

研究開発課題別事後評価結果

▶ 課題情報

研究開発課題名	生物種メタボロームモデル・データベースの構築
研究代表名	有田 正規

▶ 事後評価結果

1.実施計画の達成度	<p>MassBank-wiki を主な研究開発対象とし、1)メタボローム情報のアノテーション、2)文献情報の蓄積と検証、3)データ統合とモデル・データベース作成の 3 つを研究開発項目に掲げて実施された。</p> <p>1)について、代謝物の測定生データを解析してアノテーションし、代謝物の同定結果を PRIME に、測定条件を Metabolonote に、代謝物データを PRIME, KomicMarket2 及び MassBank-wiki に収録した。また、代謝アノテーションを行うためのソフトウェアを公開した。</p> <p>2)について、ケミカルエコロジーや生薬学における代謝物の生理活性(生物活性)情報を、学術文献や一般書籍から収集し、KNApSAcK データベースに収録した。</p> <p>3)について、モデル・データベース「MassBank-wiki」を新規に開発し、それぞれの生物種が持つと考えられる代謝物の総覧を 1 および 2 で取得したデータを統合することで作成し、収録した。しかし、サーバーの管理上の問題で関連学会と調整がつかず、また、サーバー内のデータ消失事故の対応に相当の労力や時間を費やしたこと等から開発が遅れ、研究開発期間中の公開には至らなかった。</p> <p>上記から、実施計画は概ね達成されたが、一部の重要な計画が達成されなかった。</p>
2.生命科学研究への波及効果	<p>国際標準化の取り組みに大きく貢献した。データベース自体は公開されていないが、アノテーションの充実、分子構造や生物活性との関連データの整備、また信頼性の高い MS データの集約により、メタボロームデータの利用価値が大きく向上しており、今後の活用が期待できる。</p>
3.研究開発課題の運営	<p>3つの研究グループからなる実施体制を構築し、一定の連携のもと、本研究開発課題に貢献して研究成果を挙げた。一方で、研究開発対象としたデータベースは独自性が高いことから、外部有識者会議等を通じ、データベースに関係する研究者の意見を積極的に収集する機会を積極的に求めるべきであった。</p>
4.その他特記すべき事項	<p>研究開発にあたって、統合化推進プログラムの榎屋チーム、田畑チームのほか、DBCLS やドイツ Norman MassBank の運営チームとの連携のもと行われた。人材育成の観点では、若手研究者を積極的に海外派遣し、3人の海外から参加した若手研究者が大学などの研究職に就くなど、意識的な育成が図られている。</p> <p>データの収集に当たってはデータ産生に密接にかかわる学会と協議・連携している一方で、データベースの開発・公開に当たっては研究者コミュニティと意見の一致が得られておらず、今後の課題として残された。</p>

5.総合評価

本研究開発課題は、ある生物が一般に持つ代謝物情報を閲覧・共有できるデータベースを構築することを目的として実施された。欧米が代謝物のスペクトルデータの生データを共有するための体制構築で先行しつつある状況を踏まえ、質の高いリファレンスおよびアノテーション情報を提供することに特化した、有用性の高いデータベースの構築を狙ったものであった。

本研究開発を通じ、分子構造の InChIKey やマススペクトルの SPLASH が提供され、MS データと分子構造との相関や MS データ間の相互比較が可能となった。また、生物活性との相関などアノテーションの充実が達成された。また、国際連携の推進にも大きな役割を果たした。これら一つ一つの成果は高く評価できる。しかし、最終目標であるモデル・データベース「MassBank-wiki」の公開には至らず、今後の課題として残されたことは大変残念である。データが散逸しがちなスペクトルデータの散逸を防ぎ、質の高いかたちで提供するためのユニークなデータベースであることから、研究コミュニティと強固な協力・連携関係を構築し、公開を進めて頂きたい。