

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公開特許公報(A)

(11)公開番号
特開2024-108874
(P2024-108874A)

(43)公開日 令和6年8月13日(2024.8.13)

(51)国際特許分類		F I		テーマコード (参考)	
G 0 1 N	30/86 (2006.01)	G 0 1 N	30/86	D	2 G 0 4 1
G 0 1 N	27/62 (2021.01)	G 0 1 N	27/62	X	2 G 0 4 5
G 0 1 N	30/88 (2006.01)	G 0 1 N	27/62	C	
G 0 1 N	30/72 (2006.01)	G 0 1 N	27/62	Y	
G 0 1 N	33/50 (2006.01)	G 0 1 N	30/88	E	
		審査請求	未請求	請求項の数	6
				O L	(全13頁) 最終頁に続く
(21)出願番号	特願2023-13492(P2023-13492)	(71)出願人	000001993 株式会社島津製作所 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地		
(22)出願日	令和5年1月31日(2023.1.31)	(74)代理人	110001069 弁理士法人京都国際特許事務所		
		(72)発明者	中川 裕貴 京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式 会社島津製作所内		
		Fターム (参考)	2G041	EA04 EA06 FA10 HA01 JA20 LA07 MA02 MA04 MA05	
			2G045	FA34 FB06 JA04	

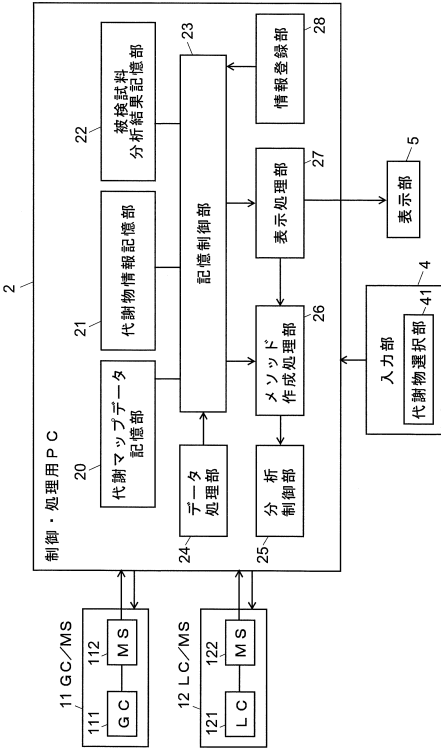
(54)【発明の名称】 代謝物解析用データ処理装置

(57)【要約】 (修正有)

【課題】代謝マップから、或る代謝物が被検試料に含まれ得るか否かを容易に判断できるようにする。

【解決手段】1ないし複数の分析装置（11, 12）で被検試料を分析することにより得られた分析データに基づいて同定された代謝物について、その測定結果を代謝物に対応付けて記憶している代謝物測定結果記憶部（22）と、複数の代謝物が、それぞれの測定結果とともに掲載されている代謝マップであって、各代謝物の掲載領域に、該代謝物を検出可能な分析装置の種類を表す分析装置情報が付加された代謝マップを表示画面に表示するための代謝マップ表示用データを記憶している代謝マップデータ記憶部（20）と、所定の代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている各代謝物に対応する測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示する表示処理部（27）と、を備える。

【選択図】 図1



【特許請求の範囲】

【請求項 1】

1 ないし複数の分析装置で被検試料を分析することにより得られた分析データに基づいて同定された代謝物について、その測定結果を代謝物に対応付けて記憶している代謝物測定結果記憶部と、

複数の代謝物が、それぞれの測定結果とともに掲載されている代謝マップであって、各代謝物の掲載領域に、該代謝物を検出可能な分析装置の種類を表す分析装置情報が付加された代謝マップを表示画面に表示するための代謝マップ表示用データを、1 ないし複数の代謝マップについて記憶している代謝マップデータ記憶部と、

前記代謝マップデータ記憶部に記憶されている代謝マップデータを読み出して所定の代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている各代謝物について、その代謝物に対応する測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示する表示処理部と、

を備える、代謝物解析用データ処理装置。

【請求項 2】

請求項 1 に記載の代謝物解析用データ処理装置において、

前記分析装置が、ガスクロマトグラフ質量分析装置と液体クロマトグラフ質量分析装置である、代謝物解析用データ処理装置。

【請求項 3】

請求項 1 に記載の代謝物解析用データ処理装置において、

前記代謝マップの各代謝物の掲載領域に付加されている分析装置情報が、前記掲載領域の少なくとも一部を、分析装置の種類に対応する色で表示させるための色情報である、代謝物解析用データ処理装置。

【請求項 4】

請求項 2 に記載の代謝物解析用データ処理装置において、

前記代謝物測定結果記憶部が、被検試料を分析装置で分析する前に所定の誘導体化処理が行われる代謝物について、誘導体化処理によって形成される誘導体化物の測定結果を代謝物に対応付けて記憶しており、

前記表示処理部が、前記代謝マップデータ記憶部に記憶されている代謝マップデータを読み出して代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている代謝物の誘導体化物の測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示する、代謝物解析用データ処理装置。

【請求項 5】

請求項 4 に記載の代謝物解析用データ処理装置において、

前記代謝物測定結果記憶部に、複数の誘導体化物の測定結果が代謝物に対応付けて記憶されているとき、

前記表示処理部は、前記複数の誘導体化物の中から所定の条件を満たす誘導体化物の測定結果を、前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示する、代謝物解析用データ処理装置。

【請求項 6】

1 ないし複数の分析装置で被検試料を分析することにより得られた分析データに基づいて同定された代謝物について、その代謝物の複数の誘導体化物の測定結果を代謝物に対応付けて記憶している代謝物測定結果記憶部と、

複数の代謝物が掲載されている代謝マップを表示画面に表示するための代謝マップ表示用データを、1 ないし複数の代謝マップについて記憶している代謝マップデータ記憶部と、

前記代謝マップデータ記憶部に記憶されている代謝マップデータを読み出して代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている代謝物について、その代謝物の複数の誘導体化物の中から所定の条件を満たす誘導体化物の測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上に挿入して表示する表示処理部

10

20

30

40

50

と、

を備える、代謝物解析用データ処理装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、被検試料の分析データに基づいて代謝マップを作成する代謝物解析用データ処理装置に関する。

【背景技術】

【0002】

代謝異常を伴う疾患の診断、治療、或いはこうした疾患に対する治療薬の研究・開発等のために、ガスクロマトグラフ質量分析装置（GC/MS）、液体クロマトグラフ質量分析装置（LC/MS）を利用した代謝物解析が行われている。また、医薬品、健康食品、薬物などの安全性、や毒性に関する薬理の検討、動植物のメタボローム解析などにも、GC/MSやLC/MSを利用した代謝物解析が行われている。

【0003】

代謝物解析では、ヒトや他の生物の生体内における代謝の経路を記した代謝マップと呼ばれるチャートがよく利用されている（非特許文献1）。代謝マップには、代謝の過程で生成される各種の化合物（代謝物）、化学反応、代謝に関与する酵素、などが掲載されており、一目で代謝の流れが理解できるようになっている。こうした代謝マップによれば、ヒトや他の生物から採取された尿などの被検試料中にどのような代謝物が存在するかを容易に知ることができる。

【0004】

例えば、或る代謝マップに含まれている様々な代謝物が被検試料に含まれているか否かを調べたい場合には、GC/MSおよび／またはLC/MSを用いて、被検試料に含まれる代謝物を分析する。そして、その分析結果により得られたクロマトグラムピークに対応するマススペクトルやマスクロマトグラムから被検試料に含まれる代謝物を同定し、各代謝物の測定結果として該代謝物の定量値や定量値を表す棒グラフ等を代謝マップ上に挿入する。このような作業を、代謝マップに含まれている代謝物の全てについて繰り返し行うことにより、GC/MS、LC/MSを用いた被検試料の分析結果を反映した代謝マップが完成する。

【0005】

しかしながら被検試料の分析結果から代謝マップを作成する作業は繁雑であり、作業者の負担が大きい。そこで、被検試料の分析結果が入力されると、その分析結果の解析から代謝マップを作成するまでの作業を自動的に実行する代謝物解析用データ処理装置が提供されている。この装置は、代謝マップを表示画面に表示するための代謝マップ表示用データを記憶部に記憶しており、被検試料の分析結果の解析が終了すると、代謝マップ表示用データを記憶部から読み出し、代謝物の定量値等が挿入された代謝マップを作成して表示画面に表示する。

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0006】

【非特許文献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

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

代謝マップに掲載されている代謝物には、GC/MS及びLC/MSのいずれでも検出可能なものもあれば、GC/MS及びLC/MSのいずれか一方でのみ検出可能な代謝物

10

20

30

40

50

もある。また、GC／MS及びLC／MSのいずれでも検出できない代謝物もある。したがって、代謝マップに掲載されている代謝物の中に測定結果が挿入されていない代謝物がある場合でも、実際はその代謝物が被検試料に含まれている場合がある。しかしながら、代謝マップをみただけで、代謝物が被検試料に含まれ得るか否かを判断することは難しかった。

【0008】

本発明が解決しようとする課題は、被検試料の分析結果を反映した代謝マップを作成する代謝物解析用データ処理装置において、代謝マップから、或る代謝物が被検試料に含まれ得るか否かを容易に判断することができるようにすることである。

【課題を解決するための手段】

【0009】

上記課題を解決するために成された本発明に係る代謝物解析用データ処理装置は、

1ないし複数の分析装置で被検試料を分析することにより得られた分析データに基づいて同定された代謝物について、その測定結果を代謝物に対応付けて記憶している代謝物測定結果記憶部と、

複数の代謝物が、それぞれの測定結果とともに掲載されている代謝マップであって、各代謝物の掲載領域に、該代謝物を検出可能な分析装置の種類を表す分析装置情報が付加された代謝マップを表示画面に表示するための代謝マップ表示用データを、1ないし複数の代謝マップについて記憶している代謝マップデータ記憶部と、

前記代謝マップデータ記憶部に記憶されている代謝マップデータを読み出して所定の代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている各代謝物について、その代謝物に対応する測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示する表示処理部と、

を備えるものである。

【発明の効果】

【0010】

本発明に係る代謝物解析用データ処理装置によれば、被検試料の分析結果を反映させた代謝マップを表示画面に表示する際に、該代謝マップに含まれる各代謝物の表示領域に、該代謝物を検出可能な分析装置の種類を表す情報が付与されているため、ユーザは、代謝マップに含まれる代謝物の中に測定結果が挿入されていない代謝物が存在する場合に、その代謝物の表示領域に付与されている分析装置情報から、その代謝物が被検試料に含まれ得るか否かを容易に判断することができる。具体的には、被検試料の分析に使用された分析装置と、その代謝物を検出可能な分析装置が異なる場合は、該代謝物は被検試料に含まれ得ると判断することができる。

【図面の簡単な説明】

【0011】

【図1】本発明に係る代謝物解析用データ処理装置を用いた代謝物解析システムのブロック構成図。

【図2】代謝マップの作成手順を示すフローチャート。

【図3】被検試料の分析前の代謝マップの表示例を示す図。

【図4】被検試料の分析後の代謝マップの表示例を示す図。

【図5】被検試料の分析後の代謝マップにおいて、代謝物の誘導体化物の名称を表示させた状態を示す図。

【発明を実施するための形態】

【0012】

以下、本発明に係る代謝物解析用データ処理装置を用いた代謝物解析システムの一実施形態について、図面を参照して説明する。

【0013】

図1は本実施形態による代謝物解析システムの全体概略図である。この代謝物解析システムは、分析装置としてGC部111とMS部112とからなるGC／MS11、LC部

10

20

30

40

50

121とMS部122とからなるLC/MS12、GC/MS11及びLC/MS12の動作を制御するとともにGC/MS11及びLC/MS12でそれぞれ収集された分析データを処理するための制御・処理用パーソナルコンピュータ（PC）2を備える。

【0014】

制御・処理用PC2にはユーザインターフェイスとして入力部4及び表示部5が接続されている。制御・処理用PC2は汎用のパーソナルコンピュータにアプリケーションソフトウェアとして専用の制御・処理ソフトウェアが搭載されたものであり、このソフトウェアがPC上で実行されることで、GC/MS11の通常の制御やデータ処理のほか、後述するような特徴的な制御・処理を遂行する。即ち、制御・処理用PC2が本発明に係る代謝物解析用データ処理装置に相当する。

【0015】

制御・処理用PC2で実現される代謝物解析用データ処理装置は、代謝マップデータ記憶部20、代謝物情報記憶部21、被検試料分析結果記憶部22、記憶制御部23、データ処理部24、分析制御部25、メソッド作成処理部26、表示処理部27、情報登録部28、上記入力部4に含まれる代謝物選択部41、及び、上記表示部5、を機能ブロックとして備える。

【0016】

代謝マップデータ記憶部20は1乃至複数（通常は複数）の代謝マップを構成するデータを記憶するものである。代謝物情報記憶部21はGC/MS11及びLC/MS12のいずれか一方又は両方で分析可能な代謝物について、データ処理条件を含む分析条件と、既知の標準試料の保持指標、マススペクトル、特徴的なイオン情報（イオンの質量電荷比や複数のイオンの強度比など）などの分析結果とを含む分析関連情報を代謝物毎に記憶するものである。なお、代謝物毎の分析関連情報に含まれる標準試料の分析結果（マススペクトル、保持指標等）は、このシステムに含まれるGC/MS11、LC/MS12を用いて当該代謝物を含む標準試料を実際に測定して求めるようにしてもよいし、既存の学会論文などに発表されている情報を利用してよい。なお、或る1つの代謝物に対しGC/MS11又はLC/MS12を用いて、異なる分析条件の下で測定されることがある。したがって、1つの代謝物に対応付けられている分析関連情報は1つであるとは限らず、複数である場合もある。

【0017】

被検試料分析結果記憶部22は、標準試料ではなく含有成分が未知である被検試料をGC/MS11、LC/MS12により分析した結果である保持指標、マススペクトルなどの分析結果と、その分析を実行した際の分析条件と、標準試料の分析結果（マススペクトル、保持指標等）と、その被検試料を分析した結果から同定された代謝物とその測定結果とを、被検試料毎に記憶するものである。被検試料分析結果記憶部22が本発明の代謝物測定結果記憶部に相当する。なお、記憶部20、21、22は1つのメモリ装置（例えばHDDやSSDなど）の中で異なる記憶領域に設けられていてもよいし、別々のメモリ装置に設けられていてもよい。

【0018】

この実施形態において、代謝マップデータ記憶部20に格納されている代謝マップを構成するデータ（以下、代謝マップデータという）には、代謝マップを構成する複数の代謝物の名称を、各代謝物の測定結果が挿入される領域を示す矩形枠とともに代謝経路に沿って配置した状態で表示部5の画面に表示するための代謝マップ表示データが含まれる。代謝マップ表示データには、各代謝物を検出可能な分析装置の種類を表す分析装置情報が含まれている。分析装置情報については後述する。

【0019】

また、この実施形態において、代謝物情報記憶部21に格納される代謝物毎の分析関連情報には、GC/MS11、LC/MS12における前処理の一つである誘導体化に用いられる誘導体化試薬と、誘導体化試薬との反応によって形成される代謝物の誘導体化物及びその性質、等の情報が含まれるものとする。

10

20

30

40

50

【0020】

次に、上記構成の代謝物解析システムを用い、被検試料に含まれる代謝物の同定を行う際の分析手順の一例を図2のフローチャートに従って説明する。

【0021】

まずユーザ（作業員）は入力部4で目的とする代謝経路が記載された代謝マップの表示を指示する（ステップ1）。この指示に応じて表示処理部27は、記憶制御部23を介して代謝マップデータ記憶部20から対応する代謝マップデータを読み出し、その代謝マップを表示部5の画面上に描出するとともに、代謝物情報記憶部21からその代謝マップに掲載されている代謝物に対応した分析関連情報を読み出して取得する（ステップ2）。なお、代謝マップが複数存在する場合には、例えば代謝マップ名などにより、ユーザが所望の代謝マップを選択できるようにしておくことよい。

10

【0022】

ユーザは表示部5の画面上に表示された代謝マップ上で、代謝物選択部41により、被検試料に含まれているか否かを確認したい代謝経路を選択指示する（ステップ3）。図3はこのときに表示される表示画面の一例を示している。この分析前表示画面51では、代謝物選択部41により選択された代謝経路が含まれる代謝マップ（部分代謝マップ）が主領域511に表示され、その右側の副領域512の下段に全体の代謝マップ（全代謝マップ）が、上段に分析条件の詳細が表示されている。副領域512の下段に表示された全代謝マップにおいて四角枠で囲まれている部分が主領域511に表示されている部分代謝マップに相当する。

20

【0023】

表示画面に表示される代謝マップには、該代謝マップに含まれる代謝物の名称とともにその代謝物の測定結果が挿入される領域である矩形枠61が代謝経路に沿って掲載されている。図3に示すように、分析前表示画面51に表示される代謝マップは、各代謝物の測定結果が矩形枠61に挿入されておらず該矩形枠61が空欄であることから「代謝マップの白地図」とも呼ばれている。

【0024】

本実施形態では、表示画面に表示される代謝マップに掲載される各代謝物の矩形枠61に、その代謝物を検出可能な分析装置がGC/MS11、LC/MS12のいずれであるかを表す分析装置情報として、分析装置の種類を表す色が付加されている。具体的には、検出可能な分析装置がGC/MS11のみである代謝物の矩形枠61は青色、LC/MS12のみである代謝物の矩形枠61は黒色、GC/MS11とLC/MS12のいずれでも検出可能な代謝物の矩形枠61は緑色で表示される。なお、図3では、矩形枠が青色、黒色、緑色であることを、それぞれ実線、破線、一点鎖線で表現している。

30

【0025】

ユーザにより選択指示された部分代謝マップが確定すると、メソッド作成処理部26は選択指示された部分代謝マップに含まれる代謝物に対応した分析関連情報を取得し、GC/MS11、LC/MS12のいずれか、あるいは両方により分析を実行する際に必要な各種の分析パラメータやデータ処理パラメータを含むメソッドファイルを作成し（ステップ4）、これを分析制御部25に送る。分析制御部25は分析開始の指示を受けると、このメソッドファイルに従ってGC/MS11及び/又はLC/MS12を制御し、被検試料に対する分析を実行する（ステップ5）。

40

【0026】

GC/MS11及び/又はLC/MS12により収集された分析データはデータ処理部24に入力され、データ処理部24はメソッドファイルに記載されたデータ処理条件に基づいてデータ処理を実行する。このメソッドファイルでは、保持指標、マススペクトル、特徴的なイオン情報などが代謝物毎に確定しているので、これらを用いることで、代謝物を容易に検出することができる。例えば、保持指標から保持時間が推測可能であるから、推測される保持時間の前後に適度な時間的余裕を見込んだ保持時間範囲を設定し、クロマトグラム上でこの保持時間範囲に絞って目的の代謝物に対応すると思われるピークを抽出

50

する。そして、そのピーク付近の実測によるマススペクトルと標準試料のマススペクトルとのパターン比較を行って、その類似性を判断することにより、目的の代謝物であるか否かを高い確度で判断することができる。また、データ処理部 24 は、同定された代謝物に対応した質量電荷比のマスクロマトグラム上のピーク面積などを用いて、その代謝物の定量値を算出することができる。上記のように同定にクロマトグラムを併用することで、マススペクトルのピークパターンのみを用いた代謝物の検出に比べて検出が容易であり、しかも高い信頼性をもって検出を行うことができる。

【0027】

データ処理部 24 により被検試料に含まれる代謝物が順次同定され定量値が求まると、その分析結果は記憶制御部 23 を介して被検試料分析結果記憶部 22 に格納される（ステップ 6）。このとき、分析前の前処理として誘導体化処理が行われた結果、複数の誘導体化物が形成された代謝物については、これら複数の誘導体化物の定量値が代謝物と対応付けて被検試料分析結果記憶部 22 に格納される。なお、代謝物情報記憶部 21 に格納されていた標準試料の分析結果（マススペクトル、保持指標等）や分析条件自体も被検試料毎に保存するようにしてもよいが、代謝物情報記憶部 21 に格納されている情報との対応関係のみを記録するようにしてもよい。

10

【0028】

その後、ユーザが入力部 4 から代謝マップの作成を指示すると（ステップ 7）、表示処理部 27 は記憶制御部 23 を介して代謝マップデータ記憶部 20 から代謝マップデータを読み出すとともに、その代謝マップに関連付けられた被検試料の分析結果として、該代謝マップに掲載されている代謝物の測定結果を被検試料分析結果記憶部 22 から読み出して、代謝マップ上に明記する（ステップ 8）。図 4 はこのときに表示される表示画面の一例を示す図である。この分析後表示画面 7 では分析前表示画面 5 と同様に、主領域 711 に部分代謝マップが表示され、副領域 712 の下段に全代謝マップが、上段に分析条件の詳細が配置表示されている。図 4 に示す例では、代謝マップの矩形枠 61 には、代謝物の測定結果として複数の被検試料に含まれている代謝物の定量値の棒グラフが挿入されており、選択指示されなかった代謝物については、矩形枠 61 内に「—」が表示されている。また、選択指示されたものの検出されなかった代謝物については、矩形枠 61 が空欄となっている。

20

【0029】

このような分析後表示画面 7 を見れば、選択指示されたものの検出されなかった代謝物については、その矩形枠 61 の表示色から、被検試料中に存在する可能性があるか否かを判断することができる。すなわち、例えば被検試料の分析に用いた装置が LC/MS12 である場合に矩形枠 61 の表示色が青色である代謝物（すなわち、GC/MS12 でのみ検出可能な代謝物）の該矩形枠 61 が空欄である場合は、分析装置を GC/MS11 に変更することで検出され得ると判断することができる。また、例えば被検試料の分析に用いた装置が LC/MS12 である場合に矩形枠 61 の表示色が緑色である代謝物（すなわち、GC/MS11、LC/MS12 の両方で検出可能な代謝物）の該矩形枠 61 が空欄である場合も、LC/MS12 では検出されなかったものの GC/MS11 で検出される可能性があるかと判断することができる。

30

40

【0030】

さらに、本実施形態では、記憶制御部 23 は、複数の誘導体化物の定量値が被検試料分析結果記憶部 22 に格納されている代謝物については、所定の条件を満たす誘導体化物の測定結果を被検試料分析結果記憶部 22 から読み出して、代謝マップ上に明記する。ここで、所定の条件とは、他の誘導体化物に比べて検出感度が優れている誘導体化物であること、検出の再現性が優れている誘導体化物であること、熱や薬剤に対する安定性に優れている誘導体化物であること、等である。例えば、代謝物としてイノシトールリン酸（Inositol phosphate）を検出する場合は、被検試料の前処理としてトリメチルシリル（TMS）化処理が行われるが、それにより形成される誘導体化物（Inositol phosphate-7 TMS）の定量値が、イノシトールリン酸の測定結果として被検試料分析結果記憶部 22

50

から読み出される。なお、代謝マップの矩形枠 61 内に掲載されている測定結果が誘導体化合物の定量値である場合は、分析後表示画面 7 上の矩形枠 61 を指定することにより、例えば図 5 に示すように、誘導体化合物の名称が記述されたポップアップウィンドウ 73 が表示される。したがって、ユーザは、そのポップアップウィンドウ 73 をみて、矩形枠 61 に挿入されている測定結果が、代謝物のいずれの誘導体化合物の測定結果であるかを確認することができる。

【0031】

なお、上記実施形態の代謝物解析システムは分析装置として GC/MS 11 及び LC/MS 12 を 1 種類ずつ備えていたが、GC/MS 11 及び LC/MS 12 の少なくとも一方について、同種又は異種の複数の装置を備えていてもよい。例えば、複数の GC/MS

10

【0032】

また、上記実施形態の代謝物解析システムは、代謝マップの各代謝物の測定結果が挿入される矩形枠を、その代謝物を検出可能な分析装置の種類の応じた色で表示させる構成としたが、矩形枠の内部や代謝物の名称を、代謝物を検出可能な分析装置の種類の応じた色で表示するようにしてもよく、矩形枠や代謝物の名称の近傍に分析装置の種類を表す標識を表示するようにしてもよい。

【0033】

〔態様〕

20

上述した例示的な実施形態が以下の態様の具体例であることは、当業者には明らかである。

【0034】

（第 1 項）本発明の一態様に係る代謝物解析用データ処理装置は、

1 ないし複数の分析装置で被検試料を分析することにより得られた分析データに基づいて同定された代謝物について、その測定結果を代謝物に対応付けて記憶している代謝物測定結果記憶部と、

複数の代謝物が、それぞれの測定結果とともに掲載されている代謝マップであって、各代謝物の掲載領域に、該代謝物を検出可能な分析装置の種類を表す分析装置情報が付加された代謝マップを表示画面に表示するための代謝マップ表示用データを、1 ないし複数の代謝マップについて記憶している代謝マップデータ記憶部と、

30

前記代謝マップデータ記憶部に記憶されている代謝マップデータを読み出して所定の代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている各代謝物について、その代謝物に対応する測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示する表示処理部と、

を備えるものである。

【0035】

第 1 項に係る代謝物解析用データ処理装置によれば、被検試料の分析結果を反映させた代謝マップを表示画面に表示する際に、該代謝マップに含まれる各代謝物の表示領域に、該代謝物を検出可能な分析装置の種類を表す情報が付与されているため、ユーザは、代謝マップに含まれる代謝物の中に測定結果が挿入されていない代謝物が存在する場合に、その代謝物の表示領域に付与されている分析装置情報から、その代謝物が被検試料に含まれるか否かを容易に判断することができる。具体的には、被検試料の分析に使用された分析装置と、その代謝物を検出可能な分析装置が異なる場合は、該代謝物は被検試料に含まれ得ると判断することができる。

40

【0036】

（第 2 項）一般的に、代謝物解析に使用される分析装置は、ガスクロマトグラフ質量分析装置又は液体クロマトグラフ質量分析装置である。そこで、第 2 項に係る代謝物解析用データ処理装置は、第 1 項に係る代謝物解析用データ処理装置において、前記分析装置を、ガスクロマトグラフ質量分析装置と液体クロマトグラフ質量分析装置とすることができ

50

る。

【0037】

第2項に係る代謝物解析用データ処理装置によれば、代謝異常を伴う疾患の診断、治療、或いはこうした疾患に対する治療薬の研究・開発、医薬品、健康食品、薬物などの安全性、や毒性に関する薬理の検討、動植物のメタボローム解析等を目的とする様々な代謝物解析に有用な代謝マップを作成することができる。

【0038】

(第3項) 第3項に係る代謝物解析用データ処理装置は、第1項又は第2項に係る代謝物解析用データ処理装置において、前記代謝マップの各代謝物の掲載領域に付加されている分析装置情報が、前記掲載領域の少なくとも一部を、分析装置の種類に対応する色で表示させるための色情報であるものとすることができる。

10

【0039】

第3項に係る代謝物解析用データ処理装置によれば、代謝マップの各代謝物の掲載領域の少なくとも一部の色をみて、その代謝物を検出可能な分析装置の種類を把握することができる。

【0040】

(第4項) 第4項に係る代謝物解析用データ処理装置は、第1項ないし第3項に係る代謝物解析用データ処理装置において、

前記代謝物測定結果記憶部が、被検試料を分析装置で分析する前に所定の誘導体化処理が行われる代謝物について、誘導体化処理によって形成される誘導体化物の測定結果を代謝物に対応付けて記憶しており、

20

前記表示処理部が、前記代謝マップデータ記憶部に記憶されている代謝マップデータを読み出して代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている代謝物の誘導体化物の測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示するものとすることができる。

【0041】

(第5項) 第5項に係る代謝物解析用データ処理装置は、第4項に係る代謝物解析用データ処理装置において、

前記代謝物測定結果記憶部に、複数の誘導体化物の測定結果が代謝物に対応付けて記憶されているとき、

30

前記表示処理部は、前記複数の誘導体化物の中から所定の条件を満たす誘導体化物の測定結果を、前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上の該代謝物の掲載領域に挿入して表示するものとすることができる。

【0042】

(第6項) 第6項に係る代謝物解析用データ処理装置は、

1ないし複数の分析装置で被検試料を分析することにより得られた分析データに基づいて同定された代謝物について、その代謝物の複数の誘導体化物の測定結果を代謝物に対応付けて記憶している代謝物測定結果記憶部と、

複数の代謝物が掲載されている代謝マップを表示画面に表示するための代謝マップ表示用データを、1ないし複数の代謝マップについて記憶している代謝マップデータ記憶部と、

40

前記代謝マップデータ記憶部に記憶されている代謝マップデータを読み出して代謝マップを表示画面上に表示する際に、その代謝マップに掲載されている代謝物について、その代謝物の複数の誘導体化物の中から所定の条件を満たす誘導体化物の測定結果を前記代謝物測定結果記憶部から取得し、該測定結果を代謝マップ上に挿入して表示する表示処理部と、

を備えるものである。

【0043】

第4項～第6項に係る代謝物解析用データ処理装置によれば、

被検試料を分析装置で分析する前に所定の誘導体化処理が行われる代謝物が該被検試料

50

に含まれる場合には、その誘導体化処理によって形成される誘導体化物の測定結果を、代謝物の測定結果として代謝マップ上に表示させることができる。

【0044】

この場合、第5項又は第6項に係る代謝物解析用データ処理装置では、複数の誘導体化物が形成される代謝物については、該複数の誘導体化物の中から所定の条件を満たす誘導体化物の測定結果が、前記代謝物の測定結果として代謝マップに表示される。ここで、所定の条件とは、他の誘導体化物に比べて検出感度が優れていること、検出の再現性が優れていること、熱や薬剤に対する安定性に優れていること、等である。このような条件を満たす誘導体化物の測定結果を用いることにより、信頼性に優れた代謝マップを得ることができる。

10

【符号の説明】

【0045】

1 1 … G C / M S

1 1 1 … G C 部

1 1 2 … M S 部

1 2 … L C / M S

1 2 1 … L C 部

1 2 2 … M S 部

2 … 制御・処理用 P C

2 0 … 代謝マップデータ記憶部

2 1 … 代謝物情報記憶部

2 2 … 被検試料分析結果記憶部

2 3 … 記憶制御部

2 4 … データ処理部

2 5 … 分析制御部

2 6 … メソッド作成処理部

2 7 … 表示処理部

2 8 … 情報登録部

4 … 入力部

4 1 … 代謝物選択部

5 … 表示部

6 … 分析前表示画面

7 … 分析後表示画面

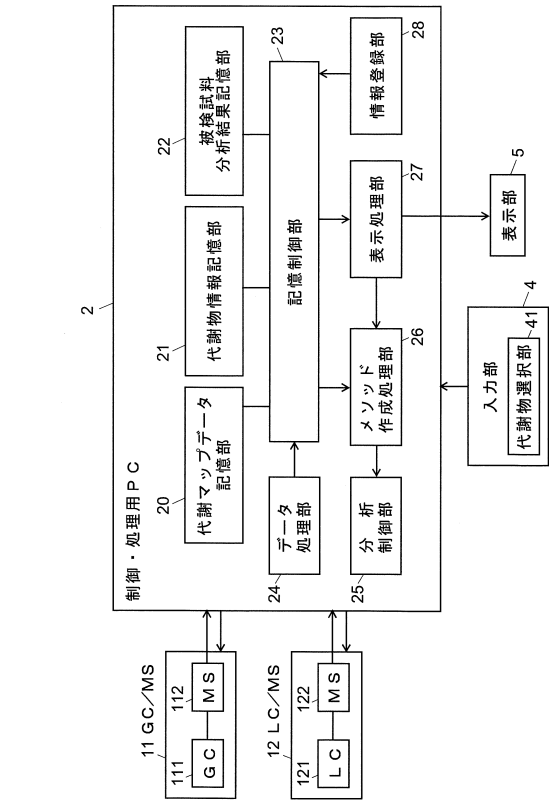
20

30

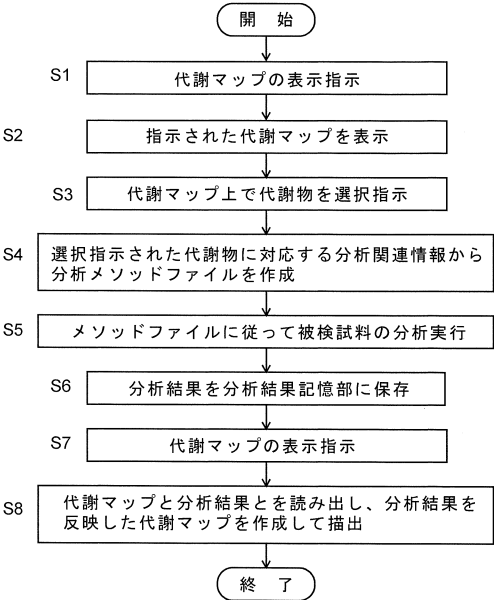
40

50

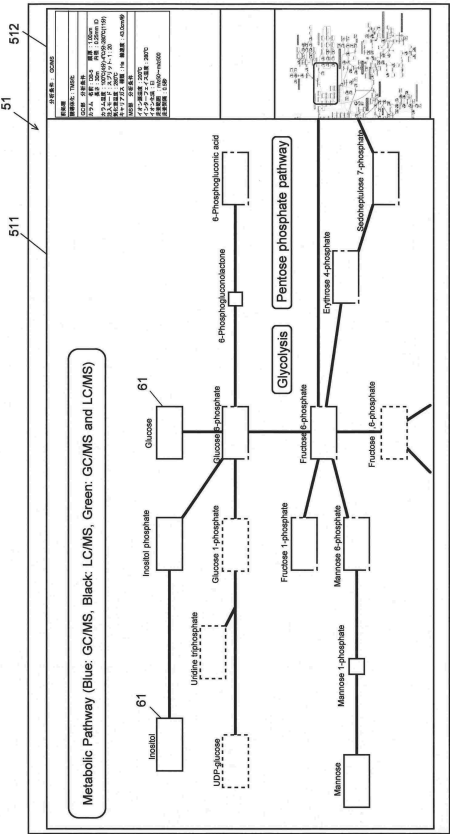
【図面】
【図 1】



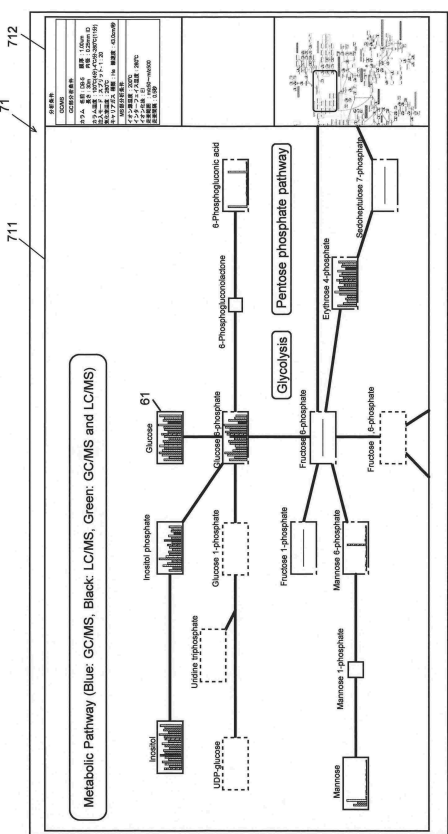
【図 2】



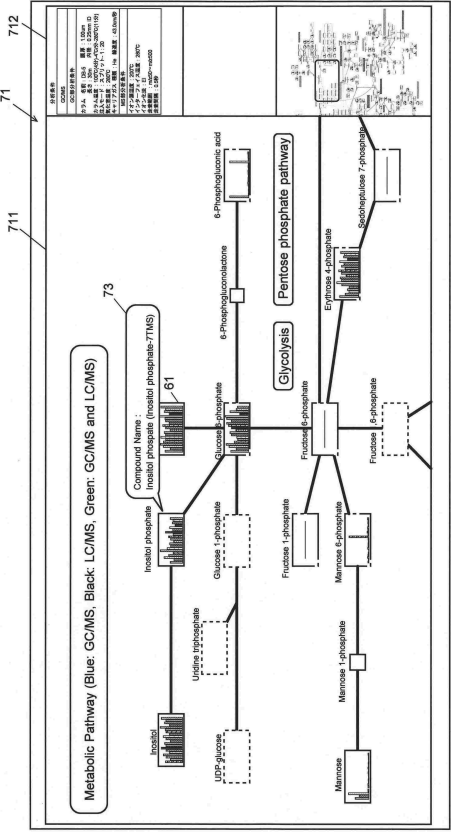
【図 3】



【図 4】



【図 5】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類	F I		テーマコード (参考)
	G 0 1 N	30/72	A
	G 0 1 N	30/72	C
	G 0 1 N	33/50	U