

# Huitièmes Journées Scientifiques du Réseau Français de Métabolomique et Fluxomique

19-21 Mai 2014

## Université Claude Bernard Lyon 1 UFR des Sciences

Domaine Scientifique de la Doua - Bâtiment La Rotonde,  
14-16 avenue des arts, 69100 Villeurbanne

## Le Comité d'Organisation

### Comité Local Lyonnais

*Marie-Geneviève DIJOUX-FRANCA*

*Anne-Emmanuelle HAY*

*Isabelle KERZAON*

*Guillaume MEIFFREN*

*Serge MICHALET*

[LEM-CESN](#) - Lyon

*Marjolaine REY*

[BF2i](#) - Villeurbanne

*Agneta KISS*

*Gilles RAUTUREAU*

[ISA](#) - Villeurbanne

*Gabriel BAVEREL*

[SFR santé Lyon Est](#) - Lyon

*Augustin SCALBERT*

[IARC](#) - Lyon

### Comité National INRA Bordeaux

*Catherine DEBORDE, Muriel GAUTHIER, Alain GIRARD, Florence LARTIGAUT, Marie-Lou LOMBARD,*

*Dominique ROLIN*

**Développement d'une méthode d'analyse métabolomique par introduction directe des échantillons biologiques sur un spectromètre de masse à très haute résolution FTICR-MS**

**B. Xue<sup>1,2,3</sup> ; S. Alves<sup>4</sup> ; A. Paris<sup>5</sup> ; François Fenaille<sup>6</sup> ; Benoit Colsch<sup>6</sup> ; J-C. Tabet<sup>4\*</sup> ; R. B. Cole<sup>4\*</sup> ; C. Junot<sup>6\*</sup> ; E. Rathahao-Paris<sup>1,2,3\*</sup>**

*1 INRA, UMR1145 Ingénierie Procédés Aliments, F-75231 Paris, France ;*

*2 AgroParisTech, UMR1145 Ingénierie Procédés Aliments, F-75231 Paris, France ;*

*3 CNAM, UMR1145 Ingénierie Procédés Aliments, F-75231 Paris, France ;*

*4 UPMC, Laboratoire CSOB, Institut Parisien Chimie Moléculaire, F-75252 Paris, France ;*

*5 UMR7245 MCAM, Muséum National d'Histoire Naturelle, F-75005 Paris, France ;*

*6 Laboratoire d'Etude du Métabolisme des Médicaments. DSV/iBiTec-S/SPI. CEA-Saclay. F-91191 Gif sur Yvette Cedex, France*

*\* MetabolomeIDF-MetaboHUB (ANR-11-INBS-0010) <http://www.metabohub.fr/>*

Après la production de données métabolomiques sur un instrument analytique (e.g. MS, RMN), le prétraitement de ces données représente une étape incontournable pour extraire des variables informatives et exploitables pour comprendre le phénomène biologique étudié.

Dans notre travail, l'introduction directe des échantillons biologiques dans une source électrospray couplé à un spectromètre de masse à très hautes résolution et exactitude en masse, ESI-FTICR-MS, a été utilisée pour produire des données métabolomiques à haut débit. Ce type d'instrument étant très peu utilisé en routine pour des applications en métabolomique, il n'existe donc aucune méthode décrite pour réaliser le prétraitement des données ainsi produites.

Un algorithme a été développé permettant de récupérer des données produites par une série d'analyses sous forme de matrice après correction de la ligne de base des spectres de masse. L'analyse de la fréquence d'apparition des variables dans le jeu de données obtenu a permis de sélectionner des variables informatives les plus largement représentées par les échantillons analysés. Une analyse en composante principale a permis de déterminer le facteur de dilution optimal pour la matrice biologique étudiée. Une évaluation de la linéarité de la réponse à la dilution choisie est réalisée à partir d'ajout de composés standards. Enfin, les signaux ont été annotés à l'aide de la base de données spectrale développée au CEA-Saclay.

La mise en place de l'approche de production de données métabolomiques très haute résolution ainsi que de l'outil de prétraitement et de traitement des données FTICR-MS permettra le phénotypage métabolomique à haut débit de cohortes.

*Remerciements: MetaboHUB (ANR-11-INBS-0010 project).*

**Mots-clés**

analyse à haut débit, spectrométrie de masse à très haute résolution, phénotypage métabolomique