



**HAL**  
open science

## **Factory and Libraries for Automatic Metabolomic Exploration : F.L.A.M.E**

Marion Landi, Mélanie Pétéra, Mishari Monsoor, Gildas Le Corguillé,  
Christophe Duperier, Sophie Goulitquer, Jean-Francois Martin, Pierre  
Pericard, Etienne Thévenot, Marie Tremblay-Franco, et al.

► **To cite this version:**

Marion Landi, Mélanie Pétéra, Mishari Monsoor, Gildas Le Corguillé, Christophe Duperier, et al..  
Factory and Libraries for Automatic Metabolomic Exploration : F.L.A.M.E. 8. Journées Scientifiques  
du Réseau Français de Métabolomique et Fluxomique RFMF, May 2014, Lyon, France. 2014. hal-  
02743239

**HAL Id: hal-02743239**

**<https://hal.inrae.fr/hal-02743239v1>**

Submitted on 3 Jun 2020

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Marion LANDI <sup>1</sup>, Mélanie PETERA <sup>1</sup>, Mishar MONSOOR <sup>2</sup>, Gildas LE CORGUILLE <sup>2</sup>, Christophe DUPERIER <sup>1</sup>, Sophie GOULITQUER <sup>2</sup>, Jean-François MARTIN <sup>3</sup>, Pierre PERICARD <sup>2</sup>, Etienne THEVENOT <sup>4</sup>, Marie TREMBLAY-FRANCO <sup>3</sup>, Christophe CARON <sup>2</sup>, Franck GIACOMONI <sup>1</sup>.

- 1 PFEM, UMR1019 INRA, Centre Clermont-Ferrand-Theix, 63122 Saint Genes Champanelle, France
- 2 ABiMS, FR2424 CNRS-UPMC, Station Biologique, Place Georges Teissier, 29680 Roscoff, France
- 3 PF MetaToul-AXIOM, UMR 1331 Toxalim INRA, 180 chemin de Tournefeuille, F-31027 Toulouse, France
- 4 DRT/LIST/DM2/LADIS, Saclay Center CEA, F-91191, Gif-sur-Yvette, France



### INTRODUCTION

Le projet FLAME (Factory and Libraries for Automatic Metabolomic Exploration) a pour objectif de proposer à la communauté scientifique internationale un outil bioinformatique rapide et efficace, disponible via une interface web pour l'annotation expertisée et à haut débit des empreintes métabolomiques. Après une phase de validation, nous avons sélectionné la plateforme web scientifique Galaxy avec l'ambition de l'enrichir d'outils dédiés au traitement de données métabolomiques.

Dans le projet FLAME, notre approche a été conduite suivant deux angles distincts :  
 ⇒ celui de l'utilisateur sans connaissance en informatique, qui souhaite traiter ses données brutes de métabolomique ;  
 ⇒ celui d'une personne voulant contribuer à l'amélioration de cette plateforme par le développement de nouveaux outils et par son optimisation fonctionnelle.

### MATERIEL ET METHODES

#### A. La Plateforme GALAXY

Galaxy est une plateforme web scientifique entièrement libre et gratuite mettant à disposition des outils et des chaînes de traitement de données principalement dédiés à la génomique. Le projet source est disponible à l'adresse : <http://galaxyproject.org>.

La prise en main de la plateforme, à travers ses interfaces, ne nécessite aucune connaissance en informatique et son caractère modulaire permet son adaptation à notre propre domaine : la métabolomique.

Les fonctionnalités principales de la plateforme Galaxy sont :

- ◆ de bénéficier d'un compte par utilisateur assurant la conservation des traitements ;
- ◆ de disposer d'une totale traçabilité des analyses effectuées ;
- ◆ la possibilité de partager des résultats entre utilisateurs ;
- ◆ la création et l'utilisation d'enchaînements automatiques d'outils.

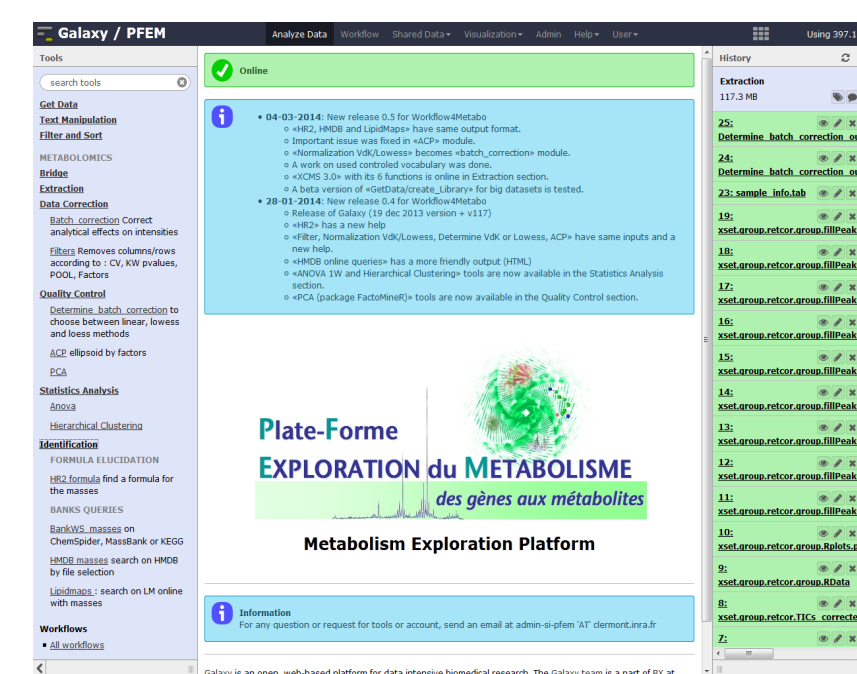


Image 01 : Interface générale de la plateforme web Galaxy.

#### B. Les « workflows »

Une des fonctionnalités majeures de la plateforme Galaxy est de pouvoir enchaîner une multitude d'outils, pré-paramétrés, de manière à construire des « workflows ». L'objectif de la construction d'un workflow par un expert est double : celui de correspondre à une stratégie d'analyses puis de le diffuser à d'autres utilisateurs moins confirmés. Cette étape de construction est menée de manière graphique (cf : Figure 2)

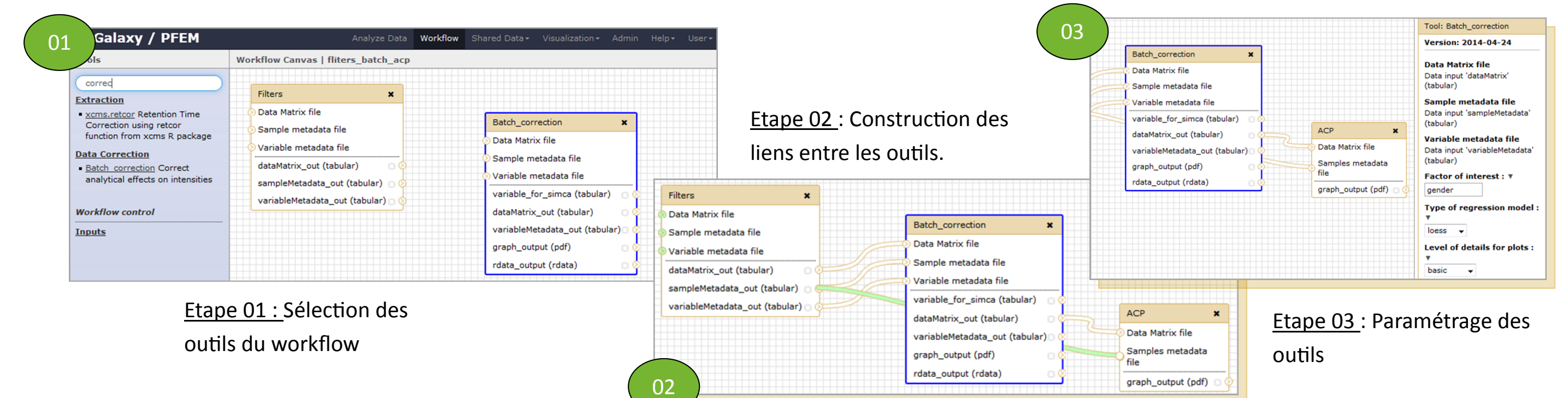


Figure 02 : Principe de construction d'un workflow via l'interface de Galaxy.

#### C. Spécifications du projet F.L.A.M.E.

Les réalisations effectuées à travers le projet FLAME ciblent :

- ⇒ **des contributeurs** issus de la communauté métabolomique avec :
  - ◆ L'intégration d'outils existants ;
  - ◆ Le développement de nouveaux outils dédiés aux études métabolomiques ;
  - ◆ Le partage de bonnes pratiques (procédures de mises à jour, galaxyfication).
- ⇒ **les utilisateurs sans connaissance en informatique** avec :
  - ◆ leur formation à l'utilisation de Galaxy ;
  - ◆ l'apport d'outils et de workflows « clé en main » ;
  - ◆ l'amélioration de l'ergonomie des interfaces.

### RESULTATS

#### Intégration et développement d'outils

Localement, une dizaine d'outils ont été développés et/ou intégrés dans l'environnement Galaxy.

L'aspect fédérateur de galaxy a permis d'établir de solides collaborations avec les précurseurs de l'utilisation de Galaxy en Métabolomique : la plateforme bioinformatique **ABiMS** de Roscoff, membre de l'institut Français de Bioinformatique (**IFB**) et avec les équipes de l'infrastructure nationale de métabolomique **MetaboHUB**. De ce travail collaboratif, résultent la création d'une instance de la plateforme Galaxy dédiée à la Métabolomique contenant près d'une vingtaine d'outils.



#### Formations et Réseaux

Montage de formations internes et d'ateliers nationaux sur l'initiation à Galaxy dans un contexte « métabolomique ».

Participation à des ateliers d'intégration d'outils sous Galaxy.

Participation à l'initiative « IFB - GT Galaxy France » : groupe de travail national chargé de fédérer l'activité française autour de Galaxy.

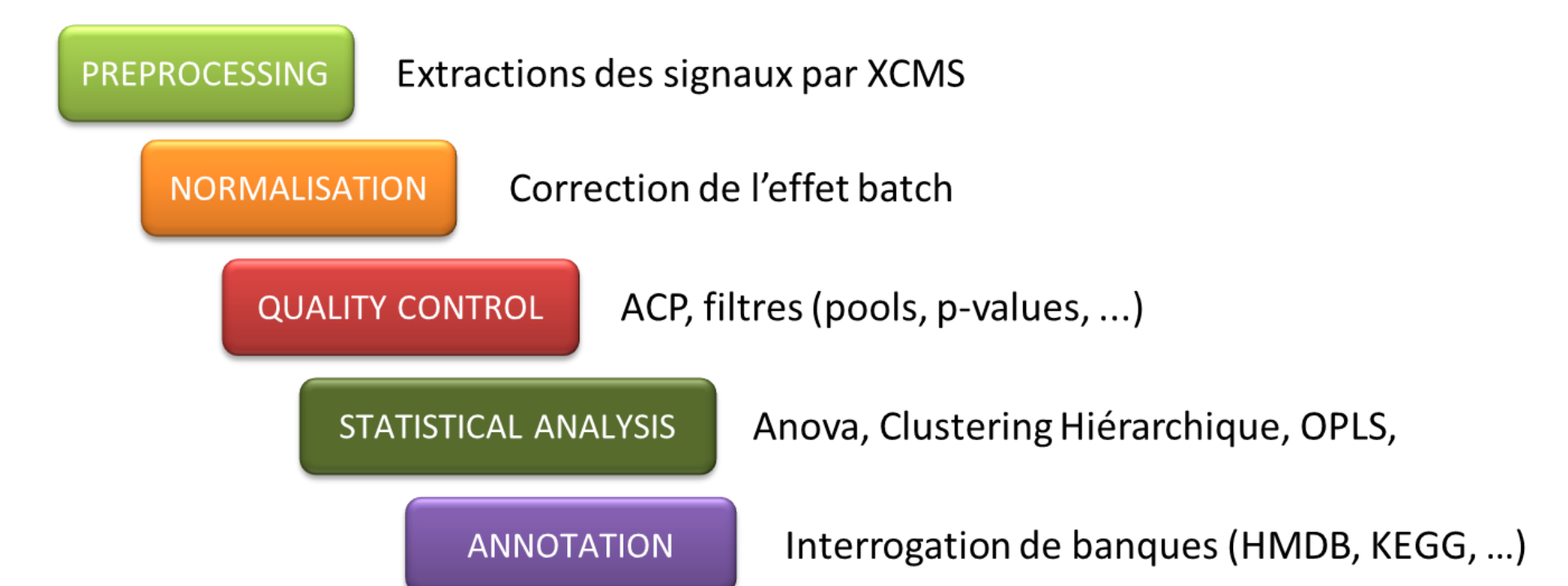


Figure 03 : Etapes de traitement des données en métabolomique disponible dans Galaxy.

#### Contribution à l'ergonomie

Design des interfaces web des outils (choix des paramètres et écritures d'aides)  
 Etablissement et partage d'un vocabulaire contrôlé entre les outils et dans la communauté.

### CONCLUSION

La première phase du projet a permis d'établir de solides liens avec plusieurs acteurs et animateurs de la communauté métabolomique. L'équipe du projet FLAME participe aujourd'hui activement au développement et à la réalisation de la première instance Galaxy, collaborative, pour la métabolomique :

<http://workflow4metabolomics.org>

Cet environnement met à disposition des laboratoires de production et de traitement de données une boîte à outils aujourd'hui complète ainsi que des enchaînements pré-paramétrés et optimisés.

La porte est ouverte à de nouvelles collaborations pour le développement et l'intégration d'outils ainsi qu'à vos suggestions sur le design de « workflows ».

