



À l'initiative du  
Réseau Français  
de Métabolomique  
et de Fluxomique

École-chercheurs

# Spectrométrie de masse et métabolomique

## *De la conception des expériences à l'intégration des données dans les réseaux métaboliques*

Du 6 au 10 Octobre 2014 – La Colle sur Loup (Alpes-Maritimes)

### Contexte et enjeux

La recherche biologique est au cœur d'une révolution technologique et scientifique en raison de l'intégration de technologies puissantes issues des sciences physiques, des mathématiques, des sciences informatiques et de l'ingénierie. La métabolomique se définit comme la science qui traite de l'analyse des petites molécules présentes dans les fluides biologiques, les cellules ou les organismes vivants. Les approches métabolomiques nécessitent des compétences variées, allant de la chimie analytique à l'informatique ; de la biochimie aux analyses statistiques complexes ; du design expérimental à l'intégration des données et tout ceci éventuellement dans un corpus plus large de données.

Ces approches sont de plus en plus utilisées pour traiter diverses questions biologiques dans des domaines stratégiques d'intérêt (voir les domaines d'applications). Ainsi, il existe un besoin de connaissances et

de savoir-faire pour appliquer ces nouvelles méthodes analytiques. La métabolomique est un domaine exigeant en termes d'équipements et de compétences. Le développement de la métabolomique au cours des dix dernières années a été poussé par les progrès technologiques dans les outils d'analyse à grande échelle comme la résonance magnétique nucléaire (RMN) et la spectrométrie de masse (MS), mais également par les avancées majeures réalisées en informatique en termes de calcul, de bases de données et de modélisation métabolique.

La spectrométrie de masse est un outil analytique de référence pour la métabolomique. Les domaines d'application sont divers : médecine, nutrition et santé, qualité alimentaire, biotechnologies végétales, biotechnologies blanches, ... Cette école-chercheurs se propose d'ouvrir les portes de la connaissance qui associe spectrométrie de masse et métabolomique au service de la biologie. ■

### Objectifs de l'école

- maîtriser les concepts et stratégies expérimentales de l'approche métabolomique par spectrométrie de masse (l'essentiel des différentes étapes de la démarche, de la chimie à la biologie)
- acquérir des connaissances sur les méthodes et outils d'analyse propres à la spectrométrie de masse au service de la métabolomique (intérêts, limites, applications, questions en suspens)
- favoriser les échanges entre les experts-chimistes en spectrométrie de masse et les biologistes
- savoir intégrer l'approche métabolomique dans un projet de recherche ■

### Public

Agents internes et externes à l'INRA spécialistes du métabolisme utilisant la spectrométrie de masse (biologistes et chimistes), doctorants et post-doctorants. ■



RÉSEAU FRANÇAIS DE MÉTABOLOMIQUE ET FLUXOMIQUE

## Programme prévisionnel

### L'approche métabolomique et les bases de la spectrométrie de masse

- La métabolomique dans l'étude du vivant
- Sources d'ionisation possibles en spectrométrie de masse
- Multiplicité des analyseurs de masse (avantages et inconvénients selon la question posée)
- Couplages chromatographie gazeuse et liquide

### La définition d'un plan d'expérience et choix des méthodes d'acquisition des données pour répondre à une question de recherche

- Importance du design expérimental et de l'échantillonnage
- Nécessité d'une préparation de l'échantillon adaptée
- Quel type de spectrométrie de masse et quel mode d'acquisition choisir pour des études de métabolomique ?

### L'exploitation des données en lien avec la question de recherche

- Le traitement des données brutes : des grands principes aux recommandations
- Exemple de programmes intégrés de traitement de données (XCMS Online, Galaxy)
- Les outils statistiques au service de la métabolomique (univarié, ACP, PLS, etc.)
- Travaux pratiques sur ordinateurs (introduction à Galaxy et SIMCA-P)

### L'identification des métabolites et l'interprétation biologique des résultats

- La démarche d'élucidation structurale (règle de l'azote, utilisation du massif isotopique, fragmentation, etc.)
- Utilisation des bases de données et leurs limites
- Intégration des données dans les réseaux métaboliques et biologie des systèmes

Le déroulé alternera séquences en plénière avec discussions, ateliers et travaux pratiques.

### Lieu

La Colle sur Loup (Alpes-Maritimes 06)

### Dates

Du lundi 6 au vendredi 10 Octobre 2014

### Participation

#### Personnels INRA (y compris doctorants financés par l'INRA)

Frais d'hébergement et frais pédagogiques pris en charge par la formation permanente nationale de votre organisme et les commanditaires de l'école. Seuls les frais de transport sont à la charge des unités.

#### Autres

#### (nous faire parvenir un bon de commande TVA à 20 %)

#### Participation aux frais de séjour et pédagogiques :

- 1000 € HT personnels non INRA rattachés à une UMR INRA ;
- 1000 € HT personnels université, autres EPST et EPIC ;
- 2000 € HT autres.

*\* Without any transaction charges for the organizer\**

Les inscriptions ne seront définitives qu'à réception du bon de commande.

En cas d'annulation, moins de 15 jours avant le début de la formation, l'intégralité du montant de l'inscription ou de la participation de l'unité sera conservée par la FPN.

### Comité d'organisation

#### Comité scientifique

EC-Spectrometrie@nantes.inra.fr  
Courant Frédérique, UMR Hydrosociétés, Université Montpellier 1  
Junot Christophe, DSV/iBiTec-S/SPI, CEA Saclay  
Martin Jean-Charles, Nort/plateau Biomet, Université Aix Marseille  
Pujos-Guillot Estelle, Plate-Forme 'Exploration du Métabolisme', AlimH, INRA Clermont Ferrand  
Rolin Dominique, Président du RFMF, Institut de Biologie Végétale Moléculaire, BAP, INRA Bordeaux

#### Ingénierie de formation

formasciences@nantes.inra.fr  
Coutarel Lorieu Martine, FPN, INRA, Nantes  
Mutel Adeline, FPN, INRA, Nantes  
Werdenberg Françoise, FPN, INRA, Nantes

### Modalités d'inscription

La fiche de pré-inscription est disponible sur le lien suivant : <http://cvip.sphinxonline.net/v4/s/hlr/eun>

ou par mail à [Martine.Coutarel-Lorieu@nantes.inra.fr](mailto:Martine.Coutarel-Lorieu@nantes.inra.fr)

Pour tout renseignement complémentaire, merci de prendre contact par mail.

La date limite d'inscription est fixée au **2 juin 2014**

Le nombre de places étant limité, le comité d'organisation se laisse la possibilité de sélectionner les participants en fonction des renseignements portés sur la fiche de pré-inscription afin d'avoir un groupe équilibré.

