

Utilisation d'une application de classification et d'analyse multivariée (PLS) sous R-studio installé sur un serveur et connecté à une base de données .

Eric Latrille (CATI CODEX)

**« TyPol »**  
**Typologie des micro-polluants**

**Estimation du devenir dans l'environnement et des effets écotoxicologiques des contaminants organiques à partir de leurs propriétés moléculaires**

# Contexte (1/2)

- Nombre et diversité des contaminants organiques potentiellement présents dans l'environnement
- 30000 à 100000 substances concernées par l'évaluation des risques environnementaux (Pesticides, REACH)
- Impossibilité d'étudier au cas par cas (temps, coût)



➔ Développement des prévisions avec des relations « Structure-Activité » (Quantitative Structure-Activity Relationship: QSAR)

# Contexte (2/2)

- Besoin de classer les contaminants organiques en fonction des propriétés jouant un rôle essentiel dans les mécanismes de devenir et d'impact
- Intérêt d'utiliser des propriétés moléculaires et des QSAR pour ce genre d'approche

➔ Les contaminants ne seraient plus classés par familles chimiques, mais selon des propriétés directement reliées aux processus d'intérêt



# Objectifs

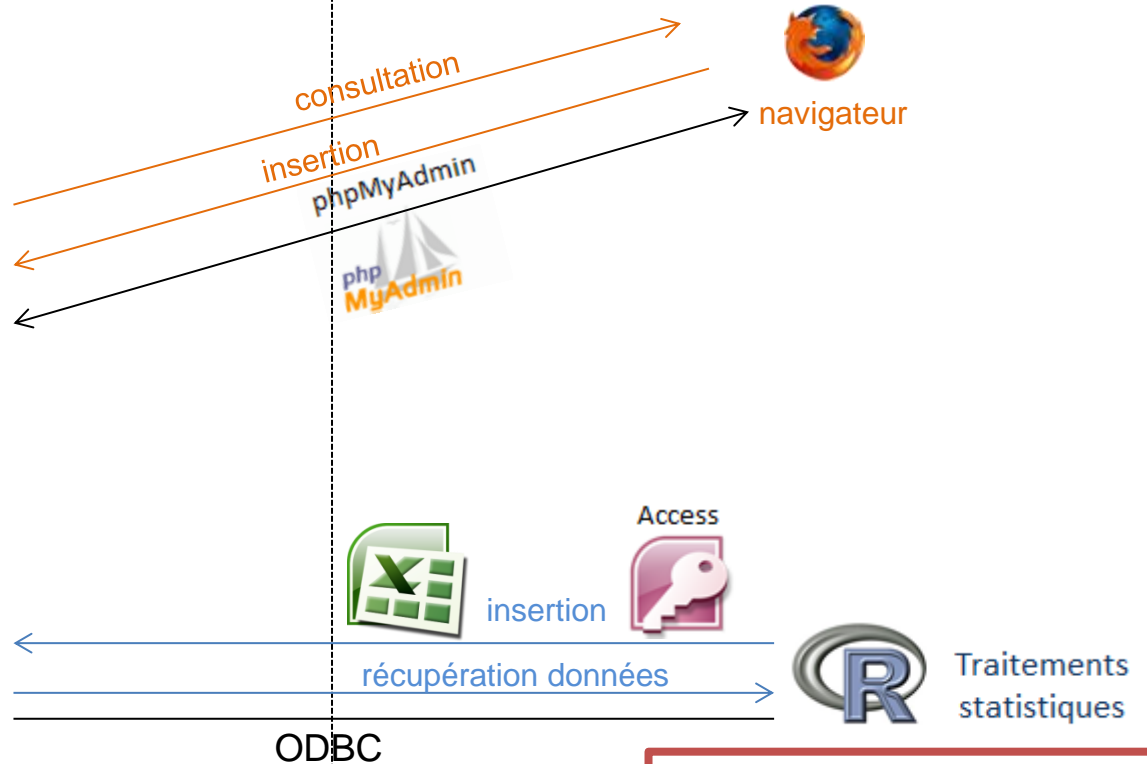
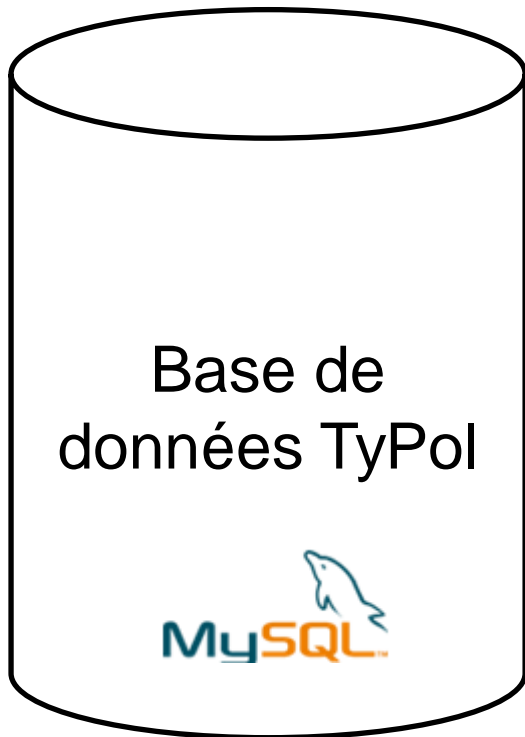
- Concevoir un outil pour **sélectionner des molécules « modèles »** selon des critères phénoménologiques (comportements différents) et opérationnels (intensité des risques actuels ou futurs)
  - Aboutir à un **outil mutualisable (BDD)** qui permettra d'argumenter les choix de contaminants modèles pour réaliser des études concernant la dispersion, les effets écotoxicologiques des contaminants organiques, ...
- 250 molécules, 40 descripteurs moléculaires, 20 paramètres environnementaux



# Architecture de TyPol (2010-2013)

Serveur FOIX

Machine locale



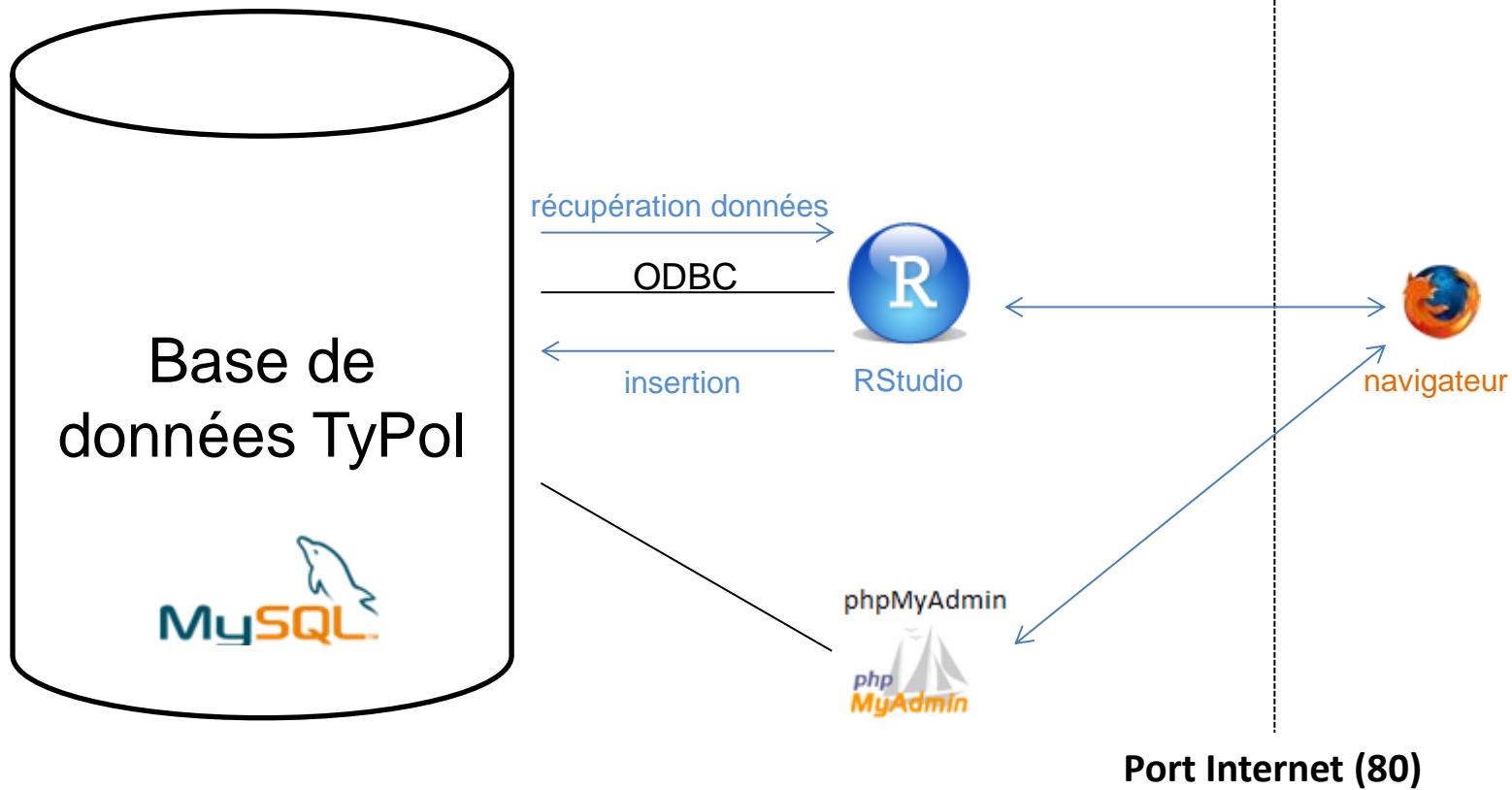
Ouverture du port MySQL (3306)  
Port Internet (80)

- Problèmes de versions
- Problèmes de visibilité de la base de données

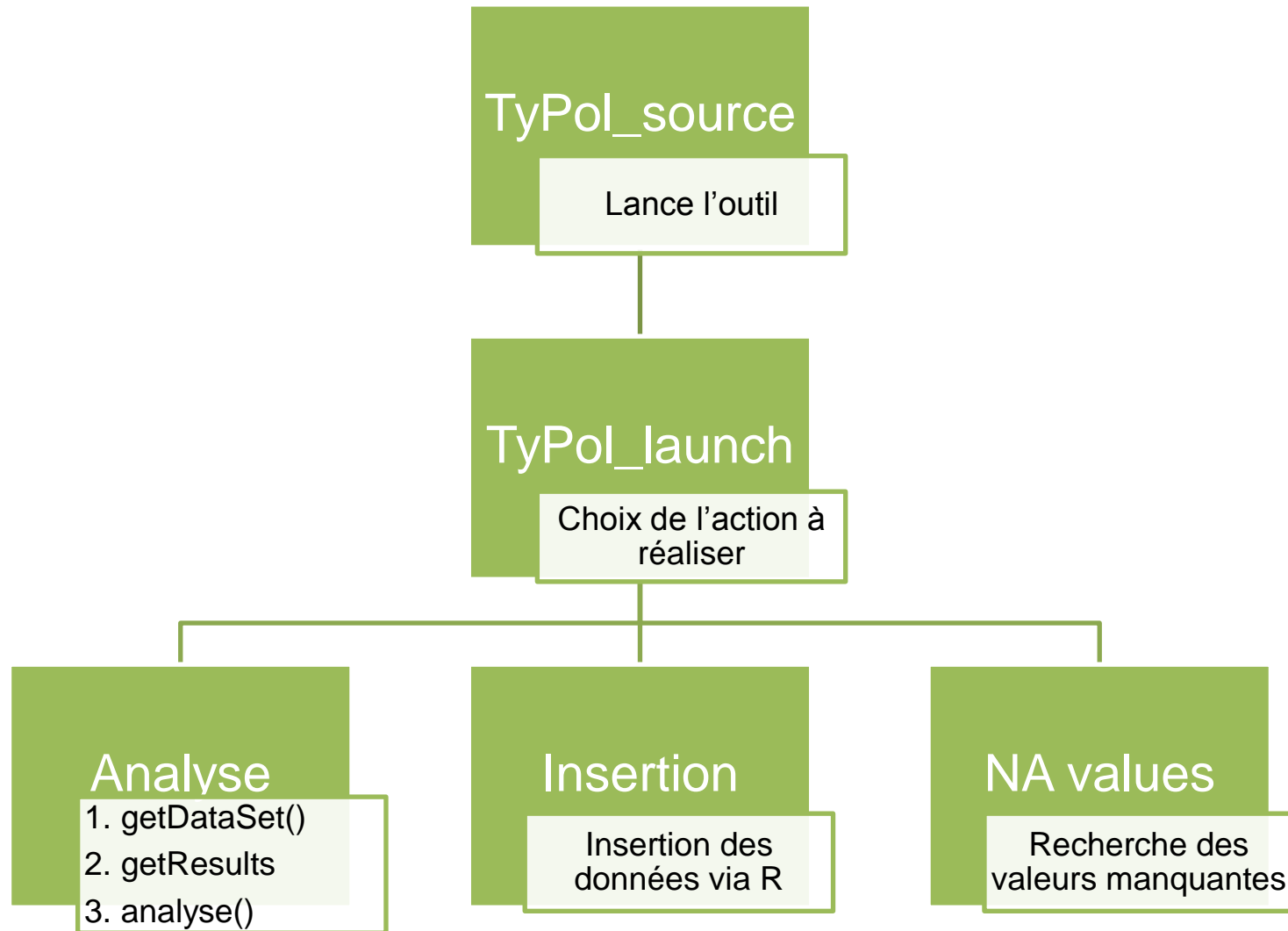
# Architecture de TyPol (2014)

Serveur FOIX

Machine locale




# Arborescence des programmes



# Connexion serveur WEB du LBE depuis l'extérieur

**Adresse :** <http://147.99.69.199/>

Authentification requise ✕

 Le site <http://147.99.69.199> demande un nom d'utilisateur et un mot de passe. Le site indique : « LBE »

Utilisateur :

Mot de passe :



# Accueil RStudio

Adresse : <http://147.99.69.199/rstudio/>

Sign in to RStudio

---

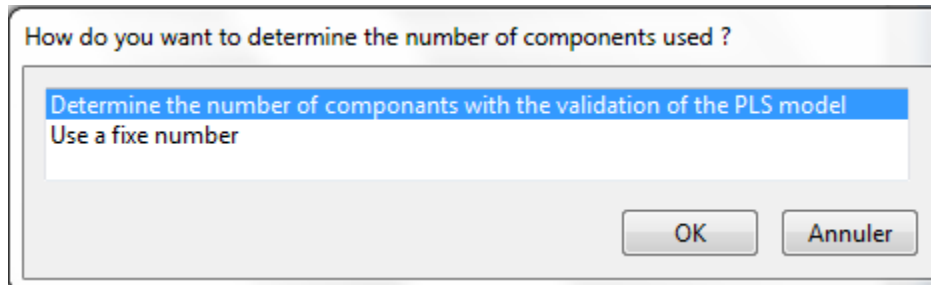
**Contact Eric.Latrille@supagro.inra.fr  
if you need an access to this service.**

Username:

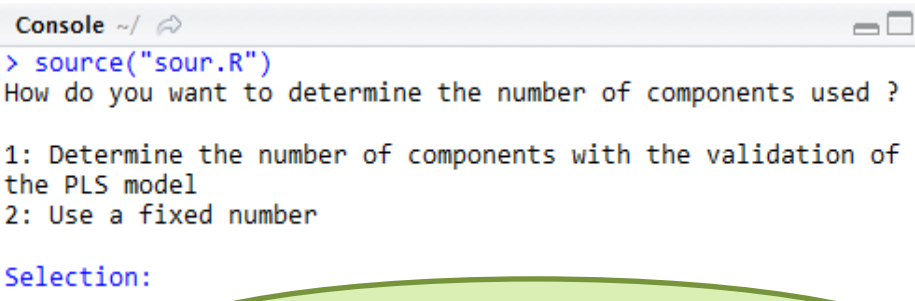
Password:

Stay signed in

# Interaction outil ↔ utilisateur



Passage vers RStudio



Nouvelle solution : RPMG



Evoluer vers shiny (pages HTML interactives)

Initialement : utilisation de la librairie tcltk → nécessite un serveur X

Pb : pas de serveur X sur le serveur de Narbonne (sécurité)

Solution 1 : utilisation de la console R :

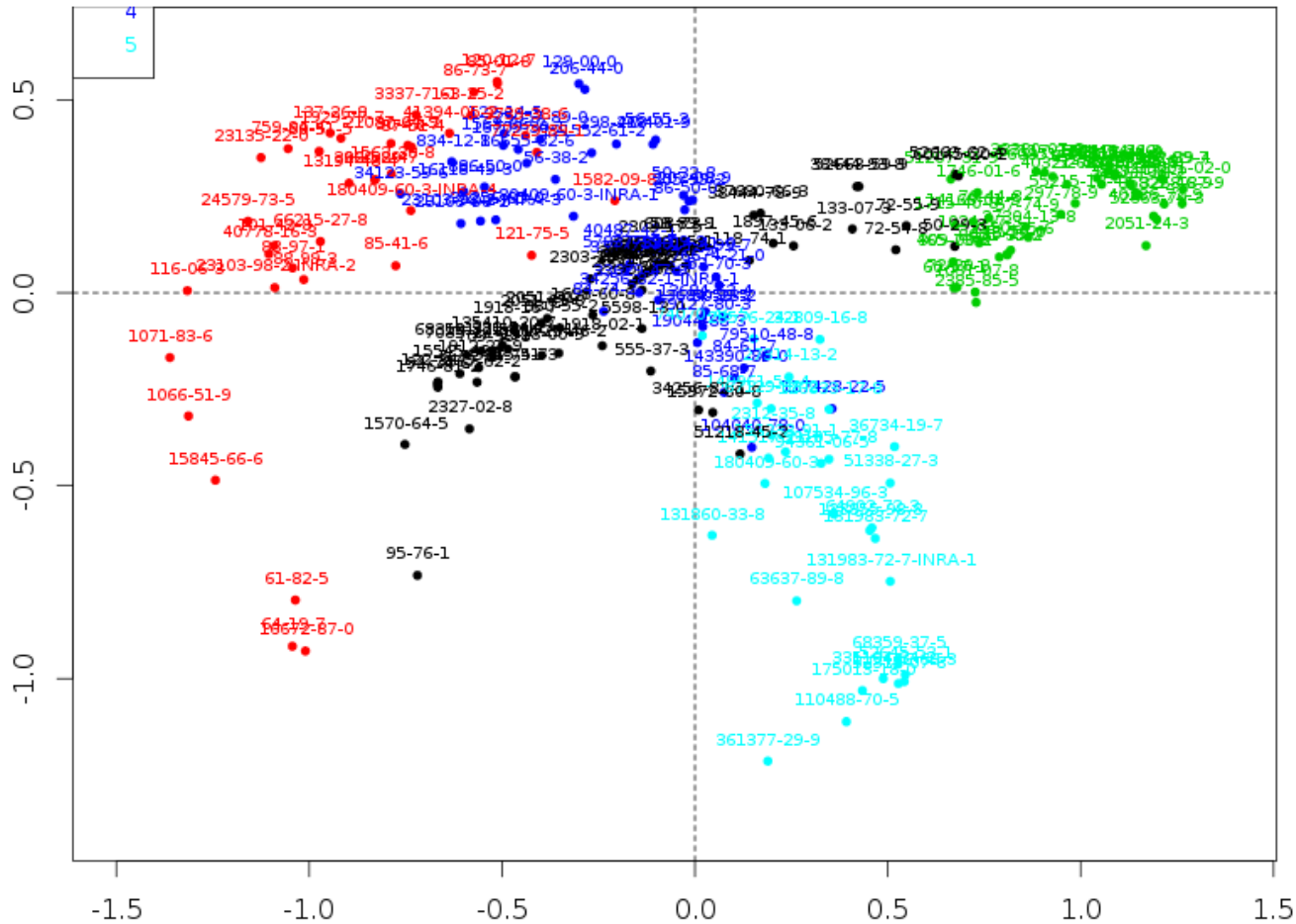
- sélection d'un seul élément
- pas ergonomique pour la sélection de plusieurs éléments (molécules)

Solution 2 : utilisation d'une nouvelle librairie

# Classification + PLS

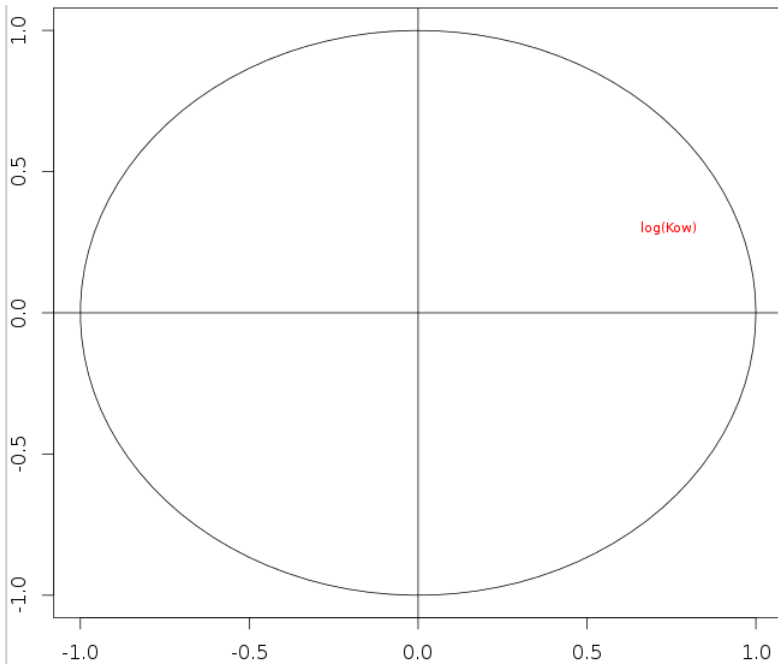
Premier plan factoriel :

Individuals factor map (PLS Spline Regression)

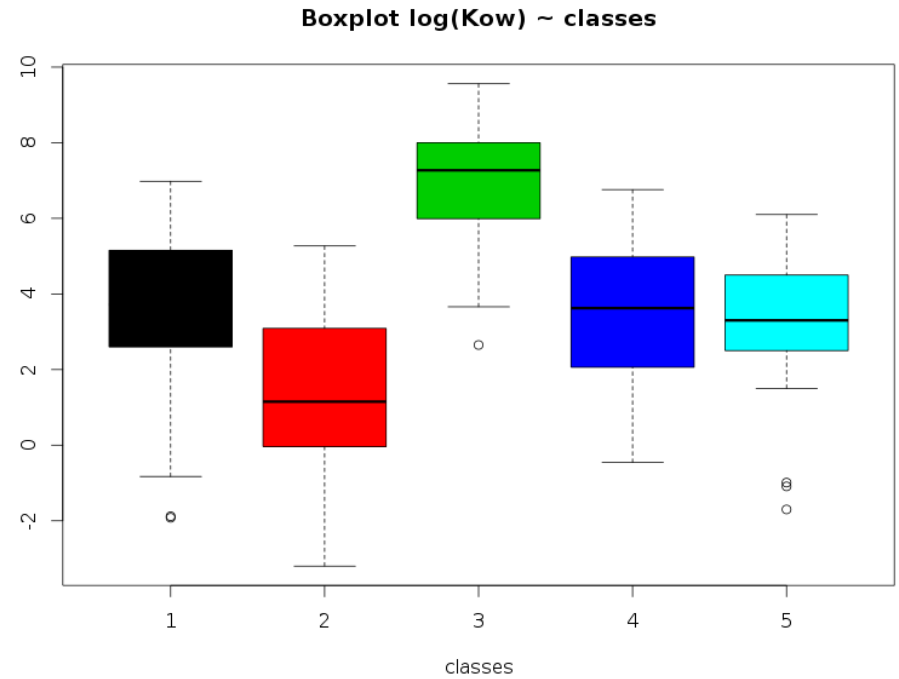


# Prediction

Cercle des corrélations :



Boxplot :





# Merci de votre attention

# Merci de votre participation

Laure Mamy, Pierre Benoit, Enrique Barriuso, Carole Bedos, Fabienne Bessac,  
Christian Bockstaller, François Laurent, Fabrice Martin-Laurent, Xavier Louchart,  
Cécile Miège, Dominique Patureau,  
Sophie Vitrant, Anaïs Labrunie, Marie Vincens, Ziang Li, Enguerrand de Villiers  
Virginie Rossard, Rémie Servien, Eric Latrille