

生物学者にやる気を出させる代謝マップエディタ

1. 背景

ゲノム情報と呼ばれる分野では種々のウェブデータベース(DB)が作成されている。しかし一般に、こうした DB はユーザの視点を反映、編集する機能を持たず、人の手におえないデータのポンチ絵を眺めるだけのウェブページになっている。こうした理由で、ユーザの視点を反映させられる、無償の、ポンチ絵作成用データベースおよびソフトウェアが長い間待ち望まれてきた。

2. 目的

本プロジェクトで目指したものは、「ポンチ絵感覚で代謝マップ(DB)を記述できる」ソフトウェアである。パワーポイントのようなツールでポンチ絵を描くだけで、その場で代謝のシミュレーションが行なえ、更にそのポンチ絵を自由に比較、交換できるフレームワークを最終目標とする。

3. 開発の内容

作成するのは Java 言語による、代謝に特化した制約つきお絵かきエディタである。まず、パワーポイントと同等のお絵かき性能を持つエディタを作成し、そのエディタに代謝を描きやすくする制約を課してからシミュレーション機能を付加した。以下に本ソフトウェアの満たしている条件を掲げる。

- 全てのコンピュータ上で動作すること
- コンパクトであること
- 処理の透明性
- 使いやすさ
- 美しさ

これらの条件を満たすマップエディタとして以下を開発した。

- 基本図形の描画機能： 四角形、角マル四角形、楕円形、直線、コネクタ、テキストボックスを自由に描画、回転、色づけできる。オブジェクトのグループ化も可能。
- 代謝図形の描画： 別途作成してある、代謝情報の検索ツールにおける結果を、キャンバス上に Drag&Drop することで任意の代謝物構造、酵素反応、パスウェイを描画できる。各代謝物質はダブルクリックして編集オプションを選ぶことで、原子配置を変更可能。物質名はテキストボックス、酵素反応はコネクタとして表現されるため、お絵かきエディタの機能で自由に変更できる。
- 複数レイヤの表示： 複数のレイヤを簡単に見渡し検索できるように、検索ウィンドウ、鳥瞰図を表示するウィンドウ、詳細情報を表示するウィンドウを実装。

- 描画内容に対応するグラフ構造の作成とシミュレーション基盤：ユーザはトレース用のアイコンをクリックすることで、画面上の任意の炭素、窒素、または硫黄原子をトレースすることができる。(トレースしたい原子上をクリックすると、同一画面上でその原子から到達可能なポジションが全てハイライトされる。)また、このアイコンで酵素反応を示す矢印に触れると、その反応における原子の対応情報を見ることができる。これらの機能は、ユーザが自由に描いた任意の代謝マップについて適用できる。
- 代謝マップと構造データ：大腸菌のエネルギー代謝、アミノ酸生合成 / 分解、補酵素の整合性 / 分解、核酸の生合成 / 分解を 30 マップにまとめて描画した。またシロイヌナズナの二次代謝にかかわる代謝物質約 800 個について構造でー他を作成、整理した。

4. 従来技術との相違

- **代謝に特化したエディタである。**

従来、論文等に代謝経路を掲載する場合は ChemDraw (CambridgeSoft, Cambridge, UK)やパワーポイント(Microsoft, Seattle, USA)を用いて代謝物の構造から一つ一つ作成する必要があった。本プロジェクトでは、経路検索ツールの結果を Drag&Drop するだけで初心者でもお絵かき感覚で代謝マップを記述できるエディタを提案、実装した。

- **大規模なトレーサ実験のシミュレーションができる唯一のソフトウェアである。**

従来法と異なる本エディタの最も重要な機能は、描画された代謝物と酵素反応がグラフ構造として機能し、代謝物を構成する炭素や窒素の行き先を全て確認できる点にある。本ソフトウェアでは 2000 反応以上のデータを提供し、それらを自在に組み合わせた経路の検索を可能にしている。

- **代謝のウェブデータベースを手軽に作成できるソフトウェアである。**

今回作成したのは大腸菌の代謝マップだが、本エディタを用いれば、大腸菌の代謝マップを少々改変するだけで望みの代謝マップを作成することができる。代謝マップはそのまま Java アプレットとして公開しても良いし、JPEG, PNG などに変換して、画像ライブラリとしても公開できる。

5. 期待される効果

本プロジェクトはその萌芽研究で蓄積された成果を初心者にはわかりやすい形で表示、また自在に編集できるインターフェースを構築したことにあたる。また、描いたポンチ絵上で原子がどう移動するかという情報(トレーサ実験のシミュレーション)を視覚的に確認できる。このプロジェクト成果は、研究者のみならず代謝を勉強する高校生以上の学生にも幅広く利用してもらおう可能性を持っている。

6. 普及(活用)の見通し

今後、作成したソフトウェアを研究者に広く流通させる有力手段の一つは、よく読まれる研究論文を書くことである。今回、マップを作成した大腸菌代謝に関しては米国科学アカデミー紀要に論文が掲載されたため(Masanori Arita "The metabolic world of Escherichia coli is not small." Proceedings of the National Academy of Sciences USA, 101(6) 1543-1547, NAS, 2004)、今後ソフトウェアへのアクセス数増加が見込まれる。

開発は今後も継続し、ネットワーク上に代謝マップのリポジトリサーバを構築する。一般ユーザが自分の代謝マップをウェブサーバに投稿またはダウンロードし、お互いに興味のある代謝マップ情報を自由に共有、交換できるフレームワークを構築する。こうして代謝情報の一極集中型のデータベースを廃し、人々が自由に情報を発信するコミュニティを形成する。代謝研究における世界標準となるソフトウェアを目指す。

7. 開発者名

代表者

有田正規 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科情報生命科学専攻)

arita@k.u-tokyo.ac.jp

中西由紀子(インテックウェブアンドゲノム株式会社勤務。ソフトウェア外注により作業依頼。アイコン作成、大腸菌代謝マップ描画、大腸菌における代謝物の構造および酵素反応の整理。)

藤原夕紀子(主婦。アルバイト雇用。シロイヌナズナ二次代謝物の構造ファイル作成、脂質の構造ファイル作成。)

須永豊(東京工業大学大学院情報理工学研究科 数理・計算科学専攻千葉研究室 修士。アルバイト雇用。一般 Java プログラムの自動 RMI プログラム化。)

8. 関連Webサイト

ソフトウェアおよび基礎データは <http://www.metabolome.jp/> にて近日公開予定。

(現在も一部成果を公開中。)