

2011年6月30日  
三井情報株式会社

**メタボロミクス研究のための代謝経路解析システム「CrossPath」を販売開始**

－膨大なメタボロミクスデータの生理学的解釈を支援－

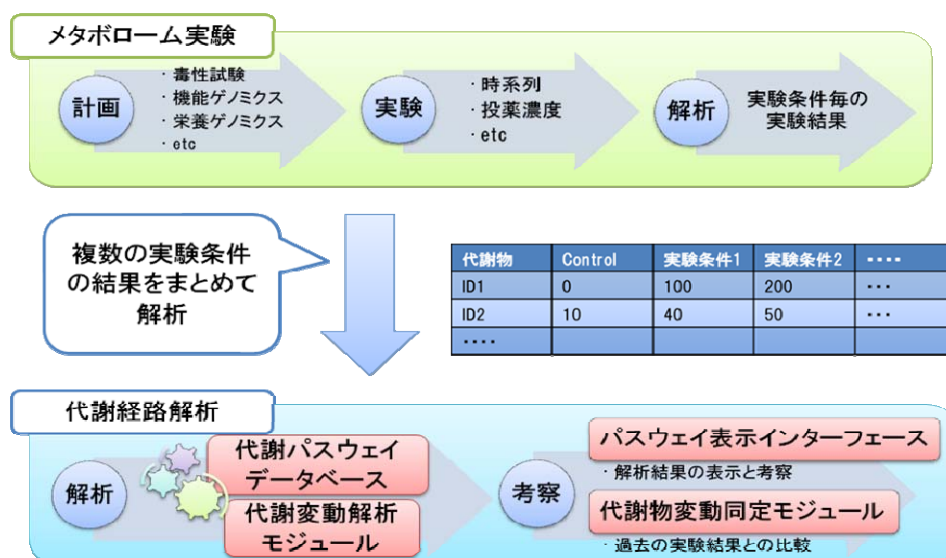
三井情報株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:下牧拓、以下:MKI)は、大日本住友製薬株式会社(本社:大阪市、代表取締役社長:多田正世、以下:大日本住友製薬)ゲノム科学研究所で開発された「“動きのある”代謝経路を選択する技術(※1)」を基に、膨大なメタボロミクスデータ(※2)の中から変動している代謝経路(※3)(以下パスウェイ)を自動的に抽出し、各代謝物の変動量をパスウェイ上に視覚的にマッピングするシステム「CrossPath」を開発しました。今回の技術開発により、実験で得られた大量のメタボロミクスデータの生理学的な解釈が容易になりました。

当システムはMKIよりパッケージソフトとして、薬効、安全性、バイオマーカー等の研究へ取り組む製薬メーカーや研究所向けに本日より販売を開始いたします。本製品により、病気の進行度や治療効果をモニタリングできるバイオマーカー開発や新薬開発研究の効率化が期待されます。

製品名称	製品の主な特長	販売価格	サービス開始日	販売目標
代謝経路解析システム CrossPath	・メタボロミクスデータから動きのある代謝経路(パスウェイ)を自動選出し、変動した代謝物をパスウェイ上に視覚的にマッピングを行う	180万円/1ライセンス (初年度保守費用込)	2011年6月30日	16本/4年

詳細は、当社「バイオインフォマティクス」紹介ページをご覧ください。

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



< 図 代謝経路解析システムによる解析フロー >

以上

《用語の解説》

(※1) “動きのある”代謝経路を選択する技術: 大日本住友製薬(株)ゲノム科学研究所で開発された技術(WO2011/055820)

(※2) メタボロミクス: 生体内に含まれる代謝産物を網羅的に解析することにより、生体内で起きている反応を全体的に把握するための技術・学問分野。潜在的なバイオマーカーの発見、生物学的経路における薬剤や疾患の影響の検出などが期待できる。

(※3) 代謝経路: 生体物質が多段階の化学反応を経て別の物質に変化する一連の経路のこと。化学反応に応じて生成される物質を代謝物という。

**【製品に関するお問い合わせ先】** 三井情報株式会社 R&D センター バイオサイエンス室  
〒164-8555 東京都中野区東中野 2-7-14  
TEL: 03-3227-5559 FAX: 03-3360-1730 E-mail: [bio-info@ml.mki.co.jp](mailto:bio-info@ml.mki.co.jp)

**【報道に関するお問い合わせ先】** 三井情報株式会社 経営企画部 コーポレート・マーケティング室  
TEL:03-6376-1008 FAX:03-3435-0520 E-mail:[press@ml.mki.co.jp](mailto:press@ml.mki.co.jp)

### **【三井情報株式会社について】**

三井情報株式会社(MKI)は、お客様のICT(Information and Communication Technology)基盤の構築・運用を通じて、お客様の情報コミュニケーションを支えています。ICT インフラストラクチャからアプリケーションにわたり、コンサルティングから設計・構築、運用・保守サポート、データセンターを活用したサービス等をワンストップでご提供します。MKIは、お客様の経営戦略や業務基盤をICTで総合的に支える「ICTトータルマネジメントパートナー」として、お客様とともに持続的な成長を実現してまいります。

ホームページ: <http://www.mki.co.jp/>

※三井情報、MKI 及びロゴは三井情報株式会社の商標または登録商標です。

※本リリースに記載されているその他の社名・商品名は、各社の商標または登録商標です。

## (参考資料)

### 【開発の背景】

細胞の働きや病態等の表現系を理解するためには、DNA 配列の網羅的解析(ゲノム解析)やタンパク質の網羅的解析(プロテオーム解析)に加え、糖、アミノ酸、脂質など代謝物質の網羅的解析(メタボローム解析)が極めて重要になります。ゲノム解析やプロテオーム解析においては解析手法が確立され、解析ソフトウェアやデータベースが豊富に存在し、ハイスループットな解析を行う環境が整備されています。一方、メタボローム解析においては、代謝パスウェイ等のデータベースの整備が進みつつあるものの、解析ソフトウェアに関しては未だ発展途上であり、測定技術の進歩に伴い膨大な代謝物変動の情報は比較的容易に得られるようになってきている半面、その生理学的解釈が難しくなっているという問題があります。

### 【新製品の特長】

内因性代謝物は測定時点の生体の状態を良く反映しており、動物間で種差が少なく、同一個体から経時的に採取可能な血液・尿で測定できる等の特徴があります。これらの実験結果を解析し生理的解釈を行うには、KEGG(※1)や HMDB(※2)等の代謝パスウェイデータベースに照らし合わせ、大きく変動があった代謝系の抽出などを行います。我々は、代謝物の数と変動の大きさを加味した新たな指標に基づいて、“動きのある”代謝パスウェイを自動的に選び出し、生理学的意味の解釈を支援するシステムを開発しました。これによりメタボロミクスデータの生物学的考察が効率的にできるようになりました。

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

#### 《用語の解説》

(※1) KEGG PATHWAY Database (<http://www.genome.jp/kegg/pathway.html>)

(※2) Small Molecule Pathway Database (<http://www.smpdb.ca/>)

### 【製品機能】

本ソフトウェアは Web アプリケーション形式で、以下の 4 種類のコンポーネントとこれらコンポーネントを操作する Web インターフェースから構成されています。

代謝物変動解析モジュール	代謝物の測定データを読み込み、代謝物の変動量、変動確率を計算し代謝パスウェイ毎のエントロピーを計算するモジュール
代謝パスウェイデータベース	解析時に参照するパスウェイデータベース。KEGG や HMDB 等を利用可能
パスウェイ表示インターフェース	抽出した代謝パスウェイ上に、代謝物の変動量をグラフィカルにマッピングするモジュール
代謝物変動同定モジュール	蓄積された解析結果から、現在の解析結果と似た解析結果を検索するモジュール

#### 1. 代謝物変動解析モジュール

代謝物の測定データから、有意に変動をしている代謝パスウェイを抽出します。一般的な手法としては、変動代謝物群と各代謝パスウェイが関係する蓋然性を統計的に評価した後、蓋然性の高い順から有意な代謝パスウェイとしますが、本システムでは、代謝物の変動量を算出したのち、その代謝物の変動確率を推定することで、代謝パスウェイ毎のエントロピー(情報量)を算出し、この大きさにより有意な代謝パスウェイを抽出します。一般的な手法では、検出されやすい代謝物が優遇され、考察の際に主観的なバイアスがかかりやすいという問題がありましたが、本システムの手法はその点を解決し、エントロピーという客観的な尺度

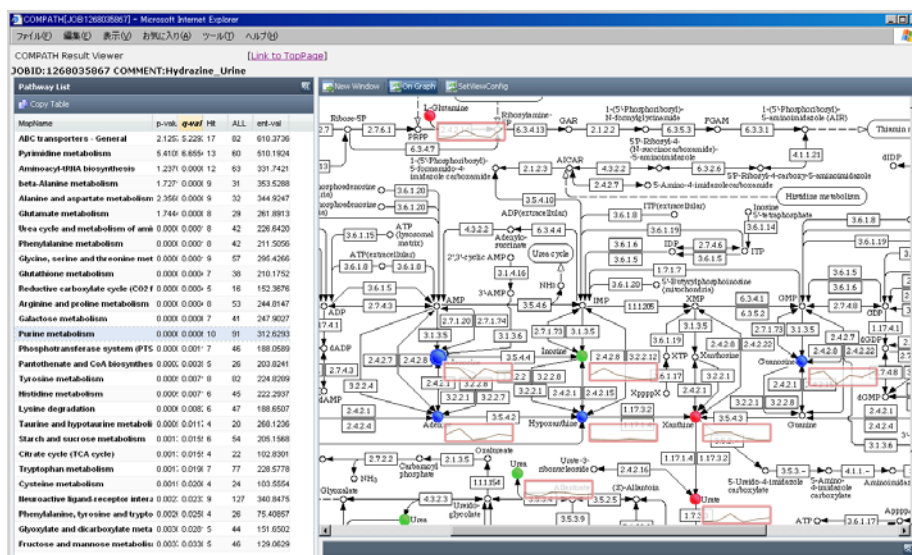
で代謝パスウェイを抽出し生体内に起こった現象を考察できます。そのため、薬剤の濃度依存性を測定した実験、タイムコースなどに依存する実験など、複数区間での結果を総合的に考察する必要がある実験の解析などに効果を発揮します。

## 2. 代謝パスウェイデータベース

本システムでは、KEGG や HMDB といった既存の代謝パスウェイデータベース上に、測定データを解析した結果をマッピングすることができます。本システムでは、代謝パスウェイデータベースを取り込み、イニシャライズすることで解析やパスウェイ表示時に必要な情報を収集するため、これら以外のデータベースに関しても拡張が可能です。

## 3. パスウェイ表示インターフェース

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



© Kanehisa Laboratories

<図 パスウェイ表示インターフェース>

## 4. 代謝物変動同定モジュール

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

以上