



## GLOSSAIRE

### A

**ACP.** L'Analyse en Composantes Principales est une méthode d'analyse multivariée exploratoire qui permet de résumer la variabilité de données caractérisées par un grand nombre de variables, à l'aide d'un ensemble réduit de dimensions.

**Alanine.** Acide aminé de formule  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$ .

**Alignement.** Etape de traitement consistant à réaligner les pics qui présentent des déplacements chimiques différents d'un échantillon à l'autre.

**Analyte.** Substance ou un produit chimique constituant le centre d'intérêt d'une procédure d'analyse chimique, toxicologique ou écotoxicologique.

**AMOLPS.** ANOVA Multiblock Orthogonal Partial Least Squares.

**Analyse bioinformatique.** Flux de travail métabolomique en français. Ensemble d'étapes mathématiques et informatiques qui permettent de traiter et d'analyser les données métabolomiques produites par les instruments analytiques.

**Analyseur de masse.** L'analyseur de masse a pour but de trier les ions en fonction de leur rapport masse/charge ; ce tri est réalisé par l'application et le balayage d'un champ magnétique ou électrique en fonction des analyseurs considérés.

**Analyse multivariée non supervisée.** Approche exploratoire qui permet de rendre compte des similarités, ou regroupements d'observations, ainsi que des corrélations entre les variables.

**Annotation.** L'annotation des métabolites est l'association de signaux analytiques à une ou plusieurs structure(s) moléculaire(s), sur la base d'information biochimique mesurée expérimentalement ou issue d'outils de prédiction in silico. Plusieurs niveaux d'annotation sont définis en fonction du degré de confiance et de la singularité associés à la qualité de cette attribution.

**ANOVA. Analysis of Variance.**

**Apodisation.** Etape de traitement des données consistant à multiplier le signal temporel obtenu en RMN par une fonction mathématique afin d'améliorer le rapport signal-sur-bruit.

## B

**B0. B Zéro.** Champ magnétique produit par le spectromètre RMN.

**Balayage complet.** Le balayage complet est une méthode d'acquisition utilisée en spectrométrie de masse. Dans ce mode, un intervalle de gamme de masses est défini par l'opérateur et suivi par l'analyseur de masse, par exemple du rapport masse sur charge 100 au rapport masse sur charge 1000. Ceci permet de mesurer des métabolites dont les masses des molécules entières ou de leurs fragments sont comprises dans cet intervalle.

**Bioinformatique.** Ensemble d'algorithmes et d'outils informatiques et statistiques utilisés pour le traitement des données analytiques et l'interprétation de l'information biologique.

**Biologie intégrative.** La biologie intégrative concerne la description intégrée de très nombreux processus intervenant dans les divers niveaux des organisations structurale et fonctionnelle hiérarchiques du vivant.

**Biologie réductionniste.** En biologie, les progrès de la biologie moléculaire ont favorisé une forme de réductionnisme dans l'étude des êtres vivants en privilégiant quelques phénomènes physico-chimiques comme base d'explication du fonctionnement du vivant.

**Biomarqueur.** Un biomarqueur est une caractéristique biologique mesurable liée à un processus normal ou non. C'est un métabolite sélectionné à l'étape du traitement statistique qui partage avec des métabolites dûment répertoriés dans une base de données métaboliques des propriétés spectroscopiques (déplacement(s) chimique(s), masse moléculaire, type de fragmentation). Cette identification a priori du métabolite reste sommaire ; cela explique que ledit biomarqueur ait une identification putative ou que le nom de structure chimique attribué à cette étape fasse de cet analyte un métabolite candidat à ce nom possible de structure.

**bmi.** Body mass index [indice de masse corporelle, IMC]. Il se calcule pour les adultes de 18 à 65 ans comme le rapport de la masse (en kg) sur le carré de la taille (en m). Les valeurs de 18 et 25 sont des repères d'un IMC normal

**Branche.** Lien entre deux noeuds d'un dendrogramme.

**Bucketing.** Segmentation du spectre RMN permettant de réduire le nombre de variables utilisées pour l'analyse statistique.

## C

**Chélation.** Processus physico-chimique de formation d'un complexe, ici entre un ligand (ex. : l'EDTA) avec un cation métallique (par exemple  $Mn^{2+}$ ). (Une définition intéressante aussi sur Wikipédia).

**Chromatogramme d'Ion Extraît (EIC ou XIC).** Il s'agit de la première "brique" utilisée par les logiciels de recherche et d'intégration des ions (peakpicking). Il s'agit d'une représentation graphique de l'évolution d'un  $m/z$  donné en fonction du temps. C'est sur la base de ces EIC que les logiciels vont calculer les aire sous courbe des features qui seront reportées dans le tableau final.

**Chromatographie en phase gazeuse.** Technique qui permet de séparer en phase gazeuse les analytes dans un échantillon même complexe en jouant principalement sur leur volatilité ; la phase mobile est un gaz.

**Chromatographie en phase liquide.** Technique qui permet de séparer en solution les analytes dans un échantillon même complexe en jouant principalement sur leur affinité chimique vis à vis de la phase stationnaire de la colonne ; la phase mobile est un solvant, seul ou en mélange.

**Combinaison linéaire.** quation qui définit un objet mathématique par un ensemble de termes obtenus par des produits de variables et de constantes. Par exemple  $Y = aX_1 + bX_2 + cX_3$ .

**Composante principale.** Axe synthétique calculé comme une combinaison linéaire des variables mesurées qui maximise la variabilité. axe synthétique calculé comme une combinaison linéaire des variables mesurées qui maximise la variabilité.

**Contribution factorielle.** Projection d'une variable sur une composante principale.

**Coordonnée factorielle.** Projection d'une observation sur une composante principale.

**Correction de ligne de base.** Etape de traitement réalisée après la transformation de Fourier, qui permet d'obtenir un spectre dont la ligne de base est la plus plate possible, ce qui permet une détermination précise de l'aire des pics.

**Couplage de la chromatographie avec la spectrométrie de masse.** L'association de ces deux techniques d'analyse permet de générer des images larges de la composition moléculaire des échantillons dont on cherche à explorer



le métabolome. Ce couplage est nécessaire d'une part à une plus grande efficacité et répétabilité du processus d'ionisation des analytes (la compétition pour les charges dans la source est diminuée), d'autre part à la non superposition des signaux dont l'information serait rendue quasiment inextricable sauf usage d'analyseur de masse à ultra-haute résolution.

**Critère d'agrégation.** Règle selon laquelle deux observations ou groupes d'observations sont regroupés à chaque étape de la classification ascendante hiérarchique.

**Cryobroyage.** En métabolomique, opération unitaire, réalisée à très basse température (par exemple en azote liquide), de transformation d'un solide en poudre fine de granulométrie homogène.

## D

**DA.** Discriminant Analysis [Analyse discriminante].

**Déconvolution.** Ajustement des pics du spectre RMN par un modèle mathématique afin de déterminer précisément l'aire de certains pics.

**Démarche "avec a priori".** Les scientifiques tentent d'expliquer un phénomène par des hypothèses. Une hypothèse, pour être scientifiquement admissible, doit être confirmée, c'est-à-dire doit permettre des expérimentations qui la corroborent (la confirment) ou la réfutent (l'infirmement). Cette approche est qualifiée de démarche "avec à priori".

**Démarche "sans a priori".** Les scientifiques peuvent réaliser des observations et des mesures sans avoir d'hypothèse de travail pour expliquer un phénomène. Ces démarches sont qualifiés de démarche "sans à priori". Cependant, elles nécessitent d'avoir des technologies globales offrant le plus large spectre d'investigations

**Dendogramme.** Structure en forme d'arbre qui permet de représenter un partitionnement hiérarchique.

**Domaine de masse.** Intervalle de masse au sein duquel un spectromètre de masse est capable de délivrer une mesure fiable. La valeur la plus haute est souvent celle qui est indiquée car la plus différenciante entre analyseurs de masse.



**Données appariées (ou en paire).** Plan d'expériences dans lequel un individu est soumis à deux mesures successives de la même variable ou à la mesure de deux variables. Les mesures faites sur le même individu ne sont pas indépendantes.

**Données répétées (ou longitudinales).** Plan d'expériences dans lequel des mesures ont été faites à plusieurs dates au cours du temps pour chaque individu considéré.

### E

**Echantillon analytique.** Résultat de la transformation de l'échantillon biologique par un protocole de préparation ad hoc en échantillon directement analysable par un instrument de chimie analytique. En métabolomique, cet échantillon analytique est une solution de métabolites qui peut être directement "injectée" en chromatographie couplée à la spectrométrie de masse ou placée pour être analysée dans le spectromètre RMN.

**Echantillon biologique.** Les échantillons biologiques sont d'origines diverses (animales, végétales, microbiennes, écosystèmes ...) et peuvent être des organismes entiers, des organes, des tissus, des cellules, des biofluides issus d'organismes vivants. Par extension, les surnageants de cultures cellulaires sont aussi considérés comme des échantillons biologiques.

**Effet de matrice.** Phénomène qui se manifeste par des hausses ou baisses de signal aléatoire dûes à la matrice dans laquelle se trouve les métabolites.

**Energie d'interaction magnétique.** Energie qui caractérise l'interaction entre le moment magnétique nucléaire et le champ magnétique du spectromètre (BO). Cette énergie dépend de l'état (alpha ou beta) dans lequel se trouve le noyau.

**Epigénomique.** Sciences de l'analyse structurale et fonctionnelle des marques apposées sur le génome sans modifier la séquence de l'ADN.

**Equilibre des populations.** Les populations des niveaux alpha et beta sont conditionnées par deux phénomènes antagonistes : l'influence de l'agitation thermique et l'influence du champ magnétique externe. En absence d'ondes radiofréquence, cela conduit à une situation d'équilibre où l'état alpha est légèrement plus peuplé que l'état beta.

**Etat alpha.** Etat dans lequel se trouve le noyau d'un atome plongé dans un champ magnétique externe et orienté dans le sens de ce champ magnétique.



**Etat beta.** Etat dans lequel se trouve le noyau d'un atome plongé dans un champ magnétique externe et orienté en sens inverse de ce champ magnétique.

## F

**Facteur confondant.** Source de variation d'ordre biologique, environnementale ou technique pouvant masquer les variations biologiques que l'on souhaite observer. A l'extrême, le facteur confondant risque de biaiser l'interprétation des résultats de l'analyse métabolomique s'il correspond à un facteur de variabilité corrélé à l'effet étudié mais non causal.

**FEUILLE.** Extrémité des branches qui est associée à une observation.

**FID.** Free Induction Decay. Signal temporel (signal brut) obtenu lors d'une expérience de RMN. Le spectre est obtenu par transformation de Fourier du FID.

**Filtrage.** Dans le contexte de la RMN, les expériences de filtrage permettent d'observer sélectivement le signal de certaines molécules (par exemple les métabolites) en supprimant les signaux non-souhaités (par exemple ceux des protéines).

**Fluxomique.** Mesure des vitesses réelles des réactions métaboliques dans le système biologique intègre. C'est une mesure de la dynamique du métabolisme et représente le résultat final de toutes les interactions métaboliques et régulatrices qui déterminent le comportement du métabolisme à l'échelle d'une cellule, d'un tissu ou d'un organisme.

## G

**Génomique.** Science de l'analyse structurale et fonctionnelle des génomes ; elle s'appuie sur l'analyse des séquences d'ADN qui caractérisent ces génomes.

**Génotype.** Ensemble des constituants génétiques d'un organisme, qu'ils soient exprimés ou non.

**Graphe.** Objet mathématiques constitué d'un ensemble de sommets reliés par des arêtes. Un graphe peut être utilisé pour modéliser un réseau. Si les arêtes



sont dirigées (une source et une cible) on parle de graphe orienté (non orienté dans le cas contraire).

## H

**HCA.** La Classification Ascendante Hiérarchique (HCA) est une méthode de classification non-supervisée qui vise à mettre en évidence des groupes d'observations semblables à l'aide d'un partitionnement hiérarchique d'un ensemble de données multivariées.

## I

**Infusion.** L'analyse par infusion directe consiste à injecter directement l'échantillon dans une source à pression atmosphérique par un pousse seringue.

**Injection en flux.** L'analyse par injection en flux continu (Flow Injection Analysis FIA) consiste, dans son principe le plus simple, en l'injection (par le passeur d'échantillon) d'un petit volume ( $\mu\text{L}$ ) de l'échantillon dans un fluide en mouvement, ici la phase mobile délivrée par la pompe de la chromatographie liquide.

**Interactomique.** Etude des réseaux et des interactions structurales et fonctionnelles établies à l'échelle cellulaire entre les différents types moléculaires (acides nucléiques, protéines, métabolites).

**Ionisation.** Processus physique observé dans la source du spectromètre de masse ayant pour objet de donner une charge aux analytes ; les mécanismes impliqués sont variés, il peut s'agir de protonation, de déprotonation, d'arrachement d'électron ou encore de capture d'électron.

**IRM (Imagerie par Résonance Magnétique).** Technique, et par extension appareil, permettant l'acquisition d'images ou de spectres sur un échantillon vivant (le plus souvent introduit horizontalement dans l'appareil).

## M

**Masse exacte.** Valeur délivrée par le spectromètre de masse qui permet de donner une précision sur la masse au-delà de la fraction entière de cette dernière. La masse exacte ne peut être générée que par des spectromètres de masse haute résolution à condition qu'ils soient bien calibrés.

**Masse nominale.** Fraction entière de la masse d'un ion. N'importe quel spectromètre de masse donne accès à cette grandeur.

**Mesure de similarité.** Métrique qui permet d'évaluer la distance entre deux observations.

**Métabolisme.** Ensemble des réactions biochimiques et chimiques connectées en réseau qui se déroulent au sein d'un être vivant pour lui permettre notamment de se maintenir en vie, de se reproduire, de se développer et de répondre aux stimuli de son environnement.

**Métabolite.** Molécules organiques de petites tailles, substrats ou produits de réactions biochimiques. En métabolomique, les métabolites considérés sont non polymériques et de taille inférieure à 1500 Da.

**Métabolome.** Collection de tous les métabolites, non-polymériques et de taille inférieure à 1500 Da, représentés dans une unité biologique de taille variable (fluides biologiques, tissu, organe, organisme, population, écosystème).

**Métabolomicien.** Personne compétente en métabolomique.

**Métabolomique.** La métabolomique est une démarche scientifique et méthodologique qui a pour ambition la description approfondie des caractéristiques métaboliques du vivant. Sur le plan méthodologique, une analyse métabolomique a vocation à établir, en un minimum d'étapes, et en un minimum de temps, une image exhaustive du profil métabolique d'un échantillon. Dans l'absolu, il s'agit de pouvoir qualifier, donner une structure et un nom, et quantifier, fournir une quantité, une teneur, une concentration pour tous les analytes. La métabolomique permet d'alimenter le développement d'outils analytiques, aux interfaces entre la biologie, la chimie, les biostatistiques et la bioinformatique, ainsi que la production de données valorisables en sciences de la Santé, de l'Alimentation, de l'Agronomie ou de l'Environnement.

**Métadonnées.** Ici les données qui définissent et décrivent l'échantillon biologique (historique de culture/prélèvement, protocoles d'échantillonnage, de conservation, etc.) mais aussi l'échantillon analytique (protocoles de préparation,





d'acquisition, de traitement, de validation). Les métadonnées en métabolomique peuvent être des termes de vocabulaire contrôlé ou ontologique, des textes libres, des images, etc.

**Méthode multi niveaux.** Pour un jeu de données qui contient plusieurs sources de variabilité, dépendantes des facteurs du plan d'expériences, méthode qui construit un sous-modèle pour chaque type de variabilité.

**Moment magnétique nucléaire.** Grandeur vectorielle qui caractérise l'intensité du champ magnétique produit par le noyau de l'atome.

**Multiplicité des raies (dans un massif de spectre RMN).** Certains massifs d'un spectre RMN sont constitués de plusieurs raies. Leur nombre dépend du nombre de noyaux voisins.

### N

**Noeud.** Partitionnement d'un ensemble d'observations en deux sous-groupes.

**Nuage électronique.** Ensemble des électrons entourant un noyau. La forme et la densité de ce nuage dépendent non seulement du type de noyau mais également des groupements chimiques voisins dans la molécule.

### O

**Onde radiofréquence.** Onde électromagnétique dont la fréquence est dans la gamme des ondes radio (fréquence inférieure à 300 Ghz ou longueur d'onde supérieure à 1 mm).

**OPLS.** Orthogonal-Partial Least Squares (Moindres carrés partiels – orthogonal).

**Orbitrap.** Il s'agit d'une électrode creuse, à l'intérieur de laquelle est placée coaxialement une électrode en forme de fuseau sur lesquelles est appliqué un champ électrostatique. Les ions sont injectés tangentiellement à l'électrode centrale et piégés autour d'elle. Leur mouvement consiste en un mouvement circulaire autour de l'électrode centrale et un mouvement oscillatoire de va-et-vient. Le courant induit par ces oscillations permet par une transformée de Fourier d'accéder à la masse. La résolution (qui dépasse 200 000) tout comme la précision en masse (1-2 ppm) sont très élevées.

## P

**Peakpicking.** En métabolomique, par spectrométrie de masse, c'est la première étape du pré-traitement et elle consiste en la recherche de l'ensemble des ions détectés et en leur intégration.

**Phasage.** En Résonance Magnétique Nucléaire, étape de traitement réalisée après la transformation de Fourier, qui permet d'obtenir un spectre dans lequel les pics sont tous positifs par rapport à la ligne de base (et donc exploitables par la suite pour la détermination de l'aire des pics).

**Phénotype moléculaire.** Ensemble des caractéristiques moléculaires observables d'un individu fruit des interactions établies entre le génotype et l'environnement.

**Plateforme.** Infrastructure physique qui réunit sur un même site l'instrumentation privilégiée en analyse métabolomique, plus précisément la résonance magnétique nucléaire ou la spectrométrie de masse, et les ressources nécessaires en ingénierie analytique. Une gestion informatisée des flux d'échantillons et de données est aussi assurée.

**PLS.** Partial Least Squares [Moindres carrés partiels]

**Population d'un niveau d'énergie.** Nombre de noyaux dans l'état correspondant à ce niveau d'énergie.

**Pouvoir de résolution spectrométrique.** Il s'agit de la capacité d'un spectromètre de masse à séparer deux ions de masse très voisine.

**Préparation d'échantillon.** Ensemble d'étapes permettant de rendre l'échantillon analysable par une technique de chimie analytique.

**Pré-traitement.** Le pré-traitement correspond en fait à un ensemble d'étapes qui permettent de transformer un ensemble de données de spectrométrie de masse à 3 dimensions ( $m/z$ , RT et intensité) en un tableau de données à 2 dimensions (1/liste des features ( $m/z$ -RT) et 2/l'intensité de ces features dans chaque échantillon).

**Projection.** Représentation d'un point dans l'espace sur un axe ou sur un plan.

**Protéomique.** Science qui étudie les protéomes, c'est-à-dire l'ensemble des protéines d'une cellule, d'un organite, d'un tissu, d'un organe ou d'un organisme à un moment donné et sous des conditions données.



## Q

**Quadripôle.** Un analyseur quadripolaire est constitué de quatre électrodes disposées parallèlement, reliées entre elles deux par deux et soumises au même potentiel qui est la résultante d'une tension continue  $U$  et d'une tension alternative  $V$  haute fréquence ( $\omega$ ). Le quadripôle est considéré comme un analyseur bassement résolutif.

## R

**Réseau métabolique.** Ensemble des réactions métaboliques pouvant avoir lieu au sein d'une cellule ou d'un organisme.

**Résonance.** Il y a résonance lorsque l'onde radiofréquence envoyée sur les noyaux a une fréquence qui correspond exactement à l'écart d'énergie entre les niveaux alpha et beta.

**Résonance magnétique nucléaire.** Ou RMN. Technique de chimie analytique utilisée en métabolomique permettant de détecter et quantifier des molécules, basée sur le comportement magnétique du noyau des atomes.

**Résolution.** En parlant d'une technique d'analyse, le terme "résolution" est généralement employé pour désigner la capacité de cette technique à séparer des ions de masses très proches ou les signaux de deux analytes différents.

**RMN à deux dimensions.** Classe d'expériences RMN permettant de mieux séparer les signaux des métabolites tout en apportant une information structurale complémentaire.

## S

**Sciences omiques.** Alors que la biologie traditionnelle se fondait sur des hypothèses que le chercheur essayait ensuite de vérifier expérimentalement, désormais, le vivant est appréhendé dans sa totalité et le chercheur essaie de



rapporter l'information biologique obtenue à des de très nombreuses variables quelles soient génétiques ou environnementales. S'appuyant largement sur les technologies de pointe et les avancées des technologies de l'information, les sciences « omiques » regroupent des champs d'étude de la biologie qui s'intéressent aux interactions dans et entre des ensembles vivants complexes (ADN, ARN, protéines, cellules, individus, voire population) en prenant compte de l'environnement auquel ces ensembles vivants sont exposés et de l'écosystème dans lequel ils vivent. (Sénat)

**Sensibilité.** Capacité de la méthode à détecter de faibles quantités d'analytes.

**Signal de l'eau.** En RMN métabolomique, le signal provenant de l'eau contenue dans l'échantillon est prépondérant et peut gêner la détection des signaux provenant des métabolites d'intérêt. Il est alors nécessaire d'utiliser une expérience permettant de supprimer ou d'atténuer ce signal de manière sélective.

**Signal RMN.** Ensemble des ondes radiofréquences que l'échantillon émet après avoir été excité.

**Source d'ion.** La source d'ions a pour rôle de produire des ions à l'état gazeux. Il existe actuellement de nombreuses méthodes d'ionisation, chacune étant adaptée à la nature de l'échantillon et au type d'analyse à effectuer. La source d'ions a, de plus, pour rôle d'extraire les ions formés et de les acheminer vers la partie analyseur de l'instrument.

**Spécificité.** Capacité de la méthode à reconnaître sans ambiguïté un signal et l'attribuer sans erreur au composé analysé.

**Spectrométrie de masse.** Ou SDM. Technique de chimie analytique utilisée en métabolomique permettant de détecter et quantifier des molécules basées sur leur rapport masse sur charge une fois ionisées.

**Spectrométrie de masse haute résolution.** Le pouvoir de résolution spectrométrique renvoie à la capacité de l'analyseur de masse à distinguer deux ions de masse très voisine. Cette propriété permet, lorsqu'elle la résolution est élevée, de révéler un nombre de descripteurs (métabolites) plus importants dans un échantillon biologique complexe même lorsqu'il existe un nombre élevé d'espèces ioniques de même masse nominale. L'image ainsi générée permet d'être plus exhaustif dans la description du métabolome. Enfin, lorsque la résolution augmente et moyennant une bonne justesse de l'information générée, il est possible d'accéder plus rapidement à la formule brute des métabolites composant l'empreinte moléculaire.



**Spectromètre de masse.** Le spectromètre de masse est composé de plusieurs éléments : un système d'introduction de l'échantillon, une source d'ions, un analyseur et un ensemble de détection d'ions.

**Spectromètre RMN.** Appareil permettant de réaliser l'acquisition d'un spectre RMN sur un échantillon liquide ou solide. L'échantillon est normalement introduit verticalement dans l'appareil.

**Structure multi-niveaux (ou hiérarchique).** Structure dite d'un jeu de données qui contient plusieurs sources de variabilité dépendantes des facteurs du plan d'expériences.

**Suppression d'ion.** La suppression d'ion correspond à une compétition pour les charges des différents métabolites présents dans l'échantillon lors du processus d'ionisation. Si un métabolite voit son signal diminué suite à son analyse dans une matrice plutôt qu'à l'état pur, c'est que des constituants de la matrice ont mieux réussi à capter les charges que lui. Si le composé n'est pas chargé, il ne peut pas être détecté en spectrométrie de masse, d'où une diminution voire une suppression de son signal.

## T

**Technique séparative.** Techniques permettant de séparer les constituants présents d'un mélange selon leurs propriétés physico-chimiques.

**Technologies "omiques".** Sous le terme générique « omiques » s'apparentent les nouvelles technologies faisant référence à génomique, transcriptomique, protéomique et métabolomique qui permettent non plus d'analyser et quantifier un gène, un transcript, une protéine ou un métabolite, respectivement mais un très grand nombres de gènes, transcrits, protéines ou métabolites.

**Transformation de Fourier.** Opération mathématique qui permet de passer du signal RMN (où toutes les fréquences sont mélangées) au spectre RMN (ou chaque fréquence donne naissance à un pic).

**Transcriptomique.** Etude de l'ensemble des ARN messagers produits lors du processus de transcription d'un génome. Elle repose sur la qualification et la quantification systématique de ces ARNm, ce qui permet d'avoir une indication relative du taux de transcription de différents gènes dans des conditions données.



**TSP.** Acide triméthylsilylpropanoïque, composé généralement utilisé comme référence de déplacement chimique (0 ppm) en RMN métabolomique.

## V

**Variabilité inter-individus.** Variabilité due aux différences entre les individus (qui ne répondent pas de la même à un même stimulus).

**Variabilité intra-individu.** Variabilité observée chez un même individu entre des mesures effectuées à différentes dates au cours du temps.

**VIP.** Variable Importance in Projection.

**Voie métabolique.** Ensemble de réactions associées à une fonction métaboliques (e.g. la glycolyse).

## W

**Workflow métabolomique.** Flux de travail métabolomique en français. Ensemble d'étapes permettant de mettre en oeuvre la démarche métabolomique, en partant d'une question biologique pour aboutir à une interprétation biologique.

## Z

**Zéro-filling.** Etape de traitement des données RMN consistant à ajouter des zéros à la fin du signal pour améliorer la résolution digitale.