

Result_list-Software_readme

1. 结果目录结构:

```
|-- 1.MetQuant-QC    【代谢物定性定量结果目录】
| |-- meta_intensity_all.xls    【所有代谢物定量结果列表】
| |-- sam_qc_infor_all.xls    【样本信息及总 PCA 图中样本编号信息】
| |-- Samples_QC_all-PCA[.3D].{png,pdf}    【QC 及所有代谢样本的总 PCA 图】
| |-- Samples_QC_all-pcaloading.{png,pdf}    【QC 及所有代谢样本总 PCA 图的载荷图】
| |-- Samples_all-PCA[.3D].{png,pdf}    【所有代谢样本的总 PCA 图】
| |-- Samples_all-pcaloading.{png,pdf}    【所有代谢样本总 PCA 图的载荷图】
| |-- QC-TIC_neg{pos}.png    【QC 及样本的 TIC 图】
| |-- cor_pearson_all.{png,pdf,xls}    【QC 样本相关性分析结果】
|-- 2. MetAnnotation    【代谢物注释结果目录】

|-- KEGG    【基于 KEGG 数据库注释代谢物通路结果】

| |--meta_all_kegg_anno_category.xls    【KEGG 通路注释结果】
| |--meta_all.KEGG.Anno. {png,pdf}    【KEGG 注释结果统计图】
| |--meta_all.KEGG.Anno.xls    【代谢物 KEGG 注释结果列表】
|-- HMDB    【基于 HMDB 数据库注释代谢物分类结果】
| |--meta_all_hmdb_anno_category.xls    【HMDB 分类注释结果】
| |--meta_all.HMDB.Anno.{png,pdf}    【HMDB 分类注释结果统计图】
| |-- meta_all.HMDB.Anno.xls    【代谢物 HMDB 注释结果列表】
|-- Lipidmaps    【基于 Lipidmaps 数据库注释代谢物分类结果】
| |--meta_all_lipidmaps_anno_category.xls    【Lipidmaps 分类注释结果】
| |--meta_all.Lipidmaps.Anno.{png,pdf}    【Lipidmaps 分类注释结果统计图】
| |-- meta_all.Lipidmaps.Anno.xls    【代谢物 Lipidmaps 注释结果列表】
|-- 3.MetDiffScreening    【差异代谢物筛选结果目录】
|-- *.vs.*    【样本比较对目录】
| |-- *.vs.*_all.xls    【样本比较对定量分析结果】
| |-- *.vs.*_all_Diff.xls    【样本比较对差异代谢物分析】
| |-- *.vs.*_all-PCA[.3D].{png,pdf}    【样本比较对 PCA 分析】
| |-- *.vs.*_all-PCA-pcaloading.{png,pdf}    【样本比较对 PCA loading 分析】
| |-- *.vs.*_all-PLSDA-{score,valid}.{png,pdf}    【比较对 PLSDA 分析】
| |-- *.vs.*_all-PLSDA-loading.{png,pdf}    【比较对 PLSDA loading 分析】
| |-- *.vs.*_all.xls.volcano.{png,pdf}    【样本比较对火山图分析】
|-- 4.MetDiffAnalysis    【差异代谢物分析结果目录】
|-- Venn_diff    【基于比较多的差异代谢物 venn 图】
| |--Diff_Venn_all.{png,svg}    【总差异代谢物 venn 图】
|-- Heatmap_diff    【总差异代谢物热图结果】
| |--Diff_Heatmap_all_{cluster,cluster_detail}.{png,pdf}    【总差异代谢物聚类热图】
| |--Diff_Heatmap_all_{.detail}.{png,pdf}    【总差异代谢物不聚类热图】
|-- *.vs.*    【比较的样本对目录】
| |-- *.vs.*_all.corr.xls    【差异代谢物相关性列表】
| |-- *.vs.*_all_Pvalue.xls    【基于相关性分析的 p 值列表】
```

| -- *.vs.*_all_zscore.xls 【差异代谢物 zscore 分析列表】
 | -- *.vs.*_all_zscore.{png,pdf} 【差异代谢物 z-score 图】
 | -- |*.vs.*_all_cluster_heatmap[,_detail].{png,pdf} 【差异代谢物聚类热图】
 | -- *.vs.*_all_heatmap[,_detail].{png,pdf} 【差异代谢物不聚类热图】
 | -- *.vs.*_all_corr.{png,pdf} 【差异代谢物相关性分析图】
 | -- ROC_all 【差异代谢物 ROC 曲线图】
 |-- 5.MetKeggEnrichment 【差异代谢物 KEGG 富集分析结果目录】
 |-- *.vs.* 【比较的样品对目录】
 | -- *.vs.*_all.kegg_enrichment.xls 【差异代谢物 kegg 富集结果列表】
 | -- *.vs.*_all.KEGG_Enrich.scatterplot.{png,pdf} 【kegg 富集气泡图】
 | -- *.vs.*_all_KEGG_map 【kegg 通路图】
 |--Met_results_dir.html 【网页版结果文件链接】
 2. 分析过程使用的软件版本汇总

分析	内容	软件	版本
代谢物定性定量	代谢物定性	Python	Python-3.5.0
	代谢物定量		
数据质控	QC样本质控	R	R-3.4.3
	总样品PCA分析		
代谢物注释	KEGG\HMDB\LIPIDMAPS	python	Python-2.7.6
		R	R-3.4.3
差异代谢物筛选	主成分分析 (PCA)	python、R	Python-3.5.0、R-3.4.3
	偏最小二乘法判别分析 (PLS-DA)		
	火山图		
差异代谢物分析	差异代谢物Venn图分析	python、R	Python-3.5.0、R-3.4.3
	差异代谢物聚类分析		
	差异代谢物相关性分析		
	Z-score分析		
KEGG富集分析	KEGG富集	python	Python-3.5.0
		R	R-3.4.3
差异代谢物ROC曲线分析	ROC曲线	R	R-3.4.3
关联分析	相关性分析	python	Python-3.5.0
		R	R-3.4.3
	KEGG共有通路筛选	python	Python-3.5.0
		R	R-3.4.3
备注	所有分析内容，数据处理主要用Python，图表绘制用R语言		