

## 26G-pm05

代謝シミュレーション基盤を利用した網羅的メタボローム推定

○荒木 通啓<sup>1</sup>, 牧口 大旭<sup>2</sup>, 小川 哲平<sup>2</sup>, 近藤 昭彦<sup>1</sup> (<sup>1</sup>神戸大自然,<sup>2</sup>三井情報)

**【目的】** 疾患表現型としてのメタボローム変化に着目したバイオマーカーの探索研究は、今後の先制医療に向けて、いち早く疾患の発症前診断を行い、創薬・治療シーズを提示していく上で喫緊の課題となってきた。本研究では、独自に開発している代謝シミュレーション技術と正常細胞および疾患細胞に関するデータをもとに、未同定の代謝物・酵素遺伝子情報を含めたメタボローム推定を行うことを目的とした。

**【方法及び結果】** すでに開発している代謝シミュレーション基盤を利用して、ヒトゲノムおよび代謝パスウェイ情報をもとに、網羅的なメタボローム推定を行った。現行の代謝シミュレーション基盤では、KEGG・BRENDA といった代謝関連データベースに集積されたあらゆる代謝物・遺伝子情報を利用しているため、ヒトゲノム・メタボローム情報に特化した仕様に変更し、Human Metabolome Database 等に集積されている疾患関連情報を取り入れていくことで、より推定精度の高いメタボローム推定基盤の構築を行った。

**【考察】** 本研究の代謝シミュレーション基盤で推定されたメタボロームは、質量分析を用いたメタボローム解析に向けて、有用な知見を与えるものと期待できる。