



UMR 5180 des Sciences Analytiques Université Claude Bernard Lyon1-CNRS

Institut des Sciences Analytiques - ISA- FR 2112

Direction : Pierre LANTERI

Directeur-Adjoint : Jean-Louis ROCCA

Assistante de direction : Marie-Hélène Boutran-Lara

Effectifs au **01/01/2007** :

43 permanents (20 EC, 8 C, 15 ITA/ITARF) / 40 stagiaires (dont 25 doctorants)



Equipe CHEMOD
Chimométrie/
Modélisation chimie théorique

Lantéri Pierre, PR
Chermette Henry, PR
Bordes Claire MC
Gauvrit Jean-Yves (AI)
Lamiraix Amélie (AI)

Equipe ANABIO
RMN Biomoléculaire
Spectro de masse

Equipe SEPSYS
Séparations/microsystèmes

Equipe SPEC 2
Spectroscopie/Spéciation

Equipe THERMALI
Thermodynamique/
Analyse en ligne

CHEMOD

- Développements fondamentaux en théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT),
- Applications de la DFT orientées vers les méthodes de chimie analytique
- Interactions entre la peroxyredoxine et l'eau oxygénée : en lien avec les études en RMN, menées par O. Walker, approche QM/MM
- DFT et Chimiométrie

CHEMOD

- Modélisation de propriétés physico-chimiques /Analyse de données
 - Caractérisations physicochimiques; Naturalité et analyses des traces et ultra-traces de contaminants.
 - Contribution à l'évaluation des données, voies d'exposition et protocoles par des méthodes statistiques des produits et substances visées par REACH
 - Analyse et traitement des données spectrales
 - Etude in silico de banque de données de molécules à visée thérapeutiques. Réduction de chimiothèque et modélisation de propriétés physicochimiques



1. Réduction de dimensionnalité
Classification

2. *Préparation des bases de données*

Modélisation

3. *Analyse des bases de données*

4. Techniques de réduction
⇒ Relier une propriété Y aux descripteurs X selon un modèle

exemple : modèle polynomial du 1^{er} degré

$$y = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n + b$$

⇒ Estimer avec précision les coefficients du modèle en fonction des individus choisis

L'algorithme d'échange

⇒ Critère de choix : *D-optimal*
minimiser le déterminant de la matrice de variance-covariance qui intervient lors du calcul des coefficients

⇒ *Choix des meilleurs individus en accord avec ce critère*



1. Principales étapes d'une chimiothèque

2. Préparation des bases de données

Modélisation

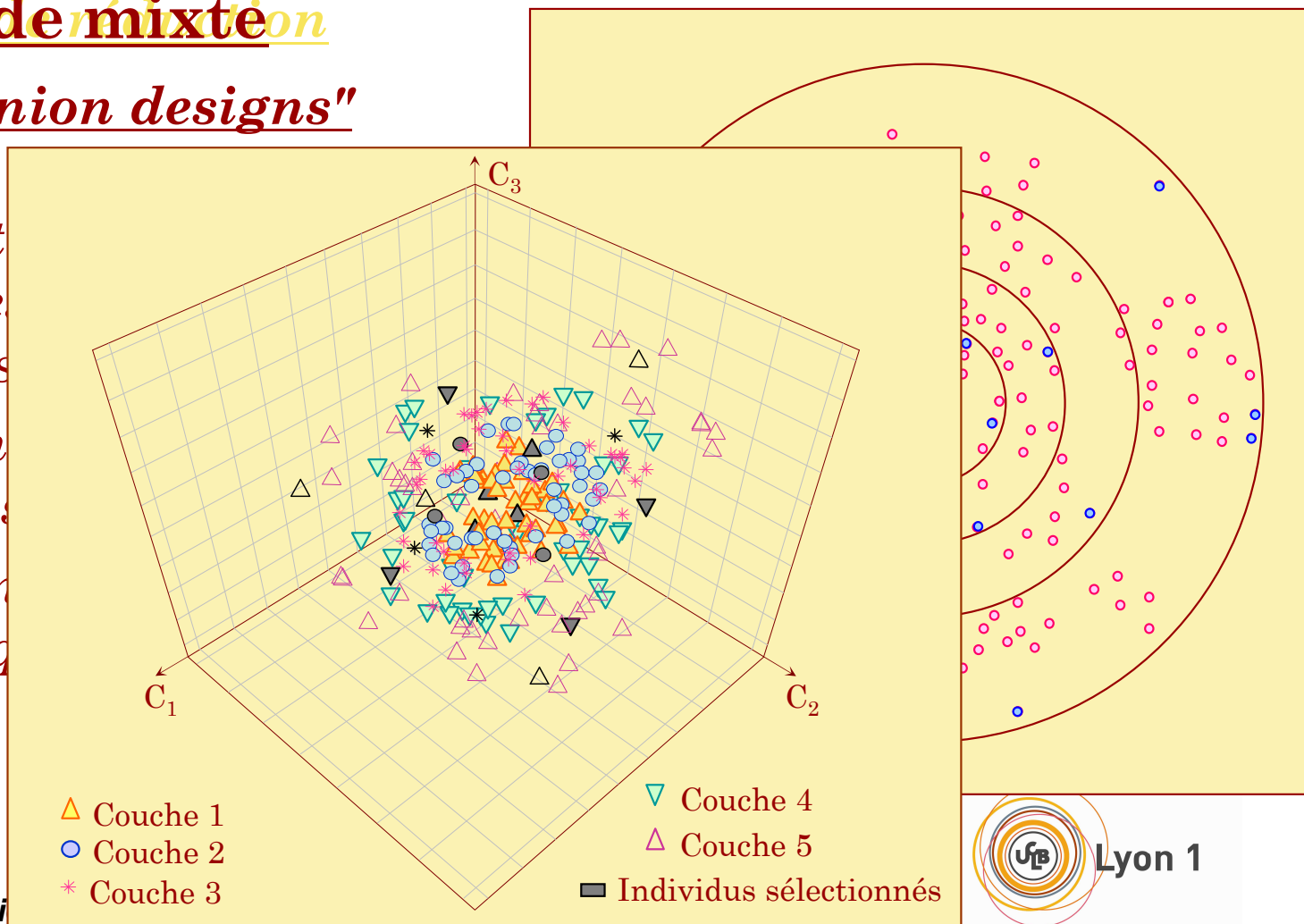
3. Analyse des bases de données

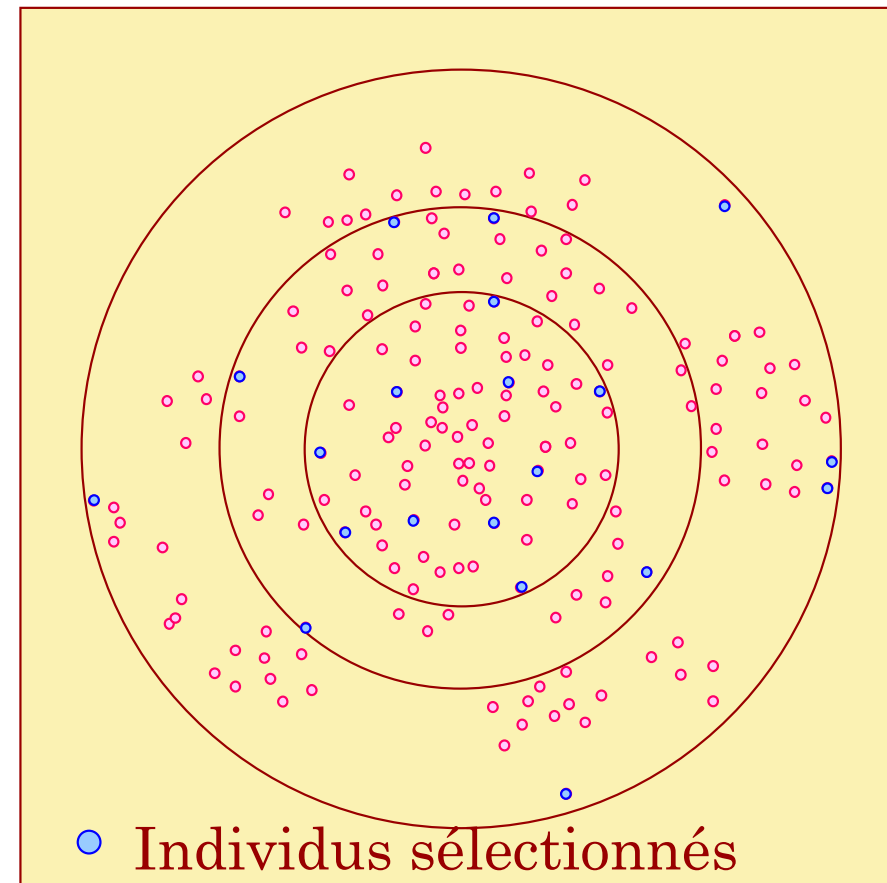
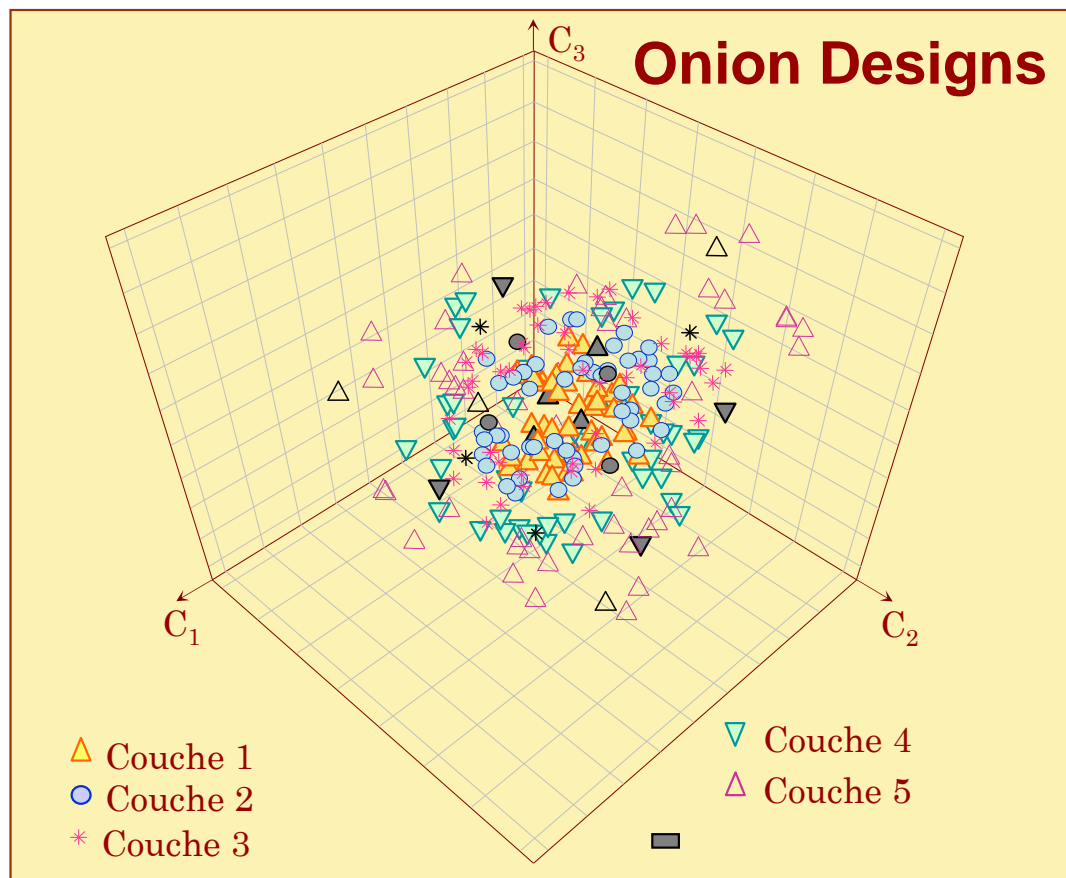
4. Technique de sélection

Méthode mixte

Les "onion designs"

- ⇒ Représentation dans un espace à 3 dimensions des composés
- ⇒ Fractionnement en couches
- ⇒ Sélection des individus dans chaque couche





Demain

ISA, Institut des Sciences Analytiques

Dans CLEA , Cité Lyonnaise de l'Environnement et de l'Analyse

CRMN
ISA
CEMAGREF



UMR 5180

UMR 5180



Chimiométrie 2007

aura lieu les 29 et 30 novembre 2007 à LYON

1997-2007: 10 ans de Chimiométrie

**Université Claude Bernard Lyon 1 –
Ecole de Chimie Physique Electronique de Lyon**

Ce congrès fera le point sur 10 ans de Chimiométrie : les avancées de la Chimiométrie, de la collecte de l'information (plans d'expériences) au traitement des données (analyse des données / modélisation).



UNIVERSITÉ DE GENÈVE
Lyon 1

