

Agilent Pathway Architect

발견에서 통찰까지

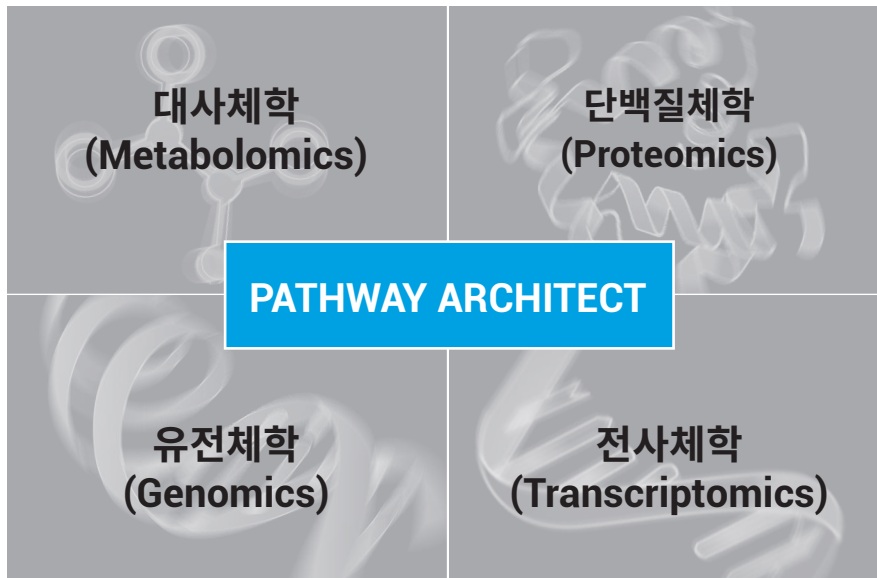
The Measure of Confidence



Agilent Technologies

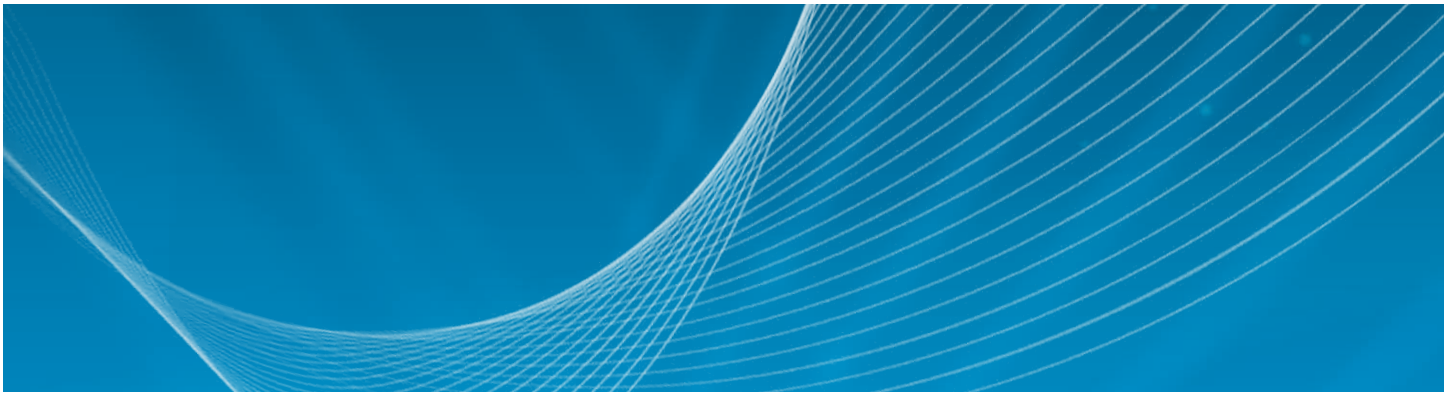
'발견'에서 '이해'로의 질주

오늘날 과학자들은 유전체학, 전사체학, 단백질체학, 대사체학 실험 데이터와 같이 점차 대규모의 복잡한 데이터를 분석함에 따라 심각한 난관에 부딪치고 있습니다. 데이터 분석에 경로(pathway) 분석을 통합시키는 것은 이러한 난제를 현저히 완화시킬 수 있고, 측정 결과 이면의 생물학적 원리를 이해하고자 하는 생물학 연구의 궁극적 목표를 충족시킬 수 있습니다. 다양한 분석 데이터를 생물학적 이해로 전환하는 성공적인 방법 중 하나는 처리된 데이터를 생물학적 경로 상에 반영하여 시각화하는 것입니다.



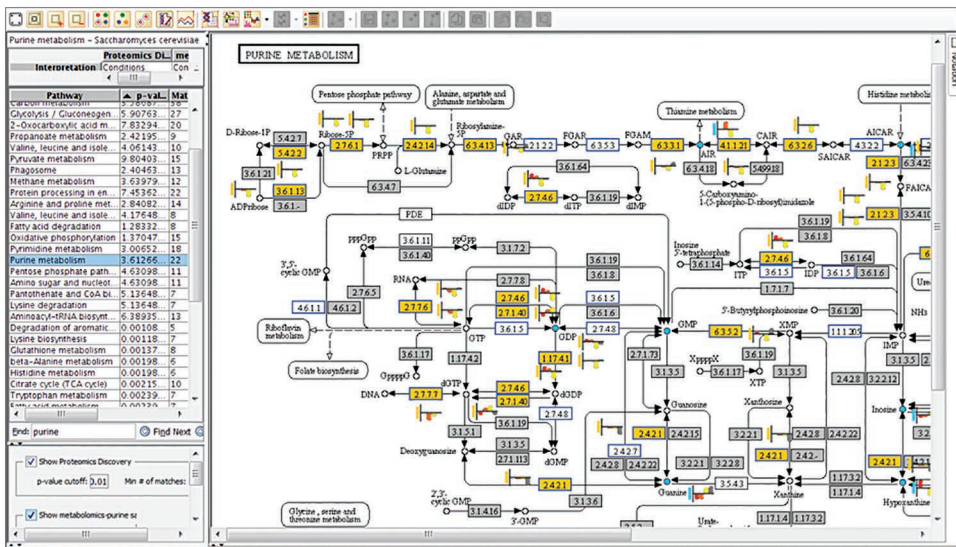
경로 중심의 관점으로 데이터를 분석하는 능력은 과학자들에게 아래와 같은 가능성을 제공합니다.

- 화합물과 오믹스 결과를 알려진 생명 작용과 연결
- 생물학적 연관성과 직접 연계하여 연구 목표에 집중
- 멀티오믹스 결과를 통합하여 보다 포괄적인 해석 가능
- 가설을 수립 및 후속 실험 방향 안내



더 깊은 통찰의 확보

GeneSpring 및 Mass Profiler Professional (MPP)의 옵션 모듈로서의 Agilent Pathway Architect 소프트웨어는 과학자들이 더 깊이 데이터를 이해할 수 있도록 빈틈없는 플랫폼을 제공하기 위해 설계되었습니다. Pathway Architect를 통해 단일오믹스 또는 멀티오믹스 실험 결과를 고전적인 생물학적 경로에 맵핑하고 동시에 이 경로 정보를 분석, 시각화 및 해석할 수 있습니다. 이 생물학적 경로 중심의 워크플로는 발견에서부터 통찰 및 검증에 이르는 과정을 가속화합니다. 또한 이는 연구자들이 효율적인 계획을 세우고 다음 단계 실험을 실행할 수 있도록 안내합니다.



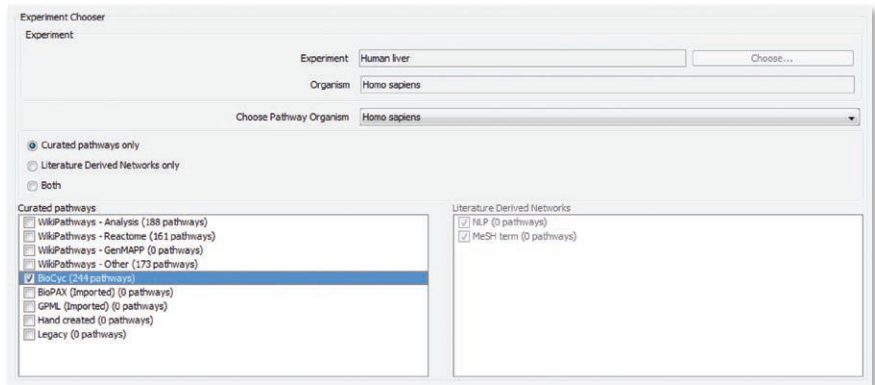
Pathway Architect에서 시각화한 KEGG의 purine 대사 경로. 파란색으로 표시된 대사체(원형)와 노란색으로 표시된 유전자/단백질(사각형)은 입력 항목 리스트와 일치함을 나타냅니다.

결과의 시각화

Pathway Architect는 공개적으로 사용 가능한 경로 데이터베이스를 이용해 생물학적 결과에 대한 이해를 용이하게 하는 시각화 도구입니다. 소프트웨어는 선택된 경로에 대사체, 단백질 및 유전자를 맵핑하고, 대화형 사용자 분석을 위해 데이터를 경로의 접점과 경계에 그래프 형식으로 반영합니다. 연구자들은 특정 생물체에 대한 검색 조건을 지정할 수 있고, 특정 경로에 데이터를 반영하기 전에 경로 결과표를 살펴볼 수 있습니다.

경로 데이터베이스

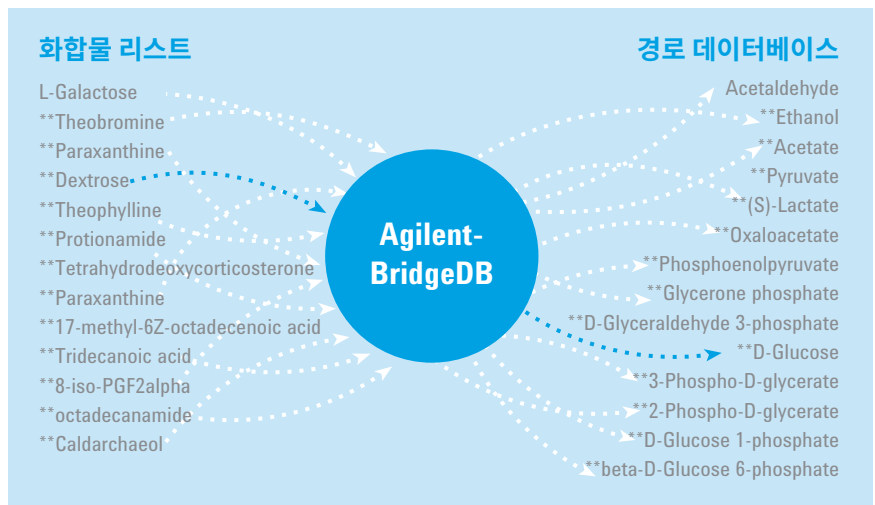
- KEGG
- WikiPathways
- BioCyc
- 맞춤형 PathVisio 경로
- GPML 포맷
- BioPAX 포맷
- 자연어 처리(Natural Language Processing, NLP)



Pathway Architect 내에서 사용 가능한 경로의 선택

잘못된 매칭 결과 해결

Pathway Architect는 강력한 빌트인 도구인 Agilent-BridgeDB를 이용해 동일 화합물에 대한 명명법의 불일치 문제를 해결할 수 있습니다. 이 자료는 실험에서 주석이 달린 대사체, 단백질, 유전자 식별자(identifier)를 특정 경로 데이터베이스에서 사용된 해당 식별자에 자동으로 연결시킵니다. Pathway Architect는 오류를 최소화하기 위해 일반명 대신 오직 식별자만을 이용합니다. Agilent-BridgeDB는 KEGG, BioCyc 및 WikiPathways 데이터베이스에 최적화되어 있습니다.



Agilent-BridgeDB는 실험에서 주석이 달린 대사체, 단백질, 유전자 식별자를 특정 경로 데이터베이스에서 사용된 해당 식별자에 자동으로 연결시킵니다.

간소화된 경로 분석

소프트웨어가 경로 분석 수행 준비를 완료하면, 사용자는 단일 또는 멀티오믹스 분석을 다음과 같이 간단한 3단계로 실행할 수 있습니다.

1. 데이터 선택
2. 특정 생물체 지정
3. 경로 데이터베이스 선택 및 분석

The screenshot displays the Pathway Architect software interface. At the top, a table lists search results for various pathways, including their names, the number of matched entities, pathway entities, and p-values. Below this, a detailed pathway map is shown with nodes and connecting lines. A callout box points to a specific node in the map, indicating that all experimental data points are displayed next to the related nodes. At the bottom, a control panel allows users to filter results based on p-value cutoffs and the number of matches, and to choose between showing pathways that pass either filter or both filters.

Pathway	Matched Entities	Pathway Entities	p-value(TB Dye...
Mx_Ascorbate_and_aldarate_metabolism_WP1622...	47	47	0.8656339
Mx_Histidine_metabolism_WP1561_41507	3	44	0.9599696
Mx_Glycolysis_and_Gluconeogenesis_WP1567_41...	1	31	0.7562498
Mx_Citrate_cycle_(TCA_cycle)_WP1566_41460	4	20	0.35121104
Mx_Biotin_metabolism_WP1631_38985	1	11	0.8928804
Mx_Fructose_and_mannose_metabolism_WP1652...	2	48	0.19564885

검색된 경로 목록 매칭된 개체 수 유의도 매치 스코어

관련 접점 옆에 모든 실험 데이터 표시

필터링 결과 공동 또는 개별 분석 수행

Pathway Architect는 사용자 친화적인 대화형 그래픽 디스플레이를 제공합니다.

실험에 영향을 미치는 경로

GeneSpring과 MPP에 Pathway Architect 모듈을 추가하는 것은 가설이 없는 상태에서 경로 주도적 연구로의 발전을 돕습니다. 이 접근은 단일오믹스 및 멀티오믹스 실험 모두에서 증명된 바 있습니다. 단일오믹스 또는 멀티오믹스 실험의 주요 데이터 분석 결과를 Pathway Architect로 분석하여 다른 생물학적 현상과 관련된 경로를 쉽고 확실하게 알아낼 수 있습니다. 이러한 경로 분석 결과는 선택된 유의한 경로에서 얻은 대사체, 단백질 또는 유전자의 내보내기 리스트를 이용해 신속하게 다음 단계 실험의 방향을 설정하고 설계하는 데 사용할 수 있습니다.

후속 실험 가속화

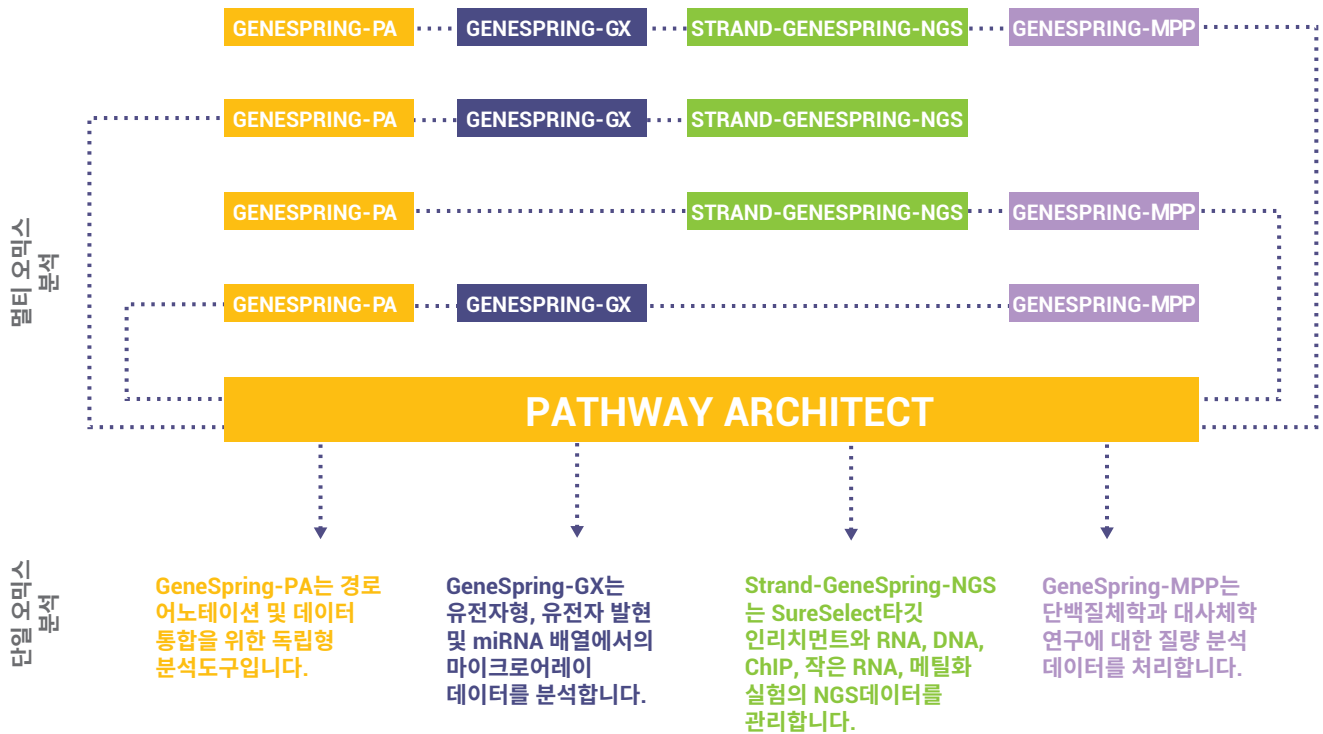
Pathway Architect에서 내보낸 리스트는 다음 실험에 사용할 수 있도록 다른 애질런트 소프트웨어로 불러올 수 있습니다. 예를 들어, 단백질 서열 등록 번호 리스트는 Agilent Spectrum Mill 소프트웨어로 보내 삼중 사중극자 MRM 실험을 설계한 후 Agilent MassHunter Acquisition 소프트웨어로 로드하여 해당 실험을 수행할 수 있습니다. 동일한 개념을 유전자도 적용하여, 유전자 목록을 애질런트 eArray 웹사이트로 보내 맞춤형 마이크로어레이를 구성할 수 있습니다. 이 유용한 소프트웨어 연결성은 일련의 후속 실험 계획과 그 수행의 속도를 높입니다.



애질런트는 가설 없이 진행되는 발견(discovery)으로부터 경로 주도적 유효성 검증에 이르는 순환 프로세스를 간소화함으로써 단일오믹스 및 멀티오믹스 실험을 통합 지원합니다.

멀티오믹스 데이터 통합

GeneSpring, Mass Profiler Professional 및 Pathway Architect를 포함한 애질런트의 통합 생물학 소프트웨어 제품군은 멀티오믹스 데이터의 공동 분석 절차를 간소화합니다. 이 소프트웨어 모듈은 유전체학, NGS, 전사체학, 단백질체학 및 대사체학 연구의 데이터를 공동으로 처리하고 효율적으로 해당 경로 상에 항목들을 맵핑합니다. 생성 중인 멀티오믹스 데이터에서 과장되어 나타나는 생물학적 경로를 직관적으로 탐색하여 신속하게 찾아낼 수 있습니다. 생물학적 경로에 대한 기존의 지식과 멀티오믹스 데이터를 통합함으로써 더 깊은 통찰을 얻고, 발견에서 검증까지의 절차를 가속화 할 수 있습니다.



더 자세히 알아보기

www.agilent.com/chem/metabolomics

현지 애질런트 고객 센터 찾기

www.agilent.com/chem/contactus

미국 및 캐나다

1-800-227-9770

agilent_inquiries@agilent.com

유럽

info_agilent@agilent.com

아시아 태평양

inquiry_lsca@agilent.com

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc., 2012
2014년 7월 3일, 한국에서 인쇄
5991-1459KO

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 우)04418
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부
고객지원센터 080-004-5090 www.agilent.co.kr



Agilent Technologies