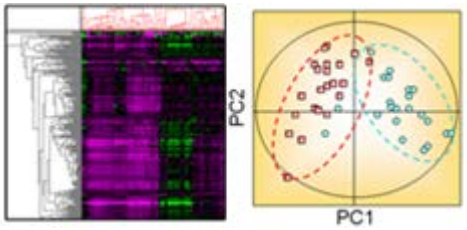
植物代謝物プロファイリングデータベース AtMetExpressの開発とオミックスデータ統合化の推進

福島　敦史

理化学研究所・環境資源科学研究センター (CSRS)

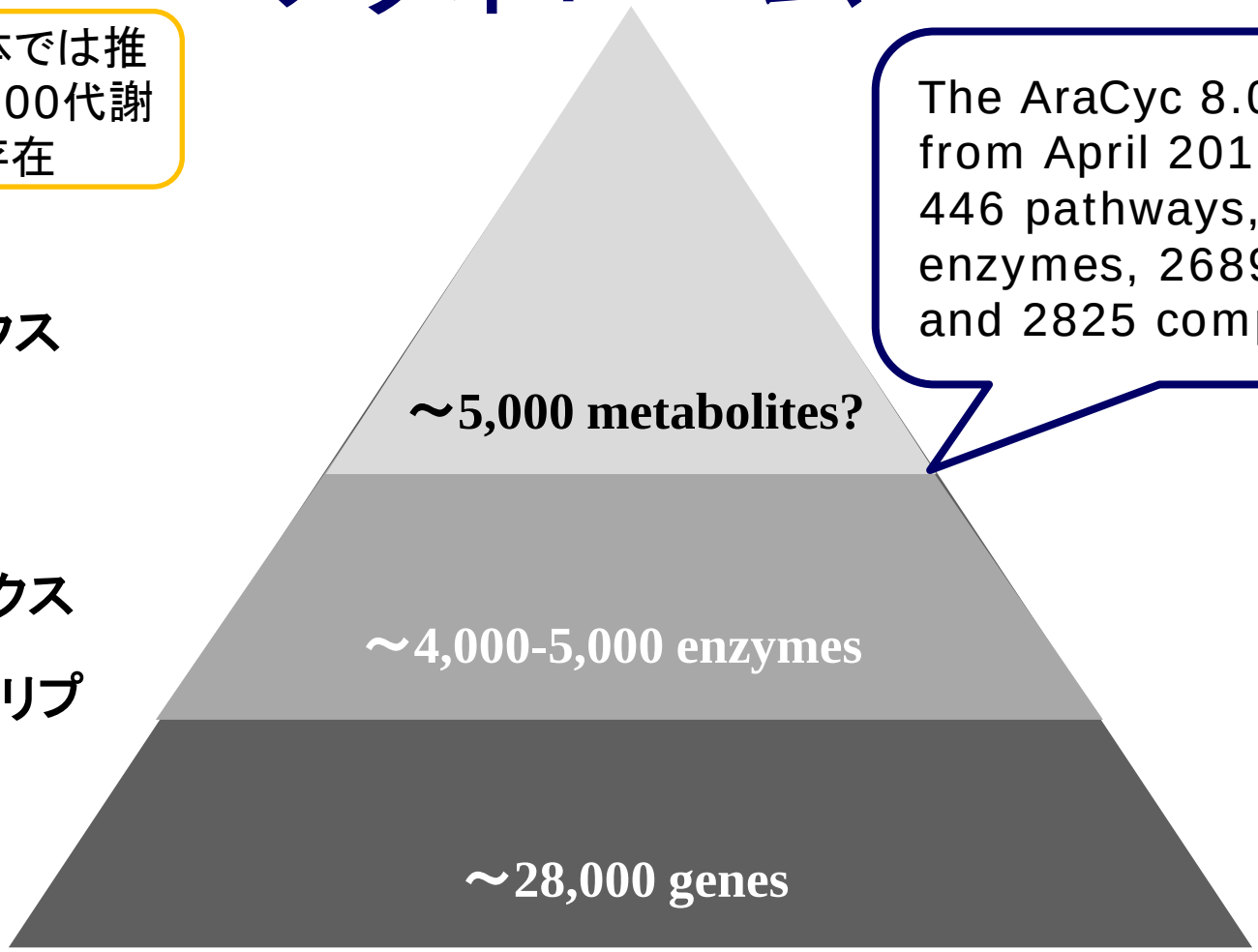


内容

1. 研究背景
2. 研究開発の目的・全体像
3. 結果
4. まとめ

モデル植物シロイヌナズナのメタボローム

植物界全体では推定～200,000代謝物が存在



メタボロミクス

プロテオミクス

(トランスクリプトミクス)

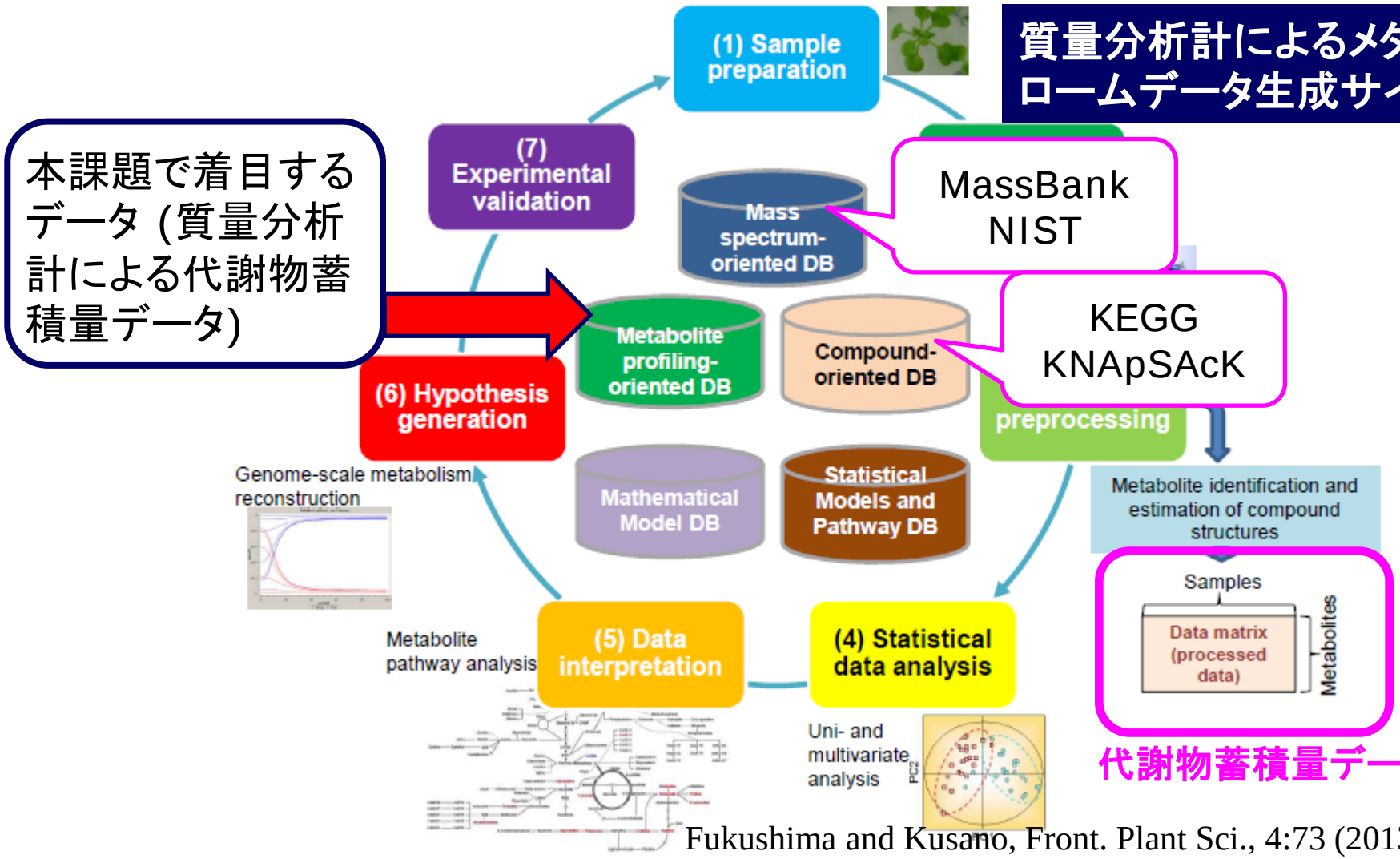
ゲノミクス

The AraCyc 8.0 release from April 2011 contains 446 pathways, 5520 enzymes, 2689 reactions, and 2825 compounds

TAIR (http://www.arabidopsis.org/) 調べ

メタボロミクスは細胞内代謝物の総体を化学分析する学問

生命の根本である「情報」と「物質」とが交差する特異的な分野の一つ



Fukushima and Kusano, Front. Plant Sci., 4:73 (2013)

例. PlantMetabolomics.org

Arabidopsis Metabolomics Consortium

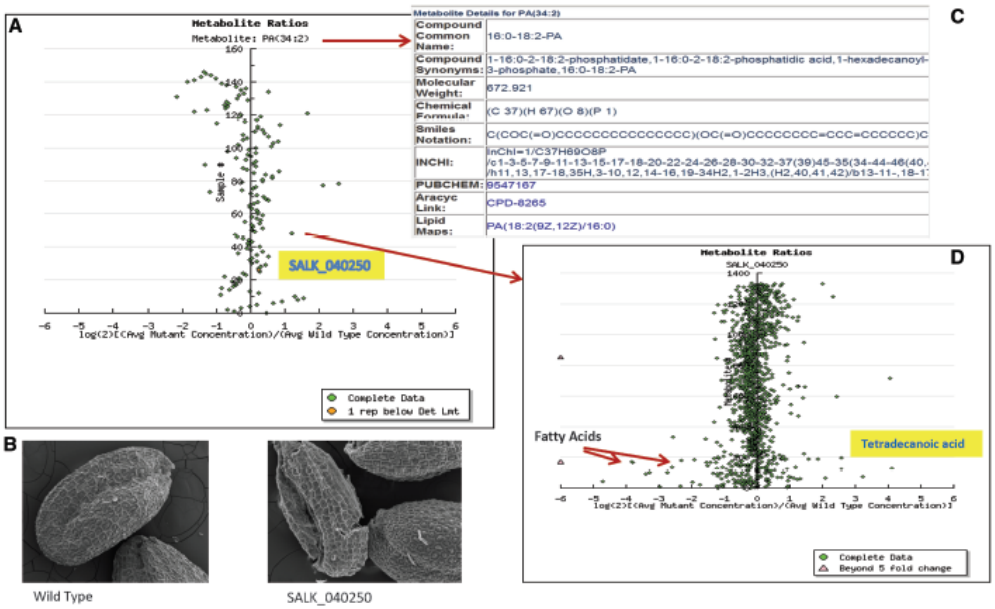
Home | About | Datasets | Tools | Tutorials | Gene Targets | Search

About PlantMetabolomics

This is an NSF-funded multi-institutional project that is developing metabolor Arabidopsis genes. The Consortium has established metabolomic platforms chemically defined. Initial studies have focused on investigating the robustnes minimize the environmental and developmental effects on the metabolome. S Arabidopsis mutant lines in genes whose functions are currently not fully ur T-DNA knockout alleles for these targeted genes, some of which have been integrated with phenotypic data and data concerning protein function, trar concerning the functions of the targeted genes.

What Can You Do?

Search for your Metabolite:



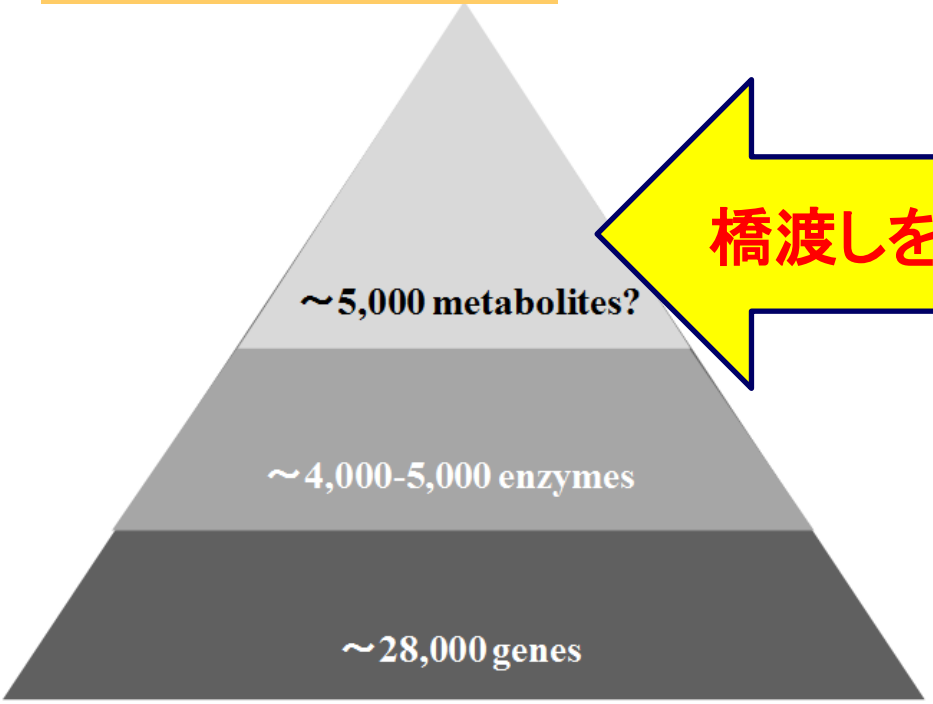
Bais et al., Plant Physiol (2010); Bais et al., NAR (2012);
http://plantmetabolomics.vrac.iastate.edu/ver2/

See also, Plant Metabolomics Resource (PMR)

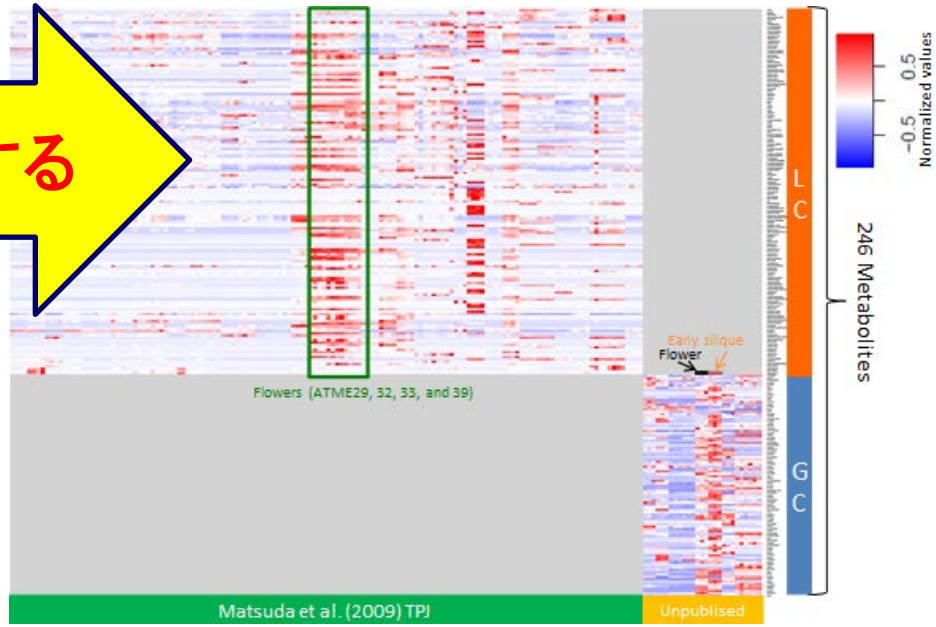
研究開発の目的

予測されるメタボローム

測定可能なメタボローム



橋渡しをする



- モデル植物シロイヌナズナのメタボローム把握するための文献整理・データ再解析
- シロイヌナズナの代謝物プロファイルデータを閲覧・加工・共有するフレームワークの開発・情報基盤づくり

研究開発の概要

化合物データセット

PlantMetabolomics.org (737)

KNApSAcK (625)

代謝物プロファイル測定データ

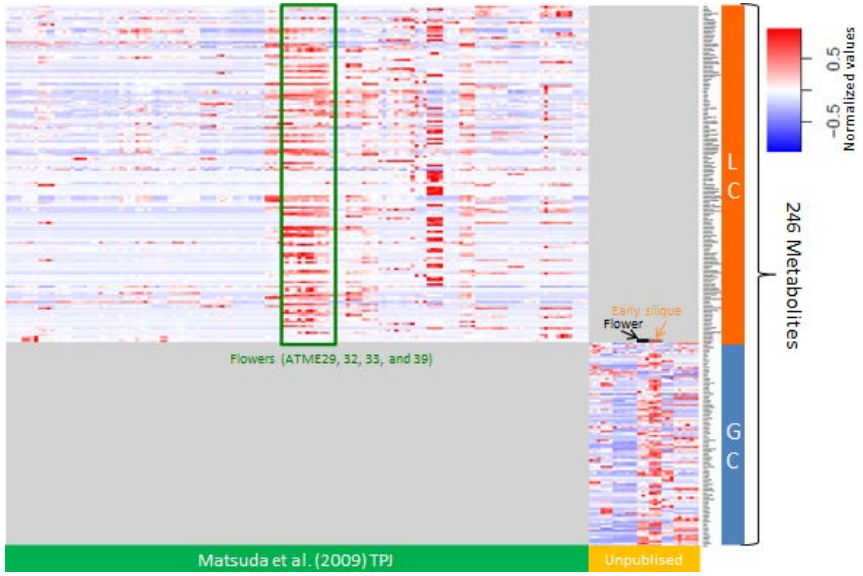
RIKEN

14データセット
(11 published + 3 unpublished)

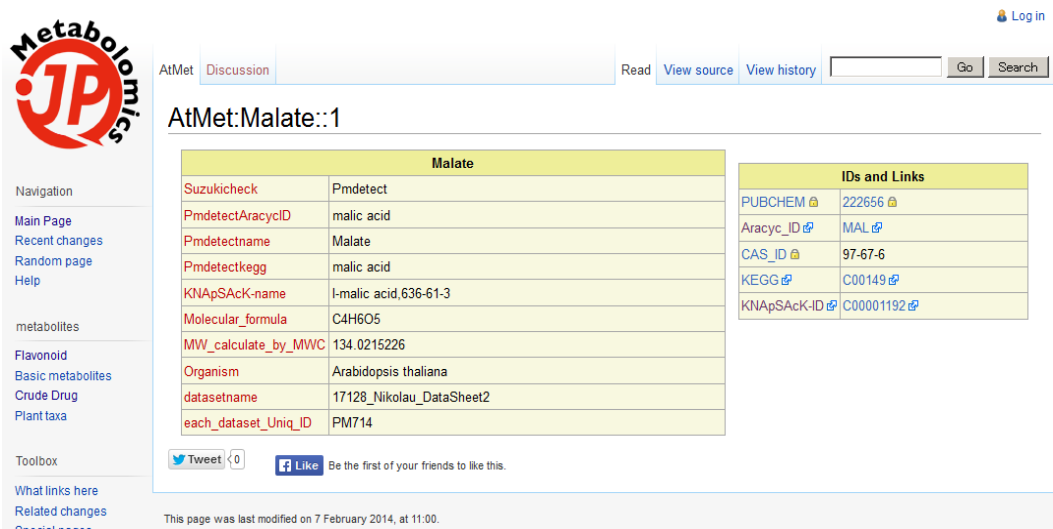
- GC-TOF-MS (83*, 92, 93)
- CE-TOF-MS (74, 60)
- UPLC-q-TOF-MS (106, 289, 99)
- LC-IT-TOF-MS (55, 96)

*括弧内は、測定できた代謝物の数

AtMetExpressの開発



Wikiスタイルページ



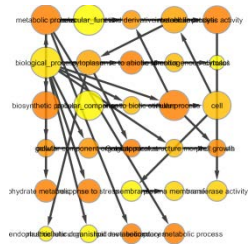
収集済みのデータセットは14

データセット名	PMID	検出した既知代謝物数	
Matsuda et al. (2010) Plant Physiol - AtMetExpress Development	20023150	289	Published data
Matsuda et al. (2009) Plant J – MS2T paper	18939963	99	
Matsuda et al. (2011) Front in Plant Sci – AtMetExpress Ecotype	22645535	106	
Hirai et al. (2010) JPR – LC, ecotype	20369372	38	
Ide et al. (2011) JXB – GC and CE data	21131548	74	
Kusano et al. (2007) BMC Syst Biol – GC data	18028551	93	
Kusano et al. (2010) Amino Acids – GC data	20354740	87	
Kusano et al. (2011) Plant J – GC and LC data	21466600	92	
Okazaki et al. (2012) Metabolomics – LC-IT data	23463370	96	
Watanabe et al. (2008) Plant Physiol – GC and CE data	18024555	60	
Fukushima et al. (2009) PNAS – GC data	19359492	83	
AtMetExpress Development (GC data), unpublished	NA	93	Unpublished data
Time course GC data - unpublished	NA	78	
Development of MeKO database (GC data)	NA	99	

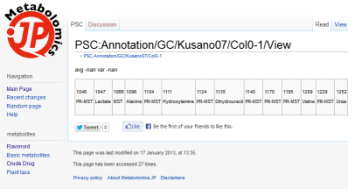
実施した研究項目

1) 既存の化合物情報の収集・統合 (H25年10月)

2) 代謝物プロファイルデータの収集・再解析 (H25年9-10月)

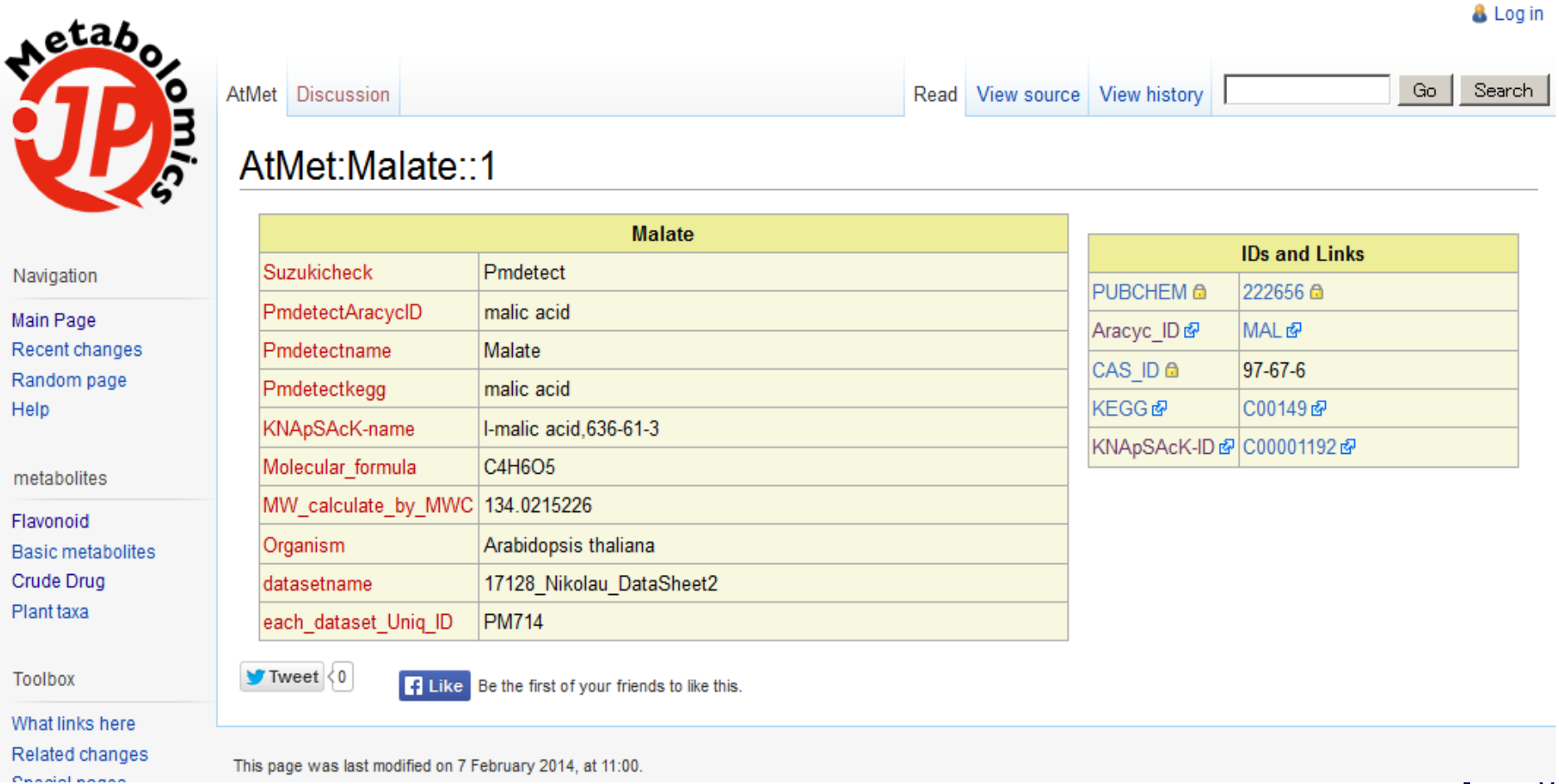


3) Wiki化・データ視覚化・データ共有(H25年11月-H26年1月)

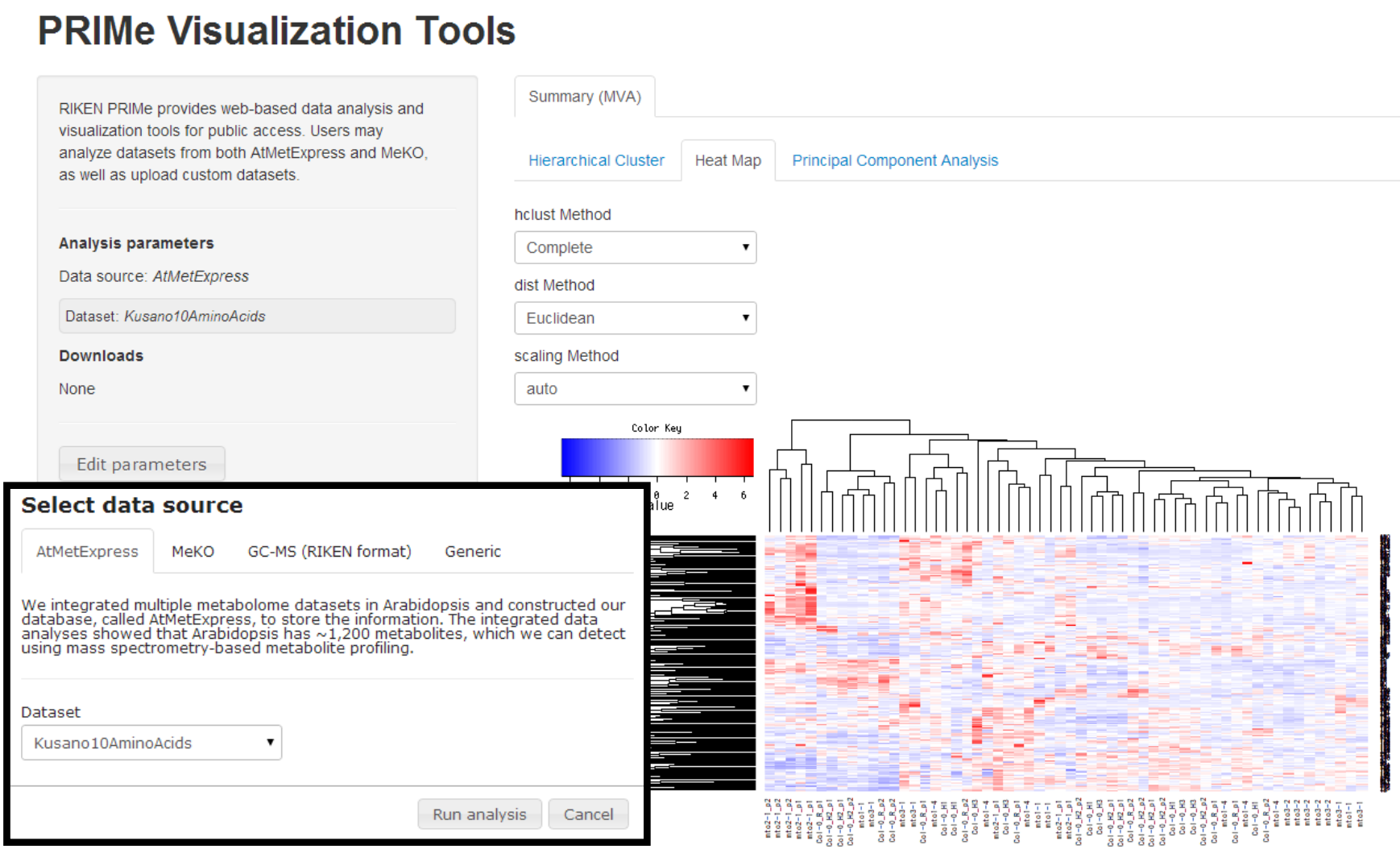


➔ シロイヌナズナのメタボローム中、質量分析計で測定可能な代謝物数はおよそ1,200個

Metabolite information in Wiki



再解析ツール (AtMetExpress): a heatmap



再解析ツール (AtMetExpress): HCA

PRIMe Visualization Tools

RIKEN PRIMe provides web-based data analysis and visualization tools for public access. Users may analyze datasets from both AtMetExpress and MeKO, as well as upload custom datasets.

Analysis parameters

Data source: *AtMetExpress*

Dataset: *Kusano10AminoAcids*

Downloads

None

Edit parameters

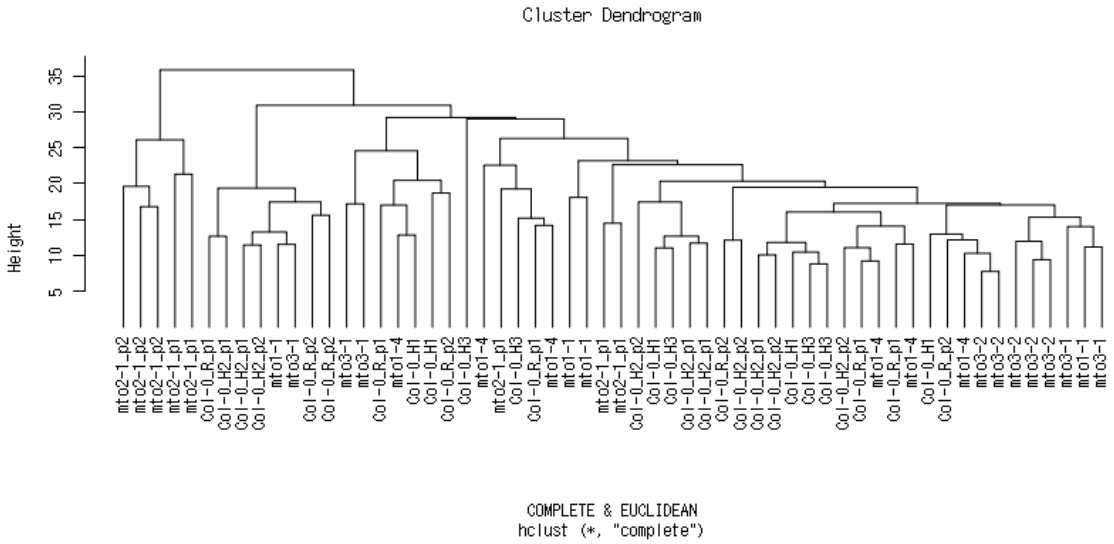
Summary (MVA)

Hierarchical Cluster | Heat Map | Principal Component Analysis

hclust Method: Complete

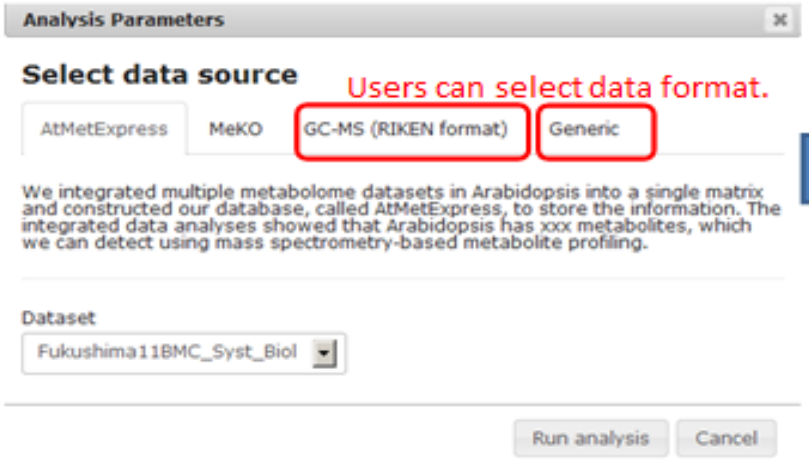
dist Method: Euclidean

scaling Method: auto



再解析ツール(AtMetExpress):User's data

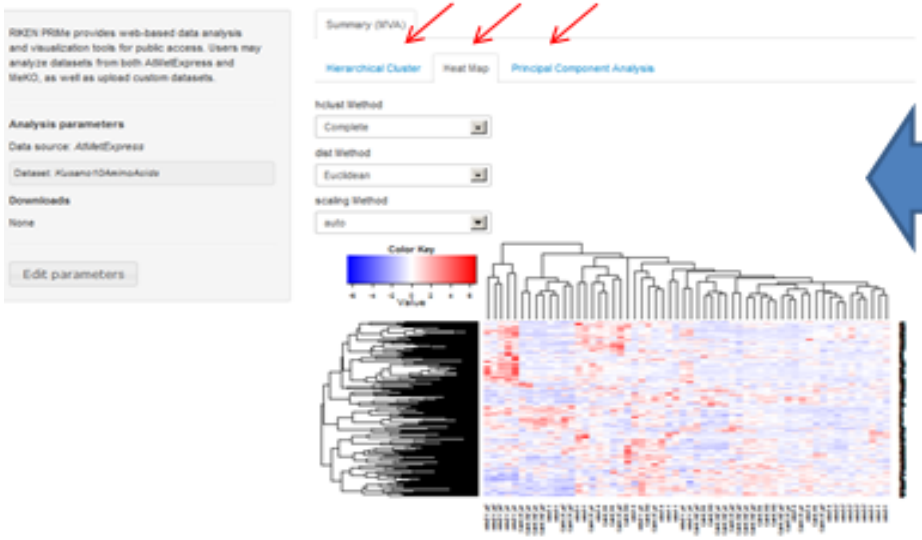
Meta-analysis selection (GC-MS RIKEN format or GENERIC format)



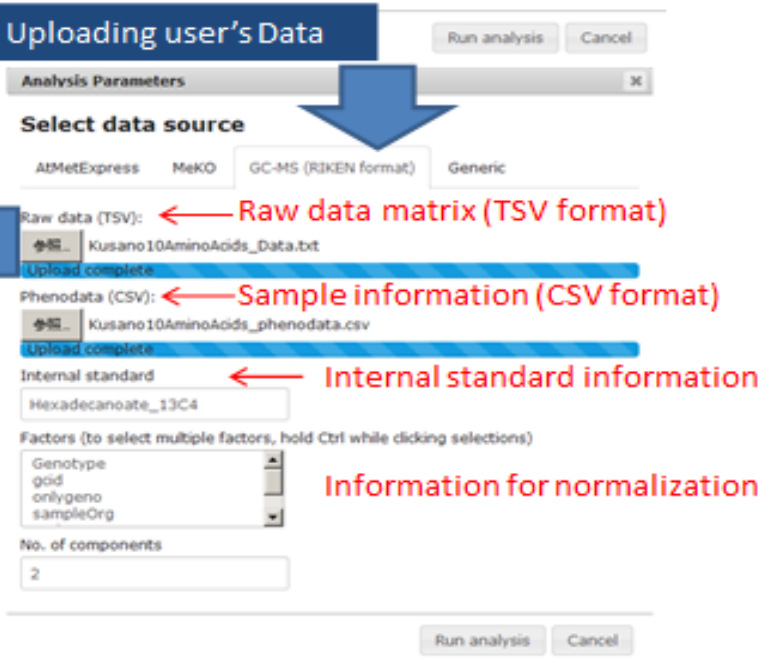
User's Data selection

Meta-analysis tools

HCA, Heatmap, and PCA

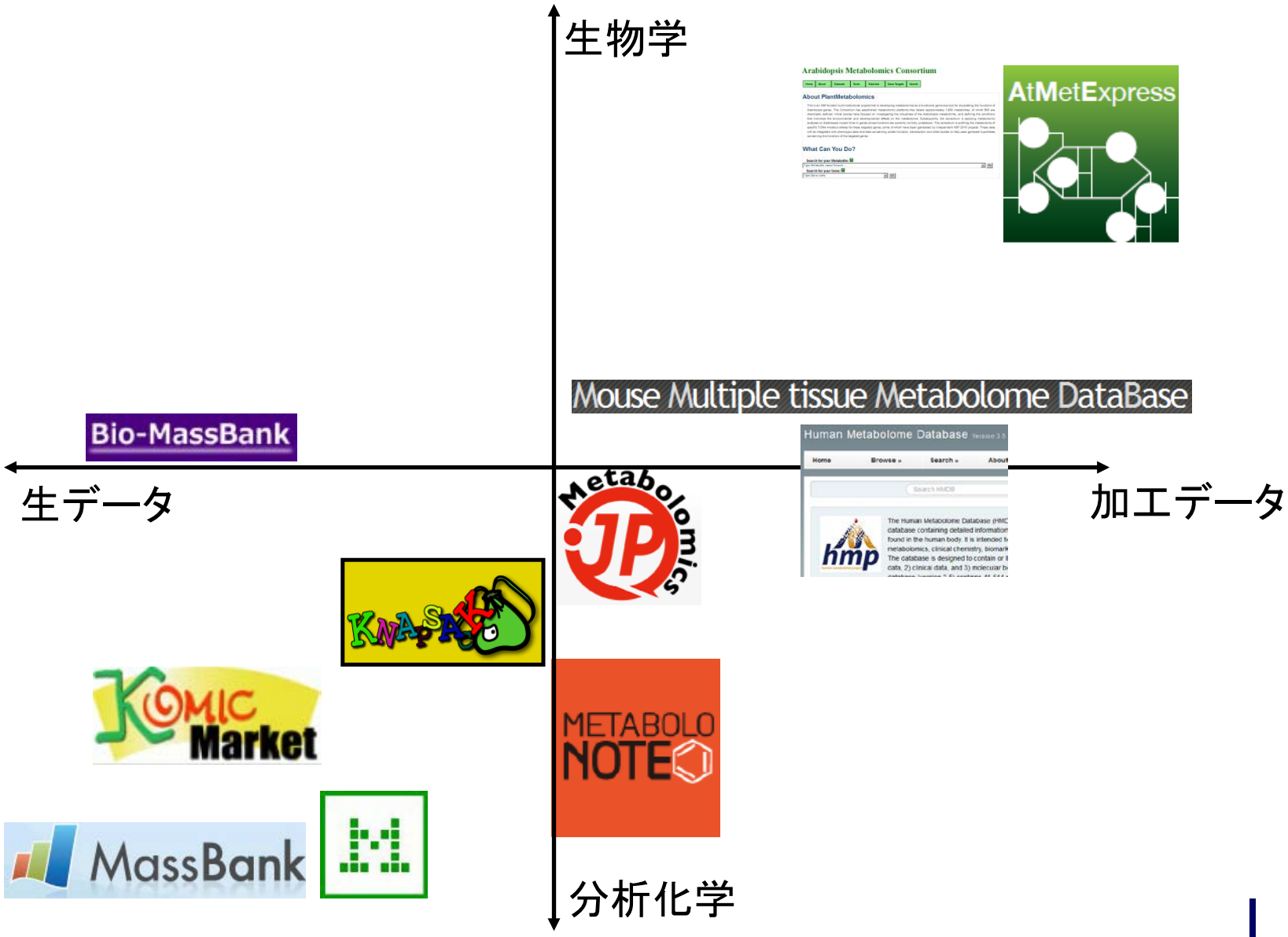


Uploading user's Data



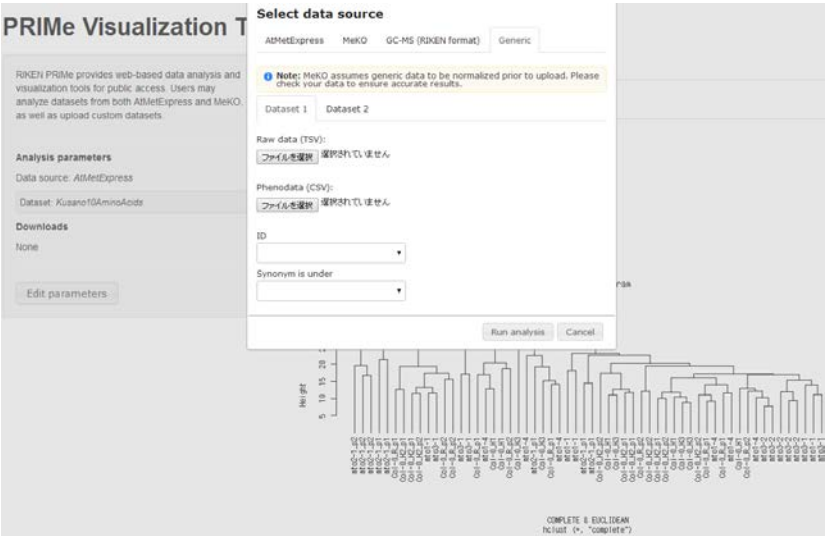
デモ

統合データベースの新たな活用法

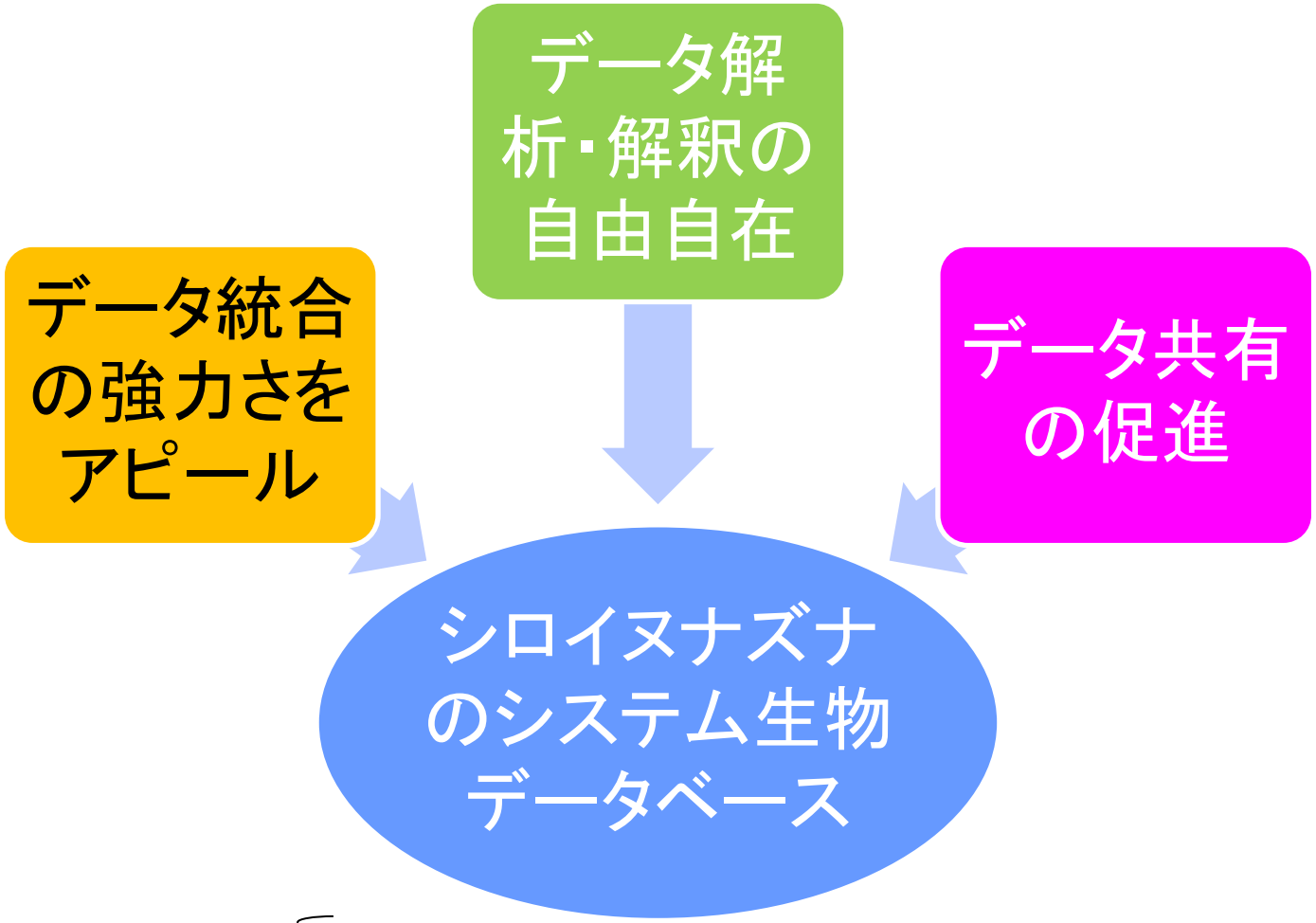


まとめ

- 現状のMSに基づく代謝物プロファイリング→シロイヌナズナの代謝物~1,200個が計測可能
- XMetExpress＝＝汎用的なフレームワーク
- AtMetExpress GUI tool はメタボローム データの再解析を簡便にする



今後の本研究の将来性



- 生物学者が活用できるデータ
- 簡便なデータ共有
- 研究サイクルの加速

謝辞

理化学研究所CSRS

- Kazuki Saito
- Masanori Arita
- Tetsuya Sakurai
- Miyako Kusano
- Yozo Okazaki
- Ryo Nakabayashi
- Akie Mejia
- Makoto Suzuki
- Makoto Kobayashi
- Yutaka Yamada
- Kenji Akiyama

Others

- Redestig Henning