ライフサイエンスデータベース統合推進事業
統合化推進プログラム(平成 26 年度採択)
課題名「生物種メタボロームモデル・データベースの構築」(研究代表者　有田　正規)

メタボロミクスの国際連携とデータ共有

有田　正規
(理化学研究所環境資源科学研究センター)

ゲノミクス、プロテオミクスに続き、メタボロミクスも国際連携の段階にきている。データの共有にはフォーマットやプロトコルはもちろん、品質の管理および再利用のためのメタデータ統一が必要になる。様々な計測手法を用いるメタボロミクスでは、とりわけ重要な問題である。(これに対してゲノムなどの先行するオミックスは表記法や評価の指針がほぼ統一されている。)

国際的には代謝物同定の基準は国際メタボロミクス学会の標準化委員会 (MSI) が定め、分野毎にガイドラインが策定されている [1、2)]。しかし標準物質が入手できず種間の分布も多様な脂質などにたいする対策は未だにとられていない。本プロジェクトは国内の主要なメタボロミクス研究者と連携し、フォーマットやプロトコルの統一を図っている(かずさ DNA 櫻井研究員、ポスター)。また藻類など代謝のよくわかっていない生物種についても文献から情報を収集している(NAIST 金谷教授、ポスター)。さらに MSI で主な役割を担うオリバー・フィーングループ(UCDavis)と共同で MS/MS に基づく脂質同定ソフトウェアを構築し(理研 CSRS 津川研究員)、その成果を MassBank および MONA (MassBank Of North America) 上に統合する予定である。従来の情報収集との大きな違いは、プロトコル毎に代謝物のカテゴリー毎にフラグメントのパターンに基づく同定基準を明らかにすることで、「同定規則または指針」を明確に打ち出している点である。こうした基準に基づけ

ばデータベース上の重複するスペクトルを検出・統合でき、全ての標準物質を揃える必要性という高い障壁を取り除ける。そうして各サーバーで統合した結果を、クローリングツールを用いて収集・再統合する仕組も現在構築中である（理研 CSRS Mejia 研究員）。

参考文献

１） MSI Board members *et al.* “The metabolomics standards initiative” *Nat Biotechnol* 25(8)、 846-848、 2007

２）Sumner、 L. *et al.* “Proposed minimum reporting standards for chemical analysis Chemical Analysis Working Group (CAWG) Metabolomics Standards Initiative (MSI)” *Metabolomics* 3(3)、 211-221、 2007