メタボロームデータ解析と活用法：
データベースとオンラインツールの使い方

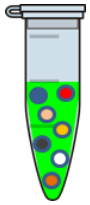
早川 英介
理化学研究所 環境資源科学研究センター
メタボローム情報研究チーム

- 本講義の目的
  - メタボロミクスデータの解析法を理解し、研究に活用する

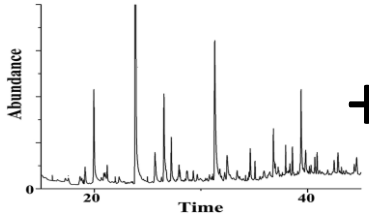
- 本講義の対象
  - 質量分析のデータ解析に慣れていない方
  - 他のオミクス研究者

- 講義内容
  - メタボロミクスデータの簡単な解説
  - 公共レポジトリ
  - データ解析ツール

質量分析によるメタボローム分析

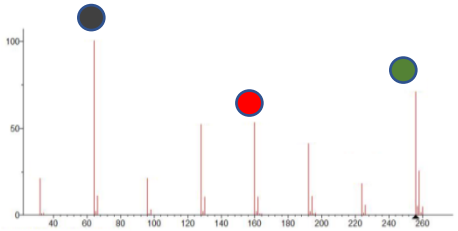


試料



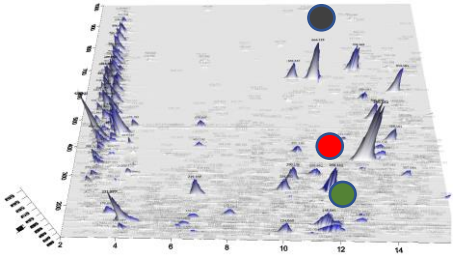
液体/ガス
クロマトグラフィー

+



Mass/charge

質量分析

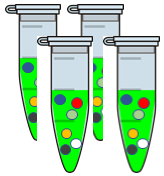


膨大な質量ピーク情報
- 質量電荷比
- シグナル強度
- 保持時間

- ターゲット分析：
  あらかじめ測定対象（ターゲット）を決めて分析を行う

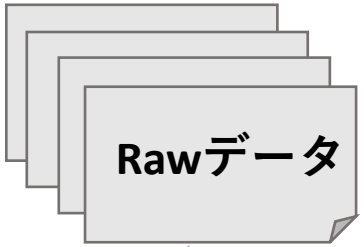
- ノンターゲット分析：
  測定対象を設定せずに分析を行い、検出された質量ピーク全てに関して解析を行う

メタボロミクスデータ処理フロー



試料

機器分析
(LC/GC-MS)



MSデータ処理

・ピーク検出　・アライメント
・Feature検出　・代謝物アノテーション

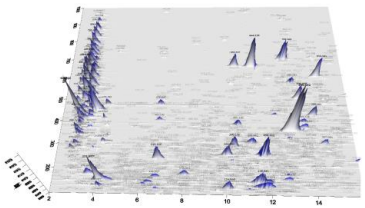
比較定量テーブル
(データ行列)

	試料A	試料B	試料C	試料D
Metabolite A	50	100	90	80
Metabolite B	100	90	75	60
Metabolite C	30	60	100	90
Metabolite D	30	100	80	60

データ解析

多変量解析
エンリッチメント解析

質量分析におけるRAWデータ

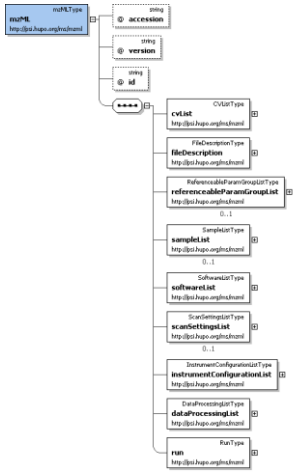


Rawデータ

- 生・未加工のLC-MSデータ
- 装置のセッティング・質量電荷比・ion count値の配列・クロマトグラム情報
- ベンダーが提供しているSDK等で中身へのアクセスは可能

公共フォーマットmzML

- Open format
- XMLベース
- ほとんどのMS関連ソフト・ツールで読み込み可
- Msconvert（ProteoWizard）でほとんどのベンダー形式から変換可能



RAW データの中身

.mzML

- 装置
- 測定条件
- その他の情報
  - イメージング　：　XY位置情報
  - イオンモビリティ　：　Drift bin

- Scan number
- spectrum type (MS1 or 2)
- m/z 配列
- Intensity 配列

MSデータ処理

- スペクトル処理
- データアライメント
- Mass feature検出
- データマトリックス生成

メタボロミクスのデータレポジトリ

Metabolights (EMBL-EBI)
メタボロミクス実験と関連情報のレポジトリ (1333 studies)

Metabolomics Workbench (UC San Diego)
メタボロミクスデータベース・レポジトリ・解析ツール (2747 studies)

Metabolomic Repository Bordeaux
植物に特化したメタボロミクスレポジトリ(58 projects)

MetaboBank (DDBJ)
メタボロミクスデータレポジトリ。MAGE-TAB formatによるメタデータの記述(104 studies)

- **Rawデータに加え試料・実験条件などのメタデータを格納**
- **結果の再現性・データ共有の観点から論文投稿時に強く求められる**
- **再解析や他のオミクスデータとの連携など利用価値は高い**

レポジトリデータの活用法・再解析

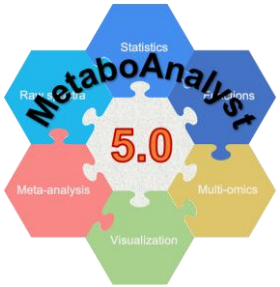
- 興味ある現象・試料
- 他オミクス（geno-/transcript/proteo）

メタボロミクスレポジトリ

MetaboLights

実験情報
Rawデータ
データマトリックス

データ解析プラットフォーム



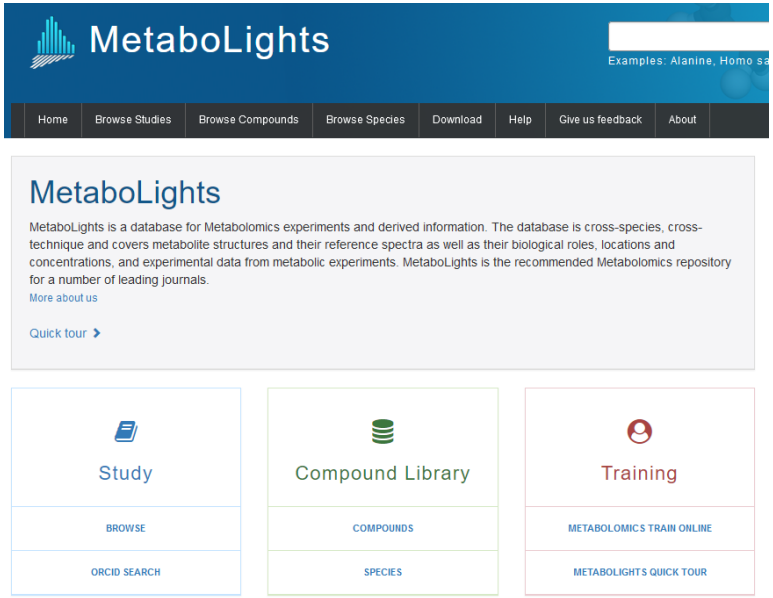
多変量解析
エンリッチメント解析

- 代謝パスウェイ情報
- 代謝物情報
- 生物学的解釈

- 代謝物の観点からの知見
- オミクスデータ統合

Metabolights

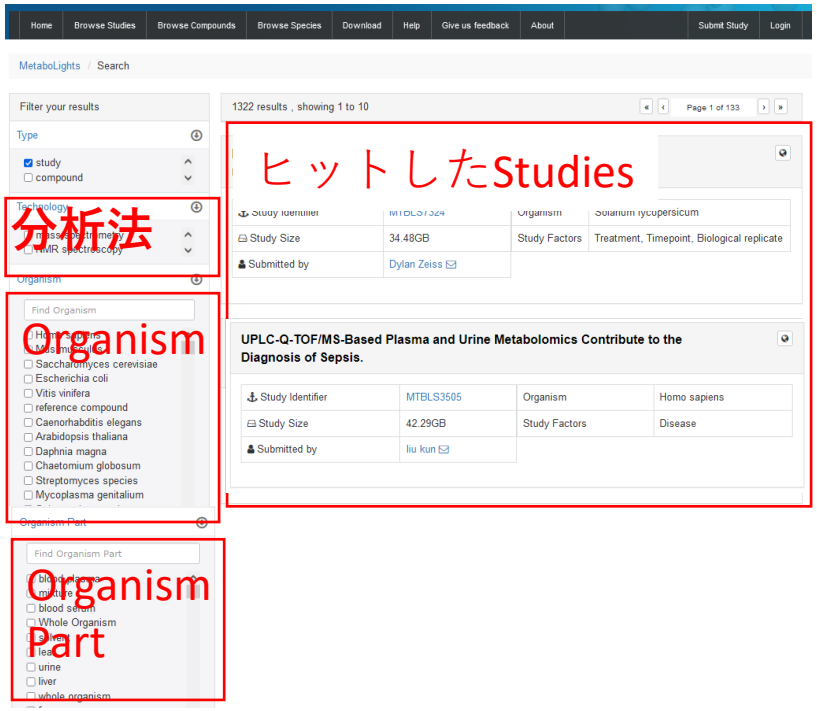
- メタボロミクス研究のためのデータベース/レポジトリ
- Rawデータ、実験情報、比較定量テーブル等が登録
- Cross-species, cross-technique
- 化合物情報など関連情報、外部データベースとの接続性



- Studies: プロジェクト単位での各種データのレポジトリ
- Compounds: 代謝物構造データベース

https://www.ebi.ac.uk/metabolights/

レポジトリ上のデータのブラウジング（Browse Studies）



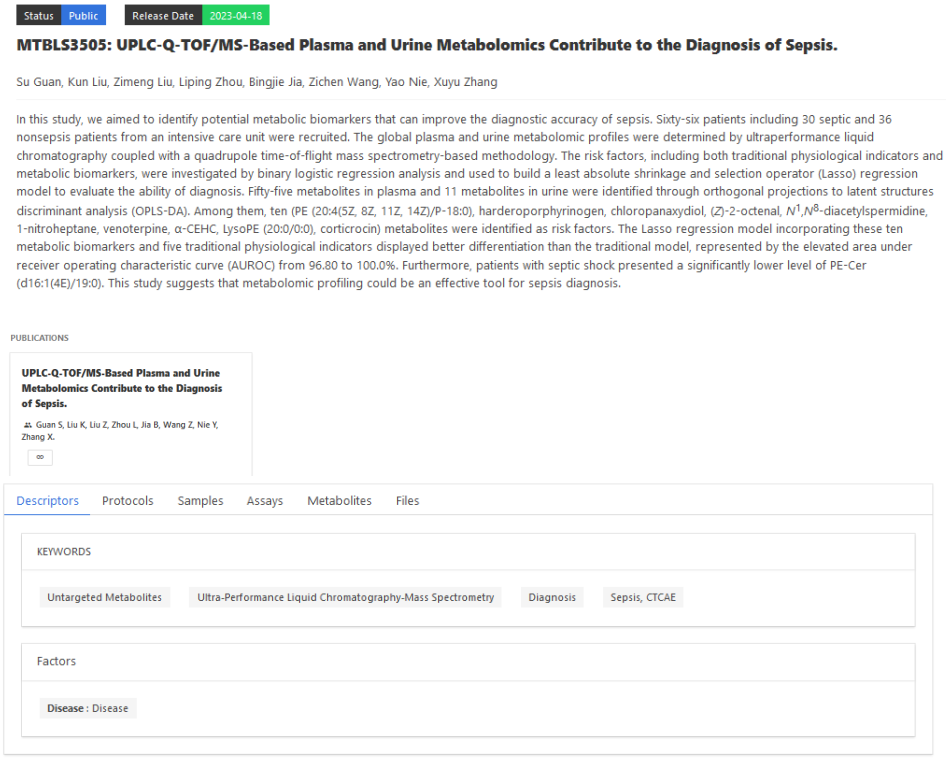
https://www.ebi.ac.uk/metabolights/

- **Metabolights上には多数の”Study”として研究データセットがRawデータ、定量テーブル、各種メタデータと共に格納されている。（1322 studies 2023Aug）**

- **Studyを**
  - **分析法：Mass spectrometry/NMR**
  - **Organism**
  - **Organism part**

  で検索して取得することが可能

各Studyのデータ



Status Public | Release Date 2023-04-18

MTBLS3505: UPLC-Q-TOF/MS-Based Plasma and Urine Metabolomics Contribute to the Diagnosis of Sepsis.

Su Guan, Kun Liu, Zimeng Liu, Liping Zhou, Bingjie Jia, Zichen Wang, Yao Nie, Xuyu Zhang

In this study, we aimed to identify potential metabolic biomarkers that can improve the diagnostic accuracy of sepsis. Sixty-six patients including 30 septic and 36 nonsepsis patients from an intensive care unit were recruited. The global plasma and urine metabolomic profiles were determined by ultraperformance liquid chromatography coupled with a quadrupole time-of-flight mass spectrometry-based methodology. The risk factors, including both traditional physiological indicators and metabolic biomarkers, were investigated by binary logistic regression analysis and used to build a least absolute shrinkage and selection operator (Lasso) regression model to evaluate the ability of diagnosis. Fifty-five metabolites in plasma and 11 metabolites in urine were identified through orthogonal projections to latent structures discriminant analysis (OPLS-DA). Among them, ten (PE (20:4(5Z, 8Z, 11Z, 14Z)/P-18:0), harderoporphyrinogen, chloropanaxydiol, (Z)-2-octenal, N^1,N^8-diacetylspermidine, 1-nitroheptane, venoterpine, α-CEHC, LysoPE (20:0/0:0), corticrocin) metabolites were identified as risk factors. The Lasso regression model incorporating these ten metabolic biomarkers and five traditional physiological indicators displayed better differentiation than the traditional model, represented by the elevated area under receiver operating characteristic curve (AUROC) from 96.80 to 100.0%. Furthermore, patients with septic shock presented a significantly lower level of PE-Cer (d16:1(4E)/19:0). This study suggests that metabolomic profiling could be an effective tool for sepsis diagnosis.

PUBLICATIONS

UPLC-Q-TOF/MS-Based Plasma and Urine Metabolomics Contribute to the Diagnosis of Sepsis.

Guan S, Liu K, Liu Z, Zhou L, Jia B, Wang Z, Nie Y, Zhang X.

Descriptors | Protocols | Samples | Assays | Metabolites | Files

KEYWORDS

Untargeted Metabolites | Ultra-Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrometry | Diagnosis | Sepsis, CTCAE

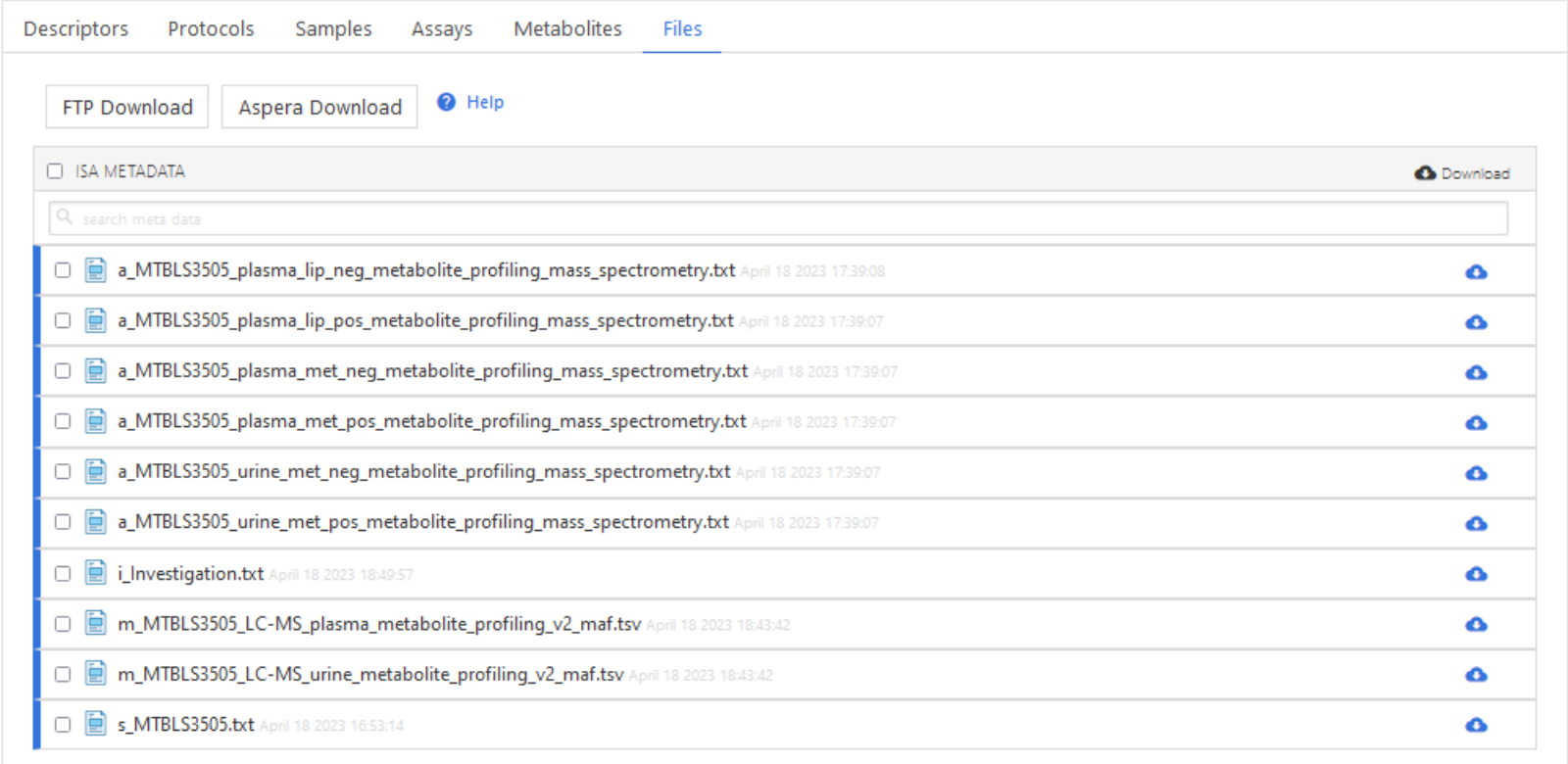
Factors

Disease : Disease

https://www.ebi.ac.uk/metabolights/editor/MTBLS3505

- **Descriptors:**
  studyの内容を示すkeyword
- **Protocols:**
  試料調整・MS分析法・アノテーション法まで含む処理の概要
- **Samples:**
  各サンプルの概要
- **Assays:**
  各サンプルで行われた一連の処理の詳細
- **Metabolites:**
  Studyで検出された代謝物のリスト
- **Files:**
  各種ファイル

ファイル構成



- **S_MTBLS****.txt ファイル: 各サンプル・Rawデータに関する情報のテーブル**
- **i_investigation.txt: Studyに関する各種メタデータ**
- **maf.tsvファイル：アノテーションされた代謝物の比較定量データ**

S_MTBLS****.txt

試料の種類・実験条件

サンプル

Sample name	Characteristic 1	Characteristic 2	Characteristic 3
C1	Mouse	Kidney	**Control**
C2	Mouse	Kidney	**Control**
N1	Mouse	Kidney	**Drug Treated**
N2	Mouse	Kidney	**Drug Treated**

maf.tsv

サンプル

代謝物

Database ID	inchi	Metabolite name	C1	C2	N1	N2
CHEBI:17263	InChI=...	Estrone	1.69E+08	7.0E+08	5.7E+08	7.2E+08
CHEBI:80658	InChI=...	Dihydrocortisol	1.52E+09	1.2E+09	3.6E+09	1.4E+09
CHEBI:732	InChI=...	Adipate semialdehyde	3.26E+09	1.9E+09	3.2E+09	1.4E+09
CHEBI:2490	InChI=...	3-Aminopentanedioate	1.69E+08	7.0E+08	3.2E+09	3.6E+06
CHEBI:28791	InChI=...	N-[(2S)-2-Amino-2-c...	1.69E+08	1.4E+09	7.1E+08	3.6E+09

- サンプル情報テーブル（S_MTBLS***.txt）と比較定量テーブル(maf.tsv)にメタボローム解析に必要な主要データが含まれている。
- 両ファイルを組み合わせることで容易に再解析が可能になる

メタボロミクスデータ解析

- メタボロミクスでは膨大な代謝物データが得られるため、データを要約する解析が重要
- 多変量解析が良く用いられる
  - 主成分分析 (Principle component analysis)
  - 部分的最小二乗法 (Partial least squares)
- 生物学的な解釈のためのエンリッチメント解析

	試料A	試料B	試料C	試料D
metabolite A	50	100	90	80
Metabolite B	100	90	75	60
Metabolite C	30	60	100	90
Metabolite D	30	100	80	60

比較定量テーブル
(データマトリックス)

→

多変量解析
- データの傾向・要約
- 重要な代謝物の選択

→

エンリッチメント解析
- 代謝パスウェイ特定
- 生物学的な解釈

メタボロミクスデータ解析ツール

MSデータ処理

- MS-DIAL: 多様な装置の形式に対応したMSデータ解析ツール。ピーク検出・デコンボリューションやアノテーションで活躍。

MSデータ処理

- MZmine: マススペクトロメトリデータの解析のためのソフトウェア。ピーク検出、アライメント、データの視覚化、および多変量解析のサポートを含む。

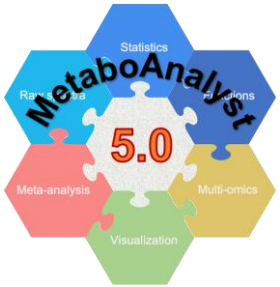
解析・解釈

- Metabolomics workbench:レポジトリ・データベースに加えさまざまなメタボロミクス解析ツールを提供するウェブベースのプラットフォーム。多変量解析のサポートも含む。

解析・解釈

- MetaboAnalyst: ウェブベースのツールで、多変量解析・エンリッチメント解析を含むの多数のデータ解析機能を提供する。APIやR言語での利用も可能

MetaboAnalyst



- カナダのアルバータ大学のDavid Wishartと マギル大学のJianguo Xiaの研究グループにより運営されているフリーのWebサービス
  http://www.metaboanalyst.ca/

- Xia, J., Wishart, D.S. (2011), “Web-based inference of biological patterns, functions and pathways from metabolomic data using MetaboAnalyst”, *Nature Protocols*., 6, 743-760.
- Pang, Z., Chong, J., Zhou, G., Morais D., Chang, L., Barrette, M., Gauthier, C., Jacques, PE., Li, S., and Xia, J. (2021) MetaboAnalyst 5.0: narrowing the gap between raw spectra and functional insights *Nucl. Acids Res*. (doi: 10.1093/nar/gkab382)

- メタボロミクスデータの解析と解釈を支援するための包括的なウェブベースのツールであり、様々な統計的の解析手法を統合して、研究者がメタボロミクスデータを解釈するのを助ける。

Metaboanalystデータ解析メニュー

	Input Data Type	Available Modules (click on a module to proceed, or scroll down for more details)					
①	Raw Spectra (mzML, mzXML or mzData)			LC-MS Spectra Processing			
②	MS Peaks (peak list or intensity table)			Functional Analysis	Functional Meta-analysis		
③	Annotated Features (compound list or table)		Enrichment Analysis	Pathway Analysis	Joint-Pathway Analysis	Network Analysis	
④	Generic Format (.csv or .txt table files)	Statistical Analysis [one factor]	Statistical Analysis [metadata table]	Biomarker Analysis	Statistical Meta-analysis	Power Analysis	Other Utilities

多変量解析

https://www.metaboanalyst.ca/

①Raw spectra: ピーク処理前のRawデータ

②MS peaks: ピーク検出後の質量電荷比・強度情報のリスト

③Annotated Features: アノテートされた化合物のリスト

④Generic Format: csv, tsvフォーマットの様々なデータ

データの準備（Metabolightsから）

S_MTBLS**.txt**

サンプル

Sample name	Characteristic 1	Characteristic 2	Characteristic 3
C1	Mouse	Kidney	**Control**
C2	Mouse	Kidney	**Control**
N1	Mouse	Kidney	**Drug Treated**
N2	Mouse	Kidney	**Drug Treated**

群A

群B

maf.tsv

サンプル名

代謝物

Database ID	inchi	Metabolite name	C1	C2	N1	N2
CHEBI:17263	InChI=...	Estrone	1.69E+08	7.0E+08	5.7E+08	7.2E+08
CHEBI:80658	InChI=...	Dihydrocortisol	1.52E+09	1.2E+09	3.6E+09	1.4E+09
CHEBI:732	InChI=...	Adipate semialdehyde	3.26E+09	1.9E+09	3.2E+09	1.4E+09
CHEBI:2490	InChI=...	3-Aminopentanedioate	1.69E+08	7.0E+08	3.2E+09	3.6E+06
...	...	...	...	...	...	...

化合物名

サンプル名

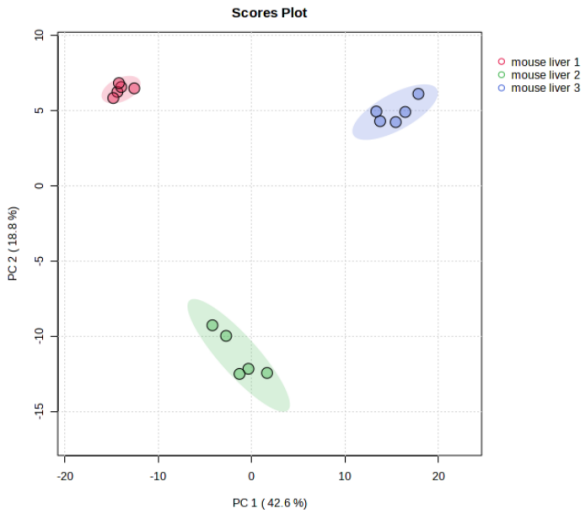
群名

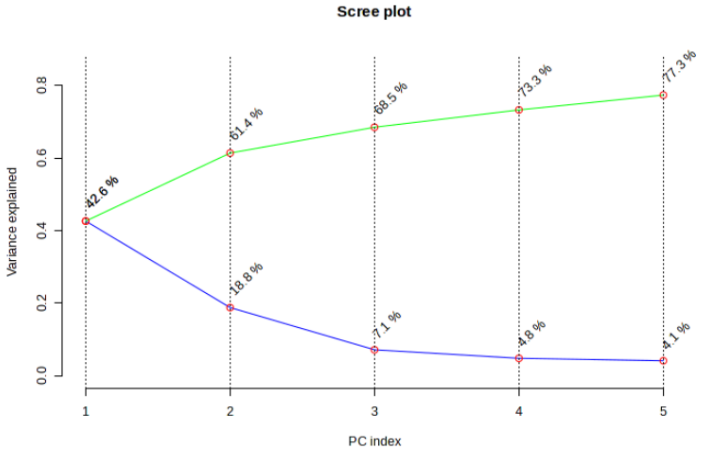
多変量解析用テーブル

	C1	C2	N1	N2
Metabolite name	群A	群A	群B	群B
Estrone	1.69E+08	7.0E+08	5.7E+08	7.2E+08
Dihydrocortisol	1.52E+09	1.2E+09	3.6E+09	1.4E+09
Adipate semialdehyde	3.26E+09	1.9E+09	3.2E+09	1.4E+09
3-Aminopentanedioate	1.69E+08	7.0E+08	3.2E+09	3.6E+06
...	...	...	...	...

メタボロミクスにおける代表的な多変量解析手法

- 主成分分析 (Principle component analysis)
  - 大量の代謝物（変数）を説明する主成分を軸として次元を削減
  - サンプル群の代謝物プロファイルの傾向を可視化

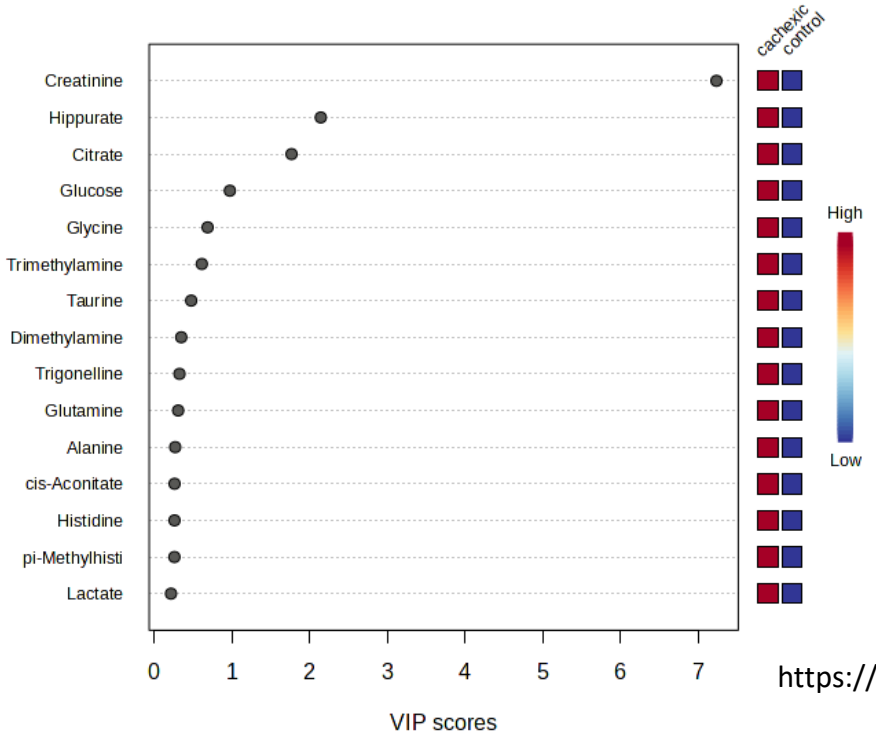




https://genap.metaboanalyst.ca

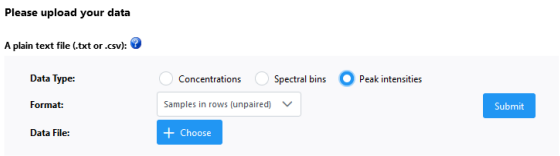
メタボロミクスにおける代表的な多変量解析手法

- 部分的最小二乗法 (Partial least squares)
  - 目的変数（サンプル情報等）と予測変数（代謝物群）の関係を潜在変数を介してモデリングを行う。
  - 目的変数への寄与が高い代謝物を選択

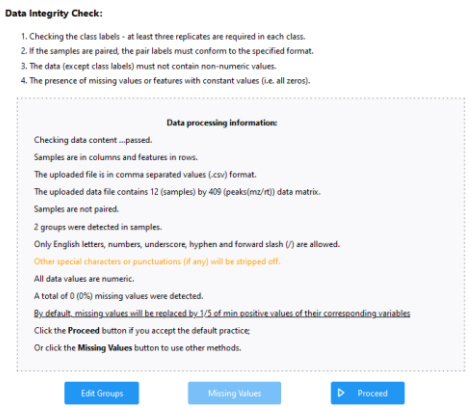


https://genap.metaboanalyst.ca

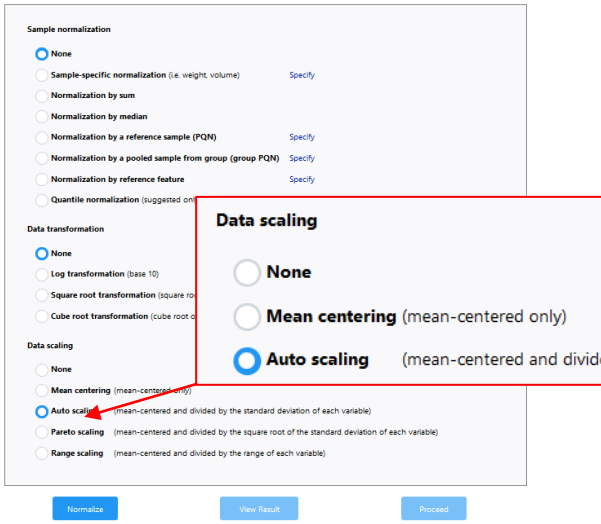
操作手順（多変量解析）



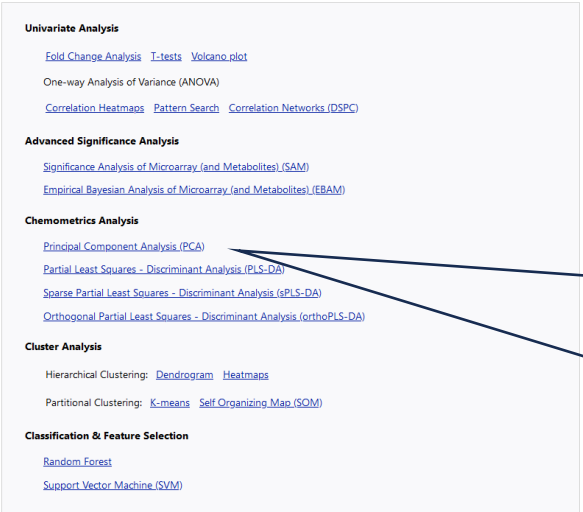
ファイルアップロード



入力データの確認

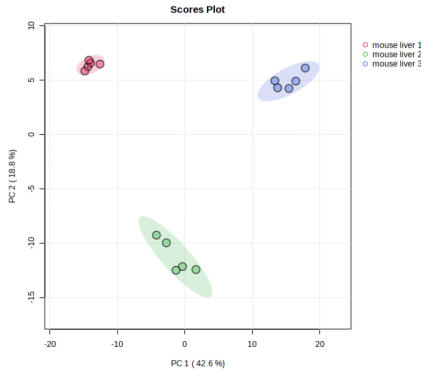


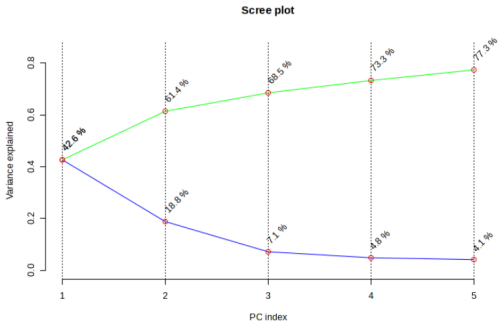
Normalization/scaling



解析結果のメニュー

PCA

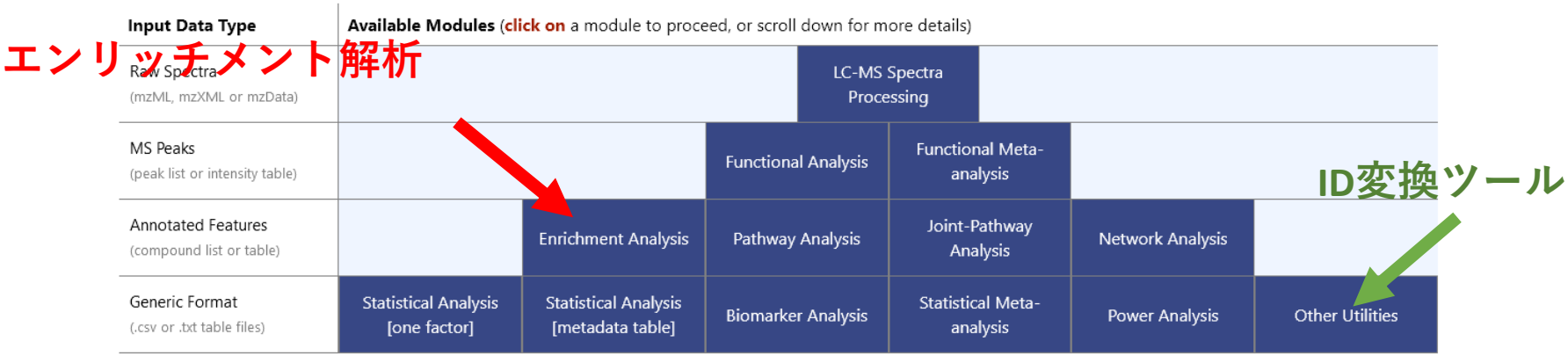


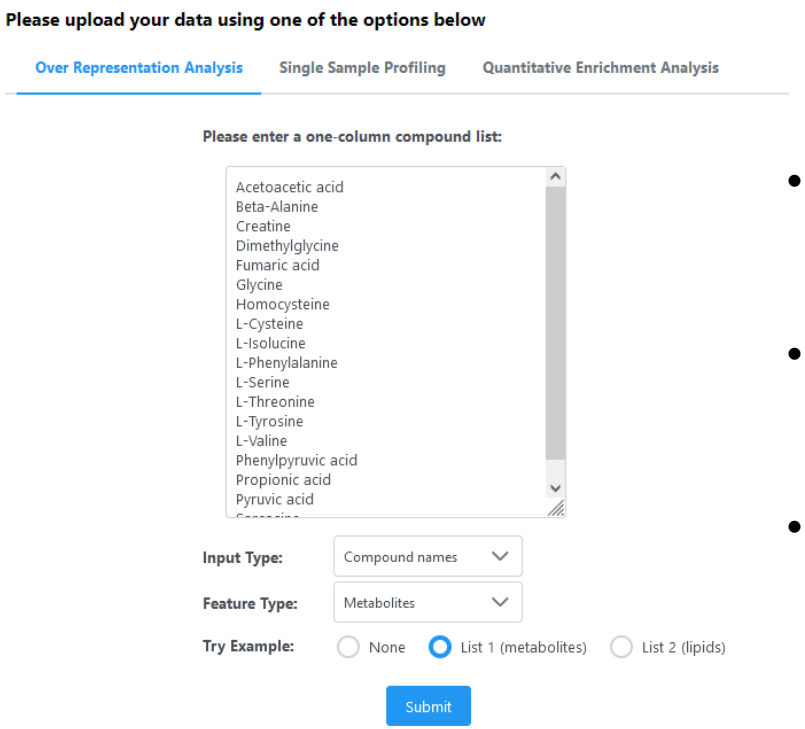


エンリッチメント解析

- t-検定などの統計的仮説検定は個々の代謝物について有意なものを選ぶが、エンリッチメント解析では代謝経路ごとに計算を行う。
- 特定の代謝経路に含まれる複数の代謝物の内、「差のある代謝物」が多く含まれる場合はその代謝経路は有意になりやすい。
- “どの代謝パスウェイが変動しているか“を見ることで解析結果を生物学的理解へつなげる

MetaboAnaystでのエンリッチメント解析





- （変動・有意差のあった）代謝物リストをテキストボックスに入力
- 入力名はcompound name (HMDB)や各種ID が利用可能
- ID変換はID conversion toolが利用可能

入力情報の確認・標準化（Name/ID Standardization）

Query	Hit	HMDB	PubChem	KEGG	Details
Acetoacetic acid	Acetoacetic acid	HMDB0000060	96	C00164	
Beta-Alanine	Beta-Alanine	HMDB0000056	239	C00099	
Creatine	Creatine	HMDB0000064	586	C00300	
Dimethylglycine	Dimethylglycine	HMDB0000092	673	C01026	
Fumaric acid	Fumaric acid	HMDB0000134	444972	C00122	
Glycine	Glycine	HMDB0000123	750	C00037	
Homocysteine	Homocysteine	HMDB0000742	778	C00155	
L-Cysteine	L-Cysteine	HMDB0000574	5862	C00097	
L-Isolucine		-	-	-	View
L-Phenylalanine	L-Phenylalanine	HMDB0000159	6140	C00079	

https://www.metaboanalyst.ca/

- ユーザーの入力した代謝物情報の確認
- マッチしない（認識されない）代謝物は黄色でハイライトされるので viewリンクから正しい名前を確認

解析で用いる代謝経路の分類指定（Parameter Setting）

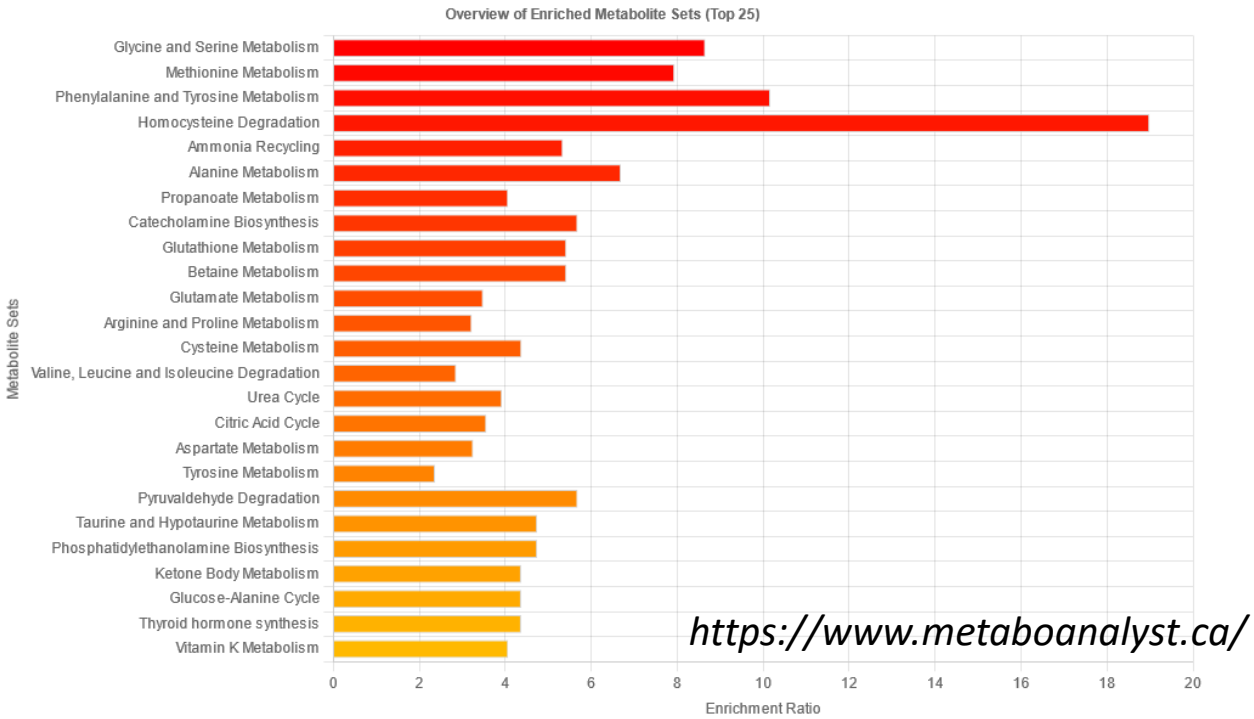
Please select a metabolite set library

Pathway based	SMPDB	99 metabolite sets based on normal human metabolic pathways.
	KEGG	84 metabolite sets based on KEGG human metabolic pathways (Oct. 2019).
	Drug related	461 metabolite sets based on drug pathways from SMPDB.
Disease signatures	Blood	344 metabolite sets reported in human blood.
	Urine	384 metabolite sets reported in human urine.
	CSF	166 metabolite sets reported in human cerebral spinal fluid (CSF).
	Feces	44 metabolite sets reported in human feces.
Chemcial structures	Super-class	35 super chemical class metabolite sets or lipid sets
	Main-class	464 main chemical class metabolite sets or lipid sets
	Sub-class	1072 sub chemical class metabolite sets or lipid sets
Other types	SNPs	4,598 metabolite sets based on their associations with SNPs loci.
	Predicted	912 metabolic sets predicted to change in the case of dysfunctional enzymes.
	Locations	73 metabolite sets based on organ, tissue, and subcellular localizations.
Self defined	Upload here	define your own customized metabolite sets

https://www.metaboanalyst.ca/

- 目的に合った代謝経路の分類を選択する。
- 一般的なメタボロミクスの場合はPathway-associated metabolite sets (SMPDB)を選択
- 他のオミクス解析でKEGG、SNPs、組織等の情報と連携させる場合は該当の物を選択
- 自分で作成した代謝経路の分類・代謝物のセットを利用することも可能

エンリッチメント解析結果①

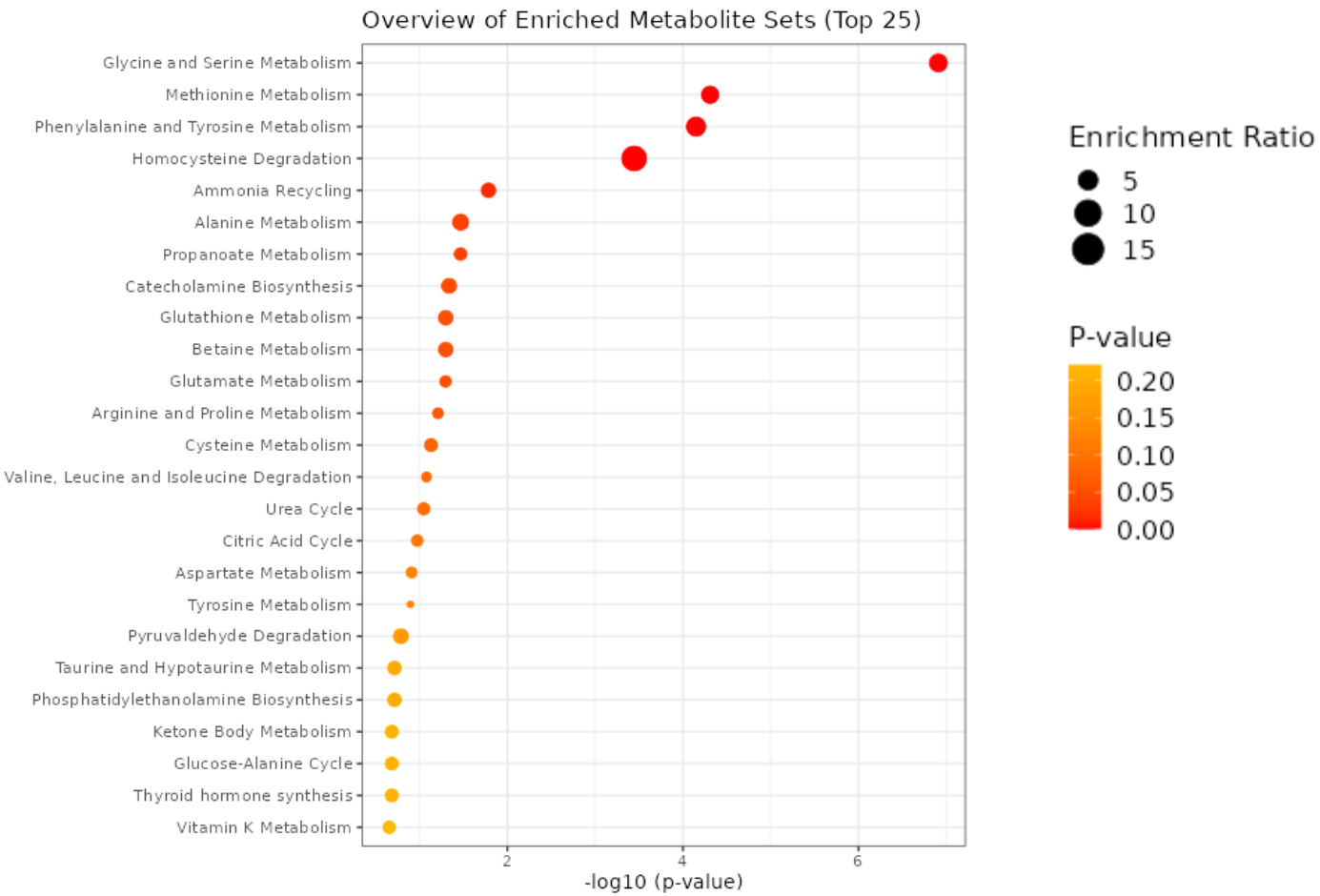


代謝パスウェイ/代謝物セット

Enrichment ratio

- **Enrichment ratio: 特定の代謝パスウェイ(代謝物セット)内のメタボライトの頻度と、全体のデータセット内のその頻度との比率。**

エンリッチメント解析結果②



https://www.metaboanalyst.ca/

エンリッチメント解析結果のP-valueとEnrichment Ratioを可視化

解析結果の詳細

Metabolite Set	Total	Hits	Expect	P value	Holm P	FDR	Details
Glycine and Serine Metabolism	59	9	1.04	1.23E-7	1.21E-5	1.21E-5	View
Methionine Metabolism	43	6	0.756	4.9E-5	0.00476	0.00231	View
Phenylalanine and Tyrosine Metabolism	28	5	0.492	7.08E-5	0.00679	0.00231	View
Homocysteine Degradation	9	3	0.158	3.59E-4	0.0341	0.00881	View
Ammonia Recycling	32	3	0.562	0.0164	1.0	0.322	View
Alanine Metabolism	17	2	0.299	0.034	1.0	0.451	View
Propanoate Metabolism	42	3	0.738	0.0341	1.0	0.451	View

https://www.metaboanalyst.ca/

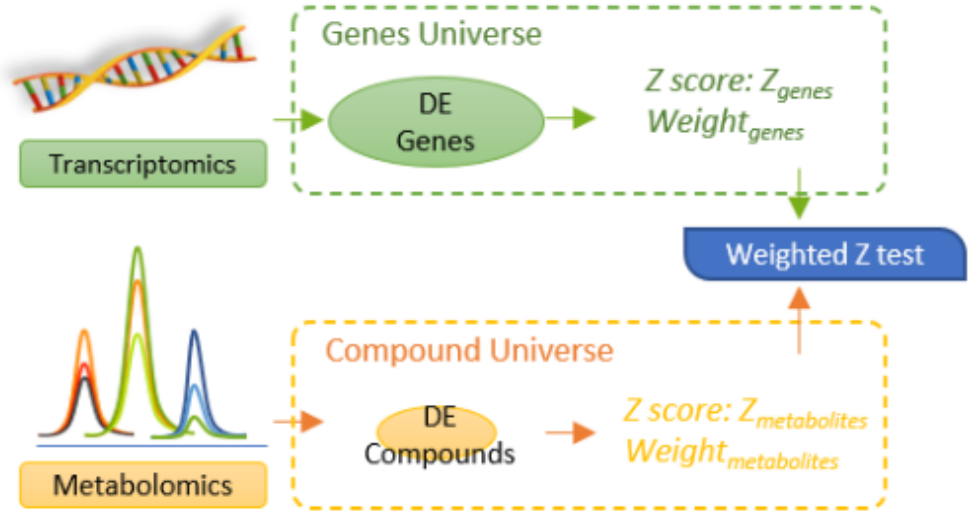
Set Name	Metabolites	References
Glycine and Serine Metabolism	2-Ketobutyric acid; Betaine; Adenosine monophosphate; Ammonia; **Creatine**; **Dimethylglycine**; L-Cystathionine; Glyoxylic acid; **Glycine**; Guanidoacetic acid; Glyceric acid; L-Glutamic acid; L-Alanine; **L-Threonine**; **L-Serine**; Oxoglutaric acid; Ornithine; Orotidylic acid; **Pyruvic acid**; Pyrophosphate; **Sarcosine**; Phosphoserine; L-Arginine; Adenosine triphosphate; Magnesium; **L-Cysteine**; L-Methionine; **Homocysteine**; 3-Phosphoglyceric acid; NAD; S-Adenosylhomocysteine; Succinyl-CoA; Phosphohydroxypyruvic acid; 5-Aminolevulinic acid; Pyruvaldehyde; S-Adenosylmethionine; Acetyl-CoA; FAD; Zinc (II) ion; ADP; Hydroxypyruvic acid; Oxygen; Coenzyme A; Formaldehyde; Phosphate; (R)-lipoic acid; NADH; Pyridoxal 5'-phosphate; 5,10-Methylene-THF; Tetrahydrofolic acid; Carbon dioxide; Water; Aminoacetone; Hydrogen peroxide; D-Serine; L-2-Amino-3-oxobutanoic acid; Dihydrolipoate; 8-[(Aminomethyl)sulfanyl]-6-sulfanyloctanoic acid; (S)-lipoic acid	SMPDB KEGG

- **Holm P : Holm法による多重比較補正を行ったp-value**
- **FDR:　想定される偽陽性の割合**
- **Viewリンクから代謝パスウェイ/代謝物セットの詳細が確認できる**

マルチオミクス（マルチセット）のデータ解析

- マルチセットPLS
  - 教師有マルチセットPLS-ROG
  (Yamamoto, H., *Journal of Chemometrics*, 31(3) (2017) e2883)

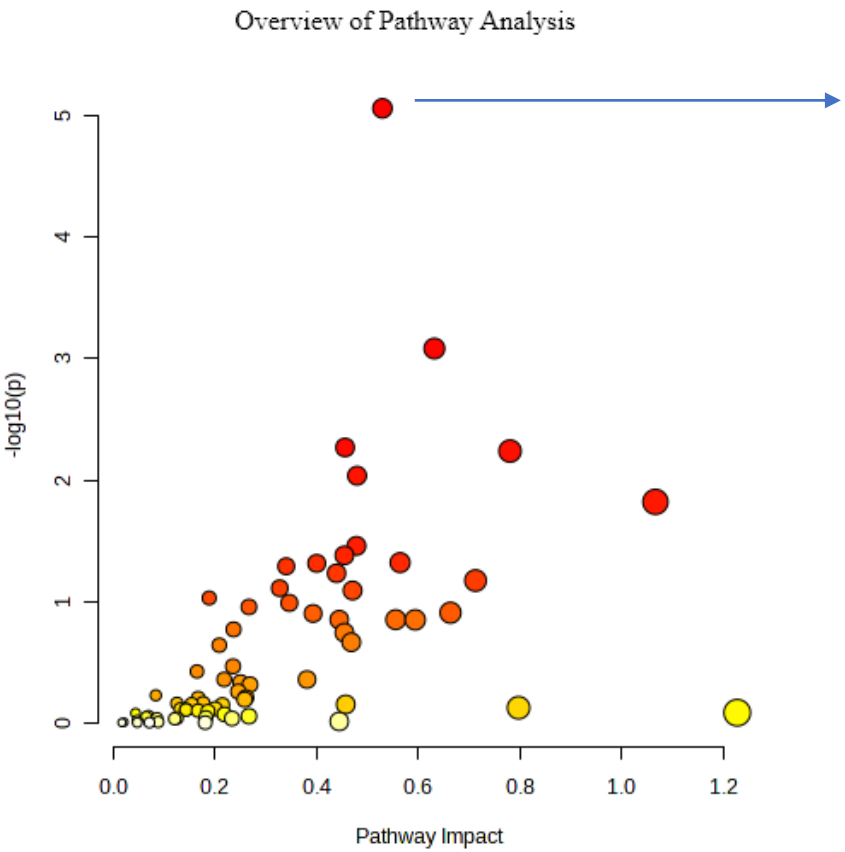
- Joint Pathway Analysis (MetaboAnalyst)
  - マルチセット多変量解析の結果で統計的に優位な遺伝子・タンパク質・代謝物に対してエンリッチメント解析を行う。

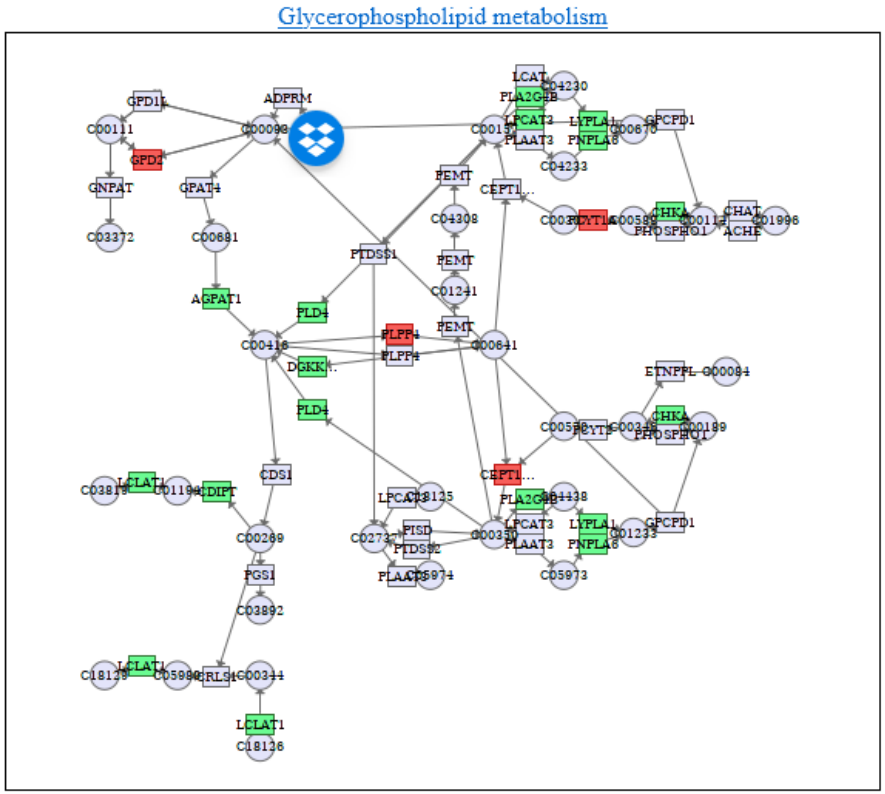


from MetaboAnalyst tutorial page
(https://www.metaboanalyst.ca/MetaboAnalyst/docs/Tutorials.xhtml)

MetaboanalystにおけるJoint Pathway Analysis

Input Data Type	Available Modules (click on a module to proceed, or scroll down for more details)					
Raw Spectra (mzML, mzXML or mzData)				LC-MS Spectra Processing		
MS Peaks (peak list or intensity table)			Functional Analysis	Functional Meta-analysis		
Annotated Features (compound list or table)		Enrichment Analysis	Pathway Analysis	Joint-Pathway Analysis	Network Analysis	
Generic Format (.csv or .txt table files)	Statistical Analysis [one factor]	Statistical Analysis [metadata table]	Biomarker Analysis	Statistical Meta-analysis	Power Analysis	Other Utilities





解析結果のダウンロード

①

msea_ora_result.csv

②

name_map.csv

③

ora_0_dpi72.png

ora_1_dpi72.png

④

Rhistory.R

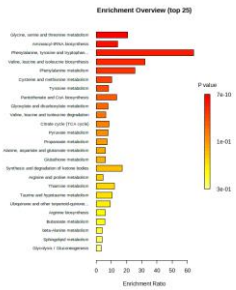
①エンリッチメント解析結果

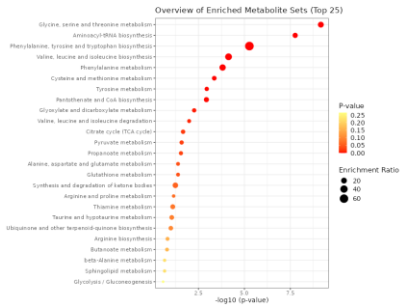
	A	B	C	D	E	F	G
1		total	expected	hits	Raw p	Holm p	FDR
2	Glycine and Serine Metabo	59	1.04	9	1.23E-07	1.21E-05	1.21E-05
3	Methionine Metabolism	43	0.756	6	4.90E-05	0.00476	0.00231
4	Phenylalanine and Tyrosine	28	0.492	5	7.08E-05	0.00679	0.00231
5	Homocysteine Degradatior	9	0.158	3	0.00036	0.0341	0.00881
6	Ammonia Recycling	32	0.562	3	0.0164	1	0.322
7	Alanine Metabolism	17	0.299	2	0.034	1	0.451
8	Propanoate Metabolism	42	0.738	3	0.0341	1	0.451
9	Catecholamine Biosynthesi	20	0.352	2	0.046	1	0.451
10	Glutathione Metabolism	21	0.369	2	0.0503	1	0.451
11	Betaine Metabolism	21	0.369	2	0.0503	1	0.451

②使用した代謝物リスト・マッチ結果

	A	B	C	D	E	F	G
1	Query	Match	HMDB	PubChem	KEGG	SMILES	Commer
2	Acetoacetic acid	Acetoacetic acid	HMDB000006	96	C00164	CC(=O)CC	1
3	Beta-Alanine	Beta-Alanine	HMDB000005	239	C00099	C(CN)C(=C	1
4	Creatine	Creatine	HMDB000006	586	C00300	CN(CC(=O	1
5	Dimethylglycine	Dimethylglycine	HMDB000009	673	C01026	CN(C)CC(=	1
6	Fumaric acid	Fumaric acid	HMDB000013	444972	C00122	C(=C/C(=C	1
7	Glycine	Glycine	HMDB000012	750	C00037	C(C(=O)O)	1
8	Homocysteine	Homocysteine	HMDB000074	778	C00155	C(CS)C(C(=	1
9	L-Cysteine	L-Cysteine	HMDB000057	5862	C00097	C([C@@H	1

③各種画像ファイル





④Rコード

```
# PID of current job: 2344740
mSet<-InitDataObjects("conc", "msetora", FALSE)
cmpd.vec<-c("Acetoacetic acid","Beta-Alanine","Creatine","Dimethylglycin
mSet<-Setup.MapData(mSet, cmpd.vec);
mSet<-CrossReferencing(mSet, "name");
mSet<-CreateMappingResultTable(mSet)
mSet<-PerformDetailMatch(mSet, "L-Isolucine");
mSet<-GetCandidateList(mSet);
mSet<-SetCandidate(mSet, "L-Isolucine", "L-Isoleucine");
mSet<-SetMetabolomeFilter(mSet, F);
mSet<-SetCurrentMsetLib(mSet, "kegg_pathway", 2);
mSet<-CalculateHyperScore(mSet)
mSet<-PlotORA(mSet, "ora_0_", "net", "png", 72, width=NA)
mSet<-PlotEnrichDotPlot(mSet, "ora", "ora_dot_0_", "png", 72, width=NA)
mSet<-CalculateHyperScore(mSet)
mSet<-PlotORA(mSet, "ora_1_", "net", "png", 72, width=NA)
mSet<-PlotEnrichDotPlot(mSet, "ora", "ora_dot_1_", "png", 72, width=NA)
mSet<-SetMetabolomeFilter(mSet, F);
```

Summary

- メタボロミクスデータ解析の流れ
  - Rawデータ→MSデータ処理 → データ行列 →解析

- 公共データレポジトリ
  - Rawデータに加え各種ファイルを取得可能
  - 構造化されたデータから効率的に再解析を行う

- データ解析ツール
  - 多変量解析でデータの傾向と重要な代謝物を知る
  - エンリッチメント解析で代謝パスウェイと生物学的な解釈へ

質量分析インフォマティクス

- 質量分析インフォマティクス研究会（http://ms-bio.info/
  - 「質量分析法を用いた研究分野（特にオミクス研究）のデータ解析」の研究者の交流の場
  - ハッカソン（国内版バイオハッカソンと共同開催）・ソフトウェア講習会・ミートアップ（テーマごとのディスカッション・情報交換）

- メタボロミクス実践ガイド　（書籍）
  - 試料調整、機器分析、データ解析まで網羅

  https://www.yodosha.co.jp/yodobook/book/9784758122511/

- 質量分析インフォマティクス入門
  - 質量分析インフォマティクスに関する各種情報を紹介

  https://mass-spec-info.github.io/metaboguide/