

Clarivate Analytics

System Biology Solutionsの最近 の強化点と今後の開発計画

MetaCoreユーザー会
2019年6月5日

クラリベイト・アナリティクス
ライフサイエンス・ジャパン
ソリューションコンサルタント
門岡 桂史



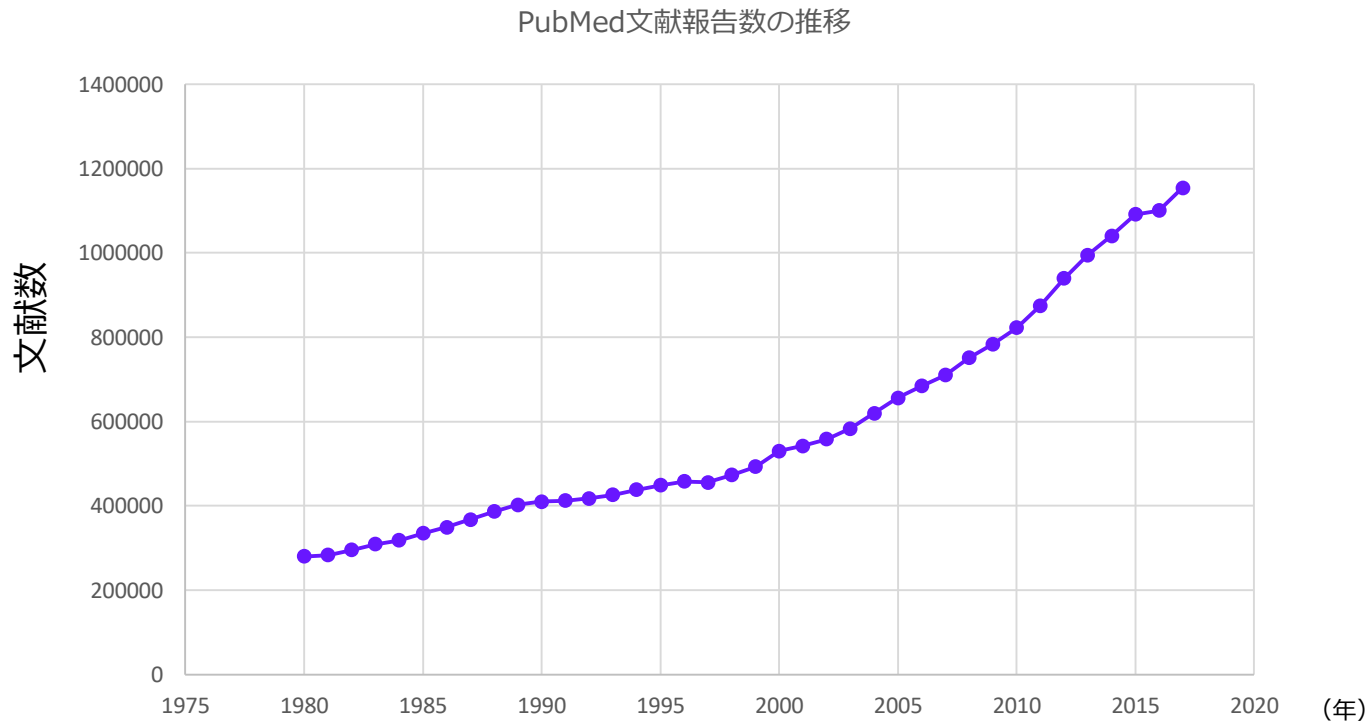
Big data challenges in the Life Sciences



- As technological advances lead to the generation of more omics data, scientists are facing a new challenge in making sense of it all.
- New tools are needed that can meet this challenge to enable researchers to generate actionable hypothesis from their data.

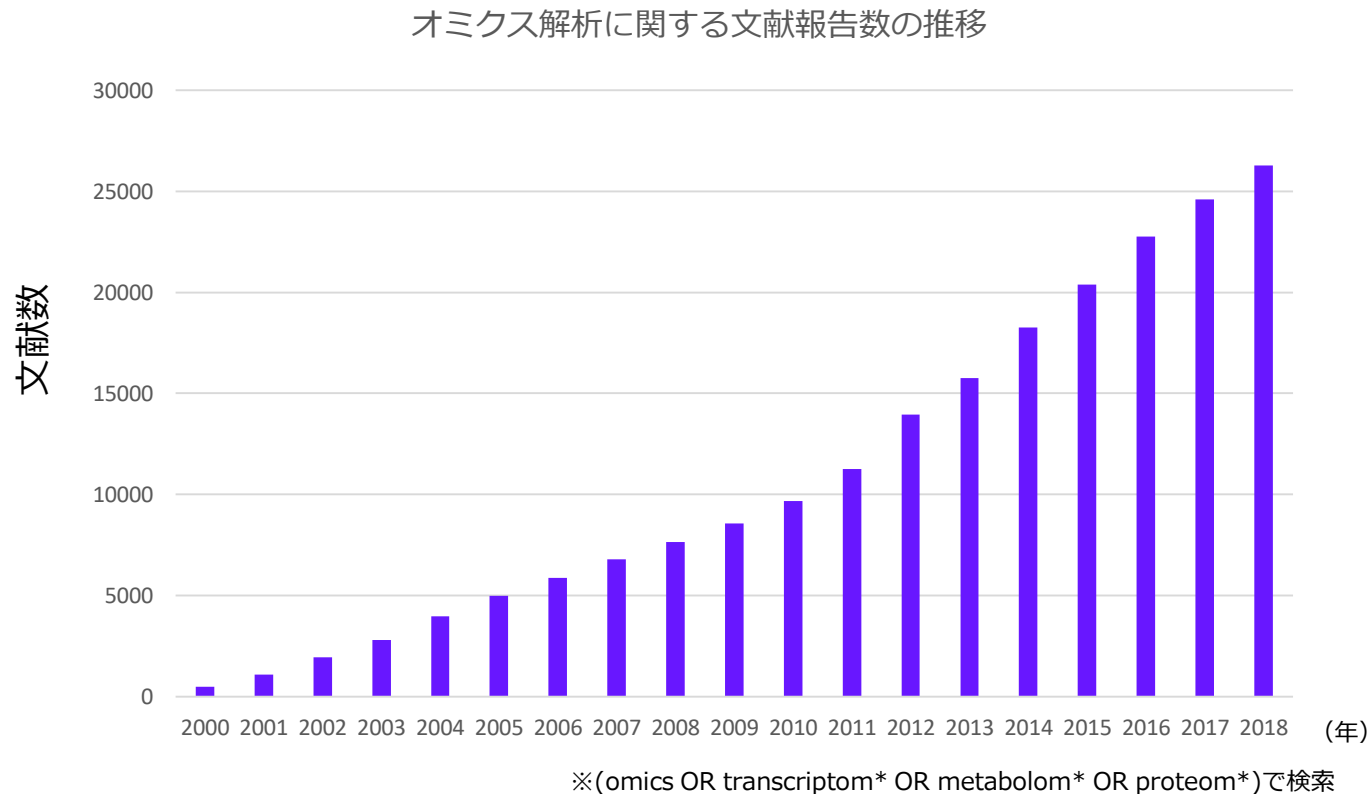
文献報告数の推移

年間で報告される文献数は増え続けている。



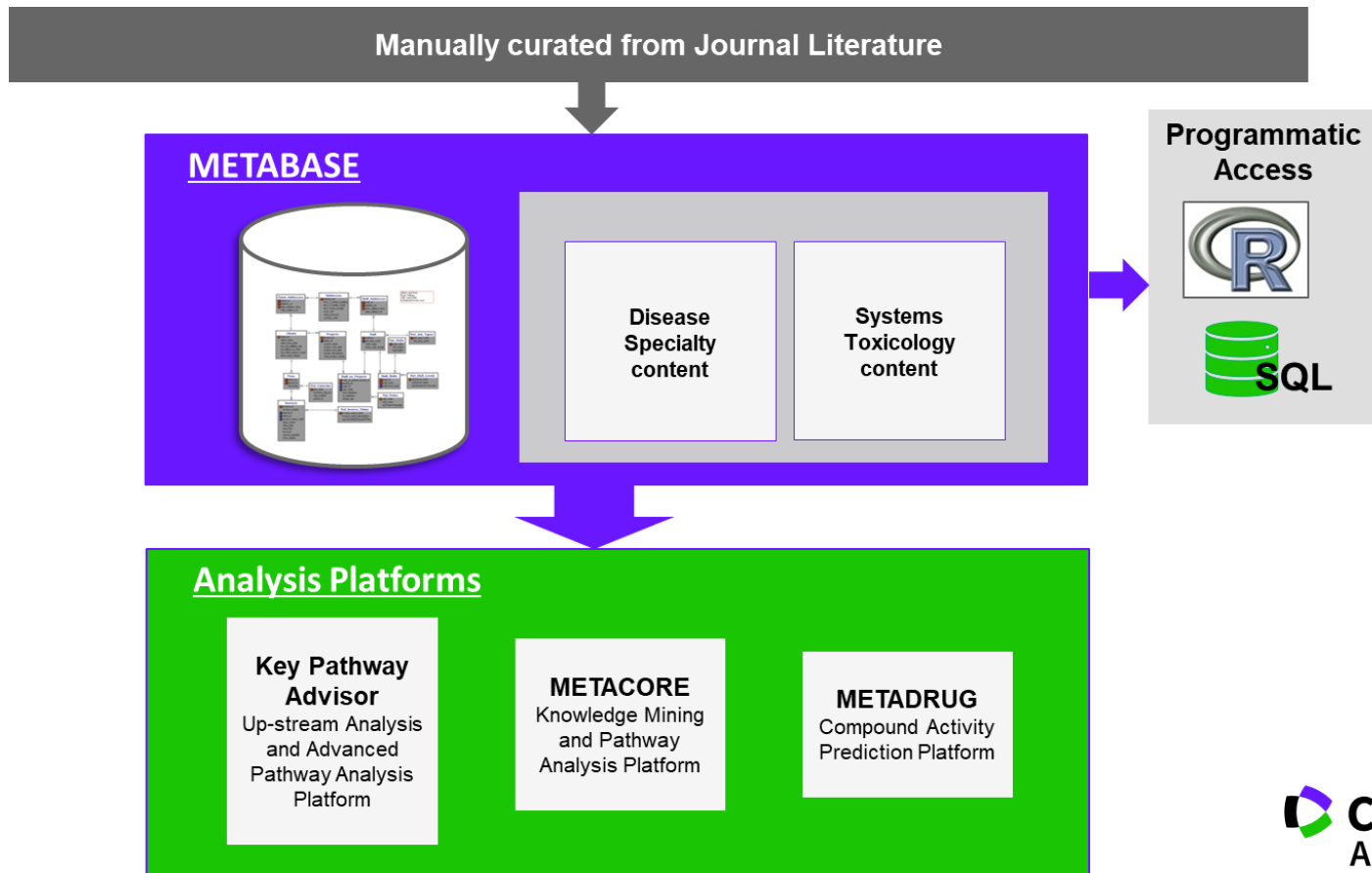
文献報告数の推移

年間で報告される文献数は増え続けている。



System Biology SolutionsとMetaBase（医科学・創薬のためのナレッジベース）

5



MetaCoreとは？

- ナレッジマイニング及びオミックス解析を支援する解析プラットフォームです。

- ナレッジマイニング

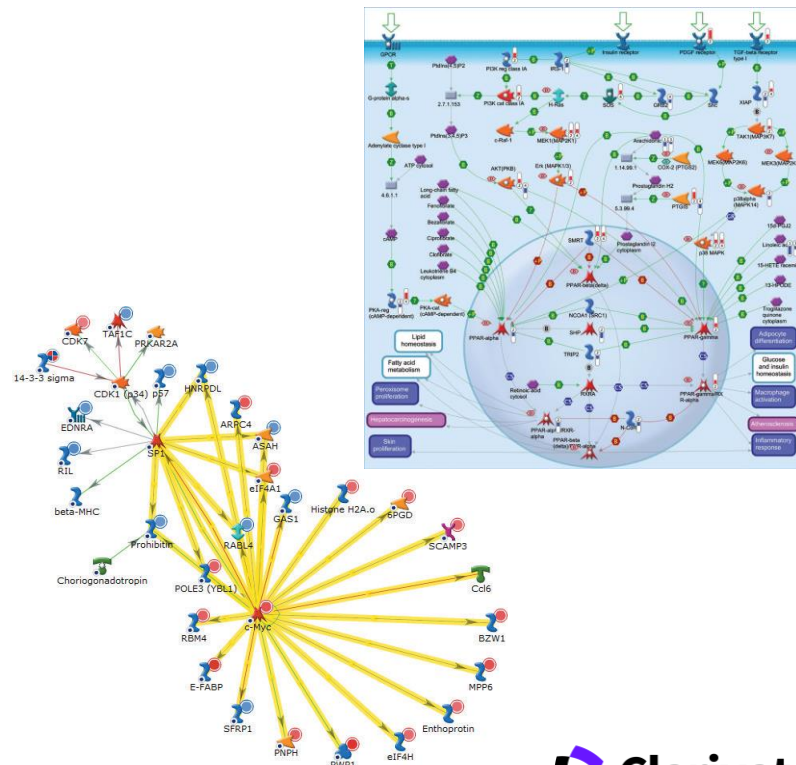
専門のスタッフによって収集された豊富な分子間相互作用情報、パスウェイマップ、疾患関連分子などを自由に検索することが可能です。

- エンリッチメント解析（パスウェイ解析）

専門のスタッフによって収録された信頼性の高いコンテンツと独自かつ詳細なオントロジーに基づくパスウェイ解析によって、OMICsデータの理解を強力にサポートします。

- 自由自在なネットワーク解析

様々な検討段階からネットワーク構築を行えると共に、多様なアルゴリズムとフィルター機能によって自在に構築を行い解析に役立てることが可能です。



MetaDrugとは？

- ナレッジマイニング及びシステム薬理学・毒性学のための解析プラットフォームです。

- ナレッジマイニング

専門のスタッフによって収集された豊富な分子間相互作用情報、パスウェイマップ、疾患関連分子などを自由に検索することが可能です。

- 化合物情報からパスウェイ解析への展開

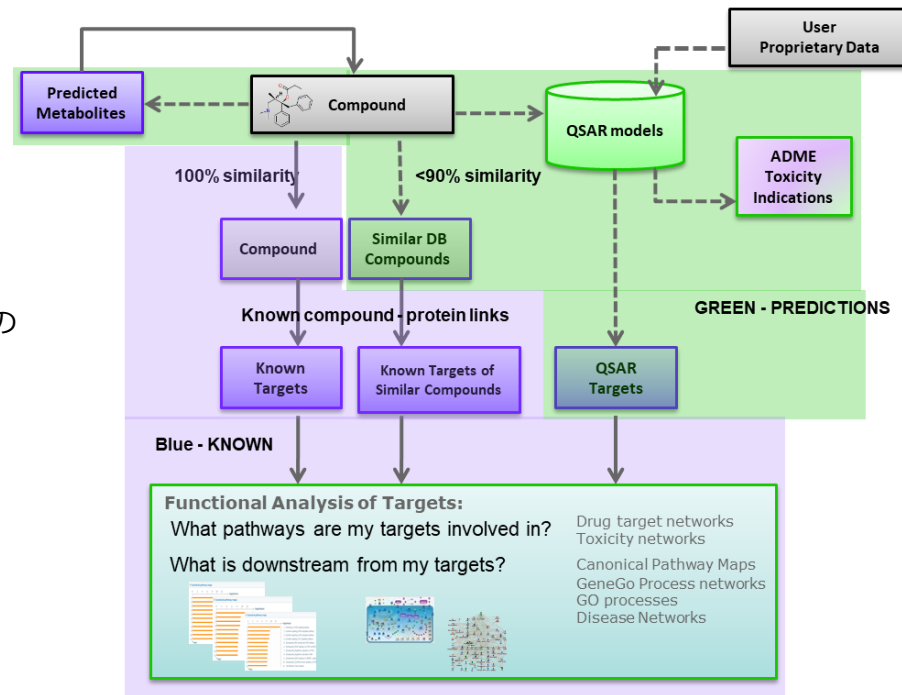
化合物の標的分子情報に基きパスウェイ解析を行うことで、その化合物の生物学的な影響の機序を予測することが可能です。

- 類似構造予測機能

類似化合物の予測によって、より柔軟に解析へ展開できます。

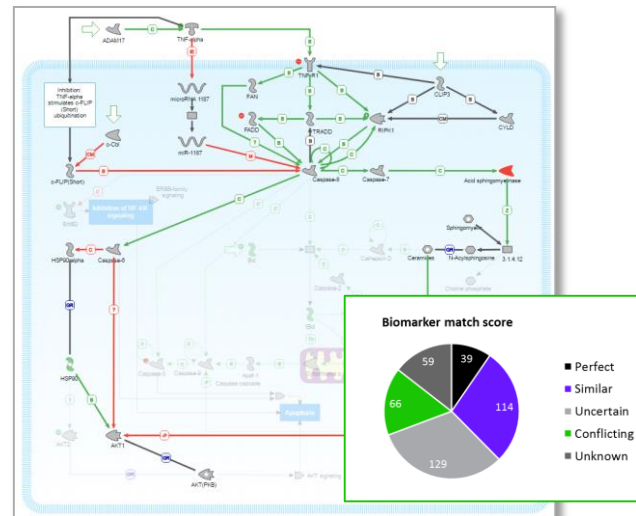
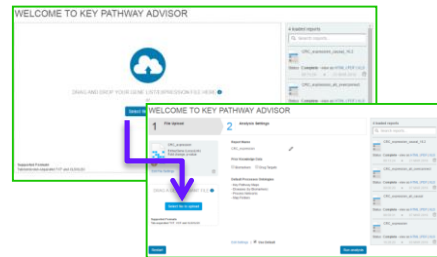
- 代謝物予測機能

豊富なコンテンツに基いて化合物の代謝物を予測します。



KPA (Key Pathway Advisor) とは

- シンプルな操作性とビジュアル、独自の解析法で OMICsデータのより迅速な理解を支援するための解析ツールです。
- 遺伝子の発現変動を共通して調節している上流因子の予測
 - Causal reasoningアルゴリズムに基づき、発現変動遺伝子の上流因子 (Key Hubs) を探索することが可能です。
- 相乗的エンリッチメント解析
 - Key Hubsをエンリッチメント解析へと取り込むことで、実験データの生物学的意義をより深く解釈することが可能です。
- 発現変動遺伝子が分子プロセスにどのように影響するかを予測
 - Signaling pathway impact analysis (SPIA)アルゴリズムに基づき、パスウェイの各因子への影響を予測することができます
- バイオマーカー解析・Drug Target解析
 - 指定した疾患において、発現変動遺伝子 / Key Hubsが医薬品開発の標的分子として適しているか、それらについて医薬品開発が行われているか、を簡便に評価することが可能です。



Bioinformaticsに馴染みのない研究者でも簡単に解析を始めることができると共に、様々な研究者のより効率的な解析を支援します。

MetaCore/KPAの最近の強化点

MetaBase 収録コンテンツ (2019年Q2)

データベース

• 遺伝子 (ヒト)	61,517
• タンパク質 (ヒト)	20,412
• 遺伝子 (マウス)	68,166
• タンパク質 (マウス)	17,006
• 遺伝子 (ラット)	47,958
• タンパク質 (ラット)	8,054
• 化合物	876,219
• 化合物 (構造式付き)	858,534
• 内因性化合物	5,467
• 栄養性化合物	126
• 生体異物代謝物	31,563
• 医薬品	9,129
- 生物製剤	1,358
- 低分子	7,771
- 承認済み医薬品	2,291
- 取り下げ医薬品	261
- 治験段階の医薬品	5,002
- 開発中止された医薬品	1,188
- 前臨床段階の医薬品	251
- 不明	136
- 多剤併用レジメン	8,444

ネットワーク

• ネットワーク内の遺伝子 (ヒト)	24,979
• ネットワーク内の遺伝子 (マウス)	22,105
• ネットワーク内の遺伝子 (ラット)	18,770
• ネットワーク内の化合物	418,321
• ネットワーク内の医薬品	3,585
• ネットワーク内の内因性化合物	4,764
• ネットワーク内の代謝反応	39,225
• 相互作用	2,315,807
- タンパク質 – タンパク質	926,267
- 化合物 – タンパク質	799,604
- 化合物 – 化合物	11,635
- 代謝酵素 – 反応式	49,557
- 基質, 生成物 – 反応式	107,418
- RNA – タンパク質	416,613
• 収録ジャーナル	3,710
• マップ	1,569

過去1年における主なコンテンツの増加分

項目	Q2-2018	Q2-2019	増加分
収録ジャーナル数	3,700	3,710	10
収録論文数 (network - interactions, reactions)	273,267	287,256	13,989
分子間相互作用数 (総数)	1,924,033	2,315,807	391,774
分子間相互作用数 (Protein-Protein interactions)	849,694	926,267	76,573
分子間相互作用数 (Substrate, Product – Reactions interactions)	101,732	107,418	5,686
分子間相互作用数 (RNA-protein interactions)	148,689	416,613	267,924
パスウェイマップ数 (Regulatory and metabolic maps)	800	811	11
パスウェイマップ数 (Disease maps)	721	729	8

コンテンツ強化ハイライト

- Gene-disease associationの情報を大幅にアップデート

2018 Q4

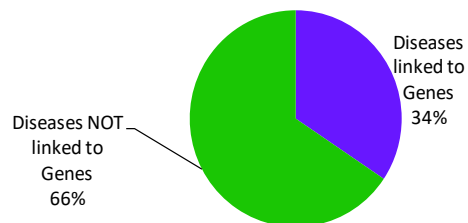
188,829 unique gene-disease
associations from 94,865 articles



2019 Q1

220,845 unique gene-disease
associations from 121,210 articles

9,422 Diseases, based on MESH+OMIM



21,440 genes are linked to 3,240 diseases

- RNA-protein interactionの情報がさらに充実

Non-coding RNAs interactions	Total amount of interactions
microRNA	170,730
Other types of non-coding RNAs	9,205



Non-coding RNAs interactions	Total amount of interactions
microRNA	409,720
Other types of non-coding RNAs	9,477

疾患パスウェイマップの統合 (昨年の強化点)

- MetaMiner Partnershipによって構築されたDisease Pathway Mapsを統合

Maps : 1,569

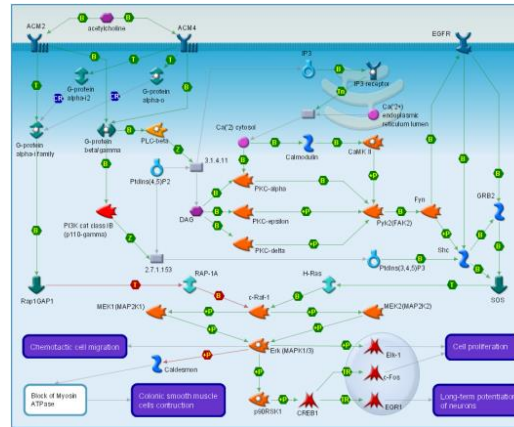
Unique Content

(672 regulatory processes maps

+ 729 Disease maps

+ 139 Metabolic maps

+ 29 Toxicity maps)



ACM2 and ACM4 activation of ERK

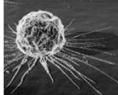
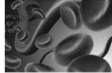
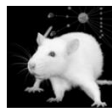
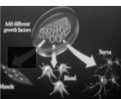
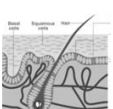
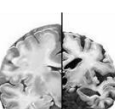
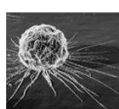
(参考) MetaMiner Partnershipについて

目的：疾患パスウェイマップの構築/提供

- ・ コンソーシアム型プログラム（2009年より開始）
- ・ 参加企業1社につき、パスウェイマップを5つ作製

成果物

- ✓ 疾患特異的パスウェイマップ
- ✓ 疾患特異的遺伝子変異
- ✓ バイオマーカー
- ✓ OMICsデータ・リポジトリ

Completed				Ongoing	Coming soon		
Cystic Fibrosis  CFF Foundation	Asthma1, 2  AZ, JNJ, Merck	Prostate Cancer  Exclusive Project	Multiple Sclerosis  Vertex, IOP	Oncology1,2  Eli Lilly Millennium J&J Tgen Van Andel Harvard Johns Hopkins CRUK	Hematology  Exclusive Project	Immunology  Celgene, BI	Microbiome 
Toxicology  Elan FDA Vertex	Stem Cells  Astra Zeneca Eli Lilly Novartis Chicago Children's Hospital University of Glasgow University of Sheffield University of Queensland USC	Dry Eye  Exclusive Project	Depression  Vertex, IOP	Diabetes II, Obesity, Metabolic Syndrom X  Eli Lilly TNO FDA University of Amsterdam	COPD  AZ	Eye Diseases  Novartis	Drug combinations 
		Dermatitis  Unilever	Huntington's  CHDI	Neuro-fibromatosis 1&2  Children's Tumor Foundation	Immuno Oncology  3 large Pharma 1 small Pharma		

日本語サポートサイトの構築

https://clarivate.jp/training/metacore_metadrag_key_pathway_advisor_support/



The screenshot shows the Japanese support site for Clarivate Analytics' MetaCore, MetaDrug, and Key Pathway Advisor. The page has a dark header with the Clarivate Analytics logo and navigation links. Below the header, a large black banner displays the site's title in white text. Underneath, a light gray section titled 'ユーザーガイド' (User Guide) contains a '簡易マニュアル' (Quick Manual) section. This section lists several PDF guides for MetaCore, including a quick guide series, guides for searching interactions, uploading experimental data, setting enrichment parameters, and guides for interpreting enrichment results using pathway maps.

Clarivate Analytics

製品&サービス ▾ 分野別ソリューション ▾ ニュース イベント 会社概要 ▾ ブログ 🔍

← トップ

MetaCore／MetaDrug／Key Pathway Advisorサポートサイト

ユーザーガイド

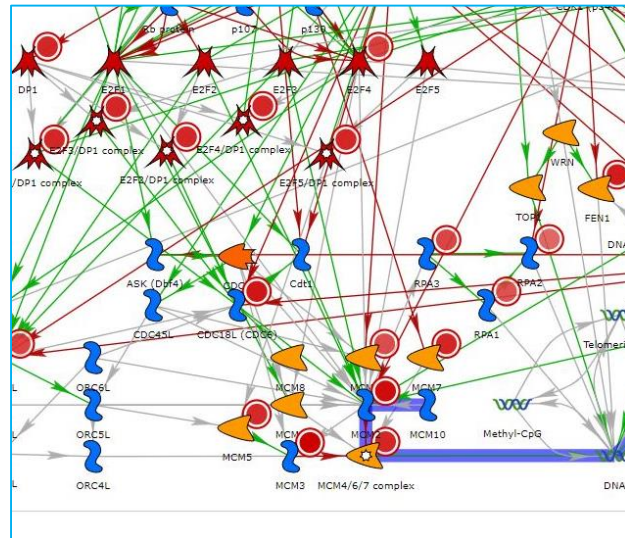
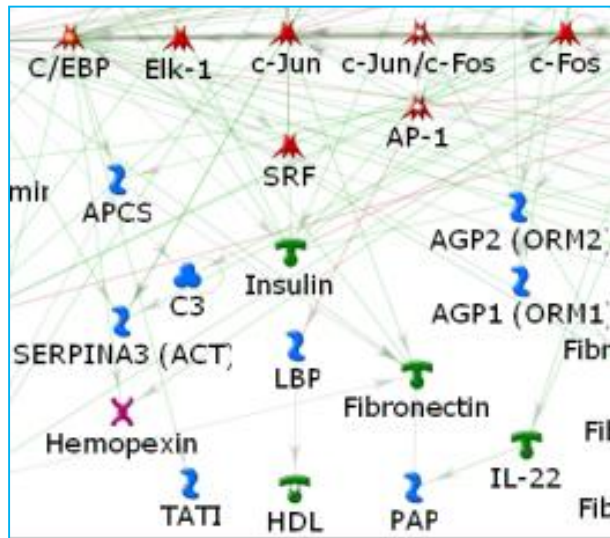
簡易マニュアル

- MetaCore
 - MetaCore Quick Guide Series (Quick Guide 1-11統合版) (2018年8月改訂) [PDF]
 - Quick Guide 1：分子名から検索し相互作用情報を調査する [PDF]
 - Quick Guide 2：実験データ（遺伝子発現データ）をアップロードする [PDF]
 - Quick Guide 3：実験データの確認と閾値の設定 [PDF]
 - Quick Guide 4：実験データのエンリッチメント解析1：パスウェイマップを使ったエンリッチメント解析（パスウェイ解析） [PDF]
 - Quick Guide 5：実験データのエンリッチメント解析2：複数のパスウェイマップをまとめたカテゴリー(Pathway Map Folder)を使ったエンリッチメント解析 [PDF]

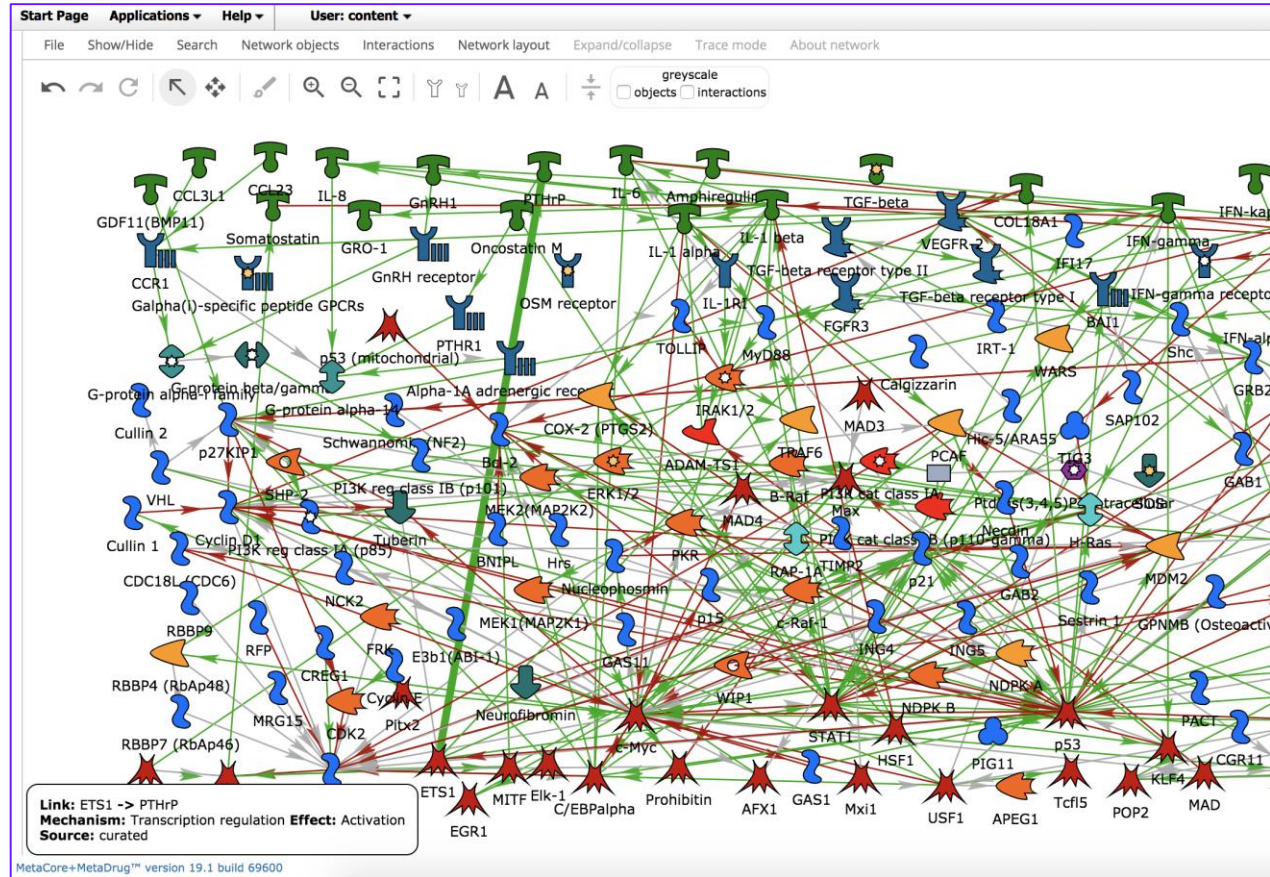
今後の開発計画

Build Network機能：インターフェースとビジュアルデザインを一新

- Adobe FlashからAngularに移行し、パフォーマンスが向上します
- ビジュアルデザインを「KPA-like」に一新します
- 重複の削除などを通じて105から60にボタンの数を減らし画面をよりシンプルにします



Build Network機能：インターフェースとビジュアルデザインを一新



MetaBase/MiniBase : 新しいアクセス方法の提供開始予定

21

- MetaBaseはClarivate Analytics System Biology Solutionsのベースとなるマニュアルキュレーションされたナレッジベースです。
- 200以上のテーブルからなるOracle データベースとして提供されるMetaBaseは、最も包括的なシステムバイオロジーのデータベースといえます。
- プログラムによるMetaBaseへの直接アクセスにより、バイオマーカーの発見、ターゲットの同定、薬理学および毒性評価など様々な研究をサポートする高度な分析を実施することが可能です。

2019年夏提供開始予定

MetaBase On premise

MiniBase On premise

- Standard Metabase Content
- Bespoke content
- Services Package

- Standard Minibase Content:
 - Interactions
 - Pathways
 - Biomarkers
 - Toxicity
- Bespoke content
- Services Package

- 四半期ごとに更新されるMetaBaseコンテンツセット
- 顧客による制御/維持
- ユーザー、データ、およびサーバーの完全な制御

- 顧客のニーズに合わせた各種コンテンツを四半期ごとに更新
- 顧客による制御/維持
- ユーザー、データ、およびサーバーの完全な制御



MetaBase Hosted

MiniBase Hosted

- Standard Metabase Content only
- Hosting Package

- Standard Minibase Content:
 - Interactions
 - Pathways
 - Biomarkers
 - Toxicity
- Hosting Package

- 四半期ごとに更新されるMetaBaseコンテンツセット
- VPN 経由のデータベースへのセキュアアクセス

- 顧客のニーズに合わせた各種コンテンツを四半期ごとに更新
- VPN 経由のデータベースへのセキュアアクセス

Cortellis

Powering Life Sciences Innovation



Clarivate
Analytics