

2020年11月19日
三井情報株式会社

**三井情報、脂質同定ソフトウェア「LipidSearch」新バージョンの提供を開始
- 4つの新機能追加で網羅的な未知脂質解析の更なる加速を支援 -**

三井情報株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:小日山 功、以下 三井情報)は、メタボローム解析に用いる脂質同定※1ソフトウェア「LipidSearch(リピッドサーチ)」の最新バージョンである「LipidSearch 5.0」の提供を開始しました。LipidSearchは2010年に東京大学大学院医学系研究科 田口 良特任教授(当時)と三井情報が開発して世界30か国で利用されているソフトウェアで、これまで手動で行っていた脂質のデータ分析プロセスを自動化し、構造が不特定かつ多岐にわたる未知な脂質(未知脂質)の発見に寄与してきました。三井情報は従来のLipidSearchに新しい機能を追加することで脂質の網羅的な解析・解明を加速させ、医療・創薬分野の研究だけでなく、食品や化粧品機能性評価/商品開発を支援していきます。

脂質は蛋白質、炭水化物と共に三大栄養素の一つであり、体内ではエネルギー源として身体活動や体温調節等の働きを助けています。その反面、過剰に摂取するとメタボリックシンドロームや動脈硬化などの脂質関連疾患の原因となります。近年、国内外の学会で多くの未知脂質が生体内に存在することが明らかになり、未知脂質の解明は脂質関連疾患の病態解明に繋がる可能性が期待されています。未知脂質の研究には脂質の網羅的な解析(リピドミクス)が欠かせず、高度な実験技術・知識、高性能で高価な質量分析装置に加え、膨大なデータ解析が必要です。かかる状況を受け、三井情報では未知脂質の解明をより加速させることを目的として、LipidSearch 5.0に以下の4つの機能を追加しました。

① データベースカスタマイズ

LipidSearchの脂質仮想構造データベースは独自の脂質計算アーキテクチャを用いて150万種以上の脂質が登録されていることが強みでしたが、LipidSearch 5.0ではさらに柔軟なデータベースカスタマイズ機能を搭載しました。ユーザは脂質基本骨格、脂肪酸鎖、付加イオン、修飾基等の部分構造をSMILES記法※2で自由に定義でき、LipidSearch 5.0はこれらの定義した部分構造の組み合わせを計算、多様な脂質の構造を視覚的に表示します。また、既知脂質かどうかを公共データベースLipidMaps Structure DataBase※3に照合する機能も追加し、より効率的な脂質分析が可能となりました。

② Infusion解析機能

LC※4での成分分離を経ないInfusionデータ※5に特化した同定アルゴリズムを追加しました。当アルゴリズムはガウスモデルを用いて同位体ピークを分離させ、分離させた同位体ピークで混合物スペクトルの組成式を高精度に同定するアルゴリズムを実装しています。さらにInfusionのMS2スペクトルからの脂質構造同定、プロダクトイオンの強度情報を用いた定量分析までを成分分離を経ずに実施することが可能となりました。

③ LC-MS※6同定機能の強化

LC-MSで脂質を分離する際に同一分子式で構造の異なる異性体のピークが同時溶出(共溶出)し、MS2スペクトルに混在することで正確な同定が困難となっていました。LipidSearch 5.0ではMS1クロマトグラムをGaussian Fittingで成分ごとに分離し、かつMS2スペクトル中のプロダクトイオンピークを各成分クロマトグラムに分類するデコンボリューションアルゴリズムで混合スペクトルからも正確な脂質成分の同定を行うことが可能となりました。

④ アラインメント機能の強化

試料中の脂質成分の比較定量分析を行う際、異なる測定間で保持時間がずれるため、特に多検体でのアラインメント解析においてピークの対応付けの誤りが発生し、定量分析が困難となっていました。LipidSearch

5.0では脂質クラスごとに保持時間のずれを補正するアルゴリズムを実装し、正確な定量分析を行うことが可能となりました。

三井情報は2010年にLipidSearchを提供開始してから世界中で未知脂質の発見を後押ししてきました。これまでに培ったバイオサイエンス事業のナレッジとIT技術を駆使し、今後も各分野の研究開発を加速させていきます。

※1 脂質同定: 生体試料中に含まれる脂質成分の種類を判定すること

※2 SMILES記法: 分子の化学構造をASCII符号の英数字で文字列化した表記方法

※3 LipidMaps Structure DataBase: 生体脂質構造の世界最大の公的リレーショナルデータベース

※4 LC: 液体クロマトグラフ

※5 Infusionデータ: LCでの成分分離を経ずに取得した質量分析データ

※6 LC-MS: 液体クロマトグラフィー質量分析法

以上

【関連ページ】

製品ページ: <https://www.mki.co.jp/solution/lipidsearch.html>

【三井情報株式会社について】

三井情報株式会社(MKI)はキャッチコピー『ナレッジでつなぐ、未来をつくる』を掲げ、ICTを基軸とした事業戦略パートナーとしてお客様のIT戦略を共に創り、デジタルトランスフォーメーションを支援しています。半世紀にわたり培った技術や知見の結実である“KNOWLEDGE”を活かし、お客様と共に価値を創造する「価値創造企業」として絶え間ない挑戦を続けていきます。

ホームページ: <https://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。

【報道関係者からのお問い合わせ先】

三井情報株式会社

経営企画統括本部 戦略企画部 広報・CSV推進室

TEL : 03-6376-1008 E-mail : press-dg@mki.co.jp

【本製品サービスに関するお問い合わせ先】

三井情報株式会社

バイオサイエンス部 バイオサイエンス室

TEL : 03-6376-1291 E-mail : bio-psg-pro-dg@mki.co.jp