



HAL
open science

Enrichissement de la base de données spectrale peakforest en LC-MS

Sylvain Emery, Bernard Lyan, Charlotte Joly, Nils Paulhe, Franck Giacomoni,
Etienne Thévenot, C. Junot, Estelle Pujos-Guillot

► **To cite this version:**

Sylvain Emery, Bernard Lyan, Charlotte Joly, Nils Paulhe, Franck Giacomoni, et al.. Enrichissement de la base de données spectrale peakforest en LC-MS. 10. journées scientifiques du Réseau Francophone de Métabolomique et Fluxomique, May 2016, Montpellier, France. 158 p., 2016, Livret des résumés 10JS RFMF. hal-01594987

HAL Id: hal-01594987

<https://hal.science/hal-01594987>

Submitted on 26 Sep 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Contexte

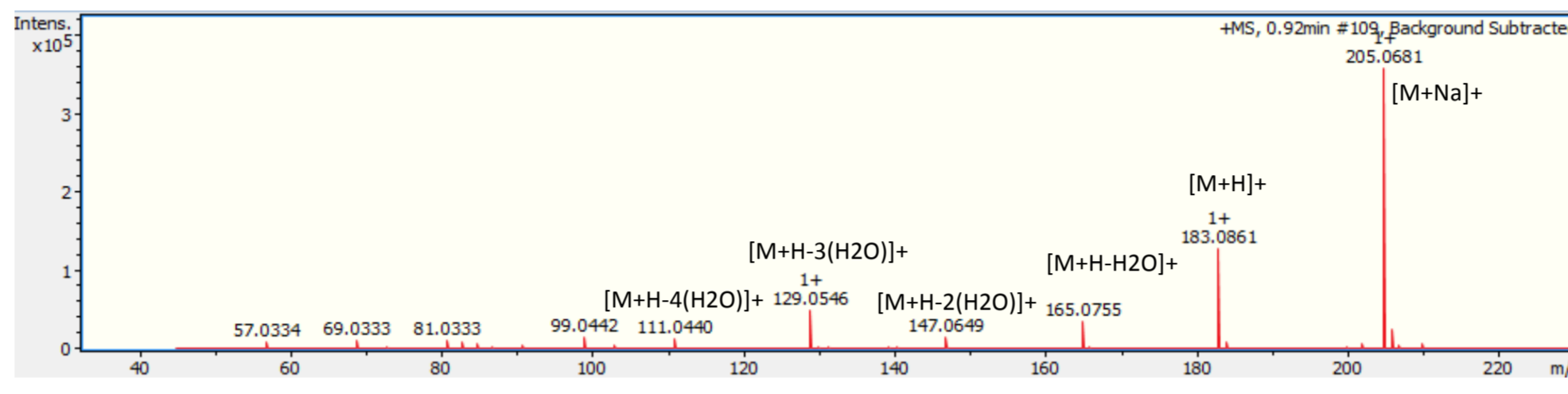
L'analyse métabolomique non ciblée est une approche puissante permettant la caractérisation du phénotype métabolique lié aux développements de maladies chroniques. L'identification des biomarqueurs qui y sont associés est devenue un enjeu majeur pour ce type d'approche. Il existe aujourd'hui un très large panel de banques de données en métabolomique, pouvant aider lors de cette étape d'identification, telles que MassBank (massbank.eu), HMDB (hmdb.ca) ou Lipidmaps (lipidmaps.org), mais ces bases n'intègrent pas de données chromatographiques alors que le temps de rétention peut être un paramètre contribuant largement dans l'identification de molécules (L.W. Summer et al : Metabolomics (2014) 10 :1047-1049).

Enrichir la base de données

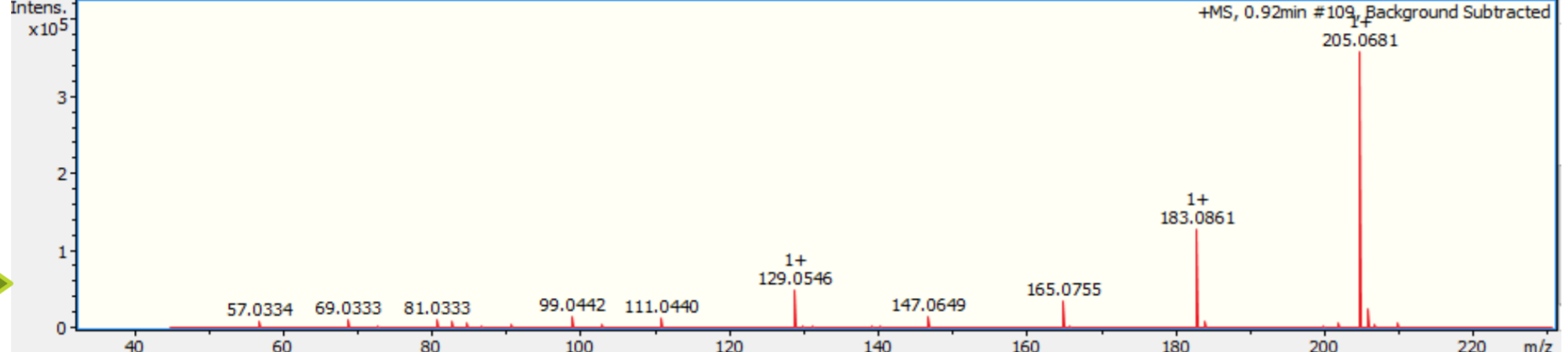
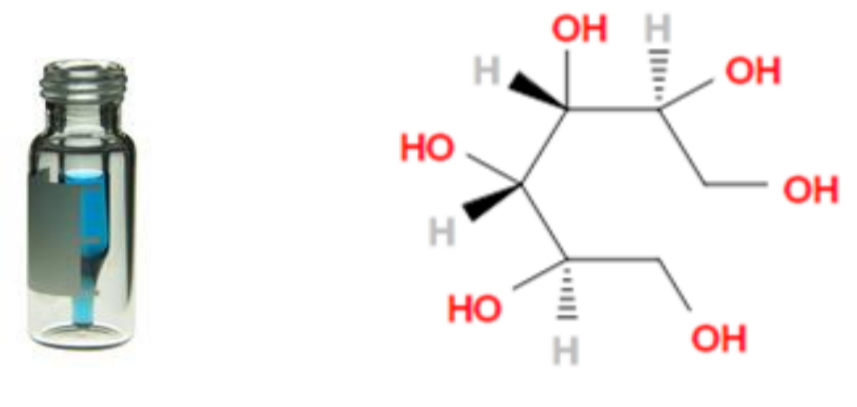
L'objectif est d'alimenter la base de données PeakForest en standards de référence (métabolites déjà décrits dans les biofluides) qui sont analysés par les quatre plateformes du consortium MetaboHUB

Annotation des spectres de masses (ion pseudo moléculaire, adduits, fragments source), collecte des temps de rétention

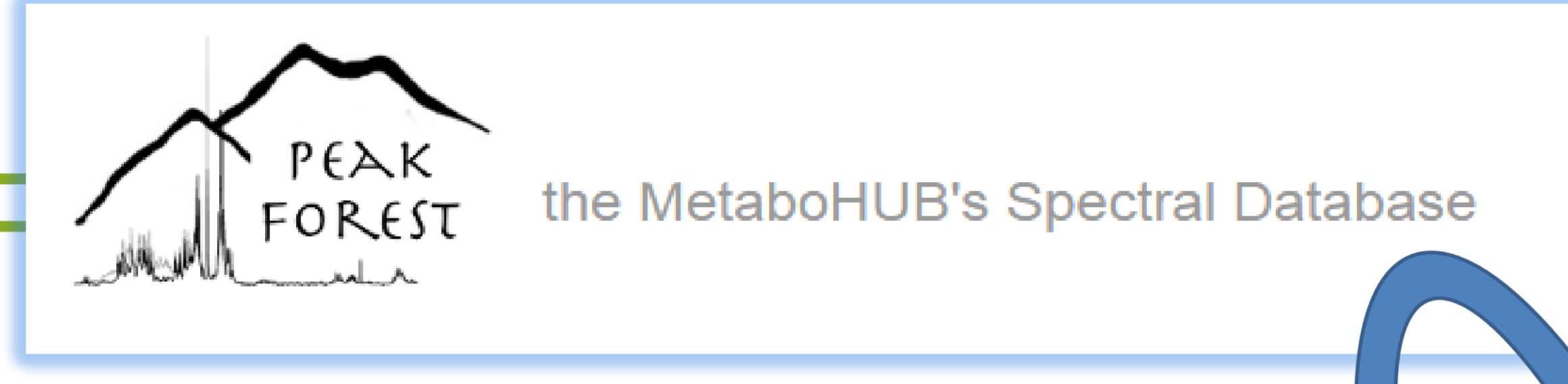
Importation des données (metadata, liste de pics) via des fichiers (format Excel) directement intégrables dans la base de données PeakForest



| Scan Type | ms | Identified compound | Identified compound |
|-----------|----------|---------------------|---------------------|
| 1 | 205.0681 | | |
| 2 | 183.0861 | | |
| 3 | 161.0725 | | |
| 4 | 147.0649 | | |
| 5 | 129.0546 | | |
| 6 | 111.0440 | | |
| 7 | 99.0442 | | |
| 8 | 81.0333 | | |
| 9 | 69.0333 | | |
| 10 | 57.0334 | | |



Acquisition de ces standards par différentes méthodes en LC-HRMS (Orbitrap, QToF)



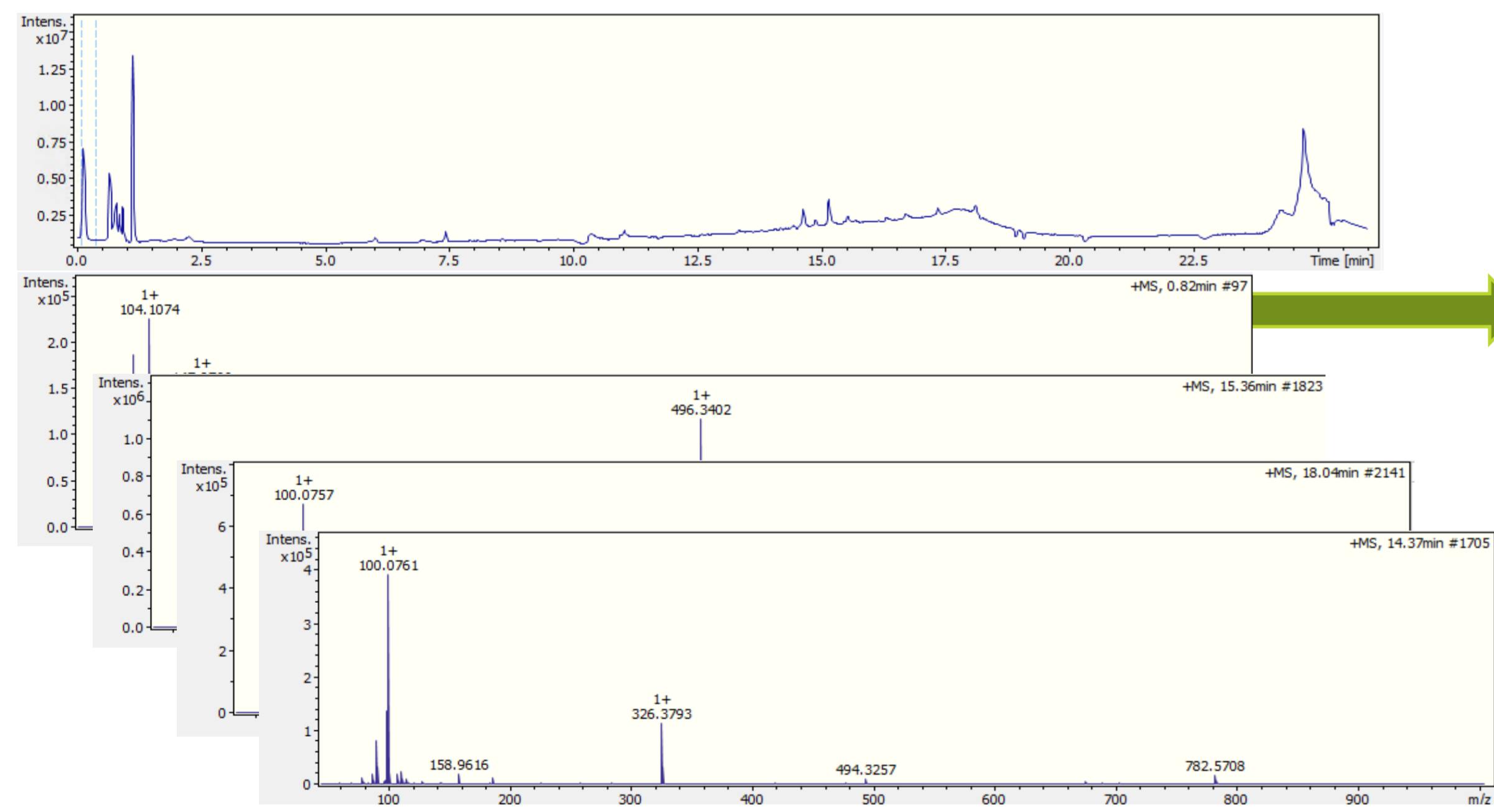
Enrichissement de la base de données

S'enrichir de la base de données

L'objectif est de pouvoir utiliser cette ressource pour une annotation automatique des jeux de données



Analyse de biofluides (plasma, urine ...) pour la caractérisation de phénotypes métaboliques liés aux développements de maladies chroniques



Analyse métabolomique non ciblée en LC-HRMS

Annotation automatique

Enrichissement de la base de données

Curation manuelle faite par des experts



Traitement des données via la plate-forme web Galaxy W4M (Workflow4Metabolomics.org)

Conclusion et perspectives



- ✓ Une preuve de concept de l'utilisation de cet outil a été réalisée pour l'annotation d'un échantillon de plasma de référence du National Institute of Standards and Technology
- ✓ Au total plus de 70 métabolites ont été confirmés en LC-MS

Perspectives de ce travail :

- ✓ Intégration des identifications sur PeakForest.org après curation par des experts
- ✓ Ajout de données MS/MS

➤ Cet outil, ayant pour but de proposer des services d'aide à l'annotation de métabolites en haut débit, contribuera donc à terme à enrichir la caractérisation des métabolomes de différents systèmes biologiques

