

# メタボローム・データベースの開発

金谷 重彦・西岡孝明

奈良先端科学技術大学院大学 (NAIST)

情報科学研究科・情報生命科学専攻

・計算システムズ生物学講座

櫻井 望

(財)かずさDNA研究所・

産業基盤開発研究部

有田 正規

(独)理化学研究所

植物科学研究センター

平成25年1月21日

# メタボローム・データベースの意義

## 日本は二次代謝物研究で世界をリード

薬/食用知識

有用生物

ヒト

機能性

配合

薬用植物

ゲノム  
トランスクリプトーム  
プロテオーム

メタボローム

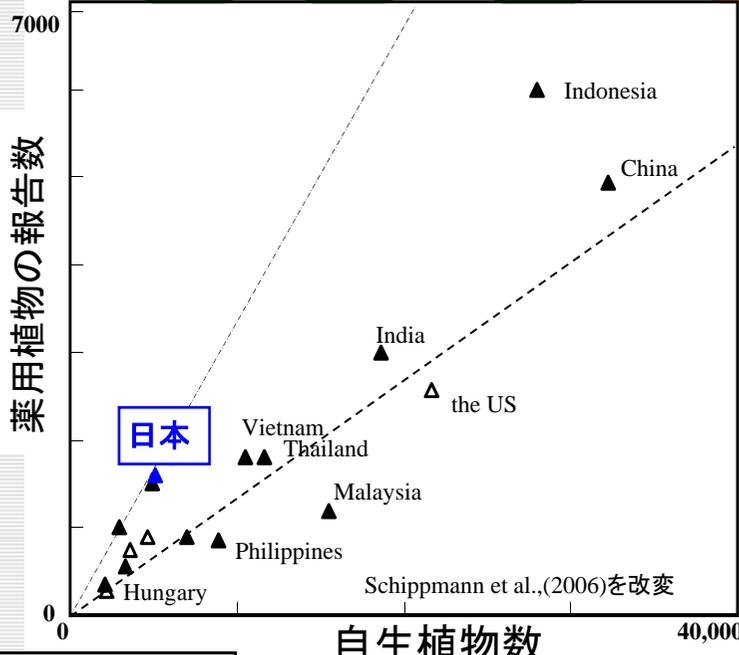
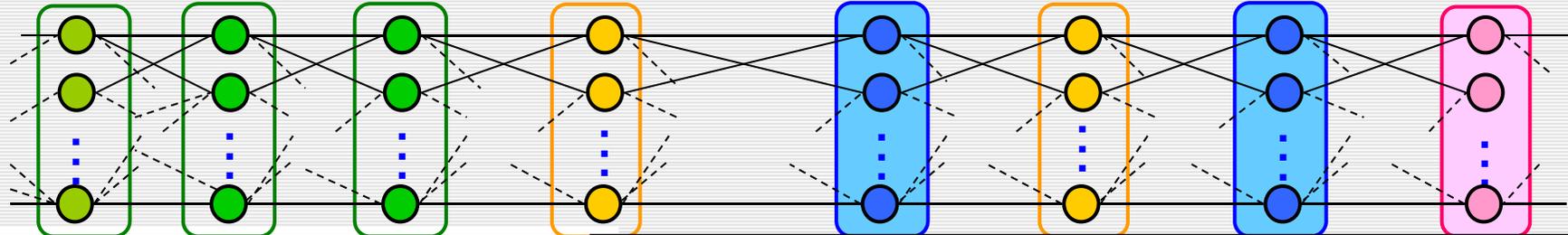
ゲノム  
トランスクリプトーム  
プロテオーム

メタボローム

生理活性

Nature (2007)

Curr Comput Aid Drug Des (2011)



### メタボローム研究の課題

検出できるが、同定率が低い。

(1)代謝物MSデータを集約・共有するDB

日本は微生物・植物・海洋生物の資源大国

2次代謝物は生理活性の宝庫

(2)メタボロームと生理活性のリンク

(3)2次代謝DBとゲノム情報のリンク

# メタボローム・データベース構想

質量スペクトルから生理活性情報の統合化をめざす。

日本メタボローム・データベース  
パブリック・リポジトリ

メタボロミクス研究者、一般ユーザ  
デポジット・閲覧・アノテーション・キュレーション

## [1] 質量スペクトルDB (MS DB)

・学会MSDB  
MassBank, LipidBank  
・研究グループMSDB  
PRIME

[1-1] 化合物MS  
DB

・個別研究における代謝物の同定  
文献情報  
・大規模メタボロームMSDB  
MassBase, MS2T, KomicMarket

[1-2] メタボローム  
MS DB

## [2] 代謝物情報DB

・文献情報  
KNASAcK DB

[2-1] 代謝物-  
{生物種, 生理活  
性}関係DB

・質量スペクトルのアノテーション  
MassBankフラグメンテーション・ライブラリ

[2-2] MS-化合物構  
造の関係知識DB

## [3]メタボローム統合DB

[3-1] ウィキDBによるメタボロームデータの統合管理

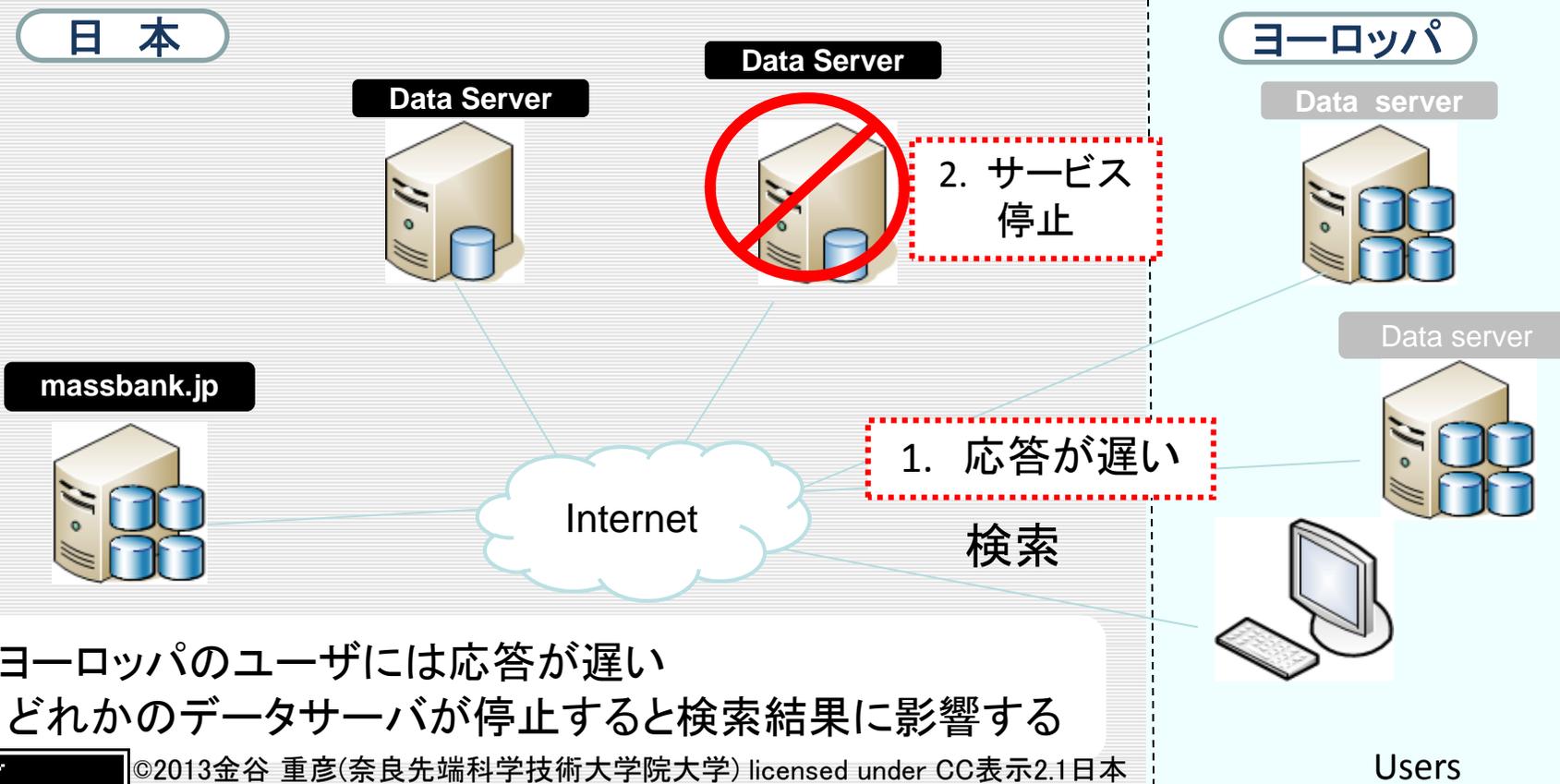
[3-2] メタボローム・アノテーション・システム

[3-3] ゲノム情報とのリンク

基礎研究: 持続可能社会に向けた生物資源の有効利用、生物種、分野、目的に応じた基礎研究  
産業応用: 新規有用代謝物質の探索、ゲノム育種による有用/新規代謝物質の生産 など

## 1. 質量スペクトルDBの拡充

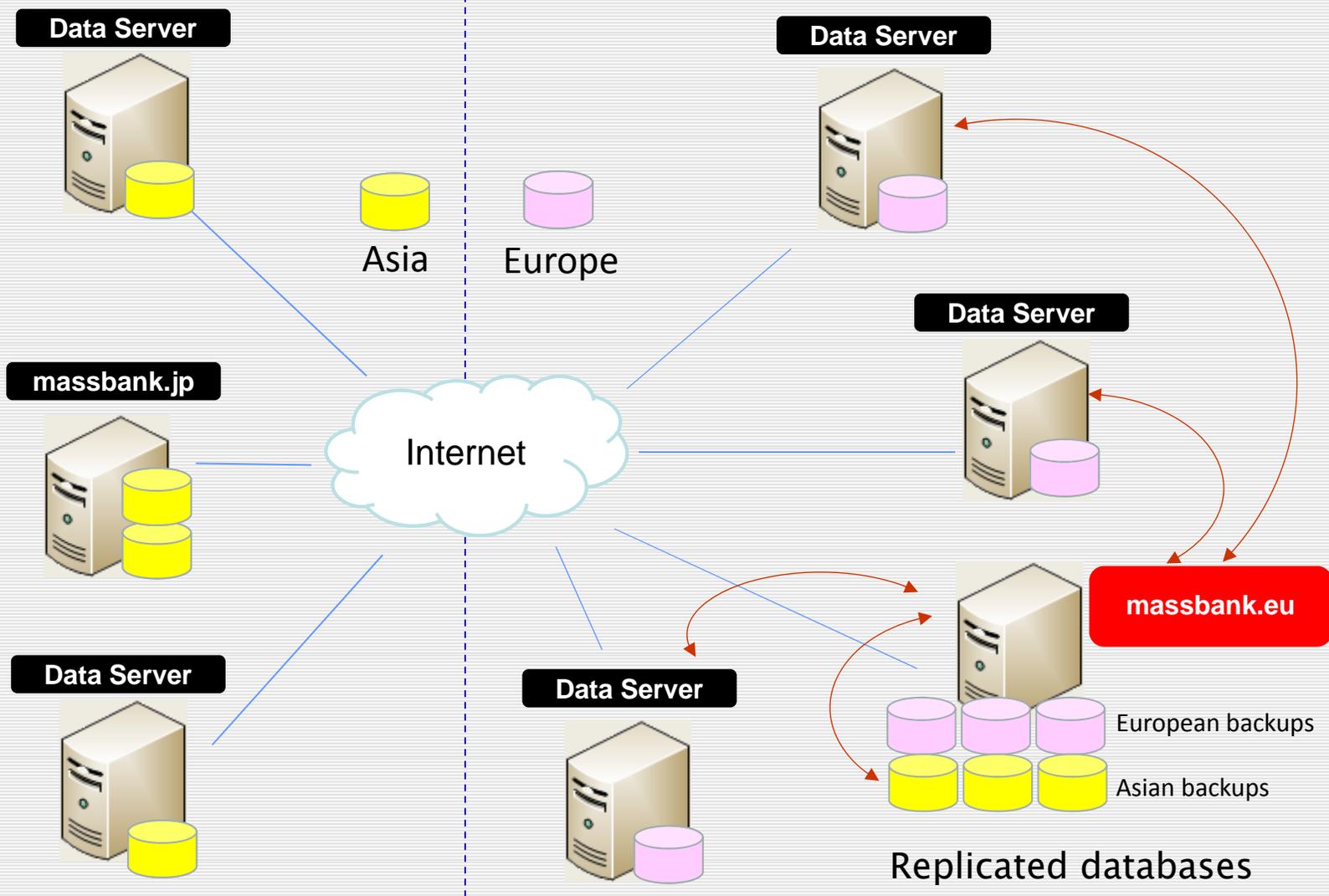
- ・ 安定した、応答の良いサービスを提供するSubversion を利用したデータバックアップとミラーサーバの開発と設置
- ・ 国際学会、国際組織との連携



[1-1]化合物MS DB  
平成24年度 MassBank 開発内容

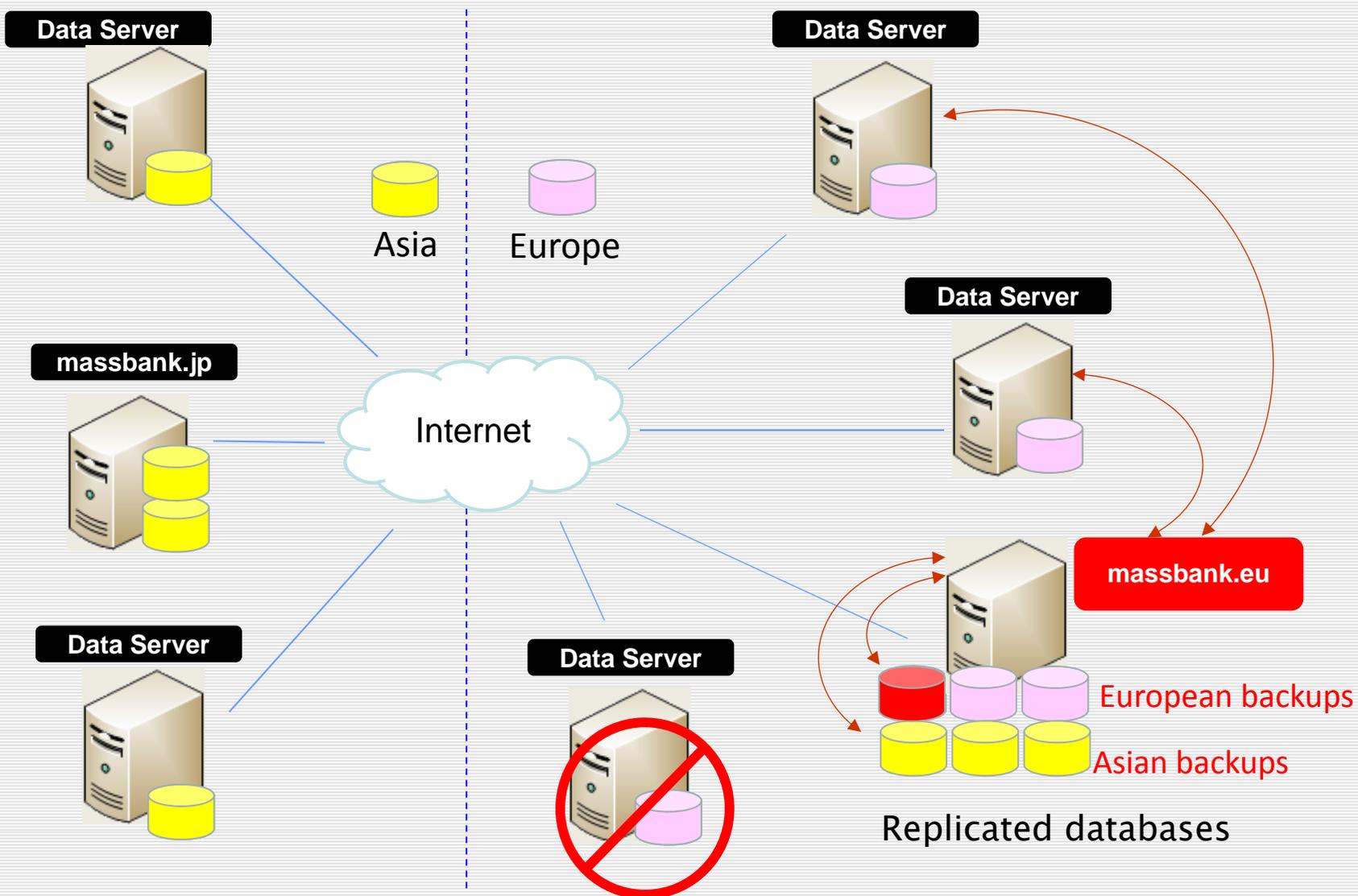
西岡(NAIST)

1. SVN を利用してミラーサイトをドイツに設置

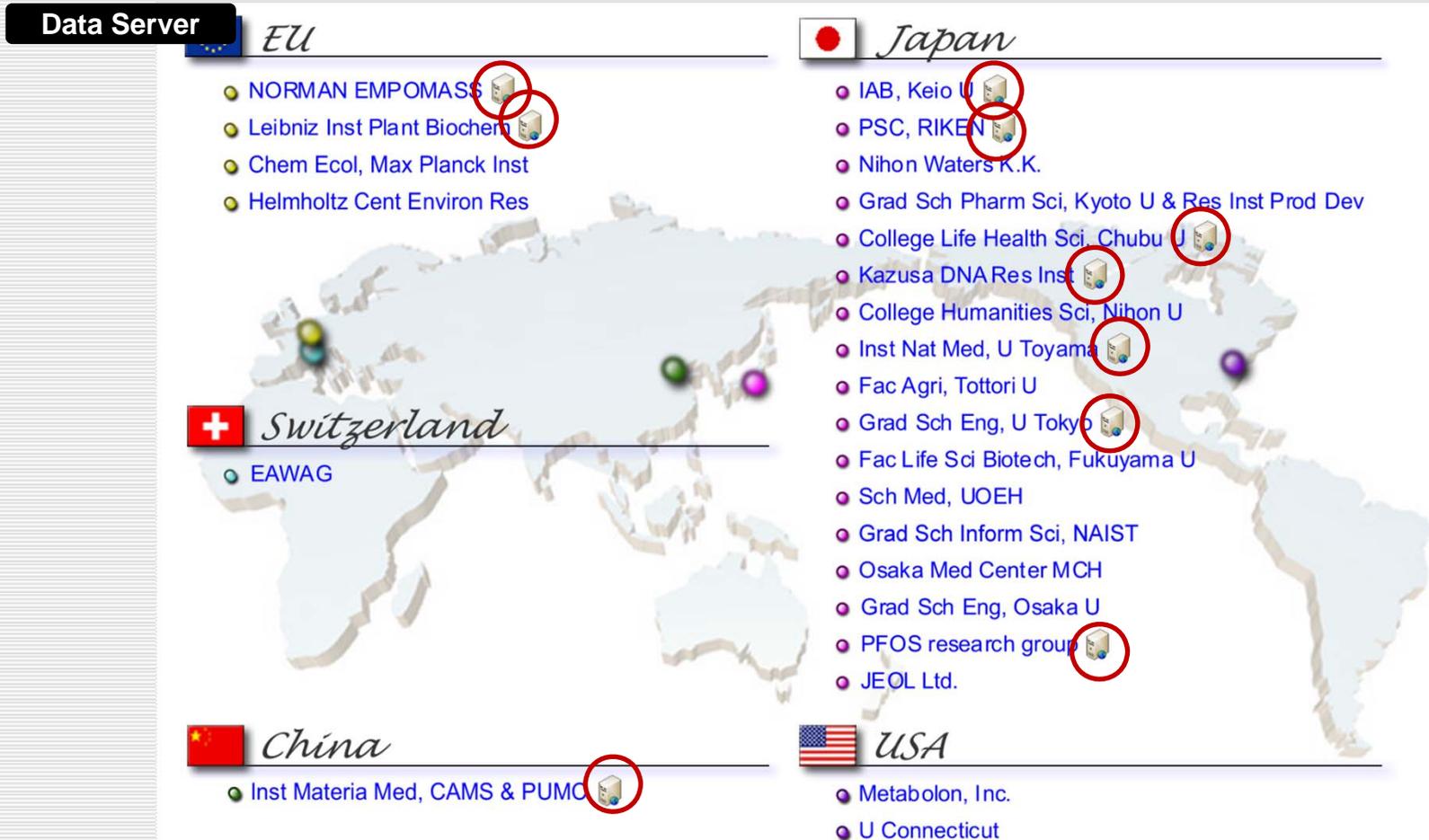


[1-1]化合物MS DB  
平成24年度 MassBank 開発内容  
2. バックアップ・データベースの設置

西岡(NAIST)



# [1-1]化合物MS DB MassBank の現状



25 の研究グループ (17 Japan, 4 EU, 2 USA, 1 Switzerland and China groups) が 10 個のデータサーバから 31,153 データを公開している (2012年8月現在). 2012年10月のアクセスは 9,980 (unique IPs) であった。API を介してのアクセスが増加している。

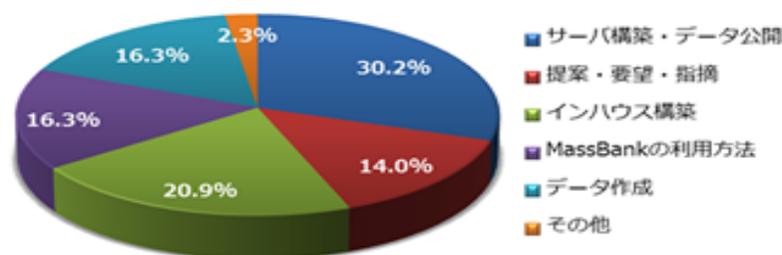
## [1-1]化合物MS DB

MassBank に高精度なデータが増えている (2012.11集計)

レコード数	hybrid tandem MS	化合物種	精度
173	FAB-EBEB-MS data	Carotenoids	
3,251	ESI-QTOF-MS <sup>2</sup> data	Metabolites	(< 40 ppm)
4,504	ESI-ITFT-MS <sup>2</sup> data	General chemicals	(< 5 ppm)
253	ESI-ITTOF-MS <sup>2</sup> data	Saponins	
45	ESI-TOFTOF-MS <sup>2</sup> data	Metabolites	

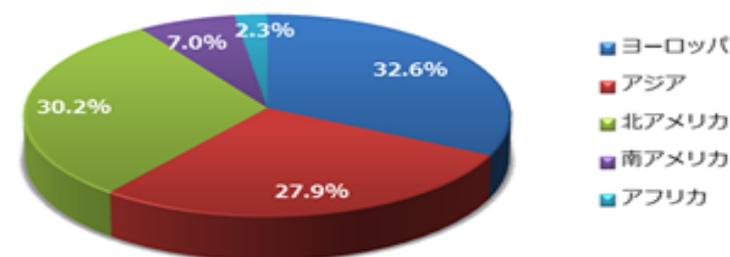
データの公開を希望する研究者は多い(2012.12.31集計)

お問い合わせ内容の内訳



30 % データ公開、サーバの構築法  
 21 % In-House MassBank の構築法  
 16 % レコード作成法

お問い合わせの地域別の割合



問合せはアジア地域以外が  
 3/4 を占める。

## [1-1]化合物MS DB

### MassBank 開発内容: サードパーティによるツール開発

- 1.質量分析計からピークデータ、メタデータを自動的に インポートして、MassBank レコードを作成するツールの開発が進められた。
- 2.開発の背景: MassBank record 作成がデータ公開の bottle-neck になっている。手作業でのデータ作成は嫌われている。

Mass++ (2009~): 田中最先端研究所(島津)が開発。開発は継続中。

RMassBank (2012): スイス連邦水質研究所( EAWAG )で開発

R package を利用したほぼ自動的にレコードを作成するツール

NORMAN **MassBank** Training workshop (2012年11月、開催地 Amsterdam) で利用講習会が開催された。(EU 19地域から39名参加)

### MassBank.jp: 年間アクセス数



各1年間の訪問者  
(ユニークな IP アドレス)数

# [1-1]化合物MS DB

## 国際学会や組織との連携、普及

第19回国際質量分析会議ワークショップ (IMSC2012: 2012年9月、京都)  
Mass++ and MassBank: PCによるデータ処理とDBの構築ツール

NORMAN **MassBank** Training Workshop (2012年11月27日、アムステルダム  
NORMAN network (EU加盟19ヶ国、公立環境研究機関の連合。) により開催  
RMassBankを用いたデータ作成講習会。(EU 19地域から39名参加)。  
NORMAN network は**MassBank** のEU ミラーサイトを立ち上げ、MassBankと  
連携(2012年11月)。

### FORTHCOMING WORKSHOPS

[▶ Top](#)

27 Nov 2012

#### NORMAN MassBank Training Workshop - Amsterdam, The Netherlands

The identification of polar organic compounds and their transformation products in the environment, as well as their potential adverse effects are of constant concern for prioritisation of relevant emerging pollutants. The NORMAN Network launched an open-access mass spectral database in 2011, the NORMAN MassBank (<http://massbank.normandata.eu/MassBank>), with the aim to improve the identification of unknown compounds in environmental samples.

This workshop, organised by the NORMAN Association in collaboration with UFZ – Helmholtz Centre for Environmental Research (Germany) and Eawag - Swiss Federal Institute of Aquatic Science and Technology (Switzerland) as part of the NORMAN Working Group on Effect Directed Analysis, will bring together environmental chemists who are planning to share their mass spectral data with NORMAN MassBank community. Welcome are any kind of mass spectral data independent from machine types and analytical settings. An in-depth introduction to the use of MassBank, including practical exercises, will be provided.

[First announcement \(517 KB\)](#) and [Registration form](#)

<http://www.norman-network.net/index.php.php?module=public/workshops/workshopss&menu2=public/workshops/workshops>

## [1-1]化合物MS DB

## 平成25年度計画 MassBank 研究開発計画

- 化合物 MS DB の開発:
- MassBank のデータと解析ツールの分割
  - スリムな MassBank
    - 分散型 DB、public repository に特化
    - 低コスト管理と持続性ある MS DB として世界標準の地位を確固としたものにする。
  - 高精度な MS データに対応したアルゴリズム開発、化学注釈をつけた参照データを提供する機能に特化した MassBank に分割

# [1-2]メタボロームMS DB

## 平成23年度メタボロームデータの整理と公開

### 共通データフォーマットの作成・公開

→ KNApSAcK, Bio-MassBank, MassBase, KomicMarketをスムーズに連携  
データの拡充

→ MassBase: 5058データ、Bio-MassBank: 1300スペクトルを公開

データ処理スキーム、ソフトウェアの改良、アノテーション用語の整理

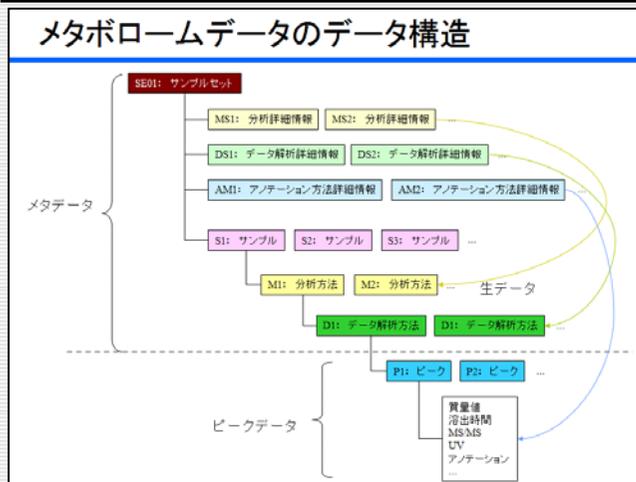
→ データ生産の効率化

①メタデータ階層構造の検討

②記載項目・書式の検討

③フォーマットに従ったサンプルデータの提供

④フォーマットの公開



### Record Index

Contributor : Kazusa (1,300)



<http://webs2.kazusa.or.jp/togodb>



# [1-2]メタボロームMS DB

## 平成24年度 メタボロームデータの整理と公開

### メタデータ(実験条件等)の専用データベース開発(Metabolonote)

→ データ公開を加速、データ連携を促進

### データの拡充

→ MassBase: 13,784データ公開。3年間の目標36,000件を達成予定

Bio-MassBank: 1942スペクトルを公開

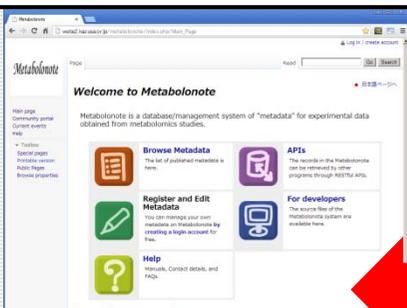
### データ処理の効率化 高速な組成式推定技術 (MF Searcher)

Sakurai et al. *Bioinformatics in press*

①フォーマットに従った  
メタデータの蓄積

②フォーマットに従った  
MSデータの蓄積

③組成式推定の高速化  
従来法の100~2000倍



Metabolonote

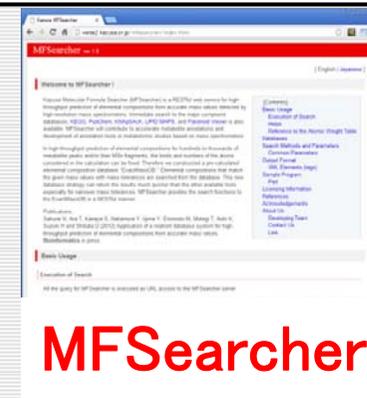
連携



MassBase 1.0



Bio-MassBank  
Kazusa (3,242)



MFSearcher

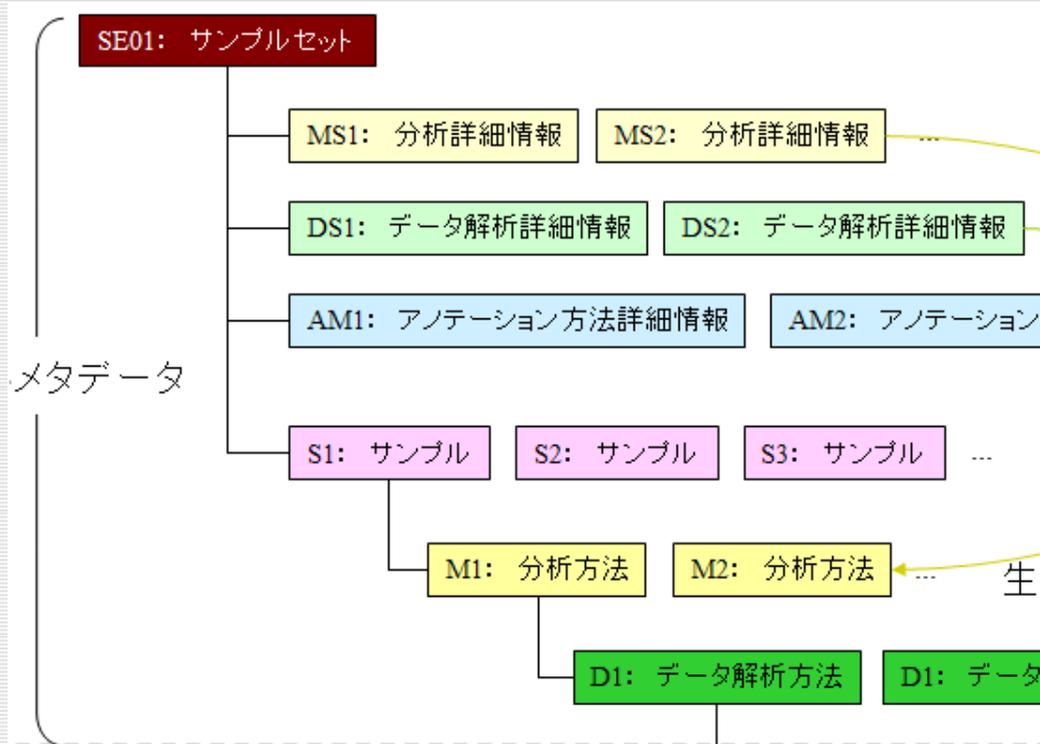
<http://webs2.kazusa.or.jp/metabolonote/>

<http://webs2.kazusa.or.jp/mfsearcher/>

# [1-2]メタボロームMS DB

櫻井(かずさ)

## 平成24年度 **メタデータ専用**データベース MetabolonoteをセマンティックMediaWikiで開発



複雑な実験条件に関するメタデータの一元管理  
管理コストを下げ、データの公開と利用を促進

Metabolonote

SE1/S01/M04/D01

Sample Set Information

ID	SE1
Title	Arabidopsis thaliana metabolite analysis
Description	Investigation of Arabidopsis thaliana Leaf metabolites. 6 replicates data are examined for each sample.
Authors	Takeshi Ara, Ryosuke Sasaki, Mitsuo Enomoto, Nozomu Sakurai, Hideyuki Suzuki, Daisuke Shibata, Kazusa DNA Research Institute
Reference	Direct Submission
Comment	version 5

Sample Information

ID	S01
Title	Arabidopsis wt leaf
Organism - Scientific Name	Arabidopsis thaliana
Organism - NCBI taxonomy ID	NCBI:taxon:5111

Write once, use from anywhere!

- TOGOメタボロームフォーマットに対応
- 階層的なメタデータ構造を管理
- セマンティックMediaWikiでRDF化
- APIによるデータ取得
- 公開・非公開の簡単な切り替え
- 移植可能なシステム

# [1-2]メタボロームMS DB (25年度計画)メタボロームデータの整理と公開

## データの拡充

- Bio-MassBank、KomicMarketを中心にデータの拡充
- Metabolonote (セマンティックMediaWikiベース) のRDF活用
- KNApSAcK, Bio-MassBank, MassBase, KomicMarketと連携、統合化
- データ処理の効率化
- **フォーマットに従ったデータ生産の促進・普及**

## [3-1] メタボロームデータの統合管理



# メタボローム・データベース構想

質量スペクトルから生理活性情報の統合化をめざす。

日本メタボローム・データベース  
パブリック・リポジトリ

メタボロミクス研究者、**一般ユーザ**  
デポジット・閲覧・アノテーション・キュレーション

## [1] 質量スペクトルDB (MS DB)

・学会MSDB  
MassBank, LipidBank  
・研究グループMSDB  
PRIME

[1-1] 化合物MS  
DB

・個別研究における代謝物の同定  
文献情報  
・大規模メタボロームMSDB  
MassBase, MS2T, KomicMarket

[1-2] メタボローム  
MS DB

## [2] 代謝物情報DB

・文献情報  
KNAPSAcK DB

[2-1] 代謝物-  
{生物種, 生理活  
性}関係DB

・質量スペクトルのアノテーション  
MassBankフラグメンテーション・ライブラリ

[2-2] MS-化合物構  
造の関係知識DB

## [3]メタボローム統合DB

[3-1] ウィキDBによるメタボロームデータの統合管理

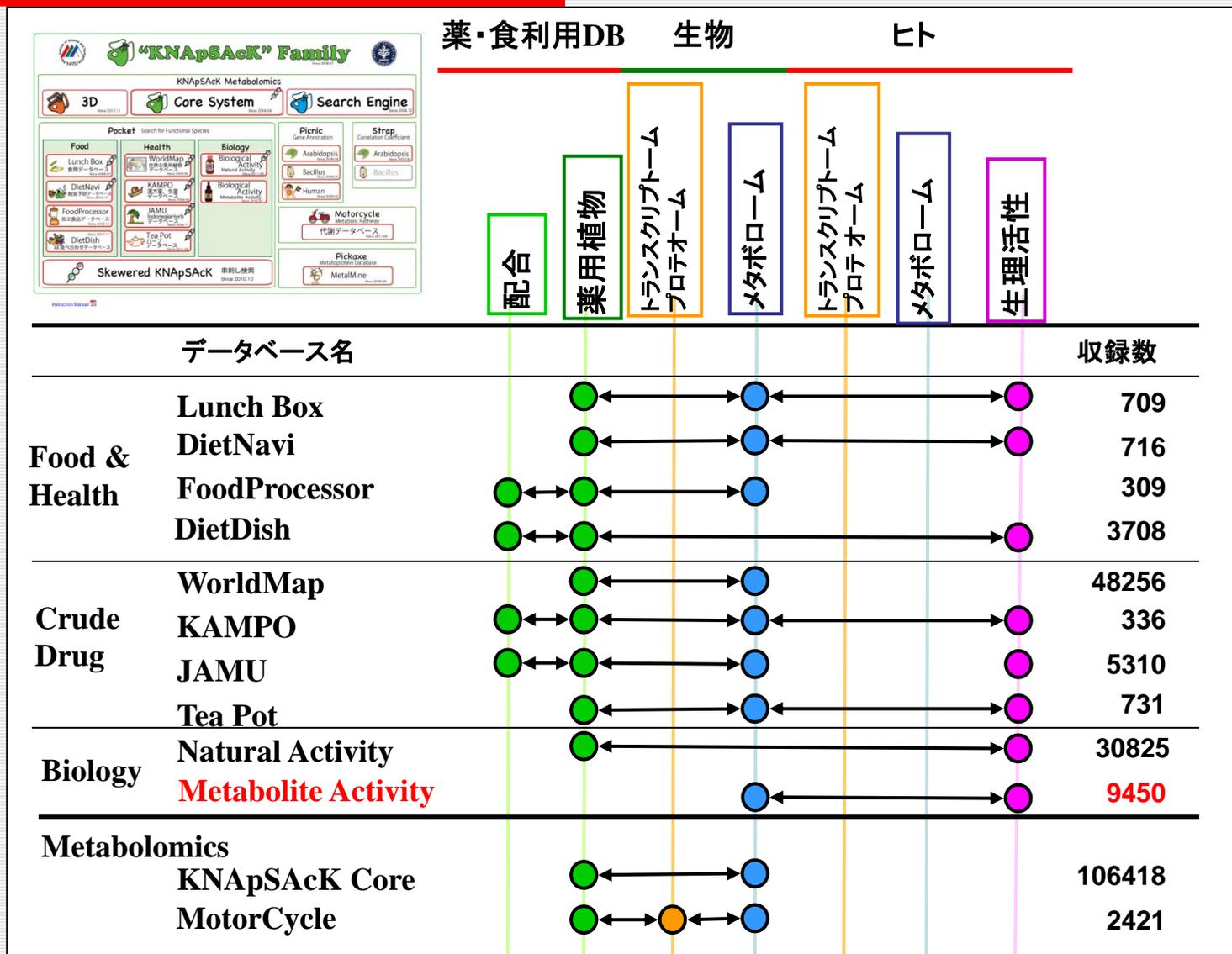
[3-2] メタボローム・アノテーション・システム

[3-3] ゲノム情報とのリンク

基礎研究: 持続可能社会に向けた生物資源の有効利用、生物種、分野、目的に応じた基礎研究  
産業応用: 新規有用代謝物質の探索、ゲノム育種による有用/新規代謝物質の生産 など

[2-1]代謝物質-生物活性の関係データベース

平成24年度 代謝物、食材と活性の関係情報のDBの開発とデータ充実



Afendi et al., *Cur. Pharmacogenomics Personalized Med.*, **10**, 111-124, (2012)

[2-1]代謝物質-生物活性の関係データベース

平成24年度 代謝物、食材と活性の関係情報のDBの開発とデータ充実

トーゴーの日シンポジウム2012  
 ~ライフサイエンスデータベース統合の医学への応用を探る~ 2012.10.5

KNApSAcKファミリーデータベース：  
 メタボロミクスから展開する植物の  
 多目的活用  
 金谷 重彦

(奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科)

バイオサイエンスデータベースセンター 2012年10月5日(金) 時事通信ホール

2012.10.12

「KNApSAcK Family DB:  
 オミックス研究における医食同源の体系化」

金谷 重彦

(奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科)

バイオサイエンスデータベースセンター 2012年10月12日(金) BioJapan2012 パシフィコ横浜

ブース展示: 日本分子生物学会 2012.12

NBDC

AJACS 駿河 2013.1.13

静岡県立大学  
 食品栄養科学部

開催: 2013年1月15日(日) 9:00-16:00  
 1月16日(月) 9:00-16:00  
 会場: 静岡県立大学 豊田キャンパス コンピュータ棟3階 (421-8501)  
 受付: 601号 / 費用: 無料  
 申し込み: 下記ページよりお申し込みください。  
<http://events.biosciencedb.jp/01/ajacs26>  
 (お問い合わせ: [ajacs@nagasaki.ac.jp](mailto:ajacs@nagasaki.ac.jp) 090-95-12-26 日 9:00-18:00 まで)

プログラム:

1月15日(日)	1月16日(月)
9:00-10:30	9:00-10:00
10:30-12:00	10:30-12:00
12:00-13:00	12:00-13:00
13:00-14:30	13:00-14:30
14:30-16:00	14:30-16:00

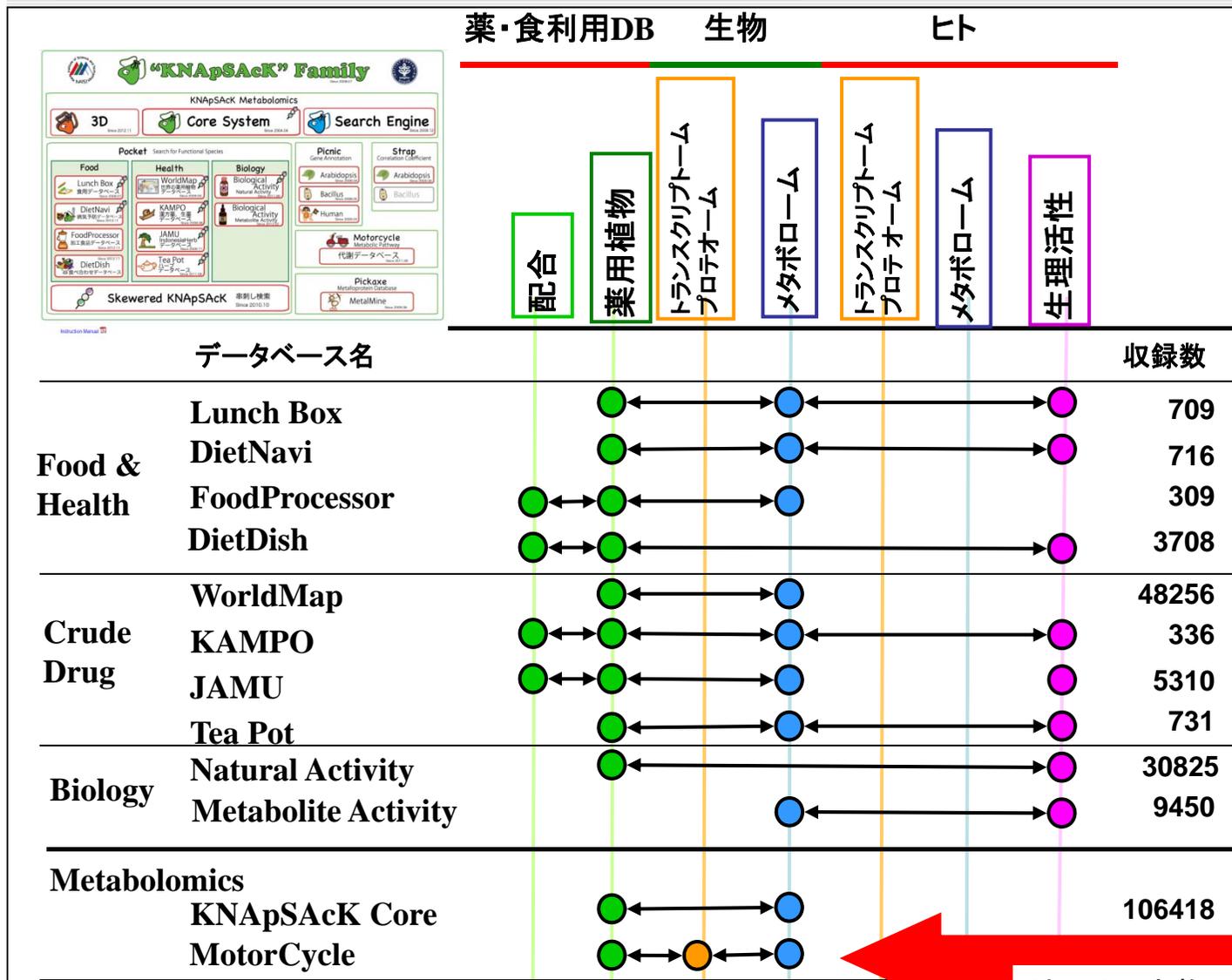
主催: 静岡県立大学 食品栄養科学部 食品栄養科学部  
 共催: 日本植物生理学会 代謝物データベース研究会  
 協賛: 静岡県立大学 豊田キャンパス コンピュータ棟3階 (421-8501)

日本植物生理学会 2013.3 予定

[2-1]代謝物質-生物活性の関係データベース

平成25年度計画 生物活性情報の充実、オミクス情報とのリンク

二次代謝物、タンパク質相互作用、生物活性の関係DBの設計とデータ蓄積



[3-3]  
ゲノム情報とのリンク

池田ら、生物工学会誌90,777-781(2012)

# [2-2] MSデータと化学構造の関係知識DB

西岡、金谷(NAIST)

(平成24年度) 化学構造推定ツールの開発、文献から収集  
(平成25年度計画)

MSデータと化学構造の関係知識 DB

高精度なMSデータの化学注釈や関係知識獲得の自動化

化学構造式推定ツールの拡充

クエリ ESI-MS<sup>2</sup> で観察されたピークの m/z

ピークと部分化学構造式との関係の ID

Matched Formulae : 15

m/z	39.0235	41.0396	42.0321	54.0339	55.0413	56.0416	66.0351	68.0503	81.0459	82.0547	93.0434	95.0591	110.072	156.076
Formula	C3H3	C3H5	C2H4N	C3H4N	C3H5N	C3H6N	C4H4N	C4H6N	C4H5N2	C4H6N2	C4H7N2	C5H5N2	C5H7N2	C6H10N3O2
No.	--	--	--	ion-pos-0020 ion-pos-0021	--	ion-pos-0016 ion-pos-0018 ion-pos-0019 ion-pos-0020 ion-pos-0021	ion-pos-0021	ion-pos-0016 ion-pos-0019 ion-pos-0020	ion-pos-0016 ion-pos-0019 ion-pos-0020 ion-pos-0021	ion-pos-0017 ion-pos-0019 ion-pos-0020 ion-pos-0021	ion-pos-0016 ion-pos-0019 ion-pos-0020 ion-pos-0021	ion-pos-0020 ion-pos-0016 ion-pos-0019 ion-pos-0021	ion-pos-0020 ion-pos-0016 ion-pos-0019 ion-pos-0021	ion-pos-0020 ion-pos-0054

Hit Relationships : 6

**ion-pos-0016**  
Substructure

Formula, Precision & Recall, TP

C4H6N2	0.71	0.15	10
C4H7N2	0.5	0.16	11
C5H7N2	0.7	0.21	14
C3H6N	0.45	0.15	10

**ion-pos-0018**  
Substructure

Formula, Precision & Recall, TP

C3H6N	0.41	0.39	43
-------	------	------	----

**ion-pos-0019**  
Substructure

Formula, Precision & Recall, TP

C5H7N2	0.5	0.4	10
C3H6N	0.55	0.24	6
C4H5N2	0.57	0.32	8
C4H6N	0.64	0.28	7

**ion-pos-0020**  
Substructure

Formula, Precision & Recall, TP

C4H6N2	0.69	0.9	9
C4H7N2	0.5	0.16	11
C5H7N2	0.7	0.21	14
C3H6N	0.45	0.15	10

**ion-pos-0021**  
Substructure

Formula, Precision & Recall, TP

C3H4N	0.5	0.31	21
C3H5N	0.41	0.39	43
C4H6N	0.64	0.28	7
C4H7N	0.5	0.16	11
C5H7N	0.7	0.21	14
C3H6N	0.45	0.15	10

クエリの未知代謝物に含まれる部分化学構造の候補

Results : 2 Hit.

**Histidine**

Formula : C6H9N3O2  
Exact Mass : 155.0695

DB Links  
KNApSack : C00001363  
KEGG : C00135  
KEGG : C00135

Hit Relationship-No.  
ion-pos-0016, ion-pos-0018, ion-pos-0019, ion-pos-0020, ion-pos-0021, ion-pos-0054

**beta-Pyrazol-1-ylalanine**

Formula : C6H9N3O2  
Exact Mass : 155.06948

DB Links  
KNApSack : C00001390  
KEGG : C01162

Hit Relationship-No.  
ion-pos-0018

推定された代謝物候補  
MassBank-KNApSack等  
統合検索

# メタボローム・データベース構想

質量スペクトルから生理活性情報の統合化をめざす。

日本メタボローム・データベース  
パブリック・リポジトリ

メタボロミクス研究者、一般ユーザ  
デポジット・閲覧・アノテーション・キュレーション

## [1] 質量スペクトルDB (MS DB)

・学会MSDB  
MassBank, LipidBank  
・研究グループMSDB  
PRIME

[1-1] 化合物MS  
DB

・個別研究における代謝物の同定  
文献情報  
・大規模メタボロームMSDB  
MassBase, MS2T, KomicMarket

[1-2] メタボローム  
MS DB

## [2] 代謝物情報DB

・文献情報  
KNASAcK DB

[2-1] 代謝物-  
{生物種, 生理活  
性}関係DB

・質量スペクトルのアノテーション  
MassBankフラグメンテーション・ライブラリ

[2-2] MS-化合物構  
造の関係知識DB

## [3]メタボローム統合DB

[3-1] ウィキDBによるメタボロー  
ムデータの統合管理

[3-2] メタボローム・アノテーショ  
ン・システム

[3-3] ゲノム情報とのリンク

基礎研究: 持続可能社会に向けた生物資源の有効利用、生物種、分野、目的に応じた基礎研究  
産業応用: 新規有用代謝物質の探索、ゲノム育種による有用/新規代謝物質の生産 など

# [3-1]メタボロームデータの統合管理 (25年度計画)メタボロームデータの整理と公開

## データの拡充

→ Bio-MassBank、KomicMarketを中心に拡充

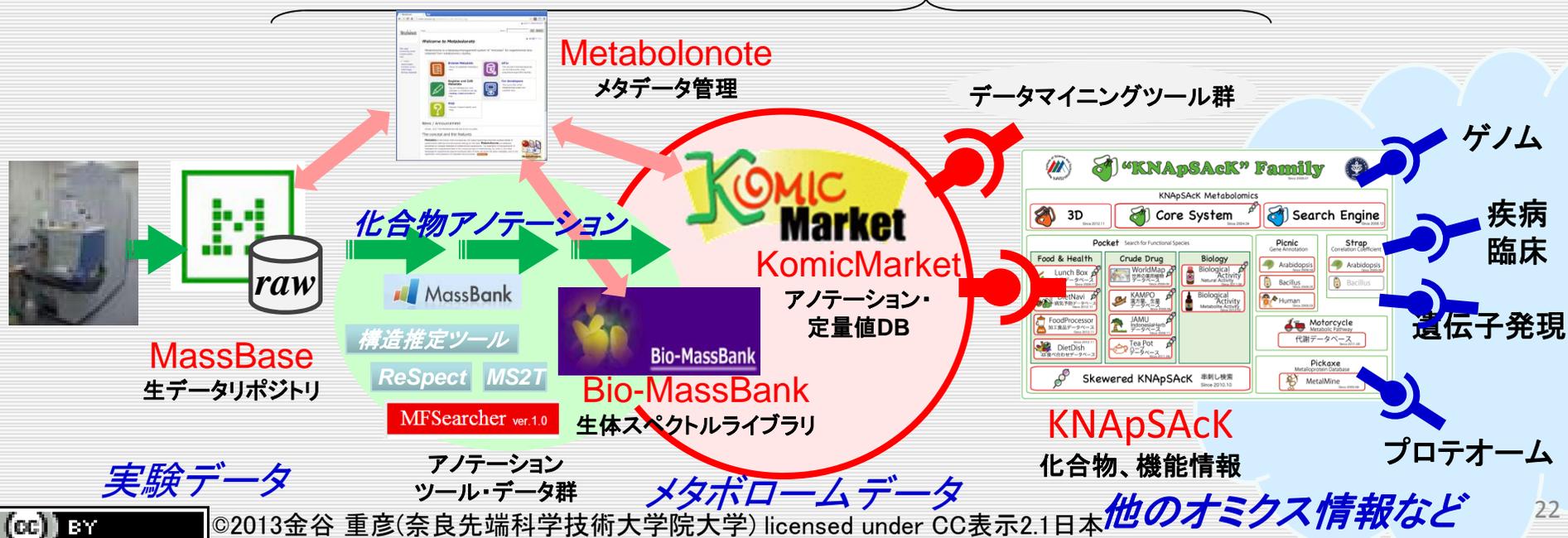
## Metabolonote(セマンティックMediaWikiベース)のRDF活用

→ **KNApSAcK, Bio-MassBank, MassBase, KomicMarketと連携、統合化**

## データ処理の効率化

→ フォーマットに従ったデータ生産の促進・普及

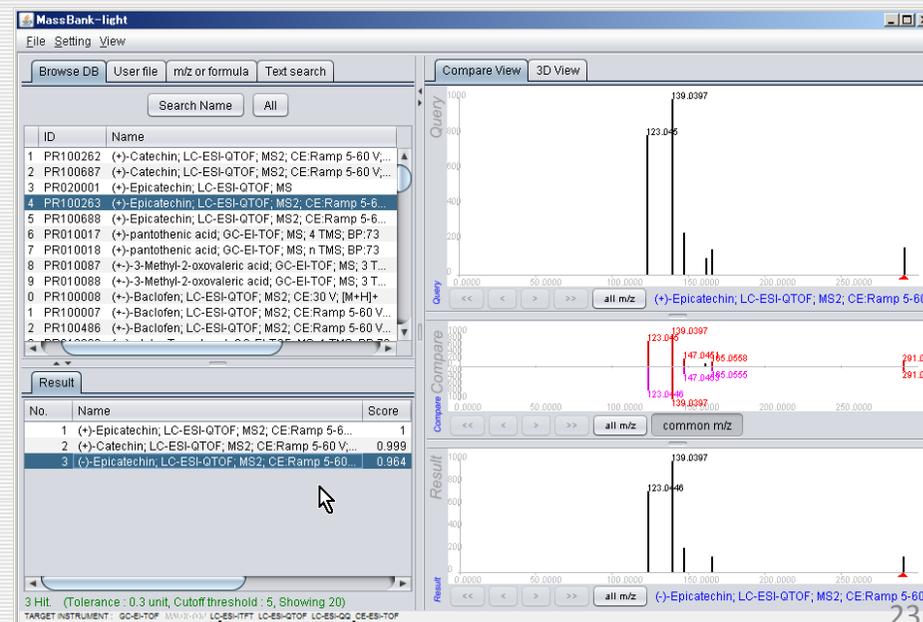
### [3-1] メタボロームデータの統合管理



## [3-2]メタボロームアノテーション・システムの開発成果1. (平成24年度)MassBank<sub>light</sub>の開発

### Java Web Start による検索ソフトウェア開発

- MassBankの機能を Java Application で実現(部分構造検索を除く)
- ローカルでもブラウザからでも起動可能
- データとソフトウェアを明確に分離
- MassBankコードを利用  
LGPL General License
- ローカルのファイルも利用可能



# [3-2]メタボロームアノテーション・システムの開発成果2. 有田(理研) (平成24年度)MassBank<sub>light</sub>の開発

特徴的機能: 容易な検索切り替え

文字列検索

質量値検索

スペクトル検索

MassBankを踏襲した表示

スペクトルを複数選択可能

MassBank-light

File Edit View

Use DB Use m/z or formula Text search

Search Reset

	m/z (mass)	formula	diff
not specify	71		<input type="checkbox"/>
AND			<input type="checkbox"/>

Result

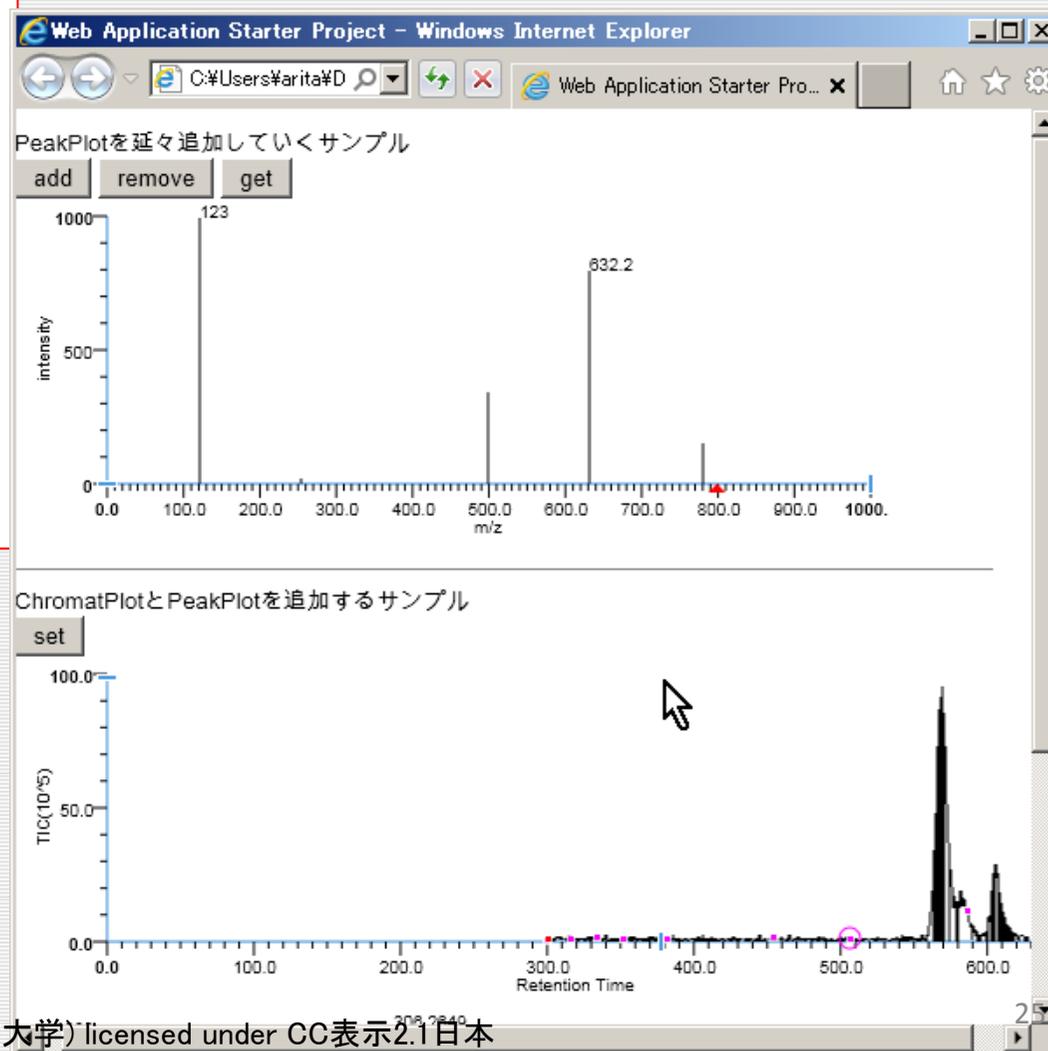
No.	Name	Score
1	Nonadecanoic acid methyl ester, GC-EI-TOF, MS; 0 ...	
2	Nonadecanoic acid methyl ester, GC-EI-TOF, MS; 0 ...	
3	Spermidine, GC-EI-TOF, MS; 5 TMS, BP:73	
4	1,3-Diaminopropane, GC-EI-TOF, MS; 4 TMS, BP:73	
5	1,3-Dihydroxyacetone dimer, GC-EI-TOF, MS; 2 TMS...	
6	Ferulic acid, GC-EI-TOF, MS; 2 TMS, BP:73	
7	1-Aminocyclopropane-1-carboxylic acid, GC-EI-TOF...	
8	5-Methylcytosine, GC-EI-TOF, MS; 2 TMS, BP:73	
9	Cadaverine, GC-EI-TOF, MS; 4 TMS, BP:174	
10	cis-Aconitic acid, GC-EI-TOF, MS; 3 TMS, BP:73	

234 Hit. (Tolerance : 0.3 unit, Cutoff threshold : 5, Showing 20)

## [3-2]メタボロームアノテーション・システムの開発 (平成24年度) JavaScriptによるデータ表示

Appletは、Web Startは逐一起動が必要。これを回避するためにJavaScriptを使用

- マススペクトルの描画。拡大、クリック可能
- クロマトグラムの描画。指定箇所でスペクトルを表示可能(ピンク丸)

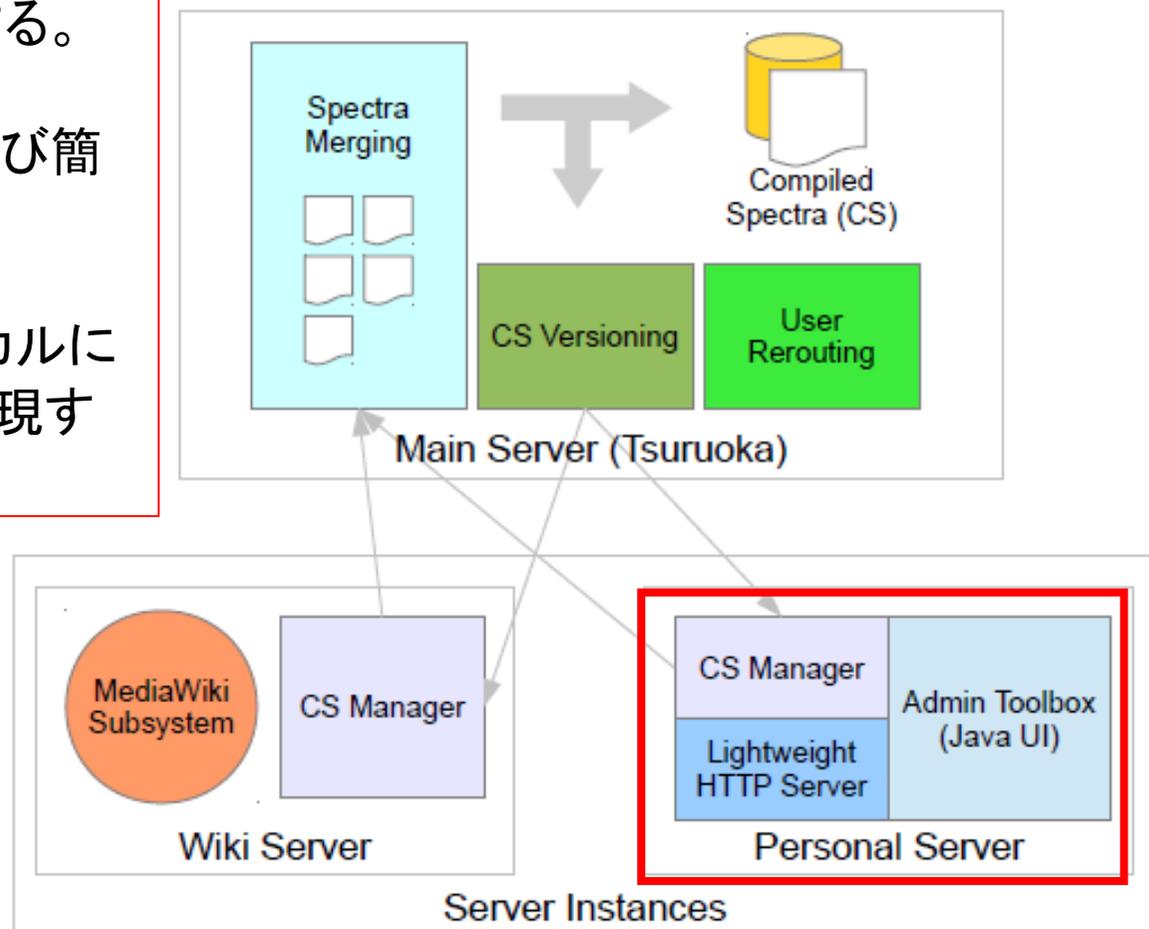


## [3-2]メタボロームアノテーション・システムの開発 (平成25年度計画)MSアノテーションの効率化を目指したデータ分散フレームワークの構築

(a)メインサーバで定期的にスペクトルを収集し、自動コンパイルで「統合スペクトル」の作成を実現する。

(b)ローカルサーバはWikiおよび簡易クライアントで実現する。

(c)スペクトル実データはローカルにのみ存在するデータ分散を実現する。



研究開発項目:平成24年度当初計画は全て達成された。

## 1.質量スペクトルDB(化合物MSDBとメタボロームMSDB)の拡充

### 1.1化合物MS DBの開発

- ・プロトタイプシステムの開発
- ・データのDBへの蓄積ならびに公開

### 1.2メタボロームMS DBの開発

- ・DBプロトタイプシステムの開発
- ・データのDBへの蓄積ならびに公開

## 2.代謝物質情報DBの構築

### 2.1 代謝物質と生物活性の関係データベース

- ・データベース構築
- ・データ蓄積ならびに公開

### 2.2 MS データと化学構造の関係知識DBと

#### 化学構造式推定ツールの開発・実装

- ・システム開発
- ・データの充実ならびに公開

## 3.メタボローム統合DB

- ・wikiを中心としたデータ統合技術開発
- ・wikiを中心とした統合データの公開

H23	H24	H25
公開 MassBank		
公開 BioMassBank		
公開 Metabolite Activity		
公開 MassBank		
MassBank Wiki		

# メタボローム・データベース構想

質量スペクトルから生理活性情報の統合化をめざす。

日本メタボローム・データベース  
パブリック・リポジトリ

メタボロミクス研究者、一般ユーザ  
デポジット・閲覧・アノテーション・キュレーション

## [1] 質量スペクトルDB (MS DB)

・学会MSDB  
MassBank, LipidBank  
・研究グループMSDB  
PRIME

[1-1] 化合物MS  
DB

・個別研究における代謝物の同定  
文献情報  
・大規模メタボロームMSDB  
MassBase, MS2T, KomicMarket

[1-2] メタボローム  
MS DB

## [2] 代謝物情報DB

・文献情報  
KNASAcK DB

[2-1] 代謝物-  
{生物種, 生理活  
性}関係DB

・質量スペクトルのアノテーション  
MassBankフラグメンテーション・ライブラリ

[2-2] MS-化合物構  
造の関係知識DB

## [3]メタボローム統合DB

[3-1] ウィキDBによるメタボロー  
ムデータの統合管理

[3-2] メタボローム・アノテーショ  
ン・システム

[3-3] ゲノム情報とのリンク

基礎研究: 持続可能社会に向けた生物資源の有効利用、生物種、分野、目的に応じた基礎研究  
産業応用: 新規有用代謝物質の探索、ゲノム育種による有用/新規代謝物質の生産 など

# メタボローム・データベースの開発

金谷 重彦・西岡孝明

奈良先端科学技術大学院大学 (NAIST)

情報科学研究科・情報生命科学専攻

・計算システムズ生物学講座

櫻井 望

(財)かずさDNA研究所・

産業基盤開発研究部

有田 正規

(独)理化学研究所

植物科学研究センター

平成25年1月21日