

# MetaboAnalyst 4.0基本功能

Lily Qtof 2019-06-02

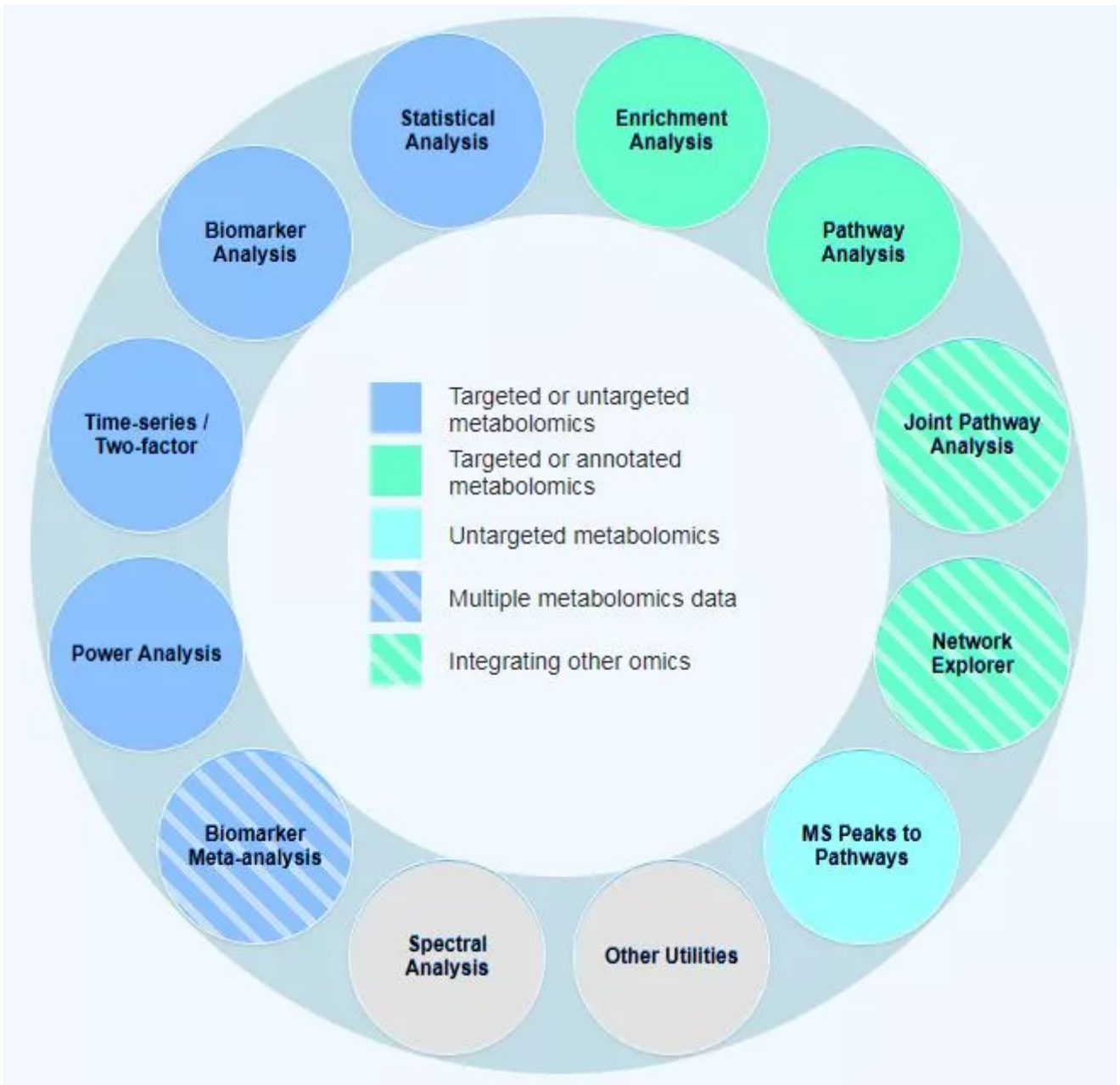
## MetaboAnalyst 4.0



Metaboanalyst是一款操作简单且功能强大的代谢组学数据分析软件，可以进行常规的统计分析，以及代谢通路分析等。

### 基本功能

**MetaboAnalyst - statistical, functional and integrative analysis of metabolomics data.**



## 1. 目标

为高通量代谢组学研究提供一个用户友好的、基于web的分析途径。

MetaboAnalyst的目标是为代谢组学数据处理、标准化、多元统计分析以及数据注释提供多种常用的程序。目前的实施重点是探索性统计分析、功能解释和转化代谢组学研究的高级统计学。

## 2. 数据格式

支持当前代谢组学研究的各种数据类型，包括化合物浓度、NMR/MS波谱箱、NMR/MS峰强度表、NMR/MS峰列表和LC/GC-MS谱图。

## 3. 数据处理

根据上传数据的类型，可以使用不同的数据处理选项。数据的归一化包括常量和归一化、参考样本/特征归一化、特定样本归一化以及Auto/Pareto/range缩放等。

## 4. 统计分析

广泛使用的统计和机器学习方法有：

- 单变量分析：fold change分析，t检验，火山图，单因素方差分析、相关分析；
- 多元变量统计分析：主成分分析(PCA)、偏最小二乘判别分析(PLS-DA)和正交偏最小二乘判别分析(正交PLS-DA)；
- 高维特征选取：微阵列显著性分析(SAM)和贝叶斯分析(EBAM)；
- 聚类分析：树状图、热图、k-means和自组织的神经网络分析(SOM)；
- 有监督的数据分类：随机森林和支持向量机(SVM)。

## 5. 功能富集分析

该模块主要基于几个数据库对人类和哺乳动物提供代谢组学富集分析(MSEA)，数据库中包含约6300组主要从人类研究中收集的具有生物学意义的代谢物。

## 6. 通路分析

该模块目前支持21个模型物种的通路分析（包括通路富集分析和通路拓扑分析）和可视化，这21个模型物种包括：人类、小鼠、大鼠、牛、鸡、斑马鱼、拟南芥、水稻、果蝇、疟疾、出芽酵母、大肠杆菌等，共有1600条代谢通路。

## 7. 时间序列和双因素数据分析

该服务目前支持聚类和可视化(包括交互式3D-PCA可视化和分层聚类的双向热图)、单变量双因素分析的双向方差分析、不同实验条件不同时间剖面的多元贝叶斯时间序列分析(MEBA)、方差同步主成分分析(ASCA)，用于识别与各个实验因素(及其相互作用)相关的主要模型。

## 8. 生物标志物分析

该模块提供基于ROC曲线的潜在生物标志物性能评价方法。它提供经典的单变量ROC分析，以及更基于PLS-DA、SVM或随机森林的多变量ROC曲线分析。此外，用户还可以手动选择生物标志物或设置保留样本，以进行灵活的评估和验证。

## 9. 样本量大小和功率分析

用户可以上传来自试点研究或类似研究的数据集，以计算在一定置信度内检测效果所需的最小样本数量，并估计当前研究设计的功率。

## 10. 联合途径分析

该服务允许用户在代谢途径中同时分析感兴趣的基因和代谢产物。目前仅支持来自人类、小鼠和大鼠的数据。

## 11. MS峰到通路

基于成熟的mummichog和GSEA算法，用户可以上传LC-MS 色谱峰数据进行代谢通路富集分析和可视化探索。它目前支持21种生物，包括人类、小鼠、斑马鱼、秀丽隐杆线虫以及一些其他物种。

## 12. 网络浏览器

用户可以上传一个或两个代谢物列表,基因列表,或KEGG直系同源物(即从宏基因组生成),然后在分子生物网络中可视化探索这些感兴趣的化合物，如KEGG全球代谢网络,以及基于已知的基因、代谢物和疾病之间的关系所建立的网络。

## 13. 生物标志物的meta分析

用户可以上传在相似条件下获得的多个代谢组学数据集，从而在多个研究中识别出可靠的Biomarker。它目前支持基于合并P值、计数和直接合并的meta分析方法。用户可以在交互式Venn图中直观地分析meta分析结果。

## 14. 图像生成

重要的图像可以生成高分辨率格式的图片，如.png、.tiff、.ps等，可用于论文的发表。

## 15. 生成报告

完成后，将生成一个全面的PDF报告，记录执行的每个步骤以及相应的表格和图形结果。处理后的数据和图像也可以下载。

人生中只有没做过的事会让我们遗憾。♥

