帕诺米克 BioNovoGene

Biodeep™

全球领先的代谢组学云分析平台

Biodeep Online为每位代谢组用户提供生物信息数据的存储、分析

谢桂纲 于建东

20190118

BioDeep™

- 科学存储、解卷积与鉴定、生物信息挖掘于一体的代谢组学云分析平台

MetaDeco

MetAnno

MetaDiscovery

收费方式

MetaDeco

- 免费存储（永久免费空间30G，超出需购买）；
- 免费解卷积

MetAnno

- 付费：根据最终代谢物鉴定数量，10个米克币/每个代谢物。

MetaDiscovery

- 付费：根据比对组别数量，单次分析（首组800米克币，每增加一组，另付400米克币）。

关于“米克币”

- 米克币是什么？
  Biodeep付费功能所需要的“货币”；
- 怎么获得米克币？
  1）免费获得：线下客户赠送、首次注册、提出改进意见等；
  详情参考：http://help.biodeep.cn/#platform/3.0getMoney.md
  2）购买：按照RMB：米克币=1:1，量多从优。
  充值入口：http://my.biodeep.cn/index.php?app=balance#account_recharge

操作步骤

上传数据

- 新建项目
- 编辑分组[例如：pos，neg]
- 上传数据与文件管理

创建任务

- 参数选择
- 创建任务

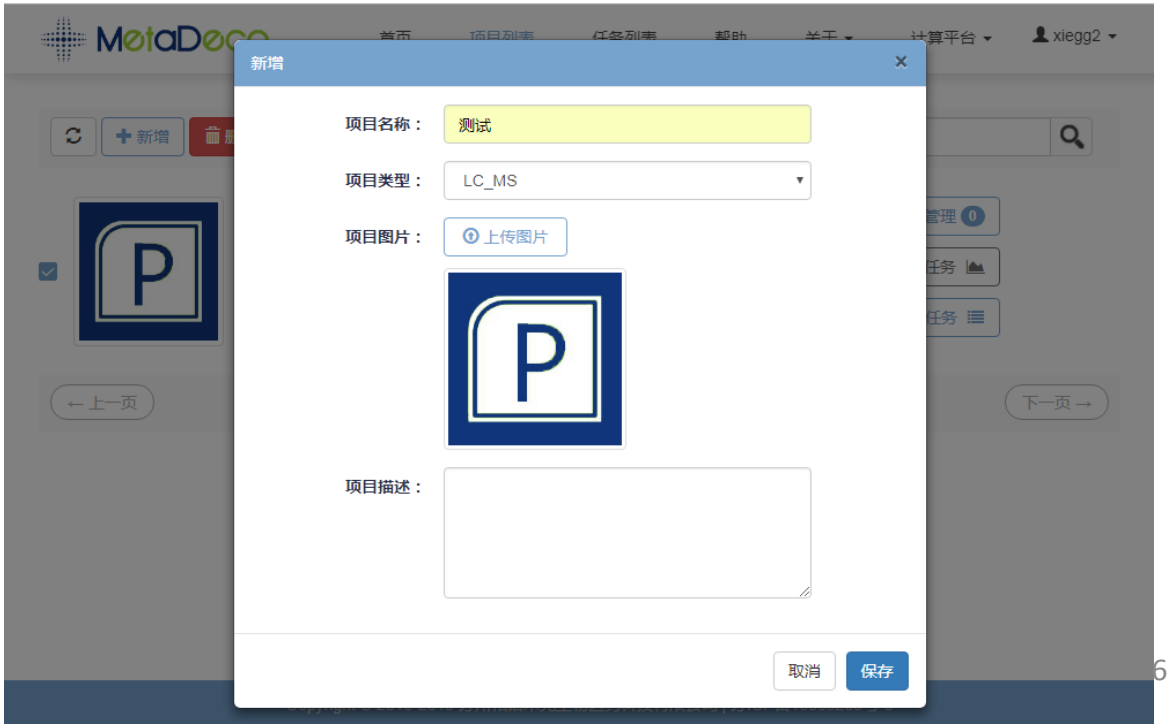
查看结果

- 在线查看
- 结果下载

详情参考：http://help.biodeep.cn/

上传数据

- 1. 新建分析项目
- http://mz.biodeep.cn/index.php/index/project_home



上传数据

- 2. 编辑样本的分组信息
- 会需要在文件管理器之中编辑分组信息，以方便进行后续的比较分析

上传数据

- 3. 上传原始数据文件
- LCMS: 支持mzXML，Raw(Thermo)等
- GCMS: 支持CDF
- 因为服务器后台比较繁忙，建议首先转换为mzXML格式之后再进行上传，可以缩短队列等待时间

格式转换软件：http://proteowizard.sourceforge.net/

参考文献：Meta-analysis of untargeted metabolomic data from multiple profiling experiments，Nature protocols.

上传数据

- 4. 文件管理操作
- 在文件列表中选中文件之中，可以进行下面的三个操作：

删除错误上传的文件

下载原始数据文件

在实验分组间移动文件

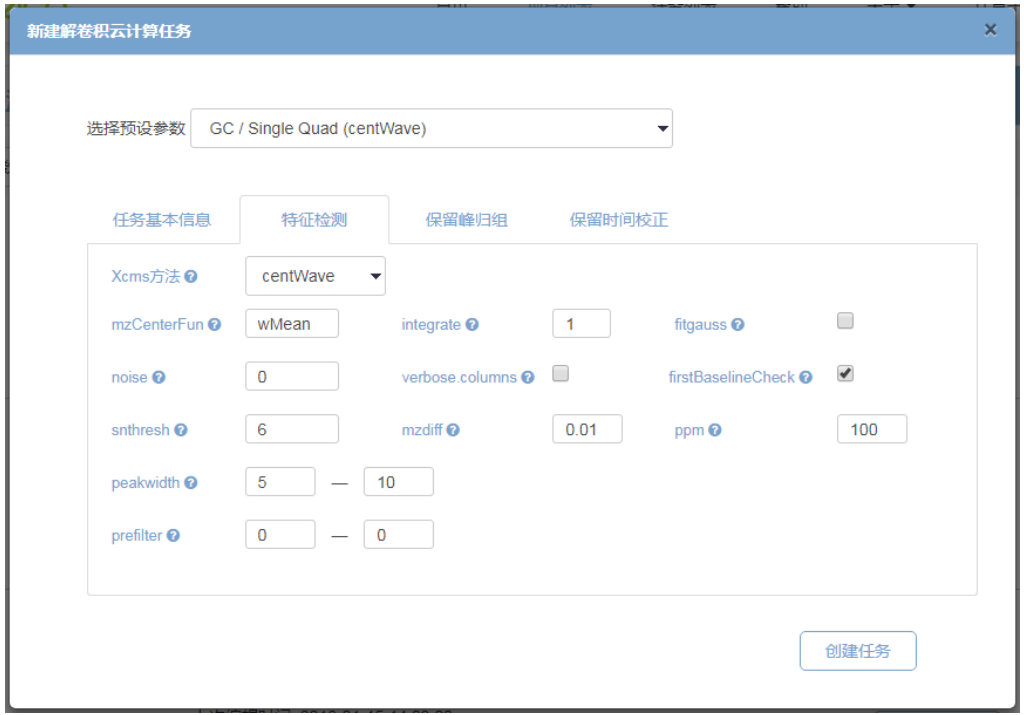
创建任务

- 在实验组别列表之中选中需要进行分析的组别，之后点击创建任务按钮，即可开始新建一个分析任务

上传数据

设定解卷积参数

- 点击创建任务之后下一步会需要设定解卷积参数，一般直接使用默认参数即可，也可以针对自己的实验自行调整最佳参数



查看结果

- 任务执行成功之后，可以点击任务标题的链接在线查看结果数据，也可以点击下载结果链接下载结果至本地查看

操作步骤-小分子代谢物鉴定

上传数据

- 选择数据
- 选择标准品数据库

创建任务

- 创建任务

结果

- 查看结果

详情参考：http://help.biodeep.cn/

上传数据

- http://msms.biodeep.cn/new_task.php?app=new_task

上传数据

- 选择样本数据
- 为了进行小分子化合物鉴定，首先会需要在MetaDeco之中上传实验的原始数据
- 在这里目前只能够进行LCMS项目的注释
- 也可以切换到右边创建新的
- MetaDeco项目上传原始数据

上传数据

- 选择peaktable
- 如果目标分析项目已经在MetaDeco之中成功的进行了解卷积任务，那么可以在第三步选择peaktable做全注释
- 也可以上传自己的peaktable，进行选择性的物质注释，例如进行差异代谢物注释鉴定

创建任务

- 样本极性设置
- 会需要在第四步中为样本分组进行设置，告诉鉴定程序每一个样本的极性模式以及加和物的类型。
- 在这一步也可以不做设置，物质鉴定程序会尝试自动识别极性模式。但是对于一些原始数据文件可能会出现自动识别失败的问题
- 用鼠标拖拽分组到对应的极性模式
- 之中即可

创建任务

- 选择标准品库
- 可以使用自己所构建的标准品库以及其他用户共享出来的标准品库进行物质鉴定操作。
- 如果使用共享标准品库，除了免费的MoNA数据库之外，其他的共享标准品库的使用可能会产生
- 相应的费用

创建任务

- 创建任务
- 完成注释任务的参数设置之后可以点击最下方的按钮创建注释任务
- 可以点击任务标题的链接进行结果的查看

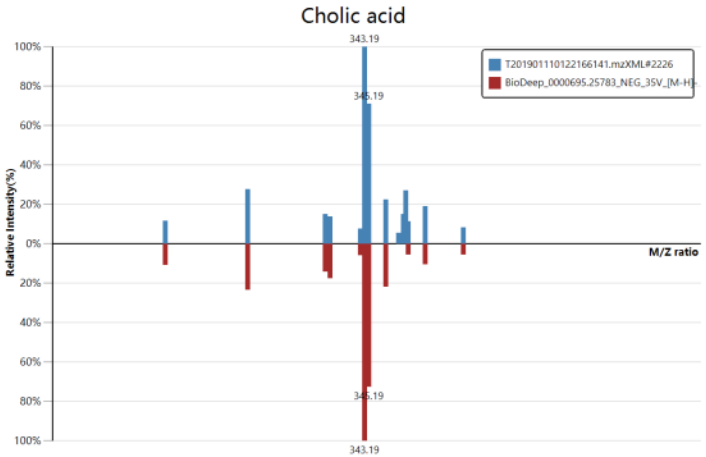
结果

- 查看注释结果
- 在结果表格之中，可以查看鉴定结果小分子化合物的基本属性，BioDeep数据库编号和鉴定的结果判定依据

#编号	BioDeep编号	分子质量	分子式	母离子	质谱图编号	标准品库	加合物	准确度	算法名称	得分
	BioDeep_0000158	192.027	C6H8O7	**191.019@168**	BioDeep_0000158.21537_NEG_35V_[M-H]-	MoNA.rda	[M-H]-	**MSMScomfirmed**	SSM	SSM: 1/1 HITS+: 2/2 PPM: 7
	BioDeep_0005598	193.0739	C10H11NO3	**192.066@433**	BioDeep_0005598.49242_NEG_20V_[M-H]-	MoNA.rda	[M-H]-	**MSMScomfirmed**	SSM	SSM: 1/1 HITS+: 1/1 PPM: 1
	BioDeep_0032745	195.053159	C9H9NO4	194.043@461	BioDeep_0032745.40338_NEG_35V_[M	MoNA.rda	[M-H]-	**MSMScomfirmed**	SSM	SSM: 0.94/1 HITS+: 1/1 PPM: 14

点击链接将会进行BioDeep数据库查询

点击行数据将会显示详细的二级质谱图比对结果



鉴定结果依据

#编号	BioDeep编号	分子质量	分子式	母离子	质谱图编号	标准品库	加合物	准确度	算法名称	得分
	BioDeep_0000158	192.027	C6H8O7	**191.019@168**	BioDeep_0000158.21537_NEG_35V_[M-H]-	MoNA.rda	[M-H]-	**MSMScomfirmed**	SSM	SSM: 1/1 HITS+: 2/2 PPM: 7
	BioDeep_0005598	193.0739	C10H11NO3	**192.066@433**	BioDeep_0005598.49242_NEG_20V_[M-H]-	MoNA.rda	[M-H]-	**MSMScomfirmed**	SSM	SSM: 1/1 HITS+: 1/1 PPM: 1
	BioDeep_0032745	195.053159	C9H9NO4	194.043@461	BioDeep_0032745.40338_NEG_35V_[M	MoNA.rda	[M-H]-	**MSMScomfirmed**	SSM	SSM: 0.94/1 HITS+: 1/1 PPM: 14

操作步骤

上传数据
- 新建项目
- 上传数据

数据分析
- 数据预处理

查看结果
- 在线查看
- 结果下载

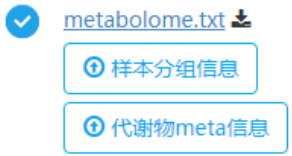
详情参考：http://help.biodeep.cn/

上传数据

- 1. 新增分析项目
- 点击新增按钮，
- 在弹出框之中填写相应信息
- 之后保存，完成项目的创建

上传数据

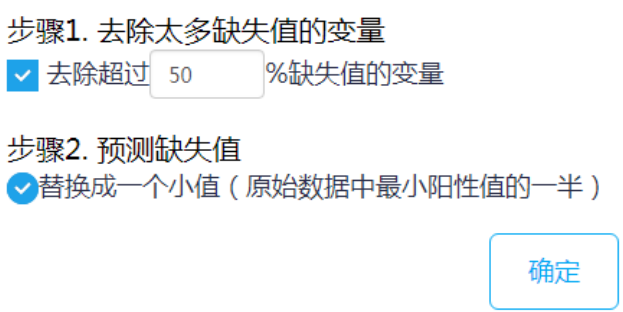
- 上传计算数据
- 依次点击分析文件，新增按钮，可以打开分析用的数据文件的上传窗口
- 之后还会需要依次上传样本的分组信息和代谢物注释结果信息（可选）



数据格式参考：http://help.biodeep.cn/#metadiscovery/1.7dataformat.md

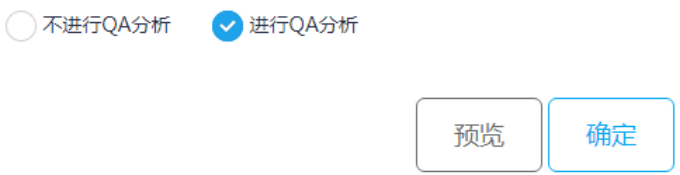
数据分析

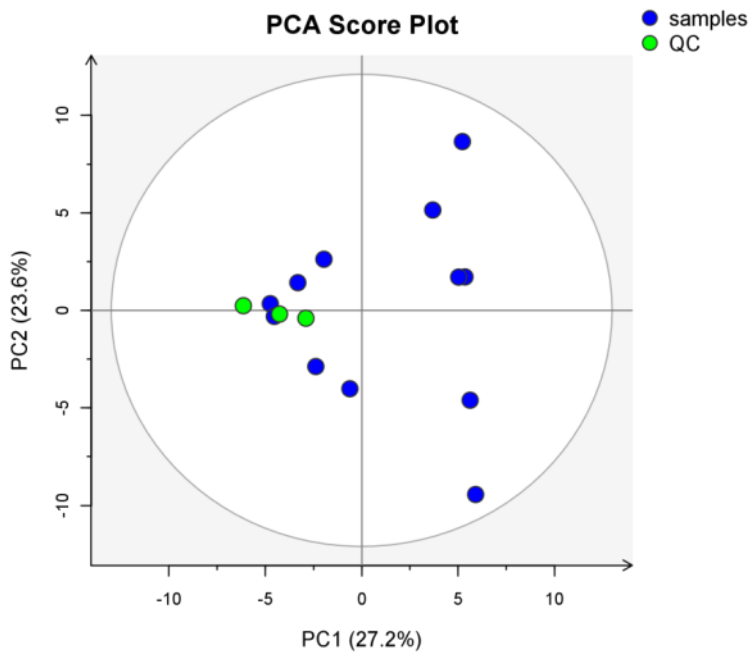
- 数据预处理
- 所上传的计算数据需要进行预处理才能够得到比较好的分析结果，在BioDeep之中需要首先完成预处理才能够进入后续的统计分析。
- 一般情况下，预处理阶段直接使用系统的默认值即可。



数据分析

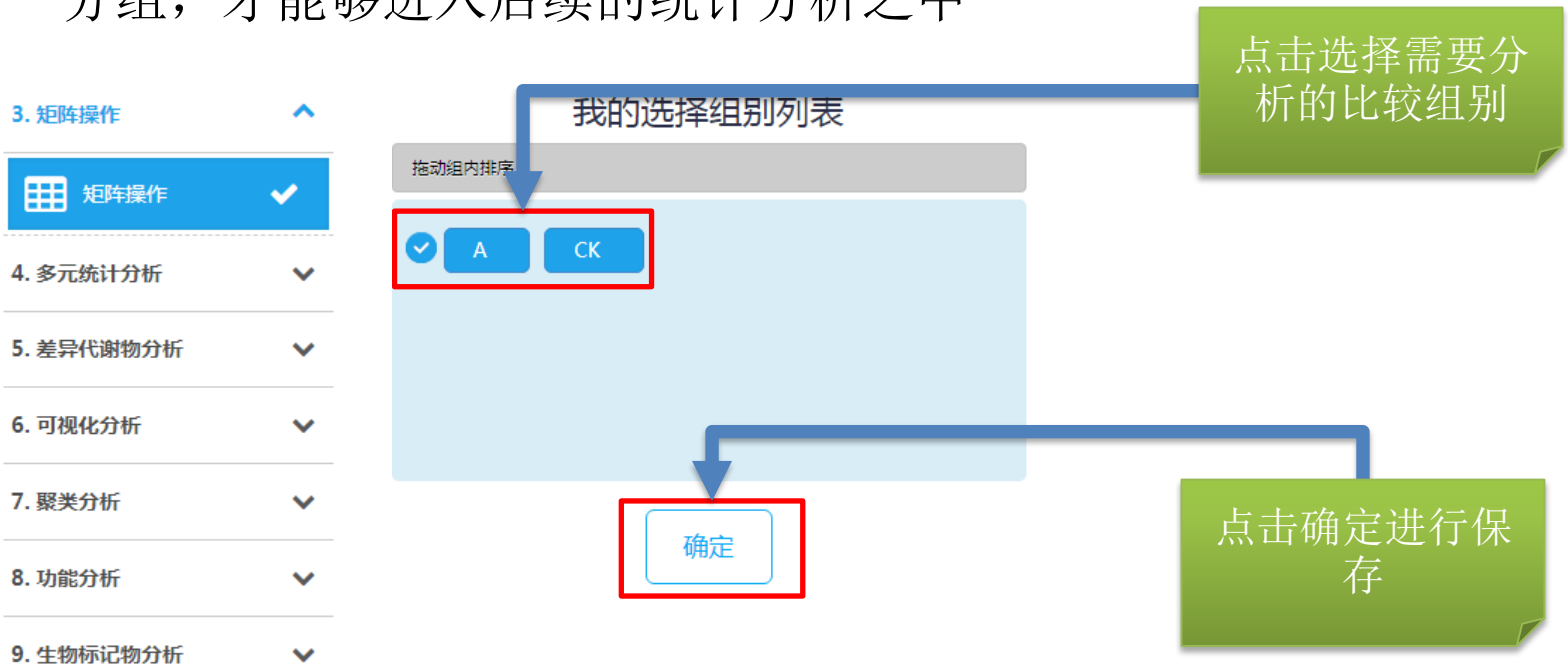
- 质控分析
- 质控分析可以查看仪器是否稳定





数据分析

- 在后续的数据分析之中，大部分的项目都是实验组之间的比较统计分析操作，完成了数据的预处理之后，会首先需要选择需要进行分析的分组，才能够进入后续的统计分析之中



数据分析

- 多元统计分析
- 多元统计分析中PCA，PLS-DA，OPLS-DA分析都需要首先进行自动拟合，然后就可以切换标签页进行结果图以及表格的下载操作

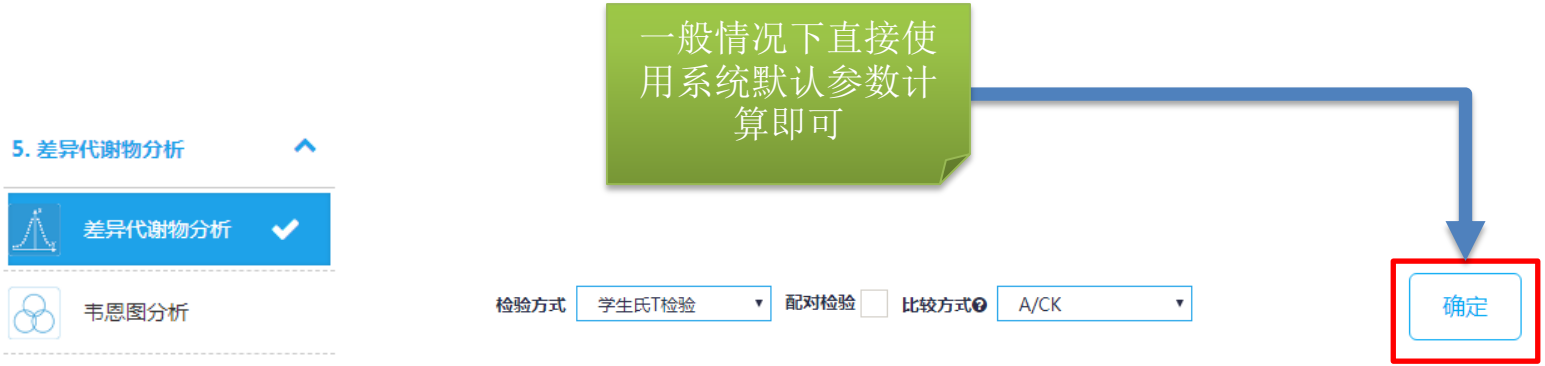
切换至结果标签页进行结果下载

点击确定进行保存

设置分析算法参数

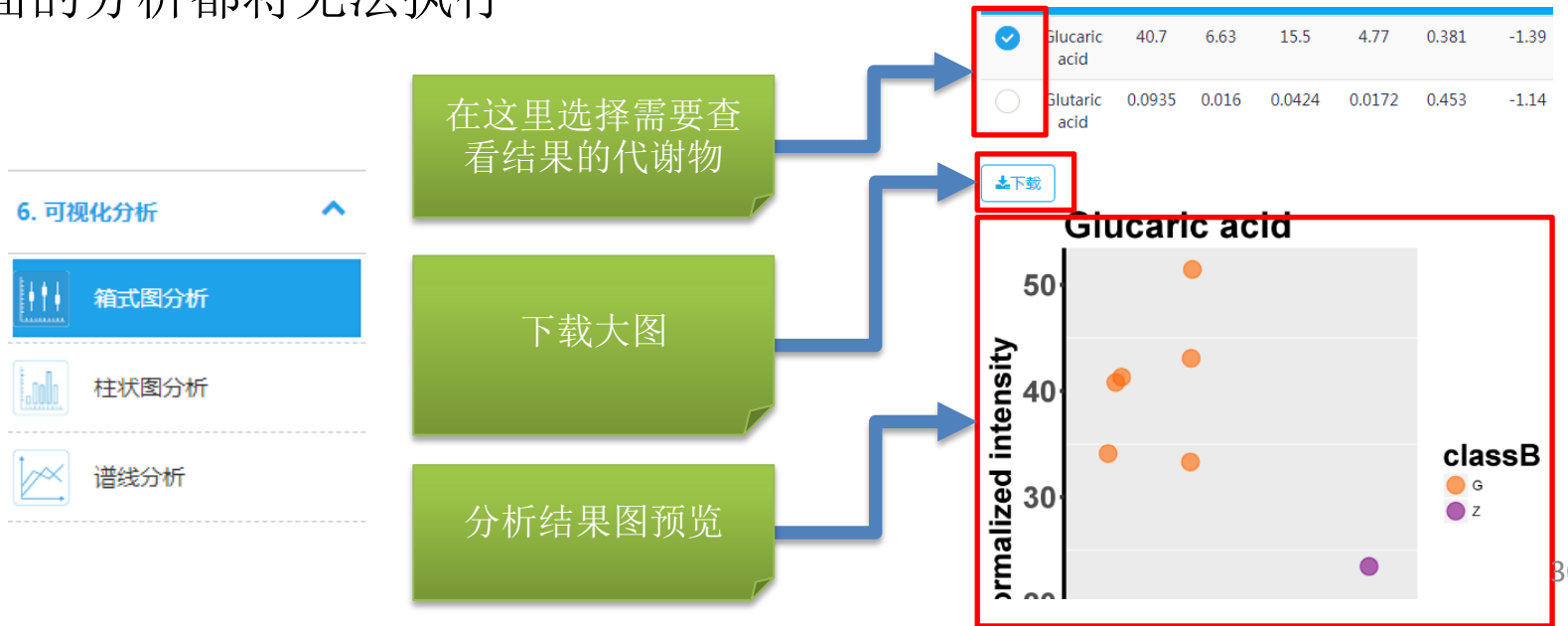
数据分析

- 差异代谢物分析
- 差异代谢物分析包括一个比对组内的差异代谢物计算（火山图）和不同的比对组间的差异代谢物分析（文氏图）。文氏图分析会要求所上传的数据之中至少具有两个比对组别。



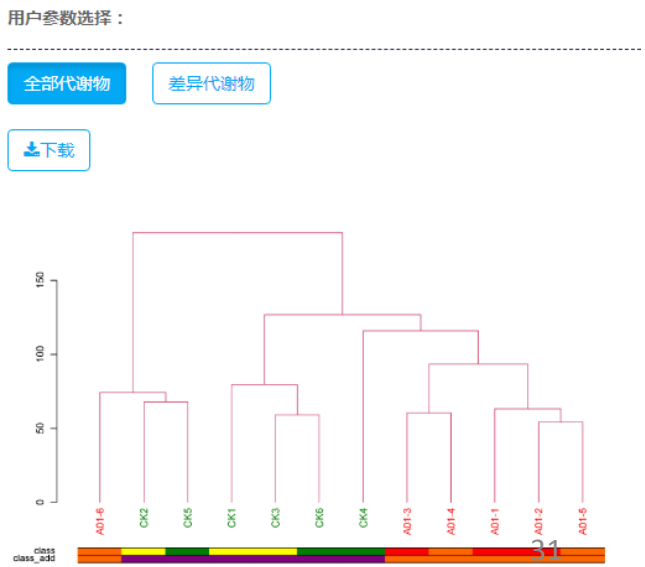
数据分析

- 差异代谢物结果可视化分析
- 进一步的可视化分析是建立在差异代谢物分析结果的基础上的。如果没有在上一步执行差异代谢物分析，或者没有差异代谢物结果，则后面的分析都将无法执行



数据分析

- 聚类分析
- 聚类分析则可以查看了解样本之间以及代谢物之间的关联
- 在这个小节的分析中可以选择分析所有的代谢物还是前面所计算出来的差异代谢物之间的关联



数据分析

- 生物学功能分析
- 生物学功能分析，主要是进行和KEGG代谢通路，以及KEGG代谢反应网络相关的分析操作。（生物学功能分析需要在上传可选的代谢物meta信息文件，如果没有上传，将无法进行这部分的分析操作。）

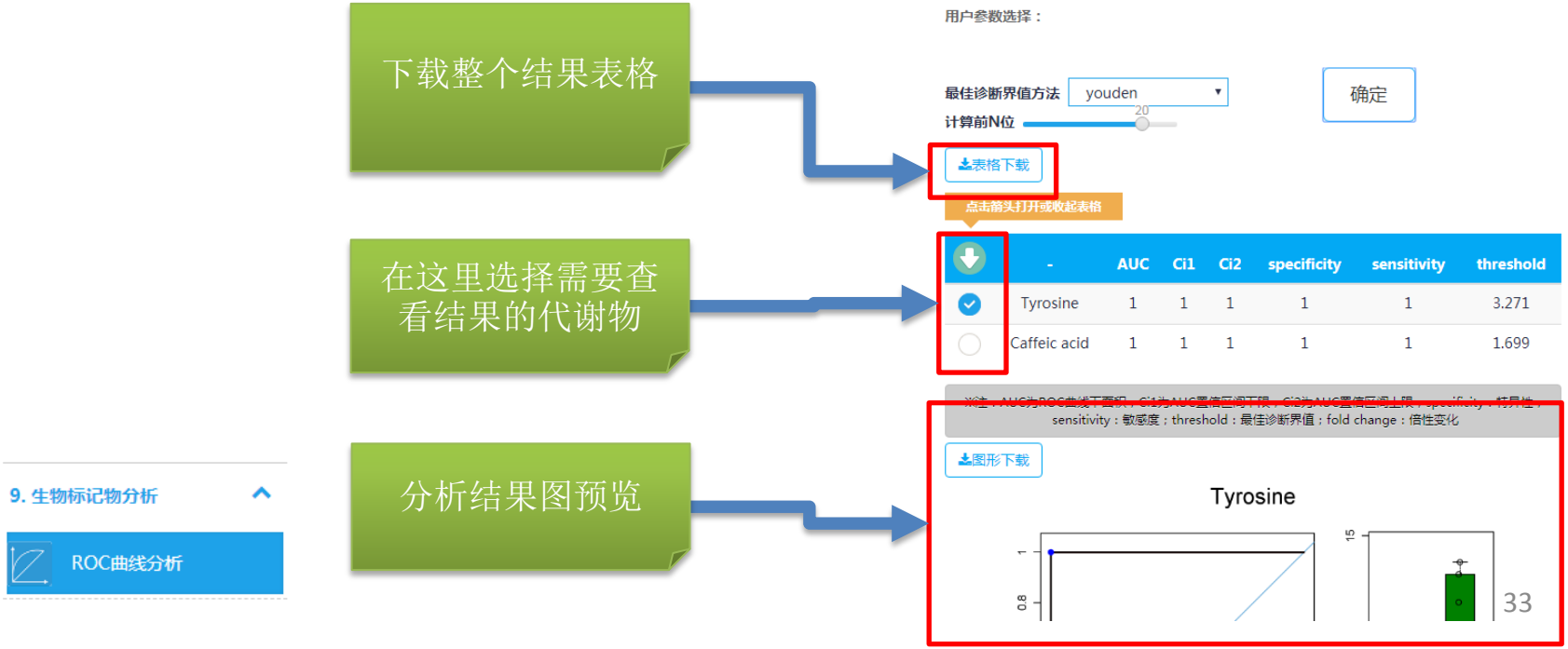
数据分析

- 生物标记物分析
- 计算能够特异性的指示某种生物性状变化的代谢物。

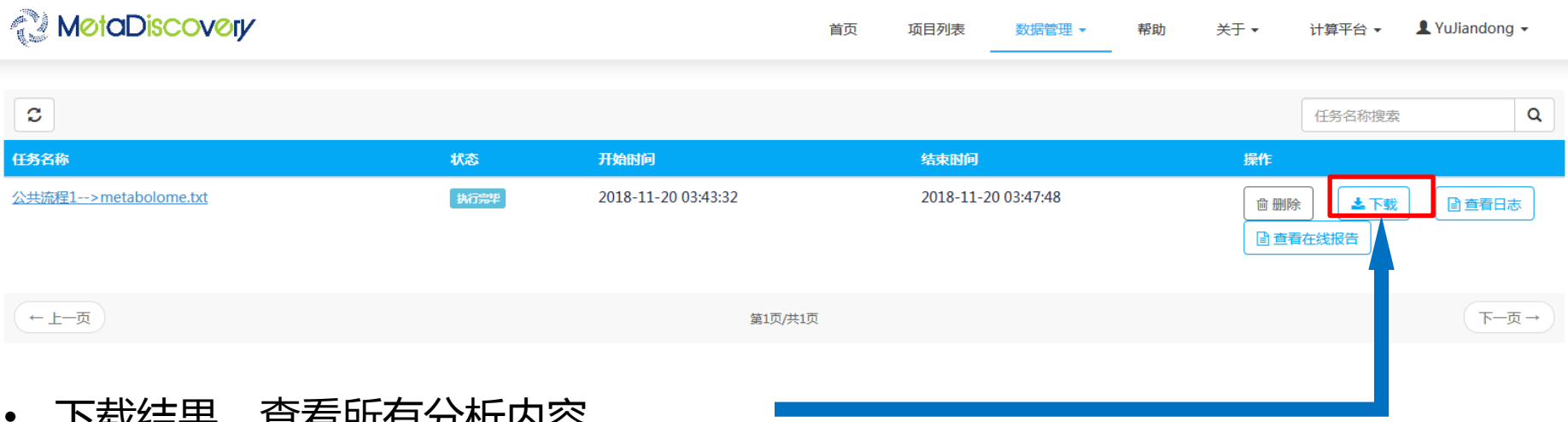
下载整个结果表格

在这里选择需要查看结果的代谢物

分析结果图预览



数据分析



- 下载结果，查看所有分析内容

Copyright © 2015-2019 苏州帕诺米克生物医药科技有限公司 | 苏ICP备15063286号-3

操作步骤-构建个人标准品库

- 创建标准品库项目

- 上传标准品库原始数据文件
- 上传对应的注释信息
- 编辑构建任务参数

- 标准品库自动化构建成功

详情参考：http://help.biodeep.cn/

- 标准品库操作
- 可以点击标准品库的标题进入标准品库的详细信息查看页面，在这里你可以进行：
- 1. 编译标准品库：从原始数据自动化构建标准品库
- 2. 删除标准品库
- 3. 查看标准品库原始文件列表
- 4. 查看标准品库详细内容
- 5. 设置标准品库属性信息

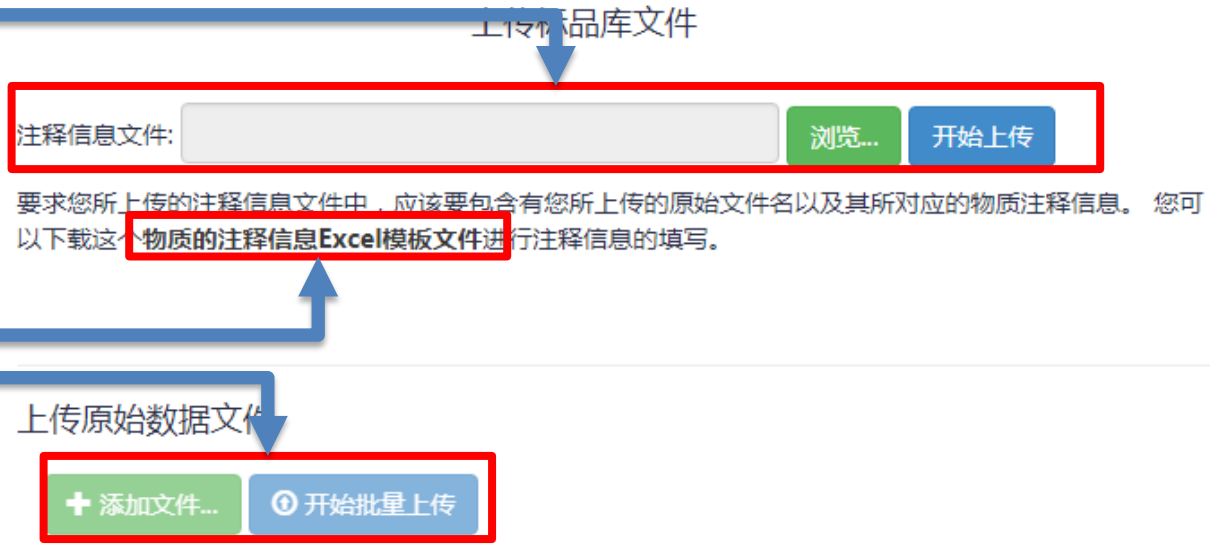
- 上传标准品库原始数据文件

- 上传标准品库原始数据文件
- 需要上传两部分的数据文件用来进行自动化构建标准品库
- 1. 注释信息文件：用来指明该物质是什么
- 2. 原始数据文件：用来指明该物质的具体的二级质谱碎片结构

上传注释信息文件

下载注释信息模板

上传原始数据文件



- 当所有填写的信息都检查通过之后，就可以开始上传标准品的原始数据文件了。
- 上传完成后，可以点击最下方的查看标准品库进行进一步的编辑操作。

上传原始数据文件

添加文件... 开始批量上传

137.37 Mbit/s | 00:00:00 | 100.00 % | 14.51 MB / 14.51 MB

21.mzXML	2.67 MB	取消
37.mzXML	1.61 MB	取消
38.mzXML	2.94 MB	取消
86.mzXML	2.96 MB	取消
87.mzXML	4.34 MB	取消

查看标准品库

上传标品库文件

注释信息文件: metainfo-template.xlsx 浏览... 开始上传

要求您所上传的注释信息文件中，应该要包含有您所上传的原始文件名以及其所对应的物质注释信息。 您可以下载这个**物质的注释信息Excel模板文件**进行注释信息的填写。

原始数据文件名	化合物名称	CAS	ChEBI	HMDB	KEGG	检查结果
21.mzXML	gamma-aminobutyric acid zwitterion	56-12-2	59888	HMDB0000112	C00334	格式检查通过
37.mzXML	glycine	56-40-6	15428	HMDB00123	C00037	格式检查通过
38.mzXML	L-methionine	63-68-3	16643	HMDB00696	C00073	格式检查通过
86.mzXML	thiourea	62-56-6	36946	HMDB34155	C14415	格式检查通过
87.mzXML	diethanolamine	111-42-2	28123	HMDB04437	C06772	格式检查通过

- 确定物质注释信息
- 点击原始文件名链接，将会执行BioDeep标准品数据库查询
- 可能会存在多个相似的注释信息，这个时候会需要点击弹出框的物质名称列的选择框来确定最佳的注释信息
- 最后点保存完成操作

原始文件名	已分配BioDeepID
37.mzXML	BioDeep_0000037
38.mzXML	未分配
21.mzXML	未分配
86.mzXML	未分配
87.mzXML	未分配

匹配标准品注释信息

name:	glycine
BioDeepID:	
CAS:	56-40-6
HMDB:	HMDB00123
KEGG:	C00037
ChEBI:	15428

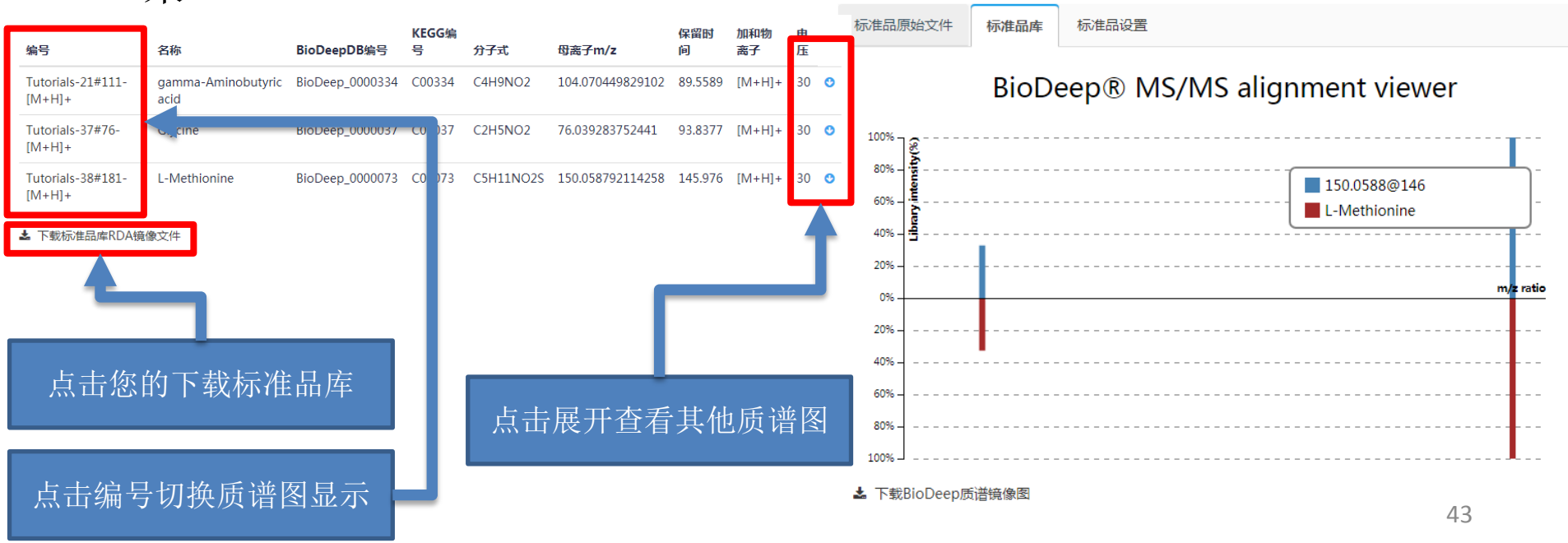
如果您确认您所上传的物质为新物质，并且BioDeep数据库之中没有您的物质的注释信息的话，请点击[保存为新物质]按钮进行保存。

物质名称	分子质量	BioDeep编号	CAS	KEGG	HMDB	ChEBI	匹配度
Glycine(C2H5NO2)	75.032028409	BioDeep_0000037	56-40-6	C00037	HMDB0000123	15428	5

保存为新物质 | 取消 保存

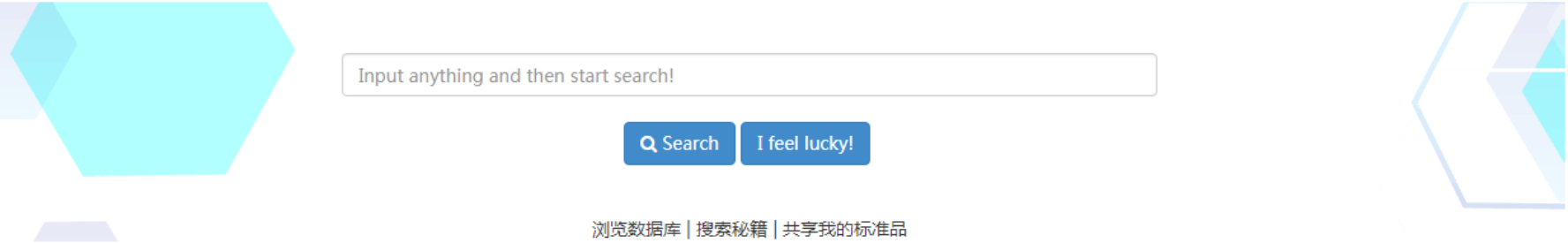
- 自动化构建标准品库
- 点击编译标准品库按钮，将会跳转到下一步设置一些参数信息
- 之后需要填写任务参数，最后点击开始编译执行标准品库的自动化构建操作

- # 查看标准品库
- 完成自动化构建任务之后，可以至标准品库详细信息页面查看构建结果



操作步骤-Biodeep标准品数据库

- http://msms.biodeep.cn/biodeepDB.php?app=index



详情参考：http://help.biodeep.cn/

- 搜索入口介绍

- 搜索帮助可以点击搜索秘籍链接了解详情

点击链接可以打开标准品质谱图查看页面

点击链接可以按照分子质量或者分子式查询

点击链接可以跳转到外部数据库查看详细信息

点击链接可以打开m/z计算器页面

返回 | **Cholic acid**

BioDeep_0000695 (81标准品质谱图谱， 查看所有质谱图)

▶ Synonym:

MF: C24H40O5

MW: 408.2876 g/mol (m/z Calculator)

CAS: 81-25-4

InChI: InChI=1S/C24H40O5/c1-13(4-7-21(28)29)16-5-6-17-22-18(12-20(27)24(16,17)3)23(2)9-8-15(25)10-14(23)11-19(22)26/h13-20,22,25-27H,4-12H2,1-3H3,(H,28,29)/t13-,14+,15-,16-,17+,18-,19-,20+,22+,23+,24-/m1/s1

InChIKey: BHQCQFFYRZLCQQ-OELDTZBJSA-N

HMDB: HMDB0000619

chebi: 16359

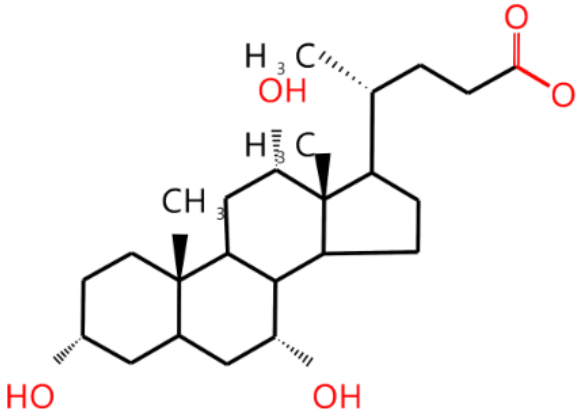
KEGG: C00695

metlin: 206

pubchem: 3963

source: 3

class: Compounds with biological roles/Steroid



帕诺米克
BioNovoGene

WWW.BIODEEP.CN Search

THANK YOU !

苏州工业园区星湖街218号
生物纳米科技园A4楼201~206室

0512-62959105