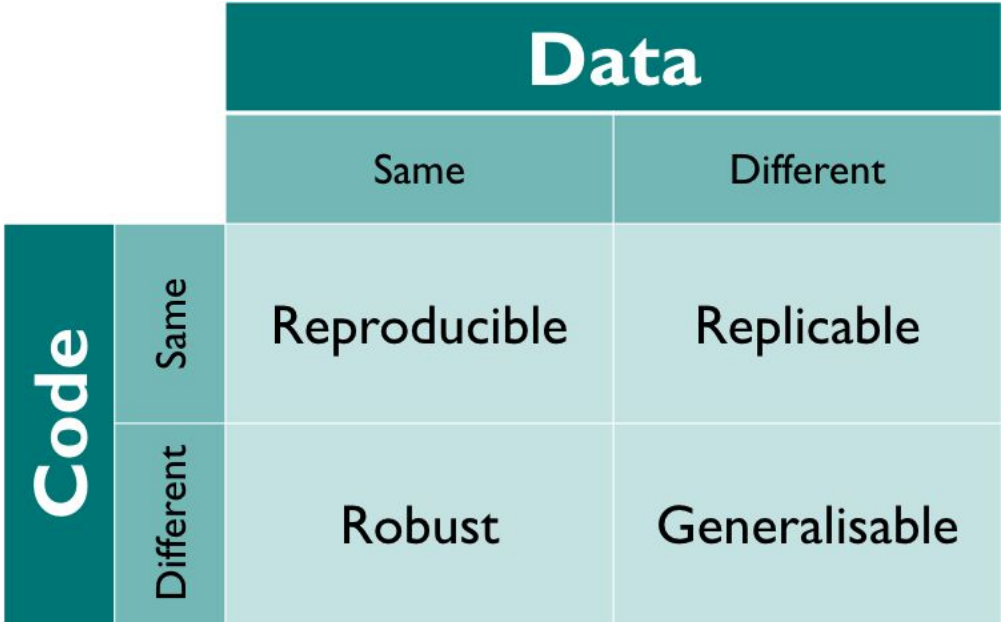
ISO

“L’étroitesse de l’accord entre les résultats individuels obtenus sur le même échantillon soumis à l’essai dans des laboratoires différents et dans les conditions suivantes : analyste différent, appareil différent, jour différent ou même jour”

Association for Computing Machinery

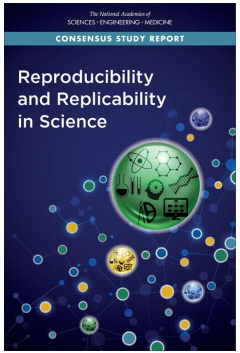
“Obtaining consistent computational results using the same input data, computational steps, methods, code, and conditions of analysis”

En résumé



https://doi.org/10.6084/m9.figshare.5443201.v1,

Recommandations pour être reproductible



https://doi.org/10.17226/25303

Description de la partie expérimentale

Méthodes, instruments, procédures, mesures, conditions expérimentales

Description de la partie computationnelle

Etapes de l'analyse des données et choix techniques

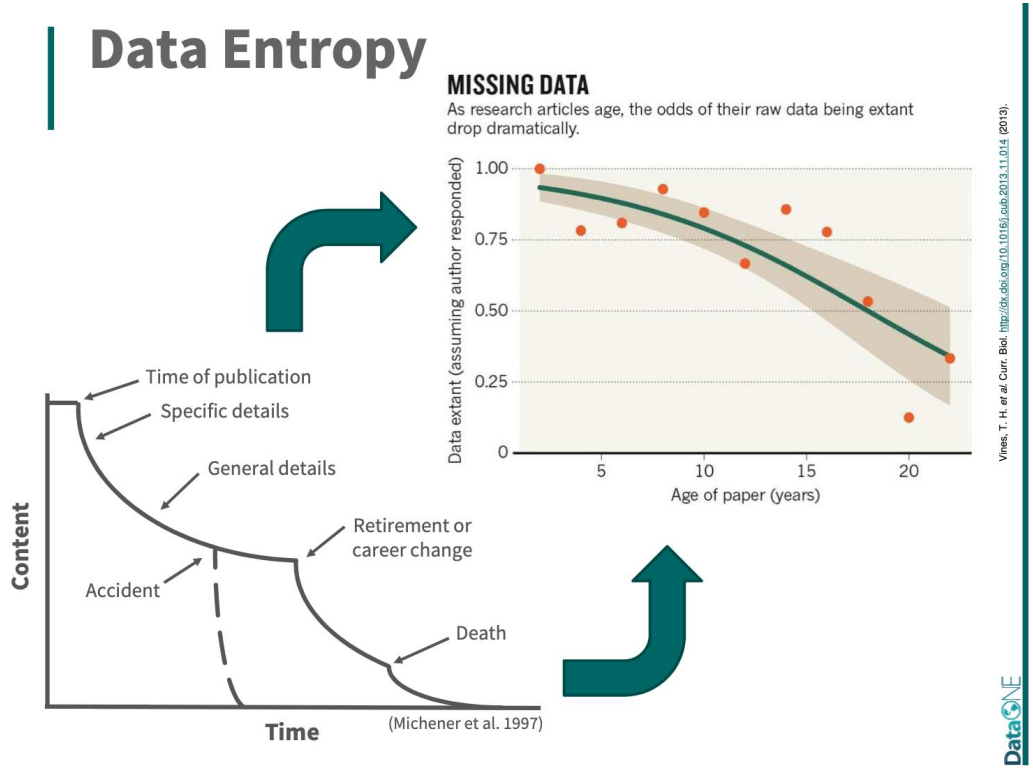
Description de la partie statistique

Décisions analytiques : quand, comment, pourquoi

Discussion des choix et des résultats obtenus

Et dans les faits ?

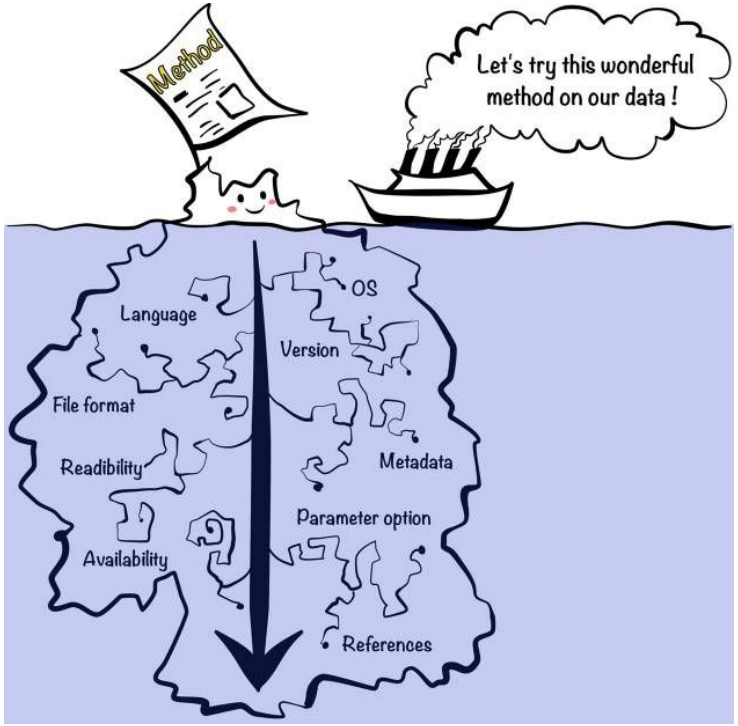
Les données face aux ravages du temps



Récupérer les données

https://youtu.be/66oNv_DJuPc

Reproduire les données



Kim et al, 2018

https://dx.doi.org/10.1093%2Fgigascience%2Fgiy077

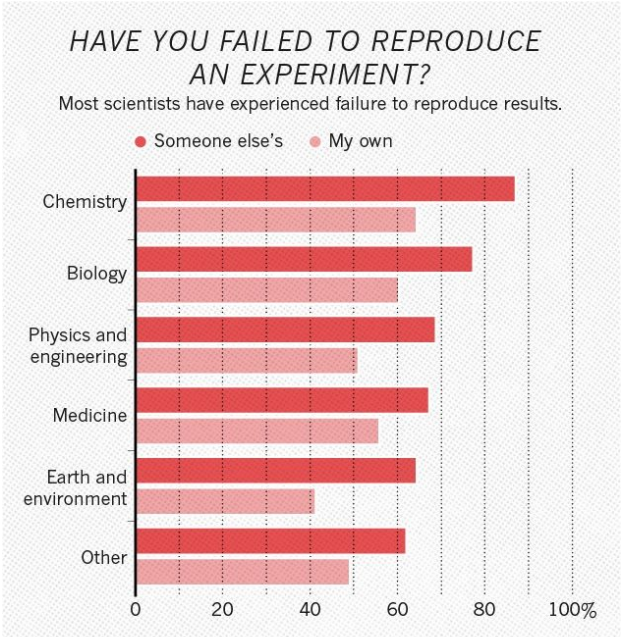
En biologie

70 %

des analyses en biologie expérimentale ne sont

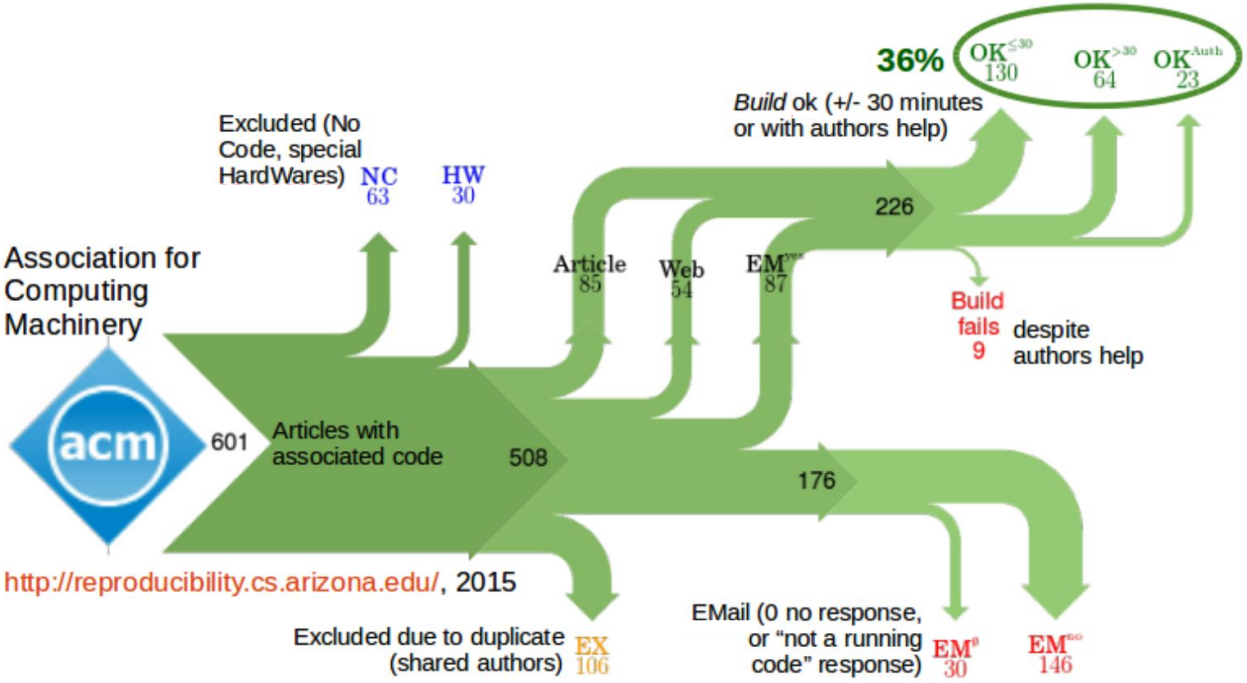
pas reproductibles

Ten Years Reproducibility Challenge : êtes vous capables de refaire vos analyses d'il y a 10 ans ?



Monya Baker, 2016

En informatique



(Collberg et al. 2015)

La bioinformatique n'y échappe pas…

Impossibilité d'installer des outils

- OS non compatible
- Dépendance plus disponible / plus valide

Mise à jour de l'outil rendant inutilisable les codes

- Python 2 et Python 3 !
- Changement des arguments des fonctions utilisées (R)

Impossibilité de reproduire les résultats de l'analyse computationnelle

- IDE : version stable du langage différente selon l'OS (Rstudio)
- Version des packages

(Perkel, Nature, 2020)

Comment rendre un projet bioinformatique plus reproductible ?

Comment ?

cirad
LA RECHERCHE AGRONOMIQUE POUR LE DÉVELOPPEMENT
donnees-recherche@cirad.fr

PARTIE I

Du point de vue de l'analyse des données

Être plus FAIR !

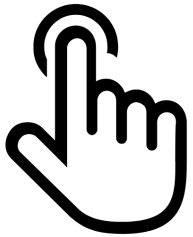
Utiliser des outils et des méthodes pour produire des résultats liés à la problématique scientifique tout en étant FAIR

cirad
LA RECHERCHE AGRONOMIQUE POUR LE DÉVELOPPEMENT
donnees-recherche@cirad.fr

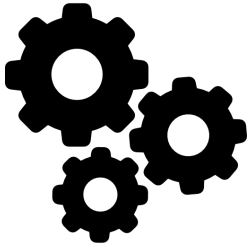
Des principes hérités des principes FAIR data

Findable

Accessible



Interoperable



Reusable

Des principes hérités des principes FAIR data

F

A

I

R

Des principes hérités des principes FAIR data

Facile à trouver (pour l'Homme et la machine)

- Identifiant unique (un DOI par exemple)
- Métadonnées décrivant l'analyse et les outils ; elles sont FAIR, consultables et indexables
- Protocoles d'analyses simples à trouver (GitHub pages)

A

I

R

Des principes hérités des principes FAIR data

Facile à trouver (pour l'Homme et la machine)

- Identifiant unique (un DOI par exemple)
- Métadonnées décrivant l'analyse et les outils ; elles sont FAIR, consultables et indexables
- Protocoles d'analyses simples à trouver (GitHub pages)

Accessible

- Ressources disponibles (GitHub, Dockerub) et outils tiers *open source* (conda)
- Les métadonnées sont accessibles, même lorsque le logiciel n'est plus disponible

I

R

Des principes hérités des principes FAIR data

Facile à trouver (pour l'Homme et la machine)

- Identifiant unique (un DOI par exemple)
- Métadonnées décrivant l'analyse et les outils ; elles sont FAIR, consultables et indexables
- Protocoles d'analyses simples à trouver (GitHub pages)

Accessible

- Ressources disponibles (GitHub, Dockerub) et outils tiers *open source* (conda)
- Les métadonnées sont accessibles, même lorsque le logiciel n'est plus disponible

Interopérable

- Coopération des outils (snakemake, docker) aussi bien en local que sur serveurs (cloud ou cluster)

R

Des principes hérités des principes FAIR data

Facile à trouver (pour l'Homme et la machine)

- Identifiant unique (un DOI par exemple)
- Métadonnées décrivant l'analyse et les outils ; elles sont FAIR, consultables et indexables
- Protocoles d'analyses simples à trouver (GitHub pages)

Accessible

- Ressources disponibles (GitHub, Dockerub) et outils tiers *open source* (conda)
- Les métadonnées sont accessibles, même lorsque le logiciel n'est plus disponible

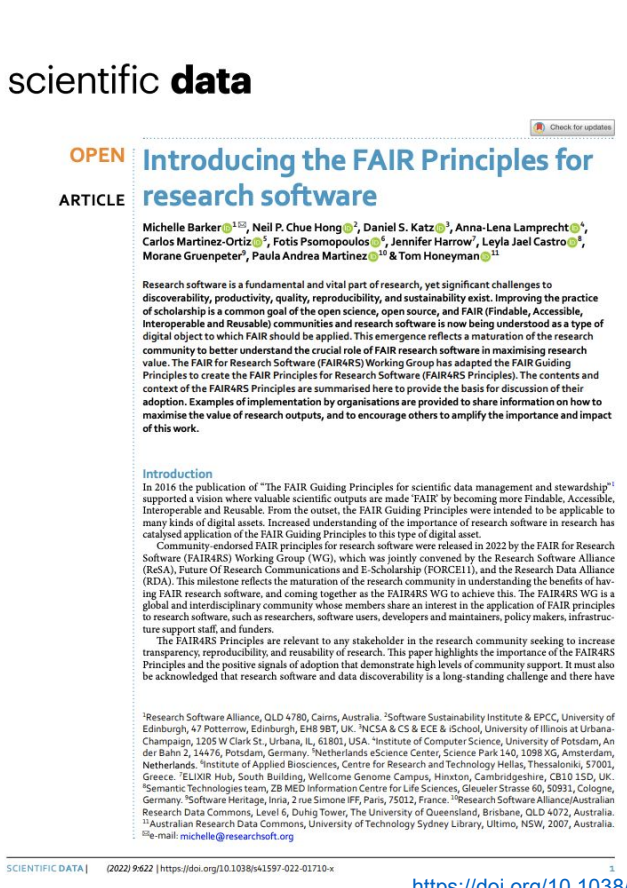
Interopérable

- Coopération des outils (snakemake, docker) aussi bien en local que sur serveurs (cloud ou cluster)

Réutilisable

- Protocole rejouable (snakemake) à l'identique (Jupyter) dans un environnement virtuel (docker)

Pour aller plus loin



scientific data

Check for updates

OPEN ARTICLE

Introducing the FAIR Principles for research software

Michelle Barker[1✉], Neil P. Chue Hong[2], Daniel S. Katz[3], Anna-Lena Lamprecht[4], Carlos Martinez-Ortiz[5], Fotis Psomopoulos[6], Jennifer Harrow[7], Leyla Jael Castro[8], Morane Gruenpeter[9], Paula Andrea Martinez[10] & Tom Honeyman[11]

Research software is a fundamental and vital part of research, yet significant challenges to discoverability, productivity, quality, reproducibility, and sustainability exist. Improving the practice of scholarship is a common goal of the open science, open source, and FAIR (Findable, Accessible, Interoperable and Reusable) communities and research software is now being understood as a type of digital object to which FAIR should be applied. This emergence reflects a maturation of the research community to better understand the crucial role of FAIR research software in maximising research value. The FAIR for Research Software (FAIR4RS) Working Group has adapted the FAIR Guiding Principles to create the FAIR Principles for Research Software (FAIR4RS Principles). The contents and context of the FAIR4RS Principles are summarised here to provide the basis for discussion of their adoption. Examples of implementation by organisations are provided to share information on how to maximise the value of research outputs, and to encourage others to amplify the importance and impact of this work.

Introduction

In 2016 the publication of "The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship"[1] supported a vision where valuable scientific outputs are made 'FAIR' by becoming more Findable, Accessible, Interoperable and Reusable. From the outset, the FAIR Guiding Principles were intended to be applicable to many kinds of digital assets. Increased understanding of the importance of research software in research has catalysed application of the FAIR Guiding Principles to this type of digital asset.

Community-endorsed FAIR principles for research software were released in 2022 by the FAIR for Research Software (FAIR4RS) Working Group (WG), which was jointly convened by the Research Software Alliance (ReSA), Future Of Research Communications and E-Scholarship (FORCE11), and the Research Data Alliance (RDA). This milestone reflects the maturation of the research community in understanding the benefits of having FAIR research software, and coming together as the FAIR4RS WG to achieve this. The FAIR4RS WG is a global and interdisciplinary community whose members share an interest in the application of FAIR principles to research software, such as researchers, software users, developers and maintainers, policy makers, infrastructure support staff, and funders.

The FAIR4RS Principles are relevant to any stakeholder in the research community seeking to increase transparency, reproducibility, and reusability of research. This paper highlights the importance of the FAIR4RS Principles and the positive signals of adoption that demonstrate high levels of community support. It must also be acknowledged that research software and data discoverability is a long-standing challenge and there have

[1]Research Software Alliance, QLD 4780, Cairns, Australia. [2]Software Sustainability Institute & EPCC, University of Edinburgh, 47 Potterrow, Edinburgh, EH8 9BT, UK. [3]NCSA & CS & ECE & iSchool, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1205 W Clark St., Urbana, IL, 61801, USA. [4]Institute of Computer Science, University of Potsdam, An der Bahn 2, 14476, Potsdam, Germany. [5]Netherlands eScience Center, Science Park 140, 1098 XG, Amsterdam, Netherlands. [6]Institute of Applied Biosciences, Centre for Research and Technology Hellas, Thessaloniki, 57001, Greece. [7]ELIXIR Hub, South Building, Wellcome Genome Campus, Hinxton, Cambridgeshire, CB10 1SD, UK. [8]Semantic Technologies team, ZB MED Information Centre for Life Sciences, Gleueler Strasse 60, 50931, Cologne, Germany. [9]Software Heritage, Inria, 2 rue Simone IFF, Paris, 75012, France. [10]Research Software Alliance/Australian Research Data Commons, Level 6, Duhig Tower, The University of Queensland, Brisbane, QLD 4072, Australia. [11]Australian Research Data Commons, University of Technology Sydney Library, Ultimo, NSW, 2007, Australia. ✉e-mail: michelle@researchsoft.org

SCIENTIFIC DATA | (2022) 9:622 | https://doi.org/10.1038/s41597-022-01710-x 1

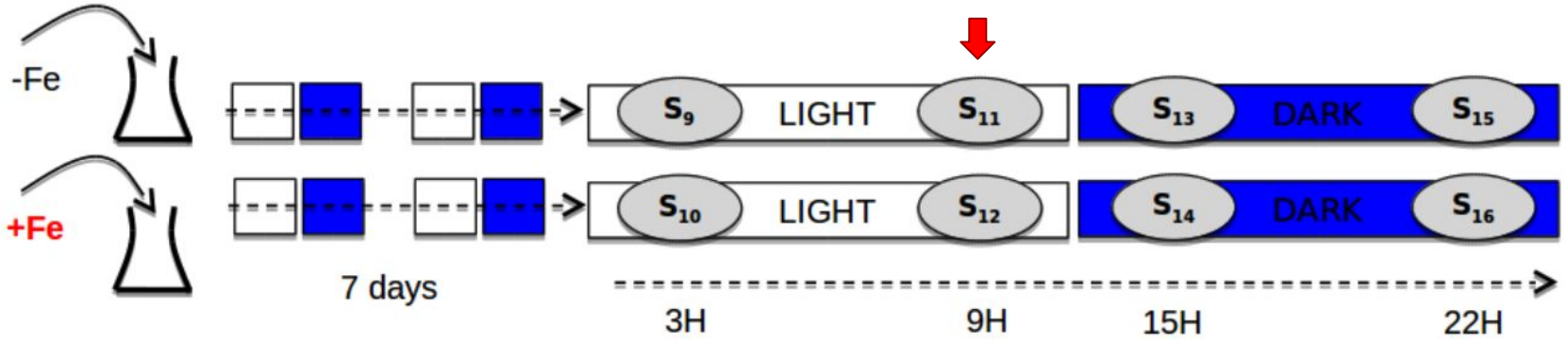
https://doi.org/10.1038/s41597-022-01710-x

Exemple d’utilisation

Plan expérimental

Étude de la réponse à une privation en fer chez l'algue verte *Ostreococcus tauri*

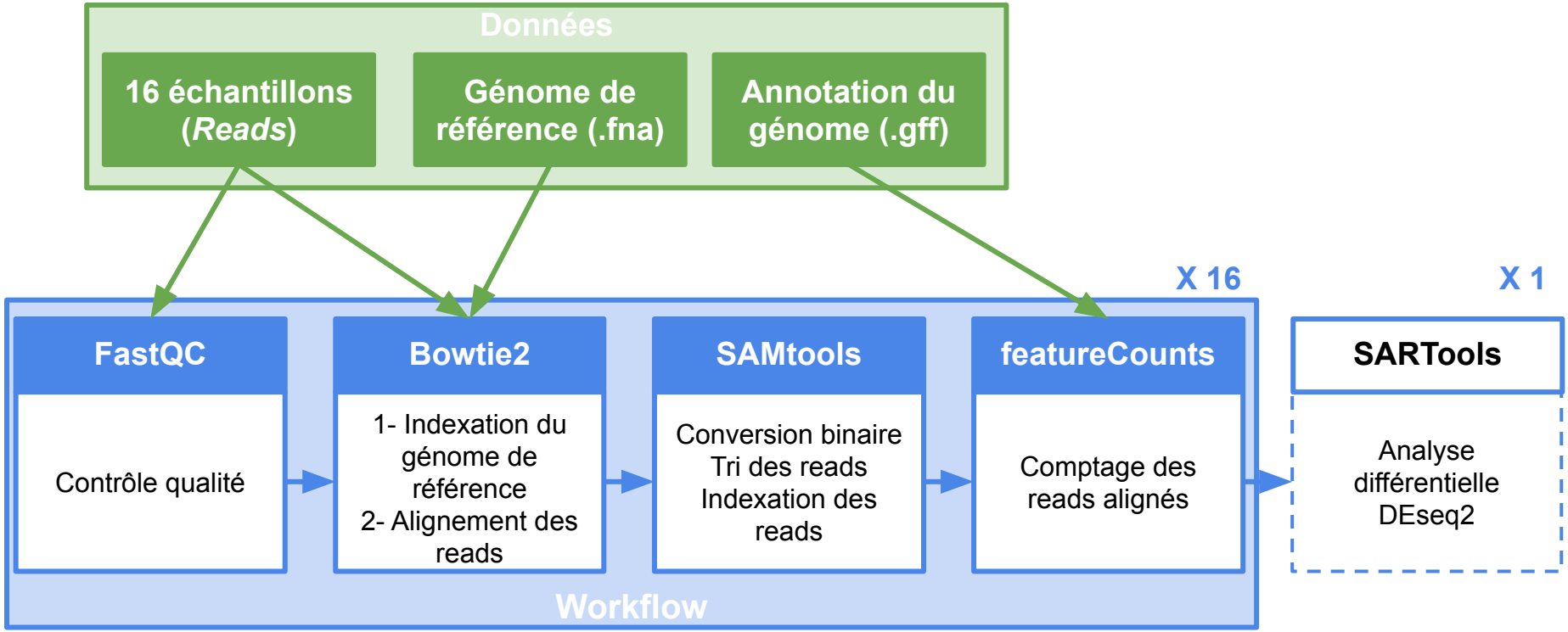
16 échantillons de données RNAseq (triplicat, single-end de 100bp)



(Lelandais *et al*. 2016)

Données réduites pour la démonstration

Analyse de données

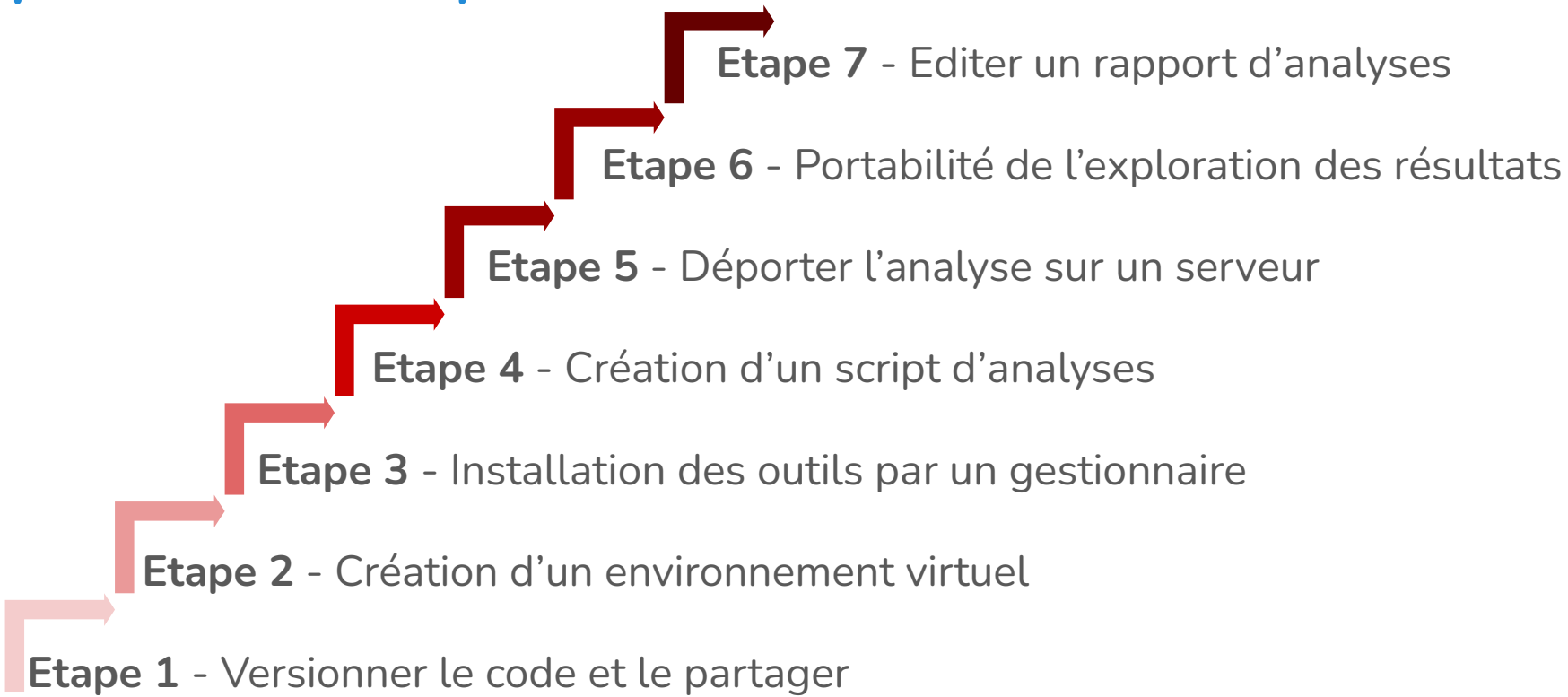


Notre question à présent ?

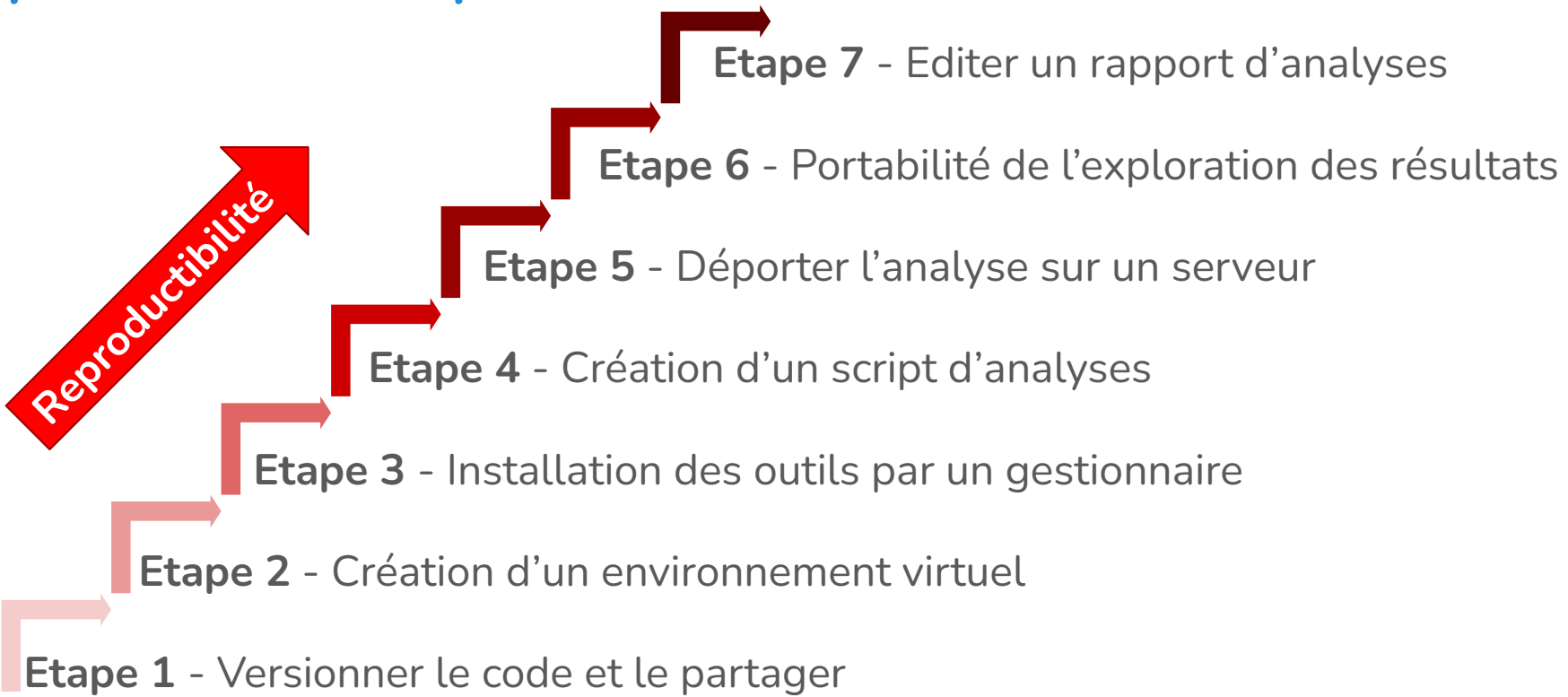
Comment réaliser cette analyse de façon reproductible ?

(et pourquoi pas la rejouer en un click)

Proposition en 7 étapes



Proposition en 7 étapes



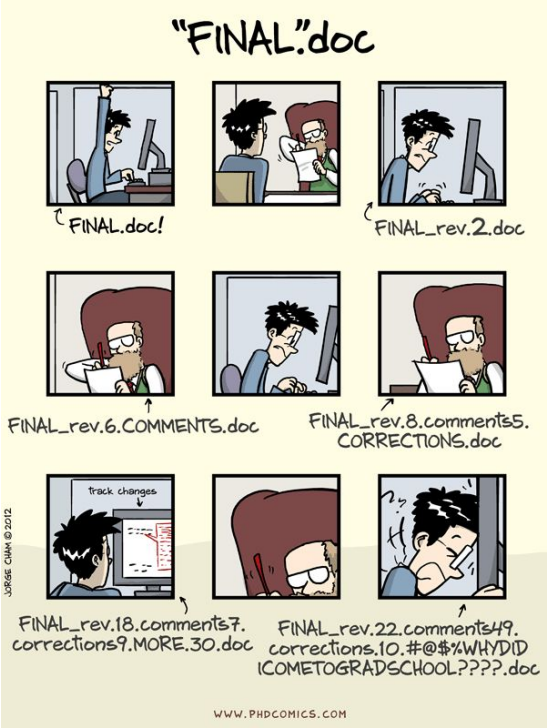
Des choix techniques équivalents

Etape 1 - Versionner le code et le partager

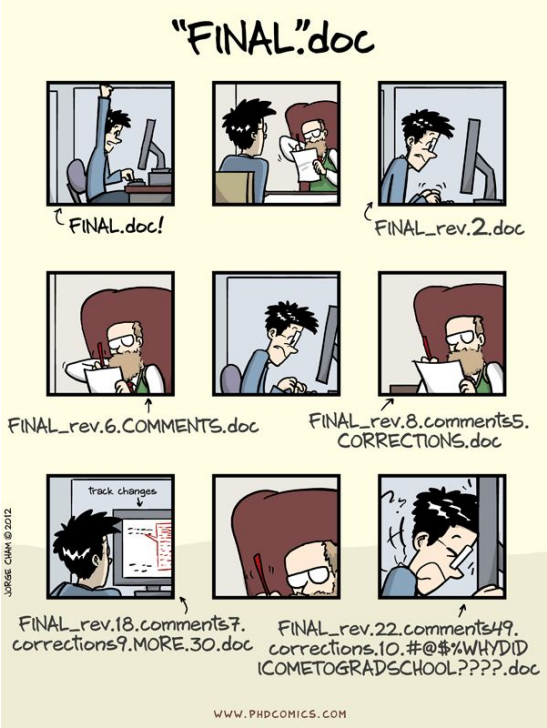
Pourquoi ?

- Figer la version du code
- Vision dans le temps
- Partage & ouverture à la communauté

Etape 1 - Versionner le code et le partager



Etape 1 - Versionner le code et le partager



→

git

GitHub

GitLab

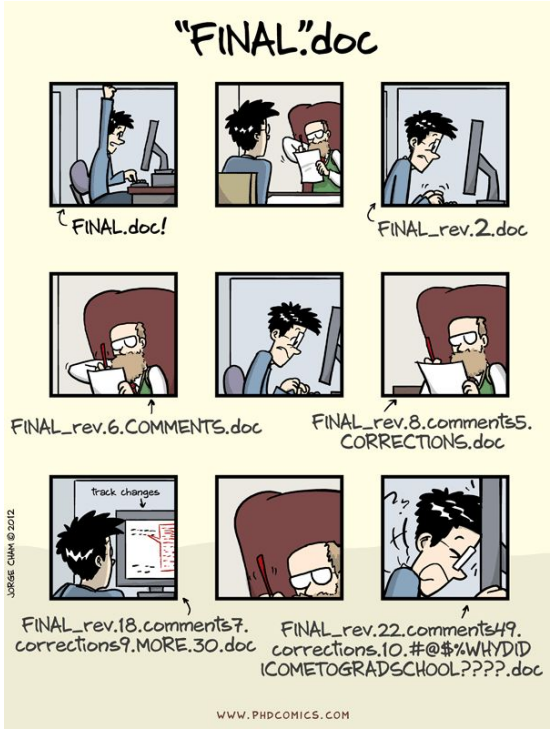
Avantages

- Sauvegarde du code
- Simple pour partager
- Gestion automatique des versions, fusionne les différentes modifications

Inconvénients

- Pas simple pour les novices

Etape 1 - Versionner le code et le partager



git → GitHub / GitLab

Après

IFB-ElixirFr / IFB-FAIR-bioinfo-training

Code | Issues | Pull requests | Actions | Projects | Wiki | Security | Insights | Settings

master | 2 branches | 2 tags | Go to file | Add file | Code

thomasdenecker add new links — 92e2180 on 2 Sep — 61 commits

docs	add new links	3 months ago
.gitignore	ignore .DS_Store files	3 months ago
images.zip	to unzip for git-github.md	3 months ago
LICENSE	Initial commit	3 months ago
README.md	Update README.md	3 months ago
_config.yml	Set theme jekyll-theme-cayman	3 months ago

README.md

Les principes FAIR appliqués à la bioinformatique

L'Institut Français de Bioinformatique (IFB) organise en partenariat avec l'Institut de Biologie Intégrative de la Cellule (I2BC) une formation à destination des bioinformaticiens et biostatisticiens souhaitant mettre en oeuvre les principes "FAIR" (Facile à trouver, Accessible, Interopérable, Réutilisable) dans leurs projets d'analyse et de développement. Les concepts FAIR, initialement définis dans le contexte d'ouverture des données de la recherche, seront ici adaptés pour cadrer avec un projet type de développement et/ou analyse bioinformatique/biostatistique. Ainsi, la formation n'abordera pas les aspects "FAIR" spécifiques aux données mais introduira plusieurs outils permettant d'améliorer la reproductibilité des analyses.

Pour plus d'informations (programme, slides, ...), un site web de la formation est disponible ici.

Objectifs pédagogiques

A la fin de cette formation, les participants pourront mettre en oeuvre les principes de la science reproductible : encapsuler un environnement de travail, concevoir et exécuter des workflows, gérer des versions de code, passer à l'échelle sur un cluster de calcul, gérer des environnements logiciels et assurer la traçabilité de leur analyse à l'aide de Notebooks.

La formation organisée en deux temps

La formartion s'organise en deux temps :

About

Formation continue sur la FAIRisation du code informatique

ifb-elixirfr.github.io/ifb-fair-bioinfo...

bioinformatics | fair

Readme

AGPL-3.0 License

Releases 2

Tess release Latest — 8 days ago

+ 1 release

Packages

No packages published

Publish your first package

Contributors 12

Environments 1

github-pages Active

Etape 2 - Création d'un environnement virtuel

Pourquoi ?

- Figer l'environnement
- Partager l'environnement

Etape 2 - Création d'un environnement virtuel

Avant

Etape 2 - Création d'un environnement virtuel

Avant

docker

Avantages

- Rapide et léger
- Portable
- Simple à partager et déployer

Inconvénients

- Avec un système à jour
- Accepté dans votre structure ?

Etape 2 - Création d'un environnement virtuel

Avant

Après : figé un outil (R & un package)

docker

```
FROM rocker/tidyverse

MAINTAINER Thomas DENECKER (thomas.denecker@gmail.com)

RUN Rscript -e
'devtools::install_github("PF2-pasteur-fr/SARTools",
build_opts="--no-resave-data")'
```

Etape 3 - Installation des outils par un gestionnaire

Pourquoi ?

- Avoir la bonne version
- Installer simplement

Etape 3 - Installation des outils par un gestionnaire

Avant : exemple de FastQC

1) Télécharger la source
2) Décompresser le dossier
3) Installer et mettre à jour Java (nombreux problèmes)
4) Changer les droits

Etape 3 - Installation des outils par un gestionnaire

Avant : exemple de FastQC

1) Télécharger la source
2) Décompresser le dossier
3) Installer et mettre à jour Java (nombreux problèmes)
4) Changer les droits

CONDA

Avantages

- Gestionnaire simple à installer
- Installation simple des paquets
- Gestion des versions

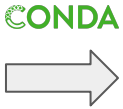
Inconvénients

- Peut être lourd (solution miniconda)
- Paquets manquants (R)

Etape 3 - Installation des outils par un gestionnaire

Avant : exemple de FastQC

1) Télécharger la source
2) Décompresser le dossier
3) Installer et mettre à jour Java (nombreux problèmes)
4) Changer les droits



Après

```
$ conda install -c bioconda -y fastqc=0.12.1
```

Tous les outils utilisés dans le protocole sont disponibles sur Conda (https://anaconda.org/) : bowtie2, samtools, htseqcount, aspera, snakemake, ...

Installation simple en une ligne !

Etape 4 - Création d'un script d'analyse

Pourquoi ?

- Avoir un script d'analyse reproductible
- Ne pas refaire ce qui est déjà fait
- Paralléliser

Etape 4 - Création d'un script d'analyse

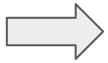
Avant (script Shell)

```
for sample in `ls *.fastq.gz`
do
  fastqc ${sample}
done
```

Etape 4 - Création d'un script d'analyse

Avant (script Shell)

```
for sample in `ls *.fastq.gz`
do
  fastqc ${sample}
done
```



Snakemake

Avantages

- Workflow (gestion des jobs)
- Puissant et rapide
- Capable d'utiliser des environnements Conda
- Parallélisable sur un cluster

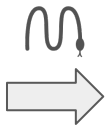
Inconvénients

- Une logique à apprendre
- Syntaxe moins simple que le script shell

Etape 4 - Création d'un script d'analyse

Avant (script Shell)

```
for sample in `ls *.fastq.gz`
do
  fastqc ${sample}
done
```



Après (Snakefile)

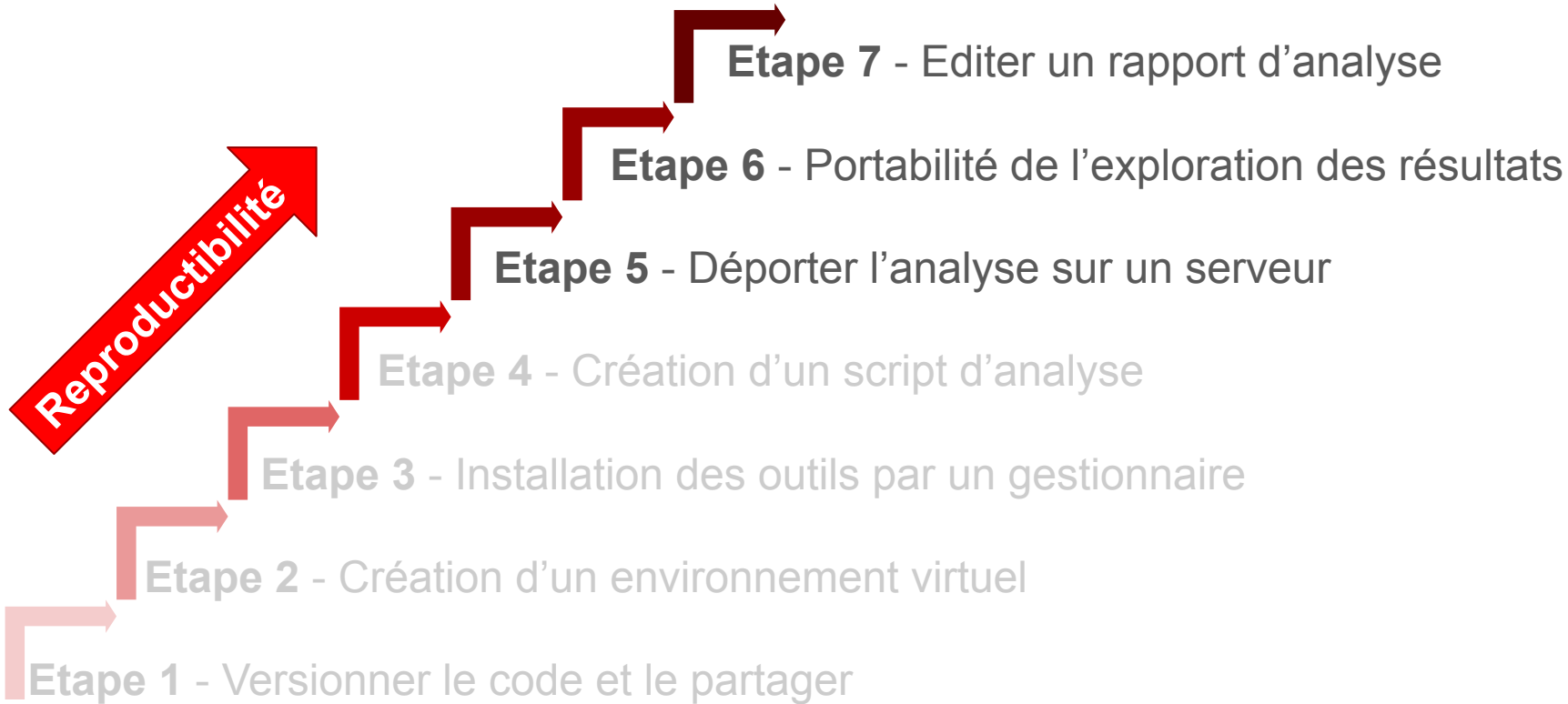
```
$ cat > Snakefile
SAMPLES, =
glob_wildcards("./samples/{smp}.fastq.gz")

rule final:
input:expand("fastqc/{smp}/{smp}_fastqc.zip",smp
=SAMPLES)

rule fastqc:
   input:  "samples/{smp}.fastq.gz"
   output:"fastqc/{smp}/{smp}_fastqc.zip"
   message: """Quality check"""
   shell: """fastqc {input} --outdir
fastqc/{wildcards.smp}"""
$ snakemake
```

Plus court à écrire mais pas à exécuter !

Où en sommes nous ?



Etape 5 - Déporter l'analyse sur un serveur

Pourquoi ?

- Environnement contrôlé
- Déport de l'analyse

Etape 5 - Déporter l'analyse sur un serveur

Avant

Adaptation en local et sur les serveurs difficile voire non gérée ...

Etape 5 - Déporter l'analyse sur un serveur

Avant

Adaptation en local et sur les serveurs difficile voire non gérée ...

Avantages

- Simple à mettre en place
- Augmentation de la puissance (cloud ou cluster)
- Pour tout le monde

Inconvénients

- Pas simple pour les novices
- Attention aux données sensibles

Etape 5 - Déporter l'analyse sur un serveur

Avant

Adaptation en local et sur les serveurs difficile voire non gérée ...

Après

```
$ git clone
https://github.com/thomasdenecker/FAIR_Bioinfo

$ cd FAIR_Bioinfo

$ sudo docker run --rm -d -p 80:8888 --name
fair_bioinfo -v ${PWD}:/home/rstudio
tdenecker/fair_bioinfo bash ./FAIR_script.sh
```

Le protocole est lancé !

Etape 6 - Portabilité de l'exploration des résultats

Pourquoi ?

- Rendre simple l'exploration
- Simple à partager

Etape 6 - Portabilité de l'exploration des résultats

Avant : Terminal R

```
dds <- DESeqDataSetFromMatrix(countData =
cts,colData = coldata, design= ~ batch +
condition)

dds <- DESeq(dds)
resultsNames(dds) # lists the coefficients
res <- results(dds, name =
"condition_trt_vs_untrt")

# or to shrink log fold changes
# association with condition:
res <- lfcShrink(dds,
coef="condition_trt_vs_untrt", type="apeglm")
```

Etape 6 - Portabilité de l'exploration des résultats

Avant : Terminal R

```
dds <- DESeqDataSetFromMatrix(countData =
cts,colData = coldata, design= ~ batch +
condition)

dds <- DESeq(dds)
resultsNames(dds) # lists the coefficients
res <- results(dds, name =
"condition_trt_vs_untrt")

# or to shrink log fold changes
# association with condition:
res <- lfcShrink(dds,
coef="condition_trt_vs_untrt", type="apeglm")
```

Avantages

- Portable (HTML)
- Accessible partout
- Interactif (paramétrable, graphes dynamiques, ...)

Inconvénients

- Mélange de R et de HTML

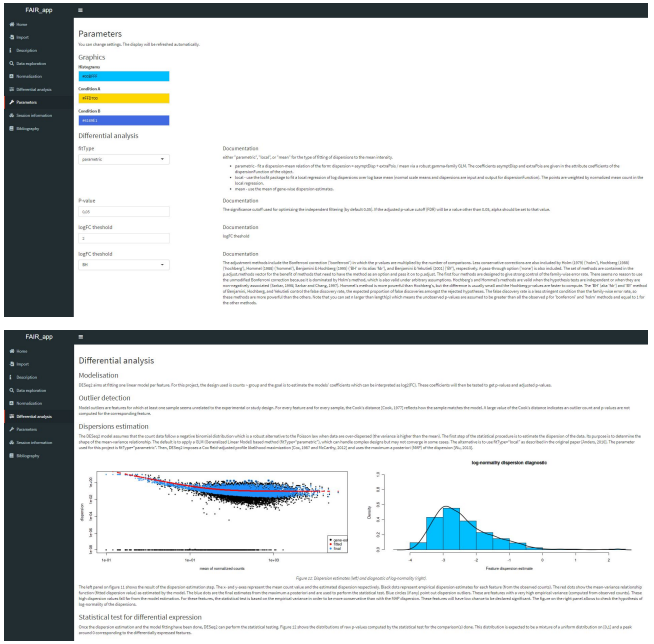
Etape 6 - Portabilité de l'exploration des résultats

Avant : Terminal R

```
dds <- DESeqDataSetFromMatrix(countData =
cts,colData = coldata, design= ~ batch +
condition)

dds <- DESeq(dds)
resultsNames(dds) # lists the coefficients
res <- results(dds, name =
"condition_trt_vs_untrt")

# or to shrink log fold changes
# association with condition:
res <- lfcShrink(dds,
coef="condition_trt_vs_untrt", type="apeglm")
```



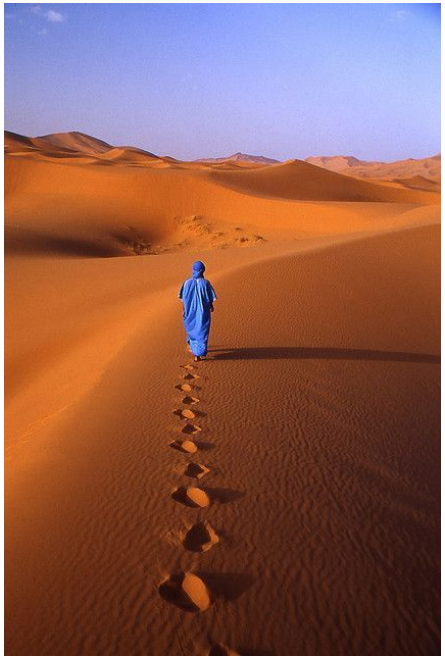
Etape 7 - Editer un rapport d'analyse

Pourquoi ?

- Avoir une trace de l'analyse (date, heure, paramètres, ...)
- Stocker les versions des outils

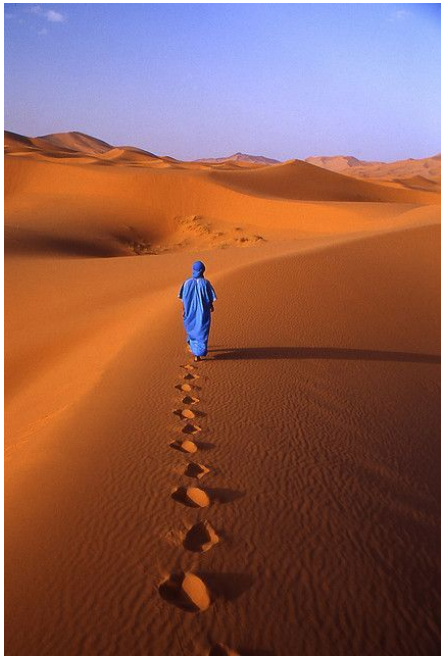
Etape 7 - Editer un rapport d'analyse

Avant



Etape 7 - Editer un rapport d'analyse

Avant



Avantages

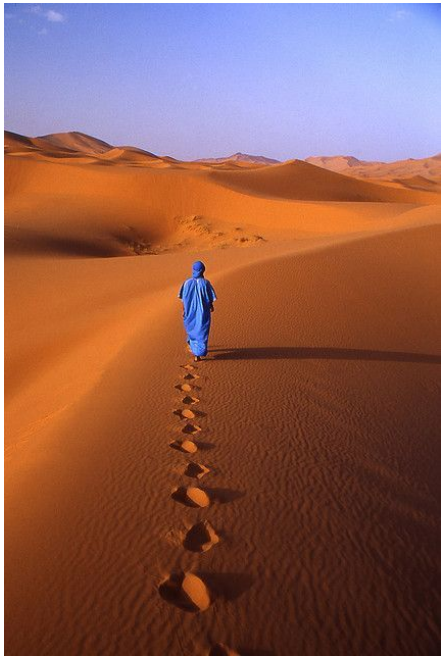
- Syntaxe simple (Markdown)
- Partage (PDF, HTML, ...)

Inconvénients

- Rares problèmes de visualisation en LaTeX

Etape 7 - Editer un rapport d'analyse

Avant



rmarkdown

jupyter

quarto

Après

Statistical report of project Demo: pairwise comparison(s) of conditions with DESeq2

Thomas Denecker

2020-11-12

The SARTools R package which generated this report has been developped at PF2 - Institut Pasteur by M.-A. Dillies and H. Varet (hugo.varet@pasteur.fr). Thanks to cite H. Varet, L. Brillet-Guéguen, J.-Y. Coppee and M.-A. Dillies, *SARTools: A DESeq2- and EdgeR-Based R Pipeline for Comprehensive Differential Analysis of RNA-Seq Data*, PLoS One, 2016, doi: http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0157022 when using this tool for any analysis published.

1 Introduction

The analyses reported in this document are part of the Demo project. The aim is to find features that are differentially expressed between STANDARD and DEPLETED. The statistical analysis process includes data normalization, graphical exploration of raw and normalized data, test for differential expression for each feature between the conditions, raw p-value adjustment and export of lists of features having a significant differential expression between the conditions.

The analysis is performed using the R software [1], Bioconductor [2] packages including DESeq2 [3,4] and the SARTools package developed at PF2 - Institut Pasteur. Normalization and differential analysis are carried out according to the DESeq2 model and package. This report comes with additional tab-delimited text files that contain lists of differentially expressed features.

For more details about the DESeq2 methodology, please refer to its related publications [3,4].

2 Description of raw data

The count data files and associated biological conditions are listed in the following table.

Table 1: Data files and associated biological conditions.

label	files	Iron
S1	SRR3099587_chr18_ftc.txt	STANDARD
S2	SRR3099586_chr18_ftc.txt	STANDARD
S3	SRR3099585_chr18_ftc.txt	STANDARD
D1	SRR3105699_chr18_ftc.txt	DEPLETED
D2	SRR3105698_chr18_ftc.txt	DEPLETED
D3	SRR3105697_chr18_ftc.txt	DEPLETED

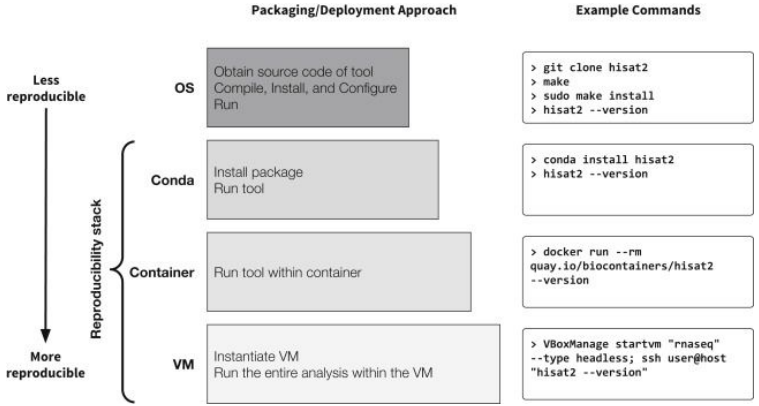
After loading the data we first have a look at the raw data table itself. The data table contains one row per annotated feature and one column per sequenced sample. Row names of this table are feature IDs (unique identifiers). The table contains raw count values representing the number of reads that map onto the features. For this project, there are 7659 features in the count data table.

Table 2: Partial view of the count data table.

	S1	S2	S3	D1	D2	D3
ostta01g00010	11	12	11	7	5	1

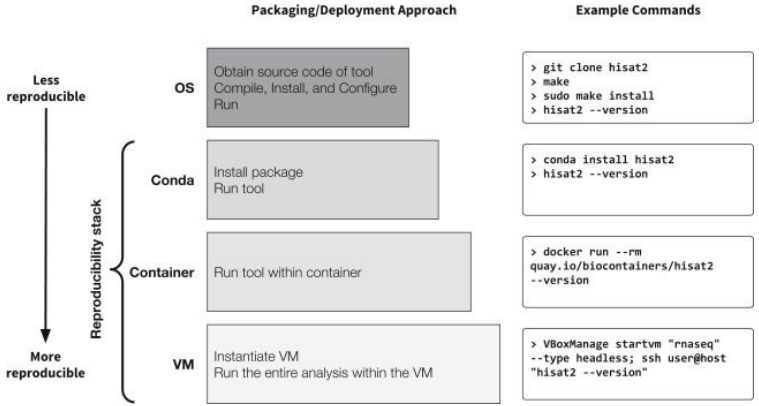
Conclusion

Quel est notre niveau de reproductibilité?



Practical Computational Reproducibility in the Life Sciences, Björn Grüning *et al*, 2018

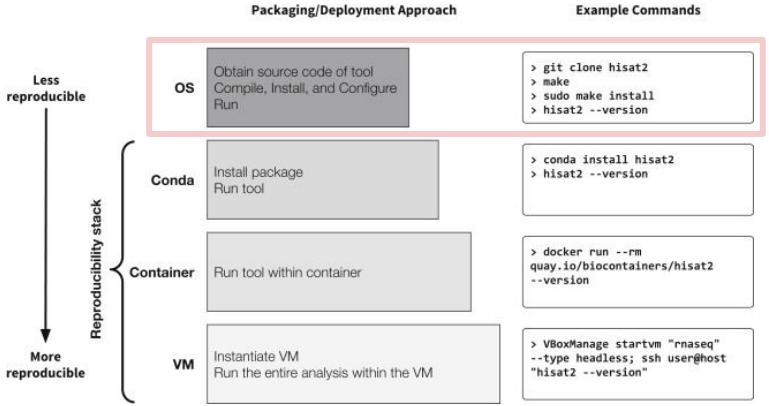
Quel est notre niveau de reproductibilité?



Practical Computational Reproducibility in the Life Sciences, Björn Grüning *et al*, 2018

FAIR bioinfo

Quel est notre niveau de reproductibilité?

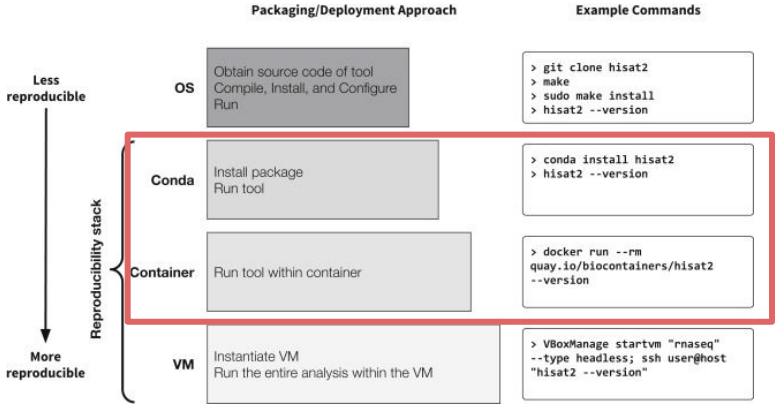


Practical Computational Reproducibility in the Life Sciences, Björn Grüning *et al*, 2018

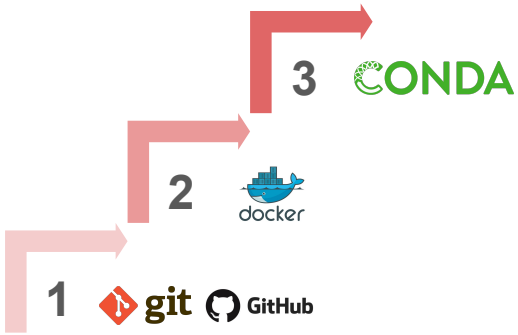
1 git GitHub

FAIR bioinfo

Quel est notre niveau de reproductibilité?

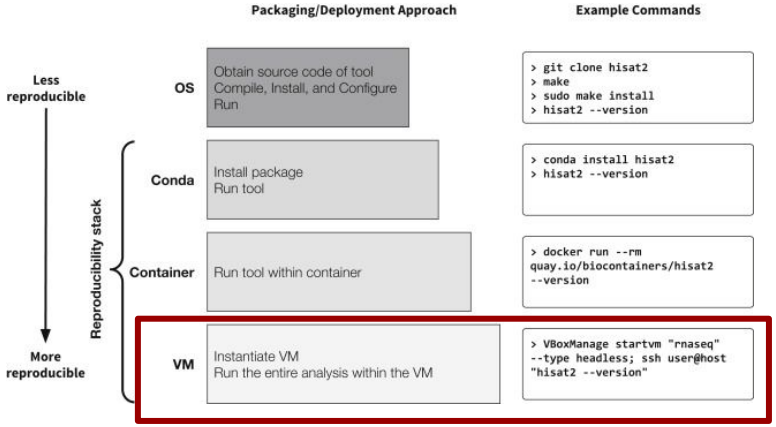


Practical Computational Reproducibility in the Life Sciences, Björn Grüning *et al*, 2018

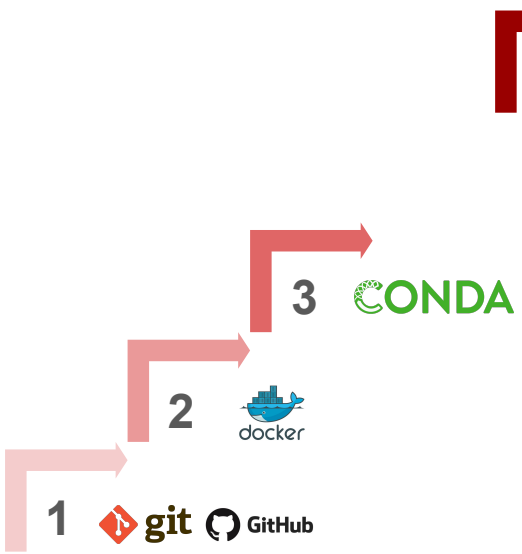


FAIR bioinfo

Quel est notre niveau de reproductibilité?

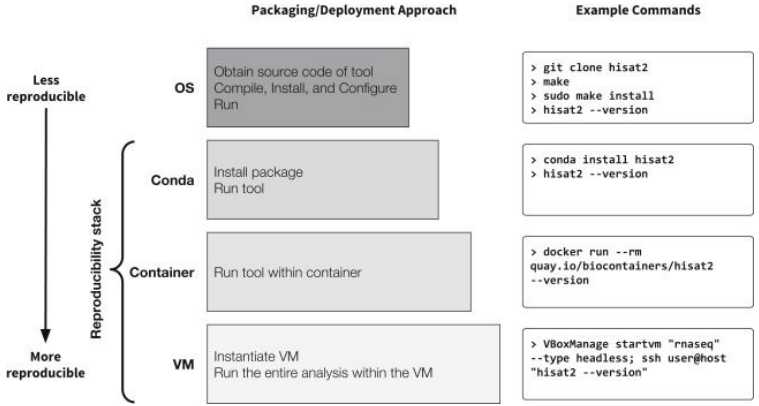


Practical Computational Reproducibility in the Life Sciences, Björn Grüning *et al*, 2018

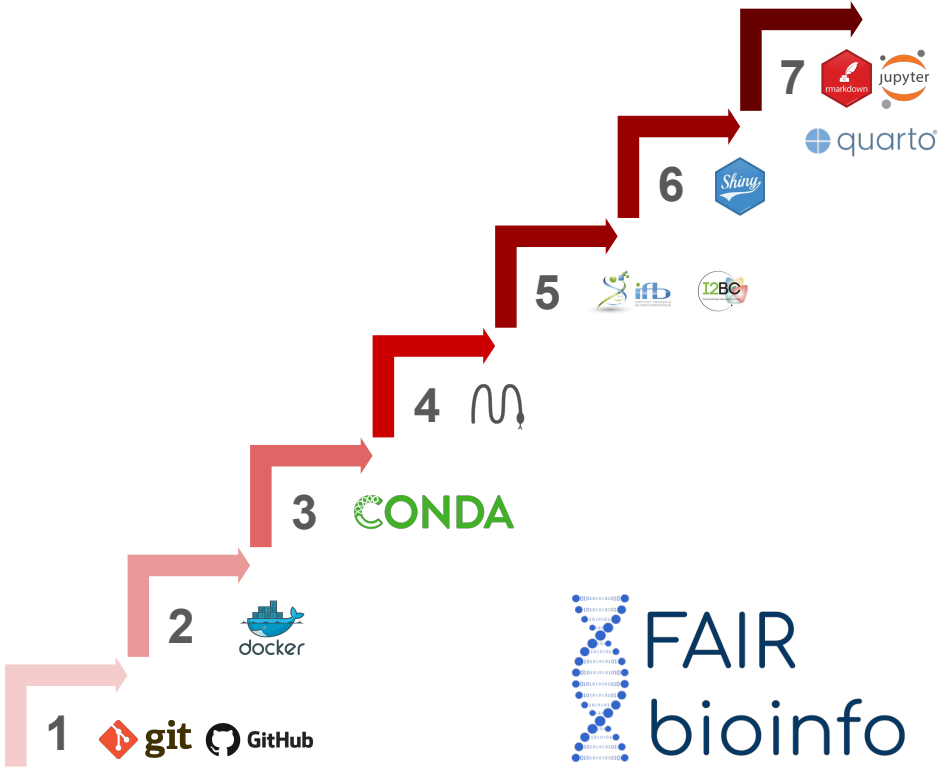


FAIR bioinfo

Quel est notre niveau de reproductibilité?



Practical Computational Reproducibility in the Life Sciences, Björn Grüning *et al*, 2018



FAIR bioinfo

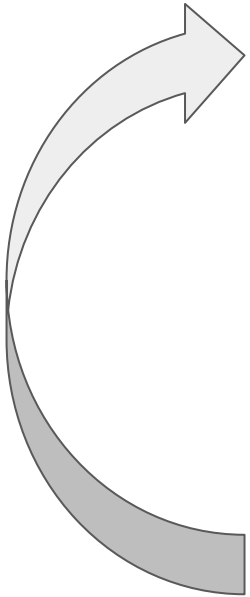
Take home messages

Une vraie réflexion sur la reproductibilité des analyses en Bioinformatique

Proposition d'une solution qui aide à rendre reproductible n'importe quel protocole d'analyse

La reproductibilité est une plus value pour la Bioinformatique !

Un cercle vertueux



FAIR raw data

+

FAIR_bioinfo scripts/protocols

=

FAIR processed data

Mise en application

Notre objectif

(Re)Découvrir des outils complémentaires pour gagner en reproductibilité

Notre crédo

FAIR raw data + FAIR bioinfo = FAIR processed data

Notre méthodologie

Rendre une analyse de données reproductible à partir de données publiées

https://ifb-elixirfr.github.io/IFB-FAIR-bioinfo-training/index.html#home

Ressources

FAIR_bioinfo

- 2019 : https://github.com/thomasdenecker/FAIR_Bioinfo
- 2020 : https://ifb-elixirfr.github.io/IFB-FAIR-bioinfo-training/session2020.html
- 2021 : https://ifb-elixirfr.github.io/IFB-FAIR-bioinfo-training/session2021.html

FAIR & le cluster de l'IFB

- Slurm : https://ifb-elixirfr.github.io/IFB-FAIR-bioinfo-training/assets/pdf/Session2020/04_cluster.pdf
- Snakemake + Slurm : https://ifb-elixirfr.github.io/IFB-FAIR-bioinfo-training/assets/pdf/Session2020/04_tp1_snakemake.pdf
- Docker/Singularity : https://ifb-elixirfr.github.io/IFB-FAIR-bioinfo-training/assets/pdf/Session2020/04_tp2_singularity.pdf

Données

- Originale : https://trace.ncbi.nlm.nih.gov/Traces/sra/?run=SRR4026187
- Réduite : https://doi.org/10.5281/zenodo.3997237

Une belle équipe !

2019

T. Denecker

C. Toffano-Nioche

2020-2023

C. Hernandez

H. Chiapello

G. Le Corguillé

P. Lieby

Y. Mahmah

J. Seiler

J. van Helden

PARTIE II

Du point de vue des données

Être plus FAIR !

Utiliser des outils pour améliorer la gestion, la mise en qualité et l'ouverture des données

cirad
LA RECHERCHE AGRONOMIQUE POUR LE DÉVELOPPEMENT
donnees-recherche@cirad.fr

Questions préliminaires

Qu'est ce qu'une donnée de recherche ?

In the context of the OECD Recommendation of the Council Concerning Access to Research Data from Public Funding (OECD, 2006), "research data" are defined as ***factual records*** *(numerical scores, textual records, images and sounds)* ***used as primary sources for scientific research*** *and that are* ***commonly accepted in the scientific community*** *as necessary to validate research findings. A research data set constitutes a systematic, partial representation of the subject being investigated.*

Scientific data are very diverse: they include observational data, which record natural phenomena (in fields such as astronomy, geoscience and demography); ***experimental data****, which record the outcomes of man-made experiments, such as laboratory experiments in physics, chemistry and* ***biology****, or clinical trials; computational data, which are generated through large-scale simulations; and reference data, which are highly curated datasets, such as the human genome.*

OECD-ilibrary.org

Qu'est ce qu'une métadonnée ?

Les métadonnées sont des « données qui décrivent des données » :

- **Information** structurée associée à un "objet", un document ou un jeu de données
- **Documentation** qui permet à l'utilisateur de comprendre, de comparer et d'échanger le contenu du jeu de données décrit

Il existe des **standards** de métadonnées :

- Standards minimaux (ex : Dublin Core)
- Standards métiers (ex : EML, DDI…)

Il est conseillé de produire les métadonnées **au moment de la collecte ou de la création** des données plutôt qu'à posteriori. Les métadonnées seront complétées **tout au long du cycle de vie des données**.

En résumé

Les données

Les métadonnées

C'est quoi le cycle de vie des données ?

Le modèle de UK Data Archive définit les six étapes suivantes :

- **Création ou collecte des données** (*creating data*) ;
- **Traitement des données** (*processing data*) ;
- **Analyse des données** (*analysing data*) ;
- **Conservation des données** (*preserving data*) ;
- **Accès aux données** (*giving access to data / data discovery*) ;
- **Réutilisation des données** (*reusing data*).

Une introduction à la gestion et au partage des données de la recherche - Le cycle de vie des données

Et dans la “vraie vie” ?

Le passé

- Le leg (du doctorant précédent …)
- La biblio à T0
- Les méthodes pré existantes

Le présent

- Les manipes
- La création de connaissance (méthodes, posters …)

Le futur

- Le manuscrit
- Les publications

Des échantillons

- dans les frigos
- dans les tiroirs

Des fichiers

- des petits, des gros
- un peu partout (PC, cloud, cluster)
- des données brutes, du code, des résultats

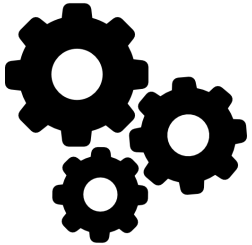
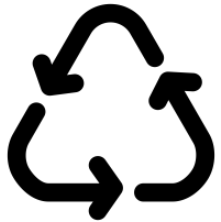
De la connaissance

- des méthodes, du code
- des systèmes d’information
- des publications

Mais au fait c'est quoi FAIR ?

Findable **A**ccessible **I**nteroperable **R**eusable



Sangya Pundir

Findable -- Faciliter la découverte des données

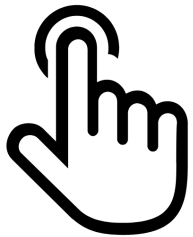
Findable

- Les données ont un **PID** (Persistent IDentifier ou identifiant pérenne en français)
- Les données sont décrites par des **métadonnées**
- Ces métadonnées doivent être liées aux PIDs des données
- Les données sont déposées dans un **entrepôt de données**

https://doranum.fr/enjeux-benefices/principes-fair/

Accessible -- Permettre l'accès aux données et leur téléchargement

Accessible

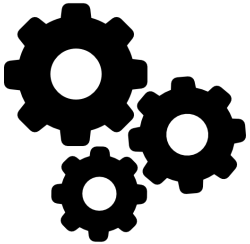


- Les données sont accessibles à travers un **protocole de communication standard**
- Ce protocole est **libre et ouvert**
- Ce protocole permet un accès par **authentification** si besoin
- Les **métadonnées restent accessibles** même si les données ne le sont plus

https://doranum.fr/enjeux-benefices/principes-fair/

Interoperable -- Permettre l'exploitation des données quel que soit l'environnement informatique utilisé

Interoperable

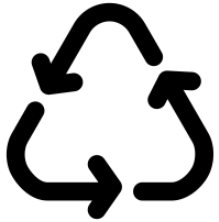


- Les données sont **décrites avec un vocabulaire contrôlé**
- Le vocabulaire utilisé **respecte les principes FAIR**
- Les **métadonnées sont reliées à d'autres données**

https://doranum.fr/enjeux-benefices/principes-fair/

Reusable -- Permettre la réutilisation des données pour de futures recherches

Reusable



- Les métadonnées ont une **pluralité d'attributs**
- Une **licence de réutilisation** est attribuée aux données
- La description des données indique leur **provenance**
- Le partage des données suit les **standards de la communauté scientifique**

https://doranum.fr/enjeux-benefices/principes-fair/

En savoir plus

https://doranum.fr/enjeux-benefices/principes-fair/

En savoir plus

scientific data

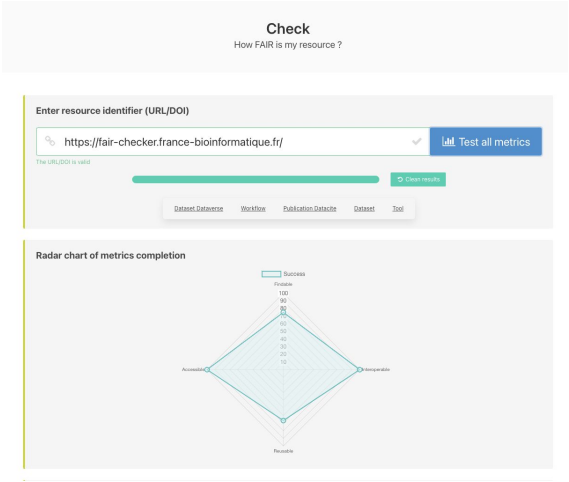
The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship

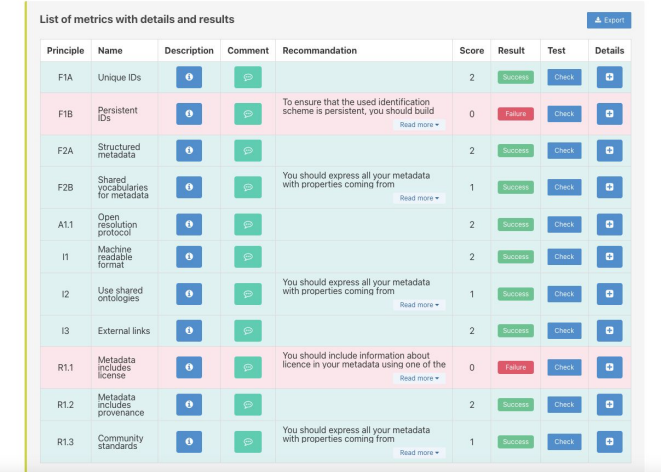
Wilkinson et al., 2016

https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18

https://www.go-fair.org/fair-principles/

Exemple d'évaluation automatique par FAIR CHECKER





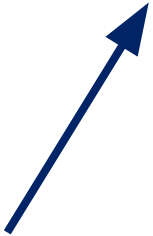
https://fair-checker.france-bioinformatique.fr

Thomas Rosnet et al.

Comment gérer les données ?

Comment le gérer ?

Plan de gestion de données



Planifier et anticiper

Gérer, faire fructifier et ne pas les perdre

Data is the new (s)oil !

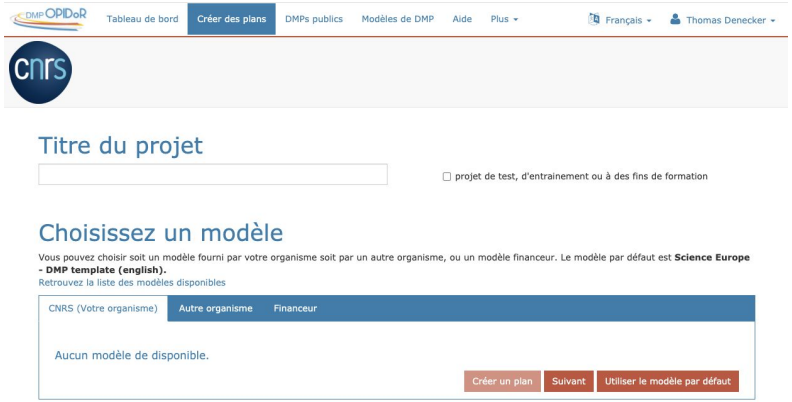
Les objectifs du PGD

1. **Assurer la reproductibilité des expériences** (comment les données sont obtenues)
2. **Respecter le droit et les personnes** (clarifier le cadre juridique et éthique)
3. **Permettre la réutilisation des données** (Garantir la compréhension des données)
4. **Éviter les pertes de données** (Assurer un stockage adapté)
5. **Établir le rôle de chacun** (Définir les responsabilités)
6. **Clarifier les droits de réutilisation** (Spécifier les modalités de partage)

Les outils

Il existe plusieurs outils dont

DMP OPIDoR
Solution nationale



DSW - Data Stewardship Wizard
Solution européenne (ELIXIR)

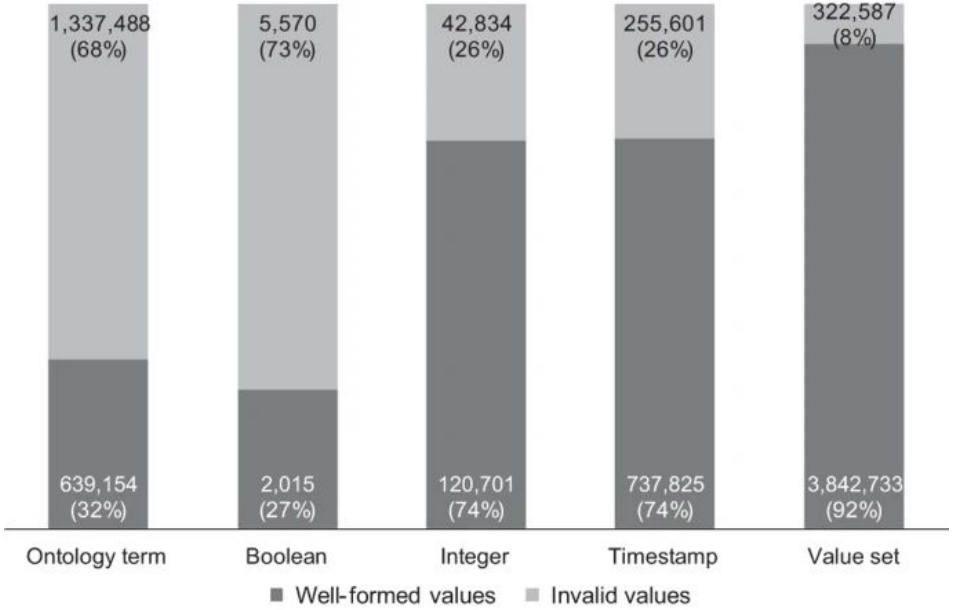
Comment bien décrire les données ?

Bilan de la qualité des métadonnées

Les métadonnées demandées sont différentes entre les bases de données et souvent complexes

La soumission est hétérogène

Les métadonnées sont souvent incomplètes, inconsistantes, redondantes et tout simplement pas assez informatives



Quality of dictionary attributes in NCBI BioSample according to their type, in Gonçalves et al., 2019

Utilisation de standards

Définition

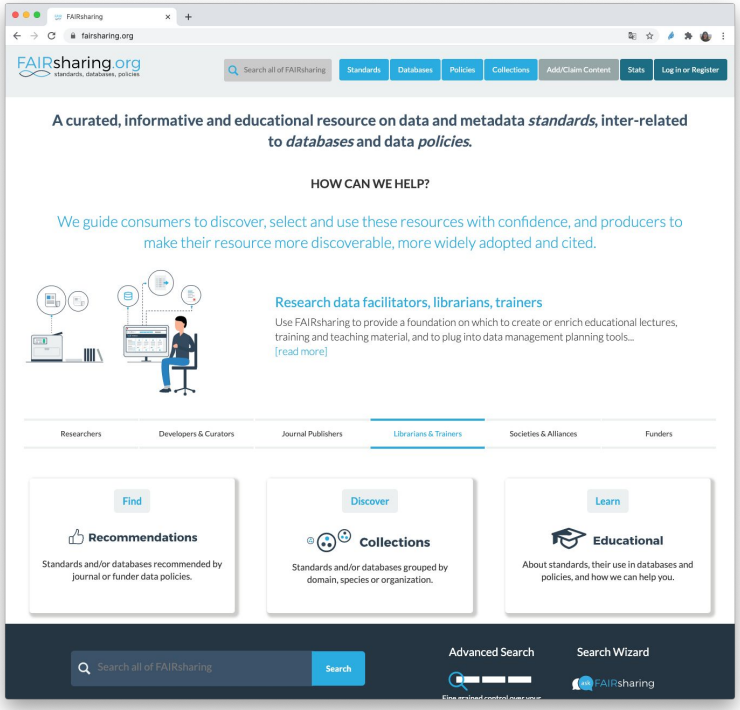
A standard provides the **requirements, specifications, guidelines or characteristics** that can be used for the **description, interoperability, citation, sharing, publication, or preservation** of all kinds of **digital objects** such as data, code, algorithms, workflows, software, or papers.

source: https://fairsharing.org/educational/

Comment trouver le bon ?

Sansone, et al. FAIRsharing as a community approach to standards, repositories and policies.

Nat Biotech. 2019 https://doi.org/10.1038/s41587-019-0080-8



Exemple de standard : Genomic standards consortium

Producteur de Minimum Information Standards utilisés par l'ENA (EBI) et SRA (NCBI)

Notion de checklists sur l'ENA

https://www.ebi.ac.uk/ena/browser/checklists

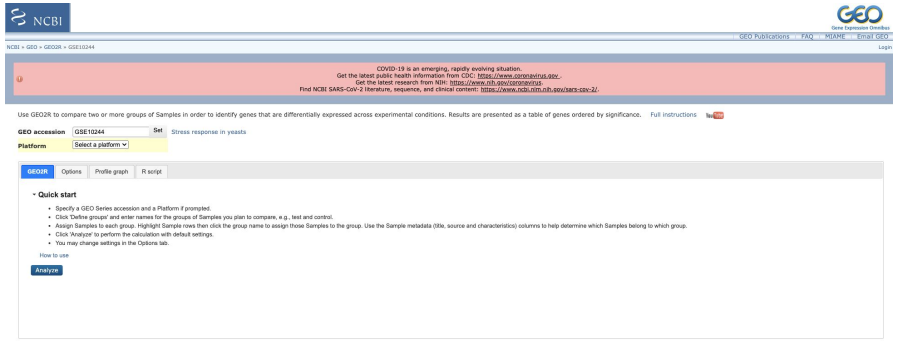
Specification projects	MIGS	MIMS	MIMARKS	New checklists
Checklists	EU, BA, PL, VI, ORG	metagenomes	survey, specimen	e.g., pan-genomes
Shared descriptors	collection date, environmental package, environment (biome), environment (feature), environment (material), geographic location (country and/or sea, region), geographic location (latitude and longitude), investigation type, project name, sequencing method, submitted to INSDC			
Checklist-specific descriptors	assembly, estimated size, finishing strategy, isolation and growth condition, number of replicons, ploidy, propagation, reference for biomaterial		target gene	
Applicable environmental packages (measurements and observations)	Air, Host-associated, Human-associated, Human-oral, Human-gut, Human-skin, Human-vaginal, Microbial mat/biofilm, Miscellaneous natural or artificial environment, Plant-associated, Sediment, Soil, Wastewater/sludge, Water			

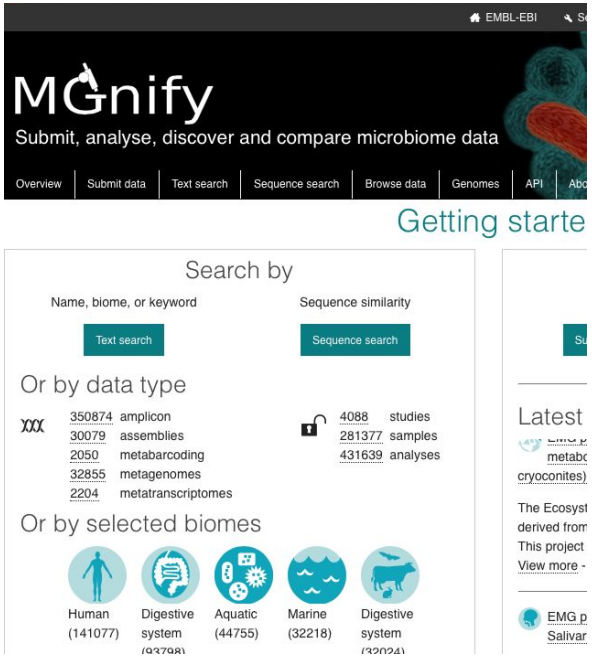
Yilmaz et *al*, 2011

Soumettre les données

Pourquoi soumettre les données et les métadonnées ?

- Pour l'Open Science et la reproductibilité des expériences
- Pour être FAIR et donner accès aux données
- Pour l'archivage
- Pour les publications
- Pour l'analyse avec par exemple MGinfy, GEOtoR, …

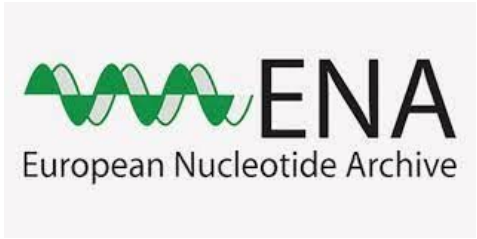




Soumission très hétérogène

Par simple fichier Excel

Un peu plus complexe



MAIS

avec une qualité des métadonnées bien supérieure

Data brokering

Proposer une solution pour fluidifier la soumission des données

Des outils sont proposés dans des branches particulières

L'IFB souhaite offrir une solution nationale divisée en 3 activités

- Développement d'outils
- Formation
- Support aux utilisateurs

Questions juridiques

Quelles obligations de partage des données ?

Les données de la recherche sont des informations publiques :

- Elles sont soumises à un principe d'**ouverture par défaut** et de **libre utilisation** (Loi Lemaire - Loi République numérique 2016 LPRN)
- Elles sont soumises à un **principe de gratuité** (Loi Valter 2015)
  - Cas particulier de Météo France et IGN
  - Spécificité des brevets et autres formes de valorisation
- Elles sont **protégées contre les risques d'accaparement**

Et les principes FAIR ?

Aussi ouvert que possible, aussi fermé que nécessaire

Des exceptions ?

- Le droit d'auteur comme dans les publications scientifiques, logiciels, …
- Les projets en partenariat avec le privé
- Les données personnelles soumises à la RGPD (sauf avec un consentement, anonymisation ou dérogations)
- Les données sensibles comme la biodiversité (orchidée)
- Secret médical, secret d'affaires, secret militaire, secret des procédés,…

Licence

Moyen d'encadrer le partage et la réutilisation des données

Par forcément nécessaire mais fortement recommandé dans tous les cas

Liste des licences et explication : https://www.data.gouv.fr/fr/licences

Modalité de partage

- Considérer les restrictions, embargo et limites de réutilisation
- Se renseigner sur les obligations de partages spécifiques au bailleurs
- Identifier les jeux de données partageables ou non
- Identifier les futurs utilisateurs
- Déterminer quand partager
- Déterminer où partager en fonction des données, des bailleurs, ...

Exemple d'entrepôts de données

Thématique

Trouver le bon ? https://www.re3data.org/ ou https://repositoryfinder.datacite.org/

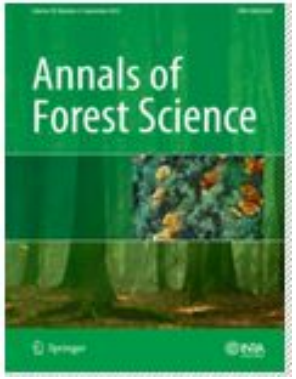
Toujours chercher à valoriser les données

Publier un ***datapaper***

Publier un **article de recherche**

Rédiger une brève pour un **magazine** spécialisé

Contribuer à un **blog**, ...



Journal of open health data

BMC Research Notes

A peer-reviewed open-access journal
Biodiversity Data Journal
Making your data count! ISSN 1314-2828 (online)

Open Data Journal for Agricultural Research

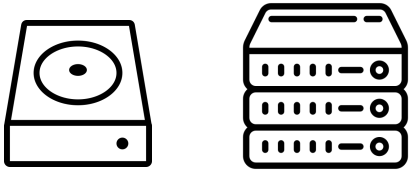
Bonnes pratiques

Un environnement de travail sûr

Sauvegardé

Stratégie 3 2 1

3 copies



2 systèmes

dont 1 distante

Protégé

Le stockage

Nombreuses méthodes et technologies de stockage des données

- Disque dur
- Clé USB
- Cloud

Vérifier l'intégrité des données lors de transfert

Il est possible de contrôler l'intégrité des données avec par exemple le md5sum

Les fichiers : nommage et format

Nommage

- Bref et explicite
- Sans espace ni caractères spéciaux
- Avec une date au bon format
- Avec l'élément le plus important en premier
- Avec la version du document

Format

Si possible non propriétaire

Les formats qui perdent le moins de données à la conversion

Le format utilisé par la communauté

https://xkcd.com/1179/

Organisation des données

Organisation des dossiers

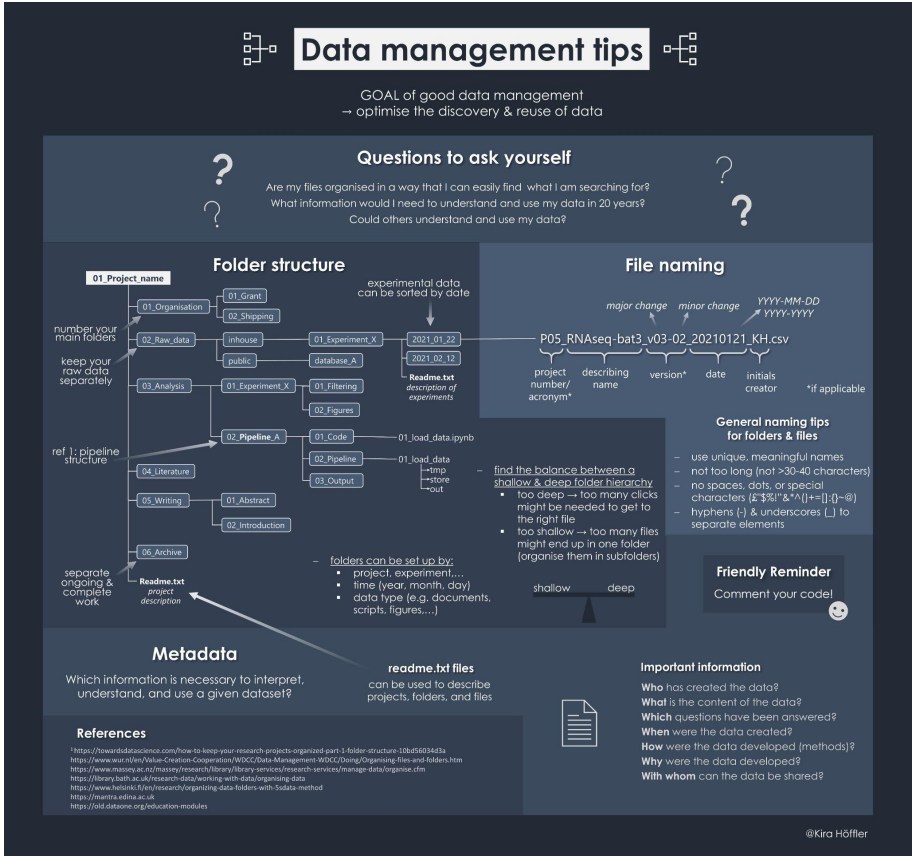
- Limitez le nombre de dossiers par niveau (5 ou 6 max)
- Allez du général au spécifique
- Choisissez des noms de dossiers explicites

Avec un README pour décrire le contenu (txt ou md)

Focus - Organisation des dossiers

- 01_project_management
  - 01_administration_files
    - .gitkeep
  - 02_accepted_grants
    - .gitkeep
  - 03_meeting_minutes
  - 04_related_literature
  - 05_data_management_plans
  - 06_notebook
- 02_material_and_methods
- 03_data
  - 001_defaultexp
  - 990_processed_data
    - .gitkeep
    - 001_defaultexp_processeddata
    - Sequencage
  - Readme_data_store.md
- 04_data_analysis
- 05_figures
- 06_disseminations
- 07_misc
- Data_Managment_Folder.jpeg
- datacite.yml
- LICENSE-CC-BY
- readme_fr_RDM.md
- README.md
- zenodo.4410128-2.svg

DOI 10.5281/zenodo.4410128



Focus - Organisation des dossiers

Accompagné d'un bon README (ici une proposition de recherche.data.gouv)

```
<Les textes d'aide sont écrits entre chevrons et sont destinés à être supprimés avant toute sauvegarde>

<Un README : Pourquoi ?

***La documentation d'un jeu de données doit être suffisante pour permettre à n'importe quel réutilisateur de comprendre et d'évaluer sa qualité. Le README fournit des informations complémentaires et accessibles lorsqu'elles ne sont pas déjà mises à disposition dans les métadonnées du jeu de données, dans les métadonnées des fichiers, et/ou dans des fichiers associés, ou des fichiers accessibles à long terme sur des services d'hébergement (entrepôt de fichiers ou publication). Dans ce dernier cas, nous vous prions d'inclure les URLs des documents en question ou leurs références***>

<Privilégier les formats text document (.txt), ou markdown (.md)>

Modèle de Fichier RDG README --- Général --- Version: 0.1 (2022-11-22)

Ce fichier README a été généré le [YYYY-MM-DD] par [NAME].

Dernière mise-à-jour le : [YYY-MM-DD].

# INFORMATIONS GENERALES

## Titre du jeu de données :

## DOI:

## Adresse de contact :

<Ci-après suit une liste d'éléments suggérés pour vous aider à enrichir, si nécessaire, votre documentation. La pertinence de certains dépend de la discipline du jeu de données ou du contexte de production>

<***Supprimer toute section non-applicable***>

# INFORMATIONS METHODOLOGIQUES

## Conditions environnementales / experimentales :

## Description des sources et méthodes utilisées pour collecter et générer les données :
<Si applicable, décrire les standards, les informations de calibration, les instruments utilisés, etc.>

## Méthodes de traitement des données :
<Si applicable, décrire le traitement des données et inclure tout détail pouvant être important pour réutiliser ou reproduire les données. Commenter chaque étape.
Par exemple, inclure les méthodes de nettoyage et d'analyse ; les codes et/ou algorithmes ; les procédés d'anonymisation ou de pseudonymisation pour les données sensibles concernant les humains ou des espèces menacées>

## Procédures d'assurance-qualité appliquées sur les données :

## Autres informations contextuelles :
<Toute information que vous considérez importante pour évaluer la qualité du jeu de données ou pour sa réutilisation : par exemple, des informations concernant les logiciels nécessaires pour interpréter les données.
Si applicable et non-inclus préalablement, ajouter les noms complets et les versions de tous les logiciels, de tous les paquets et de toutes les librairies nécessaires pour lire et interpréter les données *e.g.* pour compiler les scripts.>
```

```
# APERCU DES DONNEES ET FICHIERS


## Convention de nommage des fichiers :

## Arborescence/plan de classement des fichiers :


# INFORMATIONS SPECIFIQUES AUX DONNEES POUR : [NOM DU FICHIER]

<Le cas échéant, reproduire cette section pour chaque dossier ou fichier.
Les éléments se répétant peuvent être expliqués dans une section initiale commune.>

<Pour les données tabulaires, fournir un dictionnaire des données/manuel de codage contenant les informations suivantes :>
## Liste des variables/entêtes de colonne :

Pour chaque nom de variable ou entête de colonne, indiquer :

    -- le nom complet de la variable sous forme "lisible par les humains" ;
    -- la description de la variable ;
    -- unité de mesure, si applicable ;
    -- séparateur décimal *i.e.* virgule ou point, si applicable ;
    -- valeurs autorisées : liste ou plage de valeurs, ou domaine ;
    -- format, si applicable, e.g. date>

## Code des valeurs manquantes :
<Definir les codes ou symboles utilisés pour les valeurs manquantes.>

## Informations additionnelles :
<Toute information que vous jugez utile pour mieux comprendre le fichier>
```

https://recherche.data.gouv.fr/fr/categorie/33/guide/modele-de-readme

Et maintenant ?

Vous souhaitez

- Savoir comment remplir un plan de gestion de données ?
- Comprendre la différence entre PGD Structure et PGD Projet ?
- En savoir plus sur les métadonnées et ses standards ?
- Le cadre juridique des données ?

L'IFB propose une formation !

(le contenu des éditions précédentes est en ligne)

https://moodle.france-bioinformatique.fr/course/index.php?categoryid=10

Une belle équipe !

H. Chiapello

T. Denecker

J-F Dufayard

F. de Lamotte

P. Lieby

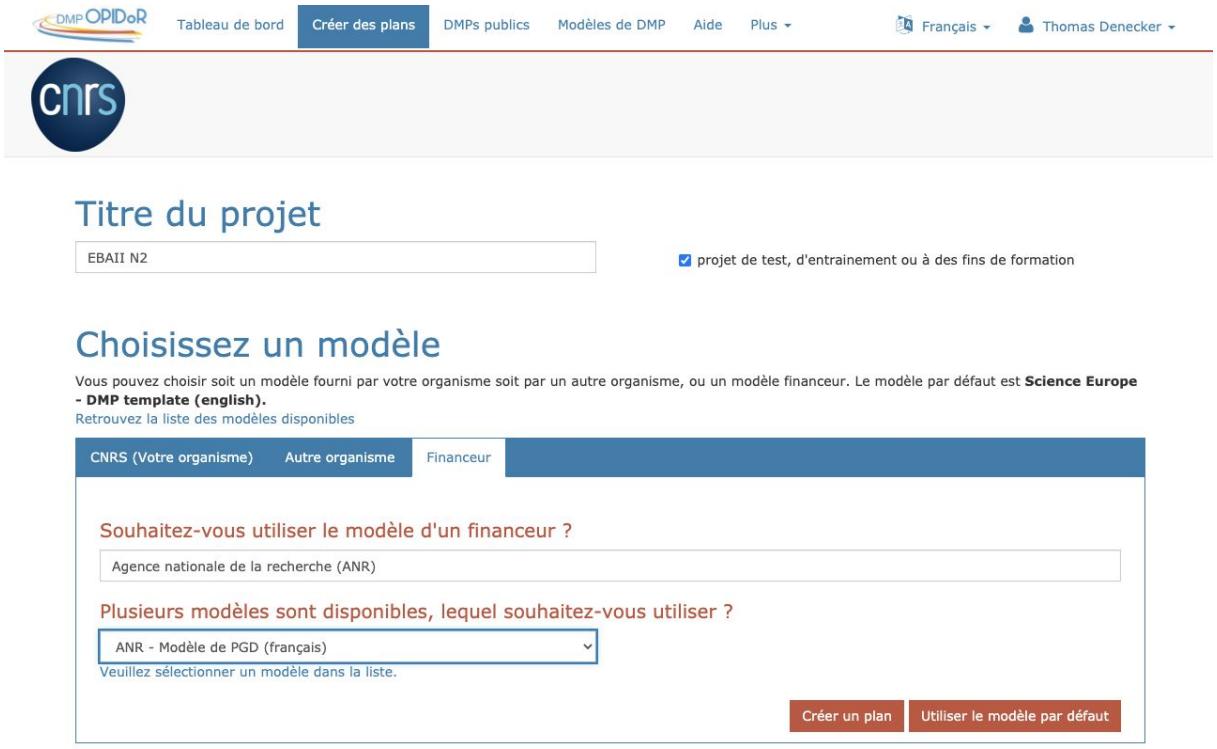
Y. Mahmah

G Sarah

J. Seiler

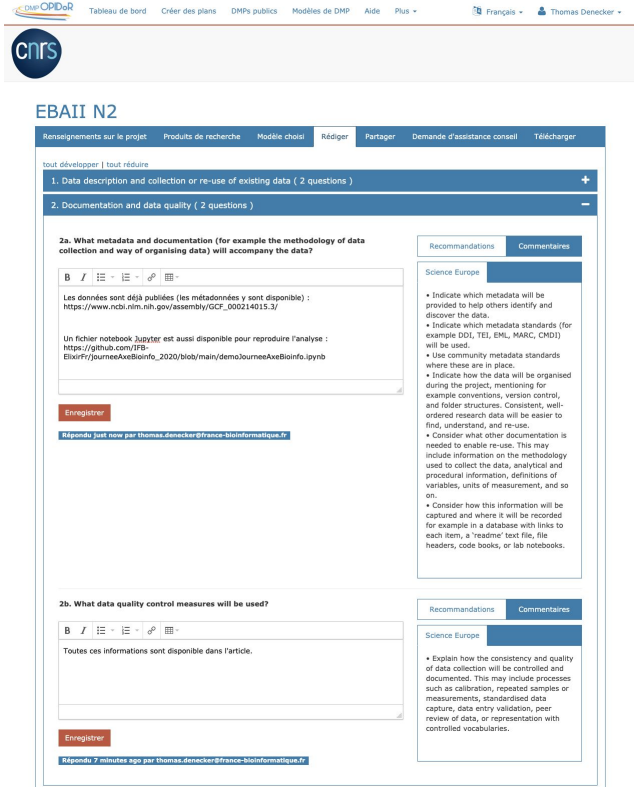
Comment FAIRe ? Et si on essayait !

Création d'un PGD



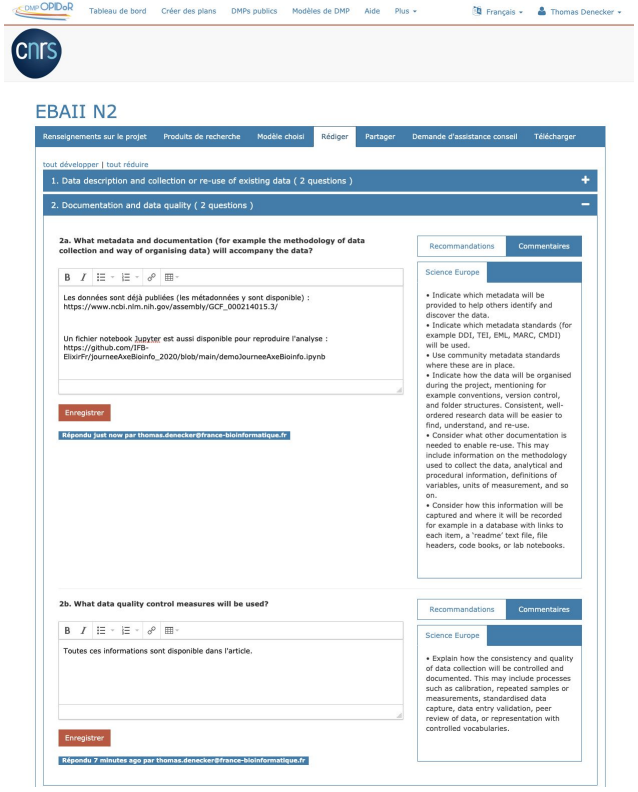
https://dmp.opidor.fr/plans/9346

Comment reproduire l'analyse ?



https://github.com/IFB-ElixirFr/FAIR_EBAII_n2/blob/master/demoFAIR_EBAII_n2.ipynb

Reproduire l'analyse sur Jupyter hub



https://jupyterhub.cluster.france-bioinformatique.fr/hub/login?next=%2Fhub%2F

Reproduire l'analyse en un click !

Au programme

- Notebook Jupyter (kernel bash)
- Téléchargement des données
- Import des scripts et des fichiers de paramétrage
- Réalisation des l'analyse
  - En parallèle
  - Sur le cluster
  - De façon reproductible
- Exploration préliminaire des résultats

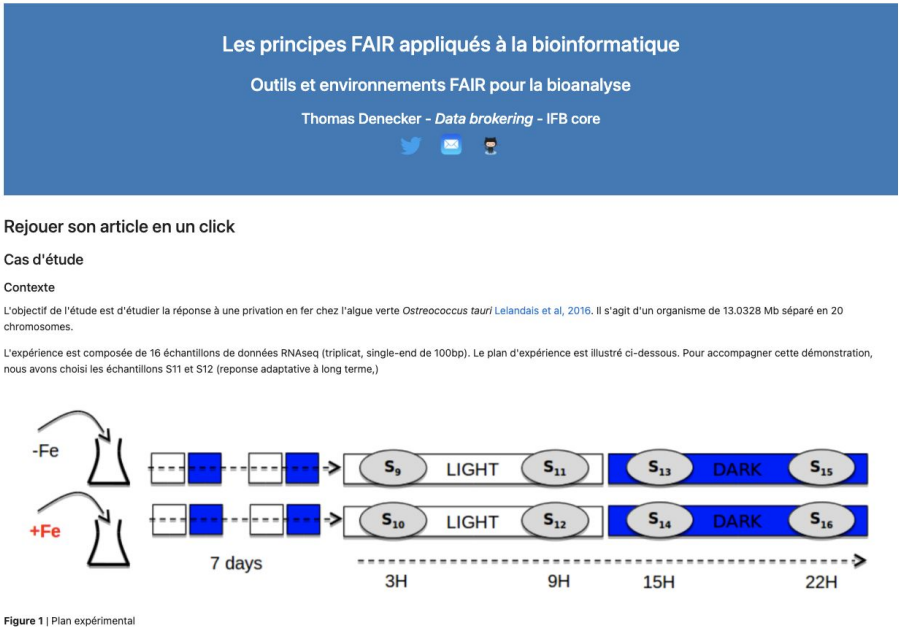
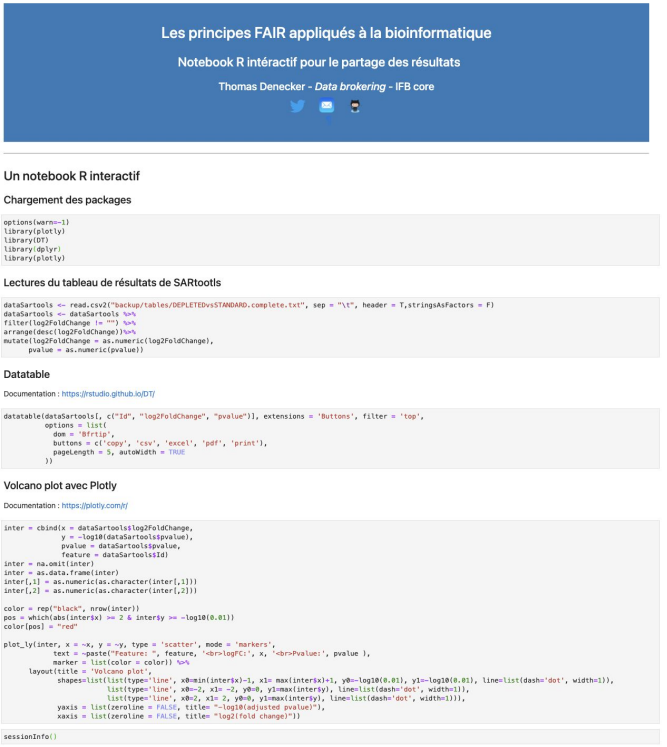


Figure 1 | Plan expérimental

Partager ses résultats avec un notebook intéractif

Au programme

- Notebook Jupyter (kernel R)
- Import des résultats
- Réalisation d'un tableau explorable avec datatable
- Réalisation d'un volcano plot avec plotly. Lors du survol d'un point, des informations sont retournées



Les principes FAIR appliqués à la bioinformatique

Notebook R intéractif pour le partage des résultats

Thomas Denecker - *Data brokering* - IFB core

Un notebook R interactif

Chargement des packages

```
options(warn=-1)
library(plotly)
library(DT)
library(dplyr)
library(plotly)
```

Lectures du tableau de résultats de SARtootls

```
dataSartools <- read.csv2("backup/tables/DEPLETEDvsSTANDARD.complete.txt", sep = "\t", header = T,stringsAsFactors = F)
dataSartools <- dataSartools %>%
filter(log2FoldChange != "") %>%
arrange(desc(log2FoldChange))%>%
mutate(log2FoldChange = as.numeric(log2FoldChange),
       pvalue = as.numeric(pvalue))
```

Datatable

Documentation : https://rstudio.github.io/DT/

```
datatable(dataSartools[, c("Id", "log2FoldChange", "pvalue")], extensions = 'Buttons', filter = 'top',
          options = list(
            dom = 'Bfrtip',
            buttons = c('copy', 'csv', 'excel', 'pdf', 'print'),
            pageLength = 5, autoWidth = TRUE
          ))
```

Volcano plot avec Plotly

Documentation : https://plotly.com/r/

```
inter = cbind(x = dataSartools$log2FoldChange,
              y = -log10(dataSartools$pvalue),
              pvalue = dataSartools$pvalue,
              feature = dataSartools$Id)
inter = na.omit(inter)
inter = as.data.frame(inter)
inter[,1] = as.numeric(as.character(inter[,1]))
inter[,2] = as.numeric(as.character(inter[,2]))

color = rep("black", nrow(inter))
pos = which(abs(inter$x) >= 2 & inter$y >= -log10(0.01))
color[pos] = "red"

plot_ly(inter, x = ~x, y = ~y, type = 'scatter', mode = 'markers',
            text = ~paste("Feature: ", feature, '<br>logFC:', x, '<br>Pvalue:', pvalue ),
            marker = list(color = color)) %>%
      layout(title = 'Volcano plot',
             shapes=list(list(type='line', x0=min(inter$x)-1, x1= max(inter$x)+1, y0=-log10(0.01), y1=-log10(0.01), line=list(dash='dot', width=1)),
                         list(type='line', x0=-2, x1= -2, y0=0, y1=max(inter$y), line=list(dash='dot', width=1)),
                         list(type='line', x0=2, x1= 2, y0=0, y1=max(inter$y), line=list(dash='dot', width=1))),
             yaxis = list(zeroline = FALSE, title= "-log10(adjusted pvalue)"),
             xaxis = list(zeroline = FALSE, title= "log2(fold change)"))
```

```
sessionInfo()
```