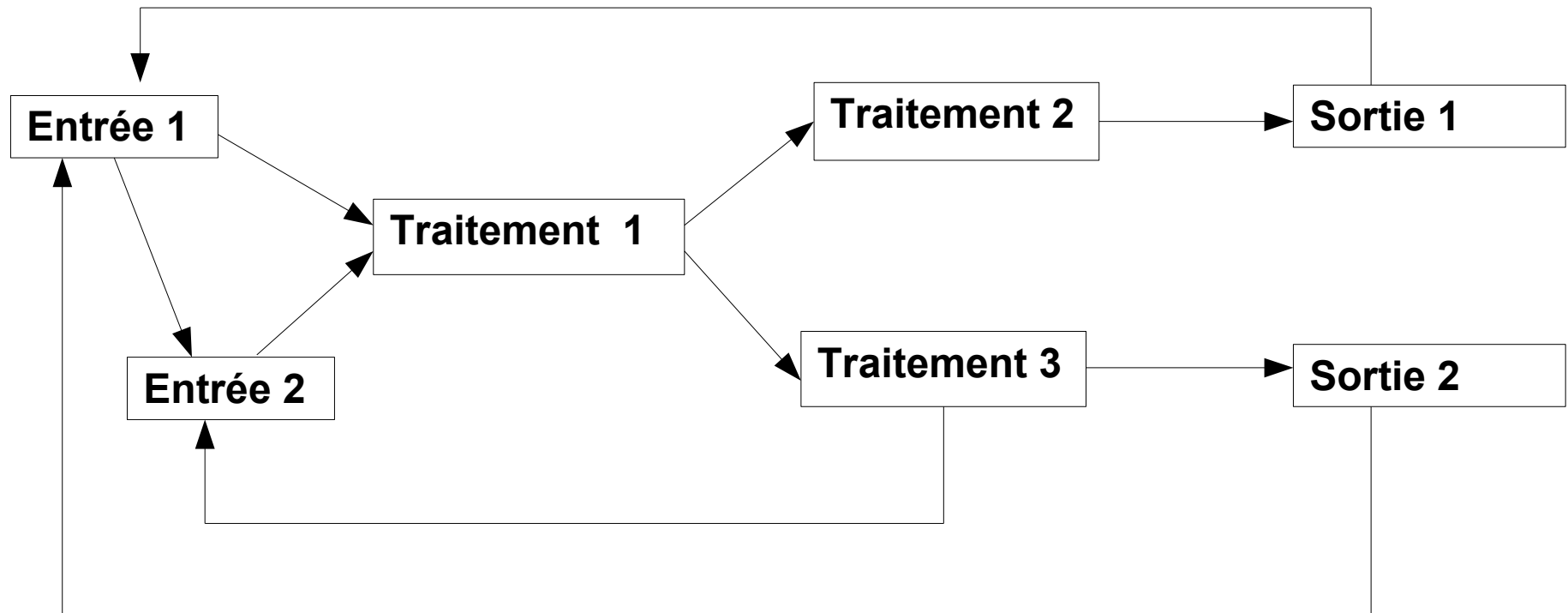


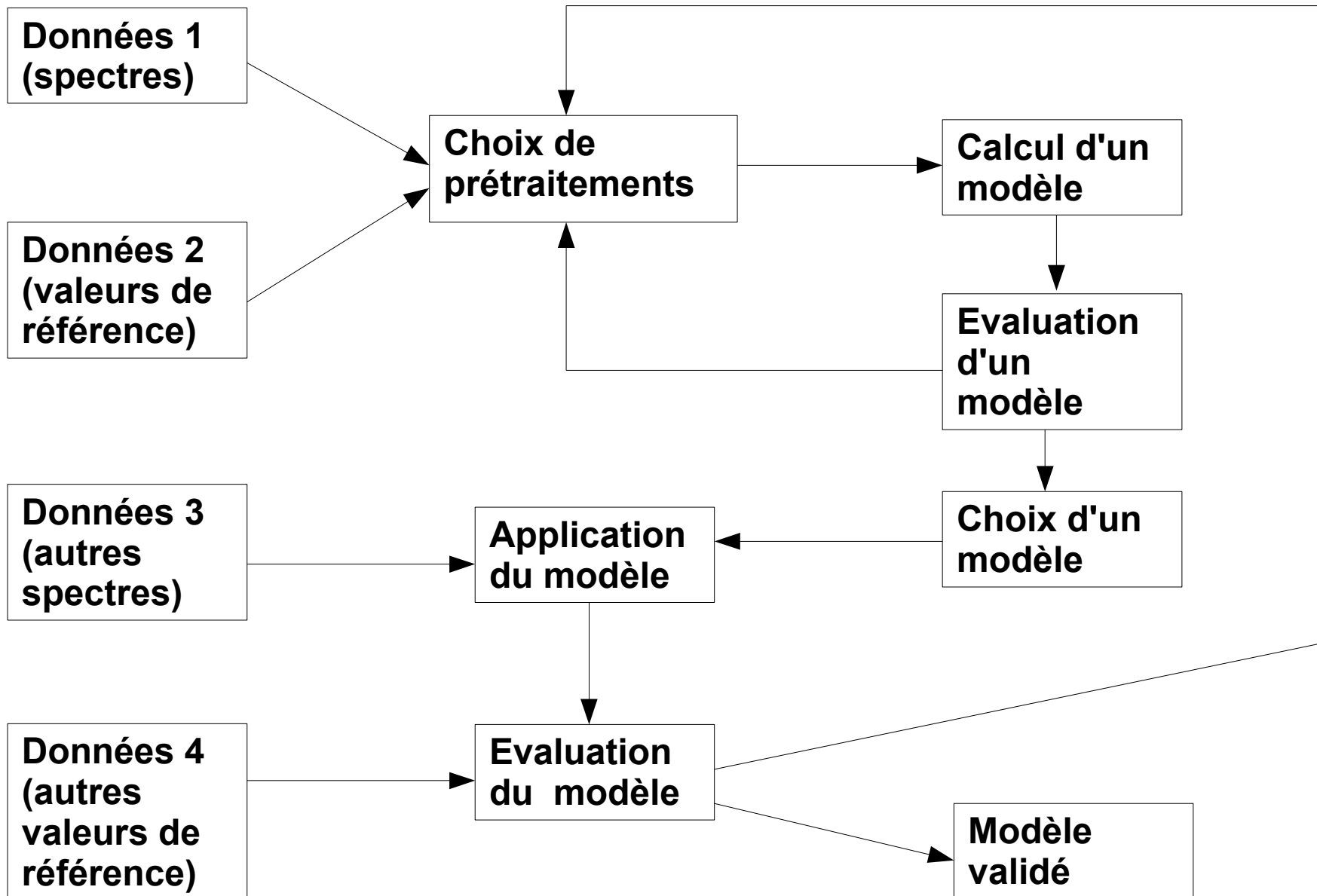
Choix d'un workflow pour une application de chimiométrie

Définition

- modélisation et automatisation de flux d'information
- enchaînement automatisé des différentes opérations et étapes de validation d'une tâche plus ou moins complexe



Exemple en chimiométrie



Choix d'un workflow

Source
« Internet »

> Langages :

Taverna
YAWL



> Solutions
développées
Knime



Source
« P.Neveu »



> **Open Alea**

- + développeur /MPL (C.Pradal)
- + interface graphique
- pas d'interface web
- petite communauté (suivi?)



> **Galaxy**

- + simple d'utilisation
- + complet
- + grosse communauté



> **Moby**

non évalué
plutôt construction ?

Exemple de workflow sous Galaxy

Galaxy

Analyze DataWorkflowShared DataVisualizationAdminHelpUser

Using 131.2 MB

Tools

search tools

[Get Data](#)[Data management](#)[Plot figures](#)[PCA](#)[Pretreatments](#)[Orthogonal Projections](#)[Regressions](#)[Discriminations](#)[Deconvolutions](#)[Multitable/Multiway Analysis](#)[Fasta](#)

Workflow control

Inputs

Workflow Canvas | simplePLS

Input dataset x
output

applies Savisky-Golay x
Select X data
outfile1

calculates a PLS Regression x
Select X data
Select y data
outfile1 (csv)
outfile2 (csv)
outfile3 (csv)
outfile4 (xml)

Input dataset x
output

applies a regression model to a new set of spectra x
Select the regression model
Select X data
ypredtest (csv)

Input dataset x
output

see references vs predictions x
Select Yref
Select Ypred
outfigure1 (png)

Details

Edit Workflow Attributes

Name:
simplePLS

Tags:

Annotation / Notes:
Describe or add notes to workflow
Add an annotation or notes to a workflow; annotations are available when a workflow is viewed.