

平成 27 年度 研究開発実施報告書

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）

研究代表者

有田 正規

理化学研究所 環境資源科学研究センター

統合メタボロミクス研究グループ メタボローム情報研究チーム

チームリーダー

「生物種メタボロームモデル・データベースの構築」



©2016 有田 正規(理化学研究所) licensed under CC表示2.1 日本

§1. 研究実施体制

(1)「理研」グループ

① 研究代表者：有田 正規（理化学研究所環境資源科学研究センター 統合メタボロミクス研究グループ メタボローム情報研究チーム チームリーダー）

② 研究項目

1. リファレンススペクトルサーバーの構築
2. モデル植物のリファレンススペクトル構築
3. 代謝物情報の検索用ガジェット作成

(2)「奈良」グループ

① 主たる共同研究者：金谷重彦（奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 教授）

② 研究項目

1. 生物種と代謝物の関係データベースの充実
2. 代謝物と生物活性の関係データベース

(3)「かずさ」グループ

③ 主たる共同研究者：櫻井望（かずさ DNA 研究所 メタボロミクスチーム チーム長）

④ 研究項目

1. メタボロームデータの大規模整備
2. アノテーションおよびデータ公開加速のための技術開発
3. RDF を直接生成するインターフェースの作成

§2. 研究実施内容

(1) 通期及び本年度の研究開発計画と達成目標

理研グループ

生物活性・効能の観点から各生物種と関連づけられてきた代謝物の文献情報とリファレンススペクトルを照合し、そこに生物サンプルから同定されたメタボローム実測結果をリンクさせる。この作業を通じて、それぞれの生物種が持つと考えられる代謝物リストをブラウザ上でクリックしながら閲覧できる、メタボモデル・データベースを構築する。

変更点：新しいリファレンス・スペクトルサーバを年度内に公開予定だったが、質量分析学会との協議が遅れた。また公開元をレンタルサーバではなく国立遺伝学研究所内に設置することになり、対応が遅れている。また MS/MS スペクトルから母核構造の指定をせずに代謝物を直接予測するソフトウェアを作成した。そのため、化合物構造を考慮した検索システムの作成は中止し、母核や部分構造の入力を必要とせずに直接化合物を予測（検索）できるようになった。

奈良グループ

医薬・健康だけでなく環境・生態に及ぶ広範なメタボロミクス研究に対応すべく、生態学と医薬学という二分野に重点をおいて代謝物と生物活性のデータベースを充実させる。具体的には天然物-対象生物-生物活性の三組の関係からなるデータを文献から抽出し、蓄積する。また生物種ならびに二次代謝物をキーとして、ゲノムならびに遺伝子情報に関わるプロジェクトとのリンクを作成する。

かずさグループ

代謝プロファイルデータの大規模公開を行い、理研チームを中心に構築されるメタボモデルを一般研究者が実験データを使って活用できる基盤を構築する。またデータベース間の連携のため、メタデータのRDF化を進める。

(2) 本年度の研究開発進捗状況

理研グループ

1. リファレンススペクトルサーバーの構築

複数のマススペクトルを拡大縮小しながら複数比較できる JavaScript インターフェースを完成させ、MediaWiki サーバ上で動作するようにした。また質量やピーク値に基づく検索インターフェースを作成し、テストサーバ上で稼働させている。

2. モデル植物のリファレンススペクトル構築

シロイヌナズナの GC/MS スペクトル情報は整理できたが、イネはまだ整理途中である。そのため、当初計画した Metabolonote に登録した論文データの整理が終わっていない。今後、精力的にデータ整理と登録を進める予定である。

3. 代謝物情報の検索性ガジェット作成

複合脂質の構造をあらかじめおおまかに指定しておいて、精密質量や MS2 スペクトルから化合物を絞り込むツールの作成を計画していたが、母核構造を一切指定せずに直接

化合物を予測、候補をランキングできるソフトウェアシステム MS-FINDER を構築した。このシステム作成に伴い、化合物の組成式リストおよび InChIKey 一覧表も作成した。これらのデータは作成中の MassBank-Wiki サーバに掲載予定である。

奈良グループ

1. 生物種と代謝物の関係データベースの充実

標準的かつ人間が読める方法で分子情報を提供する目的で、生物種と代謝物の関係データベースに含まれる 5 万種の全ての代謝物について InChI(International Chemical Identifier)キーを付加した。これにより、理研グループとかずさグループとの連携を強化した。また、InChI キーを付加することにより、他のデータからの本データベースへ簡単にリンクづけることが可能になった。また、本プロジェクトでデータ充実を図っている生物種-代謝物関係データベースの論文は、2015 年にトムソンロイターにより、本分野の上位 5%論文として選定されるに至っている。

2. 代謝物と生物活性の関係データベース

環境・生態に及ぶ広範なメタボロミクス研究に対応すべく二次代謝物による生物間の関係性を体系化する目的で、データベース Metabolite Ecology DB の設計を行い、データの蓄積を進めた。二次代謝物を、大気中(VOC)、その他、植物体の葉、根、根茎という 4 種の分布様式に分類した。また、それぞれの代謝物によるエコロジーとして抗カビ、抗菌、誘引、防御、成長促進、成長阻害、忌避などの生物活性に注目し、8285 組の代謝物、代謝物質の生態学的活性とその対象生物という 3 組のデータを実際に Metabolite Ecology DB に格納し、公開を進めた。また生物種ならびに二次代謝物をキーとした遺伝子ならびに代謝経路に関する情報の蓄積の充実を図っている。また、代謝物と生物活性の関係データベース Metabolite Activity DB データのネットワーク解析により、3 千種の代謝物と生物活性の関係から、代謝経路の生物活性としての役割について説明することができた。この成果は、Molecular Informatics において 2014 年の論文賞として評価された。

かずさグループ

1. メタボロームデータの大規模整備

20 種類の植物に関して平均約 5000 化合物のアノテーションを付与したデータを構築した。下記 2 の化合物アノテーション技術を適用したデータを整備中である。

2. アノテーションおよびデータ公開加速のための技術開発

ピーク抽出ソフトウェア PowerGet を改良し有効ピーク数を約 3~7 倍増強した。フラボノイド同定ソフトウェア FlavonoidSearch を完成させた。各化合物データベース間での構造の重複を除去したデータベース N2D を構築した。

3. RDF を直接生成するインターフェースの作成

H27 年度は高精度なピーク解析技術の開発に注力したため、RDF の構築は予定より遅延している。DBCLS により作成された D2RQ Mapper を用いメタデータの RDF 形式を検討している。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

- ① 発行済論文数 (国内 (和文) 0 件、国際 (欧文) 10 件)
- ② 未発行論文数 (国内 (和文) 0 件、国際 (欧文) 0 件)
- ③ 論文詳細情報
 1. Okada T, Afendi FM, Yamazaki M, Chida KN, Suzuki M, Kawai R, Kim M, Namiki T, Kanaya S, Saito K, Informatics framework of traditional Sino-Japanese medicine (Kampo) unveiled by factor analysis, *J Nat Med.* 70, 107-14, 2016 doi 10.1007/s11418-015-0946-0
 2. Lange KW, Hauser J, Nakamura Y, Kanaya S, "Dietary seaweeds and obesity" *Food Science and Human Wellness*, 4, 87-96, 2015 doi:10.1016/j.fshw.2015.08.001
 3. Abdullah AA, Altaf-Ul-Amin M, Ono N, Sato T, Sugiura T, Morita AH, Katsuragi T, Muto A, Nishioka T, Kanaya S "Development and mining of a volatile organic compound database" *Biomed Research International* 2015:139254, 2015 doi: 10.1155/2015/139254
 4. Hirose Y, Suda K, Liu YG, Sato S, Nakamura Y, Yokoyama K, Yamamoto N, Hanano S, Takita E, Sakurai N, Suzuki H, Nakamura Y, Kaneko T, Yano K, Tabata S, Shibata D "The Arabidopsis TAC Position Viewer: a high-resolution map of transformation-competent artificial chromosome (TAC) clones aligned with the Arabidopsis thaliana Columbia-0 genome" *Plant Journal* 83(6), 1114-1122, 2015 doi: 10.1111/tpj.12949
 5. Tanaka K, Arita M, Sakurai H, Ono N, Tezuka Y "Analysis of Chemical Properties of Edible and Medicinal Ginger by Metabolomics Approach" *Biomed Research International* 2015:671058, 2015 doi: 10.1155/2015/671058
 6. Suzuki M, Nakabayashi R, Ogata Y, Sakurai N, Tokimatsu T, Goto S, Suzuki M, Jasinski M, Martinoia E, Otagaki S, Matsumoto S, Saito K, Shiratake K. "Multiomics in grape berry skin revealed specific induction of the stilbene synthetic pathway by ultraviolet-C irradiation" *Plant Physiology*, 168(1), 47-59, 2015 doi: 10.1104/pp.114.254375
 7. Tsugawa H, Cajka T, Kind T, Ma Y, Higgins B, Ikeda K, Kanazawa M, VanderGheynst J, Fiehn O, Arita M "MS-DIAL: data-independent MS/MS deconvolution for comprehensive metabolome analysis" *Nature Methods* 12(6), 523-526, 2015 doi: 10.1038/nmeth.3393
 8. Li D, Ono N, Sato T, Sugiura T, Altaf-Ul-Amin M, Ohta D, Suzuki H, Arita M, Tanaka K, Ma Z, Kanaya S "Targeted Integration of RNA-Seq and Metabolite Data to Elucidate Curcuminoid Biosynthesis in Four Curcuma Species" *Plant Cell Physiology*, 56(5), 843-851, 2015 doi: 10.1093/pcp/pcv008
 9. Ara T, Enomoto M, Arita M, Ikeda C, Kera K, Yamada M, Nishioka T, Ikeda T, Nihei Y, Shibata D, Kanaya S, Sakurai N "Metabolonote: a wiki-based database for

- managing hierarchical metadata of metabolome analyses" *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 3:38, 2015 doi: 10.3389/fbioe.2015.00038
10. Tanaka K, Arita M, Li D, Ono N, Tezuka Y, Kanaya S "Metabolomic Characterization of a Low Phytic Acid and High Anti-oxidative Cultivar of Turmeric" *Natural Product Communications*, 10(2), 329-334, 2015

(3-2) データベースおよびウェブツール等の構築と公開

別紙1参照。

(3-3) その他の著作物(総説、書籍など)

1. Rocca-Serra P, Salek RM, Arita M, Correa E, Dayalan S, Gonzalez-Beltran A, Ebbels T, Goodacre R, Hastings J, Haug K, Koulman A, Nikolski M, Oresic M, Sansone SA, Schober D, Smith J, Steinbeck C, Viant MR, Neumann S "Data standards can boost metabolomics research, and if there is a will, there is a way" *Metabolomics* 12(1):14, 2016
2. Altaf-Ul-Amin M, Katsuragi T, Sato T, Kanaya S "A Glimpse to Background and Characteristics of Major Molecular Biological Networks" *Biomedical Research International*, 2015:540297, 2015 doi: 10.1155/2015/540297
3. Kanaya S, Altaf-Ul-Amin M, Kiboi SK, Afendi FM "Big Data and Network Biology 2015" *Biomedical Research International*, 2015: 604623, 2015 doi: 10.1155/2015/604623
4. 平井(森田)晶, 中村 由紀子, 黄 銘, 佐藤 哲大, 小野 直亮, 西岡 孝明, 白井 剛, 金谷 重彦, "ビッグ・データ・バイオロジー 医食同源と生態学の体系化に向けて," *化学と生物*, vol.53, no.9, pp600-607, 2015.8
5. 櫻井 望、有田正規 「バイオインフォマティクス入門」日本バイオインフォマティクス学会, 慶應義塾大学出版会 (2015年) 執筆分担

(3-4) 国際学会および国内学会発表

1. 招待講演 (国内 10件、国際 3件)

〈国内〉

1. 有田 正規 「Comprehensive lipidomics and Mass/LipidBank databases」日本分子生物・生化学会大会(BMB2015)シンポジウム「リポドミクスから見えてきた脂質の新機能 -基礎から臨床まで-」神戸, 12/4 2015
2. 有田 正規 「科学者から見た学術のオープン化」林和弘氏、有田正規氏講演会「オープンな知がイノベーションを生む -オープンサイエンスの潮流と図書館の可能性-」(東大新図書館トークイベント14) 東京, 10/17 2015
3. 櫻井望「Sirius2をつかった組成式の推定」第63回質量分析総合検討会, 6/17, 2015
4. 櫻井望「かずさDNA研究所におけるメタボローム解析」千葉県バイオ・ライフサイエンス・ネットワーク会議平成27年度 総会・事例報告会, 幕張, 7/14, 2015

5. 櫻井望「地場産業振興のためのメタボローム解析による食品分析」千葉県バイオ・ライフサイエンス・ネットワーク会議, 幕張, 1/29, 2015
6. 櫻井望「メタボローム解析の紹介」AJACS 津軽, 弘前, 9/3, 2015
7. 櫻井望「メタボローム解析の紹介」AJACS 薩摩, 弘前, 1/27, 2016
8. 櫻井望「メタボローム解析の技法とデータベース構築の実際」植物バイオ研究会第5回会合, 東京, 2/23, 2016
9. 金谷 重彦「ビッグデータを活用した新規ビジネスの可能性」, 第2 創業・新事業創出セミナー, 東京 2015.11
10. 金谷 重彦「ビッグ・データ・バイオロジー～医食同源と生態学の体系化に向けて」, 関西文化学術研究都市 8 大学連携 市民公開講座, 京都, 9/15, 2015

〈国際〉

1. Arita M "Comprehensive Acquisition of MS/MS Spectra Benefits Database Research" 6th International Singapore Lipid Symposium, Singapore, December 1 (Nov30-Dec1), 2015
2. Kanaya S, "KNAPSAcK Family DB: Data-driven Nutrition Science from Accessibility of Edible Species to Cuisine," 第4 回ケモインフォマティクス秋の学校, 東京, 11/25. 2015
3. Kanaya S, "KNAPSAcK Edible Species Database and Data-Driven Nutrition Science," International Conference on Movement and Nutrition in Health and Disease, ドイツ、レーゲンスブルグ、6/11. 2015

2. 口頭講演 (国内 6 件、国際 5 件)

〈国内〉

1. 有田正規 「メタボロームデータベースの構築と活用」 第9回メタボロームシンポジウム 三島 9月30日
2. 津川裕司 「MS-DIAL プログラムを用いたリポクオリティ解析とデータベースへの連携」第9回メタボロームシンポジウム 三島 9月30日
3. 津川裕司 ほか 「マスシフト則を適用することによる自動 MS/MS 生成および未知化合物の同定戦略」 9回メタボロームシンポジウム 三島 10月2日
4. 福島敦史ほか 「AtMetExpress: Development of metabolite-profiling database in Arabidopsis」 9回メタボロームシンポジウム 三島 10月2日
5. 櫻井望ほか「植物が生産する代謝産物の基本台帳整備」第33 回日本植物細胞分子生物学会 東京大学 8月11日
6. 秋元奈弓ほか「MSMS Flavonoid Search : MSMS スペクトルの経験的な開裂予測に基づくフラボノイド化合物アノテーションシステムの構築」第33 回日本植物細胞分子生物学会 東京大学 8月11日

〈国際〉

1. 発表者、タイトル、学会名、場所、月日
Masanori Arita "Toward a true reference: establishing spectral standards", "Compound identification and databases" workshop in Metabolomics2015, San Francisco, 29 June 2015
2. Atsushi Fukushima "Development of metabolite-profiling database in Arabidopsis:

AtMetExpress – Meta-analysis of metabolome data” Metabolomics 2015, San Francisco, 30 June 2015

3. Hiroshi Tsugawa “MS-FINDER: Integrated Strategy for Structure Elucidation on LC-MS/MS by using Chemo- and Bioinformatics Resources” Metabolomics 2015, San Francisco, 1 July 2015
4. Wijaya SH, Tanaka Y, Katsuragi T, Morita AH, Afendi MF, Batubara I, Ono N, Altaf-Ul-Amin MD, Takahashi Y, Darusman LD, Kanaya S, “Utilization of KNApSAcK Family Databases for Developing Herbal Medicine Systems,” Indonesia, Jakarta, PRAGMA 29, Oct. 2015
5. Li D, Ono N, Sato T, Sugiura T, Altaf-Ul-Amin MD, Arita M, Tanaka K, Ma Z and Kanaya S, “Comparison of Curcuminoid Biosynthesis of *Curcuma longa* and its Cultivars Using a Pathway Based RNA-Seq Analysis Method,” Metabolomics, 米国、サンフランシスコ、2015, Jun. 2015

3. ポスター発表（国内 5件、国際 5件）

〈国内〉

1. 発表者、タイトル、学会名、場所、月日
2. 有田正規ほか「代謝物リストの見本を載せるデータベース」トーゴの日シンポジウム 東京 10月5～6日
3. 櫻井望ほか「安定同位体を用いた植物代謝成分の基本台帳整備」第9回メタボロームシンポジウム 三島 10月1～2日
4. 秋元奈弓ほか「MSMS スペクトルの経験的な開裂予測に基づくフラボノイド化合物アノテーションシステム MSMS Flavonoid Search の構築と展開」第9回メタボロームシンポジウム 三島 10月1～2日
5. 櫻井望ほか「メタボロミクス技術による成分基本台帳整備と食品研究への応用」日本農芸化学会 2016年度大会 札幌 3月29日

〈国際〉

1. Azian Azamimi Abdullah et al. “KNApSAcK Metabolite Ecology Database for Investigating the Relationships Between VOCs and Biological Activities” Metabolomics2015, San Francisco, 29 June – 2 July
2. Donghan Li et al. “Comparison of curcuminoid biosynthesis of *Curcuma longa* and its cultivars using a pathway based RNA-Seq analysis method” Metabolomics2015, San Francisco, 29 June – 2 July
3. Saravanan Dayalan et al “Distributed data sharing node for mass spectra repositories in the Metabolomics Node Network” Metabolomics2015, San Francisco, 29 June – 2 July
4. Sakurai N et al., “Construction of a pipeline for the comprehensive annotation of plant metabolites by liquid chromatography-high-resolution mass spectrometry” Metabolomics2015, San Francisco, 29 June – 2 July

5. Akimoto N et al., “Flavonoid Search: Enhanced annotation of flavonoids through construction of empirical dissociation rules and a predicted mass fragment database” Metabolomics2015, San Francisco, 29 June – 2 July

(3-5 知的財産権の出願

該当無し

(3-6) 受賞・報道等

1. 受賞

1. 第 63 回質量分析討論会 最優秀賞(口頭発表部門)、津川裕司、6/19, 2015
2. 理化学研究所研究奨励賞、津川裕司、4 月, 2016
3. 2014 年 Molecular Informatics 論文賞、Ohtana Y, Abdullah AA, Altaf-Ul-Amin MD, Huang M, Ono N, Sato T, Sugiura T, Horai H, Nakazawa Y, Morita A.H, Lange K, Kibinge N, Katsuragi T, Shirai T Kanaya S 1/1, 2015

§4. 研究開発期間中に主催した活動(主催したワークショップ等)

| 年月日 | 名称 | 場所 | 参加人数 | 概要 |
|--------------------------|-------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|--|
| 2015 年 9 月 30 日-10 月 2 日 | <u>第9回メタボロームシンポジウム</u> | 三島市民ホール | 302 人 | 全国のメタボローム関連研究者が集まる年会を主催 |
| 2015 年 6 月 29 日-7 月 2 日 | <u>Metabolomics2015</u> | Hyatt Regency San Francisco Airport | 300 人 (シンポジウムの参加者。会議全体は 1000 人超) | 国際会議の国際オーガナイザ。さらにシンポジウム ”Compound identification and databases”を企画講演。ハッカソン等にも参加。 |

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

| No. | 状態 | 研究開発課題名 | データベース、ウェブツール等の名称 | 概要 (150字程度) | URL | 公開開始日 | 関連論文 (論文リストに記載があれば、その番号でも可) |
|-----|----|------------------------|------------------------|--|---|-------------|--------------------------------|
| 1 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | KNAPSAcK Core DB | 本DBは、文献情報をもとに生物種代謝物の関係を収集し、公開しています。現在までに、111,199件の生物種-代謝物関係が蓄積されており、メタボロミクス研究の標準データベースとなっています。 | http://kanaya.naist.jp/knapsack_jsp/top.html | | |
| 2 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Bio-MassBank | 本DBは、植物の組織や微生物試料をLC-, GC-, CE-MSで分析して得られたマススペクトルを代謝物を同定できた、できないにかかわらず収集します。未同定代謝物のマススペクトルをその化学構造を表現する化学的descriptorとして利用することによって、異なる試料間で同じあるいは類似したマススペクトルがあれば同じ未同定代謝物が含まれている、と考えることができます。このように代謝物を同定することができなくても、その存在を知ることができます。現在、シロイヌナズナの葉、ミヤコグサの花をLC-MS, MS2分析したデータそれぞれ664件、636件を公開しています。 | http://bio.massbank.jp/ | | |
| 3 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | KomicMarket | 本DBは、主にLC-MSによるメタボローム解析で得られた化合物ピークについて、化合物の同定・推定(アノテーション)を行った結果を蓄積・公開しているDBです。 | http://webs2.kazusa.or.jp/komicmarket/ | 2007年8月7日 | |
| 4 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | MassBank | 本DBは、代謝物質あるいはそれらの関連物質をEI-, FAB-, ESI-, MALDI-MS, MS2などを用いて分析したマススペクトルを収集、公開しています。データの公開状況(2015年2月末)は次のとおりです。28研究グループが13,534化合物について分析した合計41,092マススペクトルデータを日本とドイツのミラーサーバから公開しています。 | http://www.massbank.jp/ | | |
| 5 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | MassBase | 本DBは、主に質量分析の未加工データ(生データ)、生データをテキスト形式に変換したデータ、同定・推定(アノテーション)を行わないピークデータを、蓄積・公開するためのDBです。 | http://webs2.kazusa.or.jp/massbase/ | 2008年1月7日 | |
| 6 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Metabolome Activity DB | 本DBは、文献情報をもとに代謝物の活性情報を収集し、公開しています。現在までに、10758種の代謝物-活性の関係が蓄積されており、メタボロミクス研究の標準データベースとなっています。 | http://kanaya.naist.jp/MetaboliteActivity/top.jsp | | |
| 7 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | metabolomics.jp | 本DBは、メタボロミクスを中心とした有田研究室の活動全般を対象としたポータルサイトです。フラボノイド、基礎代謝物、生薬、植物系統分類データベースのほか、ファイトレメディエーションを含めた放射線情報、講義資料も掲載しています。 | http://metabolomics.jp | | |
| 8 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | MFSearcher | 本DBは、精密質量分析で得られた精密質量値から、組成式を迅速に推定するためのウェブサービスです。また、KNAPSAcK, KEGG, PubChem, LipidMAPS, FlavonoidViewer, HMDB等の化合物データベースに対して、精密質量値からの検索も高速に行うことができます。ハイスループットなピークアノテーションに利用されています。 | http://webs2.kazusa.or.jp/mfsearcher/ | 2010年11月30日 | |
| 9 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | MS-MS FragmentViewer | 本DBは、フラボノイド標品のMS/MSフラグメントを化学構造に帰属させ、分子開裂モデルを提示しているデータベースです。化合物ピークのアノテーションに利用されています。 | http://webs2.kazusa.or.jp/msmsfragmentviewer/ | 2008年8月25日 | |
| 10 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Metabolonote | 本DBは、メタボロミクス実験の詳細な実験手法に関する情報(メタデータ)だけを専門的に取り扱うデータベースです。セマンティックMediaWikiを利用したシステムにより、ユーザー登録(無料)をすることでだれでも気軽にご自身のメタデータを記録・編集することができます。メタデータを実際のデータ(生データファイルや、ピークアノテーション情報、ピークのスペクトル情報など)と切り離して管理することにより、1)実験後すぐに、さらには実験前であっても、メタデータを記載することができるので、実験設定の詳細を忘れてしまう前に記録に留めておくことができます。また、2)一度記録したメタデータは、論文や実際のデータを管理するその他のデータベースから共通して参照できるというメリットがあります。Metabolonoteのコアシステムは公開されているので、ユーザー独自のMetabolonoteをLIMSや公開サイトとして構築できるほか、フォーマットを独自に定義することで、メタボロミクス以外のデータ管理についても使用することが可能です。 | http://metabolonote.kazusa.or.jp/ | 2012年10月5日 | No.7 |

| | | | | | | | |
|----|----|------------------------|--------------------------------|--|---|------------|--|
| 11 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | KOMICS | 本DBは、質量分析によるメタボローム解析とメタボロームを活用したオミクス解析のためにかずさDNA研究所でこれまで開発されてきた解析ツールやデータベースを公開しているポータルサイトです。LC-精密質量MSの強力な解析ツールPowerGetや、世界最大級のデータ量を持つ分析生データのレポジトリMassBase等、ユニークなリソースが整備されています。また、メタボロミクス関係のリソースへのリンク集など、これからメタボロミクス分野へ参入する研究者にとっても役立つ情報を提供しています。 | http://www.kazusa.or.jp/komics/ | 2012年3月13日 | |
| 12 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | MassBank Fragmentation Library | マスペクトルの開裂パターンをWiki上に整理したDB | http://metabolomics.jp/wiki/index:MassBank | | |
| 13 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Motorcycle DB | 二次代謝酵素DB | http://kanaya.naist.jp/motorcycle/top2.html | | |
| 14 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Natural Activity | 薬用植物、食用植物と生物への影響(ヒトへの効能)に関するDB | http://kanaya.naist.jp/BiologicalActivity/top.jsp | | |
| 16 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | World Map DB | 世界で使われている薬/食用植物と使用国の関係DB | http://kanaya.naist.jp/KNAPSAcKWorld/top.jsp | | |
| 17 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | KAMPO DB | 漢方配合生薬における配合に関するDB | http://kanaya.naist.jp/kampo/top.jsp | | |
| 18 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | JAMU DB | インドネシア配合生薬Jamuにおける配合に関するDB | http://kanaya.naist.jp/jamu/top.jsp | | |
| 19 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Tea Pot DB | ハーブとして使用される植物DB | http://kanaya.naist.jp/TeaPot/top.jsp | | |
| 20 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Lunch Box | 食用生物DB | http://kanaya.naist.jp/LunchBox/top.jsp | | |
| 21 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Diet Navi | 食用生物DB | http://kanaya.naist.jp/DietNavi/top.jsp | | |
| 22 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | FoodProcessor | 加工品に含まれる食用生物DB | http://kanaya.naist.jp/FoodProcessor/top.jsp | | |
| 23 | 継続 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | YAKUZEN | 食材(例:豚肉)、効能(例:花粉症)、体質九分類(例:平和質)から薬膳レシピを検索できます。 | http://kanaya.naist.jp/YAKUZEN/top.jsp | | |
| 24 | 新規 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | 体質判定・改善アプリ 体質九分類判定・改善支援ツール | 体質改善にオススメの食材をご提案、さらにその食材を使った薬膳料理をご提案いたします。 | http://taishitsu.e-growth.net/ | | |
| 25 | 新規 | 生物種メタボロームモデル・データベースの構築 | Metabolite Ecology DB | 植物の二次代謝物を分布様式、生物活性ごとに分類し、代謝物、代謝物質の生態学的活性とその対象生物という関係を検索できます。 | http://kanaya.naist.jp/MetaboliteEcology/top.jsp | | |