

研究開発課題別中間評価結果

➤ 課題情報

研究開発課題名 「物質循環を考慮したメタボロミクス情報基盤」

研究代表名 有田 正規

➤ 中間評価結果

当研究開発課題は、1) 国内外の主要メタボロミクス拠点のスペクトルライブラリを集約し、実測データ（一次データ）のみならず、それらを標準化したスペクトルライブラリ（二次データ）を提供する国際的資源としての MassBank データベースを構築すること、2) 生体サンプルを測定したデータの寄託先として機能する公共リポジトリを開始し、欧米の既存リポジトリ事業とメタデータ連携すること、3) これらのメタボロミクス資源を他のオミックス研究とリンクするため、物質循環を考慮したメタ代謝を視覚化するマップを作成し、栄養学や環境学にも資する学際分野としてのメタボロミクスを確立することを目指すものである。

日本質量分析学会との調整が不調に終わり、開発対象 DB 名を MetaboBank に変更した。Massbank.jp ドメインにはドイツの MassBank サーバのクローンを再構築し、日本質量分析学会に無償譲渡した。2020年10月、理研および群馬大学由来のスペクトル・ライブラリデータを収載して MetaboBank リポジトリを公開するとともに、スペクトルライブラリの二次データ公開基盤 MetaboBank Wiki の公開準備を整えた。

化合物の生理活性表記を論文から取得し、主要なアルカロイドの生合成経路情報を整理してメタ代謝マップを構築した。機械学習によりアルカロイドの分子構造からその生合成経路を予測するシステムを完成させ、天然物の生合成出発物質を予測するアルゴリズムを開発して、アルカロイド化合物約 1.2 万種に応用した結果を KNApSack CobWeb として公開した。

理研 CSRS およびかずさ DNA 研の測定メタデータを収載した RIKEN Plant Metabolome MetaDatabase (RIKEN PMM) を公開した。MS-DIAL バージョン 4 を開発し公開した。研究チームらの過去の計測データ（細胞、マウスおよびヒト由来検体）を再解析し、これまでより 10 倍程度多い脂質分子種を同定することに成功した。

進捗状況についてはメイン DB の MetaboBank リポジトリの公開が遅れるなど若干の遅れが認められ、今後の進め方についても再考が必要である。チーム内の連携が十分ではなく、それぞれのグループが開発している DB に一体感がない。一方で、メタボローム DB に対する期待は大きく、メタボロミクス以外の研究分野の研究者にも有用な DB の開発が望まれる。どのようなユーザーがどのように DB やツールを使うのかといったユーザー視点での開発が必要である。

以上