

KaPPA - View 4  
Kazusa Plant Pathway Viewer

## KaPPA-View 4

The Kazusa Plant Pathway Viewer, Version 4.0

利用者マニュアル（日本語版）

第 1.0 版



財団法人 かずさ DNA 研究所

---

## 免責事項

著者および KaPPA-View プロジェクトメンバーは、本書の内容が正確であることに最善の努力を払いましたが、内容がいかなる場合にも完全に正確であることを保証するものではありません。また、本書に含まれる情報の利用によって発生するいかなる損害に対しても責任は負いません。本書の内容は著者および KaPPA-View プロジェクトメンバーにより断り無く変更されることがあります。予めご了承下さい。

KaPPA-View Copyright © 2004-2010, Kazusa DNA Research Institute. All rights reserved.

本書に掲載した会社名または商品名などは、一般に各社の登録商標または商標です。

# 目次

|                                      |           |
|--------------------------------------|-----------|
| <b>1. はじめに</b> .....                 | <b>1</b>  |
| 1-1. KaPPA-View について .....           | 1         |
| 「カッパ」の名前の由来 .....                    | 2         |
| 1-2. KaPPA-View4 でできること .....        | 2         |
| 1-3. 動作環境 .....                      | 5         |
| OS およびウェブブラウザ .....                  | 5         |
| プラグイン .....                          | 6         |
| 1-4. このマニュアルについて .....               | 6         |
| <b>2. 解析の開始</b> .....                | <b>8</b>  |
| 2-1. KaPPA-View へのアクセス .....         | 8         |
| 2-2. ログイン(ゲストユーザーとして) .....          | 8         |
| 2-3. メインメニュー .....                   | 9         |
| 2-4. ユーザー権限 .....                    | 10        |
| 2-4-1. ゲストユーザーとパワーユーザー .....         | 10        |
| 2-4-2. パワーユーザー登録(アカウントの取得) .....     | 10        |
| 2-4-3. パワーユーザーの有効期限 .....            | 11        |
| 2-5. パワーユーザーとしてのログイン .....           | 11        |
| 2-5-1. パワーユーザー専用メニュー(サイドメニュー) .....  | 12        |
| 2-5-2. パスワード変更(パワーユーザーのみ) .....      | 13        |
| 2-5-3. ユーザー情報の編集 (パワーユーザーのみ) .....   | 13        |
| 2-6. ログオフ .....                      | 14        |
| 2-6-1. 自動ログオフ .....                  | 14        |
| <b>3. データのアップロードと管理</b> .....        | <b>16</b> |
| 3-1. 一時的アップロードと恒久的アップロード .....       | 16        |
| 3-2. 実験データのアップロード .....              | 16        |
| 3-3. ユーザーマップのアップロード .....            | 17        |
| 3-4. 相関データのアップロード .....              | 18        |
| 3-5. アップロードしたデータの管理(パワーユーザー専用) ..... | 19        |
| 3-5-1. 実験データの編集 .....                | 20        |
| 3-5-2. データの削除 .....                  | 20        |
| 3-6. ユーザーマップのメール送信(パワーユーザー専用) .....  | 20        |
| <b>4. データ解析</b> .....                | <b>23</b> |

|                                       |           |
|---------------------------------------|-----------|
| 4-1. 閲覧データの選択                         | 23        |
| 4-1-1. 比較実験ペアの作成                      | 24        |
| 4-1-2. 閲覧する比較実験ペアの選択                  | 29        |
| 4-2. データの閲覧                           | 32        |
| 4-2-1. データ閲覧ウィンドウ                     | 32        |
| 4-2-2. 代謝経路ツリー                        | 34        |
| 4-2-3. マップモード                         | 35        |
| 4-2-4. 代謝マップ                          | 37        |
| 4-3. ポップアップ情報ウィンドウ                    | 44        |
| 4-2-5. 鳥瞰 (Bird's Eye) マップ            | 46        |
| 4-2-6. マップのサムネイル表示                    | 51        |
| 4-4. データ解析機能                          | 51        |
| 4-4-1. 簡易マップ                          | 52        |
| 4-4-2. マルチプルマップ表示                     | 54        |
| 4-4-3. 相関データの重ね描き機能                   | 56        |
| 4-4-4. 1生物種内における2実験の比較                | 61        |
| 4-4-5. 生物種間での実験データ比較                  | 62        |
| 4-4-6. 全実験データの並列表示                    | 64        |
| <b>5. マップ閲覧機能</b>                     | <b>66</b> |
| <b>6. 検索</b>                          | <b>67</b> |
| 6-1. 遺伝子、化合物、酵素反応の検索                  | 67        |
| 6-2. Blast 検索                         | 68        |
| <b>7. ダウンロード</b>                      | <b>70</b> |
| <b>8. 外部システムからの利用</b>                 | <b>72</b> |
| 8-1. データアップロード API                    | 72        |
| 8-1-1. データフォーマット                      | 73        |
| 8-1-1. データ送信 URL とパラメーター              | 73        |
| 8-1-2. サンプルコード                        | 74        |
| 8-1-3. KaPPA-View4 でのデータ閲覧後の動作        | 75        |
| 8-2. 遺伝子、化合物、酵素反応、代謝マップへの外部システムからのリンク | 76        |
| 8-2-1. 各要素へのリンク書式                     | 76        |
| 8-2-2. リンク時における生物種の指定                 | 79        |
| <b>9. ファイルのフォーマット</b>                 | <b>81</b> |
| 9-1. 全般的なご注意                          | 81        |
| 9-2. アップロード用の実験データ                    | 81        |
| 9-2-1. データ部分                          | 82        |

|                                     |            |
|-------------------------------------|------------|
| 9-2-2. ヘッダー部分 .....                 | 84         |
| 9-3. 関連データ .....                    | 90         |
| 9-3-1. フォーマット .....                 | 90         |
| 9-3-2. サンプル .....                   | 91         |
| 9-4. ユーザーマップ .....                  | 91         |
| 9-5. POST 転送用データ .....              | 94         |
| 9-5-1. POST データの構造 .....            | 94         |
| 9-5-2. フォーマット .....                 | 95         |
| 9-5-3. サンプル .....                   | 98         |
| <b>10. デフォルトデータ .....</b>           | <b>99</b>  |
| 10-1. 生物種 .....                     | 99         |
| 10-2. 実験データ .....                   | 100        |
| 10-3. 関連データ .....                   | 102        |
| <b>11. 利用のヒントとトラブルシューティング .....</b> | <b>104</b> |
| 11-1. マップの画面撮りを作成する .....           | 104        |
| 11-2. 2色法のマイクロアレイデータを扱う .....       | 104        |
| 11-3. 1色法のマイクロアレイデータを扱う .....       | 105        |
| 11-4. 化合物 ID を調べる .....             | 105        |
| <b>12. 謝辞 .....</b>                 | <b>107</b> |
| <b>13. 参考文献 .....</b>               | <b>108</b> |
| <b>14. 連絡先 .....</b>                | <b>109</b> |
| KaPPA-View 開発チーム .....              | 109        |
| プログラミングおよびシステム構築 .....              | 109        |



# 1. はじめに

---

## 1-1. KaPPA-View について

DNA マイクロアレイ技術の進展により、網羅的な遺伝子発現の解析(トランスクリプトーム解析)が可能となっています。またクロマトグラフィー・質量分析を中心として、網羅的な代謝産物解析(メタボローム)のデータも得られつつあります。このような解析データは通常、数千～数万の遺伝子や化合物(ピーク)の膨大な定量データであり、複数のデータを比較することにより生物学的解釈や考察を得ることは、研究者にとってしばしば大きな困難を伴います。KaPPA-View (The Kazusa Plant Metabolic Pathway Viewer, <http://kpv.kazusa.or.jp/kappa-view/>) は、遺伝子や代謝産物を機能単位ごとに知識ベースで整理した「代謝経路マップ」を利用し、トランスクリプトームやメタボロームのデータをマップに投影することで、これらのオミクスデータに内在する生物学的意義の発見を手助けするためのウェブツールです (Tokimatsu et al. 2005, Tokimatsu et al. 2006, and Sakurai et al. 2006)。

KaPPA-View は当初、モデル植物シロイヌナズナに対応したツールとして開発されました。植物の二次代謝産物の生合成制御に焦点を当てた研究プロジェクトで開発されたため、フラボノイド、グルコシノレート、カロテノイドなど、特に二次代謝経路を中心に代謝経路マップの整備を行い、約 130 枚の代謝経路マップが搭載されました (Tokimatsu et al. 2005)。各代謝経路マップは SVG (Scalable Vector Graphics) という形式で作成されており、ユーザーがウェブブラウザを介してアップロードした実験データにもとづいて、複数実験間における遺伝子発現や代謝産物蓄積の変化量を色の変化として代謝経路マップ上に表現することが可能です。このような代謝経路マップ上での表現は、膨大なオミクスデータを直感的に解釈するのに役立ちます。

大量の遺伝子発現のデータが公共のデータベースに蓄積されたことにより、遺伝子の共発現性の解析が進みました。この解析は、類似あるいは協調的な機能を持つ遺伝子が、様々な組織や生理条件を通じて類似した発現パターンを示すことに基づいており、類似性の指標として遺伝子間での共発現相関などが用いられています。そこで私たちは、遺伝子

間、化合物間での関係性を代謝マップ上に表示できる機能を追加した、第2世代目の KaPPA-View を開発・公開しました (KaPPA-View2, 2006 年公開)。

遺伝子の共発現性の解析は、特に、代謝経路を制御する転写調節因子の探索を行う上で有効であり、多くの成功例が報告されています。代謝経路上にある酵素遺伝子と、転写因子を含むそれ以外の遺伝子との共発現性を解析できるようにするため、我々は、第3世代の KaPPA-View を公開しました (KaPPA-View3, 2008 年公開)。KaPPA-View3 では、シロイヌナズナ以外でも様々な植物のマイクロアレイデータが蓄積されてきたことを受け、複数の生物種を扱えるよう機能拡張がなされました。

2010 年 1 月、我々は KaPPA-View バージョン 4 をリリースしました。KaPPA-View4 は、これまでのバージョンで追加されてきた多くの機能を総括し、プログラムやデータ構造を最適に設計し直したことで、劇的な操作性と処理速度の向上が実現されています。新たな機能としては、外部のデータベースや単体アプリケーションからデータを直接アップロードできる機能が設けられ、ブラウザで KaPPA-View4 へのログイン操作を行わなくても、データを代謝経路マップ上に表示できるようになりました。KaPPA-View4 はこれらの改良により、オミクスデータを迅速に代謝マップ上で比較解析するための汎用的なビューワーとして利用可能となりました。

開発チーム一同、KaPPA-View4 が多くの研究者のお役に立てることを願っています。

### **「カッパ」の名前の由来**

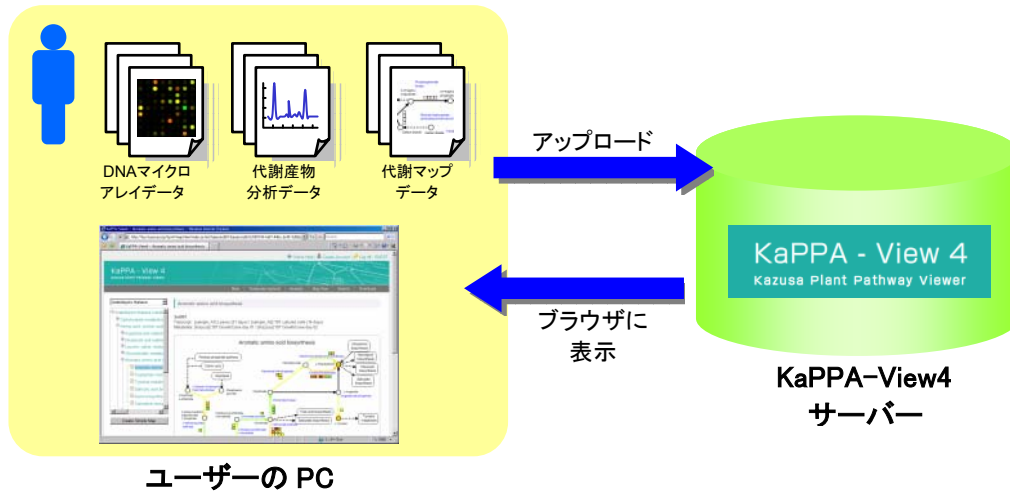
KaPPA は、Kazusa Plant Pathway に由来していますが、日本でカッパといえば、民話に登場する「河童」を思い浮かべることでしょう。河童は人里近くの小川に棲息しており、何かよい獲物はないかと、いつも人間界を眺めています。KaPPA-View を通じて河童の目となり、トランスクリプトームやメタボロームの世界を眺めて、そこからぜひ大きな獲物を獲得してください。KaPPA という呼び名には、このような思いも込められています。

## **1-2. KaPPA-View4 でできること**

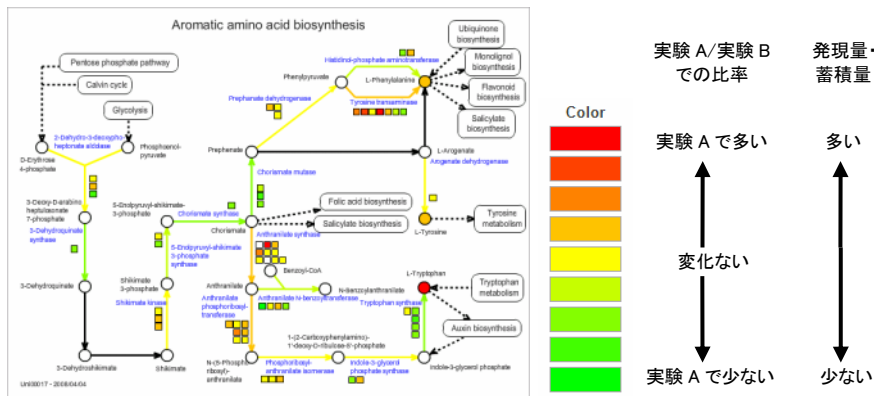
ここではまず簡単に、KaPPA-View4 の動作や、KaPPA-View4 でできる解析について見て行きましょう。



ユーザーが持っている DNA マイクロアレイデータや代謝産物分析データを、インターネットブラウザを介して KaPPA-View4 にアップロードすると、KaPPA-View4 は、代謝経路マップ上に各遺伝子や化合物のデータを当てはめて表示します。デフォルトでは、シロイヌナズナ、イネ、ミヤコグサ、トマトに対応する約 130 枚の代謝マップが準備されています。

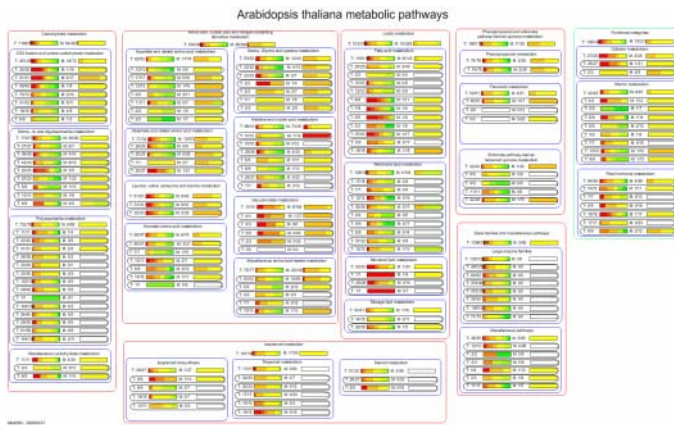


マップ上では、遺伝子は四角(□)、化合物は丸(○)のシンボルで表されており、2実験間での変化比率や1実験での絶対量などのデータの大小に応じて各シンボルが異なる色相で塗り分けられます。

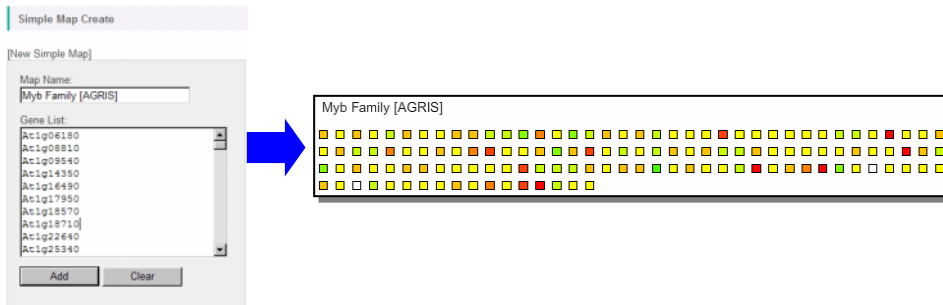


鳥瞰マップ表示では、全ての代謝マップの集計値を一覧でき、どの代謝経路が大きく変化しているかを知ることができます。

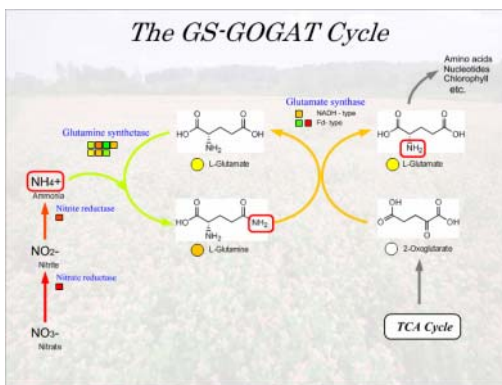
## 1. はじめに



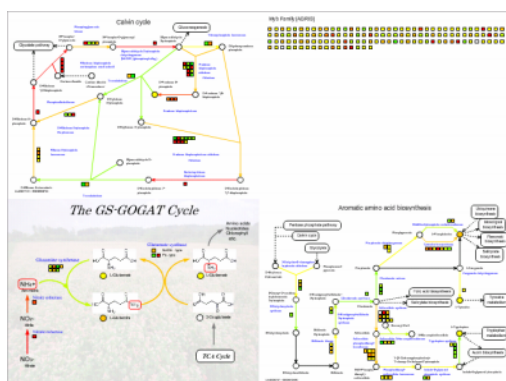
代謝マップに描かれない遺伝子(転写調節因子など)も、遺伝子 ID を入力することで簡易的なマップとして表示、解析することができます。



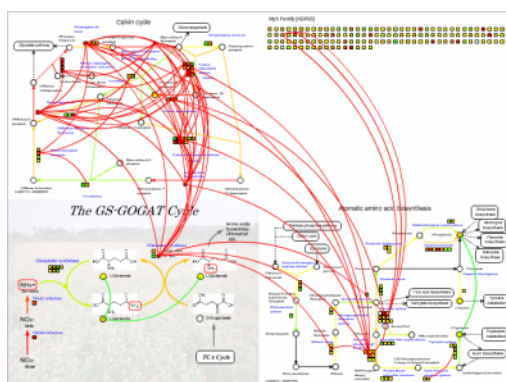
また、ユーザーが作成した代謝マップを利用することもできます。



簡易マップ、ユーザーマップを含め、最大 4 枚の代謝マップを並べて一度に閲覧することができます。



さらに、遺伝子の共発現性相関データなど、遺伝子-遺伝子間および代謝物-代謝物間の関係性を、代謝マップ上に図示できます。これはKaPPA-View4に特徴的な機能で、転写因子とそれが制御する代謝経路遺伝子との関係などを解析したりするのに役立ちます。



この他、複数の生物種の遺伝子をマップ上に並べて表示したり、複数の実験データをマップ上で比較表示したりする機能や、外部のアプリケーションからデータを直接アップロードして表示する機能などがあります。

### 1-3. 動作環境

KaPPA-View4 の操作は、以下のコンピューター環境でテストされています。

#### OS およびウェブブラウザ

- **Windows XP / Vista (Microsoft)**

### 1) Microsoft Internet Explorer 6, 7, 8

※Internet Explorer 8 で表示の配置がおかしいと感じる場合には、互換表示ボタンをオンにしてお使い下さい。

### 2) Mozilla Firefox 3.0.10

### 3) Google Chrome 3.0

#### • Mac OS X version.10.5.8 (Apple)

### 1) Safari 4.04

※「ポップアップウィンドウを開かない」のチェックを外してお使いください。

### 2) Firefox 3.5.6

### 3) Opera 9.63, 10.10

※「ポップアップを有効にする」に設定してください。ただし、代謝マップのフルスクリーン表示は動作しません。

## プラグイン

代謝経路マップを表示するために、ウェブブラウザには Flash Player ver.9 以降 (Adobe) がインストールされている必要があります。もしお使いのブラウザにインストールがされていない場合には、下記 URL の案内に従ってインストールを行って下さい。

<http://www.adobe.com/products/flashplayer/>

## 1-4. このマニュアルについて

本書は、KaPPA-View4 の全機能について詳細に記述したマニュアルです。

ユーザーマップの作成方法に関しては、別途「**ユーザーマップ作成マニュアル**」をご参照下さい。また、初めて KaPPA-View4 をお使いの方は、「**簡単操作マニュアル**」をご覧いただくと、ご理解の手助けになると思います。

これらのマニュアルは、KaPPA-View4 トップページから入手できます。

## 2. 解析の開始

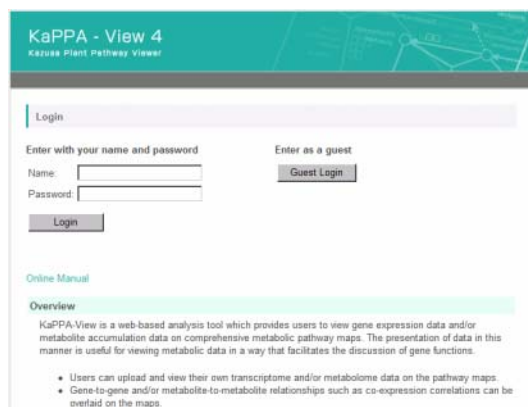
---

KaPPA-View4はブラウザを介して使用するウェブツールです。この章では、解析を始める際にまず必要なログイン方法について解説します。KaPPA-View4では、ゲストユーザーとパワーユーザーという二つのユーザー権限が存在します。ユーザー権限によるログイン方法の違いや、メニュー操作についても解説します。

### 2-1. KaPPA-View へのアクセス

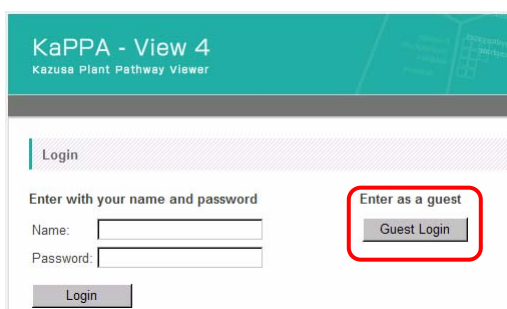
下記の KaPPA-View4 のトップページ URL にアクセスして下さい。

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/>



### 2-2. ログイン(ゲストユーザーとして)

トップページで「Guest Login」ボタンを押して下さい。



KaPPA - View 4  
Kazusa Plant Pathway Viewer

Login

Enter with your name and password

Name:

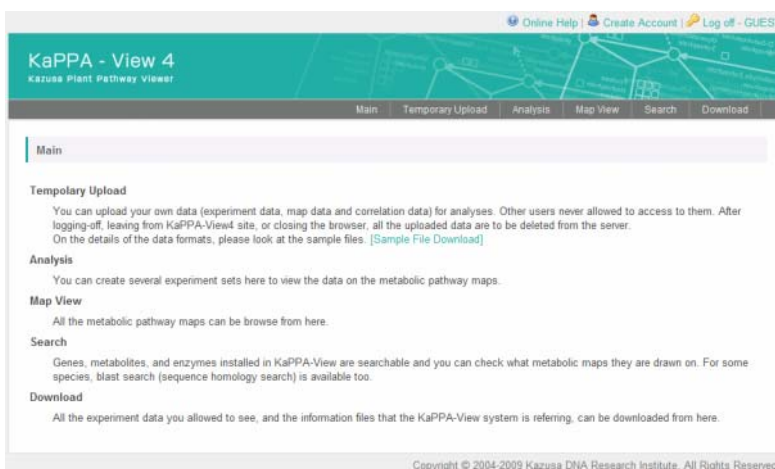
Password:

Login

Enter as a guest

Guest Login

ログインすると、メインページが表示されます。



KaPPA - View 4  
Kazusa Plant Pathway Viewer

Online Help | Create Account | Log off - GUEST

Main | Temporary Upload | Analysis | Map View | Search | Download

Main

**Temporary Upload**  
You can upload your own data (experiment data, map data and correlation data) for analyses. Other users never allowed to access to them. After logging-off, leaving from KaPPA-View4 site, or closing the browser, all the uploaded data are to be deleted from the server. On the details of the data formats, please look at the sample files. [\[Sample File Download\]](#)

**Analysis**  
You can create several experiment sets here to view the data on the metabolic pathway maps.

**Map View**  
All the metabolic pathway maps can be browse from here.

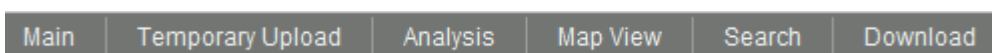
**Search**  
Genes, metabolites, and enzymes installed in KaPPA-View are searchable and you can check what metabolic maps they are drawn on. For some species, blast search (sequence homology search) is available too.

**Download**  
All the experiment data you allowed to see, and the information files that the KaPPA-View system is referring, can be downloaded from here.

Copyright © 2004-2009 Kazusa DNA Research Institute, All Rights Reserved.

## 2-3. メインメニュー

ページの上部に、メインメニューが配置されています。



### • Main

ログイン直後のメインページに戻ります。

### • Temporary Upload

実験データ、ユーザーマップデータ、関連データなど、解析に用いるユーザーのデータをアップロードします。アップロードされたデータは、ログオフしたりブラウザを閉じたりすると、自動的に消滅します。

### • Analysis

アップロードしたデータを代謝マップ上で表示・解析します。

### • **Map View**

実験データを投影しない、白地図の代謝経路マップを閲覧することができます。

### • **Search**

遺伝子、化合物、酵素反応などを検索し、それがどの代謝マップに存在するか等を調べることができます。Blast を用いた相同性検索なども提供しています。

### • **Download**

実験データや、KaPPA-View4 でシステムが利用している各生物種の遺伝子情報、化合物情報、マップ情報などを、テキストファイルとしてダウンロードできます。

## 2-4. ユーザー権限

### 2-4-1. ゲストユーザーとパワーユーザー

KaPPA-View4 には、ゲストユーザーとパワーユーザーという二つのユーザー権限が設けられています。ゲストユーザーとパワーユーザーでは、利用できる機能に差はありませんが、解析データの扱いに違いがあります。

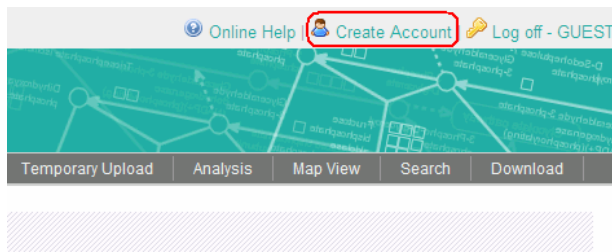
|         |   |
|---------|---|
| ゲストユーザー | 解析するデータは、ログイン後解析を開始する際に毎回アップロードする必要があります。                                 |
| パワーユーザー | 解析するデータを KaPPA-View4 サーバー上に保存しておくことができるため、一度アップロードを行えば、ログイン後すぐに解析を開始できます。 |

ゲストユーザーは、ログイン後に簡単な登録を行うことで、すぐにパワーユーザー用のアカウントを取得することができます。

### 2-4-2. パワーユーザー登録(アカウントの取得)

ゲストユーザーでログイン後、画面左上の「Create Account」をクリックしてください。





お好きなログイン名と電子メールアドレスを入力し、「Submit」ボタンを押します。

| Create New Account                    |                      |
|---------------------------------------|----------------------|
| Login Name                            | <input type="text"/> |
| Email                                 | <input type="text"/> |
| <input type="button" value="Submit"/> |                      |

これで登録作業は終了です。

すぐにログインのためのパスワードを記した電子メールが届き、パワーユーザーとしてのログインが可能になります。

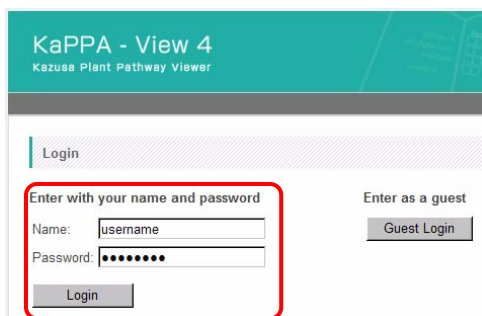
### 2-4-3. パワーユーザーの有効期限

パワーユーザーアカウントは、最後にログインしてから 30 日間ログインを行わないと、自動的に削除されます。この際、パワーユーザーがアップロードしたデータも削除されますので、ご注意ください。最後にログインしてから 21 日が経過した時点で、アカウント削除を警告するメールが自動送信されます。継続してアカウントを使用する際は、30 日が経過する前に、一度パワーユーザーとしてログイン操作を行って下さい。

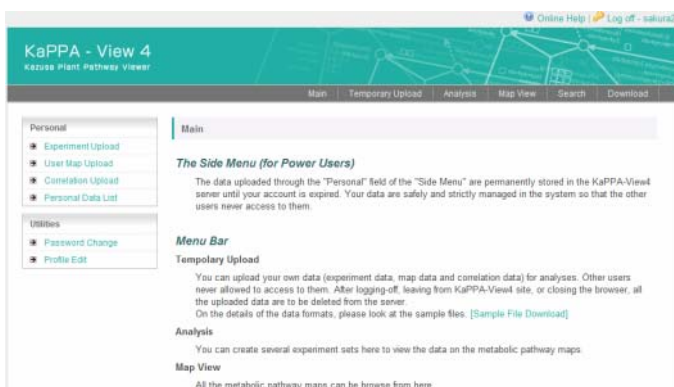
## 2-5. パワーユーザーとしてのログイン

パワーユーザーアカウントを取得すると、パワーユーザーとしてのログインが可能です。KaPPA-View4 のメインページにアクセスした後、ユーザー名とパスワードを入力し、「Login」ボタンを押して下さい。

## 2. 解析の開始



ログインすると、パワーユーザー用のメイン画面が表示されます。



### 2-5-1. パワーユーザー専用メニュー(サイドメニュー)

パワーユーザー用のメイン画面では、画面の左側に、パワーユーザー専用のメニューが表示されています。

| Personal           |
|--------------------|
| Experiment Upload  |
| User Map Upload    |
| Correlation Upload |
| Personal Data List |

| Utilities       |
|-----------------|
| Password Change |
| Profile Edit    |

#### •Personal 欄

実験データ、ユーザーマップ、相関データのアップロードを行うことができます。ここでアップロードしたデータは、Temporary Uploadとは異なり、KaPPA-View4上に保存されま

すので、ログイン後すぐに解析を開始できるようになります。保存したデータはシステム内で厳密に管理されており、他のユーザーが使用・閲覧することはできません。

「Personal Data List」では、保存したデータの一覧表示や登録内容の編集、削除などが行えます。

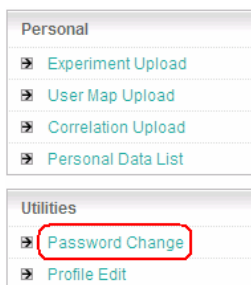
#### • Utilities 欄

パスワードや、電子メールアドレス等のユーザー情報の編集などが行えます。

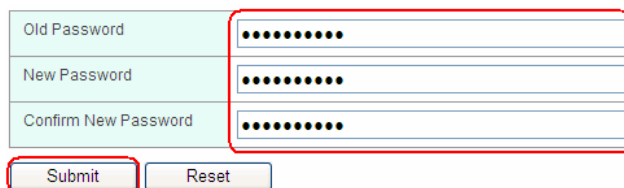
### 2-5-2. パスワード変更(パワーユーザーのみ)

システム内でのパワーユーザーデータの管理には万全を期しておりますが、運用時のセキュリティ確保のため定期的なパスワード変更をお勧めします。

サイドメニューの「Password Change」をクリックして下さい。



古いパスワード、新しいパスワードを入力し、「Submit」ボタンを押します。

The image shows a form for changing a password. It has three input fields: 'Old Password', 'New Password', and 'Confirm New Password'. Each field contains a series of dots representing masked text. Below the input fields are two buttons: 'Submit' and 'Reset'. The 'Submit' button is highlighted with a red rectangular box.

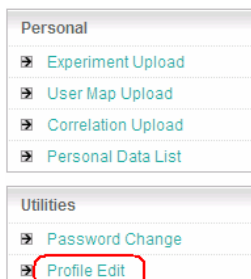
### 2-5-3. ユーザー情報の編集 (パワーユーザーのみ)

必要に応じてユーザー情報の編集が可能です。ここで登録された個人情報は、登録者の断りなく使用されることはありません。しかし、電子メールアドレスは、システム不具合などのご連絡に使用することがありますので、ご了承ください。

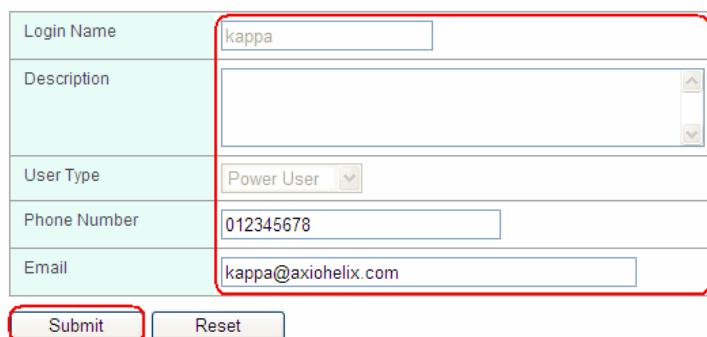
## 2. 解析の開始

---

サイドメニューから「Profile Edit」をクリックして下さい。



情報を編集し、「Submit」ボタンを押して下さい。



The image shows a profile edit form with the following fields: 'Login Name' (kappa), 'Description' (empty), 'User Type' (Power User), 'Phone Number' (012345678), and 'Email' (kappa@axiohelix.com). The 'Submit' button is highlighted with a red rectangle.

## 2-6. ログオフ

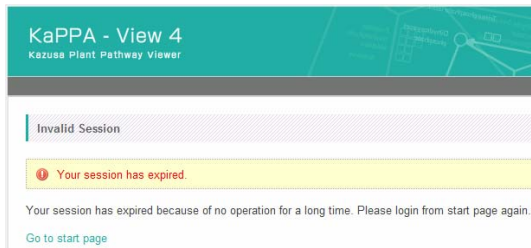
画面右上の「Log off」をクリックすることで、ログオフすることができます。



Temporary Upload でアップロードしたデータは、ログオフすることで消去されます。

### 2-6-1. 自動ログオフ

ログインした後、60 分間何の操作もしなかった場合は、自動的にログオフしたとみなされます。次の操作をしたときには下図のような画面が表示されます。



また、ログオフ操作をせずにブラウザを閉じた場合も、自動的にログオフしたとみなされます。

## 3. データのアップロードと管理

---

KaPPA-View4 では、ユーザーがアップロードした実験データ、マップデータ、相関データを使用して、代謝経路マップ上での解析を行います。この章では、これらデータをアップロードするための操作方法やその管理方法について解説します。アップロードするデータファイルのフォーマットについては、**9. ファイルのフォーマット**をご参照ください。

### 3-1. 一時的アップロードと恒久的アップロード

データのアップロードには、その後のデータの取り扱い方によって二つの種類があります。ひとつは、「一時的アップロードです」。メインメニューの「Temporary Upload」からデータをアップロードすると、そのデータは一時的なものとして扱われ、ログオフ後には消去されません(一時的データ)。もうひとつは、パワーユーザー専用の機能で、「恒久的アップロード」です。パワーユーザー専用のサイドメニューからアップロードを行うと、そのデータはKaPPA-View4 サーバー上に保存され、パワーユーザーがログインした直後にすぐ解析に用いることができます(恒久的データ)。恒久的データは、ユーザーアカウントが有効な限りサーバーに保持され続けます。

アップロードの方法は、一時的アップロードでも、恒久的アップロードでも、メニューが異なるだけで操作はほぼ同一です。

### 3-2. 実験データのアップロード

DNA マイクロアレイから得られた網羅的な遺伝子発現データや、機器分析で得られた代謝産物測定データをアップロードします。アップロードされた個々の実験データは、「Analysis」メニューを通じて代謝経路マップ上に投影され、定量値や2実験間での比較結果がマップ上の各要素の色変化によって解析できるようになります。

|           |  |
|-----------|--|
| 一時的アップロード | メインメニュー: Temporary Upload -> Experiment タブ |
| 恒久的アップロード | サイドメニュー: Experiment Upload                 |

「参照」ボタンを押してアップロードするファイルを選択し、「Upload」ボタンを押して下さい。

Experiment File :

データファイルが読み込まれ、下部に実験名などの一覧が表示されます。実験データの種別 (Transcript または Metabolite)、生物種名を選択して下さい。必要に応じて、実験名、繰り返し実験番号、コメントを記入して下さい。

「Submit」ボタンを押すと、実際にサーバーへデータがアップロードされます。

Experiment Type :  Transcript  Metabolite  
 Species :

| Experiment Name                         | Repetition Number              | Comment              |
|---|--------------------------------|----------------------|
| <input type="text" value="comp test1"/> | <input type="text" value="1"/> | <input type="text"/> |
|   | <input type="text" value="2"/> | <input type="text"/> |

「Preview」ボタンを押すと、実験データファイルの最初の 100 行が別ウィンドウに表示されます。データの内容を確認したいときにご利用ください。

アップロードしようとしているデータの中に、すでに KaPPA-View4 に存在する実験 ID と同一の ID を持つものが含まれている場合、下記のような確認画面が表示されます。「execute」ボタンを押すと、古いデータが上書きされ新しいデータに置き換わります。

Following experiments are duplicated. Are you sure to update old data ?

- Experiment Set : KES000441D8
- Experiment : KEP0000333
- Experiment : KEP0000333 (2)
- Experiment : KEP0000333 (3)

### 3-3. ユーザーマップのアップロード

### 3. データのアップロードと管理

KaPPA-View4 には、デフォルトで約 130 枚の代謝経路マップが搭載されていますが、ユーザーが独自のマップデータを準備し(ユーザーマップ)、解析に用いることも可能です。


ユーザーマップは、フリーのドローソフト「Inkscape」を用いて、SVG (Scalable Vector Graphics) 形式のファイルとして作成します。ユーザーマップの作成方法に関しては、ユーザーマップ作成マニュアルをご参照下さい。

|           |                                     |
|-----------|-------------------------------------|
| 一時的アップロード | メインメニュー: Temporary Upload -> Map タブ |
| 恒久的アップロード | サイドメニュー: User Map Upload            |

「参照」ボタンを押してユーザーマップファイルを選択し、Upload ボタンを押して下さい。

User Map File:

下部にユーザーマップのプレビューが表示されます。ユーザーマップの名前とコメントを入力し、「Submit」ボタンを押して下さい。



Unit0150 - 2008/03/28

Map Name:

Comment:

ここで入力したユーザーマップ名は、「Analysis」機能や「Map View」を使ってマップを閲覧する際に、代謝経路ツリーに表示されます。

#### 3-4. 関連データのアップロード

遺伝子の共発現性を示す関連データなど、遺伝子-遺伝子間、あるいは化合物-化合物間の関連性データをアップロードすることで、その関連性を代謝マップ上に表示する事ができます。このようなデータ表現方法は、KaPPA-View の特徴的な機能の一つであり、遺伝子の制御関係などを解析する上で役に立ちます。



|           |   |
|-----------|---|
| 一時的アップロード | メインメニュー: Temporary Upload -> Correlation タブ |
| 恒久的アップロード | サイドメニュー: Correlation Upload                 |

「参照」ボタンを押して関連データファイルを選択します。データの種別 (Gene/Compound)、データの名前、コメントを入力し、「Upload」ボタンを押して下さい。

Type :  Gene  Compound

Correlation File : C:\Documents and Settings\デスクトップ\kpv4\correlation\c

Name : my correlation 1

Comment : sample

### 3-5. アップロードしたデータの管理(パワーユーザー専用)

パワーユーザーがアップロードした恒久的データは、ユーザー自身によって編集・削除を行うことができます。

サイドメニューの「Personal Data List」を選択して下さい。

Personal

- Experiment Upload
- User Map Upload
- Correlation Upload
- **Personal Data List**

Utilities

- Password Change
- Profile Edit

データの種別を選択し、「Search」ボタンを押すと、下部に該当するデータが一覧されます。データの数が多の場合などは、必要に応じてキーワードやアップロードした日付によって絞り込みを行って下さい。

Data Type : Experiment Set

Comment :   AND  OR  
max. 5 key-words separated by space

Uploaded Date : 2009/10/01 -

#### 3-5-1. 実験データの編集

実験データの一覧を表示させた場合には、一覧表の右端に「Edit」ボタンが出現します。このボタンを押すと、別ウィンドウが開き、その実験のメタデータ(詳細情報)を編集することができます。

| <input type="checkbox"/>            | Experiment Set Name | Uploaded Date | Edit |
|-------------------------------------|---------------------|---------------|------|
| <input type="checkbox"/>            | TempSet_000001      | 2009/10/26    | Edit |
| <input checked="" type="checkbox"/> | MeJA treated cells  | 2009/10/26    | Edit |

内容を編集し、「Update」ボタンを押すと、変更が反映されます。

| [Basic Information]     |                                  |
|-------------------------|----------------------------------|
| Item                    | Value                            |
| type                    | TRANSCRIPT                       |
| Set_Set ID              | KES000441D8                      |
| Set_Experiment Set Name | MeJA treated cells               |
| Set_Array Type          | Arabidopsis thaliana (AGI codes) |

Update

#### 3-5-2. データの削除

不要なデータを削除する場合は、表示される一覧表の左端のチェックボタンにチェックを入れ、「Delete」ボタンを押して下さい。

| <input type="checkbox"/>            | Experiment Set Name | Uploaded Date | Edit |
|-------------------------------------|---------------------|---------------|------|
| <input type="checkbox"/>            | TempSet_000001      | 2009/10/26    | Edit |
| <input checked="" type="checkbox"/> | MeJA treated cells  | 2009/10/26    | Edit |

Delete

### 3-6. ユーザーマップのメール送信(パワーユーザー専用)

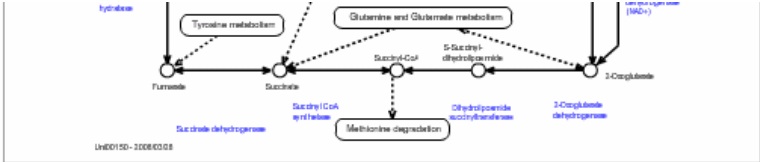
作成したユーザーマップは、簡単な操作で KaPPA-View4 管理者に送信することが可能です。デフォルトマップへの情報追加や修正をしたり、デフォルトマップにない生物種特異的なマップを作成したりして、公共性の高いマップが完成した場合には、ぜひ管理者にお

送り下さい。管理者側ではデフォルトマップとしての採用を検討させていただき、KaPPA-View4 がより質の高い解析環境を提供できるようにいたします。マップを採用するに当たっては、情報提供者の貢献を明記いたします。

データ一覧にマップデータが表示されている場合、「Send to Admin」ボタンが表示されます。送信したいマップにチェックをつけ、「Send to Admin」ボタンを押して下さい。

| <input type="checkbox"/>            | Map Name | Map Comment | Map Date   |
|-------------------------------------|----------|-------------|------------|
| <input checked="" type="checkbox"/> | My Map 1 |             | 2009/10/26 |

別ウィンドウが開き、マップのプレビューが表示されます。管理者に対するコメントを入力し、「Submit」ボタンを押すと、マップデータが送信されます。



マップの確認や掲載について詳細なご相談をするために、管理者は送信者にメールをお送りすることがあります。

コメント欄には、必ず以下の内容を書き添え下さい。コメントは日本語でも問題ありません。

- お名前  
貢献の明記に使用します。
- 所属機関  
貢献の明記に使用します。
- 連絡先メールアドレス

お送りいただいたユーザーマップについての確認などのため、管理者からの連絡用に使用します。

•ユーザーマップの用途

- 1) デフォルトマップへの情報追加
- 2) デフォルトマップの修正
- 3) デフォルトマップにないマップの追加

この場合、生物種、代謝経路ツリー上でどの位置に掲載するのが適当であるかも、合わせてお知らせ下さい

## 4. データ解析

この章では、KaPPA-View4 での解析の中心となるデータ解析機能、すなわち、実験データを代謝経路マップ上に表示する機能について解説します。

解析を始めるには、メインメニューの「Analysis」をクリックしてください。

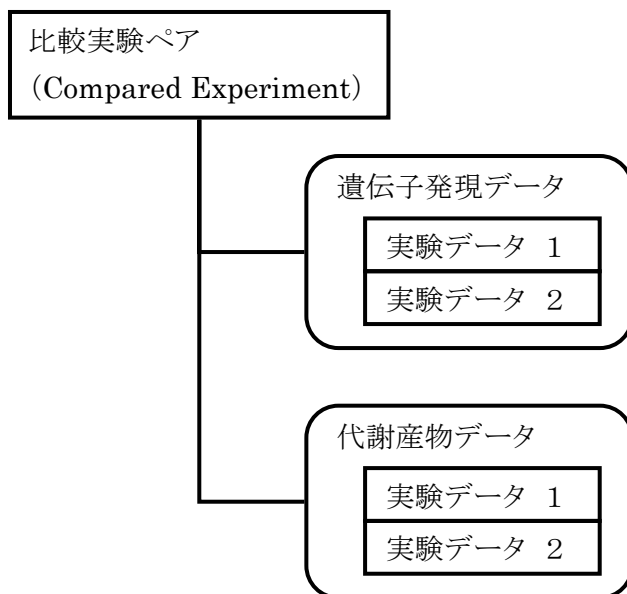
以下に示すように、KaPPA-View4 では様々なデータ解析機能を提供しています。

- 代謝マップ上で、遺伝子は□、化合物は○、酵素反応は矢印として表されています。実験データをもとに、これらのシンボルにその定量値や変化量を、色の変化として表示することができます。
- 最大 4 枚の代謝経路マップを並べて表示することができます。
- 任意の遺伝子 ID を入力することで、代謝マップ上に存在しない遺伝子の解析もできます。
- 関連データをマップ上に重ね描きすることができます。
- 代謝経路全体を俯瞰し、遺伝子発現や代謝物変化、関連データの分布を見ることができます。
- 複数の生物種のデータを比較表示することができます。
- 単一生物種の2種類のデータを比較表示することができます。

### 4-1. 閲覧データの選択

KaPPA-View4 では、遺伝子発現や代謝産物蓄積について、二つの実験間での変化量（比）や1実験での定量値を、マップ上のシンボルの色相として表現します。従って、データ解析の最初のステップは、代謝経路上に表示する実験データの選択から始まります。

KaPPA-View4 では、2実験間のデータ比較を、解析データの1単位としており、1実験の定量値は、その特殊な形として扱います。この1単位を、「比較実験ペア (Compared Experiment)」と呼びます。一つの比較実験ペアには、遺伝子発現か、代謝産物か、あるいはその双方の、それぞれ1対の比較実験データを登録します。



#### 4-1-1. 比較実験ペアの作成

メインメニューから「Analysis」をクリックすると、データ選択画面が表示されます。生物種 (Species)、実験の種別 (Experiment Type) を選択し、「Search」ボタンを押すと、登録されているデータのうち該当するものが下部に一覧表示されます。必要に応じて、アップロードしたユーザー名、日付、実験データに記載されていたメタデータなどの条件で、表示されるデータを絞り込んでください。

|                        |  |
|------------------------|--|
| Species                | Arabidopsis thaliana   |
| Experiment Type        | <input checked="" type="radio"/> TRANSCRIPT <input type="radio"/> METABOLITE   |
| Upload User            | All  |
| Upload Date            | 2009/10/01 - 2009/10/31  |
| Experiment Set Header  | -.Set ID<br>0044 <input checked="" type="radio"/> AND <input type="radio"/> OR |
| Experiment Data Header | Data_ <input checked="" type="radio"/> AND <input type="radio"/> OR            |

この一覧には、ユーザーが **3. データのアップロードと管理** に従ってアップロードしたデータや、KaPPA-View4 にデフォルトで登録されているデータが表示されます。

Analysis

|                        |  |
|------------------------|--|
| Species                | Arabidopsis thaliana   |
| Experiment Type        | <input checked="" type="radio"/> TRANSCRIPT <input type="radio"/> METABOLITE             |
| Upload User            | All  |
| Upload Date            | <input type="text"/> - <input type="text"/>  |
| Experiment Set Header  | Set_ <input type="text"/> <input checked="" type="radio"/> AND <input type="radio"/> OR  |
| Experiment Data Header | Data_ <input type="text"/> <input checked="" type="radio"/> AND <input type="radio"/> OR |













Search Reset


Showing 10 per page

Showing 1 - 2 of 2

|   | Set ID        | Set Name      | Array Type | No of Exp | Uploaded Date | Related Data |
|---|---------------|---------------|------------|-----------|---------------|--------------|
| ▶ | KES1          | Demo Data     | AGI codes  | 7         | 2009/09/16    |              |
| ▶ | Ath Demo Data | Ath Demo Data | AGI codes  | 4         | 2009/10/01    |              |

KaPPA-View4 では、いくつかの関連する実験データが一つの実験セットとして管理されています。たとえば、ある薬剤処理をした際の時系列のデータなどです。一覧表示の中で下向きの矢頭(▶)をクリックすると、その実験セットに含まれる個々の実験データが展開されて表示されます。

|   | Set ID        | Set Name           | Array Type   | No of Exp | Uploaded Date | Related Data |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |
|---|---------------|--------------------|--------------|-----------|---------------|--------------|--------|----------|---------|------|--|-------|--|--------------|--|-------|--|--------------|--|-------|--|--------------|--|-------|--|--------------|
| ▼   | Ath Demo Data | Ath Demo Data      | AGI codes    | 4         | 2009/10/01    |              |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |
| <table border="1"> <thead> <tr> <th>Exp ID</th> <th>Exp Name</th> <th>Comment</th> <th>Type</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td> TempExp_000001</td> <td>Ath A</td> <td></td> <td>quantitative</td> </tr> <tr> <td> TempExp_000002</td> <td>Ath B</td> <td></td> <td>quantitative</td> </tr> <tr> <td> TempExp_000003</td> <td>Ath C</td> <td></td> <td>quantitative</td> </tr> <tr> <td> TempExp_000004</td> <td>Ath D</td> <td></td> <td>quantitative</td> </tr> </tbody> </table> |               |                    |              |           |               |              | Exp ID | Exp Name | Comment | Type |  TempExp_000001 | Ath A |  | quantitative |  TempExp_000002 | Ath B |  | quantitative |  TempExp_000003 | Ath C |  | quantitative |  TempExp_000004 | Ath D |  | quantitative |
| Exp ID  | Exp Name      | Comment            | Type         |           |               |              |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |
|  TempExp_000001  | Ath A         |                    | quantitative |           |               |              |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |
|  TempExp_000002  | Ath B         |                    | quantitative |           |               |              |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |
|  TempExp_000003  | Ath C         |                    | quantitative |           |               |              |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |
|  TempExp_000004  | Ath D         |                    | quantitative |           |               |              |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |
| ▶   | KES000441D8   | MeJA treated cells | AGI codes    | 1         | 2009/10/26    |              |        |          |         |      |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |  |       |  |              |

実験データの左端にあるデータアイコン()をクリックすると、画面右上の「Selected Experiment」の欄に、そのデータ名が一つ登録されます。

## 4. データ解析

---

[Selected Experiment]  
Transcript  
Ath A  
Metabolite  
Compared Experiment Name  
Set001  
Add Clear All

別のデータを同様にクリックすると、二つ目の欄にデータ名が登録されます。

[Selected Experiment]  
Transcript  
Ath A  
Ath B  
Metabolite  
Compared Experiment Name  
Set001  
Add Clear All

もし、間違った実験データをクリックしてしまった場合は、「Selected Experiment」の欄にある除去アイコン(🗑️)をクリックすることで、データ登録を解除できます。

例えば1対の遺伝子発現データを選択した場合、引き続き上記と同様に代謝産物データを選択することができます。

[Selected Experiment]  
Transcript  
Ath A  
Ath B  
Metabolite  
Ath A  
Ath B  
Compared Experiment Name  
Set001  
Add Clear All

このような操作で、1対の遺伝子発現データ、1対の代謝産物データ、あるいはその双方を選択した後、「Compared Experiment Name」欄に比較実験ペア名を入力し、「Add」ボタンを押すと、1件の比較実験ペアが登録確定します。



[Selected Experiment]

Transcript

Ath A

Ath B

Metabolite

Ath A

Ath B

Compared Experiment Name

Ath 1

Add Clear All

登録確定した比較実験ペアは、「Compared Experiment List」欄に表示されます。

[Selected Experiment]

Transcript

Metabolite

Compared Experiment Name

Set001

Add Clear All

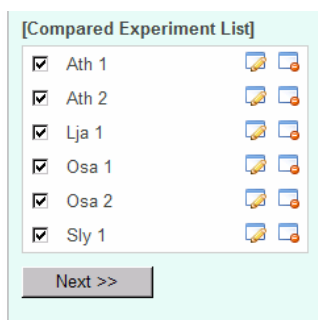
[Compared Experiment List]

Ath 1

Next >>

一度登録が確定した比較実験ペアを削除したい場合や、登録内容を再度編集したい場合は、比較実験ペア名の右側にある削除アイコン(🗑️)や、編集アイコン(✏️)をクリックしてください。編集アイコンをクリックした場合は、「Selected Experiment」欄に、実験データ名が反映されます。この状態で、実験データの選択を再度行い、「Add」ボタンを押すことで、編集内容が確定されます。

このような操作を繰り返し、比較実験ペアを複数作成することが可能です。



一度登録した比較実験ペアは、ログオフするまでは保持されますので、メニューの「Analysis」を押すことで、何回でも呼び出して利用することができます。

#### • 実験データの Type について

実験データ一覧の右端の「Type」欄に、「quantitative」と記載されているデータは、1実験の定量値を示したデータです。quantitative のデータは、2つを対にすることで、1つの比較実験ペアとして登録できます。

一方、「ratio」と記載されているデータは、DNA マイクロアレイによる2色法のデータのように、そのデータ自身がすでに比を計算したデータとなっています。このため、ratio のデータは、1つのデータだけで比較実験ペアとして登録できます。

|  |        |  |   |              |
|--|--------|--|---|--------------|
|  | KEP1_5 | [sample_B2] T87 cells - dark grown (10 days)                     | hybridized with [sample_B1]   | quantitative |
|  | KEP1_6 | [sample_C1] Leaves (38 days)                                     | hybridized with [sample_C2]   | quantitative |
|  | KEP1_7 | [sample_C2] Stems (80 days)                                      | hybridized with [sample_C1]   | quantitative |
|  | KEP1_8 | [sample_D log (ratio)] T87 cells - MeJA treated vs control (2hr) | Log (ratio) data of methyljasmonate (MeJA) treated and untreated (control) T87 cells. | ratio        |

実際には、ratio のデータは、quantitative で2つ選択するデータのうちの一方がコントロールであるものとして内部処理されます。

quantitative のデータは、遺伝子発現データは log スケールの値、化合物データは linear スケールの値 (0 以外) として処理され、比較実験ペアにおいて、その変化量 (比) を計算する際は、遺伝子発現データは2実験での値の引き算、化合物データは割り算が行われています。ratio データが選択された場合は、この比の計算の際に、遺伝子発現データでは 0 が、化合物データでは 1 が、架空の二つ目の実験データとして用いられ、比の計算が行われます。

## • 定量データの表示

代謝マップ上に、2実験間の変化量比ではなく、1実験の定量値を表現したい場合は、上記の性質を利用し、次の二つの方法で実現することができます。

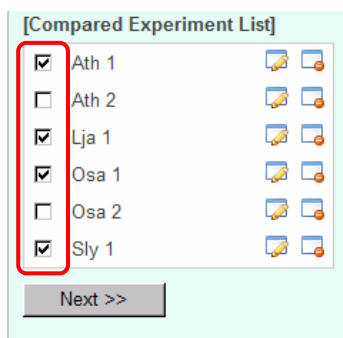
- 1) 定量データを **ratio** の実験データとしてアップロードしておき、それを利用する。
- 2) 定量データを **quantitative** の実験データとしてアップロードしておき、別途作成・アップロードしておいた、全遺伝子の値がゼロのデータ、あるいは全化合物の値が 1 のデータとの対を作り、比較実験ペアを作成する。

KaPPA-View4 では、色相のグラデーションを、遺伝子発現の場合は 0 を中心とした正負の値 (log スケール)、化合物の場合は 1 を中心とした正の値 (リニアスケール) として扱います。このため、1実験の定量データを表現する場合は、平均値や中央値などでグローバルノーマライズした値をもちいて実験データを作成しておくことをお勧めします。

### 4-1-2. 閲覧する比較実験ペアの選択

上述までに作成した比較実験ペアの中から、実際にマップ上に表示するためのデータを選択します。ここで選択した比較実験ペア (最大 8 件) は、マップ閲覧画面で、簡単なクリック操作で切り替えて閲覧することが可能です。用途に応じて、どの比較実験ペアを解析するかを選択して下さい。

「Compared Experiment List」から、表示に用いたい比較実験ペア名を選択します。



「Next」ボタンを押すと、次のページに移動します。

## 4. データ解析

| Analysis         |          |            |                      |   |
|------------------|----------|------------|----------------------|---|
| Compare Exp Name | Exp Name | Data Type  | Species              | Repetition  |
| Ath 1            | Ath A    | Transcript | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |
|                  | Ath B    | Transcript | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |
| Ath A / Ath B ▼  |          |            |                      |   |
| Compare Exp Name | Exp Name | Data Type  | Species              | Repetition  |
| Ath 1            | Ath A    | Metabolite | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |
|                  | Ath B    | Metabolite | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |
| Ath A / Ath B ▼  |          |            |                      |   |
| Compare Exp Name | Exp Name | Data Type  | Species              | Repetition  |
| Lja 1            | Lja A    | Transcript | Lotus japonicus      | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |
|                  | Lja B    | Transcript | Lotus japonicus      | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |
| Lja A / Lja B ▼  |          |            |                      |   |
| Compare Exp Name | Exp Name | Data Type  | Species              | Repetition  |
| Osa 1            | Osa A    | Transcript | Oryza sativa         | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |

このページでは、選択した比較実験ペアに含まれる対となった実験データのうち、どちらの実験データを分母として比の計算を行うかを指定します。

各実験データの下部にあるプルダウンリストで、それぞれの設定を行って下さい。

| Compare Exp Name | Exp Name |
|------------------|----------|
| Ath 1            | Ath A    |
|                  | Ath B    |
| Ath A / Ath B ▼  |          |
| Ath A / Ath B    |          |
| Ath B / Ath A    |          |

なお、ratio のデータが選ばれている場合には、分母分子の設定はできません。

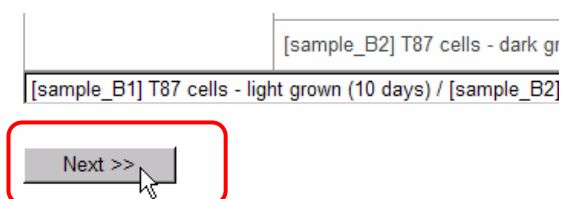
このページでは同時に、各実験データに含まれる複数回の繰り返しデータのうち、どのデータを有効とみなすかを設定します。各データに含まれる繰り返し実験番号が、リストの右端に表示されていますので、今回の解析に用いない繰り返しデータがある場合は、そのチェックを外して下さい。

| Analysis   |   |            |                      |   |
|--|---|------------|----------------------|---|
| Compare Exp Name   | Exp Name                                      | Data Type  | Species              | Repetition  |
| Ath Leaves / Cells   | [sample_A1] Leaves (21 days)                  | Transcript | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input type="checkbox"/> 2            |
|  | [sample_A2] T87 cultured cells (14 days)      | Transcript | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1 <input checked="" type="checkbox"/> 2 |
| [sample_A1] Leaves (21 days) / [sample_A2] T87 cultured cells (14 days) ▼                      |   |            |                      |   |
| Compare Exp Name   | Exp Name                                      | Data Type  | Species              | Repetition  |
| Ath Light / Dark   | [sample_B1] T87 cells - light grown (10 days) | Transcript | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1                                       |
|  | [sample_B2] T87 cells - dark grown (10 days)  | Transcript | Arabidopsis thaliana | <input checked="" type="checkbox"/> 1                                       |
| [sample_B1] T87 cells - light grown (10 days) / [sample_B2] T87 cells - dark grown (10 days) ▼ |   |            |                      |   |

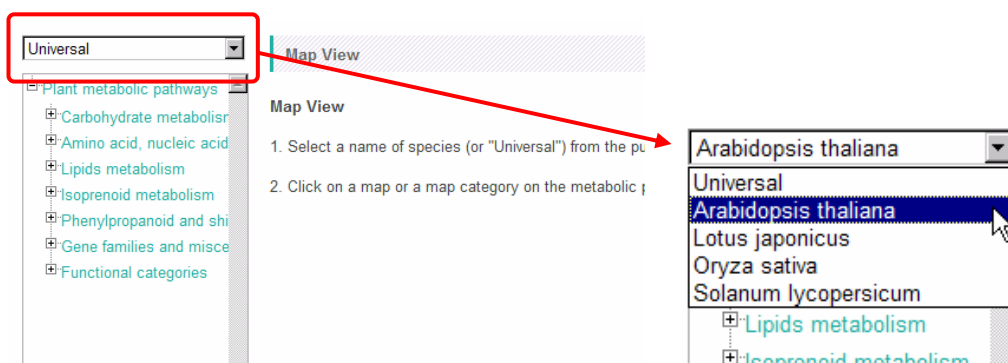
Next >>

実験データに繰り返しが含まれている場合、それぞれの遺伝子発現および代謝産物の値は、有効としてチェックした繰り返しデータだけを用いて平均値が計算されます。代謝マップ上では、その平均値をもとに色づけが行われます。

分母分子の設定、繰り返し分析の設定が終了したら、リストの一番下にある「Next」ボタンをクリックして下さい。データに基づいた代謝マップ表示画面へと切り替わります。

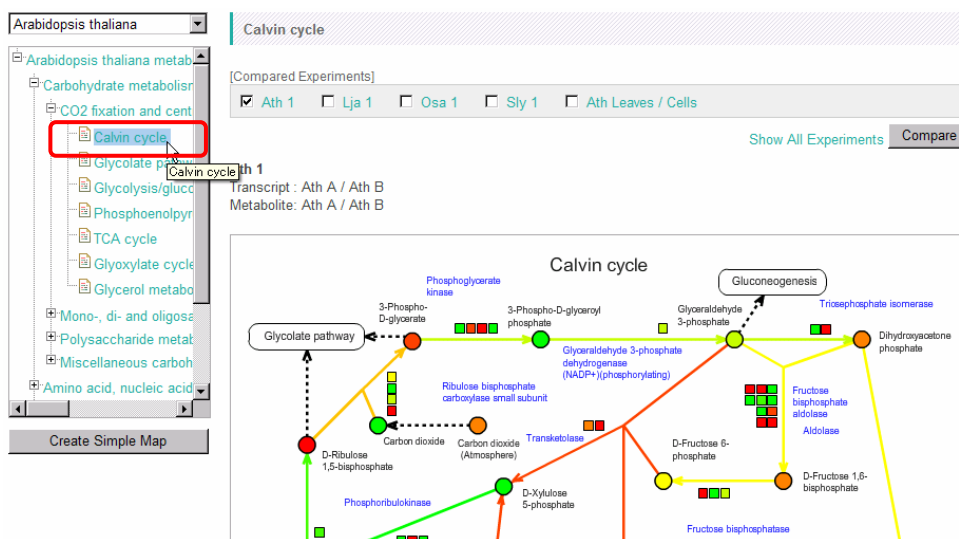


選択した比較実験ペアの生物種を、代謝マップツリーの上部のプルダウンリストから選択します。



代謝経路ツリー上で、閲覧したい代謝マップを選択すると、それが右の画面に表示されます。

## 4. データ解析



### 4-2. データの閲覧

#### 4-2-1. データ閲覧ウィンドウ

データを閲覧する画面は、主に 4 つの部分に分かれています。

The screenshot displays the KaPPA-View4 interface for the Calvin cycle. It is divided into four main sections:

- A: Navigation Tree**: A hierarchical tree on the left side showing the metabolic pathway structure. The 'Calvin cycle' is selected and highlighted in blue. Other categories include Carbohydrate metabolism, CO2 fixation and central carbon metabolism, Glycolate pathway, Glycolysis/gluconeogenesis, Phosphoenolpyruvate, TCA cycle, Glyoxylate cycle, and Glycerol metabolism. A 'Create Simple Map' button is located at the bottom of this tree.
- B: Control Panel**: Located at the top right, it shows 'Compared Experiments' with checkboxes for Set001, Set002, Set003, Set004 (checked), and Set005. Below this, it indicates 'Set004' with 'Transcript: Lja A / Lja B' and 'Metabolite: Lja A / Lja B'. There are buttons for 'Show All Experiments' and 'Compare'.
- C: Metabolic Map**: The central part of the interface shows a detailed metabolic map of the Calvin cycle. It includes various metabolites like 3-Phosphoglycerate, D-Ribulose 1,5-bisphosphate, and D-Fructose 6-phosphate, along with enzymes such as Phosphoglycerate kinase, Ribulose biphosphate carboxylase small subunit, and Fructose biphosphatase. The map is color-coded and includes a 'Gluconeogenesis' branch.
- D: Correlation Table**: Located at the bottom, it shows a table for 'Correlation Line' with columns for 'Gene', 'Compound', 'Correlation', 'Color', 'Range', and 'Number'. The 'Gene' row shows 'No Lines' with a red color and a range of 0.6 to 1.0. The 'Compound' row shows 'No Lines' with a green color and a range of 0.6 to 1.0. There are 'Update Correlation' and 'Add Related Map' buttons.

### A: 代謝経路ツリー

各生物種ごとに、代謝経路マップがカテゴリー分類され、ツリー状に表示されています。生物種の切り替えは、上部のプルダウンリストで行います。各マップ(枝)、各カテゴリー(ノード)をクリックすると、Cの領域に対応するマップが表示されます。生物種を選択するプルダウンリストには、「Universal」の項目があり、これを選択すると、全生物種の遺伝子を表示したマップが表示されます。

Universal 以外の生物種を選択されている場合には、ツリーの下部に **Create Simple Map** のボタンが表示されます。これは、遺伝子 ID の入力による簡易マップの作成に用いられます。

### B: 上部コントロールパネル

選択した **Compared Experiments** 名が表示されており、実験データの切り替えを行います。また、Universal マップモードでは、選択した実験を用いた比較表示が可能です。

## 4. データ解析

### C: マップ表示エリア

ツリーやコントロールパネルの設定に従ってマップを表示します。

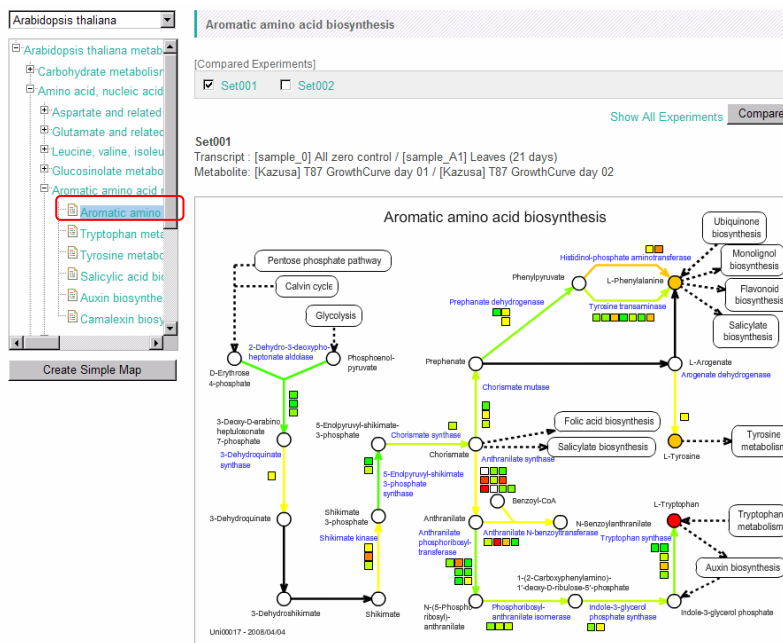
### D: 下部コントロールパネル

最大 4 枚のマップを並べて表示するための設定や、相関係数ラインの表示のためのコントロールパネルです。

## 4-2-2. 代謝経路ツリー

The Pathway Tree では、マップ表示をする生物種とマップの種類を選択します。それにより、マップ表示が変化します。ここでは、その対応関係を説明します。

ツリーの最下層が選択されている場合には、個別のマップが表示されます。



ツリーの間層(ノード)が選択されている場合には、そのカテゴリーに含まれる代謝マップを模式的に表したものが表示されます。これを”鳥瞰マップ”と読んでいます。鳥瞰マップでは、各代謝マップはインジケータバーとして表示されます。



Arabisidopsis thaliana

Arabisidopsis thaliana metab...  
 Carbohydrate metabolisr  
**Amino acid, nucleic acid**  
 Aspartate and related  
 Glutamate and related  
 Leucine, valine, isoleu  
 Glucosinolate metabo  
 Aromatic amino acid r  
 Serine, Glycine and c  
 Histidine and nucleic  
 Miscellaneous amino-  
 Lipids metabolism  
 Isoprenoid metabolism  
 Phenylpropanoid and sh  
 Gene families and misc

Amino acid, nucleic acid and nitrogen-containing derivative metabolism

View Thumb Nails View Birds Eye Map

Display Mode : Name Select

Amino acid, nucleic acid and nitrogen-containing derivative metabolism

Aspartate and related amino acid metabolism

Aspartate and asparagine metabolism  
 Lysine, threonine and methionine biosynthesis  
 Lysine degradation  
 Methionine metabolism  
 Glycine biosynthesis from methionine  
 Threonine and methylglutamate metabolism  
 Pyridine nucleotide biosynthesis

Acrotic amino acid metabolism

Acrotic amino acid biosynthesis  
 Tryptophan metabolism  
 Tyrosine metabolism  
 Salicylic acid biosynthesis  
 Auxin biosynthesis  
 Coenzyme biosynthesis

Serine, Glycine and cysteine metabolism

Serine and glycine metabolism  
 Cysteine and coenzyme metabolism  
 Glycine degradation  
 Homocysteine and cysteine interconversion  
 L-Cysteine degradation  
 Glutathione biosynthesis

Glutamate and related amino acid metabolism

Glutamate and Glutamine metabolism / Nitrate as...  
 Arginine and proline metabolism  
 Proline and 4-hydroxyproline metabolism  
 Biosynthesis of chlorophyll, proto and sticthene

Leucine, valine, isoleucine and alanine metabolism

Leucine, valine, isoleucine and alanine biosynthe...  
 Leucine, valine and isoleucine degradation

Histidine and nucleic acid metabolism

Histidine metabolism  
 Purine biosynthesis  
 Purine metabolism  
 Uridic metabolism  
 Pyrimidine biosynthesis  
 Pyrimidine metabolism  
 Cytosine metabolism

Glucosinolate metabolism

Methionine chain elongation pathway  
 Glucosinolate biosynthesis from methionine  
 Glucosinolate biosynthesis from tryptophan, phen...  
 Secondary modification of methylthioyl glucosi...  
 Secondary modification of indole-3-methyl glucosi...

Miscellaneous amino-acid-related metabolism

Anthraquinone biosynthesis  
 Glutathione and coenzyme A biosynthesis  
 Citrate biosynthesis  
 Folic acid biosynthesis  
 Formyl THF biosynthesis

上部コントロールパネルの **View Thumbnails** ボタンをクリックすると、各マップのサムネールがツリー構造に従って表示されます。

Arabisidopsis thaliana

Arabisidopsis thaliana metab...  
 Carbohydrate metabolisr  
**Amino acid, nucleic acid**  
 Aspartate and related  
 Glutamate and related  
 Leucine, valine, isoleu  
 Glucosinolate metabo  
 Aromatic amino acid r  
 Serine, Glycine and c  
 Histidine and nucleic  
 Miscellaneous amino-  
 Lipids metabolism  
 Isoprenoid metabolism  
 Phenylpropanoid and sh  
 Gene families and misc

Amino acid, nucleic acid and nitrogen-containing derivative metabolism

View Thumb Nails View Birds Eye Map

Amino acid, nucleic acid and nitrogen-containing derivative metabolism

Aspartate and related amino acid metabolism

Aspartate and aspara...  
 Lysine, threonine an...  
 Lysine degradation  
 Methionine metaboli...

Ethylene biosynthesi...  
 Threonine and methyl...  
 Pyridine nucleotide...

Glutamate and related amino acid metabolism

Glutamate and Glutam...  
 Arginine and proline...  
 Proline and 4-hydrox...  
 Biosynthesis of chlo...

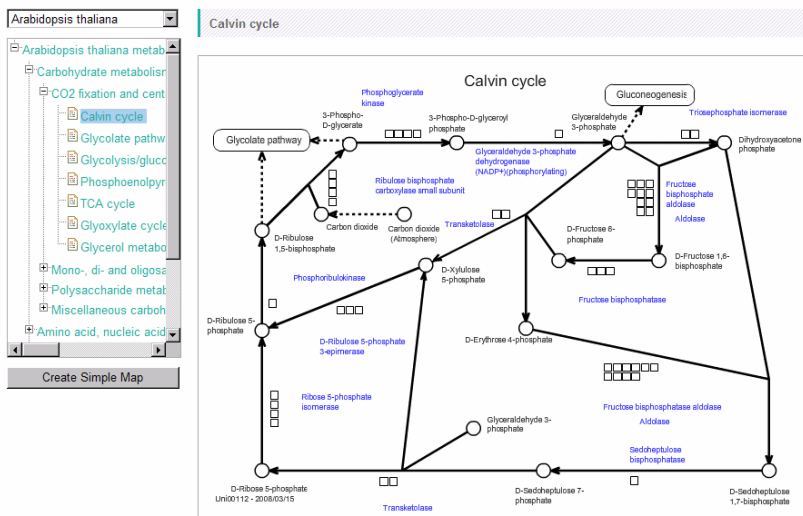
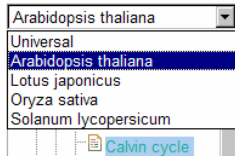
Leucine, valine, iso...

Leucine, valine and ...

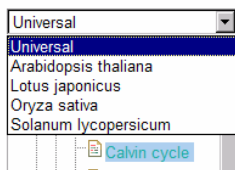
#### 4-2-3. マップモード

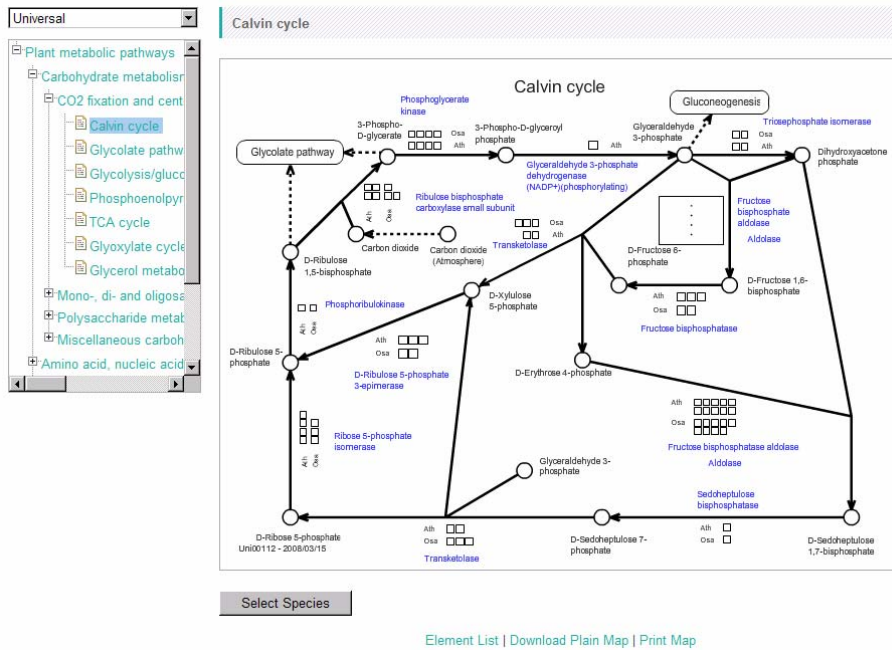
## 4. データ解析

代謝経路ツリーの上部にある生物種選択プルダウンリストでは、マップ表示する生物種を選択できます。個別の生物種名を選択すると、対応する生物種の遺伝子が表示されたマップが表示されます。これを **Species Map Mode** と呼びます。

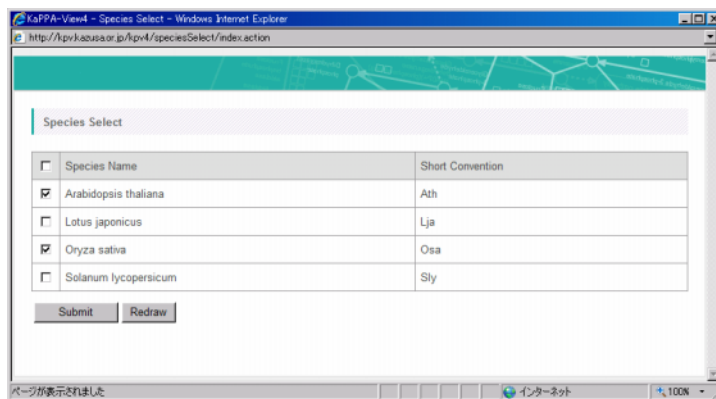


プルダウンリストから **Universal** を選択すると、登録されている全生物種の遺伝子を描画したマップが表示されます。これを”**Universal Map Mode**”と呼びます。





Universal Mode でマップ上に表示する生物種は、マップ下部にある"Select Species"ボタンを押すことで、ユーザーが選択可能です(下図)。遺伝子を表示したい生物種にチェックを入れ Submit ボタンを押した後、Redraw を押して下さい。



#### 4-2-4. 代謝マップ

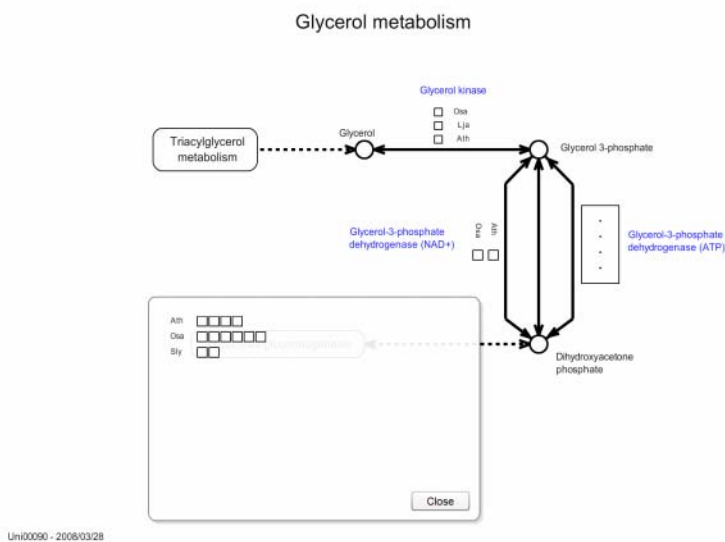
##### • マップのシンボル

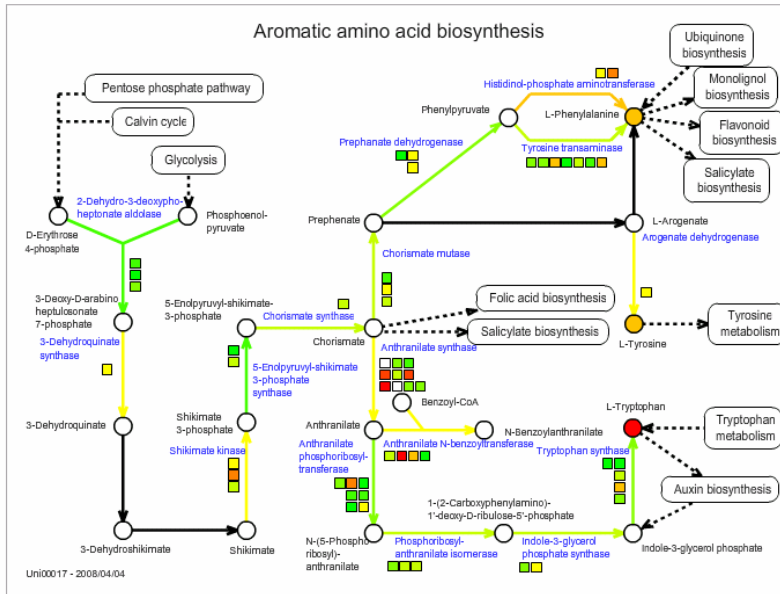
代謝マップ上では、遺伝子、化合物、酵素反応などの各要素は、以下に示すシンボルによって表されます。

| 要素 | シンボル | 備考 |
|----|------|----|
|----|------|----|

#### 4. データ解析

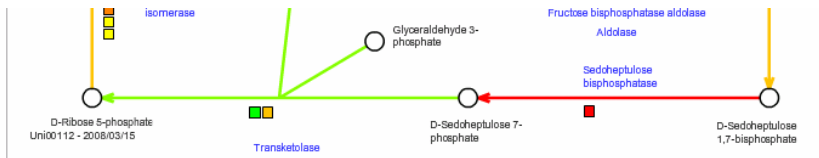
|            |                         |  |
|------------|-------------------------|--|
| 遺伝子        | □ (四角)                  |  |
| 代謝産物       | ○ (丸)                   |  |
| 酵素反応       | → (矢印)                  | 強度値は、その酵素反応に対応づけられている遺伝子発現量の平均値です。色分け表示も平均値に基づいて行われます。   |
| 他のマップへのリンク | 代謝経路名<br>(文字入り角丸四角)     | クリックすることで、他の代謝マップへ画面が切り替わります。  |
| 遺伝子群       | ....<br>(「....」が書かれた四角) | 酵素反応の近傍に多くの遺伝子を配置する十分な余白がない場合、このようなシンボルが表示されます。シンボルをクリックするとポップアップウィンドウが開き、遺伝子のシンボルを閲覧することができます。<br><b>Universal Map Mode</b> で複数の生物種が選択されている場合などによく表示されます。 |





• シンボルの色分け表示

シンボルの色は、ウィンドウ下端にある Color Legend で見ることが出来ます。



[Multiple Map]

Add Related Map

[Correlation Line]

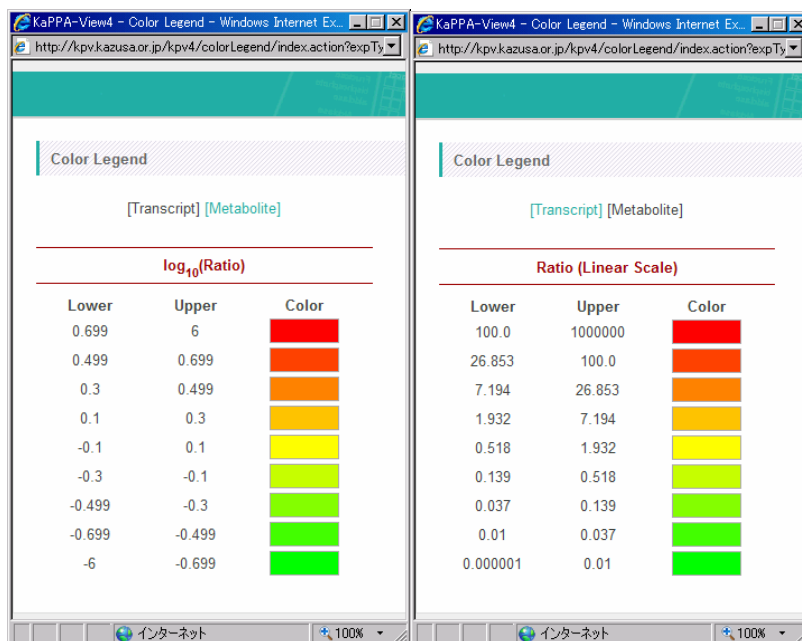
|          | Correlation | Color | Range     | Number     |
|----------|-------------|-------|-----------|------------|
| Gene     | No Lines    | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |
| Compound | No Lines    | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |

Update Correlation

[Element List](#) | [Correlation List](#) | [Histogram](#) | [Color Legend](#) | [Download Plain Map](#) | [Print Map](#)

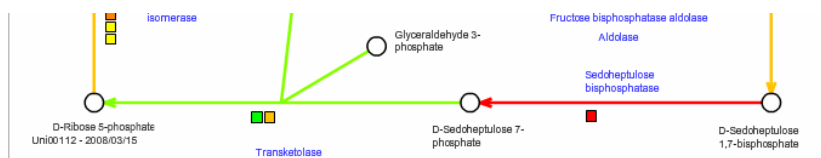
Compared Experiment の 2 実験間の変化比 (Ratio) が、Transcript は 10 を底としたログスケールで、Metabolite はリニアスケールで設定されています。

#### 4. データ解析



なお、酵素反応を示す矢印の色は、その酵素反応にアサインされている遺伝子の変化量の平均値を示しています。Universal Map Mode では、酵素反応には色がつきません。

色分け表示の設定は、ウィンドウ下端の Histogram で変更することができます。



[Multiple Map]

Add Related Map

[Correlation Line]

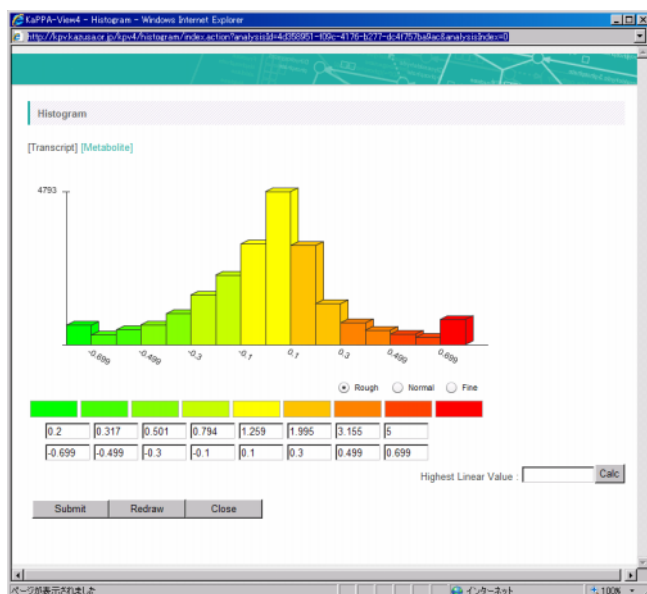
|          | Correlation | Color | Range     | Number     |
|----------|-------------|-------|-----------|------------|
| Gene     | No Lines    | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |
| Compound | No Lines    | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |

Update Correlation

Element List | Correlation List | **Histogram** | Color Legend | Download Plain Map | Print Map

ヒストグラム表示では、現在選択されている実験セットで、各値をもつ Transcripts または Metabolites の頻度分布を見ることが出来ます。また、各設定色の境界値が、リニアスケールとログスケール (Transcript のみ) でそれぞれ表示されています。

デフォルトでは、最大強度の色（赤）で示される値は、Transcript では 5, Metabolite では 100(ともにリニアスケール)が設定されています。



色設定を変更するには、最大強度（赤）で示される変化比率を「Highest Linear Value」に数値を入力し、Calc ボタンをクリックします。



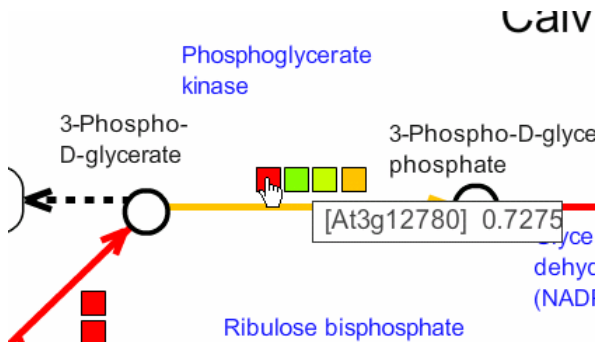
## 4. データ解析

Calc ボタンがクリックされると、各色の区切り値の幅が均等になるように自動計算されます。この設定でよければ、Submit ボタンを押して確定します。Redraw ボタンを押すと、代謝マップ上のシンボルが、設定した色で再描画されます。

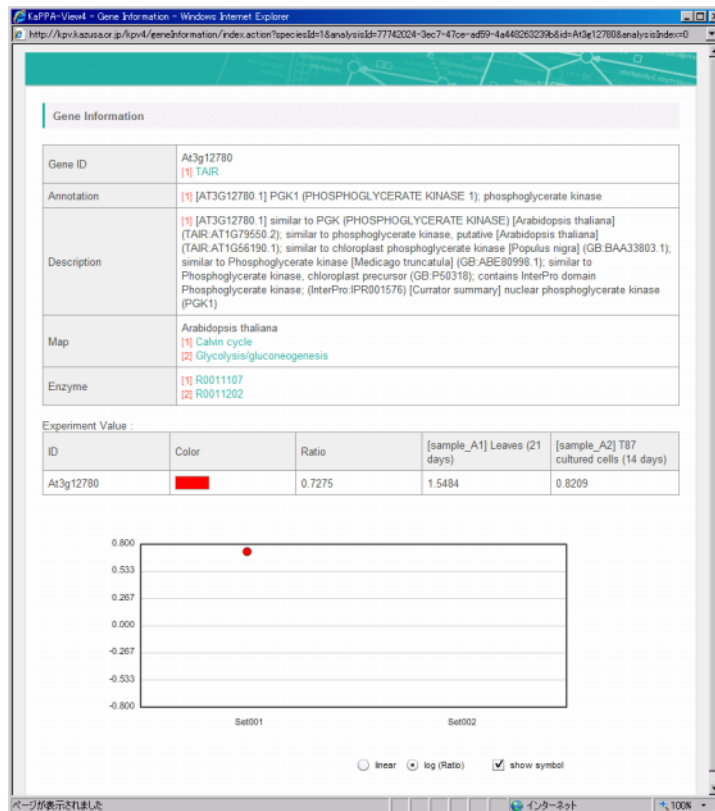
### • 各シンボルの実験値

各シンボルの値は、次の方法で知ることが出来ます。

- シンボル上にマウスオーバーする



- シンボルをクリックし、詳細情報を見る(詳細は [4-3. ポップアップ情報ウィンドウ](#)をご参照ください)





- 現在のマップ上の要素一覧を見る

ウィンドウ下端から **Element List** をクリックすると、現在閲覧しているマップに表示されている遺伝子、化合物、酵素反応の全要素一覧が表示されます。

| [Correlation Line] |             |       |           |            |
|--------------------|-------------|-------|-----------|------------|
|                    | Correlation | Color | Range     | Number     |
| Gene               | No Lines    | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |
| Compound           | No Lines    | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |

Update Correlation

[Element List](#) | [Correlation List](#) | [Histogram](#) | [Color Legend](#) | [Download Plain Map](#) | [Print Map](#)

Element List

Enzyme( 13 ) | Gene( 35 ) | Compound( 15 )

| Enzyme ID | Enzyme Name   | Compared Exp 1 |        |        |        |
|-----------|---|----------------|--------|--------|--------|
|           |   | Color          | Ratio  | Exp 1  | Exp 2  |
| R0011201  | RIBULOSE BISPHOSPHATE CARBOXYLASE SMALL SUBUNIT                   | RED            | 1.4998 | 2.3008 | 0.8011 |
| R0011202  | PHOSPHOGLYCERATE KINASE   | YELLOW         | 0.116  | 0.4468 | 0.3309 |
| R0011203  | Glyceraldehyde 3-phosphate dehydrogenase (NADP+)(phosphorylating) | RED            | 0.8422 | 1.8074 | 0.9652 |
| R0011204  | Triosephosphate isomerase (chloroplast)                           | YELLOW         | 0.0791 | 1.4173 | 1.4964 |
| R0011205  | Aldolase  | YELLOW         | 0.2117 | 0.4461 | 0.2344 |
| R0011206  | FRUCTOSE CYTOSOLIC  | RED            | 0.5226 | 0.8507 | 0.3281 |
| R0011207  | TRANSKETOLASE   | GREEN          | -0.392 | 0.5929 | 0.9849 |
| R0011208  | ALDOLASE  | YELLOW         | 0.2117 | 0.4461 | 0.2344 |
| R0011209  | SEDHEPTULOSE-BISPHOSPHATASE                                       | RED            | 0.7515 | 1.2917 | 0.5403 |
| R0011210  | TRANSKETOLASE   | GREEN          | -0.392 | 0.5929 | 0.9849 |
| R0011211  | RIBOSE 5-PHOSPHATE ISOMERASE                                      | YELLOW         | 0.1882 | 0.6595 | 0.4713 |
| R0011212  | D-RIBULOSE-5-PHOSPHATE 3-EPIMERASE                                | YELLOW         | 0.1387 | 0.7296 | 0.5909 |
| R0011213  | PHOSPHORIBULOKINASE   | RED            | 1.1259 | 1.2374 | 0.1115 |

| Gene ID   | Annotation  | Compared Exp 1 |        |        |        |
|-----------|---|----------------|--------|--------|--------|
|           |   | Color          | Ratio  | Exp 1  | Exp 2  |
| At1g32060 | [1] [AT1G32060.1] PRK (PHOSPHORIBULOKINASE); ATP binding / phosphoribulokinase/ protein binding | RED            | 1.1259 | 1.2374 | 0.1115 |
| At1g43670 | [1] [AT1G43670.1] fructose-1,6-bisphosphatase, putative / D-fructose-1,6-                       | ORANGE         | 0.4216 | 1.1312 | 0.7095 |

Universal マップモードの場合は一覧に表示する Species の選択を行うことができます。

Arabidopsis thaliana Select

| Enzyme ID | Enzyme Name                                     | Compared Exp 1 |        |       |       |
|-----------|---|----------------|--------|-------|-------|
|           |   | Color          | Ratio  | Exp 1 | Exp 2 |
| R0011201  | RIBULOSE BISPHOSPHATE CARBOXYLASE SMALL SUBUNIT | YELLOW         | 0.1269 | 0.508 | 0.381 |

### • 代謝マップの印刷

現在表示しているマップを印刷することができます。ウィンドウ下端から **Print Map** を押すと、印刷イメージがポップアップウィンドウに表示されます。右クリックから **Print** を選択し、印刷することができます。

| [Correlation Line] |             |       |           |            |
|--------------------|-------------|-------|-----------|------------|
|                    | Correlation | Color | Range     | Number     |
| Gene               | No Lines    | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |
| Compound           | No Lines    | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |

Update Correlation

Element List | Correlation List | Histogram | Color Legend | Download Plain Map | **Print Map**

### • 代謝マップのダウンロード

各マップのもととなっているデータは、SVG という形式で保存されたファイルです。このファイルをダウンロードし、フリーのドローソフト **Inkscape** で編集することで、ユーザーマップを簡単に作成することができます(詳細は、**ユーザーマップ作成マニュアル**をご参照ください)。ウィンドウ下端から **Print Plain Map** をクリックすると、ダウンロードダイアログボックスが出現しますので、ファイルを保存して下さい。

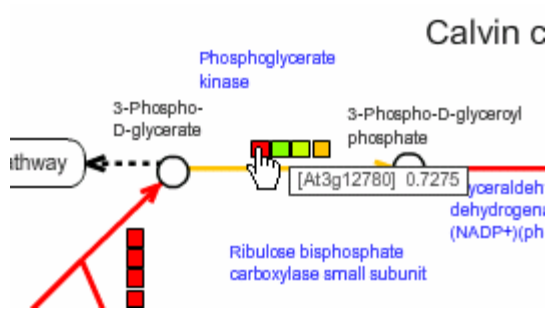
| [Correlation Line] |             |       |           |            |
|--------------------|-------------|-------|-----------|------------|
|                    | Correlation | Color | Range     | Number     |
| Gene               | No Lines    | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |
| Compound           | No Lines    | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |

Update Correlation

Element List | Correlation List | Histogram | Color Legend | **Download Plain Map** | Print Map

## 4-3. ポップアップ情報ウィンドウ

マップ上に描かれている遺伝子、化合物、酵素反応の各シンボルをクリックすると、その詳細情報がポップアップウィンドウに表示されます。各シンボルの値や、その要素が存在する他のマップが表示される他、外部データベースへのリンク等が存在します。



以下の例は、遺伝子シンボルをクリックした場合のポップアップウィンドウの例です。同一の生物種で複数の実験セットが選択されている場合など、実験間で比較できるデータが存在する場合は、ポップアップウィンドウの下部に、その値の変遷がグラフ表示されます。

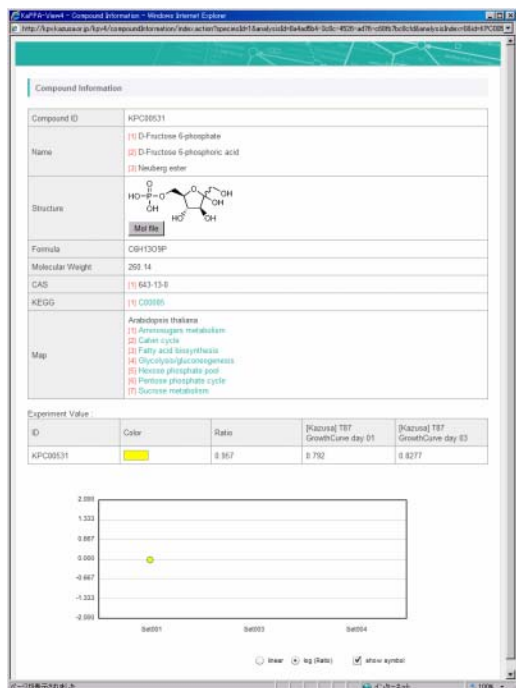


酵素反応のポップアップウィンドウでは、アサインされている遺伝子がすべて表示されます。グラフをクリックすることで、その遺伝子の詳細情報へジャンプすることができます。

#### 4. データ解析

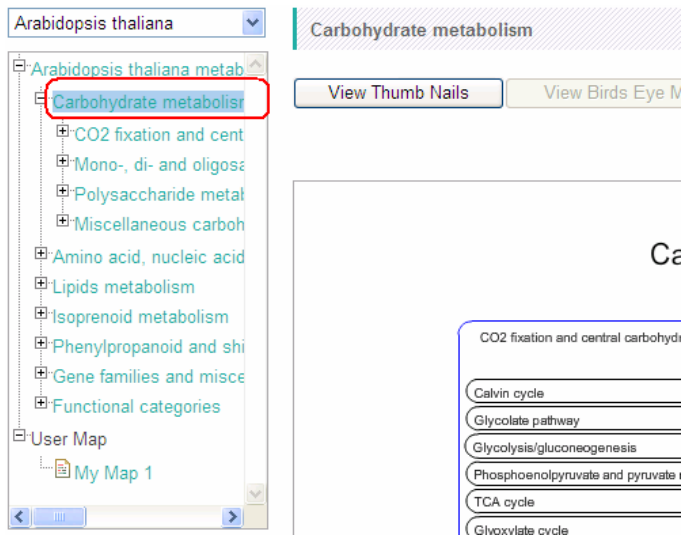


化合物詳細情報の例です。



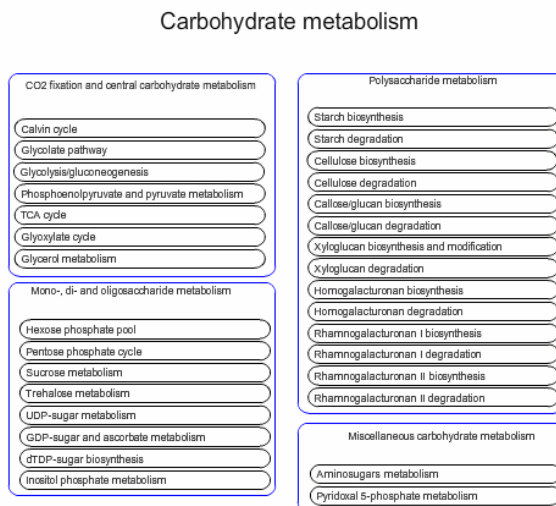
#### 4-2-5. 鳥瞰(Bird's Eye)マップ

代謝経路ツリーから中間階層を選択すると、Bird's Eye Map が表示されます。Bird's Eye Map では、そのカテゴリに含まれる各代謝マップが、一つのインジケータバーとして表現されています。インジケータバーや、それを取り囲むカテゴリ領域をクリックすると、対応する代謝マップおよびカテゴリのマップへとジャンプします。

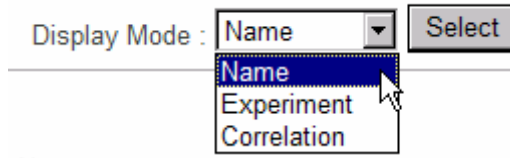


### • 代謝マップ名の表示

デフォルトでは、インジケータバーの中には、各マップ名が表示されています。

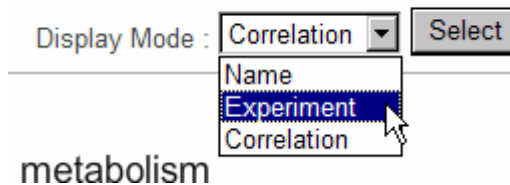


また Species Map Mode の時に、以降に示す実験データや関連データの表示モードに移行した場合は、画面右上の Display Mode から Name を選択し、Select ボタンを押すことで、マップ名表示に切り替わります。

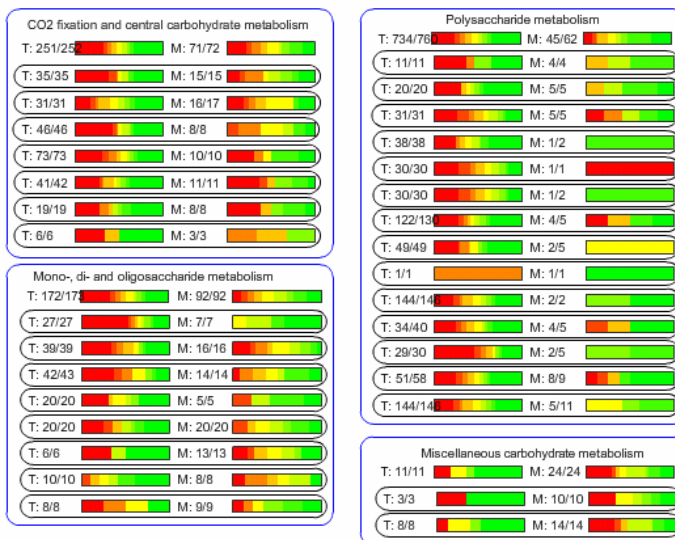


• 実験データの表示

Species Map Mode の時に、マップ右上にある Display Mode のプルダウンリストから、Experiment を選択し、Select ボタンをクリックすると、現在選択されている実験データに從って、遺伝子発現および代謝産物変化量のサーマリーが表示されます。



Carbohydrate metabolism



インジケータバーの表示は、次のことを表しています。

例)



#### T: 遺伝子(Transcripts)

分母はマップ上に描かれている遺伝子(43 個)、分子は現在解析しているデータ中に含まれる、値を持った遺伝子の数(42 個)

#### M: 代謝産物(Metabolites)

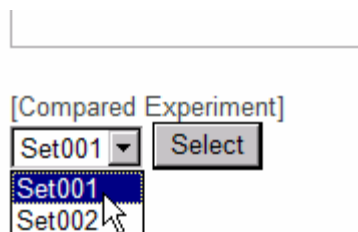
分母はマップ上に描かれている代謝物の数(14 個)、分子は、現在解析しているデータ中に含まれる、値を持った代謝物の数(8 個)

バーの色:

マップ上で、各色で表される要素数の割合

従って、バー全体がより赤くなっている経路は、選択した比較データにおいてその経路が全体的に活性化されていると考えることができます。

複数の比較実験が選択されている場合は、マップの左下に、どの実験セットのデータを表示するかを選択するプルダウンリストが表示されます。実験セット名を選択し、Select ボタンを押して下さい。

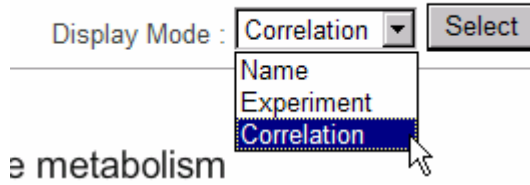


#### • 関連データの表示

遺伝子-遺伝子間または、代謝物-代謝物間の関係が、Map 上に何本存在するかを表示する事が出来ます。マップ上での関連ライン表示の詳細については、**4-4-3. 関連データの重ね描き機能**をご覧ください。

Species Map Mode の時に、マップ右上の Display Mode から Correlation を選択し、Select ボタンを押します。

#### 4. データ解析



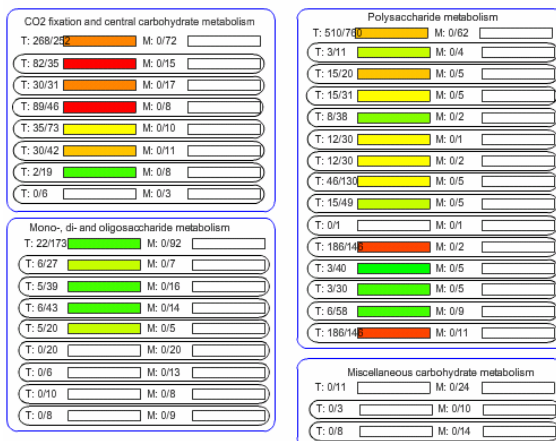
下部コントロールパネルから、表示させたい相関データを選択・設定し、Update Correlation のボタンを押します。

| [Correlation Line] |   |           |
|--------------------|---|-----------|
|                    | Correlation                                     | Range     |
| Gene               | Ath: ATTED-II AthGeneCor v3 (1388 chips) >= 0.6 | 0.6 ~ 1.0 |
| Compound           | No Lines  | 0.6 ~ 1.0 |

Update Correlation

すると、下図のように、マップに含まれる関連性の本数を表した表示がなされます。

#### Carbohydrate metabolism



T:とM: の脇に書かれた数字は、各マップのインジケーターバーでは、マップ上での関連性の本数 / マップに描かれている重複しない遺伝子および化合物の数を示しています。中間階層では、分母・分子とも、その階層に含まれる全マップ上の本数の合計を表しています。

インジケーターバーの色分けは、次のように行われています。

$$V = \log_{10}(\text{関連性の本数} / \text{要素数})$$



$V_{max}$  = 現在表示されている階層以下での  $V$  の最大値

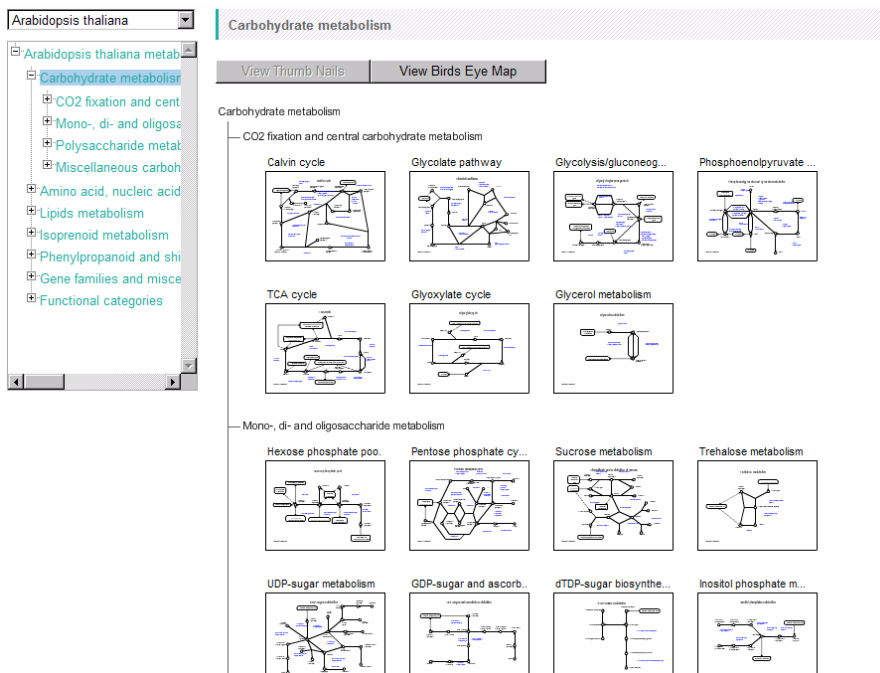
$V_{min}$  = 現在表示されている階層以下での  $V$  の最小値

としたとき、 $V_{max}$  を示すマップ(または中間階層)が最大強度の色、 $V_{min}$  を示すマップ(または中間階層)が最小強度の色で表示され、それ以外は、 $V_{max} - V_{min}$  を均等に区分けしたときに該当する色相で表示されます。

このような定義により、描かれている要素数に対して関連性の本数が多い(密度が濃い)部分が、より強い色相で表示されることになります。

#### 4-2-6. マップのサムネイル表示

代謝経路ツリーから中間階層を選択し、View Thumbnailsを選択すると、各代謝マップが縮小されたものが、ツリー構造に従って一覧表示されます。マップをクリックすることで、対応するマップにジャンプすることが出来ます。



#### 4-4. データ解析機能

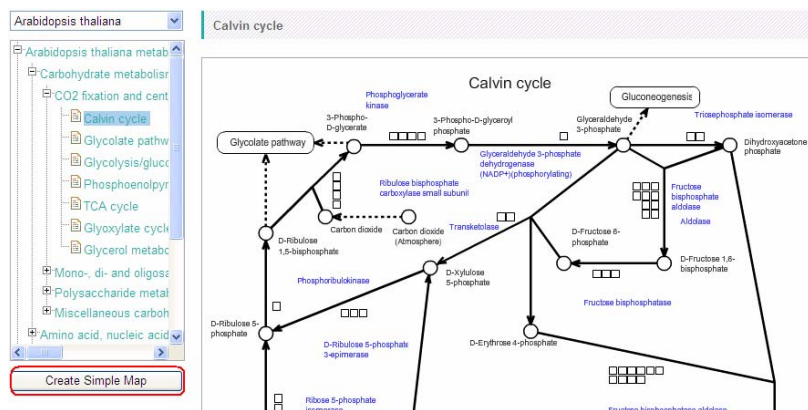
この節では、KaPPA-View4 を用いたデータ解析について解説します。これまでに紹介したデータ閲覧方法の他に、KaPPA-View4 では多彩なデータ表現方法を実装しており、それらを組み合わせることで、遺伝子機能解析を促進するツールとしてご使用いただけます。

### 4-4-1. 簡易マップ

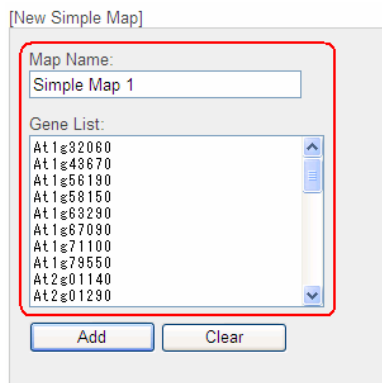
KaPPA-View4 は、代謝経路マップを主体としたビューワーであるため、代謝経路マップ上に描かれられないような遺伝子(発現調節因子など)は、デフォルトの状態では見ることが出来ません。一方、マイクロアレイ解析のデータには、様々な遺伝子の発現情報が含まれています。そこで、KaPPA-View4 では、代謝経路上に描かれられないような遺伝子でも、発現量変化の色表示をするための機能を提供しています。

KaPPA-View4 に登録されている遺伝子のリストは、Download ページからダウンロード出来ます。ここに登録されている遺伝子 ID を用いることで、任意の遺伝子を□としてタイル状にならべた簡易マップを作成することが出来ます。

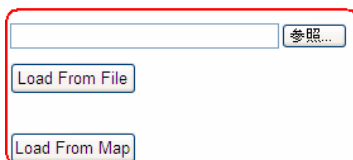
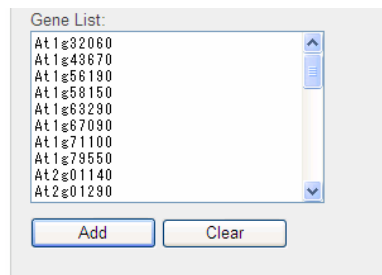
マップを作成するには、代謝マップツリーの下部に表示される「Create Simple Map」ボタンをクリックします。当機能はユニバーサルマップ、Birds Eye View、Thumbnail View 表示時は使用できません。



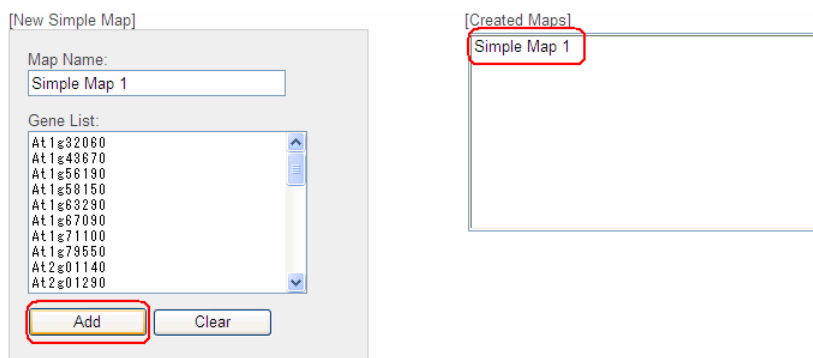
表示されるポップアップ画面上で、遺伝子 ID を入力し、適当なマップ名を入力して Add ボタンをクリックします。



遺伝子 ID は直接入力するだけでなく、ID を改行で区切ったテキストファイルを準備しておきそれを選択したり (Load From File)、現在表示中のマップから取得したり (Load From Map) することも可能です。

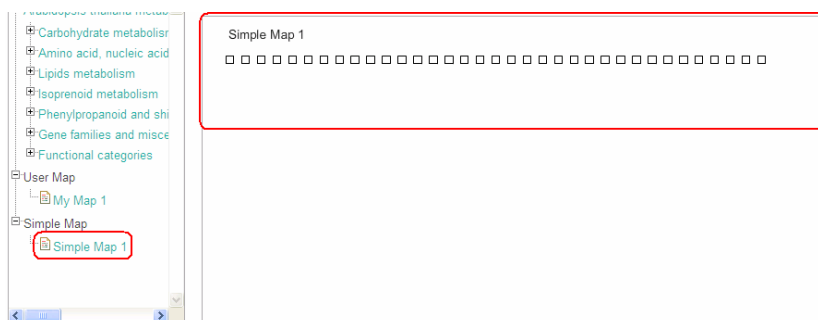


Add ボタンをクリックして登録されたマップ名は、Created Maps に表示されます。



Redraw ボタンをクリックして、ツリーを更新します。

登録された簡易マップ名は、ツリーの **Simple Map** の欄に表示されます。マップ名をクリックすると、遺伝子がタイル状に並んだ簡易マップが表示されます。

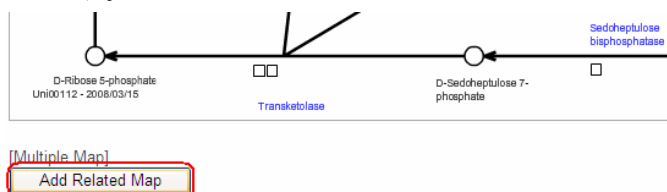


一度に登録できる遺伝子の数に制限はありませんが、多数の遺伝子に登録すると画面上に描ききれなくなることがありますのでご注意ください。

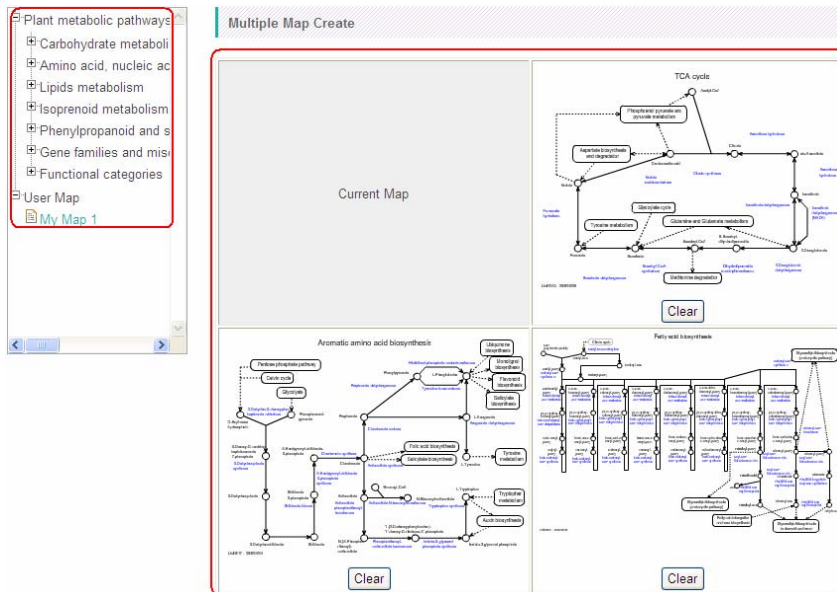
#### 4-4-2. マルチプルマップ表示

特定の代謝マップに対して、その他の代謝マップや、作成した **Simple Map**、ユーザーマップなどを比較解析したい場合があります。特に、関連する代謝マップ群を並べて表示させたり、**Simple Map** として作成した転写調節因子群と、それが制御することが予想される代謝経路を比較したりすることで、遺伝子発現データをより深く考察することができます。**KaPPA-View4** では、最大 4 枚の代謝マップを並べて表示することが可能です。

**Species Map Mode** では、下部コントロールパネルに「Add Related Map」のボタンが出現します。このボタンをクリックすると、マップの組み合わせを選択するポップアップが表示されます。



並べて表示する 4 枚のマップのうち、左上のマップは、現在マップツリー上で現在選択されているマップとなります。このため、ポップアップ画面上のプレビュー画面で左上の部分には「Current Map」と表示されています。ポップアップ画面上のツリーから、並べて表示させたいマップを選ぶと、プレビュー画面の右上、左下、右下の順に、選択したマップが順次追加されます。選択したマップをクリアしたい場合には、各プレビュー画面の下部にある「Clear」ボタンを押して下さい。



マップの選択は 3 枚全てを行う必要はありません。

マップの選択後、マップセット名 (Name) を入力してから Add ボタンをクリックし、マップの組み合わせを登録します。

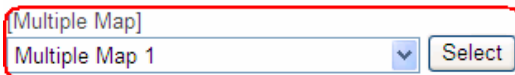
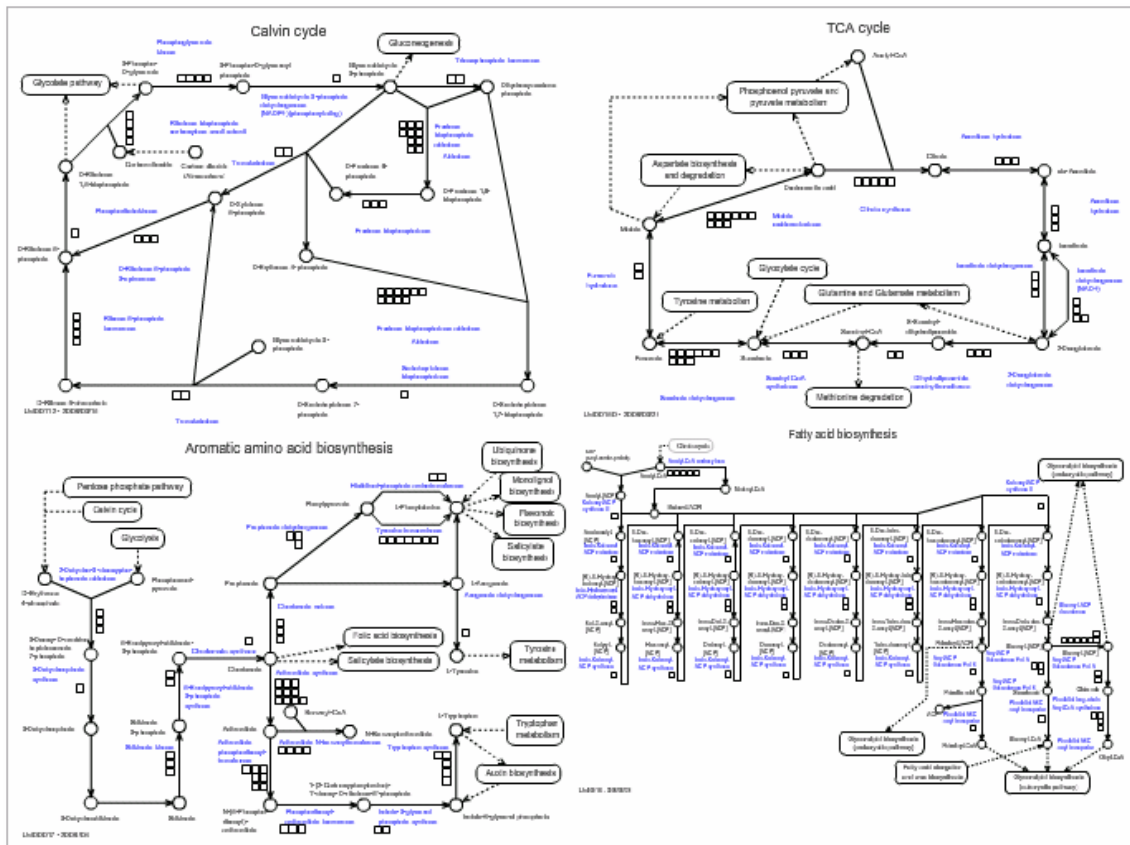
Name :

Redraw ボタンをクリックしてマップ画面を更新します。

Name :

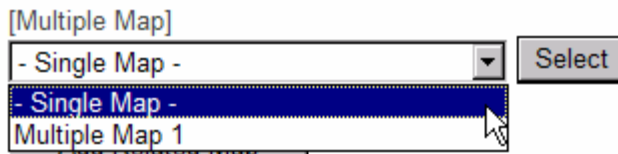
ポップアップ表示を閉じ、メインウィンドウのマップの下部を見ると、Multiple Map のプルダウンリストが出現しています。登録したマップセット名を選択し、Select ボタンをクリックすると、並べられたマップが表示されます (Multiple Map Mode)。

## 4. データ解析



Multiple Map モードでは、左上のマップは代謝マップツリーと連動しています。ツリーから他の代謝経路マップを選択すると、左上のマップだけが入れ替わります。

単一マップ表示に戻りたい場合は、「Multiple Map」のプルダウンリストから「Single Map」を選択し、Select を押します。



### 4-4-3. 関連データの重ね描き機能

公共データベースに大量のマイクロアレイデータが公開されたことにより、様々な実験条件下での遺伝子発現データから、遺伝子の共発現性解析が行えるようになりました。機能が似ている遺伝子や、特定の機能に協調して関与している遺伝子は、発現特性が似ていることが推測されます。遺伝子間の共発現性を相関係数などの数値で表すことで、遺伝子間の機能関連性を調べる解析が、近年多く行われています。このような解析で鍵となるのは、強い相関関係で結ばれた遺伝子群がどのような機能に関連しているかをいかに素早く理解できるかです。

KaPPA-View4 では、遺伝子間の関連性をマップ上に表現することにより、相関解析の解釈をお手伝いします。また、代謝産物間の関連性も図示することが可能であり、これは将来、代謝産物蓄積相関解析に利用できる機能です。

入力データは、フォーマットに従えば何でも構いませんので、たとえば知識ベースで整理されたタンパク質間相互作用や、文献に出現する遺伝子間の関連性などを図示するなど、様々な応用が可能です。

### • データの選択と表示

Species Map Mode では、下部コントロールパネルに「Correlation Line」のパネルが出現します。Gene, Compound それぞれについて、Correlation の欄から表示したいデータを選択し、Update Correlation ボタンを押します。

[Correlation Line]

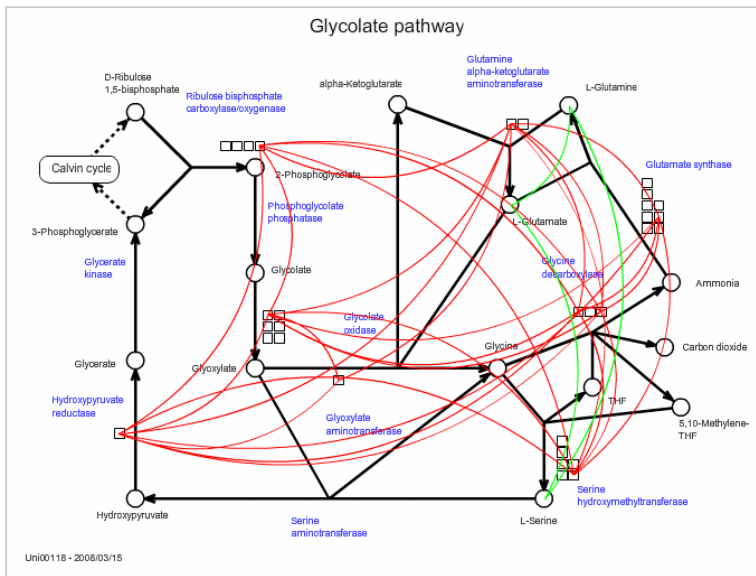
|          | Correlation                              | Color | Range     | Number      |
|----------|--|-------|-----------|-------------|
| Gene     | Ath: ATTED-II AthGeneCor_v3 (1388 chips) | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 30 |
| Compound | Demo data - from time course exps. of dn | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 3  |

Update Correlation

デフォルトでは、ATTED-II に登録された遺伝子共発現データおよび、代謝物間の蓄積相関のデモデータが登録されています(詳細は 10. デフォルトデータをご参照ください)。また、ユーザーが作成したデータをアップロードすると、そのデータを Correlation の欄から選択できるようになります(3-4. 相関データのアップロードを参照)。

すると、表示されているマップ上に、選択した相関関係で結ばれる遺伝子、または化合物がある場合に、それらが曲線で結ばれます。曲線の色は、コントロールパネルの Color で選択可能です。

#### 4. データ解析



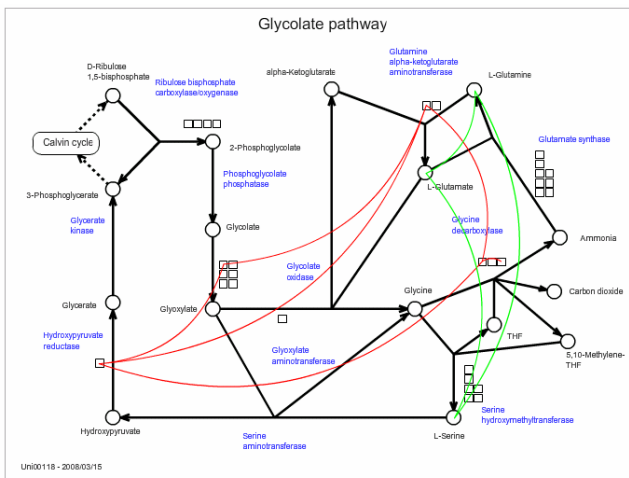
#### • 表示データの制御（データ範囲の設定）

表示したい相関係数は、二つの方法で絞り込むことができます。

ひとつは、相関係数の範囲です。デフォルトでは、0.6～1.0 が指定されていますが、Range を-1.0～1.0 の範囲で任意に変更することで、表示を変えることができます。

|          | Correlation                               | Color | Range      | Number     |
|----------|---|-------|------------|------------|
| Gene     | Ath: ATTED-II AthGeneCor_v3 (1388 chip:)  | RED   | 0.85 ~ 1.0 | High 0 / 6 |
| Compound | Demo data - from time course expts. of dn | GREEN | 0.6 ~ 1.0  | High 0 / 3 |

Update Correlation





### • 表示データの制御 (表示本数の設定)

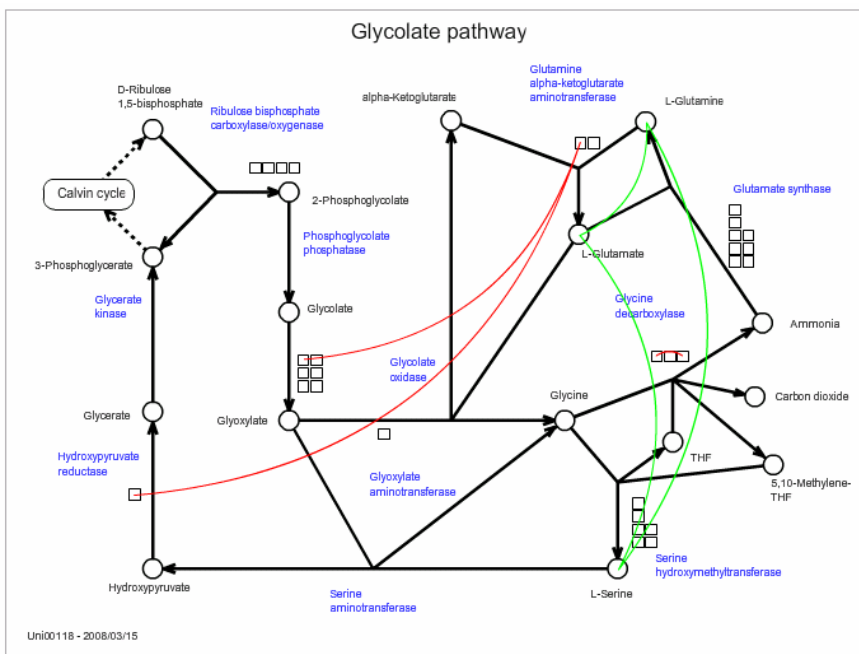
もう一つは、表示する本数で、Number の欄で指定します。

Range で指定された相関係数範囲のうち、値が大きい(High)、あるいは小さい(Low)順に、何本のラインを表示させるかを指定出来ます。

たとえば、Number の欄に High および 3 を指定すると、Range で指定された 0.6~1.0 の範囲で、上位 3 本(すなわち、最大の相関関係上位 3 本)が表示されます。

| [Correlation Line] |   |       |           |        |        |
|--------------------|---|-------|-----------|--------|--------|
|                    | Correlation                               | Color | Range     | Number |        |
| Gene               | Ath: ATTED-II AthGeneCor_v3 (1388 chip:)  | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High   | 3 / 30 |
| Compound           | Demo data - from time course exps. of dr: | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High   | 0 / 3  |

Update Correlation



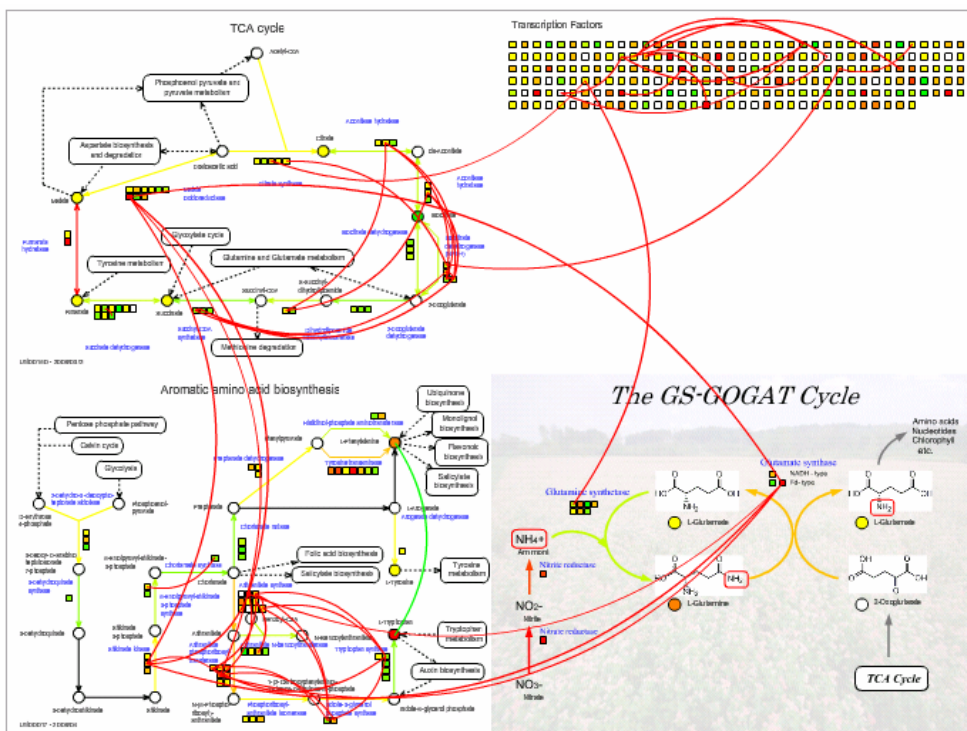
現在設定されている Range で結ばれる相関係数の本数は、/に続く数値で示されています(上図では遺伝子 30 本、化合物 3 本)。

Number の設定を解除したい場合は、本数の欄に 0 を入力し、Update Correlation ボタンを押して下さい。

### • マルチマップ上での相関表示

相関関係の表示は、Multiple Map View モードでも描画する事ができ、マップ間での関係を解析することが可能です。下図は、Simple Map, User Map を含めた Multiple Map View において相関データを表示した例です。

## 4. データ解析



### ● 相関データの詳細表示

現在描かれている相関ラインの一覧は、ウィンドウ下端の Correlation List で入手できます。

|          | Correlation | Color | Range     | Number     |
|----------|-------------|-------|-----------|------------|
| Gene     | No Lines    | RED   | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |
| Compound | No Lines    | GREEN | 0.6 ~ 1.0 | High 0 / 0 |

Update Correlation

[Element List](#) | 
 [Correlation List](#) | 
 [Histogram](#) | 
 [Color Legend](#) | 
 [Download Plain Map](#) | 
 [Print Map](#)

ポップアップウィンドウが開き、Correlation の一覧が表示されます。

| Gene 1    | Gene 2    | Coefficient |
|-----------|-----------|-------------|
| At1g32060 | At3g55800 | 0.926       |
| At1g32060 | At3g26650 | 0.921       |
| At1g32060 | At3g54050 | 0.909       |
| At2g21330 | At3g55800 | 0.903       |
| At3g55800 | At4g38970 | 0.9         |
| At1g32060 | At4g38970 | 0.9         |
| At3g26650 | At4g38970 | 0.893       |
| At3g54050 | At3g55800 | 0.893       |
| At3g12780 | At3g54050 | 0.887       |
| At2g21330 | At3g54050 | 0.879       |

| Compound 1 | Compound 2 | Coefficient   |
|------------|------------|---------------|
| KPC00486   | KPC00182   | 0.86572265625 |
| KPC01099   | KPC00570   | 0.8447265625  |

#### 4-4-4. 1生物種内における2実験の比較

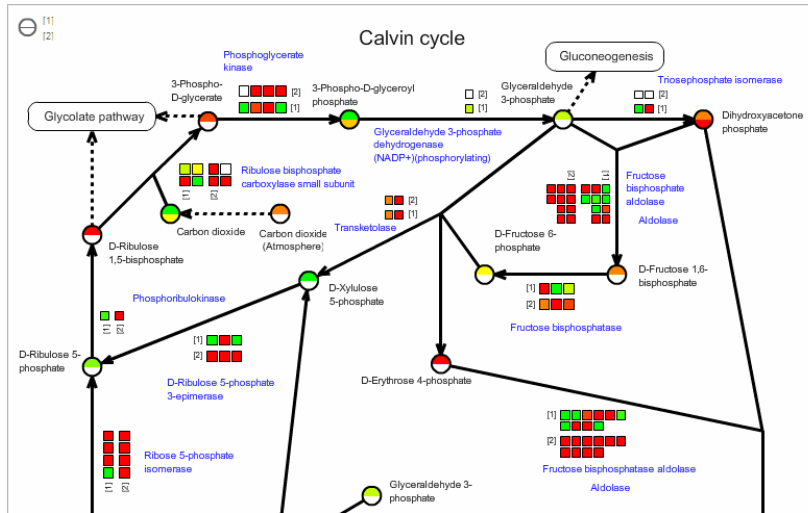
特定の生物種の実験データが複数ある場合、その中から2つを選択して同一のマップ上に表示して比較することができます。当機能は Universal マップ、ユーザーマップ、シンプルマップでは利用できません。

上部コントロールパネルで、表示する解析結果にチェックを入れ、「Compare」ボタンをクリックします。

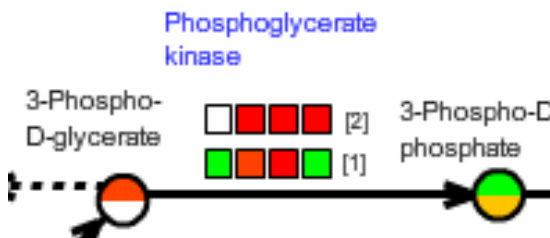


## 4. データ解析

[1] Set001  
 Transcript: Ath A / Ath B  
 Metabolite: Ath A / Ath B  
 [2] Set002  
 Transcript: dark grown T878233  
 Metabolite: Ath A / comp test1



遺伝子は、それぞれの実験が[1], [2]のラベルで表されています。対応する Compared Experiment は、マップ上部のタイトルでご確認ください。



化合物を表す円は上下二つに分割されています。マップの左上に、どちらがどの実験セットかを示す案内が表示されていますので、ご確認ください。



Compare モードでは、酵素反応への色づけは行われません。

### 4-4-5. 生物種間での実験データ比較

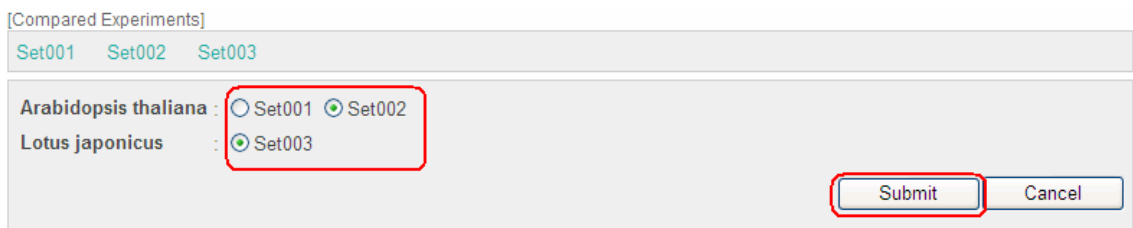
複数の生物種の実験データが存在する場合、1生物種につき1実験データを選択し、同一マップ上に表示して比較することが可能です。この機能は、**Universal Map Mode** のみで利用可能です。

**Universal Map Mode** の **Show All** ボタンをクリックすると、実験選択画面がその下部に展開されます。

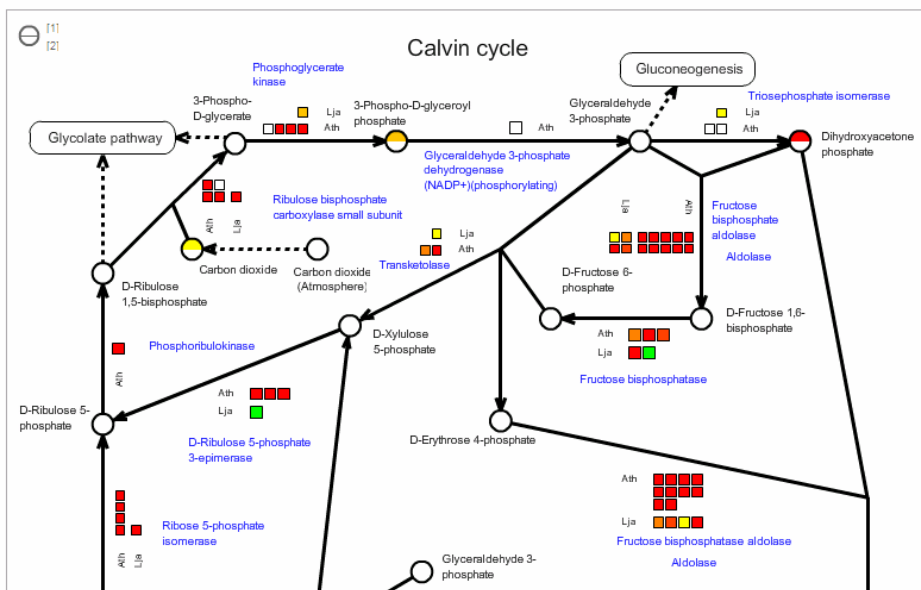


使用する解析結果を生物種ごとに一つずつ選択し、**Submit** ボタンをクリックします。

下図の例では、*Arabidopsis thaliana* の2つのデータと *Lotus japonicus* の1つのデータが存在する場合を示しています。



- [1] Set002  
Transcript : dark grown T878233  
Metabolite: Ath A / comp test1
- [2] Set003  
Transcript: Lja A / Lja B



マップ上には前項と同様な表示がなされます。遺伝子については、各生物種を示す省略名が記載されており、アサインされている遺伝子数も異なっていることに注目してください。

注意:

このモードでは、**Show All** で実験データを選択した生物種と、設定されている **Universal Map** に表示する生物種を選択が一致している必要があります。うまく表示されない場合は、マップ画面下部の生物種選択をし直した後に、該当する生物について **Show All** での実験選択を行って下さい。

### **4-4-6. 全実験データの並列表示**

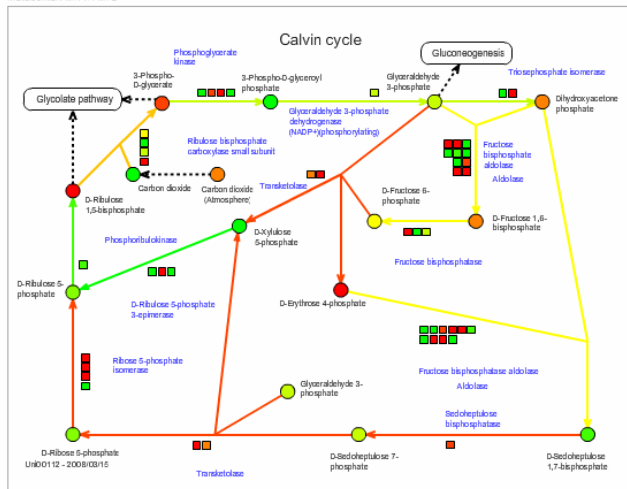
解析結果が複数ある場合、生物種を問わず全ての解析結果を一覧で表示することができません。当機能は **Universal** マップでは利用できません。

**Show All Experiments** リンクをクリックします。

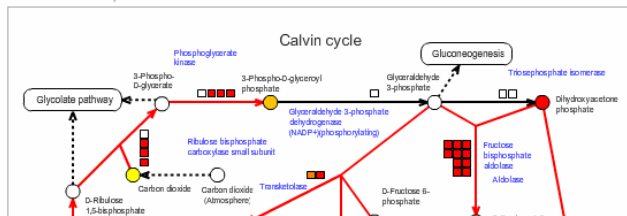


ウィンドウがポップアップし、全ての解析結果が一覧で表示されます。

Set001  
Transcript: Ath A / Ath B  
Metabolite: Ath A / Ath B



Set002  
Transcript: dark grown T875233  
Metabolite: Ath A / comp test1



## 5. マップ閲覧機能

---

KaPPA4 では、4.で解説したように実験データをした上での解析の他に、実験データを選択せずに、色分け表示を行わない状態の代謝マップを表示することもできます。マップを表示するにはメインメニューの **Map View** をクリックします。

各コントロールパネルや情報ポップアップウィンドウは、実験データが存在するときに比べて選択できる項目が少なくなっていることがありますが、基本的には実験データが存在するときと同様の表示が可能です。



## 6. 検索

メニューバーの Search では、KaPPA-View4 に登録されている Gene、Compound、Enzyme を検索する機能を提供しています。各要素が、どの生物種のどのマップ上に存在しているかを調べたりすることができます。

### 6-1. 遺伝子、化合物、酵素反応の検索

検索条件を入力し、Search ボタンをクリックします。

下図は、"glutamine"のキーワードに該当する遺伝子のアノテーションをシロイヌナズナのデータから検索する例を示しています。

|                                       |   |
|---------------------------------------|---|
| Search Target                         | Gene <input type="button" value="Annotation"/>  |
| Species                               | Arabidopsis thaliana <input type="button"/>   |
| Key word                              | glutamine <input type="button" value="AND"/> <input type="button" value="OR"/><br>max. 5 key-words separated by space |
| <input type="button" value="Search"/> |   |

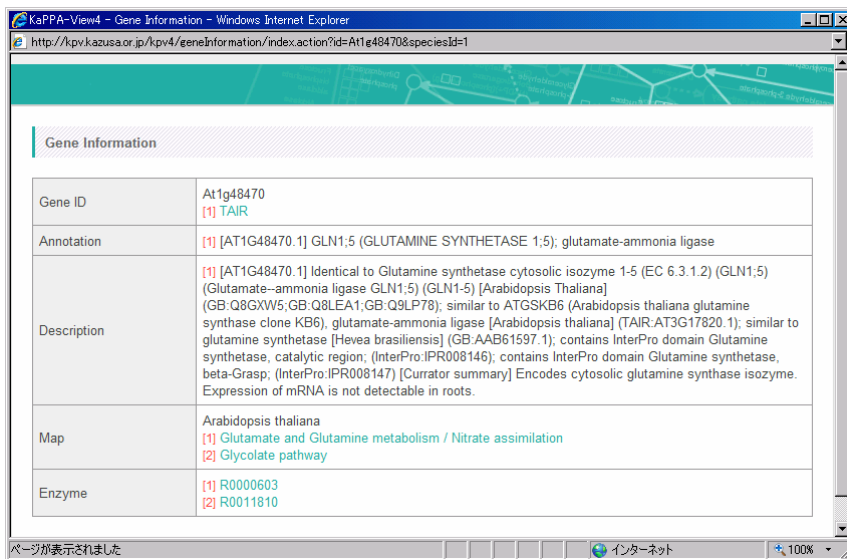
検索結果が表示されます。

Showing  per page  
Showing 1 - 10 of 19      <<First | <Previous | Next> | Last>>

| ID        | Species              | Annotation   | GenBank | Description  |
|-----------|----------------------|--|---------|--|
| At1g10270 | Arabidopsis thaliana | [1] [AT1G10270.1] GRP23 (GLUTAMINE-RICH PROTEIN23); binding  |         | [1] [AT1G10270.1] similar to EMB1796 (EMBRYO DEFECTIVE 1796), binding [Arabidopsis thaliana] (TAIR-AT3G49240.1); similar to Tetratricopeptide-like helical [Medicago truncatula] (GB-ABE81249.1); similar to ACT11D09.4 [Cucumis melo] (GB-AAS80150.1); contains InterPro domain Tetratricopeptide region; (InterPro:IPR013026); contains InterPro domain Pentatricopeptide repeat; (InterPro:IPR002885); contains InterPro domain Protein prenyltransferase; (InterPro:IPR008940); contains InterPro domain Tetratricopeptide-like helical; (InterPro:IPR011990)  |
| At1g15040 | Arabidopsis thaliana | [1] [AT1G15040.1] glutamine amidotransferase-related<br>[2] [AT1G15040.2] glutamine amidotransferase-related |         | [1] [AT1G15040.1] similar to catalytic [Arabidopsis thaliana] (TAIR-AT5G38200.1); similar to Os01g0138800 [Oryza sativa (japonica cultivar-group)] (GB-NP_001041973.1); similar to peptidase C26 [Chloroflexus aggregans DSM 9485] (GB-ZP_01516129.1); contains InterPro domain Peptidase C26; (InterPro:IPR011697); contains InterPro domain Glutamine amidotransferase superfamily; (InterPro:IPR011702)<br>[2] [AT1G15040.2] similar to catalytic [Arabidopsis thaliana] (TAIR-AT1G66860.1); similar to Os01g0138800 [Oryza sativa (japonica cultivar-group)] (GB-NP_001041973.1); similar to peptidase C26 [Chloroflexus aggregans DSM 9485] (GB-ZP_01516129.1); contains InterPro domain Peptidase C26; (InterPro:IPR011697); contains InterPro domain Glutamine amidotransferase superfamily; (InterPro:IPR011702) |
| At1g25350 | Arabidopsis thaliana | [1] [AT1G25350.1] OVA9 (OVULE ABORTION 9); glutamine-tRNA ligase   |         | [1] [AT1G25350.1] similar to tRNA synthetase class I (E and Q) family protein [Arabidopsis thaliana] (TAIR-AT5G19720.1); similar to Glutamyl-tRNA synthetase (Glutamine-tRNA ligase) (GlnRS) (GB-P52780); similar to glutamyl-tRNA synthetase [Danio rerio] (GB-AAT68085.1); similar to glutamine-tRNA ligase [Dictyostelium discoideum AX4] (GB-XP_636180.1); contains InterPro domain Ribosomal protein L25-like; (InterPro:IPR011035); contains InterPro domain Glutamyl-tRNA synthetase, non-specific RNA-binding region part 2; (InterPro:IPR007638); contains InterPro domain Glutamyl-tRNA synthetase; (InterPro:IPR004514); contains InterPro domain Glutamyl-tRNA synthetase class I; (InterPro:IPR006641); contains InterPro domain Glutamyl-  |

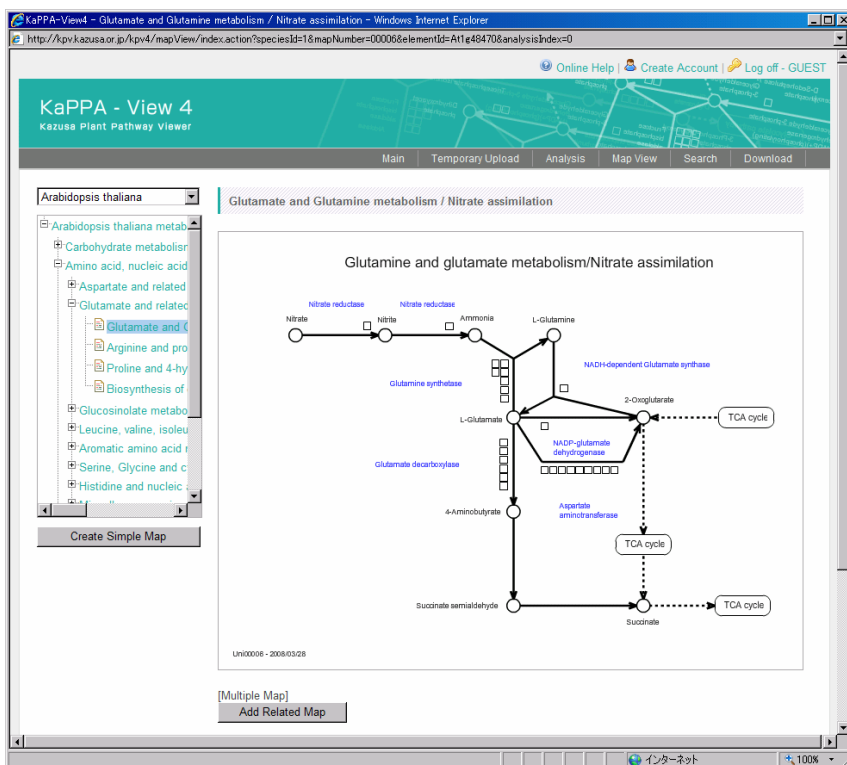
ID をクリックするとウィンドウがポップアップし、各要素の詳細が表示されます。

## 6. 検索



| Gene Information |  |
|------------------|--|
| Gene ID          | At1g48470<br>[1] TAIR  |
| Annotation       | [1] [AT1G48470.1] GLN1;5 (GLUTAMINE SYNTHETASE 1;5); glutamate-ammonia ligase  |
| Description      | [1] [AT1G48470.1] Identical to Glutamine synthetase cytosolic isozyme 1-5 (EC 6.3.1.2) (GLN1;5) (Glutamate-ammonia ligase GLN1;5) (GLN1-5) [Arabidopsis Thaliana] (GB:Q8GXW5;GB:Q8LEA1;GB:Q9LP78); similar to ATGSKB6 (Arabidopsis thaliana glutamine synthase clone KB6), glutamate-ammonia ligase [Arabidopsis thaliana] [TAIR:AT3G17820.1]; similar to glutamine synthetase [Hevea brasiliensis] (GB:AAB61597.1); contains InterPro domain Glutamine synthetase, catalytic region; (InterPro:IPR008146); contains InterPro domain Glutamine synthetase, beta-Grasp; (InterPro:IPR008147) [Curator summary] Encodes cytosolic glutamine synthase isozyme. Expression of mRNA is not detectable in roots. |
| Map              | Arabidopsis thaliana<br>[1] <a href="#">Glutamate and Glutamine metabolism / Nitrate assimilation</a><br>[2] <a href="#">Glycolate pathway</a>   |
| Enzyme           | [1] R0000603<br>[2] R0011810   |

Map の欄にリンクがある場合には、クリックすることで対応するマップにジャンプすることができます。検索した要素は、そのシンボルがブリンクして表示されます。



KaPPA - View 4  
kazusa Plant Pathway Viewer

Arabisidopsis thaliana | Glutamate and glutamate metabolism / Nitrate assimilation

Glutamine and glutamate metabolism/Nitrate assimilation

The diagram illustrates the metabolic pathway for glutamine and glutamate metabolism/nitrate assimilation. It shows the conversion of Nitrate to Nitrite by Nitrate reductase, then to Ammonia by another Nitrate reductase. Ammonia is then converted to L-glutamine by Glutamine synthetase. L-glutamine is converted to L-glutamate by NADH-dependent Glutamate synthase. L-glutamate is converted to 2-Oxoglutarate by NADP-glutamate dehydrogenase, which then enters the TCA cycle. 2-Oxoglutarate is converted to 4-Aminobutyrate by Aspartate aminotransferase, which also enters the TCA cycle. 4-Aminobutyrate is converted to Succinate semialdehyde, which then enters the TCA cycle. Succinate semialdehyde is converted to Succinate, which also enters the TCA cycle. The TCA cycle is represented by a dashed line and a circle labeled 'TCA cycle'.

### 6-2. Blast 検索

ユーザーが入力した塩基配列またはアミノ酸配列(1文字表記)のデータをもとに、その配列と相同性をもつ遺伝子を **blast** プログラムにより検索する事ができます。

メニューバーの **Search** を選択した後、**Blast Search** ボタンをクリックします。

|               |   |
|---------------|---|
| Search Target | All <input type="button" value="v"/> All <input type="button" value="v"/>   |
| Species       | All <input type="button" value="v"/>  |
| Key word      | <input type="text"/> <input checked="" type="radio"/> AND <input type="radio"/> OR<br>max. 5 key-words separated by space |

検索条件を入力し **Search** ボタンをクリックします。

**Query** はファイルから指定することも可能です。

|          |   |
|----------|---|
| Database | Arabidopsis thaliana <input type="button" value="v"/> TAIR8 cdna <input type="button" value="v"/>   |
| Program  | blastn <input type="button" value="v"/>   |
| Filter   | <input type="checkbox"/> Low complexity   |
| E-value  | <input type="text" value="10.0"/>   |
| Query    | <pre>ATCAGCGCCAAGTCCTGTGAAGACATCGAAAGCTGAGTTTATAAGCAA GATCTTGTACGCAGAGGCTTTCGCAGCGTTAGTCCAACAGTTATTTACTC CTTCATGCAAGCAGCTGGACTCAGCAATGATCATCTCATAGGCTGCTTCA GATACCAAGACTGTTGCGTAGATGCAGAGACAACAACAACAACGAAGCG AAGAAGAAGAACGAGAGAGAGAGTATATAAAGAGCCAT</pre> <input type="button" value="参照..."/> <input type="button" value="Read"/> |

**Query** には、1件の配列データを入力します。Multi FASTA 形式での複数の **Query** 設定はできません。

検索結果が表示されます。

| Gene ID   | E-Value | Enzyme ID  | Ec No  | Map  |
|-----------|---------|--|--|--|
| AT1G15970 | 0.00    | R0006404<br>R0006411<br>R0006423<br>R0006429<br>R0006433 | 1.2.1.44<br>1.2.1.44<br>1.2.1.44<br>1.2.1.44<br>1.2.1.44 | Cinnamate-monolignol pathway / sinapoyl ester biosynthesis |
| AT1G80850 | 7E-76   |  |  |  |
| AT5G44680 | 2E-5    |  |  |  |
| AT3G12710 | 7E-5    |  |  |  |
| AT5G27230 | 0.068   |  |  |  |
| AT1G75090 | 0.068   |  |  |  |











## 7. ダウンロード

KaPPA4 で使用されている遺伝子、化合物などの情報や、管理者が公開している **Experiment** は、ファイルとしてダウンロードすることが出来ます。メインメニューの **Download** をクリックして開始します。

検索条件を入力し、ダウンロードしたいデータを検索します。

|                                       |   |
|---------------------------------------|---|
| Data Type                             | <input checked="" type="radio"/> Transcript <input type="radio"/> Metabolite <input type="radio"/> Information            |
| User                                  | All <input type="button" value="v"/>  |
| Comment                               | <input type="text"/> <input checked="" type="radio"/> AND <input type="radio"/> OR<br>max. 5 key-words separated by space |
| Uploaded Date                         | 2009/10/01 <input type="button" value="calendar"/> - 2009/10/31 <input type="button" value="calendar"/>                   |
| <input type="button" value="Search"/> |   |

ダウンロードアイコンをクリックし、ファイルのダウンロードを行います。クリックしてもダウンロードが始まらない場合は、右クリックから「対象をファイルに保存」を選択してください。

| Experiment Name | Array Type         | Uploaded By | Uploaded Date | Comment |   |
|-----------------|--------------------|-------------|---------------|---------|---|
| Ath A           | AGI codes          | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Ath B           | AGI codes          | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Ath C           | AGI codes          | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Ath D           | AGI codes          | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Lja A           | Agilent Kazusa-001 | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Lja B           | Agilent Kazusa-001 | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Lja C           | Agilent Kazusa-001 | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Lja D           | Agilent Kazusa-001 | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Os A            | Agilent G4138A     | sakura      | 2009/10/01    |         |  |
| Os B            | Agilent G4138A     | sakura      | 2009/10/01    |         |  |

**Data Type** で **Information** を選択すると、KaPPA-View4 のシステム内で使用している、基本データファイルをダウンロードすることができます。各基本情報ファイルは、次のような名称が付けられています。

全生物共通のファイル

化合物情報: Uni\_compoundInfo\_[date].csv

酵素反応情報: Uni\_enzymeInfo\_[date].csv

生物種ごとのファイル

[Pre]は、生物種を表す略名あるいは、ユニバーサルマップを表すプレフィックス(Uni)です。

遺伝子情報: [Pre]\_geneInfo\_[date].csv

酵素反応と遺伝子の対応情報: [Pre]\_geneBoxinfo\_[date].csv または

([Pre]\_geneGroupInfo\_[date].csv)

遺伝子とマイクロアレイのプローブとの対応情報: [Pre]\_featureGene\_[date].csv

マップツリーの構成とマップ ID の対応情報: [Pre]\_mapRelation\_[date].csv

Tips:

代謝産物データをアップロードする際の化合物 ID を知るには、化合物情報ファイルをダウンロードしてください。

Tips:

マップ上にどの遺伝子が載っているかの情報は、情報ファイルとしては準備していません。これは、Map Information ファイルと Gene Box ファイルおよび、マップのもととなっているファイル(SVG 形式)から、システムが動的に計算して処理しているためです。

マップ上の遺伝子を調べるためには、Element List を参照するか(4-2-4. 代謝マップ 各シンボルの実験値を参照)、次の方法で調べることができます。

Gene Box ファイルに記載されている酵素反応 ID (R\*\*\*\*) は、便宜的に、マップ ID [5 または 6桁] + 2桁の通し番号となっているので、このルールをもとに、マップ上の遺伝子を調べて下さい。

将来的には、マップ上の遺伝子も別途提供してゆく予定です。

注意:

化合物情報ファイルには、CAS 番号が記載されています。ダウンロードした csv ファイルを Microsoft Excel で開くと、CAS 番号の一部が日付として誤認識され、意図しないデータに置き換わってしまうことがあります。データのご利用の際にはご注意ください。

## 8. 外部システムからの利用

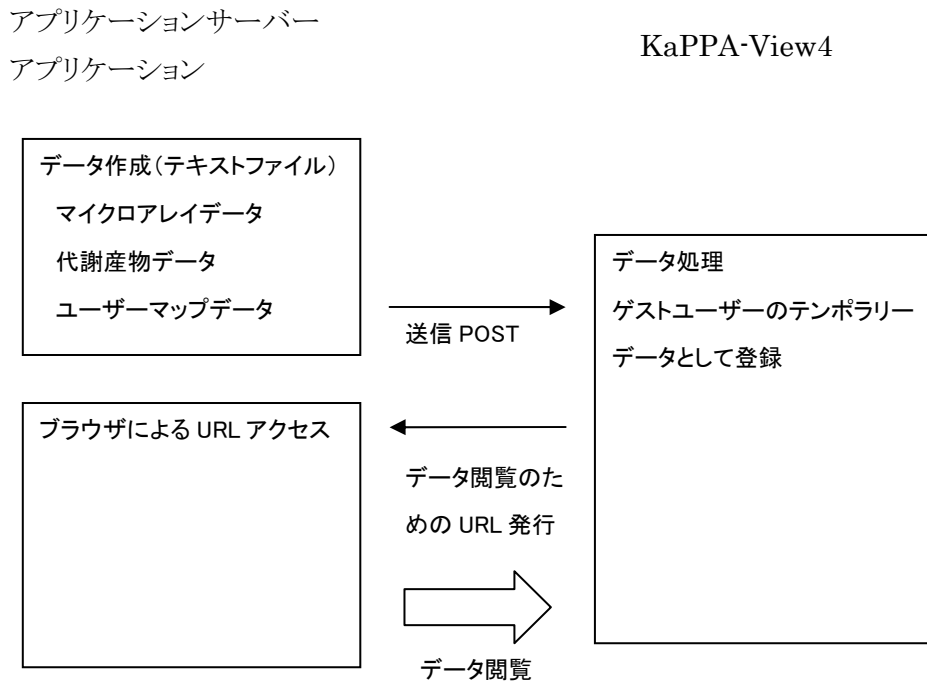
---

前バージョンと比較して、KaPPA-View4 では、外部システムからのデータ利用が大幅に強化されました。最大の特徴は、外部システムからデータをアップロードできる API (Application Program Interface) の提供です。この機能を利用することにより、ユーザーがウェブブラウザを介して KaPPA-View4 にログインする手続きを踏まなくても、外部システムから直接データをアップロードし閲覧することができます。これはすなわち、マイクロアレイデータを保持している外部データベース等から、KaPPA-View4 を直接ビューワーとして使用できることを意味しています。

この章では、主にデータベースやアプリケーションの開発者に向けて、KaPPA-View4 の外部からの利用方法について解説します。

### 8-1. データアップロード API

KaPPA-View4 では、外部システムからマイクロアレイデータ、代謝産物データ、およびユーザー作成マップをアップロードし、ブラウザで表示するための API を提供しています。データのやりとりの概念図を下図に示します。



KaPPA-View4 へのデータ送信は、`http` の `POST` を使用して行います。このためには、KaPPA-View4 の `Java` サーブレットと通信を行うための仕組みが必要となります。必要に応じて、お使いの開発言語で `POST` 送信を可能にするライブラリ等をご用意ください。

### 8-1-1. データフォーマット

`POST` 送信に際しては、送信側のアプリケーションで一時的なテキストファイルを作成する必要があります。これは、実験データは巨大になることがあるため、安定した送信を可能にするための仕様です。送信するファイルのフォーマットは **9-5. POST 転送用データ** でご確認ください。マイクロアレイデータ、代謝産物データ、ユーザーが作成した `SVG` マップ、およびそれらの簡単な付加情報を含めることができます。

### 8-1-1. データ送信 URL とパラメーター

実験データは以下の `URL` へ送信してください。レスポンスとして受け取った `URL` にブラウザでアクセスすることで、データを閲覧できます。

|              |  |
|--------------|--|
| URL          | http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/upload.action                     |
| Method       | POST   |
| Content-Type | multipart/form-data  |
| パラメータ        | uploaded (実験データファイル)   |
| レスポンス        | 成功:http で始まる、送信したデータを表示するための URL<br>失敗:エラーメッセージ。複数行に渡る場合があります。 |

### 8-1-2. サンプルコード

#### •HTML のフォームによる送信

```
<form action="http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/upload.action" method="post"
enctype="multipart/form-data">
<input type="file" name="uploaded" />
<input type="submit">
</form>
```

送信ファイルは、予めテキストデータとして準備しておいてください。

ウェブフォームで、そのテキストデータを選択し、送信ボタンを押すと、ブラウザ画面上にアクセスのための URL が表示されます。この URL をブラウザのアドレス欄に入力することで、データの表示を見ることができます。

このサンプルは実用的ではありませんが、POST 送信の仕組みを理解するには良い例と言えます。

#### •PHP による送信

PEAR のライブラリを使用した例を示します。

```
require_once 'HTTP/Client.php';

$client = new HTTP_Client();
```



```
$url = "http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/upload.action";  
$file = "./uploadfiles/postdata.txt";  
  
$postdata = array();  
$postfile = array('uploaded', $file);  
$capsule = array($postfile);  
  
$client->post($url, $postdata, false, $capsule);  
$response = $client->currentResponse();
```

受け取った URL にリダイレクトすることで、KaPPA-View4 でデータの閲覧ができます。

### **8-1-3. KaPPA-View4 でのデータ閲覧後の動作**

レスポンスとして受け取った URL へアクセスすると、閲覧者は KaPPA-View4 のゲストユーザーとして扱われます。送信されたデータは **Compared Experiment** として登録され、すぐにマップでの解析を開始できます。また、送信されたデータは **Analysis** のデータリストから選択できるようになるため、別のデータとの比較に用いたりすることができます。データの有効期限は、通常のゲストユーザーログイン時と同様です。すなわち、ログオフするか、データに対するアクセスが 60 分間ない場合(自動ログオフ)は、データは自動的にサーバーから消去されます。

POST されたデータは、**Analysis** 画面では次のように表示されます。

送信された比較実験ペアのデータは、**PS\*\*\*\*\***という実験セット ID で登録されます(\*\*\*\*\*部分は、POST されたデータの通し番号)。

POST されたデータが 2 実験の比較の場合、実験名は[比較実験ペア名]\_1 および\_2 という枝番つきの名称、実験 ID は PS\*\*\*\*\*-1 および-2 となり、**quantitative** データとして登録されます。1 実験のデータの場合は、実験名は[比較実験ペア名]-1、実験 ID は PS\*\*\*\*\*\_1 となり、**ratio** データとして登録されます。

## 8. 外部システムからの利用

---

| Set ID                                      | Set Name           | Array Type | No of Exp | Uploaded Date | Related Data |
|---|--------------------|------------|-----------|---------------|--------------|
| ▶ KES1                                      | Demo Data          | AGI codes  | 7         | 2009/09/16    |              |
| ▶ Ath Demo Data                             | Ath Demo Data      | AGI codes  | 4         | 2009/10/01    |              |
| ▼ PS000001                                  | Posted CompExp A   | AGI codes  | 2         | 2009/12/22    |              |
| Exp ID      Exp Name      Comment      Type |                    |            |           |               |              |
| 🔍 PS000001_1                                | Posted CompExp A-1 |            |           |               | quantitative |
| 🔍 PS000001_2                                | Posted CompExp A-2 |            |           |               | quantitative |
| ▼ PS000002                                  | Posted CompExp B   | AGI codes  | 1         | 2009/12/22    |              |
| Exp ID      Exp Name      Comment      Type |                    |            |           |               |              |
| 🔍 PS000002_1                                | Posted CompExp B-1 |            |           |               | ratio        |

### 8-2. 遺伝子、化合物、酵素反応、代謝マップへの外部システムからのリンク

KaPPA4 システム内の各要素(遺伝子、化合物、酵素)と代謝マップはそれぞれ固有の ID を持っており、外部のサイトやアプリケーションから直接その ID へアクセスすることができます。要素ごとに定められた URL 書式に ID を付記し、ブラウザでアクセスします。

アクセス時に未ログインだった場合、自動的にゲストとしてログインします。

#### 8-2-1. 各要素へのリンク書式

##### • 遺伝子

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/geneInformation/view.action?id=Gene ID>

ex)

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/geneInformation/view.action?id=At1g58150>

該当する遺伝子情報ページが開きます。

| Gene Information |  |
|------------------|--|
| Gene ID          | At1g58150<br>[1] TAIR                              |
| Annotation       | [1] [AT1G58150.1] unknown protein                  |
| Description      | [1] [AT1G58150.1]                                  |
| Map              | [1] Calvin cycle<br>[2] Glycolysis/gluconeogenesis |
| Enzyme           | [1] R0011107<br>[2] R0011202                       |

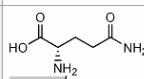
### • 化合物

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/compoundInformation/view.action?id=Compound ID>

ex)

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/compoundInformation/view.action?id=KPC00697>

該当する化合物情報ページが開きます。

| Compound Information |   |
|----------------------|---|
| Compound ID          | KPC00697  |
| Name                 | [1] L-Glutamine<br>[2] L-2-Aminoglutaric acid   |
| Structure            | <br>Mol file                           |
| Formula              | C5H10N2O3   |
| Molecular Weight     | 146.14  |
| CAS                  | [1] 56-85-9   |
| KEGG                 | [1] C00064  |
| Map                  | [1] Aminoacyl-tRNA biosynthesis<br>[2] Glutamate and Glutamine metabolism / Nitrate assimilation<br>[3] Glycolate pathway |

### • 酵素反応

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/enzymeInformation/view.action?id=Reaction ID>

ex)

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/enzymeInformation/view.action?id=R0000603>

該当する酵素反応情報ページが開きます。

## 8. 外部システムからの利用

| Enzyme Information |  |
|--------------------|--|
| Enzyme ID          | R0000603   |
| Name               | [1] GLUTAMATE-AMMONIA LIGASE   |
| EC No.             | 6.3.1.2 (Linked to the IUBMB Enzyme Nomenclature)  |
| Systematic Name    | [1] L-Glutamate: ammonia ligase (ADP-forming)  |
| Reaction           | NH <sub>3</sub> + L-glutamate + ATP = L-glutamine + ADP + phosphate  |
| Map                | [1] Glutamate and Glutamine metabolism / Nitrate assimilation  |
| Gene               | Arabidopsis thaliana<br>[1] At1g48470<br>[2] At1g66200<br>[3] At3g17820<br>[4] At3g53170<br>[5] At3g53180<br>[6] At5g16570<br>[7] At5g37600<br><br>Oryza sativa<br>[1] AK063913<br>[2] AK099882<br>[3] AK109397<br><br>Solanum lycopersicum<br>[1] Les.224.1.A1_at<br>[2] Les.224.1.S1_at<br>[3] Les.2973.1.S1_at<br>[4] Les.5308.1.S1_at<br>[5] LesAffx.31451.1.S1_at<br>[6] LesAffx.63479.1.S1_at<br>[7] LesAffx.63925.1.S1_at |

### • 代謝マップ

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/mapView/view.action?mapNumber=Map Number>

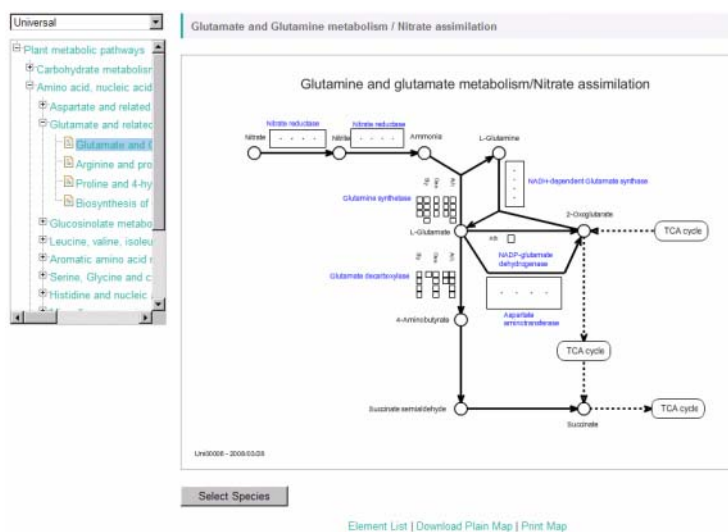
Map Number は、Map ID から先頭のアルファベット 3 文字を除いた識別子です。この方法では、Universal Map Mode で表示されるマップへアクセスします。生物種に特異的なマップを表示させたい場合は、後述する方法で生物種を同時に指定してください。

ex)

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/mapView/view.action?mapNumber=00006>

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/mapView/view.action?mapNumber=00028f>

該当するマップが表示されます。



## 8-2-2. リンク時における生物種の指定

各要素 ID に対する URL 書式のなかに、次のパラメーターを付記することで、表示する生物種を指定することができます。

`&speciesName=Species Name`

**Species Name** は、KaPPA-View4 に登録されている生物種名を記入します。大文字と小文字は区別されません。テキストは URL エンコードされている必要がありますので、もし属名と科名間の半角スペースがうまく認識されない場合は、下記の例のように、半角スペースの代わりに「%20」と表記してください。不正な **Species Name** が指定されている場合は、Universal として解釈されます。

ex)

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/geneInformation/view.action?id=At1g58150&speciesName=Arabidopsis%20thaliana>

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/compoundInformation/view.action?id=KPC00697&speciesName=Lotus%20japonicus>

<http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/enzymeInformation/view.action?id=R0000603&speciesName=Orzya%20sativa>

```
http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/mapView/view.action?mapNumber=00006&species  
Name=Solanum%20lycopersicum
```

生物種特異的なマップも表示させることができます。

```
http://kpv.kazusa.or.jp/kpv4/mapView/view.action?mapNumber=00415&species  
Name=Lotus%20japonicus
```

## 9. ファイルのフォーマット

この章では、ユーザーが解析に際して準備する以下のデータファイルのフォーマットについて詳細を解説します。

### 実験データ:

マイクロアレイデータおよび代謝産物解析データ。独自のデータを解析する際に準備します。

### 関連データ:

遺伝子-遺伝子間、代謝産物-代謝産物間の関係性のデータ。相関ライン重ね描き機能を使用し、独自のデータを表示させたい場合に準備します。

### ユーザーマップデータ:

デフォルトマップにはない、ユーザー独自の代謝マップデータ。

また、データベースやアプリケーション開発者向けに、POST 転送機能で使用されるテキストファイルのフォーマットについても解説します。

### POST 転送用データ:

外部システム(データベースやアプリケーション)から KaPPA-View4 をビューワーとして使用する際に、外部システムで一時的に生成するアップロード用のデータ。

### 9-1. 全般的なご注意

データの作成には、半角文字のみを使用してください。

UTF-8 でエンコードする必要がある場合は、ユニコードサイン(BOM)は付加しないで下さい。

### 9-2. アップロード用の実験データ

マイクロアレイで取得した **Transcript** のデータ、および、代謝産物解析で得た **Metabolite** データです。ユーザーがアップロードすることにより、データをマップ上で解析することができます。

KaPPA-View4 では、旧バージョンで使用していたフォーマットを拡張し、サンプルの詳細情報などをヘッダー部分に記述できるようにしました。従来通りのヘッダーの存在しないファイルも使用可能ですが、多数のデータを解析する場合などは、サンプルの識別を確実にし、混乱を避けるため、ヘッダー情報を付加しておくことをおすすめします。

### **9-2-1. データ部分**

KaPPA-View3 までで使用していたデータと同一です。これまで使用していたデータをそのまま使うことができます。

#### **• Extension from the Older Version 旧バージョンから拡張された点**

従来のデータはそのまま使えますが、化合物データに 0 が含まれている場合は、アップロード時にエラーを表示するようにしました(従来までは無効データとして取り扱われていました)。

従来はカンマ区切り形式(CSV形式)のみが使用できましたが、KaPPA-View4 では、CSV形式に加え、タブ区切り形式(TSV形式)も使用できるようになりました。

KaPPA-View4 では、遺伝子 ID および化合物 ID に、システムに存在しない ID を指定することができるようになりました。対応する ID を持つユーザーマップを作成することにより、ユーザーマップ上でそれらの変化量を解析できるようになります。

#### **• フォーマット**

Transcript のデータと Metabolite のデータは、別々のファイルとして作成する必要があります。Microsoft Excel 等を使い、下記に従ってデータを作成し、CSV形式または TSV形



式で保存してください。後述するヘッダー情報を付加する場合は、TSV形式での保存を行って下さい。

| 行     | 列     | 説明   |
|-------|-------|--|
| 1行目   | 1列目   | 実験のタイプを指定します。Transcriptの場合は(arrayexp)、Metaboliteの場合は(compexp)を、括弧をふくめて記載します。   |
|       | 2列目以降 | 実験名を入力します。2行目で繰り返しを設定する場合は、同じ実験には正確に同じ実験名をつけるようにしてください。一文字でも異なる場合は、異なる実験データとして扱われます。ここで入力した実験名はヘッダ情報とのマッピングに使用されます。ヘッダー情報の記述の際にも、正確に同じ名前を入力して下さい。  |
| 2行目   | 1列目   | 繰り返し番号を表わす(rep)を、括弧を含めて入力します。  |
|       | 2列目以降 | 実験の繰り返し番号を入力します。通常は、1, 2, 3...という通し番号をつけて下さい。同じ実験名で同じ繰り返し番号を持つ列ができないように注意して下さい。  |
| 3行目以降 | 1列目   | エレメントのIDを入力します。Transcriptの場合はFeature ID、Metaboliteの場合はCompound IDとなります。独自の遺伝子IDを指定したい時は「TMG+番号」、独自の化合物を指定したい時は「TMC+番号」の形で指定してください。Feature ID、Compound IDは、ダウンロードページからシステムで使われている情報ファイルを入手し、参照してください。 |
|       | 2列目以降 | 実験結果の値を入力します。遺伝子発現データの場合、数値はログスケールにしたものを入力してください。代謝産物データの場合、数値はリニアスケールで入力してください。0を含めることはできません。比の計算時には、それぞれログスケール、リニアスケールとして扱われます。  |

#### • サンプル

## 9. ファイルのフォーマット

Microsoft Excel を使ってデータを作成した例を以下に示します。

遺伝子発現データの場合

| 1  | A          | B           | C           | D           | E           | F       | G       |
|----|------------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------|---------|
| 2  | (arrayexp) | Treatment A | Treatment A | Treatment B | Treatment B | Control | Control |
| 3  | (rep)      | 1           | 2           | 1           | 2           | 1       | 2       |
| 4  | At1g01010  | -0.8285     | -0.9025     | 0.6469      | 0.5278      | -1.1905 | -1.0772 |
| 5  | At1g01020  | -1.3224     | -1.2137     | -0.5244     | -0.5612     | -0.1669 | -0.2220 |
| 6  | At1g01030  | 1.1189      | 1.1208      | 1.4112      | 1.3381      | -1.2666 | -1.2963 |
| 7  | At1g01040  | -1.2181     | -1.2986     | -0.9615     | -0.8966     | 0.0747  | 0.1132  |
| 8  | At1g01050  | -0.6649     | -0.7699     | 0.1262      | 0.2110      | 1.1751  | 1.1702  |
| 9  | At1g01060  | 0.8093      | 0.7658      | 1.5667      | 1.5299      | 0.5790  | 0.6099  |
| 10 | At1g01070  | -1.2044     | -1.2744     | -0.8895     | -0.8087     | 0.6100  | 0.6117  |
| 11 | At1g01080  | 0.9042      | 0.9041      | 1.0593      | 0.9300      | 0.0773  | 0.0601  |
| 12 | At1g01090  | 1.4873      | 1.6288      | -0.3224     | -0.3106     | 0.6158  | 0.5189  |
| 13 | At1g01100  | 1.2858      | 1.2653      | -0.0542     | -0.0030     | -0.3353 | -0.3996 |
| 14 | At1g01110  | -0.5739     | -0.4931     | 0.3831      | 0.2371      | -1.0614 | -1.2403 |
| 15 | At1g01120  | 0.6451      | 0.4880      | 1.4538      | 1.4422      | -0.8261 | -0.9685 |
| 16 | At1g01130  | 0.2656      | 0.4062      | 0.0312      | 0.0338      | 1.1975  | 1.1718  |
| 17 | At1g01140  | 0.8378      | 0.7601      | 0.1744      | 0.1655      | -0.0671 | -0.0313 |
| 18 | At1g01150  | 0.4551      | 0.5159      | 0.9629      | 0.9596      | 0.3979  | 0.4504  |
| 19 | At1g01160  | -0.0261     | -0.0262     | -0.6591     | -0.5196     | 1.3509  | 1.2571  |
| 20 | At1g01170  | -0.8704     | -0.9254     | 0.0169      | 0.0314      | -0.6277 | -0.6292 |
| 21 | At1g01180  | -0.7845     | -0.7282     | -0.0663     | -0.1267     | -0.0682 | -0.1228 |
| 22 | At1g01190  | -0.3691     | -0.3608     | -0.1055     | -0.0091     | 0.0961  | 0.0572  |

代謝産物データの場合

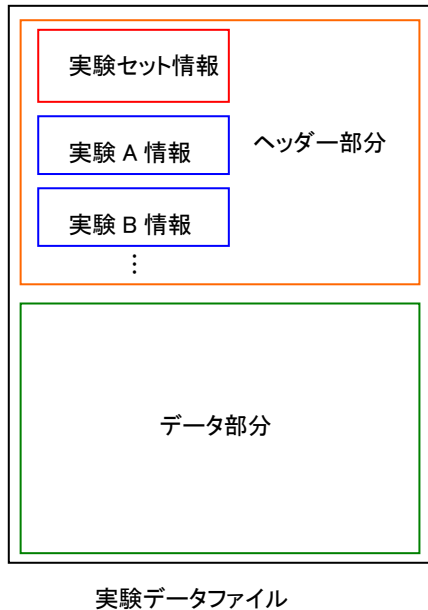
| 1  | A         | B           | C           | D           | E           | F       | G       |
|----|-----------|-------------|-------------|-------------|-------------|---------|---------|
| 2  | (compexp) | Treatment C | Treatment C | Treatment D | Treatment D | Control | Control |
| 3  | (rep)     | 1           | 2           | 1           | 2           | 1       | 2       |
| 4  | KPC00001  | 657         | 663         | 124         | 125         | 5       | 5       |
| 5  | KPC00002  | 9           | 9           | 9967        | 10274       | 9       | 9       |
| 6  | KPC00003  | 241184      | 238124      | 864         | 864         | 22      | 22      |
| 7  | KPC00004  | 122         | 120         | 18          | 18          | 180     | 177     |
| 8  | KPC00005  | 5140        | 5026        | 372         | 377         | 407378  | 393058  |
| 9  | KPC00006  | 463         | 479         | 51          | 51          | 7       | 7       |
| 10 | KPC00007  | 458         | 459         | 428122      | 438831      | 10175   | 10204   |
| 11 | KPC00008  | 50484       | 50152       | 752         | 772         | 86      | 85      |
| 12 | KPC00009  | 53          | 52          | 235794      | 238191      | 43      | 42      |
| 13 | KPC00010  | 64323       | 64567       | 890         | 896         | 24      | 25      |
| 14 | KPC00011  | 91          | 93          | 1299        | 1294        | 1323    | 1342    |
| 15 | KPC00012  | 78          | 81          | 21          | 21          | 709     | 701     |
| 16 | KPC00013  | 13949       | 13348       | 6455        | 6697        | 4135    | 4038    |
| 17 | KPC00014  | 850         | 871         | 147273      | 145685      | 72457   | 71906   |
| 18 | KPC00015  | 15519       | 14881       | 5104        | 4996        | 7       | 7       |
| 19 | KPC00016  | 18904       | 18830       | 4           | 4           | 55      | 57      |
| 20 | KPC00017  | 2011        | 2042        | 553280      | 553895      | 618     | 632     |
| 21 | KPC00018  | 269         | 270         | 331455      | 320680      | 49      | 50      |
| 22 | KPC00019  | 280         | 282         | 8606        | 8886        | 52      | 53      |
| 23 | KPC00020  | 670745      | 672289      | 68416       | 66720       | 2853    | 2855    |
| 24 | KPC00021  | 15492       | 15524       | 1926        | 1878        | 2081    | 2107    |
| 25 | KPC00022  | 7633        | 7860        | 95970       | 91740       | 300     | 304     |
| 26 | KPC00023  | 1427        | 1406        | 202         | 207         | 91220   | 93044   |
| 27 | KPC00024  | 5           | 5           | 74107       | 74234       | 19      | 19      |

### 9-2-2. ヘッダー部分

実験データファイルには、Data 部分の先頭に Header を付加することで、その実験の詳細情報を記述することができます。Header を付加しないデータでもこれまで通りアップロード

することができますが、実験内容を確認しながらデータを選択し解析をすすめるためには、できるだけヘッダーを記述した方がよいでしょう。

KaPPA-View4 では、互いに関連する複数の実験データを一つの実験セットとして管理することが可能になったため、ヘッダー部分は、実験セットに関する記述部と、個々の実験に関する記述部があります。



#### • フォーマット

ヘッダーの各情報は、以下のフォーマットで一行ずつ記述します。

>項目名 *tab* 内容

ヘッダーは必ず>から始まることになっているため、内容部分は、複数行に渡る内容を含めることはできません。

また、空白行は無視されます。

項目名は、予約ヘッダー項目と独自ヘッダー項目の2種類が存在します。

#### • 予約ヘッダー項目

予約ヘッダー項目は、システム内で認識されて、記述された内容に従い、適切な処理に使用されます。

#### 実験セットの予約ヘッダ

| ヘッダ   | 説明  |
|---|---|
| >datatype   | 実験セットのタイプを定義します。array、compound のどちらかを指定します。<br>ヘッダーを付加する場合は必須の項目となります。  |
| >Set_Set ID   | 実験セットの ID を定義します。省略された場合、システムが生成した ID (TempSet_数字) が自動的にセットされます。  |
| >Set_Experiment Set Name  | 実験セットの名称を定義します。省略された場合は ID (TempExp_数字) が名称としてセットされます。  |
| >Set_Species  | Species の名称を定義します。システム上に存在する Species と一致している必要があります。<br>省略した場合は、アップロード時に Array Type と共に指定します。   |
| >Set_Array Type   | 遺伝子発現データの場合に、Array Type の名称を定義します。システム上に存在する Array Type と一致している必要があります。省略した場合は、遺伝子発現データのアップロード時に指定します。  |
| > Set_Related Experiment<br><br>>Set_***_ID<br>と<br>>Set_***_link | 関連性を持ち対となる実験セットの ID を定義します。Analysis の実験データ選択画面で、対応する実験セットへのリンクが表示されるようになります。省略可能です。<br>「***」は任意の文字を表します。>***_ID で示したヘッダー情報に対して URL リンクを作成したい場合に、「>***_link」というヘッダーを別途作成し、そこにリンク先の URL を記載します。すると、実験情報の詳細ページで、>***_ID の情報欄にリンクが張られます。<br>>***_ID で示すヘッダー情報が複数ある場合は、その全てに同じリンクが張られます。 |

| Experiment Information       |                             |
|------------------------------|-----------------------------|
| [Experiment Set Information] |                             |
| Experiment Type              | TRANSCRIPT                  |
| Set_Set ID                   | SA01                        |
| Set_Experiment Set Name      | Sample Data Array 1         |
| Set_Array Type               | AGI codes                   |
| Set_Experiments              | Sample Ath A                |
| Set_Experiments              | Sample Ath B                |
| Set_Experiments              | Sample Ath C                |
| Set_Related Experiment       | SM01                        |
| Set_Data Source_ID           | Kazusa Microarray DB (SA01) |

現在システム内で定義されているアレイタイプ名は、以下のように調べることができます。実験データをアップロードする際、ファイルを選択して Upload ボタンを押した後の画面で、Array Type のプルダウンリストを開くと、生物種名に続けて括弧で囲まれた部分が Array Type 名となっています。各生物の代表的なマイクロアレイ名、あるいは遺伝子 ID の種類が Array Type 名となっているので、対応する featureGene 情報ファイルを参照し、データ部分に入力された feature ID に適したものであることを確認してください。

[Experiment] [User Map] [Correlation]

Experiment File :

Experiment Type :  Transcript  Metabolite

Array Type :

| Experiment Name | Array Type                           | Run Number | Comment |
|-----------------|--------------------------------------|------------|---------|
| Ath A           | Arabidopsis thaliana (AGI codes)     |            |         |
|                 | Lotus japonicus (Agilent Kazusa-001) |            |         |
|                 | Oryza sativa (Agilent G4138A)        |            |         |
|                 | Oryza sativa (AK)                    |            |         |
|                 | Solanum lycopersicum (Affymetrix)    |            |         |

#### 実験データの予約ヘッダ

| ヘッダ                   | 説明   |
|-----------------------|--|
| >Data_Experiment_ID   | 実験データの ID を定義します。省略された場合、システムが生成した ID (TempExp_番号) が自動的にセットされます。         |
| >Data_Experiment_Name | 実験データの名称を定義します。ここで指定される実験名はデータ部分とのマッピングに使用されますので、正確に記載する必要があります。         |
| >Data_Value Type      | 実験のタイプを定義します。raito と quantitative のどちらかを指定します。デフォルト (省略時) は quantitative |

|                |  |
|----------------|--|
|                | となります。   |
| >Data_Comments | 実験に対するコメントを定義します。省略可能です。   |
| >start         | 1 件の実験データに関する記述の始まりを示します。  |
| >end           | 1 件の実験データに関する記述の終わりを示します。  |
| >Data_***_ID   | 「***」は任意の文字を表します。>***_ID で示したヘッダー情報に対して URL リンクを作成したい場合に、                            |
| と              | 「>***_link」というヘッダーを別途作成し、そこにリンク先の URL を記載します。すると、実験情報の詳細ページで、>***_ID の情報欄にリンクが張られます。 |
| >Data_***_link | >***_ID で示すヘッダー情報が複数ある場合は、その全てに同じリンクが張られます。  |

| [Experiments]        |  |
|----------------------|--|
| Data_Experiment_ID   | SEA01  |
| Data_Experiment_Name | Sample Ath A                                 |
| Data_Value Type      | quantitative                                 |
| Data_Comments        | Arabidopsis thaliana Sample Data A           |
| Data_Data Source_ID  | <a href="#">Kazusa Microarray DB (SEA01)</a> |
| Data_Experiment_ID   | SEA02  |
| Data_Experiment_Name | Sample Ath B                                 |
| Data_Value Type      | quantitative                                 |
| Data_Comments        | Arabidopsis thaliana Sample Data B           |
| Data_Experiment_ID   | SEA03  |
| Data_Experiment_Name | Sample Ath C                                 |
| Data_Value Type      | ratio  |
| Data_Comments        | Arabidopsis thaliana Sample Data C           |

### ●ユーザー設定ヘッダー項目

独自ヘッダー項目は、ユーザーが自由な内容を記載するために使用することができます。実験セットに関する項目は、>Set\_で始まり、各実験に関する項目は、>Data\_で始まります。「\_(アンダーバー)」は、項目の階層区切りを示すので、関連ある項目を整理して表現できます。そして、ここで記述した内容は、階層ごとにシステム内で整理され、Analysis で実験データを選択する際に、各階層を指定して検索できるようになります。

Analysis

|                        |  |
|------------------------|--|
| Species                | Arabidopsis thaliana   |
| Experiment Type        | <input checked="" type="radio"/> TRANSCRIPT <input type="radio"/> METABOLITE |
| Upload User            | All  |
| Upload Date            | <input type="text"/> - <input type="text"/>                                  |
| Experiment Set Header  | Set_ <input type="text"/> AND <input type="radio"/> OR <input type="radio"/> |
| Experiment Data Header | <input type="text"/><br><input type="text"/> OR <input type="text"/>         |

Search Reset

---Name

- Data
- Array
- Data retrieve
- Detection
- Platform
- Comments
- Data\_
- normalization
- Experiment\_
- ID
- Name
- Sample
- Provider
- Source
- Species
- Value Type

Copyright © 2004-2009 Kazusa DNA Research Institute

[Select]  
Transcrip  
Metabolit  
Compare  
Set001  
Add



|                        |  |
|------------------------|--|
| Experiment Data Header | <input type="text"/><br><input type="text"/> OR <input type="text"/> |
|------------------------|--|

Search Reset

Compare  
Set001  
Add

Showing 10 per page

Showing 1 - 1 of 1

| Set ID | Set Name                  | Array Type | No of Exp | Uploaded Date | Related Data |
|--------|---------------------------|------------|-----------|---------------|--------------|
| KEST1  | Ath Transcripts Demo Data | AGI codes  | 4         | 2009/10/28    |              |

| Exp ID  | Exp Name   | Comment   | Type         |
|---------|--|---|--------------|
| KEPT1_3 | [sample_A2] T87 cultured cells (14 days)                         | hybridized with [sample_A1]   | quantitative |
| KEPT1_4 | [sample_B1] T87 cells - light grown (10 days)                    | hybridized with [sample_B2]   | quantitative |
| KEPT1_5 | [sample_B2] T87 cells - dark grown (10 days)                     | hybridized with [sample_B1]   | quantitative |
| KEPT1_8 | [sample_D log (ratio)] T87 cells - MeJA treated vs control (2hr) | Log (ratio) data of methyljasmonate (MeJA) treated and untreated (control) T87 cells. | ratio        |

## • サンプル

## 9. ファイルのフォーマット

|    | A                        | B  | C            | D            | E            | F            | G            |
|----|--------------------------|--|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 1  | >datatype                | array  |              |              |              |              |              |
| 2  | >Set_Set_ID              | SA01   |              |              |              |              |              |
| 3  | >Set_Experiment_Set_Name | Sample Data Array 1                                      |              |              |              |              |              |
| 4  | >Set_Species             | Arabidopsis thaliana                                     |              |              |              |              |              |
| 5  | >Set_Array_Type          | AGI codes  |              |              |              |              |              |
| 6  | >Set_Experiments         | Sample Ath A   |              |              |              |              |              |
| 7  | >Set_Experiments         | Sample Ath B   |              |              |              |              |              |
| 8  | >Set_Experiments         | Sample Ath C   |              |              |              |              |              |
| 9  | >Set_Related_Experiment  | SM01   |              |              |              |              |              |
| 10 | >Set_Data_Source_ID      | Kazusa Microarray DB (SA01)                              |              |              |              |              |              |
| 11 | >Set_Data_Source_Link    | http://www.kazusa.or.jp/microarray_db/search?setid=SA01  |              |              |              |              |              |
| 12 |                          |  |              |              |              |              |              |
| 13 | >start                   |  |              |              |              |              |              |
| 14 | >Data_Experiment_ID      | SEA01  |              |              |              |              |              |
| 15 | >Data_Experiment_Name    | Sample Ath A   |              |              |              |              |              |
| 16 | >Data_Value_Type         | quantitative   |              |              |              |              |              |
| 17 | >Data_Comments           | Arabidopsis thaliana Sample Data A                       |              |              |              |              |              |
| 18 | >Data_Data_Source_ID     | Kazusa Microarray DB (SEA01)                             |              |              |              |              |              |
| 19 | >Data_Data_Source_Link   | http://www.kazusa.or.jp/microarray_db/search?expid=SEA01 |              |              |              |              |              |
| 20 | >end                     |  |              |              |              |              |              |
| 21 | >start                   |  |              |              |              |              |              |
| 22 | >Data_Experiment_ID      | SEA02  |              |              |              |              |              |
| 23 | >Data_Experiment_Name    | Sample Ath B   |              |              |              |              |              |
| 24 | >Data_Value_Type         | quantitative   |              |              |              |              |              |
| 25 | >Data_Comments           | Arabidopsis thaliana Sample Data B                       |              |              |              |              |              |
| 26 | >end                     |  |              |              |              |              |              |
| 27 | >start                   |  |              |              |              |              |              |
| 28 | >Data_Experiment_ID      | SEA03  |              |              |              |              |              |
| 29 | >Data_Experiment_Name    | Sample Ath C   |              |              |              |              |              |
| 30 | >Data_Value_Type         | ratio  |              |              |              |              |              |
| 31 | >Data_Comments           | Arabidopsis thaliana Sample Data C                       |              |              |              |              |              |
| 32 | >end                     |  |              |              |              |              |              |
| 33 |                          |  |              |              |              |              |              |
| 34 | (arrayexp)               | Sample Ath A   | Sample Ath A | Sample Ath B | Sample Ath B | Sample Ath C | Sample Ath C |
| 35 | (rep)                    | 1  | 2            | 1            | 2            | 1            | 2            |
| 36 | At1g01010                | -0.828475158   | -0.902463025 | 0.646901298  | 0.527831687  | -1.190483883 | -1.077241722 |
| 37 | At1g01020                | -1.322449978   | -1.213715999 | -0.524355622 | -0.561203464 | -0.166943424 | -0.222037326 |
| 38 | At1g01030                | 1.118873492  | 1.1207812    | 1.41118869   | 1.338139967  | -1.266626461 | -1.29633268  |
| 39 | At1g01040                | -1.218112023   | -1.298647166 | -0.961450022 | -0.896647384 | 0.07469906   | 0.11324618   |
| 40 | At1g01050                | -0.664935805   | -0.769907958 | 0.126151787  | 0.211021608  | 1.175051608  | 1.170206475  |
| 41 | At1g01060                | 0.809261597  | 0.765810307  | 1.566740565  | 1.529944679  | 0.579037425  | 0.609907787  |
| 42 | At1g01070                | -1.204413205   | -1.274388803 | -0.889537352 | -0.808698789 | 0.61000164   | 0.611701704  |

記述例は、ログイン後のメイン画面で入手できるサンプルデータも参考にしてください。

### 9-3. 関連データ

相関係数ラインの Overlay 機能を使って、マップ上に遺伝子間あるいは化合物間の関係性を図示することができます。ここでは、そのために必要な関連性データのファイル形式を解説します。

#### 9-3-1. フォーマット

下記の情報を1行ずつ含むデータを作成し、CSV形式で保存します。

| 列 | 名称          | 型                   | 必須 |
|---|-------------|---------------------|----|
| 1 | element_id1 | 文字列 (最大 100 文字)     | ○  |
| 2 | element_id2 | 文字列 (最大 100 文字)     | ○  |
| 3 | value       | 数値 (-1.0 ~ 1.0 の実数) | ○  |



element\_id1, element\_id2 は、KaPPA-View4 に含まれる遺伝子 ID または化合物 ID を示します。データアップロードの際には、遺伝子間の相関か、化合物間の相関かを選択しますので、両者が混在したデータを作成することはできません。

ファイル内で重複する element\_id1 と element\_id2 の組み合わせが存在する場合、それぞれの value が異なる場合は警告が表示されます。重複データでも value が一致しているデータは、ひとつのデータとしてカウントされ登録されます。

### 9-3-2. サンプル

|    | 0         | 1         | 2     | 3 |
|----|-----------|-----------|-------|---|
| 1  | At1g01060 | At2g46830 | 0.855 |   |
| 2  | At1g01060 | At3g09600 | 0.813 |   |
| 3  | At1g01060 | At4g38960 | 0.800 |   |
| 4  | At1g01080 | At3g48730 | 0.900 |   |
| 5  | At1g01080 | At5g55220 | 0.893 |   |
| 6  | At1g01080 | At3g29185 | 0.891 |   |
| 7  | At1g01080 | At4g29060 | 0.890 |   |
| 8  | At1g01080 | At1g32990 | 0.888 |   |
| 9  | At1g01080 | At1g05190 | 0.886 |   |
| 10 | At1g01080 | At1g79850 | 0.882 |   |
| 11 | At1g01080 | At2g37660 | 0.881 |   |
| 12 | At1g01080 | At1g64510 | 0.880 |   |
| 13 | At1g01080 | At5g13510 | 0.880 |   |
| 14 | At1g01080 | At5g47190 | 0.877 |   |
| 15 | At1g01080 | At3g55330 | 0.876 |   |
| 16 | At1g01080 | At5g45930 | 0.876 |   |
| 17 | At1g01080 | At3g01480 | 0.875 |   |
| 18 | At1g01080 | At1g74970 | 0.874 |   |
| 19 | At1g01080 | At1g62780 | 0.873 |   |
| 20 | At1g01080 | At2g35500 | 0.872 |   |
| 21 | At1g01080 | At5g42765 | 0.872 |   |
| 22 | At1g01080 | At1g48350 | 0.871 |   |
| 23 | At1g01080 | At3g47650 | 0.871 |   |

#### 注意

相関データは巨大になることがあります。アップロード時にファイルサイズの制限がかかる場合がありますのでご注意ください。一つのファイルに含める相関値を適当に区切るか、相関値の有効数字を制限するなどに対処してください。

## 9-4. ユーザーマップ

この節では、ユーザーマップの簡単な紹介とフォーマット制約について解説します。ユーザーマップの作成に関するより詳しい情報は、[ユーザーマップ作成マニュアル](#)をご参照ください。

User Map はユーザー自身が作成するオリジナルな代謝マップです。KaPPA-View4 が提供するマップには描かれていない代謝経路を描いたり、KaPPA-View4 のマップを手直ししてより詳細な遺伝子・化合物情報を載せたマップを作成したり、プレゼンテーション用により見栄えの良いマップを作成したりして、解析の幅を広げることができます。さらに User Map には、KaPPA-View4 システムには登録されていない遺伝子や化合物を表示することが可能です。

User Map は、KaPPA-View4 にログインしてアップロードできる他、POST 機能を用いて他のサーバーシステムから利用することも可能です。作成したマップは、KaPPA-View 管理者にメール転送することもできるので、管理者があなたのマップをデフォルトマップとして採用するかもしれません。

User Map は、SVG (Scalable Vector Graphics)と呼ばれる XML 形式で作成します。マップの作成には、フリーのドローソフト Inkscape (<http://www.inkscape.org/>) が最も適しています。

KaPPA-View4 では、遺伝子や化合物、酵素反応に対する動的な色づけをおこなうため、マップ上に描くこれらの要素に対して、ID を付与する必要があります。Inkscape では、簡単な操作で ID をつけることが可能です。

#### 各要素に対する ID のフォーマット

| 要素      | 解説                 | ID   |
|---------|--------------------|--|
| 遺伝子     | 各遺伝子を表します。         | 文字列+(整数)_g<br>文字列部分は、システムで使われている ID または、TMG で始まるユーザー定義 ID です。<br>例)<br>At1g10002(1)_g<br>TMG00001(1)_g |
| 遺伝子ボックス | 酵素反応に対応した遺伝子群を表します | B + 番号<br>番号部分は酵素反応 ID の数値部分に対応します。<br>例) B00001   |
| 化合物     | 各化合物を表します          | KPC + 番号 または、TMC + 番号<br>番号より前の部分は、システムで使われている化合物 ID、または、TMC で始まるユーザー定義 ID です。<br>例)                   |

|       |                        |  |
|-------|------------------------|--|
|       |                        | KPC00005<br>TMC00001   |
| 酵素反応  | 酵素反応を表します              | R + 番号<br>システムで使われている酵素反応 ID です。   |
| 隣接マップ | クリックすると対応するマップにジャンプします | アルファベット 3 文字 + 数値 (+アルファベット 1 文字)<br>システムで使われているマップ ID です。<br>例) Uni00001, Uni00034f, Lja00017 |

## 各要素で使用可能な SVG オブジェクト

| 要素      | SVG オブジェクト      | 解説   |
|---------|-----------------|--|
| 遺伝子     | rect            | 塗り (fill) が指定されていないと、データによる色分けが表示されません。  |
| 遺伝子ボックス | rect            | 塗り (fill) が指定されていないと、データによる色分けが  |
| 化合物     | rect または circle | 塗り (fill) が指定されていないと、データによる色分けが表示されません。<br>rect を使用する場合、rx, ry 属性で角のカーブを作成することにより、丸い化合物シンボルを作ることができます。 |
| 酵素反応    | line または path   | path の場合、KaPPA-View4 システムで表示させる際には、波線を表現することができません。また、矢印の先端形状の指定もできません。                                |
| 隣接マップ   | rect または path   |  |

SVG では、SVG オブジェクトをグループ化した、グループオブジェクトを作成することも可能です。グループオブジェクトに ID を付与することで、グループ内の各要素に対して同一の ID をセットすることが可能です。その際、解析データの色づけはグループ直下に存在する要素に対してのみ行われます。

これは、化合物要素など、同一マップに複数箇所描きたい場合に利用することができます。

その他使用可能なオブジェクト

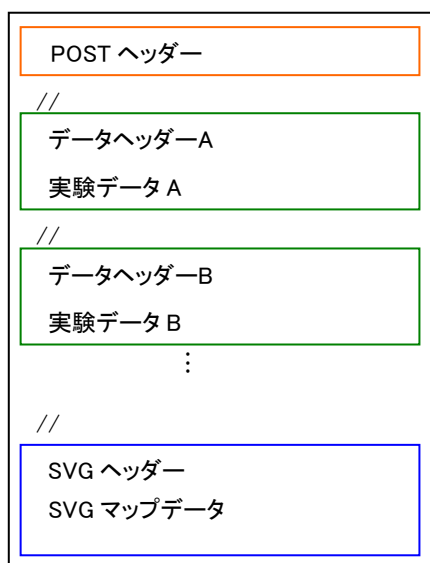
|          |   |
|----------|---|
| 文字オブジェクト | Arial フォントの使用をお勧めします。他のフォントも使用可能ですが、PC 環境によって意図しないフォントに置き換わる可能性があります。   |
| 画像       | 任意の画像を貼り付けることができますが、KaPPA-View4 で表示するためには、画像をファイルに埋め込む設定をして保存をしておく必要があります。また、画像の埋め込みを行うとファイルサイズが大きくなり、アップロードや表示に時間がかかります。 |

### 9-5. POST 転送用データ

POST データは POST 機能によって送信、登録される実験データ及び代謝マップのデータです。この節のフォーマットに従って作成されたテキストファイルを、**8-1. データアップロード API** に紹介した方法で KaPPA-View4 サーバーに POST 転送することにより、ユーザーがブラウザを介して KaPPA-View4 にログインする手続きを経なくとも、データの閲覧が可能になります。

#### 9-5-1. POST データの構造

POST データは下図のような構成になっています。



POST データファイル

POST ヘッダー部分には、生物種等データ全般に関するデータを記載します。それにつづく実験データ部分は、//によって区切られており、複数の実験データを記載することができます。最後に、ユーザーが作成した SVG データを記載することができます。SVG マップデータは省略することができます。

### 9-5-2. フォーマット

#### •POST ヘッダー部分

POST ヘッダーには、POST 転送するデータの基本属性を記載します。下記のフォーマットに従い、一行ずつ記載します。内容部分に改行を含めることはできません。

>項目名 **Tab** 内容

以下の項目を記載します。

| 項目       | 内容  |
|----------|---|
| >species | 生物種名を記載します。システム上に存在する Species の名称と一致させる必要があります。 |

|              |   |
|--------------|---|
| >array       | Array Type の名称を記載します。システム上に存在する Array Type の名称と一致させる必要があります。Array Type の調べ方は、 <b>p.87</b> を参照してください。  |
| >default_map | POST データを表示する際に使用するデフォルトのマッピングを記載します。システムに登録されているマッピング ID から先頭のアルファベット 3 文字を除いたもの、または、SVG データ部分で「>svg_name」で定義したユーザーマッピング名を記載することができます。<br>省略した場合や、不正なマッピング ID を記載した場合などは、デフォルトマッピングが表示されません。 |

### • 実験データ部分

POST データにおける実験データ部分は、**p.81** で解説したアップロード用の実験データとは異なります。転送する実験データは、KaPPA-View4 における解析手順において、Analysis により作成された Compared Experiment に相当します。ご注意ください。

一度に複数の実験データを記載することができ、各実験データは//で区切ります。それぞれの実験データには、ヘッダー部分とデータ部分に分かれています。

ヘッダーの書式は POST ヘッダーと同様で、下記のを記載します。

| 項目         | 内容  |
|------------|---|
| >set_name  | 実験データ(Compared Experiment)の名称を記載します。        |
| >data_type | 実験セットのタイプを定義します。array、compound のどちらかを指定します。 |

//で区切られた複数の実験データの中で、同じ>set\_name で同じ>data\_type が複数出現した場合は、最初に出現したデータだけが採用されます。また、同じ>set\_name で、それぞれの>data\_type が array と compound であった場合、その>set\_name は Transcript と Metabolite の双方のデータが存在する Compared Experiment として登録されます。

ヘッダーに引き続く部分がデータ本体です。下記の内容をタブ区切りで記載します。アップロード用の実験データ(**p.81**)とは異なりますのでご注意ください。

| 列 | 説明  |
|---|---|
| 1 | <p>エレメントの ID を入力します。Transcript の時は Feature ID、Metabolite の時は Compound ID となります。</p> <p>また、ユーザーが定義した任意の遺伝子 ID (TMG***)、化合物 ID (TMC***) も入力できます。SVG データにこれらの要素を描いておくことで、システムに存在しない要素への色づけをすることができます。</p> <p>システムで使われている Feature ID、Compound ID は、ダウンロードページから入手できる基本情報ファイルを参照してください(7. ダウンロードをご参照下さい)。</p> |
| 2 | <p>実験結果の値を入力します。Transcript の場合は log スケール、Metabolite の場合はリニアスケールの値として扱われます。Metabolite の場合に 0 および負の数を含めることはできません。</p> <p>列 3 にデータが入力されている場合は、列 2 と列 3 は比較実験の分子と分母としてそれぞれ扱われます。</p> <p>列 3 にデータが入力されていない場合は、列 2 の値が ratio データとして扱われます。</p>   |
| 3 | <p>実験結果の値を入力します。Transcript の場合は log スケール、Metabolite の場合はリニアスケールの値として扱われます。Metabolite の場合に 0 および負の数を含めることはできません。</p> <p>列 2 との比較時に分母として使用されます。</p> <p>省略された場合は、列 2 の値が ratio データとして扱われます。</p>  |

### • マップデータ部分

マップ部分は、マップの名称を記述する下記のヘッダーに続けて、\*\*\*で作成した SVG データをテキストデータとして記載します。ヘッダーのフォーマットは POST ヘッダーと同じです。

| 項目        | 内容  |
|-----------|---|
| >svg_name | <p>代謝マップの名称を記載します。</p> <p>この名称は、マップツリー上に表示されます。また、この名称を POST ヘッダーの &gt;default_map に記載することで、POST 転送が行われた直後に、ユーザーマップがブラウザ上に表示されるようになります。</p> |

## 9-5-3. サンプル

```
>species^ Arabidopsis thaliana^  
>array^ AGI Codes^  
>default_map^ AthTMAP02^  
//^  
>set_name^ Posted CompExp A^  
>data_type^ array^  
TMC001 ^ 0.07652^ 0.08213^  
At1g01010 ^ -0.58741^ 0.10697^  
At1g01030 ^ -0.40190^ -0.62194^  
At1g01040 ^ -0.61347^ 0.19020^  
At1g01050 ^ 0.08326^ 1.59364^  
.  
.  
//^  
>set_name^ Posted CompExp B^  
>data_type^ array^  
TMC001 ^ 0.00150^  
At1g01010 ^ -0.98685^  
At1g01030 ^ -0.16034^  
At1g01040 ^ 0.07234^  
At1g01050 ^ 2.03661^  
.  
.  
//^  
>set_name^ Posted CompExp B^  
>data_type^ compound^  
TMC001 ^ 1008^ 13^  
TMC002 ^ 98^ 1287^  
KPC00001 ^ 123^ 143^  
KPC00002 ^ 1056^ 978^  
KPC00003 ^ 348^ 417^  
.  
.  
//^  
>svg_name^ AthTMAP02^  
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" standalone="no"?>^  
<!-- Created with Inkscape (http://www.inkscape.org/) -->^  
<svg^  
  xmlns:svg="http://www.w3.org/2000/svg"^  
  xmlns="http://www.w3.org/2000/svg"^  
  .^  
  .^  
  .^  
</svg>^
```



## 10. デフォルトデータ

### 10-1. 生物種

KaPPA-View4にはデフォルトで4つの生物種のデータが搭載されています。代謝産物データと酵素反応データは、全ての生物種で共通のデータが参照されますが、遺伝子データ、マイクロアレイのプローブ(フィーチャー)データは、それぞれの生物種で個別に準備されています。また代謝マップデータは、各生物種で固有の代謝経路が存在する場合に、個別に作成しています。

デフォルトとして提供しているデータは、断り無く変更することがありますので、予めご了承ください。

各マイクロアレイで得られるプローブ ID を基準にした発現データを、対応する生物の遺伝子 ID を基準にしたデータに変換する処理には、KaPPA-Average というツールが便利です。本ソフトウェアは KaPPA-View4 のトップページ、「Download」→「Tools」より入手できます。

#### シロイヌナズナ (*Arabidopsis thaliana*)

KaPPA-View4 では、デフォルトデータを TAIR9 に対応させました。

|                  |   |
|------------------|---|
| Gene Identifier  | AGI codes (TAIR9, <a href="http://www.arabidopsis.org/">http://www.arabidopsis.org/</a> ) |
| Feature ID       | AGI codes 同上  |
| Gene Information | TAIR9 の遺伝子アノテーション   |

マイクロアレイのデータをアップロードする際は、各マイクロアレイのプローブ ID を、アノテーションの枝番号を除いた AGI コードに変換して、ご利用ください。

#### イネ (*Oryza sativa*)

イネのデフォルトデータは、KaPPA-View3とは異なっています。

|                  |   |
|------------------|---|
| Gene Identifier  | RAP-DB ( <a href="http://rapdb.dna.affrc.go.jp/">http://rapdb.dna.affrc.go.jp/</a> )より提供されている build5 の遺伝子アノテーションの、転写物 ID (rap_representative) |
| Feature ID       | 同上  |
| Gene Information | RAP-DB build5 のアノテーション情報。<br>そのタンパク質翻訳領域を TAIR9 のシロイヌナズナペプチドデータに blastp 検索した結果のうち e-value 10E-30 以下の上位 3 ヒット。                                 |

### トマト (*Solanum lycopersicum*)

|                  |  |
|------------------|--|
| Gene Identifier  | Affymetrix 社 GeneChip® Tomato Genome Array のプローブ ID  |
| Feature ID       | 同上   |
| Gene Information | Affymetrix 社 GeneChip® Tomato Genome Array のプローブデザインに用いられた EST クローンの配列を、TAIR7 のシロイヌナズナペプチドデータおよび NCBI nr に Blastx 検索した結果、および、NCBI nt に Blastn 検索した結果を集計した。 |

### ミヤコグサ (*Lotus japonicus*)


ミヤコグサのデフォルトデータは、KaPPA-View3とは異なるものになっています。

|                  |  |
|------------------|--|
| Gene Identifier  | かずさ DNA 研究所で整備されたミヤコグサゲノムの遺伝子 ID ( <a href="http://www.kazusa.or.jp/lotus/index.html">http://www.kazusa.or.jp/lotus/index.html</a> ) |
| Feature ID       | 同上   |
| Gene Information | 上記遺伝子の翻訳配列を TAIR9 のシロイヌナズナペプチドデータに blastp 検索した結果のうち e-value 10E-30 以下の上位 3 ヒット   |





## 10-2. 実験データ

データ解析の手順や動作の学習用に、KaPPA-View4には予め各生物種のデモデータを搭載しています。デモデータはコンピューターによりランダムに作成したデータですので、生物学的意味は全くありません。

デモデータには、Analysis 機能の実験データ選択画面で、Set Name やコメント欄に Demo と表記されていますので、ご確認のうえご使用下さい。

| Set ID  | Set Name                 | Array Type         | No of Exp | Uploaded Date | Related Data |
|---|--------------------------|--------------------|-----------|---------------|--------------|
|  KEST_dLja | Lja Transcript Demo Data | Agilent Kazusa-001 | 4         | 2009/10/28    | KESM_dLja    |


  

| Exp ID   | Exp Name | Comment                            | Type         |
|--|----------|------------------------------------|--------------|
|  KEPT_dLjaA | Lja A    | Computationally created demo data. | quantitative |
|  KEPT_dLjaB | Lja B    | Computationally created demo data. | quantitative |
|  KEPT_dLjaC | Lja C    | Computationally created demo data. | quantitative |
|  KEPT_dLjaD | Lja D    | Computationally created demo data. | quantitative |




シロイヌナズナについては、若干の実データを掲載しています。それぞれの詳細については、Analysis 機能の実験データ選択画面で、Set ID または Exp ID をクリックすると、ポップアップ画面に簡単なサンプル情報が記載されていますので、ご確認ください。

Showing 10 per page

Showing 1 - 1 of 1

| Set ID   | Set Name                  | Array Type | No of Exp | Uploaded Date | Related Data |
|--|---------------------------|------------|-----------|---------------|--------------|
|  <b>KEST1</b> | Ath Transcripts Demo Data | AGI codes  | 8         | 2009/10/28    |              |

| Exp ID  | Exp Name                                 | Comment                     | Type         |
|---|--|-----------------------------|--------------|
|  KEPT1_1 | [sample_0] All zero control              | All values are set to 0.    | quantitative |
|  KEPT1_2 | [sample_A1] Leaves (21 days)             | hybridized with [sample_A2] | quantitative |
|  KEPT1_3 | [sample_A2] T87 cultured cells (14 days) | hybridized with [sample_A1] | quantitative |



| Experiment Information       |                                |
|------------------------------|--------------------------------|
| [Experiment Set Information] |                                |
| Experiment Type              | TRANSCRIPT                     |
| Set_Set ID                   | KEST1                          |
| Set_Experiment Set Name      | Ath Transcripts Demo Data      |
| Set_Array Type               | AGI codes                      |
| Set_Description              | Default data for demonstration |
| Set_Depositor Name           | sakurai                        |
| [Experiments]                |                                |
| Data_Experiment_ID           | KEPT1_1                        |
| Data_Experiment_Name         | [sample_0] All zero control    |
| Data_Value Type              | quantitative                   |
| Data_Comments                | All values are set to 0.       |
| Data_Experiment_ID           | KEPT1_2                        |
| Data_Experiment_Name         | [sample_A1] Leaves (21 days)   |
| Data_Value Type              | quantitative                   |
| Data_Comments                | hybridized with [sample_A2]    |
| Data_Sample_Source           | Arabidopsis leaves, 21 days    |
| Data_Sample_Species          | Arabidopsis thaliana           |
| Data_Sample_Provider         | Kazusa DNA Research Institute  |
| Data_Array_Platform          | Agilent 22 K                   |
| Data_Array_Detection         | 2 color                        |
| Data_Array_Data retrieve     | Feature Extraction 9.0         |
| Data_Data_normalization      | normalized to median           |
| Data_Experiment_ID           | KEPT1_3                        |

### 10-3. 関連データ

シロイヌナズナのデータのみ搭載しています。遺伝子発現の関連データは ATTED-II データベース (Obayashi et al. 2009, <http://atted.jp/>) よりご提供いただきました。化合物関連データは、デモデータとして、薬剤処理したシロイヌナズナ培養細胞の代謝分析データより作成しました。

#### **ATTED-II AthGeneCor\_v3 (1388 chips) >= 0.6**

1388 枚の Affymetrix ATH1 GeneChip データより計算された遺伝子-遺伝子間のピアソン相関(AthGeneCor\_v3, ATTED-II)のうち、0.6 以上のもの

#### **ATTED-II AthGeneCor\_v3 (1388 chips) <= -0.6**

1388 枚の Affymetrix ATH1 GeneChip データより計算された遺伝子-遺伝子間のピアソン相関(AthGeneCor\_v3, ATTED-II)のうち、-0.6 以下のもの

#### **ATTED-II AthGeneCor\_v3 (1388 chips) >= 0.795 (top 5 x genes)**

1388 枚の Affymetrix ATH1 GeneChip データより計算された遺伝子-遺伝子間のピアソン相関(AthGeneCor\_v3, ATTED-II)のうち、0.795 以上のもの。境界値は、一つの遺伝子が平均で他の 5 遺伝子と関連性を持つように設定した。

**ATTED-II hormones (236 chips)  $\geq$  0.817 (top 5 x genes)**

ホルモン処理に関連する 236 枚の Affymetrix ATH1 GeneChip データより計算された遺伝子-遺伝子間のピアソン相関のうち、0.817 以上のもの。境界値は、一つの遺伝子が平均で他の 5 遺伝子と関連性を持つように設定した。

**ATTED-II tissues (237 chips)  $\geq$  0.916 (top 5 x genes)**

様々な植物の部位から得られた 237 枚の Affymetrix ATH1 GeneChip データより計算された遺伝子-遺伝子間のピアソン相関のうち、0.916 以上のもの。境界値は、一つの遺伝子が平均で他の 5 遺伝子と関連性を持つように設定した。

**ATTED-II stresses (298 chips)  $\geq$  0.739 (top 5 x genes)**

ストレス処理に関連する 298 枚の Affymetrix ATH1 GeneChip データより計算された遺伝子-遺伝子間のピアソン相関のうち、0.739 以上のもの。境界値は、一つの遺伝子が平均で他の 5 遺伝子と関連性を持つように設定した。

## 11. 利用のヒントとトラブルシューティング

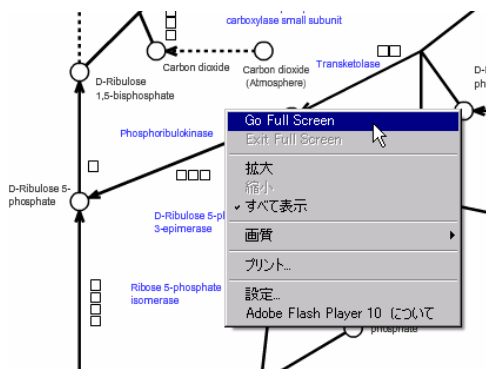
この章では、KaPPA-View4 をより身近なツールとしてつかうための Tips や、困ったときの対処法を紹介します。

### 11-1. マップの画面撮りを作成する

代謝マップのスクリーンショットをとるには、以下のようにフルスクリーンモードにすると便利です。

代謝マップ上を右クリックすると、Flash のコンテキストメニューが表示されます。その中の「Go Full Screen」を選択することで、フルスクリーン表示されます。

フルスクリーン表示にして画面撮りする (Windows では **PrtScr** ボタンを押す) ことにより、画面上での最大解像度の代謝マップを、いつも決まった大きさに撮ることができます。



### 11-2. 2色法のマイクロアレイデータを扱う

2色法のマイクロアレイデータでは、2実験間の比のデータが出力されます。

KaPPA-View4 で2色法のデータを扱う場合は、以下のように行って下さい。

方法1)

2色法で得た比のデータ(A)の他に、全プローブの値が1であるデータ(B)を作成し、両方をアップロードします。その後、Analysisの実験データ選択画面で、AとBを選択した比較実験ペアを作成してください。

方法2)

アップロードする際にヘッダー付きのデータとして準備し、ヘッダー情報の>Data\_Value Typeにratioを指定してください。アップロード後に、そのデータを単独データとして選択することで、2色法の比のデータがそのまま反映されることになります。

### 11-3. 1 色法のマイクロアレイデータを扱う

1色法のマイクロアレイで得られた相対発現量のデータを閲覧する際は、値をlog化した後、全プローブの中央値などで除算して、ノーマライズ(センタライズ)すると、色のグラデーションを最も広いレンジで使った色分け表示が可能です。quantitativeのデータ(デフォルト設定)としてアップロードを行うと、11-2の方法1)に従うことで、1色法の1件のデータを閲覧できますし、任意の2件のデータを選択して比較実験ペアを作成することも可能となります。2件以上のデータを比較する際は、適宜比較に適したノーマライズ法を採用してください。

### 11-4. 化合物IDを調べる

代謝産物のデータをアップロードする際は、KaPPA-Viewシステム内で使用されている化合物IDを知る必要があります。化合物IDを調べるには、いくつかの方法があります。

方法1)

マップ上で化合物をクリックし、化合物情報ページでIDを参照する。

調べたい化合物数が比較的少数であり、かつ化合物がマップに描かれている場合に有効です。

方法2)

Search 機能を使って、化合物名や CAS ID などで検索する。

調べたい化合物数が比較的少数である場合に有効です。Search 機能ではマップ上に描かれていない化合物も検索可能なので、ユーザーマップを作成する際には便利です。

方法3)

ダウンロードページから、化合物情報ファイルをダウンロードして参照します。

調べたい化合物数が多い場合に有効です。



## 12. 謝辞

---

代謝マップの作成に当たっては、以下の方々にご監修いただきました。篤く御礼申し上げます。

太田啓之教授（東京工業大学） 脂質代謝

西谷和彦教授（東北大学） 細胞壁代謝

古山種俊教授（東北大学） イソプレノイド代謝

梅澤俊明教授（京都大学） モノリグノール生合成

三沢典彦教授（旧海洋バイオテクノロジー研究所） カロテノイド生合成

斉藤和季教授（千葉大学院） アントシアニン、グルコシノレート生合成、硫黄代謝

本研究開発は、経済産業省の「生物機能活用型循環産業システム創造プログラム」の一環として、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) より委託を受けて、実施されたものです。

## 13. 参考文献

---

### KaPPA-View に関する文献

Tokimatsu T, Sakurai N, Suzuki H, Ohta H, Nishitani K, Koyama T, Umezawa T, Misawa N, Saito K and Shibata D (2005) KaPPA-view: a web-based analysis tool for integration of transcript and metabolite data on plant metabolic pathway maps. *Plant Physiol* **138**: 1289-1300

Tokimatsu T, Sakurai N, Suzuki H and Shibata D (2006) KaPPA-View: A tool for Integrating Transcriptomic and Metabolomic Data on Plant Metabolic Pathway Maps. In Saito K, Dixon RA and Willmitzer L eds, *Biotechnology in Agriculture and Forestry*, Vol. **57**, pp. 155-163, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg

Sakurai N and Shibata D (2006) KaPPA-View for integrating quantitative transcriptomic and metabolomic data on plant metabolic pathway maps. *J Pesticide Science* **31**: 293-295

### その他の文献

Obayashi T, Hayashi S, Saeki M, Ohta H and Kinoshita K. (2009) ATTED-II provides coexpressed gene networks for Arabidopsis. *Nucleic Acids Res.*, **37**, D987-991.

## 14. 連絡先

KaPPA-View4 システムの仕様、不具合、ご要望などに関する全てのお問い合わせは、KaPPA-View 開発チームまでお寄せ下さい。

### KaPPA-View 開発チーム

〒292-0818 千葉県木更津市かずさ鎌足 2-6-7

財団法人かずさディー・エヌ・エー研究所 産業基盤開発研究部 ゲノムバイテック研究室

チーム代表：櫻井望

開発統括：柴田大輔

<http://www.kazusa.or.jp/>

E-mail: kappa-view at kazusa.or.jp (at は@に置き換えて下さい)

### プログラミングおよびシステム構築

 **AXIOHELIX** アクシオヘリックス株式会社

<http://www.axiohelix.com/>

E-mail: info at axiohelix.com (at は@に置き換えて下さい)

#### **沖縄本社:**

〒901-0152 沖縄県那覇市小禄 1831-1 産業支援センター 502

TEL: 098-858-2887

FAX: 098-987-0288

#### **東京戦略室:**

〒140-0001 東京都品川区北品川 3-6-9 アンドウビル 8F

TEL: 03-6698-6731

FAX: 03-6698-6734