

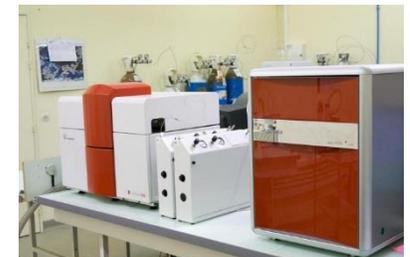
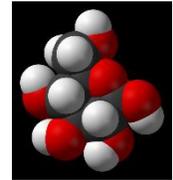
# *EXPERIMENTATION 2*

*Découvrir les appareils de mesures auprès  
des chercheurs et des analystes de  
l'université*



*Valérie Cantonny: AI CNRS, Développeur, intégrateur d'application*

- Hébergée par l'IPS2 Institut of Plant Sciences Paris-Saclay
  - Etude de l'influence des facteurs génétiques sur la croissance des plantes
- Organigramme de la plateforme:
  - Un coordinateur scientifique, une coordinatrice technique
  - Quatre analystes, une informaticienne
- Missions
  - Mesures des métabolites dans des matrices de plantes
  - Mesures de l'évolution des concentrations en isotopes stables des métabolites
- Appareils de mesures: Couplages de méthodes séparatives avec des spectromètres de masse
  - HPLC, UPLC
  - LC-TOF, GC-MS
  - EA-IRMS, RMN, GC-C-IRMS



# Projet MoDALMI: Management of Data for the Analysis of Lipids, Métabolites and Isotopes

## Le WIKI DAAP: 'Data Acquisition For Analytical Platform':



### ➤ Le WIKI DAAP:

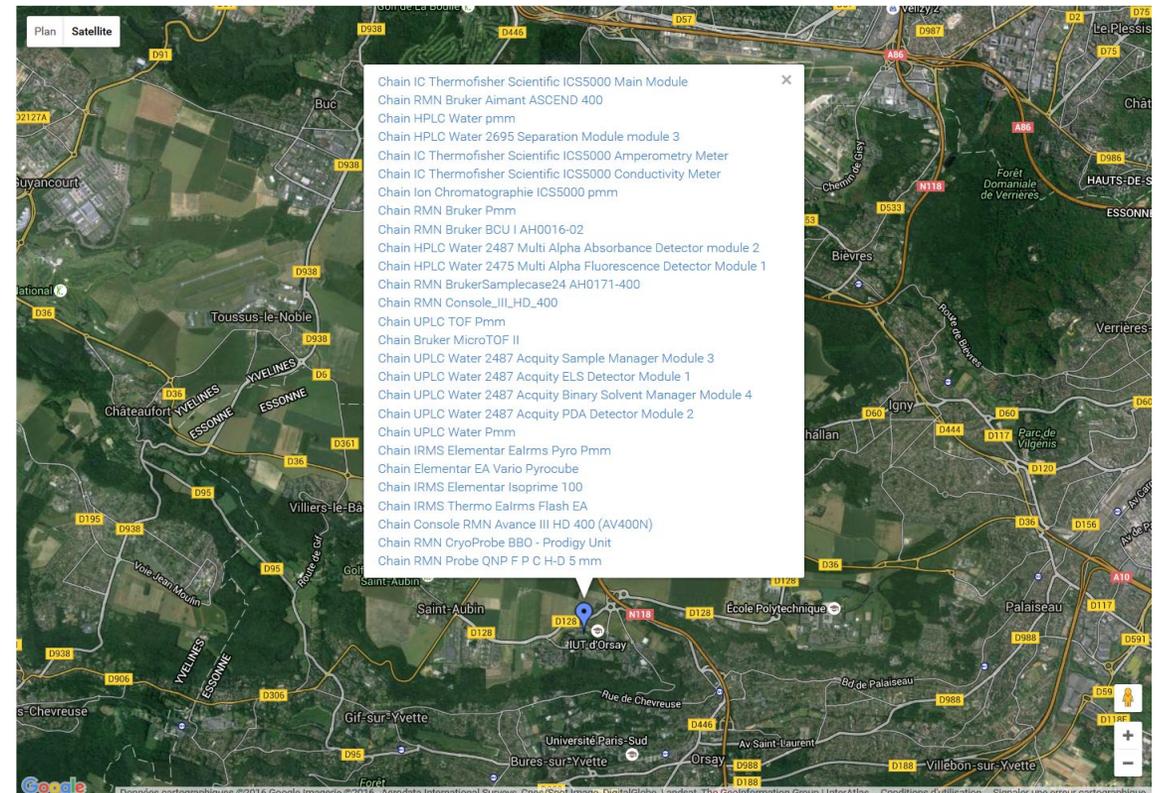
- Le projet MoDALMI, soutenu par le CDS Paris-Saclay
- Un projet collaboratif entre la faculté de pharmacie et la plateforme
- Rechercher un spectromètre par géolocalisation

### ➤ Pour les chercheurs:

- Effectuer des analyses
- Sélectionner un instrument
- Retrouver des titres d'articles liés à des analyses

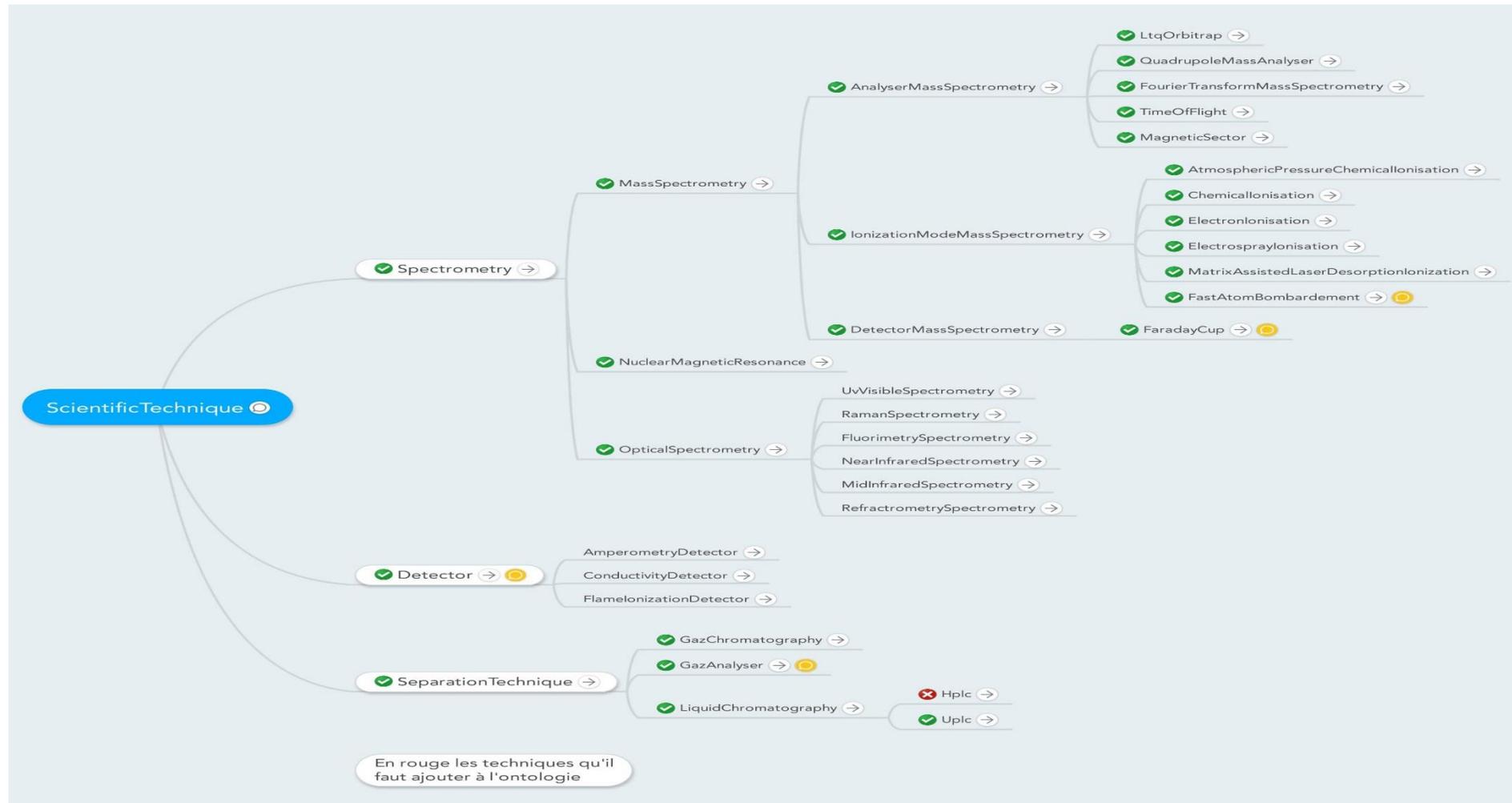
### ➤ Pour les plateformes:

- Valorisation
- Collaboration
- Délégation



# Projet MoDALMI: Management of Data for the Analysis of Lipids, Métabolites and Isotopes Expérimentation

## ➤ Création d'une carte heuristique regroupant des types d'analyses



# Projet MoDALMI: Management of Data for the Analysis of Lipids, Métabolites and Isotopes

## Expérimentation

- Création de l'ontologie avec le logiciel topbraid:
  - Les types d'analyses: 'Scientific\_technique'
  - Les équipements existants par labo: 'les instances des devices'

The screenshot shows the TopBraid ontology editor interface. On the left, a tree view displays the class hierarchy under 'Classes'. The root is 'rdfs:Resource (972)', which contains 'owl:Thing (122)'. Under 'owl:Thing', there are several classes: 'daap:Device (27)', 'daap:Protocol (6)', 'daap:Scientific\_technique (49)', 'owl:NamedIndividual (11)', 'vcard:Address', 'vcard:Email', and 'vcard:Gender'. The 'daap:Scientific\_technique' class is expanded to show its subclasses: 'daap:Detector', 'daap:Separation\_Technique (31)', 'daap:Spectrometry (18)', and 'daap:Optical\_Spectrometry'. 'daap:Detector' includes 'daap:Amperometry\_Detector', 'daap:Conductivity\_Detector', and 'daap:FlameIonization\_Detector'. 'daap:Separation\_Technique' includes 'daap:Gas\_Analyser (3)', 'daap:Gaz\_Chromatography', and 'daap:Liquid\_Chromatography (28)'. 'daap:Spectrometry' includes 'daap:Mass\_Spectrometry (10)' and 'daap:Nuclear\_Magnetic\_Resonance (8)'. 'daap:Liquid\_Chromatography' includes 'daap:UPLC' and 'daap:HPLC'.

The screenshot shows the TopBraid ontology editor interface with a table of instances. The table has three columns: '[Resource]', 'rdf:type', and 'rdfs:label'. The table lists various instances of the 'daap:Device' class, including their URIs, types, and labels.

[Resource]	rdf:type	rdfs:label
deviceLab:RMN_Probe_QNP_F_P_C_H_-_D_5_mm	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain RMN Probe QNP F P C H-D 5 mm
deviceLab:RMN_CryoProbe_BBO_-_Prodigy_Unit	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain RMN CryoProbe BBO - Prodigy Unit
deviceLab:RMN_Console_III_HD_400	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain RMN Console_III_HD_400
deviceLab:RMN_Bruker_Samplecase24_AH0171-400	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain RMN BrukerSamplecase24 AH0171-400
deviceLab:RMN_Bruker_Pmm	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain RMN Bruker Pmm
deviceLab:RMN_Bruker_BCU_I_AH0016-02	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain RMN Bruker BCU I AH0016-02
deviceLab:RMN_Bruker_Aimant_ASCEND_400	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain RMN Bruker Aimant ASCEND 400
deviceLab:Ion_Chromatographie_ICSS5000_pmm	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain Ion Chromatographie ICSS5000 pmm
deviceLab:IC_Thermofisher_Scientific_ICSS5000_Main_Module	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain IC Thermofisher Scientific ICSS5000 Main Module
deviceLab:IC_Thermofisher_Scientific_ICSS5000_Conductivity_Meter	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain IC Thermofisher Scientific ICSS5000 Conductivity Meter
deviceLab:IC_Thermofisher_Scientific_ICSS5000_Amperometry_Met...	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain IC Thermofisher Scientific ICSS5000 Amperometry Meter
deviceLab:Console_RM_N_Avance_III_HD_400_AV400N	daap:Device, daap:Nuclear_Magnetic_Resonance	Chain Console RMN Avance III HD 400 (AV400N)
deviceLab:Chain_UPLC_Water_Pmm	daap:Device, daap:Liquid_Chromatography, daap:UPLC	Chain UPLC Water Pmm
deviceLab:Chain_UPLC_Water_2487_Acquity_Sample_Manager_M...	daap:Device, daap:Liquid_Chromatography, daap:UPLC	Chain UPLC Water 2487 Acquity Sample Manager Module 3
deviceLab:Chain_UPLC_Water_2487_Acquity_PDA_Detector_Modu...	daap:Device, daap:Liquid_Chromatography, daap:UPLC	Chain UPLC Water 2487 Acquity PDA Detector Module 2
deviceLab:Chain_UPLC_Water_2487_Acquity_ELS_Detector_Modul...	daap:Device, daap:Liquid_Chromatography, daap:UPLC	Chain UPLC Water 2487 Acquity ELS Detector Module 1
deviceLab:Chain_UPLC_Water_2487_Acquity_Binary_Solvent_Man...	daap:Device, daap:Liquid_Chromatography, daap:UPLC	Chain UPLC Water 2487 Acquity Binary Solvent Manager Module 4
deviceLab:Chain_UPLC_TOF_Pmm	daap:Device, daap:Liquid_Chromatography, daap:Mass_Spectrom...	Chain UPLC TOF Pmm
deviceLab:Chain_Thermo_Flash_EA	daap:Device, daap:Gas_Analyser	Chain IRMS Thermo Ealrms Flash EA
deviceLab:Chain_HPLC_Water_pmm	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain HPLC Water pmm
deviceLab:Chain_HPLC_Water_2695_Separation_module_3	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain HPLC Water 2695 Separation Module module 3
deviceLab:Chain_HPLC_Water_2487_Dual_Alpha_Absorbance_Det...	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain HPLC Water 2487 Multi Alpha Absorbance Detector module 2
deviceLab:Chain_HPLC_Water_2475_Multi_Alpha_Fluorescence_D...	daap:Device, daap:HPLC, daap:Liquid_Chromatography	Chain HPLC Water 2475 Multi Alpha Fluorescence Detector Module...
deviceLab:Chain_Elementar_Irms_Isoprime_100	daap:Device, daap:Electron_Ionisation, daap:FaradayCup, daap:Ma...	Chain IRMS Elementar Isoprime 100
deviceLab:Chain_Elementar_Ea_Vario_Pyrocube	daap:Device, daap:Gas_Analyser	Chain Elementar EA Vario Pyrocube
deviceLab:Chain_Elementar_Ealrms_Pyro_Pmm	daap:Device, daap:Electron_Ionisation, daap:FaradayCup, daap:Gas...	Chain IRMS Elementar Ealrms Pyro Pmm
deviceLab:Chain_Bruker_MicroTOF_II	daap:Device, daap:Mass_Spectrometry, daap:Time_Of_Flight	Chain Bruker MicroTOF II

# Projet MoDALMI: Management of Data for the Analysis of Lipids, Métabolites and Isotopes Expérimentation

- Création de l'ontologie avec le logiciel topbraid:
  - Les propriétés communes définissant l'instance d'un device

The screenshot displays the 'Resource Form' interface in TopBraid. The resource name is 'deviceLab:Chain\_Bruker\_MicroTOF\_II'. The form is organized into several sections:

- Annotations:** Includes 'rdfs:label' with the value 'Chain Bruker MicroTOF II (@en)' and 'rdfs:seeAlso' with the URL '<http://www.pmm.u-psud.fr/spip.php?article89>'. There are also icons for adding and removing annotations.
- Other Properties:** Includes 'daapHelp:checkBy', 'daapProp:item', and 'daapProp:picture' (with a URL to an image). The 'daapProp:piloteProcess' property is set to 'user:Florence\_Guerard'.
- rdf:type:** Lists three types: 'daap:Device', 'daap:Mass\_Spectrometry', and 'daap:Time\_Of\_Flight', each with a radio button.
- geo:lat:** Set to '48.711394'.
- geo:long:** Set to '2.168279'.
- vcard:organization-unit:** Set to 'daap:Platform\_Metabolism\_Metabolom'.
- Incoming References:** Shows 'rdfs:seeAlso' pointing to 'deviceLab:Chain\_UPLC\_TOF\_Pmm'.

At the bottom, there are tabs for 'Form' and 'Source Code'. A navigation bar includes 'Imports', 'Instances', 'Domain', 'Relevant Properties', 'Error Log', 'SPARQL', 'Text Search', and 'SHACL Constraint Violations (experi...'. Below this is a table showing the resource's properties:

[Resource]	rdf:type	rdfs:label	rdfs:comment
deviceLab:Chain_Bruker_MicroT...	daap:Device, daap:Mass_Spectro...	Chain Bruker MicroTOF II	

# Projet MoDALMI: Management of Data for the Analysis of Lipids, Métabolites and Isotopes

## Expérimentation

➤ Création d'un WIKI public avec les photos des spectromètres et leurs description

Chain UPLC Water Pmm			Florence Guerard <a href="#">✉</a>
Near-infrared Spectroscopy	Infrared spectroscopy		Pierre Chaminade <a href="#">✉</a>
RamanEvolution	Raman spectroscopy		Ali Tfayli <a href="#">✉</a>

francais | [Valérie cantony](#) | [Discussions](#) | [Préférences](#) | [Liste de suivi](#) | [Contributions](#) | [Se déconnecter](#)

Page | [Discussions](#) | [Liste](#) | [Modifier](#) | [Historique](#) | [Page](#) | [Rechercher](#) | [Q](#)

### Device

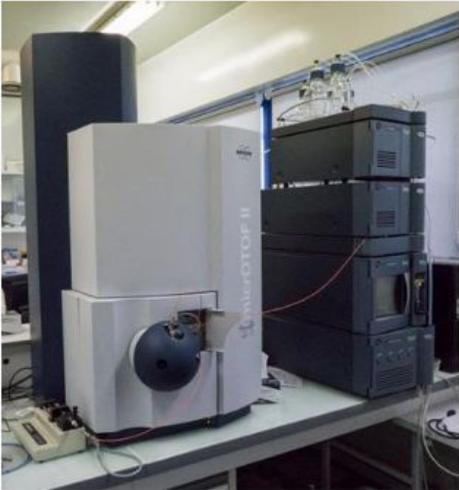
Device	Keywords	Picture	Contact
Chain Bruker MicroTOF II			Florence Guerard <a href="#">✉</a>
Chain Console RMN Avance III HD 400 (AV400N)			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain Elementar EA 1110 PyroCube			Mariane Sibole <a href="#">✉</a>
Chain FaradayCup			Sonia Abreu <a href="#">✉</a> Pierre Chaminade <a href="#">✉</a>
Chain FlameIonizationDetector			Sonia Abreu <a href="#">✉</a> Pierre Chaminade <a href="#">✉</a>
Chain Générateur Azote			Sonia Abreu <a href="#">✉</a>
Chain HPLC Water 2695 Separation Module module 3			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain HPLC 1 - Jasco LG 980-Q2 Corona			Pierre Chaminade <a href="#">✉</a> Sonia Abreu <a href="#">✉</a>
Chain HPLC 2 - HP1050 DEDL31			Pierre Chaminade <a href="#">✉</a> Sonia Abreu <a href="#">✉</a>
Chain HPLC PerkinElmer Series 200			Pierre Chaminade <a href="#">✉</a>
Chain HPLC Water 2475 Multi Alpha Fluorescence Detector Module 1			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain HPLC Water 2487 Multi Alpha Absorbance Detector module 2			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain HPLC Water pmm			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain IC ThermoFisher Scientific IC55000 Amperometry Meter			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain IC ThermoFisher Scientific IC55000 Conductivity Meter			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain IC ThermoFisher Scientific IC55000 Main Module			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain Ion Chromatographie IC55000 pmm			Caroline Mauve <a href="#">✉</a>
Chain IRUG Elementar Exims Pyro Pmm			Mariane Sibole <a href="#">✉</a>
Chain IRUG Elementar Isoprime 100			Mariane Sibole <a href="#">✉</a>
Chain IRUG Thermo Exims Flash EA			Mariane Sibole <a href="#">✉</a>

# Projet MoDALMI: Management of Data for the Analysis of Lipids, Métabolites and Isotopes Expérimentation

➤ On retrouve dans le WIKI, les propriétés communes des instruments

### Chain UPLC TOF Pmm

#### Device



**Pilote** Florence Guerard 

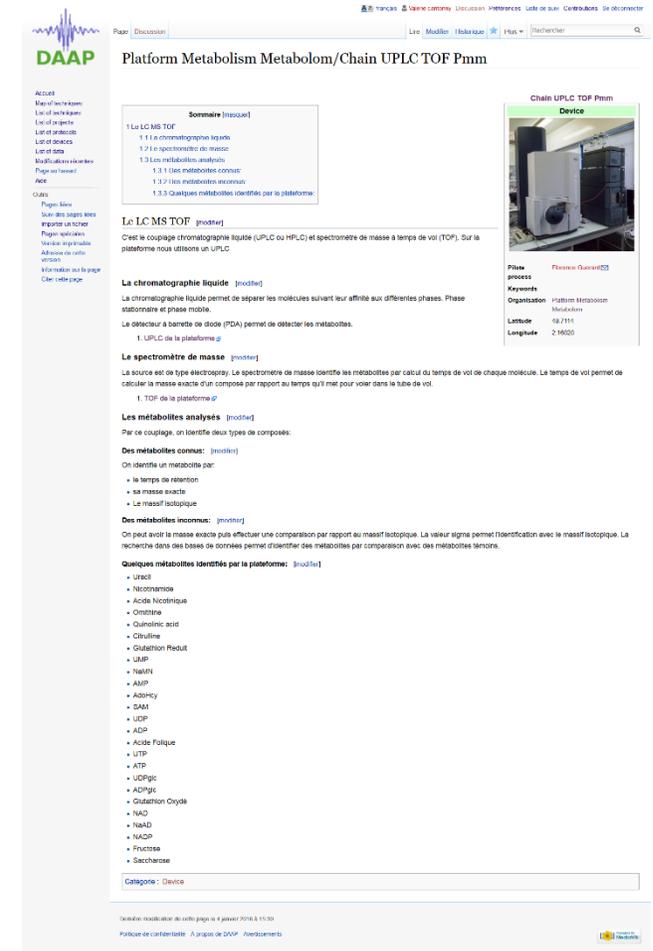
**process**

**Keywords**

**Organisation** Platform Metabolism  
Metabolom

**Latitude** 48.7114

**Longitude** 2.16828



The screenshot shows a Wiki page titled "Chain UPLC TOF Pmm" under the "Platform Metabolism Metabolom/Chain UPLC TOF Pmm" namespace. The page includes a table of contents, a summary, and detailed sections on the instrument's components and capabilities.

#### Sommaire (travaux)

- 1.1 Le LC-MS TOF
- 1.2 Le spectromètre de masse
- 1.3 Les métabolites analysés
- 1.3.1 Les métabolites connus
- 1.3.2 Les métabolites inconnus
- 1.3.3 Quelques métabolites identifiés par la plateforme

#### Le LC-MS TOF (travaux)

C'est le couplage chromatographie liquide (UPLC ou HPLC) et spectromètre de masse à temps de vol (TOF). Sur la plateforme nous utilisons un UPLC.

#### La chromatographie liquide (travaux)

La chromatographie liquide permet de séparer les molécules suivant leur affinité aux différentes phases. Phase stationnaire et phase mobile.

Le détecteur à barrette de diode (PDA) permet de détecter les métabolites.

- 1. UPLC de la plateforme [g](#)

#### Le spectromètre de masse (travaux)

La source est de type électrospray. Le spectromètre de masse identifie les métabolites par calcul du temps de vol de chaque molécule. Le temps de vol permet de calculer la masse exacte d'un composé par rapport au temps qu'il met pour voler dans le tube de vol.

- 1. TOF de la plateforme [g](#)

#### Les métabolites analysés (travaux)

Par ce couplage, on identifie deux types de composés:

#### Des métabolites connus: (travaux)

On identifie un métabolite par:

- le temps de rétention
- sa masse exacte
- Le massif isotopique

#### Des métabolites inconnus: (travaux)

On peut avoir la masse exacte puis effectuer une comparaison par rapport au massif isotopique. La valeur sigma permet l'identification avec le massif isotopique. La recherche dans des bases de données permet d'identifier des métabolites par comparaison avec des métabolites témoins.

#### Quelques métabolites identifiés par la plateforme: (travaux)

- Uric
- Nicotamine
- Acide Nicotinique
- Oméprazole
- Quinolinic acid
- Cituline
- Glutathion Redut
- UMP
- NaPiN
- AMP
- Adhicy
- SAM
- UDP
- ADP
- Acide Folique
- UTP
- ATP
- UDPGlc
- ADPGlc
- Glutathion Oxyde
- NAD
- NADP
- NADP
- Fructose
- Saccharose

Catégorie : Device

Identifié/modifié au wiki page le 4 janvier 2016 à 11:30  
Page en cache: 16 - A propos de DMAP - Avertissements