

CrossPath

メタボロミクス測定データの解釈にお困りではありませんか？

「CrossPath」は、膨大なメタボロミクスデータの中から実験条件間で大きく変動している代謝経路を自動的に抽出し、各代謝物の変動量をパスウェイ上に視覚的にマッピングするソフトウェアです。

パスウェイ画面を見ながら、測定データの生理学的解釈、考察が飛躍的に進みます。

CrossPathとは

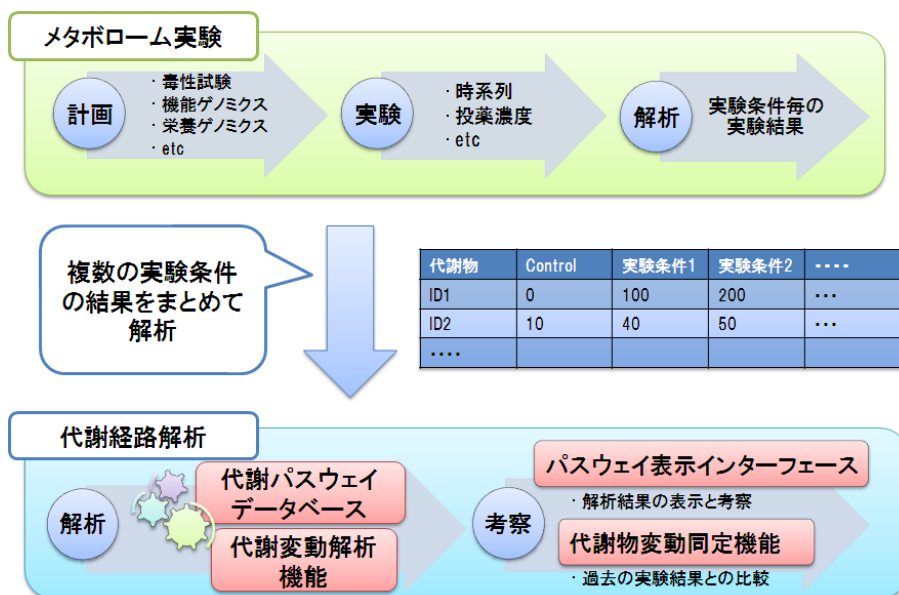
内因性代謝物は測定時点の生体の状態を良く反映しており、同一個体から経時的に採取可能な血液・尿で測定できる等の特徴があります。これらの実験結果を解析し生理学的解釈を行うには、KEGGやHMDB等の代謝パスウェイデータベースに照らし合わせ、大きく変動があった代謝系の抽出を行う必要があります。

CrossPathは、製薬企業研究所内でメタボローム研究者のニーズを直接聞きながら開発されたソフトウェアです。代謝物の数と変動の大きさを加味した新たな指標に基づいて、“動きのある”代謝パスウェイを自動的に選出する機能と、測定データの生理学的意味の解釈を支援することを重視して開発されたインターフェイスを備えています。

本ソフトウェアは、各研究者のパソコン上でWebブラウザを通じて手軽に接続、操作することができます。また、研究グループ独自の代謝物データベースをカスタマイズすることも可能です。

主な特徴

- 代謝物の数と変動の大きさを加味した新たな指標に基づいて“動きのある”代謝パスウェイを自動的に選定する**代謝変動解析機能**
- 測定データの生理学的解釈を支援する**パスウェイ表示インターフェイス**
- 過去の実験結果との類似度を比較できる**代謝物変動同定機能**
- カスタマイズ可能な**代謝パスウェイデータベース**



< CrossPathによるメタボロームデータ解析フロー >

代謝変動解析機能

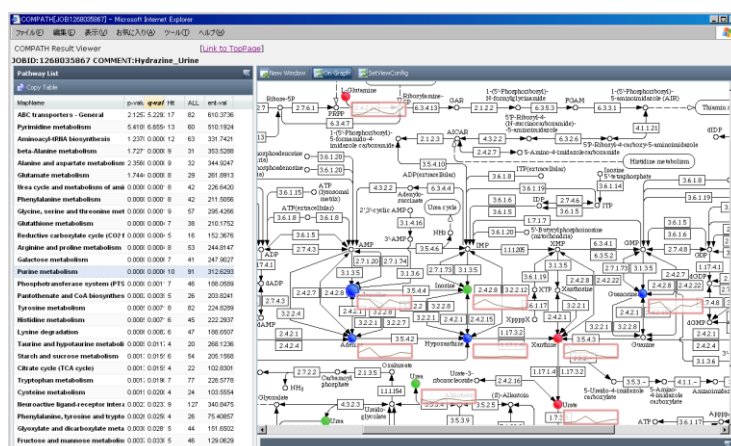
代謝物の測定データから、有意に変動をしている代謝パスウェイを抽出します。一般的な手法としては、変動代謝物群と各代謝パスウェイが関係する蓋然性を統計的に評価した後、蓋然性の高い順から有意な代謝パスウェイとしますが、本システムでは、代謝物の変動量を算出したのち、その代謝物の変動確率を推定することで、代謝パスウェイ毎のエントロピー（情報量）を算出し、この大きさにより有意な代謝パスウェイを抽出します。一般的な手法では、検出されやすい代謝物が優遇され、考察の際に主観的なバイアスがかかりやすいという問題がありましたが、本システムの手法はその点を解決し、エントロピーという客観的な尺度で代謝パスウェイを抽出し生体内に起こった現象を考察できます。そのため、薬剤の濃度依存性を測定した実験、タイムコースなどに依存する実験など、複数区間での結果を総合的に考察する必要がある実験の解析などに効果を発揮します。

カスタマイズも可能な代謝パスウェイデータベース

CrossPathでは、KEGGやHMDBといった既存の代謝パスウェイデータベース上に、測定データを解析した結果をマッピングすることができます。本システムでは、代謝パスウェイデータベースを取り込み、イニシャライズすることで解析やパスウェイ表示時に必要な情報を収集するため、ユーザ独自のデータベースに対応することも可能です。

パスウェイ表示インターフェース

CrossPathでの解析結果は表形式で表示され、エントロピーや代謝パスウェイ上にマッピングされた代謝物数等の様々な指標によるソートや絞り込みが可能です。変動した代謝物は、該当する代謝パスウェイ上に、測定データの変動量に応じて大きさや色を変えてマーキングされます。代謝データベースとしてKEGGを利用している場合は、KEGGグローバルマップ上で解析結果を参照することもでき、より俯瞰的に生体内で起きた事象に対する考察が容易となります。



© Kanehisa Laboratories

< パスウェイ表示インターフェイス >

代謝物変動同定機能

CrossPathでの解析結果は全てシステム上に蓄積されます。蓄積された解析結果は、統計的な指標を用いた結果間の比較が可能であり、現在参照している解析結果と類似する結果が過去に存在するかを即座に検索することができます。全く違う薬剤を用いた実験系であったのに、非常に似た解析結果が検索され、新たな知見を得るといった例もあります。いくらかの毒性試験の結果を本システム内に蓄積しておき、これらの結果との類似度を参照することで毒性予測を行うといった使い方も可能です。

※このカタログに記載の会社名、製品名は、それぞれ各社の商標および登録商標です。 ※このカタログに記載されている内容は予告なしに変更する場合があります。 ※このカタログに掲載の記事、写真、図表の無断転載を禁じます。

【お問い合わせ先】

MKI 三井情報株式会社

R&Dセンター バイオサイエンス室

〒105-6215 東京都中野区東中野2-7-14

TEL : 03-3227-5559 FAX : 03-3360-1730

E-Mail : bio-webinfo@ml.mki.co.jp

製品・サービスサイト : <http://biz.mki.co.jp/> コーポレートサイト : <http://www.mki.co.jp/>

●本製品は“動きのある”代謝経路を選択する技術 (W02011/055820) : 大日本住友製薬株式会社ゲノム科学研究所で開発された技術に基づき開発されました。

その他取り扱い製品の詳細はこちらへ

<http://biz.mki.co.jp/service/bio/product/index.html>