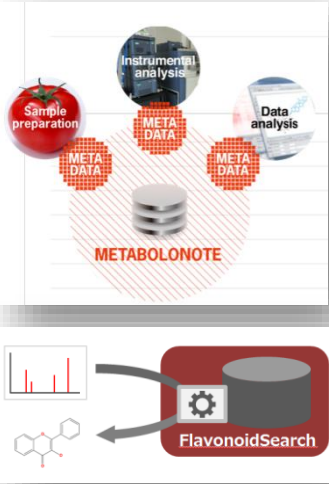


メタボロミクスを基盤としたエコロジーとヘルスケア・インフォマティクス

櫻井望 (かずさDNA研究所)、有田正規 (国立遺伝学研究所)、金谷重彦 (奈良先端科学技術大学院大学)

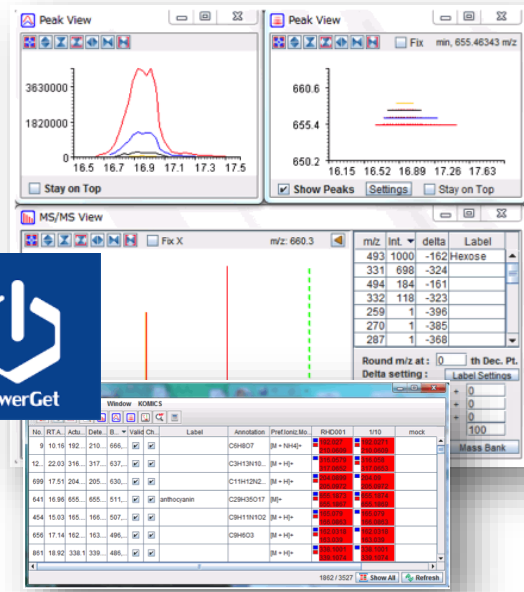
メタボロミクス実験データの管理



「Materials and Methods(マテメソ)」
サンプル調製、機器分析、データ解析の各段階の膨大なメタデータを管理し公開する。

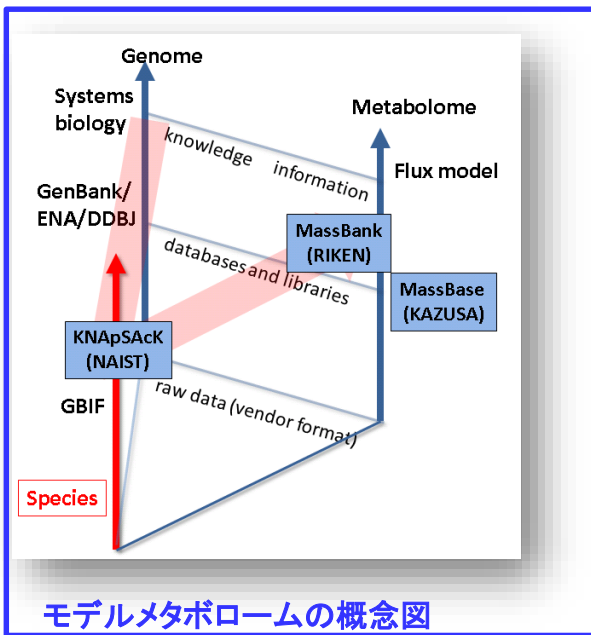
- [1]メタデータの記録を極力簡単にする。
 - [2]メタボロミクスデータの公開と利用の促進。
メタデータを実験データから切り離すことで、
 - [3]メタデータを複数のDBから利用できる。
- 150生物種、102実験、1236サンプル、2712分析、3100データを公開

フラボノイドを高精度に判別・正確な精密質量評価、正確なアダクト判定
推定できるシステム
により、精度の高い化合物推定を実現。全てのピークを「拾い切る」高性能ソフト



研究者(マススペクトル)

マススペクトルと化学構造の関連づけ(代謝物の構造決定)



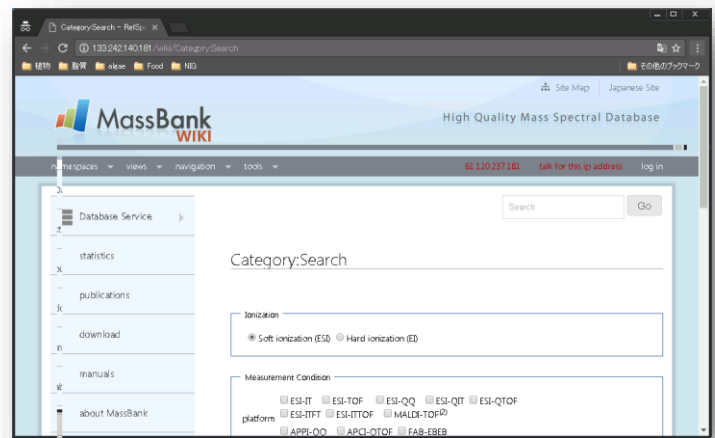
モデルメタボロームというリファレンスづくり
KNAPsACK DB、MassBase、Metabolonote、MassBank-Wikiの関連づけられた代謝物と生物種DBにより学術情報と社会をつなぐ
プラットフォーム

スペクトルその他をシェアできるクラウド
・クローラー高速アノテーションパイプライン

標準化
化合物IDとしてのInChIKey利用
SPLASH Code
理論スペクトル、標準スペクトル

MassBank-WIKI

MassBankの23199スペクトル
(3205物質)を、カテゴリー分け
測定法は Metabolonote へ。
JavaAppletを全てJavaScriptにアップデート、スペクトル比較を容易にするインターフェイス。



研究者(代謝物)

代謝物のエコロジー、ヘルスケア情報

KNAPsACK Family DB (上位1% cited)
生物種-代謝物関係DB
5万種の代謝物と10万レコードからなる
生物種-代謝物関係データ

- [1] VOCなどの情報を通して、生物間の関係情報を獲得できる。
→ 化学生態学への基盤データベース
- [2] ヒトのヘルスケアなどに関わる活性
→ 食品科学、生薬科学への基盤データベース

Number of matched data	Metabolite	Molecular Formula	MW	Organism
42000001	Gibberellin A1	C19H28O6	348.157285	Arabidopsis thaliana
42000002	Gibberellin A3	C19H28O6	348.141844	Arabidopsis thaliana
42000003	Gibberellin A4	C19H28O6	332.1627388	Arabidopsis thaliana
42000004	Gibberellin A5	C19H28O6	330.1467281	Arabidopsis thaliana
42000005	Gibberellin A6	C19H28O6	364.15220112	Arabidopsis thaliana
42000006	Gibberellin A9	C19H28O6	316.16745925	Arabidopsis thaliana
42000007	Syngonin	C17H24O6	372.1420327	Arabidopsis thaliana
42000008	Gibberellin A12	C20H30O6	332.1897936	Arabidopsis thaliana
42000009	Gibberellin A13	C20H30O6	378.1578119	Arabidopsis thaliana
42000010	Gibberellin A15	C20H30O6	356.17802364	Arabidopsis thaliana
42000011	Gibberellin A17	C20H30O6	378.16763119	Arabidopsis thaliana
42000012	Gibberellin A19	C20H30O6	362.17293556	Arabidopsis thaliana
42000013	Gibberellin A20	C20H30O6	332.1627388	Arabidopsis thaliana
42000014	Gibberellin A24	C20H30O6	346.17802364	Arabidopsis thaliana
42000015	Gibberellin A25	C20H30O6	362.17293556	Arabidopsis thaliana
42000016	Gibberellin A27	C20H30O6	362.17293556	Arabidopsis thaliana
42000017	Gibberellin A28	C20H30O6	348.157285	Arabidopsis thaliana
42000018	Gibberellin A34	C19H28O6	348.157285	Arabidopsis thaliana
42000019	Gibberellin A36	C19H28O6	346.17802364	Arabidopsis thaliana
42000020	Gibberellin A37	C19H28O6	346.17802364	Arabidopsis thaliana
42000021	Gibberellin A41	C19H28O6	346.17802364	Arabidopsis thaliana
42000022	Gibberellin A44	C19H28O6	332.1627388	Arabidopsis thaliana
42000023	Gibberellin A51	C19H28O6	348.157285	Arabidopsis thaliana
42000024	Gibberellin A71	C19H28O6	348.157285	Arabidopsis thaliana
42000025	trans-Zeaxanthin	C19H28O6	219.11201007	Arabidopsis thaliana
42000026	Dihydrozeaxanthin	C19H28O6	221.12766014	Arabidopsis thaliana
42000027	1,689-46-5	C19H28O6	301.15426892	Arabidopsis thaliana
42000028	β-Hibofuran-acetic acid	C19H28O6	301.15426892	Arabidopsis thaliana
42000029	Indole-3-acetic acid	C10H9NO2	175.0632954	Arabidopsis thaliana
42000030	Caullerolide C	C19H28O6	195.07931296	Arabidopsis thaliana
42000031	Indole-3-acetonitrile	C10H9N	156.0674827	Arabidopsis thaliana
42000032	Indole-3-acetaldoxime	C10H9NO	174.07931296	Arabidopsis thaliana
42000033	Indole-3-carboxaldehyde	C9H7NO	145.05276355	Arabidopsis thaliana
42000034	Indole-3-carboxylic acid	C9H7NO2	161.0476748	Arabidopsis thaliana
42000035	Indole-3-butyric acid	C11H11NO2	203.0842667	Arabidopsis thaliana
42000036	4-O-Indole-3-acetyl-D-glucopyranose	C16H19NO7	337.11615197	Arabidopsis thaliana
42000037	Quercetin	C22H18O12	448.0511711	Arabidopsis thaliana
42000038	Neogobyrassin	C17H22NO10	476.0715864	Arabidopsis thaliana

代謝物から世界の「食」情報へリンク:
KNAPsACK Core DB, KNAPsACK World)
世界の食用/薬用生物の使用データ、
76,108 records/ 229 countries,
edible species data : 29,485,
medicinal species data : 46,623
代謝物からエコロジーへのリンク:
Metabolite Ecology 8285 entrie
代謝物の環境分布
Natural Activity

生物活性情報、30,825レコード(1939
種の生物活性、1432種の生物種)



参考文献

Ara, Sakurai *et al.*, *Front Bioeng Biotechnol.* 2015 3:38, 00038
Tsubawa, Arita *et al.* *Nat Methods.* 2015, 12,523-6
Abdullah, Kanaya *et al.*, *Biomed Res Int.* 2015;2015,139254



社会(活性情報:エコロジーヘルスケア情報へ)