

# 質量分析・Bioinformaticsを用いた複合生命情報の解析

Keywords: Bioinformatics・質量分析・分析化学・メタボロミクス・統合オミクス解析・統計解析言語R

## ● 研究概要

質量分析による内因性代謝物(メタボローム)解析や統計解析言語Rを用いたBioinformaticsによる統合オミクス解析を応用した研究を行っています。

## ● 研究テーマ

### 1. 「簡便に・迅速に・誰にでも」使える低分子解析法の開発

質量分析は低分子などのプロファイル技術として、医学・薬学・農学などの多領域で利用されている技術である。しかし、一般的に質量分析計の操作には高い専門性が要求され、試料前処理なども煩雑である。そこで島津製作所と共同で、金属製微細針(探針)を利用した新たな分析手法PESI/MS/MS(図1)を開発した(論文1-3、特許1-3)。

本法を用いると試料の前処理を行うことなく、迅速に試料中の生体分子を同定することが可能である。さらに、多変量解析などのデータを自動実行することが可能な分析プラットフォーム: PiTMapを開発した(図2、論文3)。PiTMapを用いることで、生体試料や植物試料から簡便かつ迅速に生体分子プロファイルを取得することが可能となった。本法は今後、マウスなどの生体試料・臓器試料の分析のみならず、食品分析などへの応用も期待される(論文4)

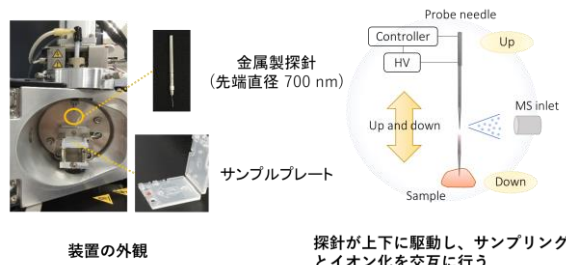
### 2. Bioinformaticsと統合オミクス解析を応用した研究

オミクス解析とは生体内分子群を網羅的に解析する技術の総称であり、Transcriptomics(遺伝子発現解析)やMetabolomics(代謝物総体解析)などがある。本研究室では統計解析言語Rを用いて多階層オミクスで得られたデータを統合するための手法開発を進めている。

特に、オミクスから得られた多変量データにBioinformaticsを駆使した研究を進めており、主成分分析(PCA)、潜在構造投影判別分析(PLS-DA)といった多変量解析を用いたバイオマーカー候補の抽出、機械学習の一つであるRandom Forestを用いたバイオマーカー候補の絞り込み、また、データ駆動型の相関ネットワーク解析によるハブ分子の特定などを行っている(論文5、6)。

所属 生命情報工学科  
複合生命情報アナリティクス研究室  
教授  
財津 桂  
Kei ZAITSU

HP: [http://www.waka.kindai.ac.jp/zaitzu\\_lab/index.html](http://www.waka.kindai.ac.jp/zaitzu_lab/index.html)  
リサーチマップ: [https://researchmap.jp/kei\\_zaitzu](https://researchmap.jp/kei_zaitzu)



装置の外観

探針が上下に駆動し、サンプリングとイオン化を交互に行う

図1 PESI/MS/MSの概要。先端直径700 nmの金属生微細針を試料に刺すだけで、試料中の生体分子のプロファイルを得ることができる。

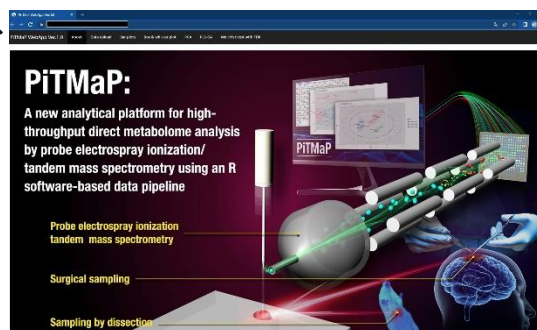


図2 PiTMap webアプリケーションの画面。ネット環境があればどこからでもアクセスして多変量解析などが可能(開発中)。

## 【論文】

- Zaitzu, K\*. et al. Intact Endogenous Metabolite Analysis of Mice Liver by Probe Electrospray Ionization/Triple Quadrupole Tandem Mass Spectrometry and Its Preliminary Application to in Vivo Real-Time Analysis. *Anal. Chem.* 88, 3556-3561 (2016).
- Zaitzu, K\*. et al. In Vivo Real-Time Monitoring System Using Probe Electrospray Ionization/Tandem Mass Spectrometry for Metabolites in Mouse Brain. *Anal. Chem.* 90, 4695-4701 (2018).
- Zaitzu, K\*. et al. PiTMap: A new analytical platform for high-throughput direct metabolome analysis by probe electrospray ionization/tandem mass spectrometry using an R software-based data pipeline. *Anal. Chem.* (2020).
- 財津 桂ら、「簡便に・迅速に・誰にでも」使える分析手法: 探針エレクトロスプレーイオン化タンデム質量分析(PESI/MS/MS)の食品分析への応用と展望. *食衛誌*, 63(2), J20-J25, (2022)
- Zaitzu, K. et al. Optimal inter-batch normalization method for GC/MS/MS-based targeted metabolomics with special attention to centrifugal concentration. *Anal. Bioanal. Chem.* 411, 6983-6994 (2019).
- Zaitzu, K. et al. Metabolomics and Data-Driven Bioinformatics Revealed Key Maternal Metabolites Related to Fetal Lethality via Di(2-ethylhexyl)phthalate Exposure in Pregnant Mice. *ACS Omega* 7, 23717-23726 (2022)

## 【特許】

- 特許第6586716号: 質量分析装置及び該装置を用いた生体試料の分析方法。
- 特許第6733888号: イオン交換膜電気透析装置
- 特許第6853541号: 分析装置