



HAL
open science

MetaSaurus: towards FAIR metabolomics analyses

Olivier Filangi, Marie Lefebvre

► **To cite this version:**

Olivier Filangi, Marie Lefebvre. MetaSaurus: towards FAIR metabolomics analyses. Séminaire semantic linked data, Oct 2023, Cap Agde, France. hal-04613582

HAL Id: hal-04613582

<https://hal.inrae.fr/hal-04613582v1>

Submitted on 16 Jun 2024

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial 4.0 International License

INRAE

➤ **MetaSaurus : towards FAIR metabolomics analyses**

Présentation : **Olivier Filangi, Marie Lefebvre**

Membres du projet : Olivier Filangi, Sophie Aubin, Magalie Weber, Marie Lefebvre, Nils Paulhe, David Benaben et Franck Giacomoni

Séminaire semantic linked data - 11 octobre 2023 – Cap d'Agde

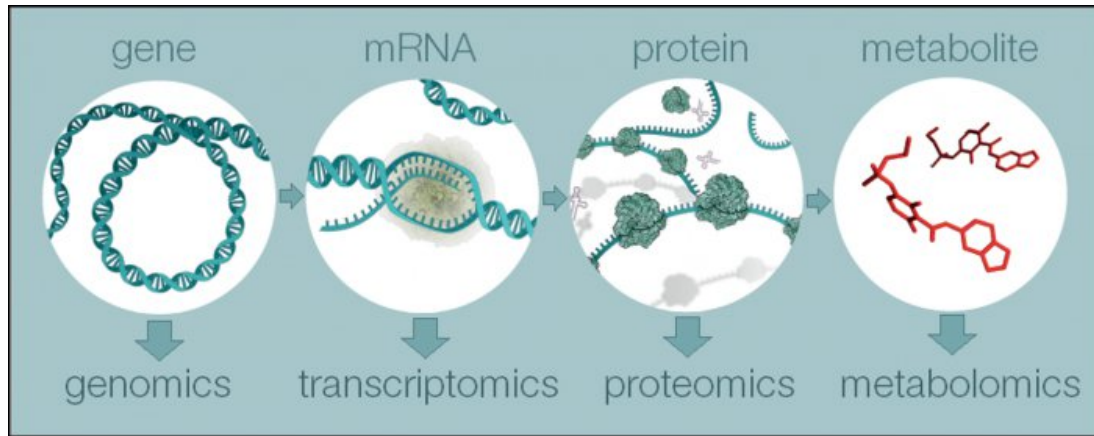


DipSO

eMPrEInTE

DOMAINE D'APPLICATION

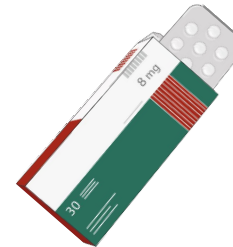
La metabolomique



Agriculture / Environnement



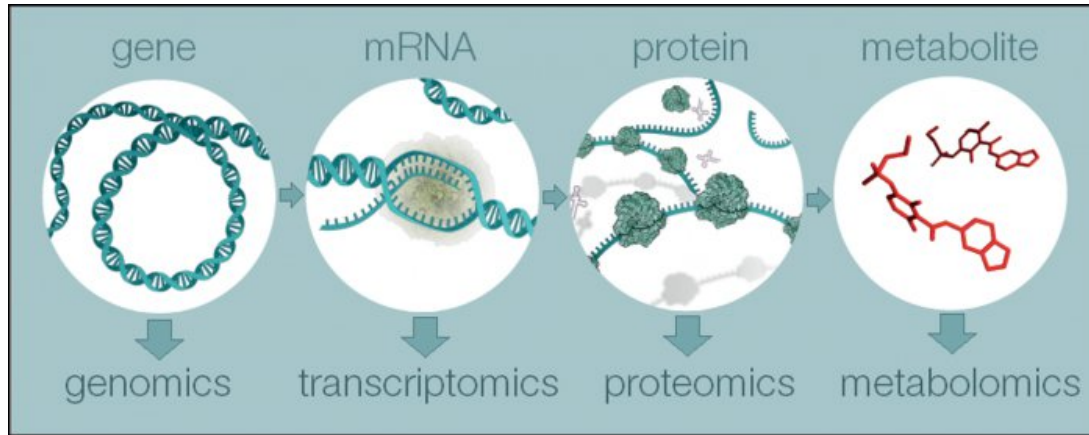
Biotechnologie



Médecine personnalisée

DOMAINE D'APPLICATION

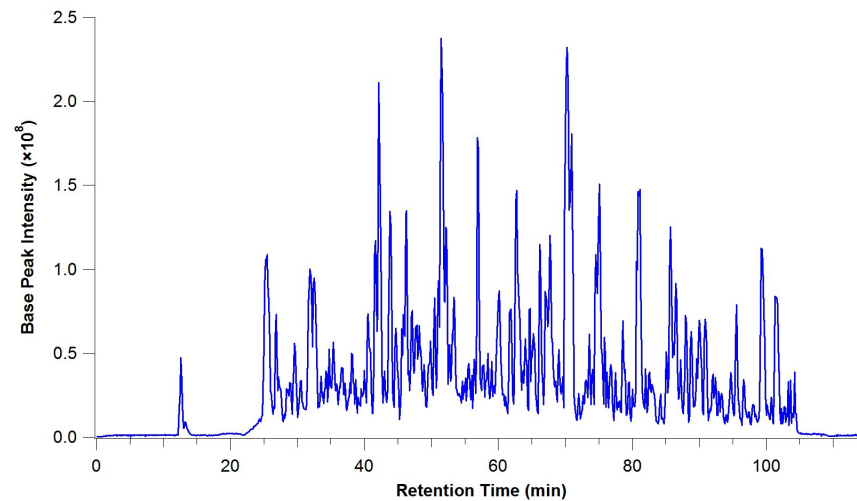
La metabolomique



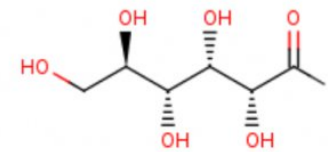
TIMS TOF Pro LC-MS/MS System



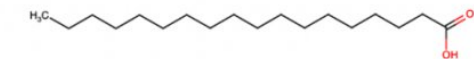
Bruker AvanceCore solution



exploration des petites molécules



glucose
(a sugar)



stearic acid
(a fatty acid)



INRAE

MetaSaurus

2023 / Séminaire Semantic Linked Data / Olivier Filangi et Marie Lefebvre

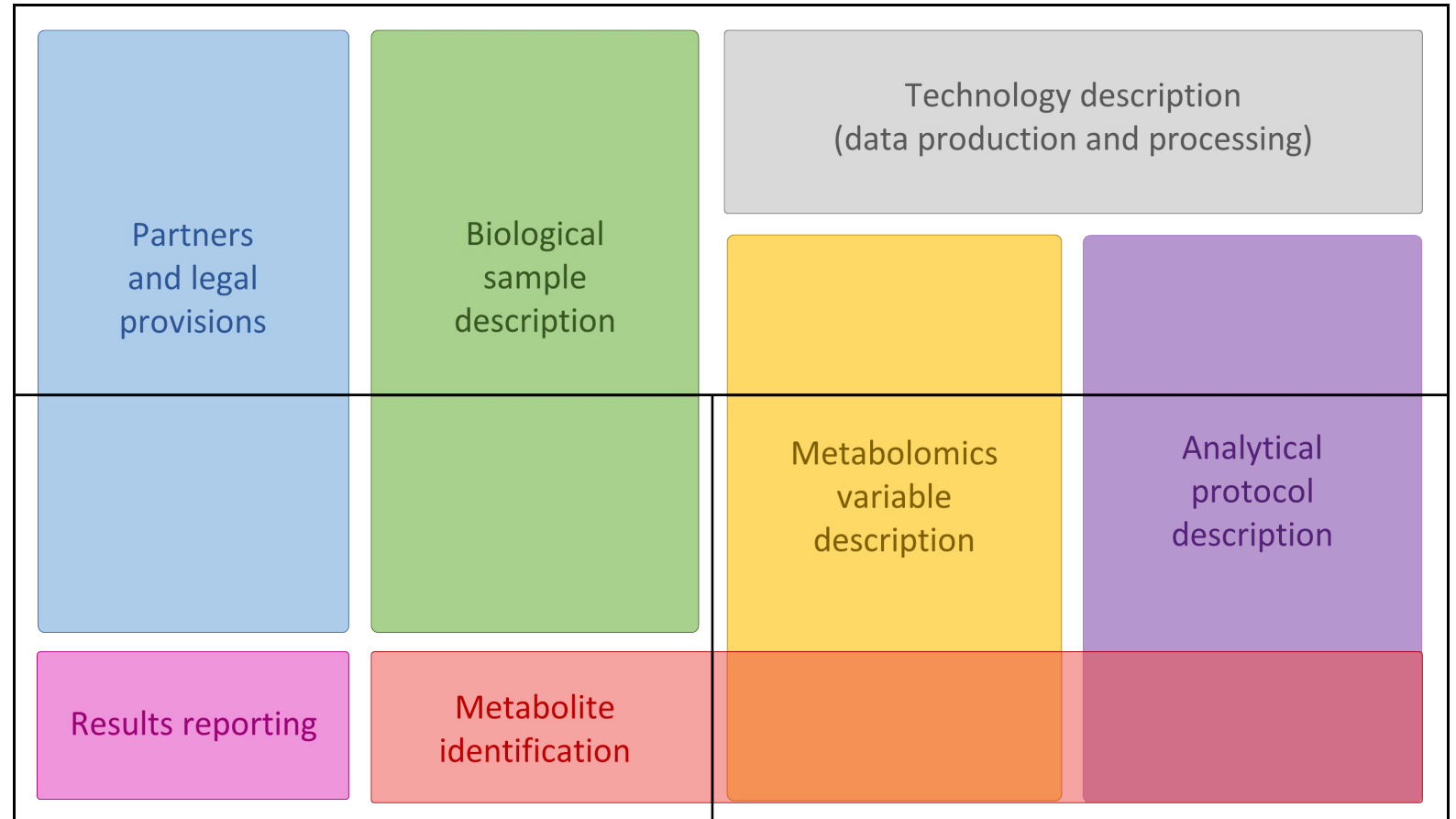
POTENTIEL DE RÉUTILISATION

When taking charge of the project



- Infrastructure nationale de métabolomique et fluxomique créée en 2013
- Infrastructure distribuée en France sur 6 nœuds
- Analyses à grande échelle et répartie sur le territoire

A project-scale map of metadata to improve future data management M.Petera et al.
<https://hal.inrae.fr/hal-03776494/document>



Post-analysis

During the analysis



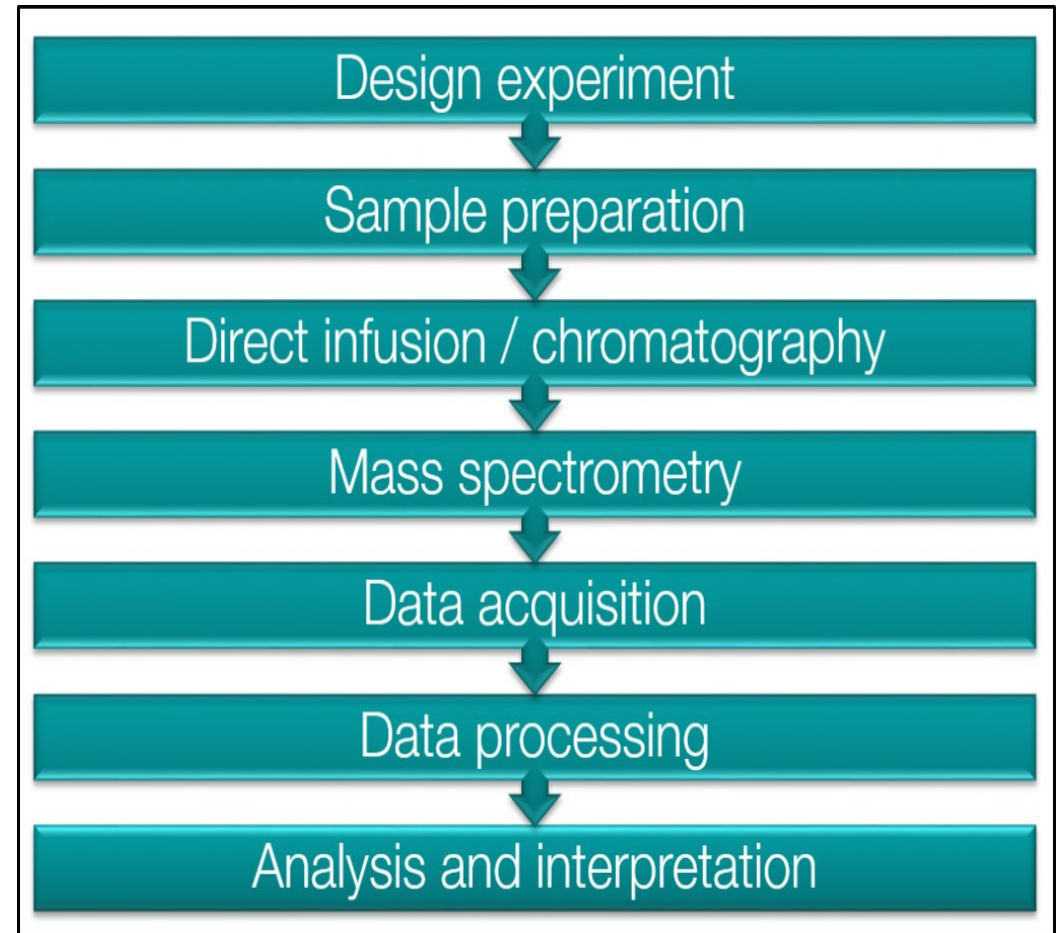
INRAE

MetaSaurus

2023 / Séminaire Semantic Linked Data / Olivier Filangi et Marie Lefebvre

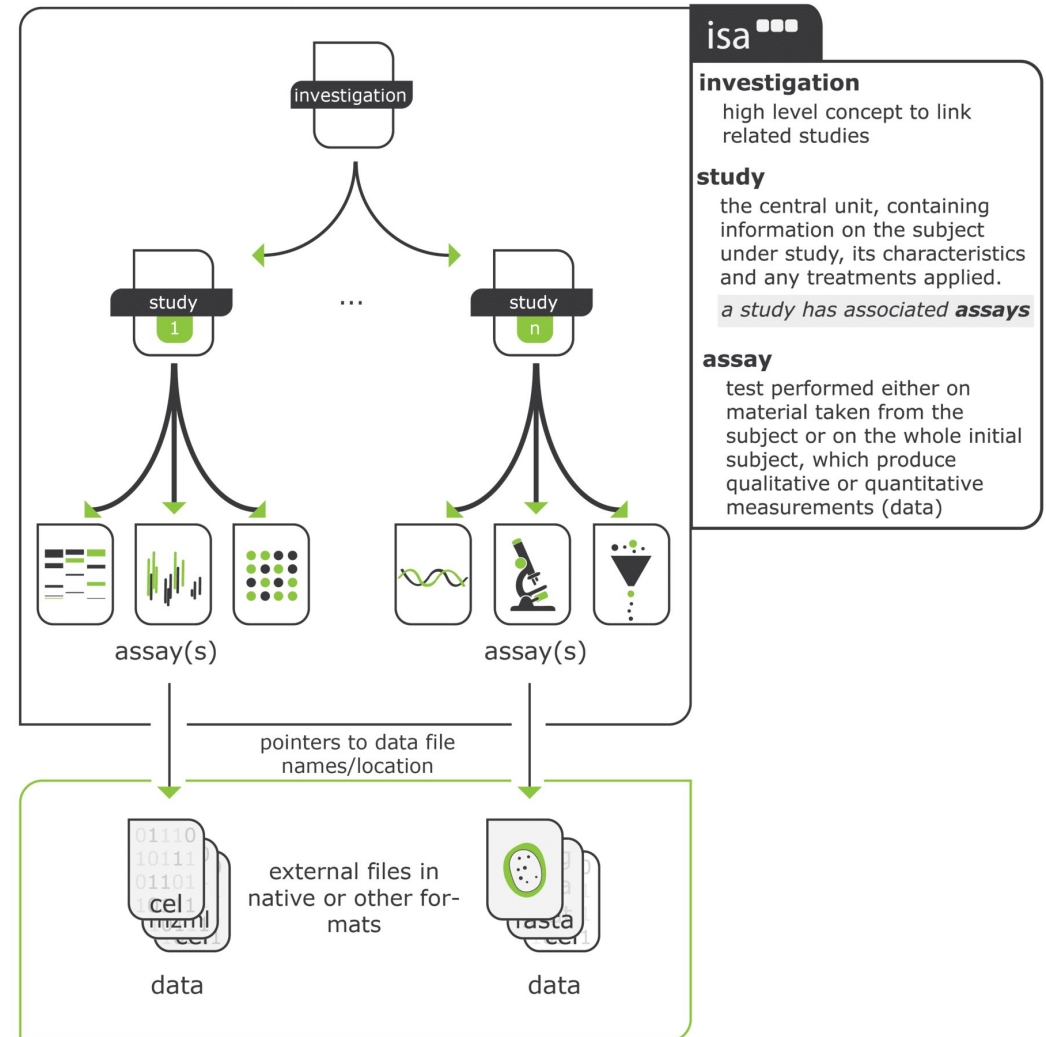
DESCRIPTION GÉNÉRALE

Metasaurus : modèle de connaissance (ontologie) adapté aux études métabolomiques qui s'appuie sur des ontologies, thésaurus et vocabulaires contrôlés publiés ;



MÉTHODOLOGIE DE CONSTRUCTION (1/3)

- Réseaux d'ingénierie INRAE DipSO / Ing. Connaissance / Ing. du domaine d'application
- On s'appuie sur le modèle européen développé par l'EBI : **ISA Model** (2008) / **LinkedISA** (2013) ainsi que les modèles définis par l'OBO foundry
- Mapping des données à notre disposition avec les vocabulaires existants en utilisant les outils à notre disposition (*OLS, Agroportal*)



<https://isa-tools.org/format/specification.html>

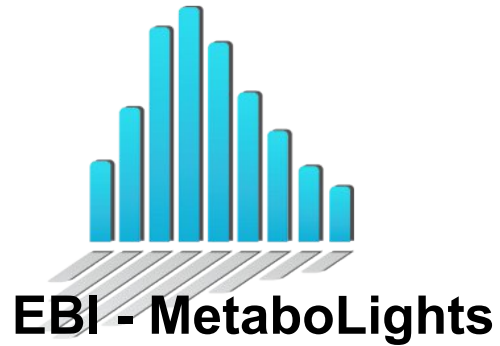


INRAE

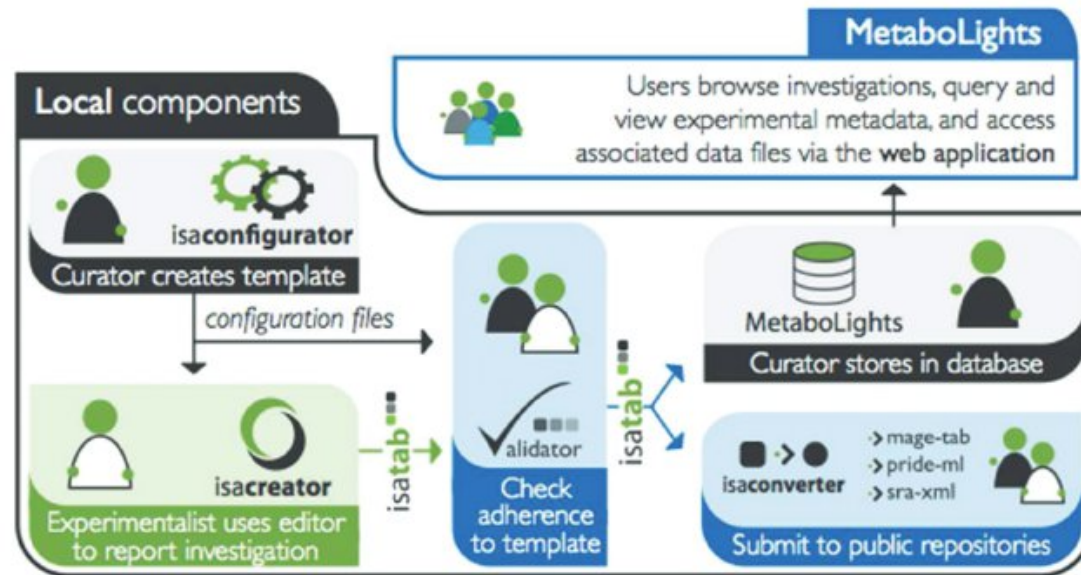
MetaSaurus

2023 / Séminaire Semantic Linked Data / Olivier Filangi et Marie Lefebvre

MÉTHODOLOGIE DE CONSTRUCTION (2/3)



MetaboLights is a database for Metabolomics experiments and derived information. The database is cross-species, cross-technique and covers metabolite structures and their reference spectra as well as their biological roles, locations and concentrations, and experimental data from metabolic experiments.



<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:10130089>



INRAE

MetaSaurus

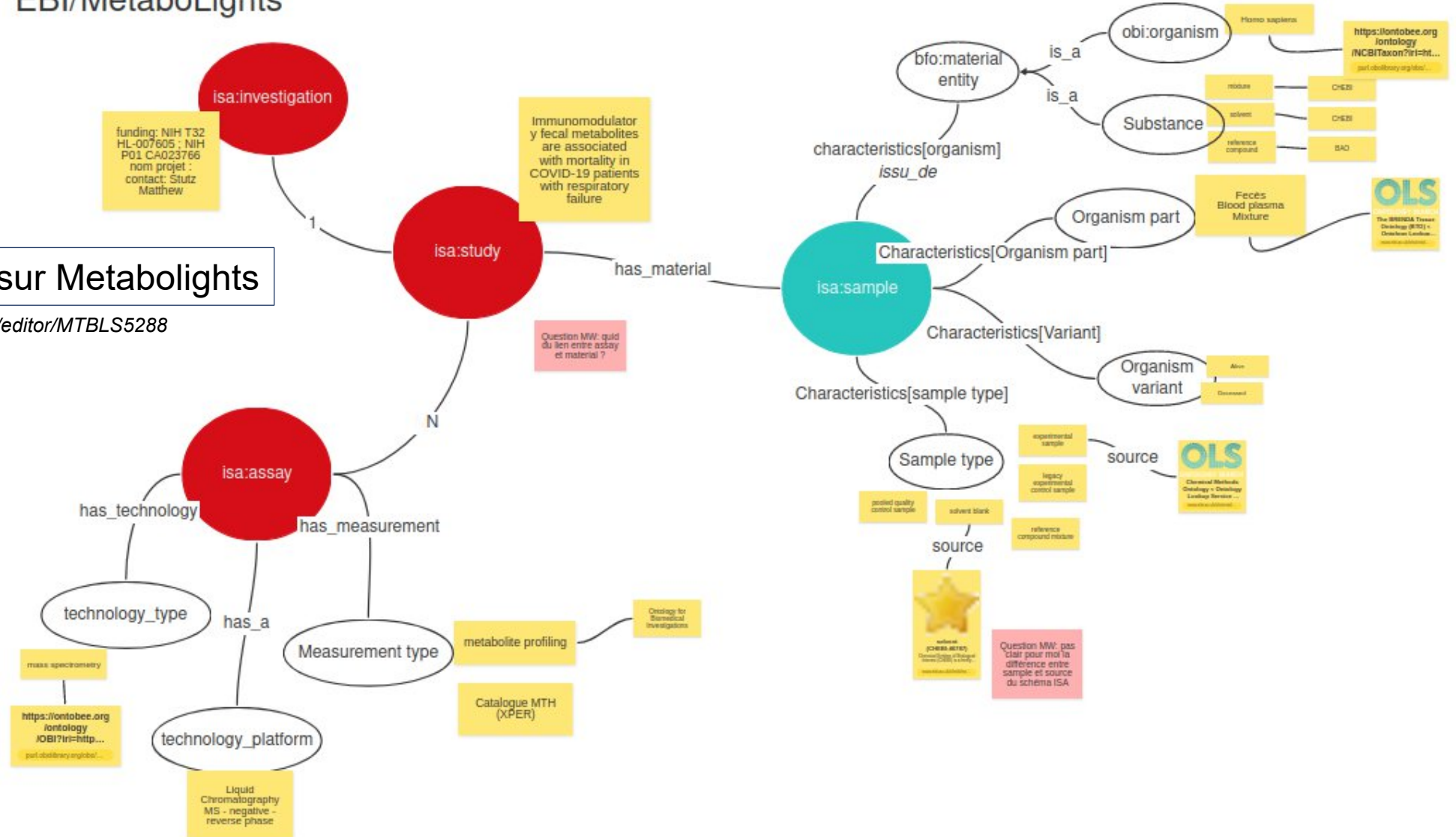
2023 / Séminaire Semantic Linked Data / Olivier Filangi et Marie Lefebvre

MÉTHODOLOGIE DE CONSTRUCTION (3/3)

EBI/MetaboLights

Cas d'étude publié sur Metabolights

<https://www.ebi.ac.uk/metabolights/editor/MTBLS5288>



INRAE

MetaSaurus

2023 / Séminaire Semantic Linked Data / Olivier Filangi et Marie Lefebvre

MOYEN D'ACCÈS / CONCLUSION

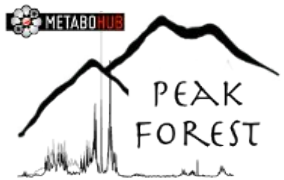
Ce qui a été réalisé :

Réalisation d'un mapping qui a permis :

- de valider le modèle ISAtab
- d'initier une liste de vocabulaires contrôlés potentiellement utilisables par la communauté

Ce qui reste à faire :

Étendre et fixer la liste de vocabulaires contrôlés en utilisant des données expérimentales provenant de diverses expériences en chromatographie liquide (LC), chromatographie gazeuse (GC) et résonance magnétique nucléaire (RMN).



Valider cette liste en la comparant avec les résultats déjà obtenus dans le cadre du projet PeakForest

Ce travail est visible uniquement par le groupe projet (documentation NextCloud, tableau de bord KLAXOON)

MetaSaurus : towards FAIR metabolomics analyses

Olivier Filangi, Sophie Aubin, Magalie Weber, **Marie Lefebvre**, Nils Paulhe, David Benaben et Franck Giacomoni



<https://metasaurus.fr/>

Merci pour votre attention



DipSO

eMPrEInTE



INRAE

MetaSaurus

2023 / Séminaire Semantic Linked Data / Olivier Filangi et Marie Lefebvre