



24 - 26 Mai 2023
Perpignan

ATELIERS THÉMATIQUES 15èmes JS du RFMF

Le 23 mai de 14h à 17h

ATELIER 1 :

Titre de l'atelier : Empreinte ou profil RMN. Traitement interactif d'une série de spectres RMN 1D avec NMRProcFlow.

Personnes encadrant l'atelier : Daniel JACOB daniel.jacob@inrae.fr
Catherine DEBORDE catherine.deborde@inrae.fr

Public envisagé et les prérequis :

- Public : intéressé par les approches de RMN métabolomique 1D ^1H (profil quantitatif ou empreintes).
- Prérequis : notion de lecture / retraitement d'un spectre RMN

Objectif de l'atelier :

Ex : L'objectif est de présenter les différentes approches de traitement d'une série de spectres RMN 1D ^1H pour les approches non-ciblée (empreintes) ou ciblées (quantification relative ou absolue) par intégration, bucketing/binning avec des exemples en métabolomique des plantes et en authenticité des vins.

La première partie de l'atelier présentera les potentialités de l'outil NMRProcFlow pour prétraiter et traiter de manière interactive une série de spectres RMN 1D : phasage, ligne de base (locale ou globale), réalignement local de pics, intégration pour les approches non-ciblée (empreinte) et ciblée (profil quantitatif).

La deuxième partie présentera les dernières options intégrées dans l'outil depuis sa publication en 2017.

L'atelier sera ponctué de prises en main de l'outil sur un jeu-test de spectres par les participants.

Nb de places maximum : 20 max

ATELIER 2 :

Titre de l'atelier : La métabolomique des écosystèmes microbiens en environnement, santé et biotechnologie

Personnes encadrant l'atelier : Nicolas Creusot, Cyril Jousse (visio) et Binta Dieme

Public envisagé et les prérequis :

- Public : tout public (étudiant-e, personnel technique, enseignant-e, chercheur-e)
- Prérequis : Bonne connaissance des workflows de métabolomique, en particulier dans l'étude des communautés microbiennes seules ou en interaction avec un hôte (holobionte)

Objectif de l'atelier :

1. Appréhender la métabolomique des communautés et ses objectifs.
 - La métabolomique des écosystèmes quésaco ? éco-métabo , méta-métabo ?
 - Les enjeux des systèmes microbiens (complexes)
 - L'initiative « réseau thématique » EcoMet.
 - Identification de questions clefs et priorisation
 2. Concevoir le-s workflow-s idéal-aux afin de mener à bien une expérimentation preuve de concept autour du « qui fait quoi » dans une communauté ?

Cette partie se fera en sous-groupes avec une restitution commune.

 - Les outils et les méthodologies utiles, utilisés, ou en développement.
 - Les différentes étapes d'un workflow de métabolomique d'une communauté microbienne
 - Méta-omiques, multi-omiques et autres « méta-données » du système microbien.
- N.B. Les groupes seront structurés en fonction de l'audience
3. Et la suite !? brainstorming autours des solutions proposées
 - Nous avons conçu un/des workflow/s (image parfaite ou puzzle incomplet?) –Quels sont les gaps qui existent ?
 - Nous pouvons réaliser ce-s workflow-s (quelles ressources, quels délais?).
 - Nous allons diffuser ce-s workflow-s (publication ? Enseignement?)

Nb de places maximum : 50 max (organisation en sous-groupes)

ATELIER 3 :

Titre de l'atelier :

Suivi d'une analyse métabolomique pas à pas permettant l'identification des biomarqueurs à partir de données LC-HRMS

Personnes encadrant l'atelier :

Chaïb Slimane : slimane.chaib@univ-perp.fr

Carriot Nathan : ncarriot@gmail.com

Public envisagé et les prérequis :

- Public : Personnes débutantes en métabolomique. L'objectif de cet atelier est de proposer un workflow clair et utilisable pour les analyses métabolomiques. Un jeu de données sera fourni afin que chaque participant puisse effectuer en direct toutes les étapes. Les participants peuvent également suivre l'atelier avec leurs propres données.
- Prérequis : Des notions en métabolomique, statistiques et réseaux de similarités spectrales (néanmoins l'atelier vise les personnes débutantes en métabolomique). Et de la bonne humeur !

Objectif de l'atelier :

Cet atelier présentera un workflow post acquisition de données LC-HRMS visant à déterminer de potentiels biomarqueurs entre différents groupes. Plusieurs étapes de ce workflow seront développées :

1. Introduction des étapes clefs pour la création de matrice via le logiciel MZmine. Cette étape permettra de comprendre les différents paramètres à utiliser pour la création d'une matrice en métabolomique. Une description complète des paramètres permettra à l'utilisateur de les optimiser en fonction de son jeu de données.
2. La matrice générée sera, dans un second temps, utilisée pour la détermination de biomarqueurs à l'aide d'outils statistiques sous R et Metaboanalyst (PCA, PLS-DA, Heatmap, etc).
3. Une fois les biomarqueurs (ou VIPs) potentiellement déterminés, une troisième étape utilisant les réseaux de similarités spectrales aidera à les annoter (GNPS et Metgem). L'utilité et les paramètres déterminant la création de réseaux de similarités spectrales seront discutés. Ces derniers permettront d'explorer le métabolome des différents échantillons avec Cytoscape et de faciliter l'annotation des potentiels biomarqueurs.

4. Enfin, une rapide description des banques de données en ligne sera faite. Les annotations seront confrontées à une analyse avec le logiciel Sirius afin de valider ou réfuter l'annotation obtenue.

Le but est d'obtenir un workflow général qui devra être ajusté en fonction du jeu de données de chacun et qui comprend les étapes clefs d'une analyse de métabolomique :

- Création d'une matrice à partir des données LC-HRMS,
- Utilisation d'outils statistiques pour l'interprétation de la matrice
- Création de réseaux de similarités spectrales
- Identification des biomarqueurs

Enfin, il est indispensable de mentionner que des formations sur la plateforme W4M sont à réaliser afin de mieux en comprendre les rouages pour optimiser le workflow ainsi que la création de matrice.

Pour préparer l'atelier...

- Logiciels spécifiques à télécharger en amont : R et Rstudio, MZmine (v2.53), Cytoscape, MetGem, Sirius.
- Avoir un compte actif sur la plateforme GNPS et Workflow4Metabolomic

Nb de places maximum : 20 max