(19)国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 118430758 A
(43)申请公布日 2024.08.02

(21)申请号 202311803262.7

(22)申请日 2023.12.26

(30)优先权数据
2023-013492 2023.01.31 JP

(71)申请人 株式会社岛津制作所
地址 日本京都府

(72)发明人 中川裕贵

(74)专利代理机构 北京林达刘知识产权代理事务所(普通合伙) 11277
专利代理师 刘新宇 张文慧

(51)Int.Cl.
G16H 30/20(2018.01)
G16H 50/70(2018.01)
G16H 50/20(2018.01)
G16H 10/60(2018.01)

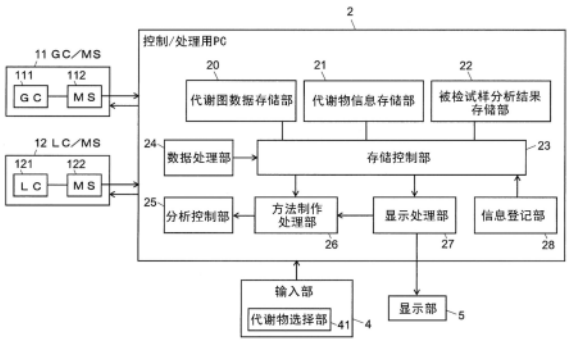
权利要求书2页 说明书7页 附图5页

(54)发明名称

代谢物解析用数据处理装置

(57)摘要

本发明提供一种代谢物解析用数据处理装置,其具备:代谢物测定结果存储部,其将基于对被检试样进行分析得到的分析数据鉴别出的代谢物的定量结果与该代谢物相对应地存储;代谢图数据存储部,其针对代谢图存储有用于将代谢图显示于显示画面的代谢图显示用数据,代谢图是将多个代谢物与各代谢物的定量结果一起登载、且在各代谢物的登载区域附加了表示能够检测该代谢物的分析装置的种类的分析装置信息的代谢图;以及显示处理部,其在读出代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将规定的代谢图显示于显示画面上时,从代谢物测定结果存储部获取与代谢物对应的定量结果,并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。



CN 118430758 A

1.一种代谢物解析用数据处理装置,具备:

代谢物测定结果存储部,其存储有基于分析数据鉴别出的代谢物以及该代谢物的定量结果,所述分析数据是通过利用一个或多个分析装置对被检试样进行分析得到的分析数据;

代谢图数据存储部,其针对一个或多个代谢图存储有用于将代谢图显示于显示画面的代谢图显示用数据,所述代谢图是将多个代谢物与各代谢物的定量结果一起登载、且在各代谢物的登载区域附加了表示能够检测该代谢物的分析装置的种类的分析装置信息的代谢图;以及

显示处理部,其在读出所述代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将规定的代谢图显示于显示画面上时,针对该代谢图中登载的各代谢物,从所述代谢物测定结果存储部获取与该代谢物对应的定量结果,并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。

2.根据权利要求1所述的代谢物解析用数据处理装置,其特征在于,

所述一个或多个分析装置是气相色谱质谱联用仪或液相色谱质谱联用仪。

3.根据权利要求1所述的代谢物解析用数据处理装置,其特征在于,

在所述代谢图的各代谢物的登载区域附加的分析装置信息是用于将所述登载区域的至少一部分以与分析装置的种类对应的颜色显示的颜色信息。

4.根据权利要求2所述的代谢物解析用数据处理装置,其特征在于,

所述代谢物测定结果存储部针对在利用分析装置对被检试样进行分析之前被进行规定的衍生化处理的代谢物,将通过衍生化处理形成的衍生化产物的定量结果与该代谢物相对应地存储,

所述显示处理部在读出所述代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将代谢图显示于显示画面上时,从所述代谢物测定结果存储部获取该代谢图中登载的代谢物的衍生化产物的定量结果,并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。

5.根据权利要求4所述的代谢物解析用数据处理装置,其特征在于,

在多个衍生化产物的定量结果与代谢物相对应地存储于所述代谢物测定结果存储部中时,

所述显示处理部从所述代谢物测定结果存储部获取所述多个衍生化产物中的满足规定的条件的衍生化产物的定量结果,并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。

6.一种代谢物解析用数据处理装置,具备:

代谢物测定结果存储部,针对基于分析数据鉴别出的代谢物,将该代谢物的多个衍生化产物的定量结果与该代谢物相对应地存储,所述分析数据是通过利用一个或多个分析装置对被检试样进行分析得到的分析数据;

代谢图数据存储部,其针对一个或多个代谢图存储有用于将登载有多个代谢物的代谢图显示于显示画面的代谢图显示用数据;以及

显示处理部,其在读出所述代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将代谢图显示于显示画面上时,针对该代谢图中登载的代谢物,从所述代谢物测定结果存储部获取

该代谢物的多个衍生化产物中的满足规定的条件的衍生化产物的定量结果,并将该定量结果插入到代谢图上来进行显示。

代谢物解析用数据处理装置

技术领域

[0001] 本发明涉及一种基于被检试样的分析数据来制作代谢图的代谢物解析用数据处理装置。

背景技术

[0002] 为了进行伴有代谢异常的疾病的诊断、治疗或者针对这样的疾病的治疗药物的研究/开发等,利用气相色谱质谱联用仪(GC/MS)、液相色谱质谱联用仪(LC/MS)进行了代谢物解析。另外,在与医药品、健康食品、药物等的安全性、毒性有关的药理的讨论、动植物的代谢物组(metabolome)等的解析中,也利用GC/MS、LC/MS进行了代谢物解析。

[0003] 在代谢物解析中,经常利用记载有人或其它生物的生物体内的代谢的路径的、被称为代谢图的图(非专利文献1)。在代谢图中,登载有在代谢的过程中生成的各种化合物(代谢物)、化学反应、参与代谢的酶等,能够一眼理解代谢的流程。根据这样的代谢图,能够容易地获知在从人或其它生物提取出的尿等被检试样中存在什么样的代谢物。

[0004] 例如,在想要调查某代谢图中包括的各种代谢物是否包含于被检试样的情况下,使用GC/MS和/或LC/MS来分析被检试样中包含的代谢物。然后,从与根据该分析结果得到的色谱峰对应的质谱、质量色谱中鉴别被检试样中包含的代谢物,并将该代谢物的定量值、表示定量值的条形图等作为各代谢物的测定结果插入到代谢图上。对代谢图中包括的全部代谢物重复进行这样的作业,由此,完成反映了使用GC/MS、LC/MS得到的被检试样的分析结果的代谢图。

[0005] 然而,根据被检试样的分析结果来制作代谢图的作业是烦杂的,作业者的负担大。因此,提供了一种当被输入被检试样的分析结果时自动地执行从该分析结果的解析起到制作代谢图为止的作业的代谢物解析用数据处理装置。在该装置中,在存储部中存储有用于将代谢图显示于显示画面的代谢图显示用数据,当对被检试样的分析结果的解析结束时,从存储部读出代谢图显示用数据,制作被插入了代谢物的定量值等的代谢图并将该代谢图显示于显示画面。

[0006] 现有技术文献

[0007] 非专利文献

[0008] 非专利文献1:Zenzaburo Tozuka,et al.,“Multi omics by LC-MS/MS to search small molecule ligands of nuclear receptors to control transcription of pharmaceutical active proteins for drug discovery”,Trends in Res,Vol 1(2),2018,pp.1-2

发明内容

[0009] 发明要解决的问题

[0010] 对于在代谢图中登载的代谢物,既存在通过GC/MS和LC/MS均能够检测的代谢物,也存在仅通过GC/MS和LC/MS中的任一方能够检测的代谢物。另外,还存在通过GC/MS和LC/

MS均无法检测的代谢物。因而,即使在代谢图中登载的代谢物中存在未被插入测定结果的代谢物的情况下,有时该代谢物也包含于被检试样。然而,仅通过观察代谢图,难以判断代谢物是否可能包含于被检试样。

[0011] 本发明要解决的问题在于,在制作反映了被检试样的分析结果的代谢图的代谢物解析用数据处理装置中,能够根据代谢图容易地判断某代谢物是否可能包含于被检试样。

[0012] 用于解决问题的方案

[0013] 为了解决上述问题而完成的本发明所涉及的代谢物解析用数据处理装置具备:

[0014] 代谢物测定结果存储部,其存储有基于分析数据鉴别出的代谢物以及该代谢物的定量结果,所述分析数据是通过利用一个或多个分析装置对被检试样进行分析得到的分析数据;

[0015] 代谢图数据存储部,其针对一个或多个代谢图存储有用于将代谢图显示于显示画面的代谢图显示用数据,所述代谢图是将多个代谢物与各代谢物的定量结果一起登载、且在各代谢物的登载区域附加了表示能够检测该代谢物的分析装置的种类的分析装置信息的代谢图;以及

[0016] 显示处理部,其在读出所述代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将规定的代谢图显示于显示画面上时,针对该代谢图中登载的各代谢物,从所述代谢物测定结果存储部获取与该代谢物对应的定量结果,并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。

[0017] 发明的效果

[0018] 根据本发明所涉及的代谢物解析用数据处理装置,在将反映了被检试样的分析结果的代谢图显示于显示画面时,对该代谢图中包括的各代谢物的登载区域赋予了表示能够检测该代谢物的分析装置的种类的信息,因此,在代谢图中包括的代谢物中存在未被插入定量结果的代谢物的情况下,用户能够根据被赋予该代谢物的登载区域的分析装置信息,容易地判断该代谢物是否可能包含于被检试样。具体地说,当在被检试样的分析中使用了的分析装置与能够检测该代谢物的分析装置不同的情况下,能够判断为该代谢物可能包含于被检试样。

附图说明

[0019] 图1是使用了本发明所涉及的代谢物解析用数据处理装置的代谢物解析系统的块结构图。

[0020] 图2是示出代谢图的制作过程的流程图。

[0021] 图3是示出被检试样分析前的代谢图的显示例的图。

[0022] 图4是示出被检试样分析后的代谢图的显示例的图。

[0023] 图5是示出在被检试样分析后的代谢图中显示有代谢物的衍生化产物的名称的状态的图。

具体实施方式

[0024] 下面,参照附图来说明使用了本发明所涉及的代谢物解析用数据处理装置的代谢物解析系统的一个实施方式。

[0025] 图1是本实施方式的代谢物解析系统的整体概要图。该代谢物解析系统具备:作为分析装置的由GC部111和MS部112构成的GC/MS11、由LC部121和MS部122构成的LC/MS12、以及用于控制GC/MS11和LC/MS12的动作并对由GC/MS11和LC/MS12分别收集到的分析数据进行处理的控制/处理用个人计算机(PC)2。

[0026] 在控制/处理用PC 2连接有作为用户接口的输入部4及显示部5。控制/处理用PC 2是在通用的个人计算机中搭载有作为应用程序软件的专用的控制/处理软件的PC,通过在PC上执行该软件,除了执行GC/MS11的通常的控制、数据处理之外,还执行后述那样的特征性的控制/处理。即,控制/处理用PC 2相当于本发明所涉及的代谢物解析用数据处理装置。

[0027] 由控制/处理用PC 2实现的代谢物解析用数据处理装置具备代谢图数据存储部20、代谢物信息存储部21、被检试样分析结果存储部22、存储控制部23、数据处理部24、分析控制部25、方法制作处理部26、显示处理部27、信息登记部28、以及上述输入部4所包括的代谢物选择部41来作为功能块。

[0028] 代谢图数据存储部20存储构成一个或多个(通常为多个)代谢图的数据。代谢物信息存储部21针对能够通过GC/MS11和LC/MS12中的任一方或双方进行分析的代谢物,针对每个代谢物存储有分析关联信息,该分析关联信息包含已知的标准试样的保留指数、质谱、特征性的离子信息(离子的质荷比、多个离子的强度比等)等分析结果以及包括数据处理条件的分析条件。此外,关于每个代谢物的分析关联信息中包含的标准试样的分析结果(质谱、保留指数等),既可以通过使用该系统所包括的GC/MS11、LC/MS12实际测定包含该代谢物的标准试样来求出,也可以利用现存的学会论文等已发表的信息。此外,有时使用GC/MS11或LC/MS12在不同的分析条件下对某一个代谢物进行测定。因而,与一个代谢物相对应的分析关联信息不限为一个,有时也为多个。

[0029] 被检试样分析结果存储部22针对每个被检试样存储有通过GC/MS11、LC/MS12对作为非标准试样的、含有成分未知的被检试样进行分析所得到的结果即保留指数、质谱等分析结果、执行该分析时的分析条件、标准试样的分析结果(质谱、保留指数等)、根据对该被检试样进行分析得到的结果鉴别出的代谢物以及该代谢物的定量结果。被检试样分析结果存储部22相当于本发明的代谢物测定结果存储部。此外,存储部20、21、22既可以设置于一个存储器装置(例如HDD、SSD等)中的不同的存储区域,也可以设置于不同的存储器装置。

[0030] 在本实施方式中,在构成代谢图数据存储部20中保存的代谢图的数据(以下,称为代谢图数据)中包含代谢图显示用数据,该代谢图显示用数据用于将构成代谢图的多个代谢物的名称以与表示被插入各代谢物的定量结果的区域的矩形框一起沿着代谢路径进行了配置的状态显示于显示部5的画面。代谢图显示数据中包含表示能够检测各代谢物的分析装置的种类的分析装置信息。在后文中描述分析装置信息。

[0031] 另外,在本实施方式中,代谢物信息存储部21中保存的每个代谢物的分析关联信息中包含在作为GC/MS11、LC/MS12中的一个预处理的衍生化中使用的衍生化试剂、通过与衍生化试剂反应而形成的代谢物的衍生化产物及其性质等信息。

[0032] 接着,按照图2的流程图来说明使用上述结构的代谢物解析系统来进行被检试样中包含的代谢物的鉴别时的分析过程的一例。

[0033] 首先,用户(作业者)通过输入部4来指示对记载有设为目标的代谢路径的代谢图的显示(步骤1)。显示处理部27响应于该指示而藉由存储控制部23从代谢图数据存储部20

读出所对应的代谢图数据并将该代谢图绘制于显示部5的画面上,并且从代谢物信息存储部21读出与该代谢图中登载的代谢物对应的分析关联信息来获取该分析关联信息(步骤2)。此外,在存在多个代谢图的情况下,优选的是用户能够根据例如代谢图名称等来选择所期望的代谢图。

[0034] 用户通过代谢物选择部41在显示于显示部5的画面上的代谢图上通过选择来指示想要确认是否包含于被检试样的代谢路径(步骤3)。图3示出了此时显示的显示画面(称为分析前显示画面51。)的一例。在该分析前显示画面51中,包含通过代谢物选择部41选择出的代谢路径的代谢图(部分代谢图)被显示于主区域511,在该主区域511的右侧的副区域512的下排显示有整体代谢图(全部代谢图),在该副区域512上排显示有分析条件的详情。显示于副区域512的下排的全部代谢图中的被方框包围的部分与显示于主区域511的部分代谢图相当。

[0035] 在显示于显示画面的代谢图中,该代谢图中包含的代谢物的名称与被插入该代谢物的定量结果的区域即矩形框61被一起沿着代谢路径进行了登载。如图3所示,在显示于分析前显示画面51的代谢图中,各代谢物的定量结果未被插入到矩形框61中,该矩形框61是空白的,因此该代谢图也被称为“代谢图的空白图”。

[0036] 在本实施方式中,对显示于显示画面的代谢图中登载的各代谢物的矩形框61附加表示分析装置的种类的颜色来作为分析装置信息,该分析装置信息表示能够检测该代谢物的分析装置是GC/MS11、LC/MS12中的哪个分析装置。具体地说,用蓝色显示能够检测的分析装置仅为GC/MS11的代谢物的矩形框61,用黑色显示能够检测的分析装置仅为LC/MS12的代谢物的矩形框61,用绿色显示GC/MS11和LC/MS12均能够检测的代谢物的矩形框61。此外,在图3中,用实线、虚线、单点划线分别表示矩形框为蓝色、黑色、绿色的情况。

[0037] 当由用户通过选择而指示的部分代谢图确定时,方法制作处理部26获取与通过选择而指示的部分代谢图中包含的代谢物进行了对应的分析关联信息,来制作包含在利用GC/MS11和LC/MS12中的任一方或双方执行分析时所需的各种分析参数、数据处理参数的方法文件(步骤4),并将该方法文件发送到分析控制部25。分析控制部25当接受到分析开始的指示时,按照该方法文件控制GC/MS11和/或LC/MS12来执行对被检试样的分析(步骤5)。

[0038] 由GC/MS11和/或LC/MS12收集到的分析数据被输入到数据处理部24,数据处理部24基于方法文件中记载的数据处理条件来执行数据处理。在该方法文件中,针对每个代谢物确定了保留指数、质谱、特征性离子信息等,因此,通过使用这些能够容易地检测代谢物。例如,能够根据保留指数来推测保留时间,因此,设定在所推测的保留时间的前后留出适度的时间余量所得到的保留时间范围,在色谱上限定到该保留时间范围内地提取被认为与目标代谢物对应的峰。然后,将该峰附近的通过实际测量得到的质谱的图案与标准试样的质谱的图案进行比较来判断它们之间的相似性,由此能够以高准确度判断是否为目标代谢物。另外,数据处理部24能够使用与鉴别出的代谢物对应的质荷比的质量色谱上的峰面积等计算该代谢物的定量值。如上所述,通过在鉴别中结合使用色谱,与仅使用质谱的峰图案进行的代谢物的检测相比容易进行检测,而且能够以高可靠性进行检测。

[0039] 当由数据处理部24依次鉴别被检试样中包含的代谢物并求出定量值时,经由存储控制部23将其分析结果保存于被检试样分析结果存储部22(步骤6)。此时,作为分析前的预处理而进行了衍生化处理的结果是,针对形成了多个衍生化产物的代谢物,将这多个衍生

化产物的定量值与代谢物相对应地保存于被检试样分析结果存储部22。此外,代谢物信息存储部21中保存的标准试样的分析结果(质谱、保留指数等)、分析条件自身也可以设为针对每个被检试样来保存,但也可以仅记录与代谢物信息存储部21中保存的信息之间的对应关系。

[0040] 之后,当用户从输入部4指示代谢图的制作时(步骤7),显示处理部27经由存储控制部23从代谢图数据存储部20读出代谢图数据,并且从被检试样分析结果存储部22读出该代谢图中登载的代谢物的定量结果来作为与该代谢图相关联的被检试样的分析结果,并将该定量结果清楚地记载在代谢图上。图4是示出此时显示的显示画面(称为分析后显示画面71。)的一例的图。在该分析后显示画面71中,与分析前显示画面51同样地在主区域711显示有部分代谢图,在副区域712的下排配置有显示全部代谢图,在上排配置有显示分析条件的详情。在图4所示的例子中,在代谢图的矩形框61中插入了多个被检试样中包含的代谢物的定量值的条形图来作为代谢物的定量结果,针对未通过选择来指示的代谢物,在矩形框61内显示有“—”。另外,针对虽然被通过选择进行了指示但未被检测的代谢物,使矩形框61为空白栏。

[0041] 如果观察这样的分析后显示画面71,则针对虽然被通过选择而指示了但未检测到的代谢物,能够根据其矩形框61的显示颜色来判断是否可能存在于被检试样中。即,当在例如用于被检试样的分析的装置为LC/MS12的情况下矩形框61的显示颜色为蓝色的代谢物(即,仅能够由GC/MS11检测的代谢物)的该矩形框61为空白栏时,能够判断为能够通过将分析装置变更为GC/MS 11来检测。另外,当在例如用于被检试样的分析的装置为LC/MS12的情况下矩形框61的显示颜色为绿色的代谢物(即,能够由GC/MS11、LC/MS12双方检测的代谢物)的该矩形框61为空白栏时也是,能够判断为虽然未被LC/MS 12检测到但可能被GC/MS11检测到。

[0042] 并且,在本实施方式中,针对多个衍生化产物的定量值被保存于被检试样分析结果存储部22的代谢物,存储控制部23从被检试样分析结果存储部22读出满足规定的条件的衍生化产物的定量结果,并将该定量结果清楚地记载在代谢图上。在此,规定的条件是指为与其它衍生化产物相比检测灵敏度优异的衍生化产物、检测的再现性优异的衍生化产物、针对热、药剂的稳定性优异的衍生化产物等。例如,在作为代谢物检测到磷酸肌醇(Inositol phosphate)的情况下,进行三甲基甲硅烷基(TMS)化处理来作为被检试样的预处理,由此形成的衍生化产物(Inositol phosphate-7TMS)的定量值被作为磷酸肌醇的定量结果从被检试样分析结果存储部22读出。此外,在代谢图的矩形框61内登载的定量结果为衍生化产物的定量值的情况下,通过指定分析后显示画面71上的矩形框61,从而例如如图5所示那样显示记述了衍生化产物的名称的弹出窗73。因而,用户能够通过观察该弹出窗73来确认被插入到矩形框61的定量结果为代谢物中的哪个衍生化产物的定量结果。

[0043] 此外,上述实施方式的代谢物解析系统具备一种GC/MS11和一种LC/MS12来作为分析装置,但也可以关于GC/MS11和LC/MS12中的至少一方具备同种或不同种的多个装置。例如,如果同时使用多个GC/MS,则能够将不同种类的柱连接于各GC/MS、或者在不同的分析条件下同时进行并行的分析,有助于缩短分析时间。

[0044] 另外,上述实施方式的代谢物解析系统设为将被插入代谢图的各代谢物的定量结果的矩形框用与能够检测该代谢物的分析装置的种类相应的颜色显示的结构,但也可以使

用与能够检测代谢物的分析装置的种类相应的颜色显示矩形框的内部、代谢物的名称，也可以在矩形框、代谢物的名称的附近显示表示分析装置的种类的标记。

[0045] [方式]

[0046] 上述的例示性的实施方式为以下方式的具体例，这对于本领域技术人员而言是显而易见的。

[0047] (第一项)本发明的一个方式所涉及的代谢物解析用数据处理装置具备：

[0048] 代谢物测定结果存储部，其存储有基于分析数据鉴别出的代谢物以及该代谢物的定量结果，所述分析数据是通过利用一个或多个分析装置对被检试样进行分析得到的分析数据；

[0049] 代谢图数据存储部，其针对一个或多个代谢图存储有用于将代谢图显示于显示画面的代谢图显示用数据，所述代谢图是将多个代谢物与各代谢物的定量结果一起登载、且在各代谢物的登载区域附加了表示能够检测该代谢物的分析装置的种类的分析装置信息的代谢图；以及

[0050] 显示处理部，其在读出所述代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将规定的代谢图显示于显示画面上时，针对该代谢图中登载的各代谢物，从所述代谢物测定结果存储部获取与该代谢物对应的定量结果，并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。

[0051] 根据第一项所涉及的代谢物解析用数据处理装置，在将反映了被检试样的分析结果的代谢图显示于显示画面时，对该代谢图所包含的各代谢物的登载区域赋予了表示能够检测该代谢物的分析装置的种类的信息，因此，在代谢图所包含的代谢物中存在未被插入定量结果的代谢物的情况下，用户能够根据被赋予该代谢物的登载区域的分析装置信息，来容易地判断该代谢物是否可能包括于被检试样。具体地说，在用于被检试样的分析的分析装置与能够检测该代谢物的分析装置不同的情况下，能够判断为该代谢物可能包括于被检试样。

[0052] (第二项)一般来说，用于代谢物解析的分析装置为气相色谱质谱联用仪或液相色谱质谱联用仪。因此，第二项所涉及的代谢物解析用数据处理装置是在第一项所涉及的代谢物解析用数据处理装置的基础上，能够将所述一个或多个分析装置设为气相色谱质谱联用仪和液相色谱质谱联用仪。

[0053] 根据第二项所涉及的代谢物解析用数据处理装置，能够制作对于各种代谢物解析有用的代谢图，所述各种代谢物解析以伴有代谢异常的疾病的诊断、治疗或者针对这样的疾病的治疗药物的研究/开发、与医药品、健康食品、药物等的安全性、毒性有关的药理的讨论、动植物的代谢物组解析等为目的。

[0054] (第三项)第三项所涉及的代谢物解析用数据处理装置是在第一项或第二项所涉及的代谢物解析用数据处理装置的基础上能够设为在所述代谢图的各代谢物的登载区域附加的分析装置信息是用于将所述登载区域的至少一部分以与分析装置的种类对应的颜色显示的颜色信息。

[0055] 根据第三项所涉及的代谢物解析用数据处理装置，仅观察代谢图的各代谢物的登载区域的至少一部分的颜色就能够掌握能够检测该代谢物的分析装置的种类。

[0056] (第四项)第四项所涉及的代谢物解析用数据处理装置是在第一项至第三项所涉

及的代谢物解析用数据处理装置的基础上，

[0057] 所述代谢物测定结果存储部能够针对在利用分析装置对被检试样进行分析之前被进行规定的衍生化处理的代谢物，将通过衍生化处理形成的衍生化产物的定量结果与该代谢物相对应地存储，

[0058] 所述显示处理部能够在读出所述代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将代谢图显示于显示画面上时，从所述代谢物测定结果存储部获取该代谢图中登载的代谢物的衍生化产物的定量结果，并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。

[0059] (第五项)第五项所涉及的代谢物解析用数据处理装置是在第四项所涉及的代谢物解析用数据处理装置的基础上，

[0060] 在多个衍生化产物的定量结果与代谢物相对应地存储于所述代谢物测定结果存储部中时，

[0061] 所述显示处理部能够从所述代谢物测定结果存储部获取所述多个衍生化产物中的满足规定的条件的衍生化产物的定量结果，并将该定量结果插入到代谢图上的该代谢物的登载区域来进行显示。

[0062] (第六项)第六项所涉及的代谢物解析用数据处理装置具备：

[0063] 代谢物测定结果存储部，针对基于分析数据鉴别出的代谢物，将该代谢物的多个衍生化产物的定量结果与该代谢物相对应地存储，所述分析数据是通过利用一个或多个分析装置对被检试样进行分析得到的分析数据；

[0064] 代谢图数据存储部，其针对一个或多个代谢图存储有用于将登载有多个代谢物的代谢图显示于显示画面的代谢图显示用数据；以及

[0065] 显示处理部，其在读出所述代谢图数据存储部中存储的代谢图显示用数据来将代谢图显示于显示画面上时，针对该代谢图中登载的代谢物，从所述代谢物测定结果存储部获取该代谢物的多个衍生化产物中的满足规定的条件的衍生化产物的定量结果，并将该定量结果插入到代谢图上来进行显示。

[0066] 根据第四项～第六项所涉及的代谢物解析用数据处理装置，

[0067] 在通过分析装置对被检试样进行分析之前进行规定的衍生化处理的代谢物包含于该被检试样的情况下，能够使通过该衍生化处理形成的衍生化产物的定量结果作为代谢物的定量结果显示于代谢图上。

[0068] 在该情况下，在第五项或第六项所涉及的代谢物解析用数据处理装置中，关于形成多个衍生化产物的代谢物，该多个衍生化产物中的满足规定的条件的衍生化产物的定量结果被作为所述代谢物的定量结果显示于代谢图。在此，规定的条件是指与其它衍生化产物相比检测灵敏度优异、检测的再现性优异、针对热、药剂的稳定性优异等。通过使用满足这样的条件的衍生化产物的定量结果，能够得到可靠性优异的代谢图。

[0069] 附图标记说明

[0070] 11:GC/MS;111:GC部;112:MS部;12:LC/MS;121:LC部;122:MS部;2:控制/处理用PC;20:代谢图数据存储部;21:代谢物信息存储部;22:被检试样分析结果存储部;23:存储控制部;24:数据处理部;25:分析控制部;26:方法制作处理部;27:显示处理部;28:信息登记部;4:输入部;41:代谢物选择部;5:显示部;51:分析前显示画面;71:分析后显示画面。

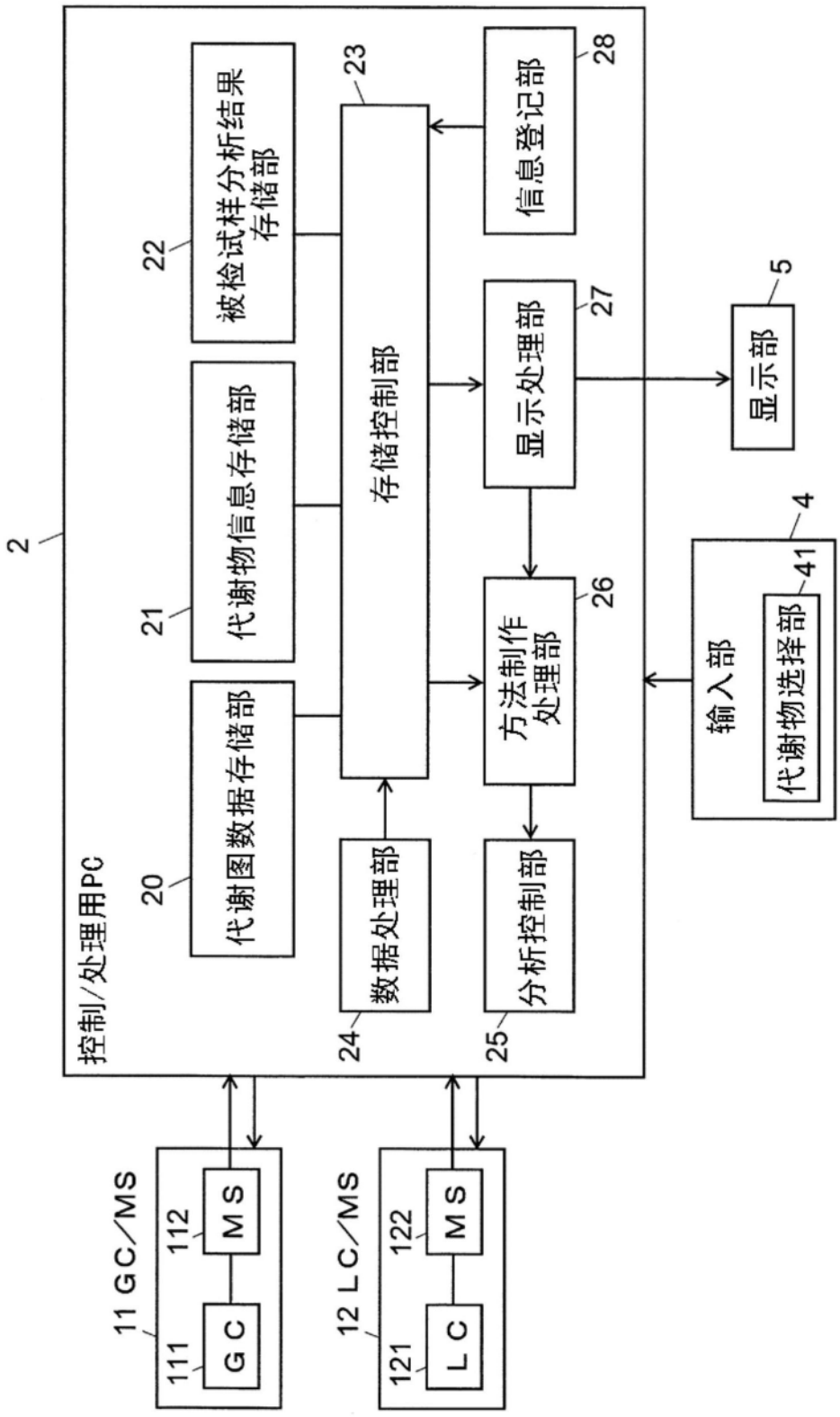

2
控制/处理用PC
20
代谢图数据存储部
21
代谢物信息存储部
22
被检试样分析结果存储部
23
存储控制部
24
数据处理部
25
分析控制部
26
方法制作处理部
27
显示处理部
28
信息登记部
4
输入部
41
代谢物选择部
5
显示部
11 GC/MS
111
GC
112
MS
12 LC/MS
121
LC
122
MS

图1

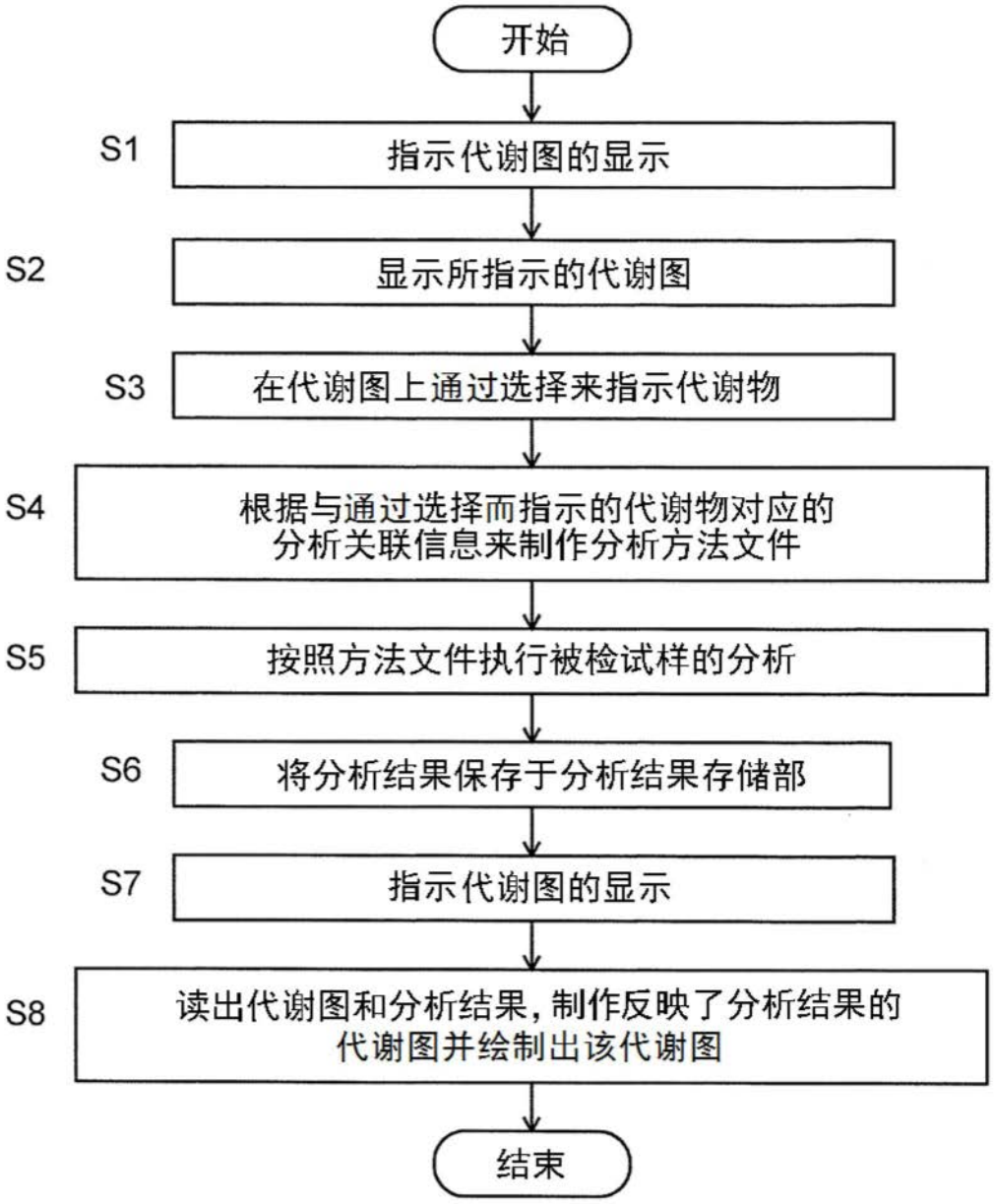

开始
S1
指示代谢图的显示
S2
显示所指示的代谢图
S3
在代谢图上通过选择来指示代谢物
S4
根据与通过选择而指示的代谢物对应的
分析关联信息来制作分析方法文件
S5
按照方法文件执行被检试样的分析
S6
将分析结果保存于分析结果存储部
S7
指示代谢图的显示
S8
读出代谢图和分析结果，制作反映了分析结果的
代谢图并绘制出该代谢图
结束

图2

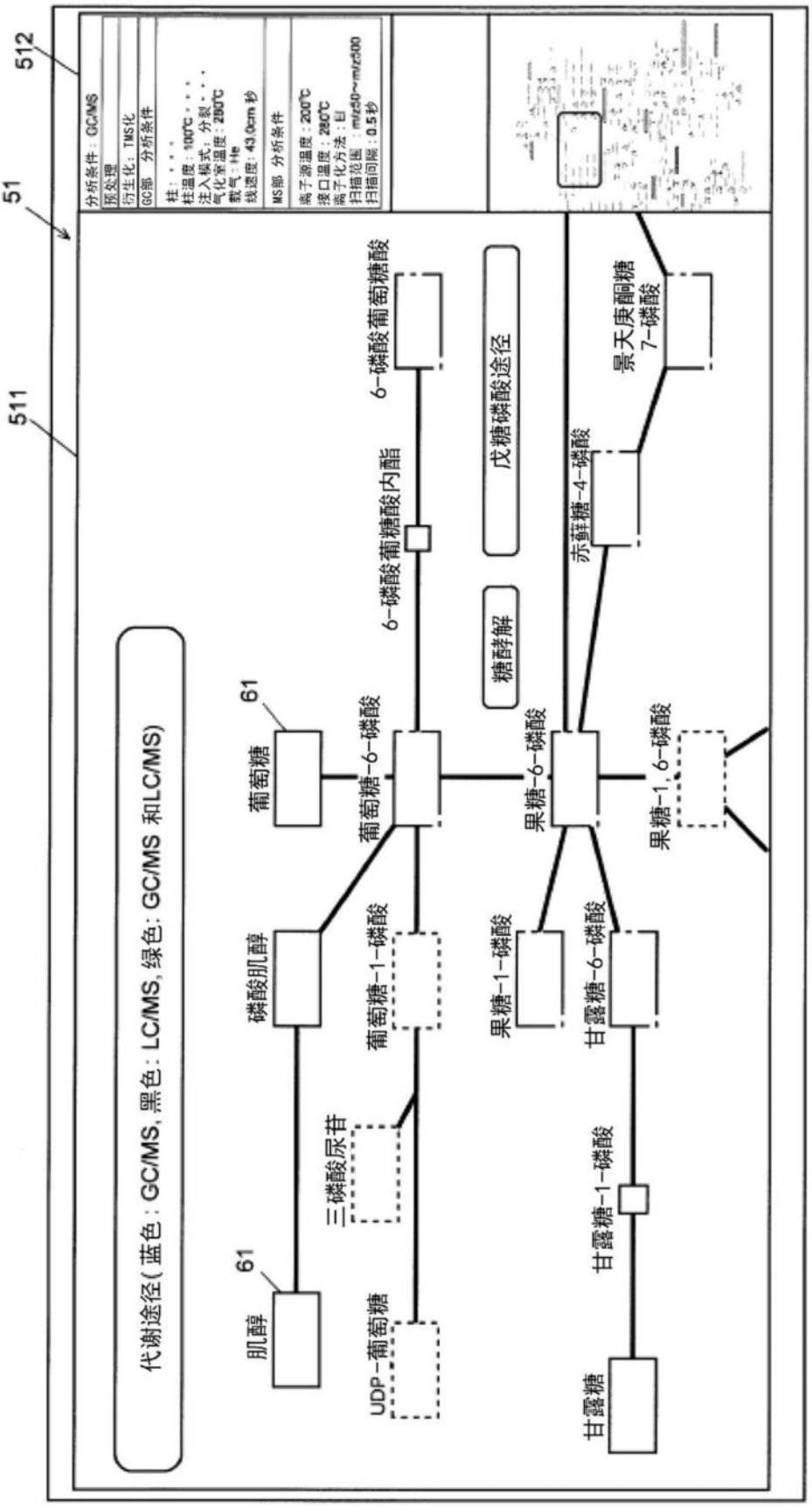

512
51
511
分析条件：GC/MS
预处理
衍生化：TMS化
GC部 分析条件
柱：・・・
柱温度：100℃・・・
注入模式：分裂・・・
气化室温度：250℃
载气：He
线速度：43.0cm/秒
MS部 分析条件
离子源温度：200℃
接口温度：280℃
离子化方法：EI
扫描范围：m/z50~m/z500
扫描间隔：0.5秒
代谢途径（蓝色：GC/MS，黑色：LC/MS，绿色：GC/MS 和LC/MS）
61
肌醇
磷酸肌醇
三磷酸尿苷
UDP-葡萄糖
61
葡萄糖
葡萄糖-6-磷酸
葡萄糖-1-磷酸
6-磷酸葡糖酸内酯
6-磷酸葡萄糖酸
糖酵解
戊糖磷酸途径
果糖-6-磷酸
果糖-1-磷酸
果糖-1,6-磷酸
赤藓糖-4-磷酸
景天庚酮糖
7-磷酸
甘露糖-6-磷酸
甘露糖-1-磷酸
甘露糖

图3

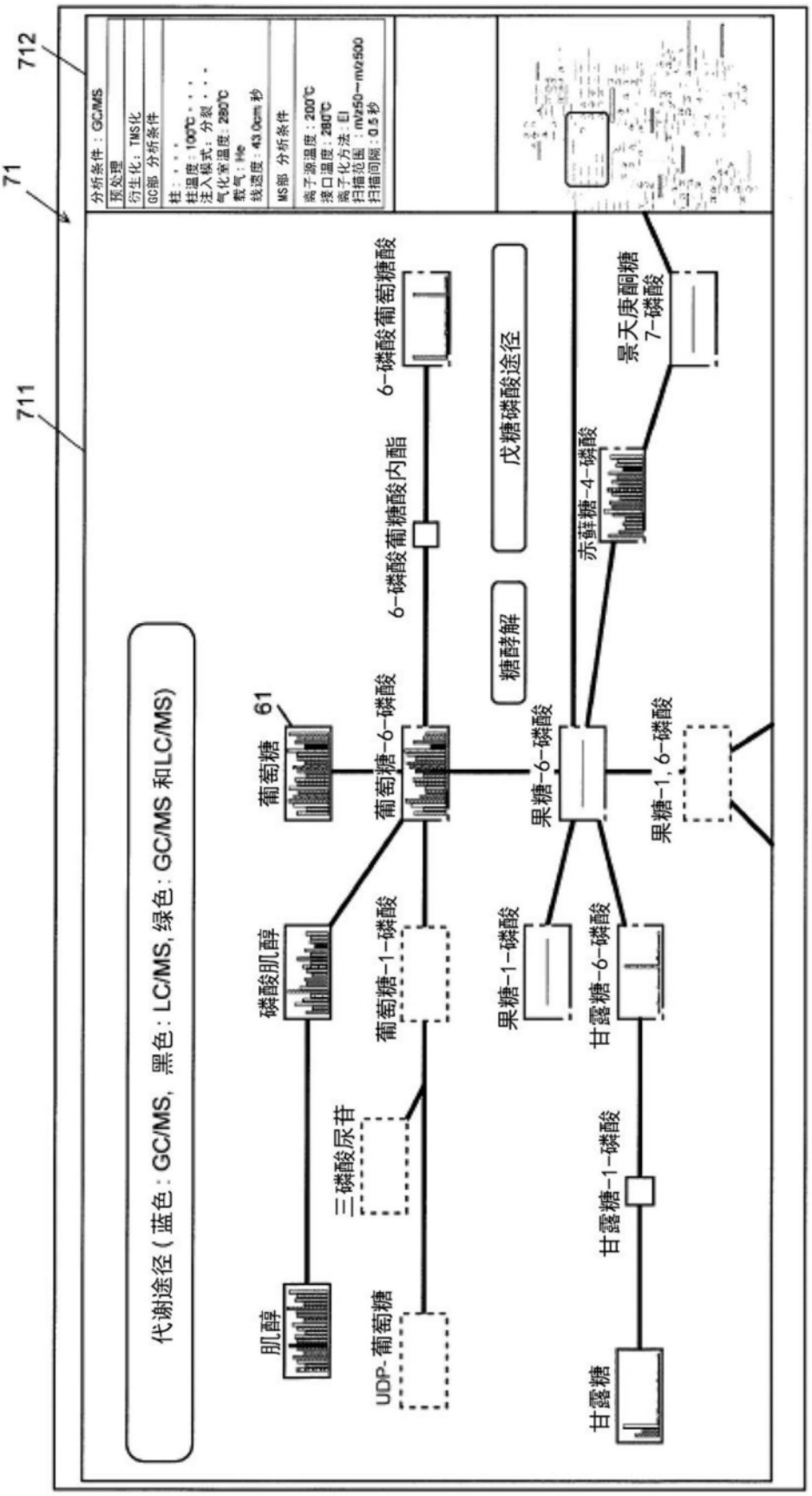

712
71
711
分析条件：GC/MS
预处理
衍生化：TMS化
GC部 分析条件
柱：
柱温度：100℃
注入模式：分裂
气化室温度：280℃
载气：He
线速度：43.0cm/秒
MS部 分析条件
离子源温度：200℃
接口温度：280℃
离子化方法：EI
扫描范围：m/z50~m/z500
扫描间隔：0.5秒
代谢途径（蓝色：GC/MS，黑色：LC/MS，绿色：GC/MS和LC/MS）
肌醇
磷酸肌醇
三磷酸尿苷
UDP-葡萄糖
葡萄糖
61
葡萄糖-1-磷酸
葡萄糖-6-磷酸
6-磷酸葡糖酸内酯
6-磷酸葡萄糖酸
糖酵解
戊糖磷酸途径
甘露糖
甘露糖-1-磷酸
甘露糖-6-磷酸
果糖-1-磷酸
果糖-6-磷酸
赤藓糖-4-磷酸
景天庚酮糖
7-磷酸
果糖-1,6-磷酸

图4

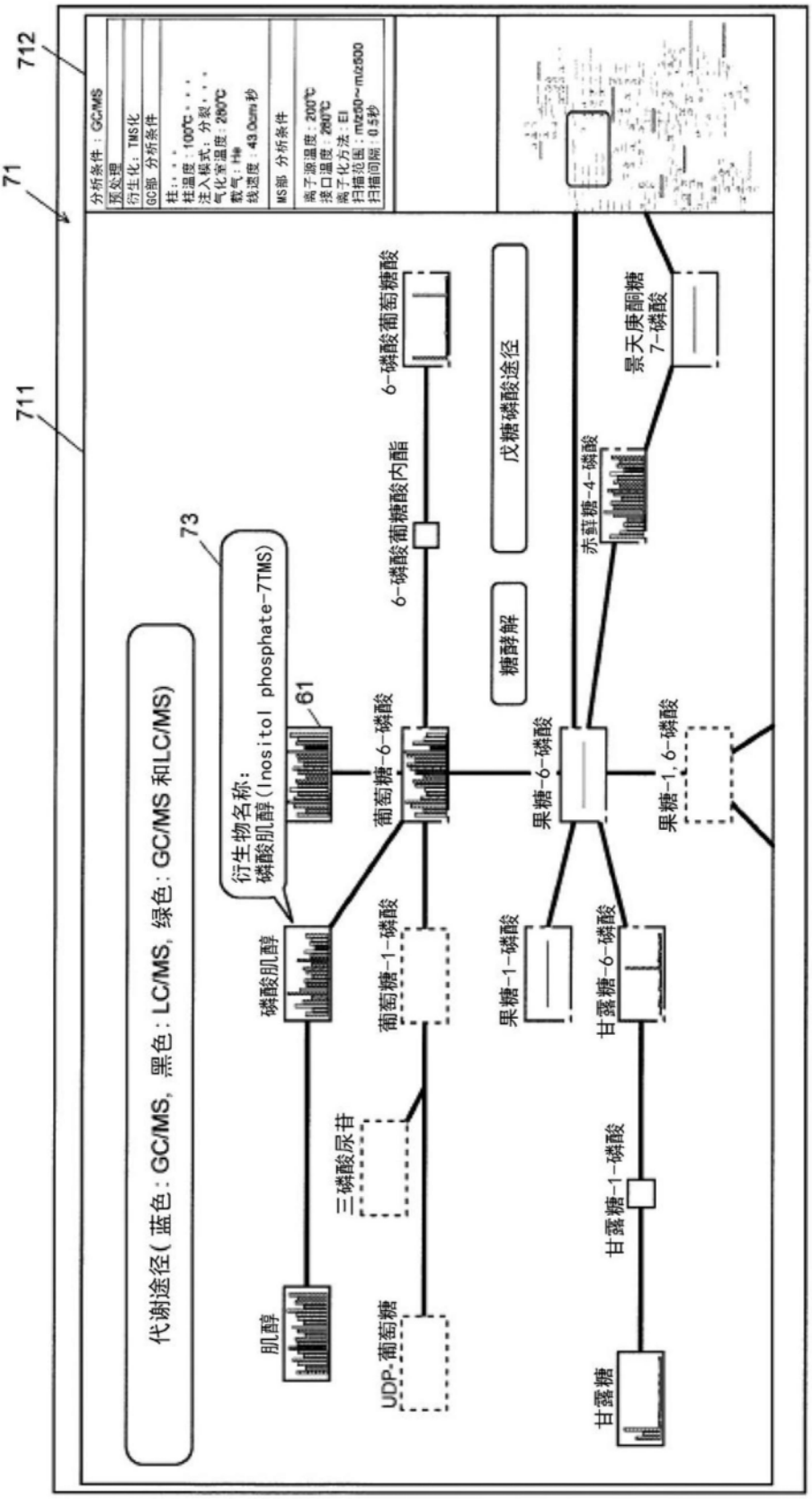

712
71
711
73
61
分析条件：GC/MS
预处理
衍生化：TMS化
GC部 分析条件
柱：，，
柱温度：100℃，，
注入模式：分裂，，
气化室温度：280℃
载气：He
线速度：43.0cm/秒
MS部 分析条件
离子源温度：200℃
接口温度：280℃
离子化方法：EI
扫描范围：m/z30~m/z500
扫描间隔：0.5秒
代谢途径（蓝色：GC/MS，黑色：LC/MS，绿色：GC/MS和LC/MS）
衍生物名称：
磷酸肌醇（Inositol phosphate-7TMS）
磷酸肌醇
肌醇
三磷酸尿苷
UDP-葡萄糖
葡萄糖-1-磷酸
葡萄糖-6-磷酸
6-磷酸葡萄糖酸内酯
6-磷酸葡萄糖酸
糖酵解
戊糖磷酸途径
果糖-1-磷酸
果糖-6-磷酸
甘露糖-1-磷酸
甘露糖-6-磷酸
甘露糖
果糖-1,6-磷酸
赤藓糖-4-磷酸
景天庚酮糖7-磷酸

图5