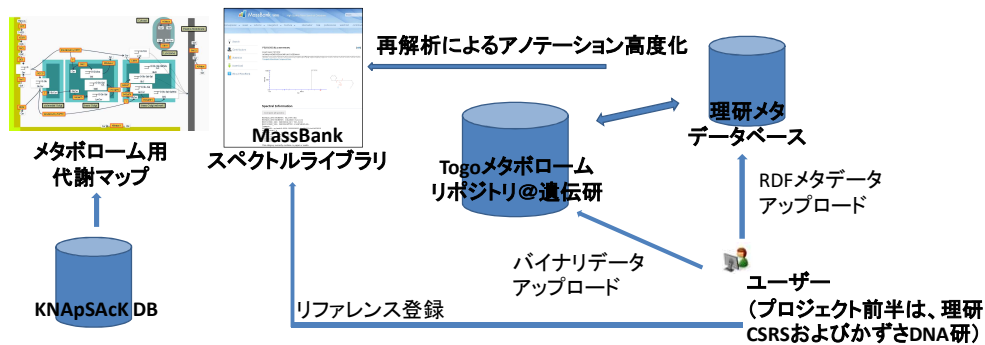


34 MassBankメタボロームリポジトリの設計と構想

有田正規（遺伝研、理研CSRS）、金谷重彦（奈良先端大）、櫻井望（遺伝研）、平川英樹（かずさDNA研）、福島敦史（理研CSRS）



2006年に始まったMassBank は日本質量分析学会の公式データベースとなり、ドイツUFZで運用されるNorman MassBank.eu、米国UC Davisの MassBank of North America (MONA) と連携して標品の実測マススペクトル(標準スペクトル)を提供してきました。本プロジェクトはその流れを継続しつつ、国立遺伝学研究所を中心にメタボローム・データのリポジトリを構築します。Togo MassBankプロジェクトとして、標準スペクトルだけでなく、生体試料を測定した実データより抽出したメタボローム測定用ライブラリ(例えば、ヒト、植物等)を提供します。また、それらのライブラリを解釈するための代謝マップも構築します。



これまでのメタボロミクスと問題点

- 標準品を計測して比較しないと、同定したと言いきれない。
 - 同定数が絞られる、標品を揃えないと実施できない。
- 各ラボが独自の基準で化合物を測定、論文を執筆。
 - ラボ間の比較ができない、プロセスを再現できない。
- リポドミクスに対応していない、コミュニティが別。
 - 同定の基準が異なり、連携も殆どない。
- スペクトルの評価やキュレーションがなされていない。

これからのメタボロミクスと対応策

- MS/MSスペクトルに基づく同定に順次移行する。
 - 標品の無い代謝物、類縁体でも同定を可能にする
- 国際基準に基づいたメソッドの記述、リポジトリの充実
 - 本プロジェクトでリポジトリを作成、SOPの整備
- リポドミクス、メタボロミクスの両方に使えるツール、基準づくり
 - 国際コンソーシアムの中で標準づくり
- 多くのスペクトルから理論的に導く統合スペクトルの必要性

リポジトリ進捗

毎月、実務者が東京に集合してメタデータやリポジトリ機能の打ち合わせを実施。生データ投稿には、BioProject, BioSampleデータベースと連携することを決定(オミックスデータの投稿を前提とする)。

代謝マップの描画ツール

マークダウン表記により、簡単なマップを描画できる機能をJavaScriptで作成。GUI、テキストのどちらからでも修正できるツールをwikiブラウザ上に実装

国際リポドミクスのコンソーシアム

Burla et al. *J Lipid Res* 2018 “MS-based lipidomics of human blood plasma”

