



Université Claude Bernard



# DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **07 décembre 2021**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur CLEMENT Yohann**

Titre de la thèse : « Outils chimiométriques pour la résolution de systèmes analytiques complexes : de la mise en place de plans d'expériences dédiés à l'analyse de données pour la détection de marqueurs spécifiques (santé/environnement) »

## Résumé



Outils chimiométriques pour la résolution de système analytique complexe : De la mise en place de plans d'expériences dédiés à l'analyse de données pour la détection de marqueurs spécifiques (santé/environnement)

Dans une première partie nous présentons une étude critique des outils chimiométriques utilisés pour l'analyse de données dans le cadre des sciences analytiques, que ce soient des méthodes supervisées ou non supervisées avec les techniques mathématiques associés pour la normalisation de ces données.

En particulier, nous nous intéressons aux problèmes essentiels de la préparation des données : Alignement des spectres, sélection des variables (méthodes sparse), choix raisonné des expériences (Space Filling Design) ... Après avoir passé en revue les techniques de représentation et de modélisation des données, nous présentons des exemples dans le domaine de la santé et de l'environnement.

Différents cas d'applications de ces techniques sont présentés :

- Analyse métabolomique urinaire permettant la détection précoce de l'obstruction de la jonction urétéro-pelvienne chez les nouveau-nés ayant reçu un diagnostic prénatal de dilatation du bassin rénal : utilisation des méthodes sparse et de l'algorithme EigenMS
- Analyse lipidomique globale des échantillons cérébraux du modèle murin THY- Tau22 surexprimant la cholestérol-24-hydroxylase, CYP46A1 : Utilisation des méthodes sparse
- Analyses isotopiques de différentes huiles essentielles d'espèces alliées : Utilisation de différentes méthodes PLS
- Analyse physico-chimique de mélange industriel de détergent : méthodologie de déformulation appliquée : Utilisation de la méthodologie des plans de mélanges et de l'ICA

Mots-clés :

Sparse PLS, Sparse ACP, Space Filling Design, plans d'expériences, EigenMS

