「代謝物リストの見本を載せるデータベース」

有田正規（理化学研究所環境資源科学研究センター）・金谷重彦（奈良先端科学技術大学院大学情報科学）・櫻井望（かずさDNA研究所）

CSRS

1. MassBankデータの整理

化合物を中心に整理し、NAIST・かずさのデータと統合。暫定サイトとしてRefSpecを構築 (http://133.242.136.63/wiki/)。

・MassBankの公開データをInChI, compound classを元に分類、カテゴリー分け。23199 Spectra → 3205物質、24研究グループの測定プロトコルを著者とコンタクトを取って整理。

2. 新しいMassBank ID

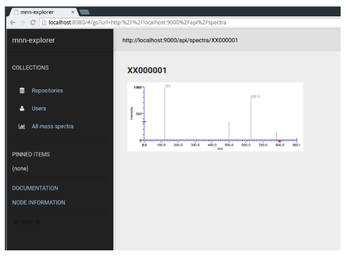
測定条件IDの桁を追加

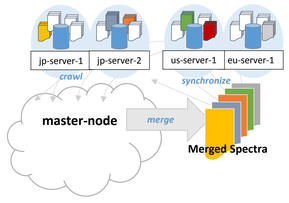
旧ID： KO000001 → 新ID： KO**01**000001
旧ID： KNA00001 → 新ID： KNA**1**000001
旧ID： PR010001 → 新ID： PR**0a**010001

ハードイオン化は a,b,cを振る

3. Metabolomics Node Network (MNN) の構築

エンドユーザーには wiki にアクセスしてもらい、サーバー間のデータシェアリング、APIを通じたアクセスは MNN という別システムで対応。





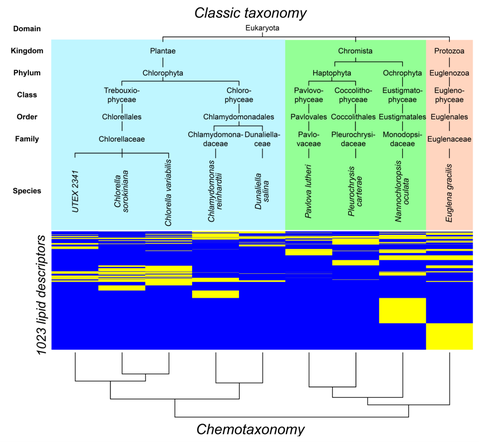
4. 国際連携

MassBank of North America (MONA @ UC Davis) とは MNN を通じたデータシェアリング (with Gert Wolgemuth @ Fiehn Lab, Davis)
Norman MassBank とは現在 Subversion を利用。これもMNNに移行したい。
MONA: http://mona.fiehnlab.ucdavis.edu/
Norman MassBank: http://massbank.ufz.de/MassBank/

5. Metabolome Model の構築

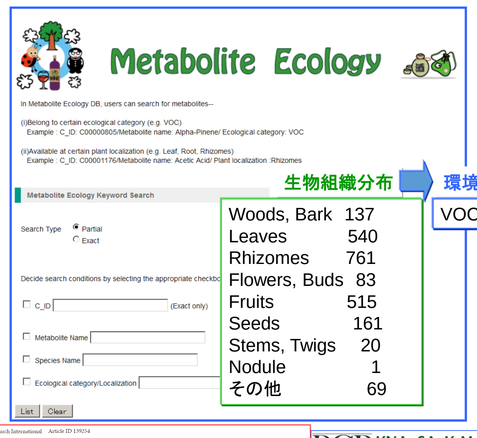
収録予定のデータたち

- GC/MSによるシロイヌナズナの代謝物　（福島敦史）
- LC/MS²によるシロイヌナズナ、ミヤコグサ、トマト、ホウレンソウの代謝物（櫻井望、Bio-MassBankとして公開していたものを整理）
- 9種藻類の脂質データ（津川裕司）
- LipidBlastおよびその拡張による脂質理論ライブラリ (Tobias Kind, 津川裕司)
- 酵母基礎代謝物のMRM用ライブラリ（津川裕司）
- 植物スフィンゴ脂質のMRM用ライブラリ（予定）
- マウススフィンゴおよび酸化脂質のMRM用ライブラリ（有田誠、池田和貴）
- ほか



生物種と代謝化合物の関係を集めたデータベース

Metabolite Ecology (prototype)
二次代謝物の分布(生物組織、環境分布)　8285 records
http://kanaya.naist.jp/MetaboliteEcology/top.jsp



生物組織分布 → 環境分布 → 生物活性

生物組織分布	
Woods, Bark	137
Leaves	540
Rhizomes	761
Flowers, Buds	83
Fruits	515
Seeds	161
Stems, Twigs	20
Nodule	1
その他	69

環境分布	
VOC	5987

生物活性: Biological Activity (Metabolite Activity, Since 2013?)

Bedded Research International　Article ID 139254
Research Article
Development and Mining of a Volatile Organic Compound Database
Azian Azamimi Abdullah,[1,2] Md. Altaf-Ul-Amin,[1] Naoaki Ono,[1] Tetsuo Sato,[1] Tadao Sugiura,[1] Aki Hirai Morita,[1] Tetsuo Katsuragi,[3] Ai Muto,[4] Takaaki Nishioka,[1] and Shigehiko Kanaya[1]
[1]Graduate School of Information Science, Nara Institute of Science and Technology, 8916-5 Takayama, Ikoma, Nara 630-0192, Japan
[2]School of Mechatronic Engineering, Universiti Malaysia Perlis (UniMAP), Ulu Pauh, 02600 Arau, Perlis, Malaysia
[3]Department of Computer Science and Engineering, Toyohashi University of Technology, 1-1 Hibarigaoka, Tempaku, Toyohashi, Aichi 441-8580, Japan
[4]Graduate School of Biological Science, Nara Institute of Science and Technology, 8916-5 Takayama, Ikoma, Nara 630-0192, Japan

PCP PLANT & CELL PHYSIOLOGY
KNApSAcK Metabolite Activity Database for Retrieving the Relationships Between Metabolites and Biological Activities
Yukiko Nakamura[1], Farit Mochamad Afendi[2], Aziza Kawsar Parvin[1], Naoaki Ono[1], Ken Tanaka[3], Aki Hirai Morita[1], Tetsuo Sato[1], Tadao Sugiura[1], Md. Altaf-Ul-Amin[1] and Shigehiko Kanaya[1,*]

代謝化合物とその生理活性の関係を集めたデータベース

●Nervous system agent
・Antipyretic
・Analgesic
・Antiarthritic
・Anesthetic
・Sedative
・Antispasmodic
・Anticonvulsant
・Antidementic
・Antidepressant
・CNS Stimulant
・Diaphoretic
・Emetic
・Antiemetic
・Antigout
・Antimigraine
・Antimyasthenic
・Antiparkinson
・Antipsychotic
・Muscle relaxant

●Cardiovascular agent
・Antidiabetic
・Hemostatic
・Antithrombotic
・Cardiotonic
・Antiarrhythmic
・Diuretic
・Hypotensive
・Atihyperlipidemic
・Antianemic
・Other cardiovascular agent

●Respiratory tract agent
・Antitussive
・Expectorant
・Antiasthmatic
・Other respiratory tract agent

●Digestive organ agent
・Antidiarrheic
・Carminative
・Stomachic
・Laxative
・Choleretic
・Antihepatotoxic
・Other digestive organ agent

●Genitourinary agent
・Oxytocic
・Antifertility
・Abortifacient
・Other genitourinary agent

●Anti-cancer agent
・Antioxidant
・Anticancer
・Antitumor
・Antineoplastic
・Antimutagenic

●Anti-inflammatory agent
・Antiinflammatory
・Antiallergic
・UV shield
・Antidermatitic
・Antiedemic

●Immunological agent
・Immunosuppressant
・Immunostimulant
・Immunomodulative

●Nutrient
・Nucleic acid
・Essential amino acid
・Nonessential amino acid
・Vitamin
・Nutrient
・Tonic

●Not therapeutic agent
・Solvent
・Flavor
・Odor
・Pigment
・Emulsifying agent
・Antiseptic

●Anti-microbial
・Antibacterial
・Antituberculotic
・Antifungal
・Inhibit spore germination
・Antimicrobial

●Anti-viral
・Antiviral
・Antileprotic
・Antihepatitic
・Anti-HIV
・Anti-HSV

●Anti-parasitic
・Anthelmintic
・Antiprotozoal
・Antiamoebic
・Antimalarial
・Antileishmanial
・Antitrypanosomal
・Pediculicidal

●Other health agent
・Antiulcerogenic
・Depilatory
・Antidote
・Hormonal
・Dental
・Other healthy

●Narcotic

●Toxic
・Insecticidal
・Acaricidal
・Molluscicidal
・Piscicidal
・Nematocidal
・Herbicidal
・Phytotoxic
・Phototoxic
・Toxic
・Cytotoxic
・Neurotoxic
・Pneumotoxic
・Hepatotoxic

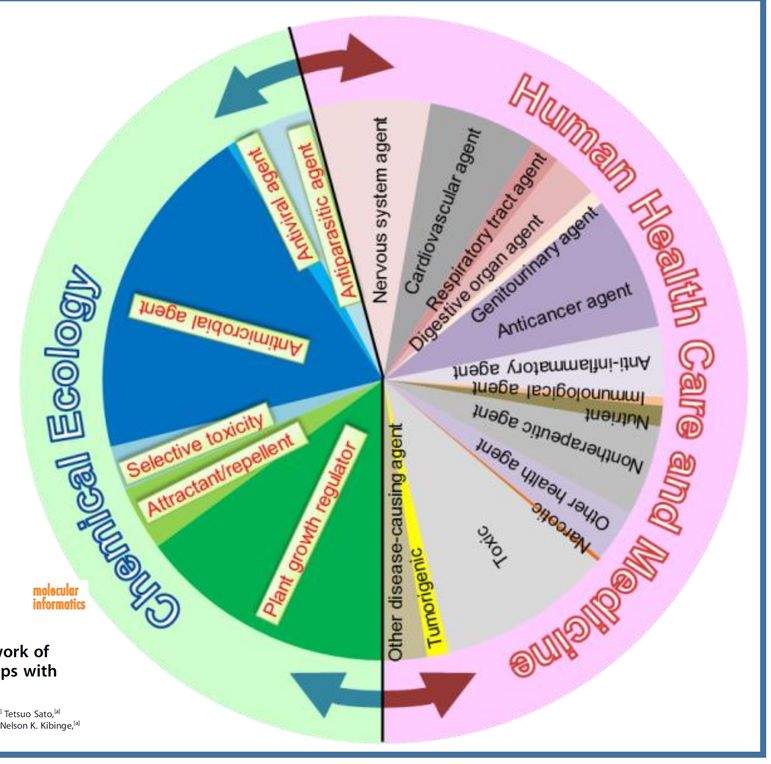
●Tumorigenic
・Tumorigenic
・Mutagenic
・Genotoxic
・Teratogenic

●Other disease-causing
・Psychotomimetic
・Hemolytic
・Allergenic
・Irritant
・Dermatitic
・Edematous

●Attractant/repellent
・Feeding attractant
・Feeding deterrent
・Pollinator attractant
・Oviposition attractant
・Oviposition deterrent
・Sex attractant
・Attractant
・Repellent

●Affect plant growth
・Enhance germination
・Enhance stem growth
・Enhance root growth
・Enhance leaf growth
・Enhance flowering
・Enhance fruiting
・Enhance plant growth
・Inhibit germination
・Inhibit stem growth
・Inhibit root growth
・Inhibit leaf growth
・Inhibit flowering
・Inhibit fruiting
・Inhibit plant growth
・Allelopathic
・Phytoalexin

Full Paper
DOI: 10.1002/minf.201400123
Molecular Informatics Best Paper Award
molecular informatics
Clustering of 3D-Structure Similarity Based Network of Secondary Metabolites Reveals Their Relationships with Biological Activities
Yuki Ohtana,[a] Azian Azamimi Abdullah,[a] Md. Altaf-Ul-Amin,[a] Ming Huang,[a] Naoaki Ono,[a] Tetsuo Sato,[a] Tadao Sugiura,[a] Hisayuki Horai,[c] Yukiko Nakamura,[a] Aki Morita (Hirai),[a] Klaus W. Lange,[d] Nelson K. Kibinge,[a] Tetsuo Katsuragi,[e] Tsuyoshi Shirai,*[b] and Shigehiko Kanaya*[a]

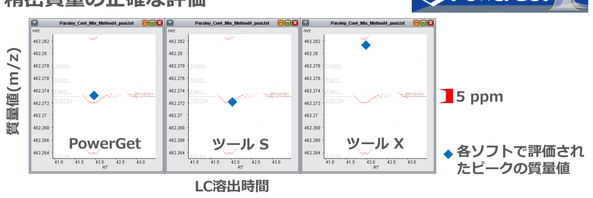


Kazusa DNA Res. Inst.

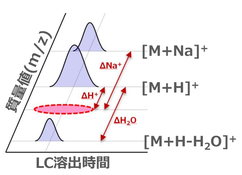
ピーク抽出ツールの高度化

PowerGetソフトの高精度化、自動化

精密質量の正確な評価



アダクト・多価イオンの正確な判定



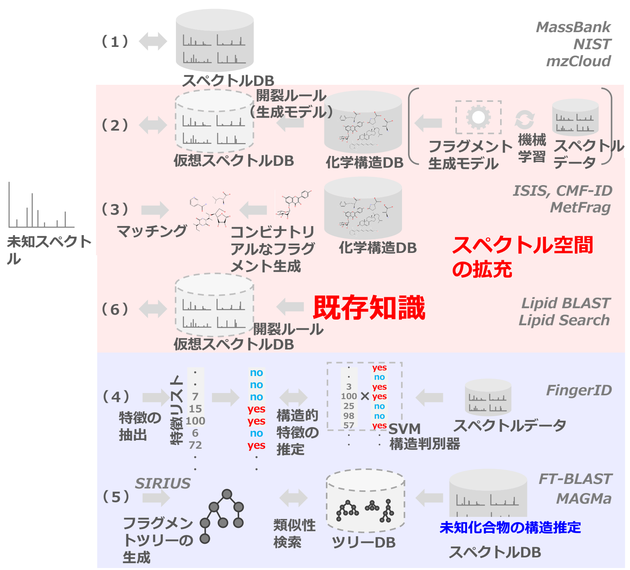
高速な組成式推定

Sakurai et al. (2012) Bioinformatics

手作業による同定・推定の方針決定が飛躍的に向上

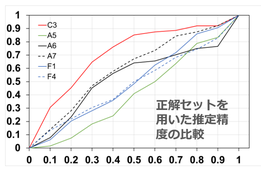
約４０００件の未公開LC-MSデータを自動処理

スペクトルの自動解読によるフラボノイドの推定



FlavonoidSearch

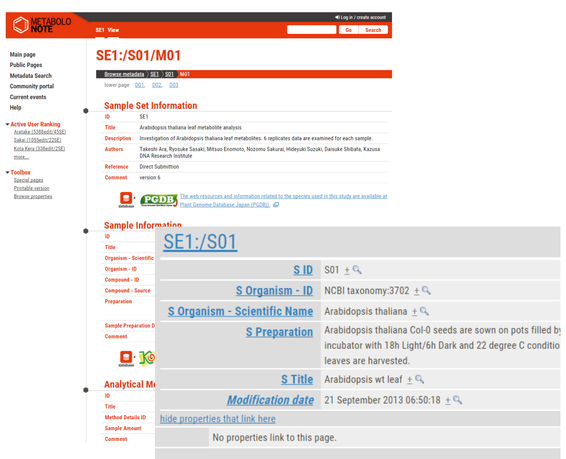
1）143種類の標品を質量分析(MS/MS解析)
2）基本骨格の開裂のしかたをルール化（経験知）
3）約7000種類の既知構造（metabolomics.jp 有田さん）に、そのルールを適用
4）出現するMS/MSフラグメントを予測しデータベース化



既存ツール以上の予測精度

網羅的なフラボノイドの解析（フラボノーム）を実現

メタデータ（実験条件）によるデータ統合



Licensed under a Creative Commons表示2.1日本 license