



HAL
open science

Preliminary results of a MetaboHUB 2.0 inter-laboratory test on 1D 1H NMR metabolite quantification of a synthetic urine.

Catherine Deborde, Patrick Giraudeau, Edern Cahoreau, Gregory da Costa,
Roselyne Gautier, Daniel Jacob, Cyril Jousse, Melia Lacaze, Inès Le Mao,
Estelle Martineau, et al.

► **To cite this version:**

Catherine Deborde, Patrick Giraudeau, Edern Cahoreau, Gregory da Costa, Roselyne Gautier, et al.. Preliminary results of a MetaboHUB 2.0 inter-laboratory test on 1D 1H NMR metabolite quantification of a synthetic urine.. *Analytics* 2022, Sep 2022, Nantes, France. hal-03728300

HAL Id: hal-03728300

<https://hal.inrae.fr/hal-03728300v1>

Submitted on 20 Jul 2022

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.

Votre résumé a bien été enregistré

Vous allez recevoir un accusé de réception pour votre soumission.

Si vous ne recevez aucun message, veuillez vérifier votre dossier SPAM ou courrier indésirable. Veuillez noter que seules les soumissions complètes entreront dans le processus d'examen et que toutes les ébauches incomplètes seront supprimées du système.

TITRE

Preliminary results of a MetaboHUB 2.0 inter-laboratory test on 1D 1H NMR metabolite quantification of a synthetic urine.

TYPE DE PRÉSENTATION

Communication par affiche

Je souhaite participer à la sélection pour une présentation « flash » (3 min) de mon poster
Je souhaite concourir au prix du meilleur poster (3)

(1) Il s'agit de votre âge à la date du 01.01.2022.

(2) Une session « Juniors » de 15 communications orales sera organisée par un comité scientifique composé de huit jeunes collègues des quatre sociétés. Cette session est réservée aux jeunes communicants (30 ans ou moins au 01.01.2022). Participer à cette sélection n'ôte pas la chance à votre résumé d'être retenu pour les autres sessions !

(3) Deux prix, décernés par un jury représentatif des quatre sociétés seront remis le jeudi 8 septembre.

AFFILIATIONS DES AUTEURS



Affiliation n°1 :

Intsitution INRAE, UMRBFP & PF Bordeaux Metabolome - MetaboHUB

Ville Villenave d'Ornon

Pays France

Affiliation n°2 :

Intsitution Nantes Université, CNRS, CEISAM, UMR 6230

Ville Nantes

Pays France

Affiliation n°3 :

Intsitution TBI, Université de Toulouse, CNRS, INRAE, INSA, MetaboHUB-Metatoul, National Infrastructure of Metabolomics & Fluxomics (ANR-11-INBS-0010)

Ville Toulouse

Pays France

Affiliation n°4 :

Intsitution Univ. Bordeaux, INRAE, Bordeaux INP, UR OENO, UMR 1366, Metabolome Bordeaux - MetaboHUB,

Ville Villenave d'Ornon

Pays France

Affiliation n°5 :

Intsitution Toxalim (Research Centre in Food Toxicology), Toulouse University, INRAE UMR 1331, ENVIT, INP-Purpan, UPS, & Metatoul-AXIOM Platform, National Infrastructure for Metabolomics and Fluxomics: MetaboHUB, Toxalim, INRAE

Ville Toulouse

Pays France

Affiliation n°6 :

Intsitution Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand & Université Clermont Auvergne, INRAE, Plateforme d'Exploration du Métabolisme - MetaboHUB

Ville Clermont-Ferrand

Pays France

Affiliation n°7 :

Intsitution CAPACITES SAS

Ville Nantes

Pays France

LISTE DES AUTEURS

Co-auteur n°1

Position auteur 1

Nom DEBORDE

Prénom Catherine

Email

Affiliation(s) 1

Auteur présentateur No

Co-auteur n°2

Position auteur 2

Nom Giraudeau

Prénom Patrick

Email

Affiliation(s) 2



Auteur présentateur No

Co-auteur n°3

Position auteur 3

Nom Cahoreau

Prénom Edern

Email

Affiliation(s) 3

Auteur présentateur No

Co-auteur n°4

Position auteur 4

Nom Da Costa

Prénom Grégory

Email

Affiliation(s) 4

Auteur présentateur No

Co-auteur n°5

Position auteur 5

Nom Gautier

Prénom Roselyne

Email

Affiliation(s) 5

Auteur présentateur No

Co-auteur n°6

Position auteur 6

Nom Jacob

Prénom Daniel

Email

Affiliation(s) 1

Auteur présentateur No

Co-auteur n°7

Position auteur 7

Nom Jousse

Prénom Cyril

Email

Affiliation(s) 6

Auteur présentateur No

Co-auteur n°8



Position auteur 8

Nom Lacaze

Prénom Mélia

Email

Affiliation(s) 5

Auteur présentateur No

Co-auteur n°9

Position auteur 9

Nom Le Mao

Prénom Inès

Email

Affiliation(s) 4

Auteur présentateur No

Co-auteur n°10

Position auteur 10

Nom Martineau

Prénom Estelle

Email

Affiliation(s) 7

Auteur présentateur No

Co-auteur n°11

Position auteur 11

Nom Moing

Prénom Annick

Email

Affiliation(s) 1

Auteur présentateur No

Co-auteur n°12

Position auteur 12

Nom Peyriga

Prénom Lindsay

Email

Affiliation(s) 3

Auteur présentateur No

Co-auteur n°13

Position auteur 13



Nom Richard**Prénom** Tristan**Email****Affiliation(s)** 4**Auteur présentateur** No

Co-auteur n°14

Position auteur 14**Nom** Silvestre**Prénom** Virginie**Email****Affiliation(s)** 2**Auteur présentateur** No

Co-auteur n°15

Position auteur 15**Nom** Traïkia**Prénom** Mounir**Email****Affiliation(s)** 6**Auteur présentateur** No

Co-auteur n°16

Position auteur 16**Nom** Canlet**Prénom** Cécile**Email** cecile.canlet@inrae.fr**Affiliation(s)** 5**Auteur présentateur** Yes

THÉMATIQUES

Sciences Omiques - Métabolomique, lipidomique

Sciences Omiques - Approches ciblées et non ciblées, multiplexées

Sciences Omiques - Approches quantitatives (avec ou sans marquage)

MOTS CLÉS

Mots Clés

NMR, Quantification, Integration, Deconvolution, Inter-laboratory test



RÉSUMÉ

Absolute quantification of individual metabolites in complex biological samples is of high importance in targeted metabolomics. There is a great diversity of practices in the scientific community, both in terms of data acquisition and processing methods for quantitative NMR metabolomics. Within MetaboHUB, the French national infrastructure of metabolomics and fluxomics, an inter-laboratory test was performed in order to evaluate the impact of NMR software or tools, NMR peak integration versus deconvolution approach, operator's level of expertise and know-how on quantitative results of 1D ^1H -NMR measurements of 32 major metabolites frequently observed in urine. For this purpose, a synthetic urine was prepared and used to compare the approach used by the different MetaboHUB NMR platforms to (i) process the same set of ^1H -NMR spectra and quantify metabolites using commercial or in-house NMR software or tools, and (ii) share know-how between sites.

One site was in charge of the preparation, NMR acquisition and distribution of the urine spectra and of five calibration range solution spectra for quantification. The synthetic urine was prepared from a "blank" stock solution supplemented with a known amount of 32 commercial compound solutions prepared by gravimetric method. The five calibration range solutions contained 32 compounds with concentration ranging from 0.1 to 12 mM. All samples were adjusted to pH 7.4 +/- 0.02 with NaOD or 1 M DCl. and supplemented with TSP (258 μM) for chemical shift calibration and possible internal quantification. The 600 MHz dataset was acquired and pre-processed (Fourier transform, phase and global baseline correction) with TopSpin v4.0.7 (Bruker BioSpin, DE) at one site by one operator and sent to the other MetaboHUB sites. Each operator was asked to quantify the metabolites using the TopSpin integration module and internal (TSP) or external calibration factors established with the calibration range solutions, and also using their favorite in-house tool or open-access or commercial NMR software.

Twenty metabolites plus the sums of creatine/creatinine or lactic acid/threonine were successfully quantified by all quantification strategies. Creatine and creatinine could not be quantified individually, because of a complex equilibrium between these two compounds, but their sum was quantified. Some metabolites were not quantifiable by all methods, commercial or in-house softwares or tools. For internal calibration with TSP, only about 50% of the metabolites were quantified with an accuracy below 5%. With the TopSpin integration module and external calibration, about 90% of the metabolites and metabolite sums were quantified with an accuracy below 5%. NMRProcFlow integration module (nmrprocflow.org, F) and external calibration allowed quantifying a few additional metabolites. The quantification accuracy improved for certain metabolites with deconvolution either with Mnova (Mestrelab Research, ES), or using a MetaboHUB in-house tool and external calibration (all 20 individual metabolites quantified with an accuracy below 5%). In this poster, we present and discuss the results obtained by the different operators, software and quantification approaches. The results highlight the relevance of inter-laboratory tests to better rationalize the choice of quantification tools in targeted NMR metabolomics.

Acknowledgements: MetaboHUB (ANR-11-INBS-0010). Corsaire Metabolomics core facility Biogenouest. ERC grant 814747/SUMMIT.

[Imprimer](#)[Retour Tableau de Bord](#)

INSCRIPTIONS

 **INSIGHT OUTSIDE**
26 avenue Jean Kuntzmann
38 330 Montbonnot
Tel : +33 825 595 525 (0,15€/min*)
Fax : +33 4 38 38 18 19
 *Permanence téléphonique du*
lundi au vendredi
de 9h00 à 12h00 et de 14h00 à 17h00



organisation@analytics2022.fr
(mailto:organisation@analytics2022.fr)
<http://www.insight-outside.fr> (<http://www.insight-outside.fr>)

ORGANISATION SCIENTIFIQUE

 Bruno Le Bizec
Patrick Giraudeau
Hélène Rogniaux
David Ropartz
cox@analytics2022.fr (mailto:cox@analytics2022.fr)
 INRAE, ONIRIS, CNRS, Université de Nantes
44000 Nantes



** prix depuis ligne fixe opérateur historique, une surtaxe peut être appliquée selon les opérateurs, décompte à la seconde au delà des 45 premières secondes.*

© Photos: La Cité des Congrès Nantes, ©Gaël Arnaud, ©FrancisGuillard, ©StudioGarnier, ©Mmeniane, ©Martin Argyroglo, LVAN

Conformément à la loi Informatique et Libertés, vous disposez d'un droit d'accès et de rectification aux données personnelles vous concernant en vous adressant à INSIGHT OUTSIDE 26 avenue Jean Kuntzmann – 38 330 Montbonnot. Conformément à la loi pour la Confiance dans l'Economie numérique du 21 juin 2004, vous pouvez également vous opposer à l'utilisation de vos coordonnées, en envoyant un simple courrier à l'adresse ci-dessus.

© 2005 - 2022 Insight Outside (<http://www.insight-outside.fr>)

