

多样品代谢通路比较分析帮助文档 V1.0

目 录

1 方法介绍.....1

2 分析过程.....2

 2.1 颜色的选择:3

 2.2 边宽的选择:3

 2.3 网页版 iPATH 使用说明:3

3 结果展示.....5

4 交付结果.....5

5 参考文献.....6

1 方法介绍

iPath(Interactive Pathways Explorer) (<http://pathways.embl.de>)是一个网页版的通路图 (pathways maps) 可视化分析软件。当前的版本 (iPath2.0) 可提供3种不同通路的概括图: 代谢通路、调控通路以及生物合成和次生代谢通路, 其中, 代谢通路属于第一层级Metabolism大类, 生物合成和次生代谢通路属于Metabolism代谢通路下的Biosynthesis of Other Secondary Metabolites子类, 其 KEGG map 标号为map01110。

代谢通路图中的节点对应各种化合物, 边代表一系列的酶类反应。对多个样品来说, 通过对它们的代谢途径进行比较与分析, 找出它们的共性和特性, 特别是对它们特殊代谢途径的分析, 能够为进一步深入研究和利用样品的功能提供理论依据。

使用软件: iPath 网页版通路图 (pathways maps) 可视化分析软件。

2 分析过程

根据 KEGG PATHWAY 数据库的注释结果, 提取多个样品功能类—新陈代谢 (Metabolism) 相关的 KOs (KEGG orthologous groups) (同步提取 map01110 生物合成和次生代谢通路相关的 KOs), 然后计算每个 KOs 在每个样品中的丰度, 根据丰度大小来确定对应代谢途径所表示的边的颜色以及宽度 (具体说明见下文)。提取后的 KO 以及颜色、边宽等信息保存在 Metabolism.txt 文件 (及 map01110.txt) 中, 文件格式为:

K00001	W5.0	#ff0000
K00003	W5.0	#FFFF00
K00004	W15.0	#ff0000
K00005	W25.0	#ff0000

其中, 第一列代表 KO 的编号, 第二列代表其在 KEGG 通路中的显示宽度, 第三列代表显示颜色。

2.1 颜色的选择:

以两个样品为例，A 样品独有的 KO 将以一种颜色（默认绿色，#00FF00）表示；B 样品独有的 KO 将以另外一种颜色（默认黄色，#FFFF00）表示；A 和 B 样品共有的 KO 将以另外不同的颜色（默认红色，#FF0000）表示；这样可以根据代谢途径中边的颜色来区分样品中是否存在某一代谢通路相关的基因；

2.2 边宽的选择:

对于 A 样品和 B 样品独有的 KO，默认边宽为 15.0px；对于 A 样品和 B 样品共有的 KO，当 A 样品中的丰度大于 B 样品中的丰度时，边宽为 25.0px；当 A 样品中的丰度小于 B 样品中的丰度时，边宽为 5.0px；这样可以根据代谢途径中边的粗细来比较样品中相应 KO 的丰度差异；

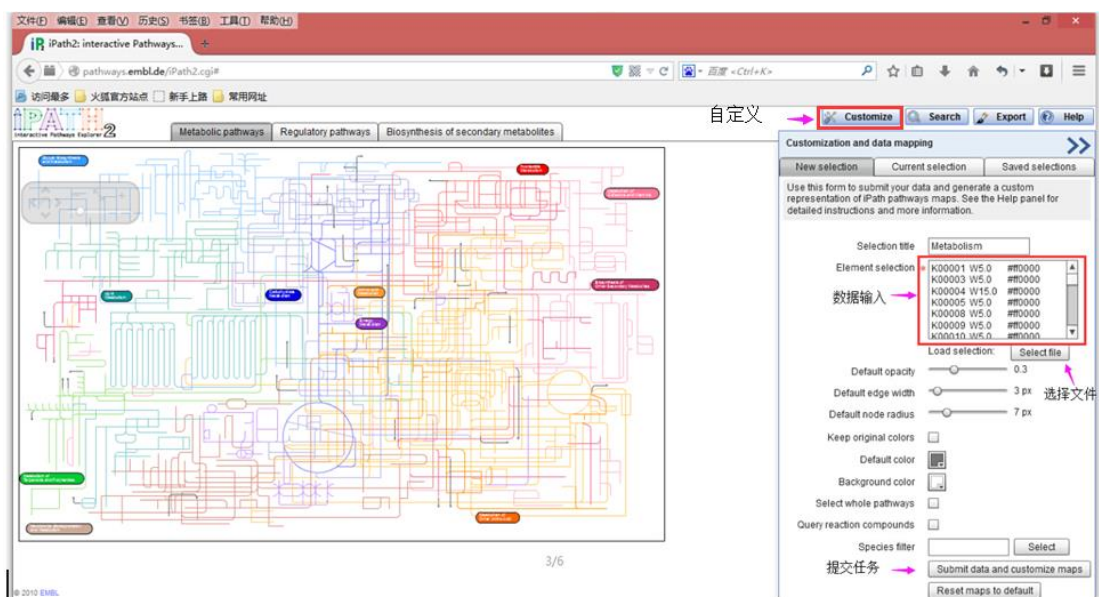
2.3 网页版 iPATH 使用说明:

登陆 ipath2.0 服务器的主页 (<http://pathways.embl.de/>)，Windows 系统下面建议使用 Internet Explorer 7（及以上版本）、Google Chrome、Firefox 和 Opera 等浏览器（需要安装 Adobe Flash 插件）。可以在主页右上方点击“HELP”了解相关帮助信息；

点击“iPath v2: the main interface”进入用户页面 (<http://pathways.embl.de/iPath2.cgi>)，会显示如下图片，显示登陆进程：

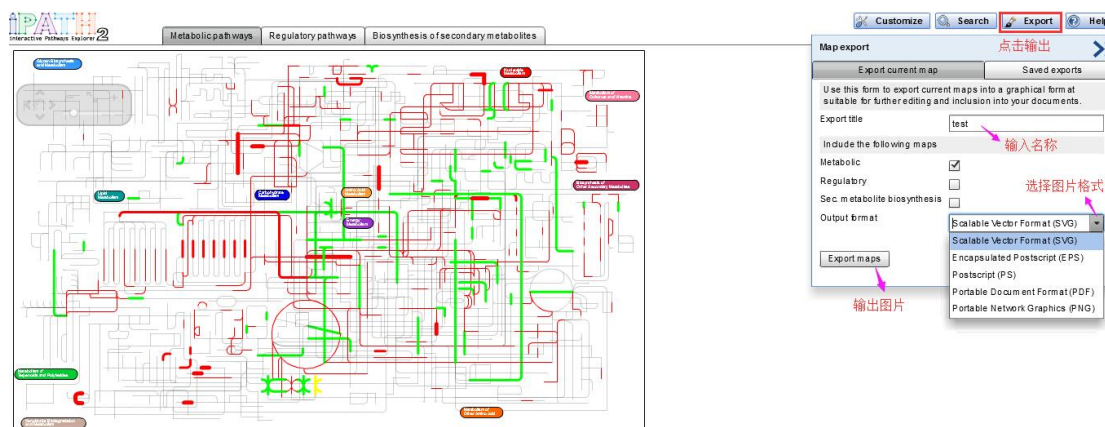


进入到用户页面后，在网页右方点击“Customize”，选择输入文件或者在相应的对话框内输入交付结果中提供的*.Metabolism.txt 或*.map01110.txt 的内容；



点击提交按钮，等运行完之后，在网页的左方会出现相应的代谢通路图，用户可以选择相应图片格式下载(下载速度与图片大小以及网络有关，请耐心等待)。

同时，提交运行完成后，用户可进行一系列放大，查找等基本操作，更多详细信息可参考官方帮助文档：<http://pathways.embl.de/help.html>



3 结果展示

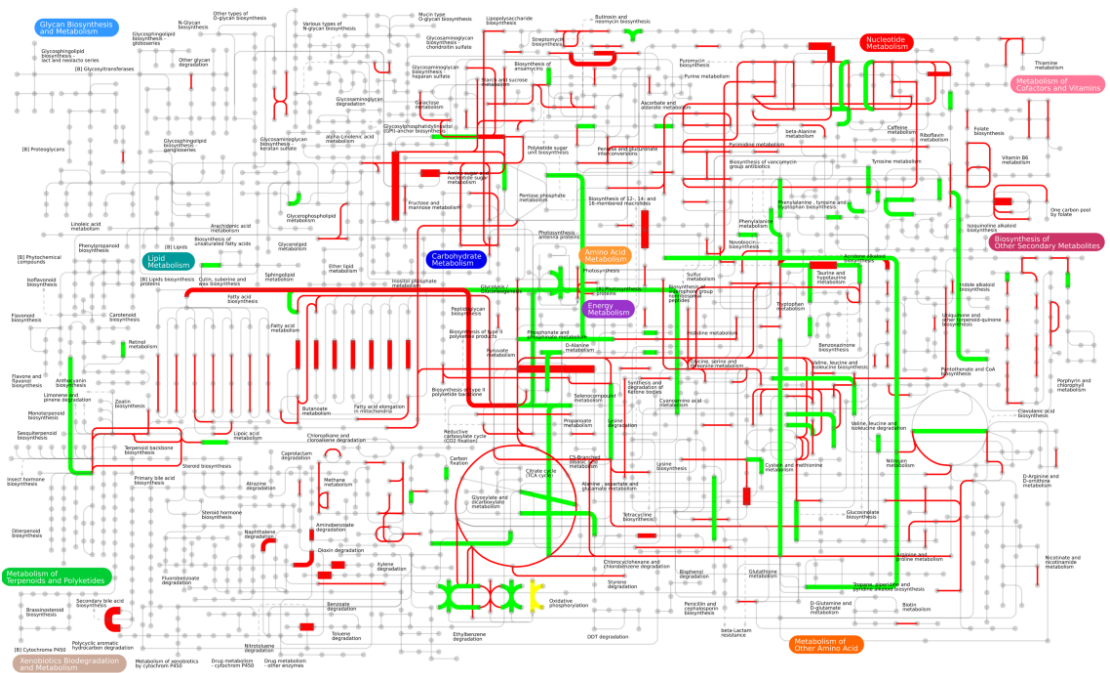


图 3-1 多样品代谢通路比较分析图（示例）

4 交付结果

结果目录：iPATH

```
Test1_VS_Test2.map01110.txt
Test1_VS_Test2.metabolism.txt
Test2_VS_Test10.map01110.txt
Test2_VS_Test10.metabolism.txt
Test2_VS_Test3.map01110.txt
Test2_VS_Test3.metabolism.txt
```

*.map01110.txt：生物合成和次生代谢通路；

*.metabolism.txt：代谢通路；

备注：参考分析过程，可将结果目录中的文件直接导入到 iPATH 网站中进行查看。

5 参考文献

- [1] Letunic I, Yamada T, Kanehisa M, et al. iPath: interactive exploration of biochemical pathways and networks[J]. Trends in biochemical sciences, 2008, 33(3): 101-103.
- [2] Yamada T, Letunic I, Okuda S, et al. iPath2. 0: interactive pathway explorer[J]. Nucleic acids research, 2011, 39(suppl 2): W412-W415.