

Promotors

Prof. D.L. Massart
Laboratorium voor Farmaceutische en
Biomedische Analyse, FABI
Vrije Universiteit Brussel

Prof. Y. Vander Heyden
Laboratorium voor Farmaceutische en
Biomedische Analyse, FABI
Vrije Universiteit Brussel

Prof. B. Walczak
Department of Chemometrics
University of Silesia, Poland

Leden van de examencommissie

Prof. L. Buydens
Labo voor Analytische Chemie
Radboud Universiteit, Nederland

Dr. S. de Jong
Research Vlaardingen
Unilever, Nederland

Prof. K. De Paepe
Dienst Toxicologie, Dermato-Cosmetologie en
Farmacognosie
Vrije Universiteit Brussel

Prof. R. Leardi
Dipartimento di Chimica e Tecnologia
Farmaceutiche e Alimentari
Universita di Genova, Italy

Prof. Y. Michotte (voorzitster)
Farmaceutische Scheikunde en Analyse van
Geneesmiddelen
Vrije Universiteit Brussel

Prof. B. Rombaut
Farmaceutische Biotechnologie en Moleculaire
Biochemie
Vrije Universiteit Brussel



Vrije Universiteit Brussel

Faculteit Geneeskunde en Farmacie

Doctoraat
Farmaceutische Wetenschappen
Academiejaar 2004-2005



UITNODIGING

Voor de openbare verdediging van het
doctoraatsproefschrift van

Frederik QUESTIER

13 mei 2005

U wordt vriendelijk uitgenodigd op de openbare verdediging van het proefschrift van

Frederik QUESTIER

'Contributions to Clustering and Feature Selection Methods for Clustering'

Op vrijdag 13 mei 2005 om 17u00 in auditorium P. Brouwer van de Faculteit Geneeskunde & Farmacie Laarbeeklaan 103, 1090 Brussel

Situering van het proefschrift

Vele wetenschappelijke disciplines kennen een ware data-explosie, die het moeilijk maakt deze data te verkennen en te interpreteren. Farmaceutisch-analytische technieken, zoals Hoge Druk VloeistofChromatografie gekoppeld aan Diode Array Detectie (HPLC-DAD) of Gas Chromatografie gekoppeld aan Massa Spectrometrie (GC-MS), laten toe vele honderden of duizenden meetwaarden (variabelen) per staal in een korte tijdspanne te verwerven. Technieken zoals combinatoriële chemie en Hoge DoorvoerScreening (HTS) laten toe vele duizenden stalen te synthetiseren en te meten. Het grote aantal stalen en de hoge dimensionaliteit van deze datasets compliceren hun visualisatie en interpretatie.

Clusteringsmethoden, die gelijkaardige objecten groeperen in clusters, kunnen helpen data samen te vatten en interessante patronen te herkennen.

Het neurale gas algoritme werd in de chemometrie geïntroduceerd als een interessante clusteringsmethode en combinaties met visualisatietechnieken werden voorgesteld.

Waar clusteringsmethoden helpen bij een groot aantal stalen, kunnen variabelenselectiemethoden helpen bij een groot aantal meetwaarden. De identificatie van de interessantste variabelen kan leiden tot een beter begrip van de bestudeerde fenomenen. De verwijdering van irrelevante of redundante variabelen kan leiden tot een kosten- en tijdsbesparing qua metingen en tot een reductie van opslagkosten, alsook tot een performantie- en snelheidsverbetering van leeralgoritmen. Vele variabelenselectiemethoden zijn beschikbaar, maar slechts weinigen zijn bruikbaar voor niet-gesuperviseerde data, waar klasse informatie omtrent de objecten niet beschikbaar is. Verscheidene methoden werden voorgesteld voor dergelijke niet-gesuperviseerde variabelenselectie, in het bijzonder voor clusteringstoepassingen. De nieuw voorgestelde AAMRT methode (Auto-Associatieve Multivariate Regressie Bomen) leidt tot een betere clustering door verwijdering van de irrelevante en redundante variabelen en laat ook toe de variabelen te identificeren verantwoordelijk voor de clusterstructuur van de data.

Curriculum Vitae

Frederik Questier behaalde in 1996 het diploma in de Farmaceutische Wetenschappen aan de Vrije Universiteit Brussel. Vervolgens combineerde hij tijdens zijn doctoraatsstudie deze farmaceutische kennis en zijn interesse in informatica, in het onderzoek in de chemometrie aan het Laboratorium voor Farmaceutische en Biomedische Analyse. Doel van deze studie was de ontwikkeling van efficiënte methoden voor clustering en voor variabelenselectie in clustering. Tegelijkertijd begeleidde hij als assistent de studenten in de Farmaceutische Wetenschappen met hun seminaries en practica Analytische Scheikunde en Voedings & Dieetleer. Sinds 2003 is hij werkzaam aan het Onderwijsvernieuwing & OnderwijsServiceCentrum van de Vrije Universiteit Brussel. Hij is auteur van 19 publicaties, waarvan 7 als eerste auteur en 17 peer reviewed in internationale tijdschriften. Zijn werk werd meermaals voorgesteld op congressen waarvan verscheidene internationaal.

Voor meer info: zie <http://questier.com>