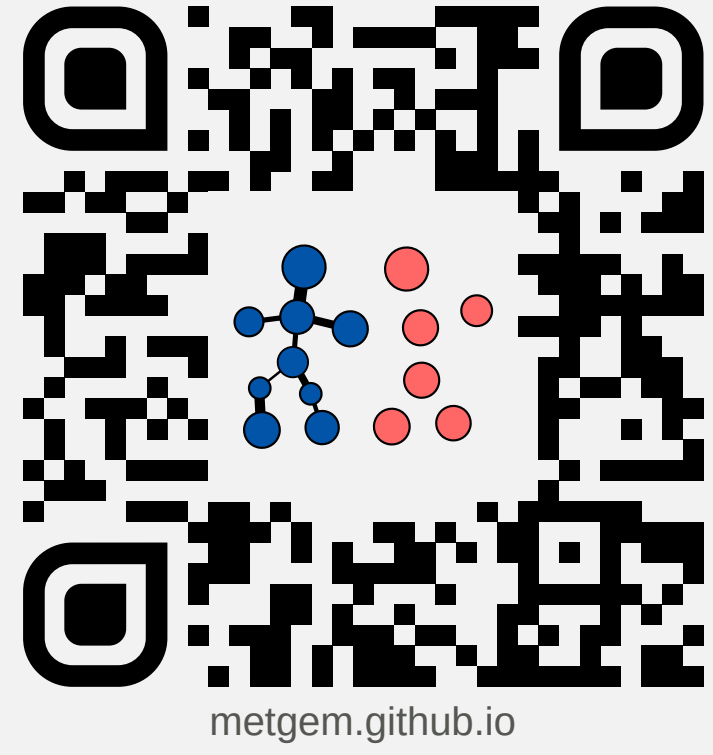


GÉNÉRATION DE RÉSEAUX MOLÉCULAIRES

DEPUIS LA PLATEFORME

WORFLOW4METABOLOMICS



metgem.github.io



workflow4metabolomics.org

NICOLAS ELIE¹, YANN GUITTON² ET DAVID TOUBOUL¹

¹ Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS UPR 2301, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay, Avenue de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette, France ² Oniris, INRAE, LABERCA, 44300 Nantes, France

INTRODUCTION

Réseaux moléculaires [1] :

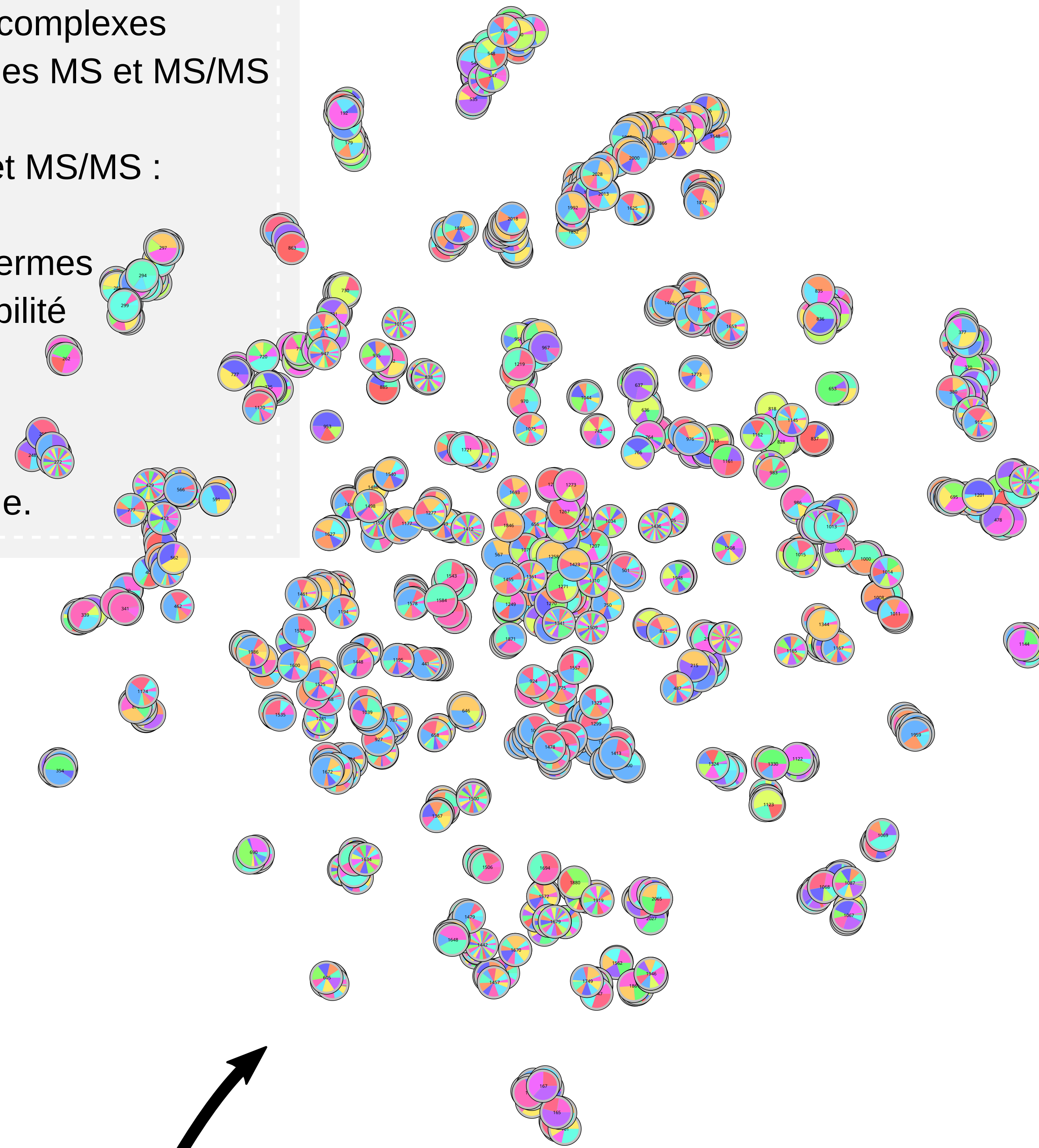
- pleinement intégrés dans les démarches de déréglication de mélanges complexes
- accéder de manière visuelle et interactive à l'ensemble du jeu de données MS et MS/MS

Plusieurs workflows disponibles pour extraire ou exporter les données MS et MS/MS :

- **MzMine** est actuellement l'outil le plus populaire dans ce domaine
- **Workflow4Metabolomics (W4M)** [2] offre de nombreux avantages en termes

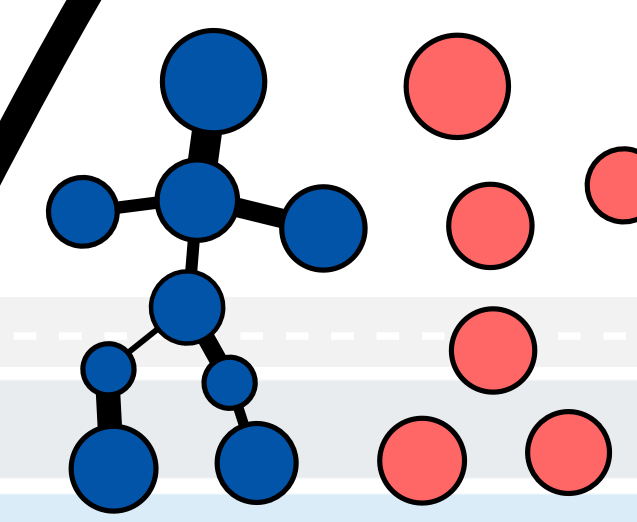
de programmation fine des opérations de traitement de données et la possibilité d'accès à un serveur dédié de calculs pour accélérer les tâches

Important d'explorer la possibilité d'interfacer **W4M et MetGem** [3] afin d'offrir une solution intégrée à la communauté scientifique en métabolomique.



MATÉRIELS ET MÉTHODES

- Mise à jour de **MetGem** vers la version **1.4**
- Ajout possible d'autant de **visualisations que nécessaire**
- Développement d'une version en ligne de commande
- Création d'un **workflow W4M** qui interface MetGem



MetGem



msPurity

metgem Molecular networking based on MS/MS spectra (Galaxy Version 1.3.6+galaxy0)

Please provide a value for this option.

Input file

No mgf or msp dataset available.

Input file to process. (--input)

Data Read Options

Cosine Score Computing Options

Network

+ Insert Network

Add Classical Network (GNPS-like) view.

t-SNE

+ Insert t-SNE

Add t-SNE embedding based view.

Execute

Citations:

- Olivon, F., Elie, N., Grellet, G., Roussi, F., Litaudon, M., & Touboul, D. (2018). MetGem Software for the Generation of Molecular Networks Based on the t-SNE Algorithm. *Analytical Chemistry*, 90(23), 13900–13908. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.8b03099>

- Elie, N., Santerre, C., & Touboul, D. (2019). Generation of a Molecular Network from Electron Ionization Mass Spectrometry Data by Combining MZmine2 and MetGem Software. *Analytical Chemistry*, 91(18), 11489–11492. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b02802>

Requirements: ?

- metgem-cli (Version 1.3.6)

RÉSULTATS ET DISCUSSION

- Intégration dans W4M permet de disposer d'un workflow complet pour générer des réseaux moléculaires
- Données brutes traitées par msPurity pour en extraire les features
- Features sont ensuite représentées sous la forme de réseaux moléculaires par MetGem
- **Accélération** des calculs grace à la puissance de calcul des serveurs W4M
- **Interactivité** de MetGem, notamment modification rapide des paramètres de visualisation sans avoir à recalculer les scores de similarité



RÉFÉRENCES

- [1] 10.1038/nbt.3597
[2] 10.1093/bioinformatics/btu813
[3] 10.1021/acs.analchem.8b03099

CONTACTS

nicolas.elie@cnrs.fr
yann.guitton@oniris-nantes.fr
david.touboul@cnrs.fr