# 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
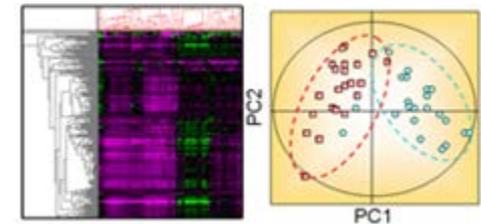
福島　敦史

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

〜5,000 metabolites?

〜4,000-5,000 enzymes

〜28,000 genes

TAIR (http://www.arabidopsis.org/) 調べ
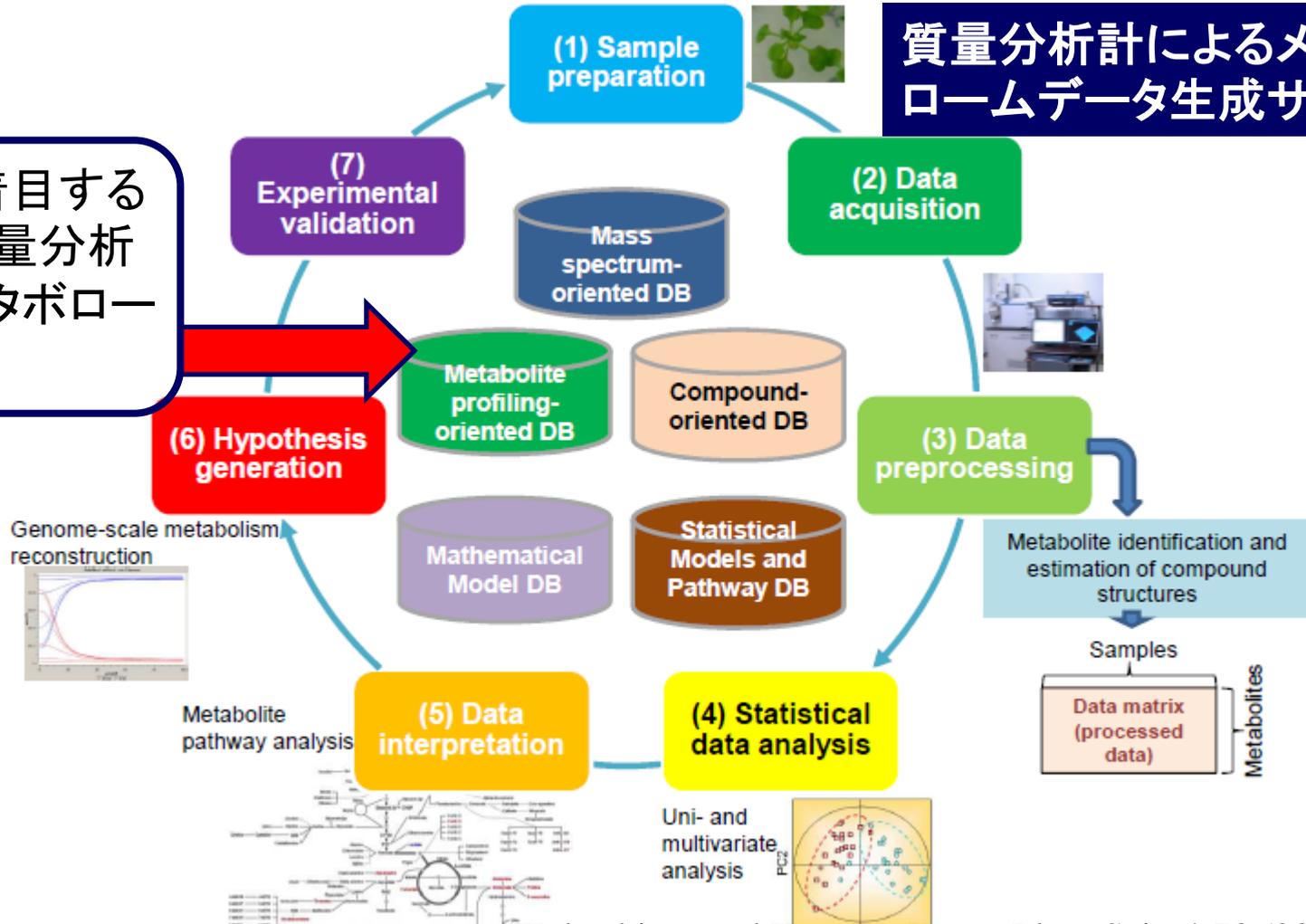
# メタボロミクスは細胞内代謝物の総体を化学分析する学問

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

質量分析計によるメタボロームデータ生成サイクル

本課題で着目するデータ (質量分析計によるメタボロームデータ)



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

3

# 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

~5,000 metabolites?

~4,000-5,000 enzymes

~28,000 genes

246 Metabolites

Flowers (ATME29, 32, 33, and 39)

Early silique
Flower

Matsuda et al. (2009) TPJ　　　Unpublised
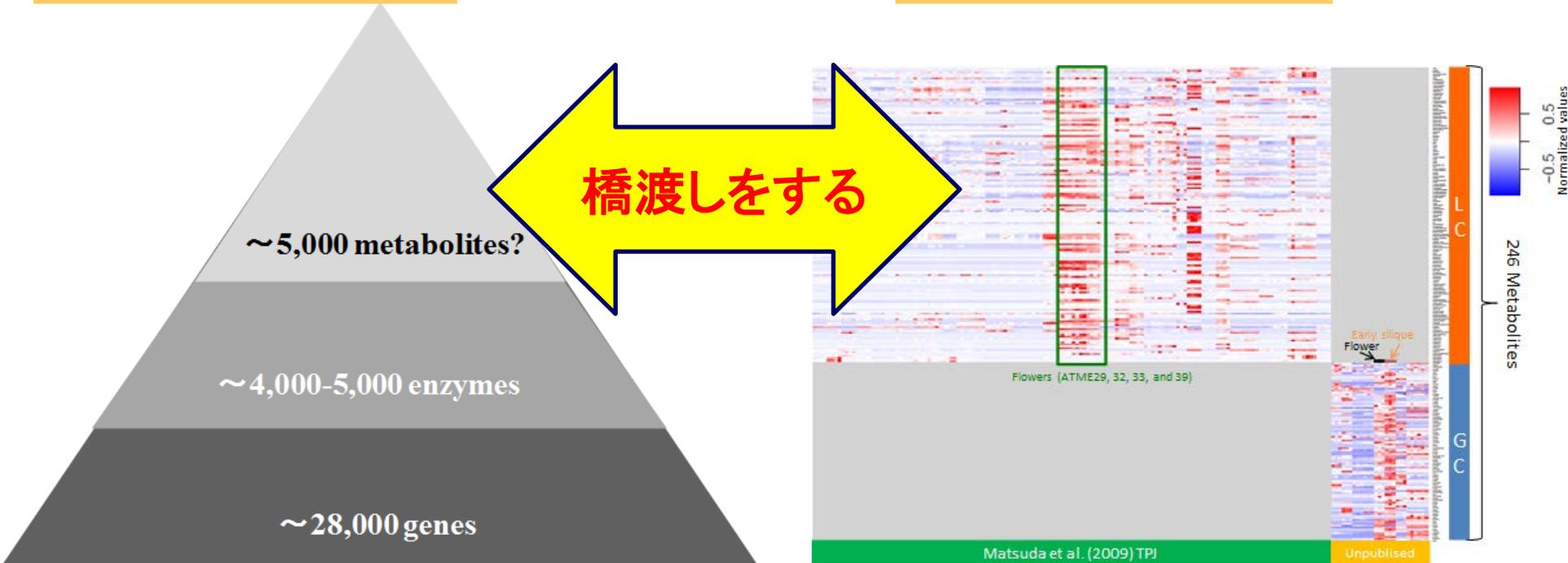
### 答えるべき問い

- モデル植物シロイヌナズナのメタボローム把握－実際にいくつの代謝物を生産するのか？

- 現状の質量分析計による代謝物プロファイリングは、どの程度のカバー率を有するのか？

4

# 研究開発の概要

化合物データセット

代謝物プロファイル測定データ

RIKEN

PlantMetabolomics.org
(737)

14データセット
(11 published ＋
3 unpublished )
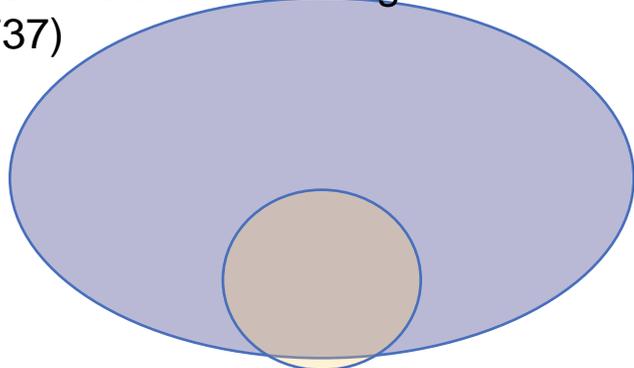
KNApSAcK (625)

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



Normalized values

LC

246 Metabolites

Early silique
Flower

Flowers (ATME29, 32, 33, and 39)

GC

Matsuda et al. (2009) TPJ　　Unpublished



PSC　Discussion　　　　　　　　　　　　Read | View

PSC:Annotation/GC/Kusano07/Col0-1/View

< PSC:Annotation/GC/Kusano07/Col0-1

avg -nan var -nan

| 1046 | 1047 | 1066 | 1096 | 1104 | 1111 | 1124 | 1135 | 1140 | 1170 | 1195 | 1209 | 1229 | 1252 |
|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| PR-MST | Lactate | MST | Alanine | PR-MST | Hydroxylamine | PR-MST | Dihydrouracil | PR-MST | PR-MST | PR-MST | Valine | PR-MST | Urea |

Navigation

Main Page
Recent changes
Random page
Help

metabolites

Flavonoid
Basic metabolites
Crude Drug
Plant taxa

Tweet 0　　Like　Be the first of your friends to like this.

This page was last modified on 17 January 2013, at 13:35.

This page has been accessed 27 times.
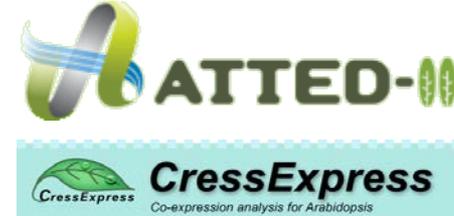
Privacy policy　About Metabolomics.JP　Disclaimers

# 期待される成果

**トランスクリプトームデータ**

GEO Gene Expression Omnibus
ArrayExpress
GeneChip©
tair AtGenExpress JPN
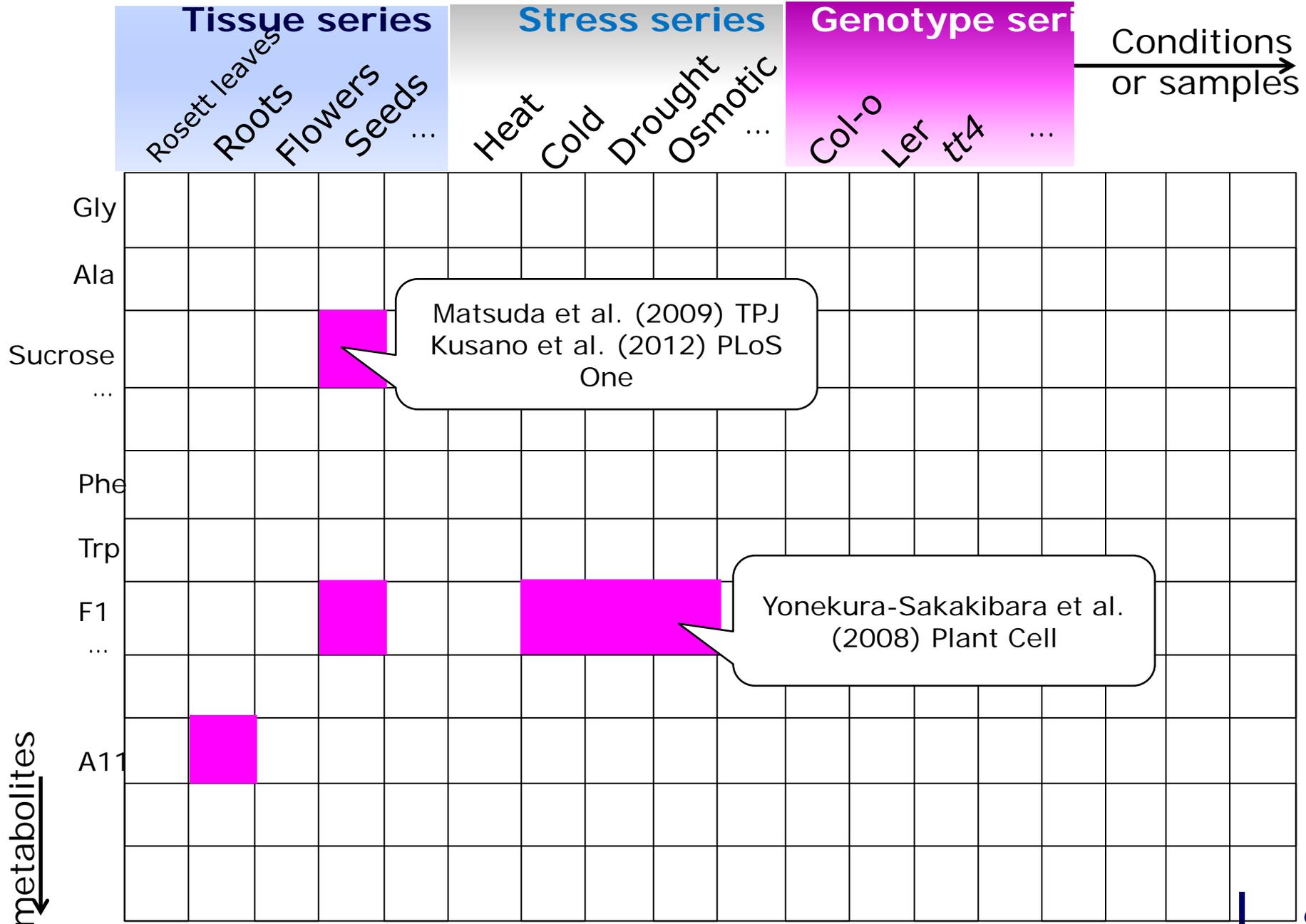
データの
収集・再
解析

**遺伝子機能予測ツール・DBの開発**

ATTED-II
CressExpress
Co-expression analysis for Arabidopsis

遺伝子
共発現
DB

**メタボロームデータ**

PGDB Plant Genome DataBase Japan
MassBank
Bio-MassBank
"KNApSAcK" Family Since 2008.07
Plant Metabolomics Resource
PMN Plant Metabolic Network
PRIMe Platform for RIKEN Metabolomics

データの
収集・再
解析

**代謝物・酵素の多様性解析
代謝経路の制御因子予測ツール
メタボロームインフォマティクスツール
の開発**

AtMetExpress

Flowers (ATME29, 32, 33, and 39)
Matsuda et al. (2009) TPJ
Unpublised

# 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 | |

# 例：AtMetExpress Development (LC & GC)



Flowers (ATME29, 32, 33, and 39)

Early silique
Flower

246 Metabolites

LC
GC

Normalized values

Matsuda et al. (2009) TPJ　　Unpublished
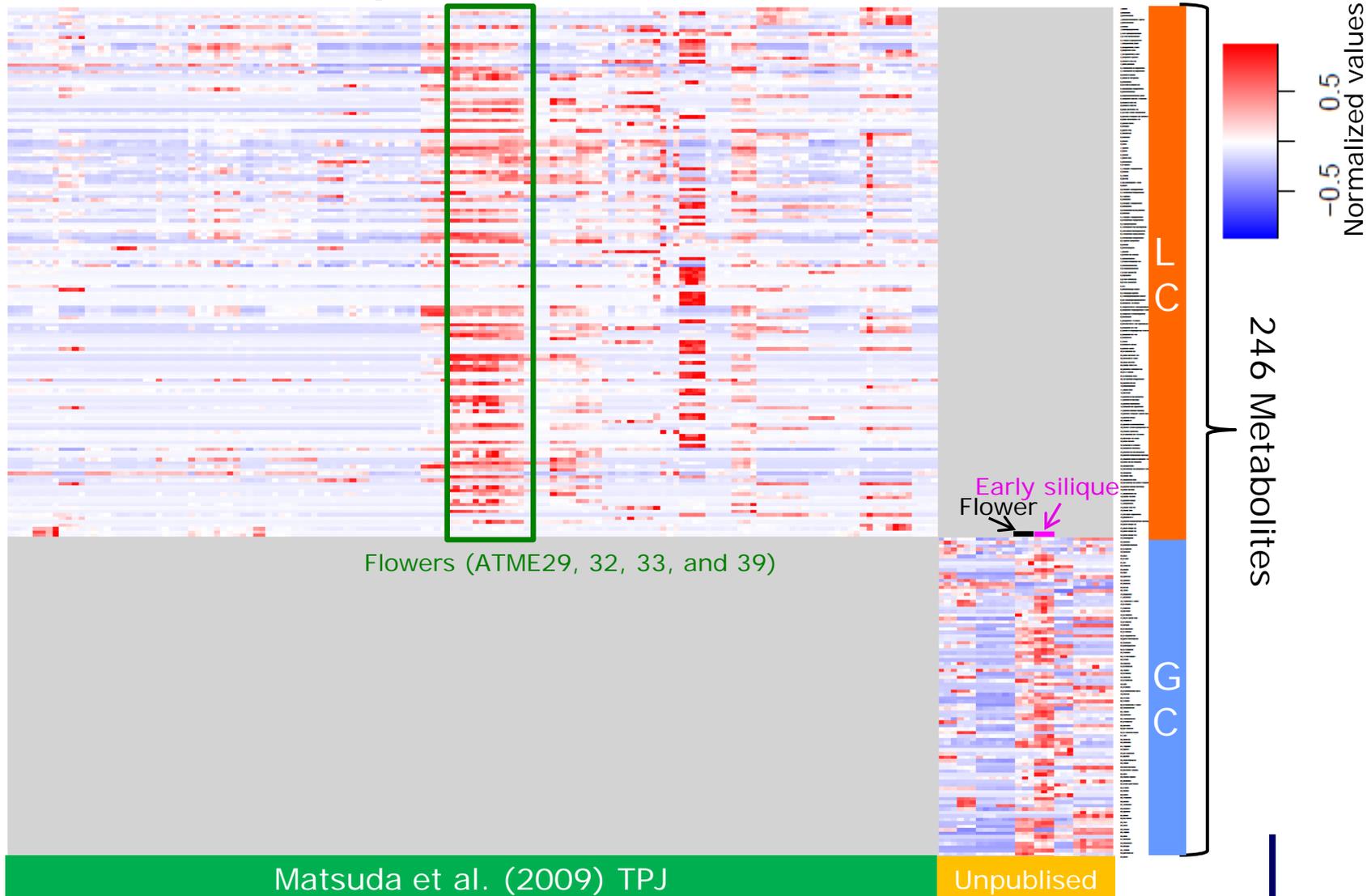
# 例：Metabolite information in Wiki

| IUPAC | "leucine"\|"l-leucine"\|"d-leucine" |
|---|---|
| SMILES | "CC(C)C[C@@H](N)C(O)=O"\|"CC(C)CC(N)C(O)=O" |
| InChl | "InChl=1/C6H13NO2/c1-4(2)3-5(7)6(8)9/h4-5H,3,7H2,1-2H3,(H,8,9)/f/h8H"\|"InChl=1/C6H13NO2/c1-4(2)3-5(7)6(8)9/h4-5H,3,7H2,1-2H3,(H,8,9)/t5-/m0/s1/f/h8H" |
| Kappa-View | "kpc00715" |
| LlipidBank | NA |
| LipidMap | NA |
| ChEBI | "25017"\|"28225" |
| ChemSpider | "5880" |
| MPIMP | "m000025_a129002-101_metb_1291_eittms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1274.1_eistr_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a118001-101_metb_1151.1_eigtms_leucine, dl- (1tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1292.9_eittms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1275.4_eimor_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a118001-101_metb_1157.6_eistr_leucine, dl- (1tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1279.9_eiqtms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1293.5_eittms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1267.3_eigtms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1280.9_eiqtms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1278.2_eistr_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_301020_eins_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1295.3_eittms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1276.8_eiqtms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1279.8_eiqtms_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_305450_eiboel_leucine, dl- (2tms)"\|"m000025_a118001-101_metb_1162_eistr_leucine, dl- (1tms)"\|"m000025_a129002-101_metb_1276.5_eiqtms_leucine, dl- (2tms)" |
| PubChem SID | "47205735"\|"4727" |
| AraCyc | LEU |

**Related Dataset**

| Dataset ID | Short description |
|---|---|
| AtMet1 | Kusano et al. (2007) BMC Syst Biol |
| AtMet2 | Matsuda et al. (2009) Plant J |

**Other links**

| Database name | Accession |
|---|---|
| MetaboLights | MTBLS40 |
| MetabolomeExpress | TBA |
| MetaboloNote | TBA |

Tweet 0　　Like Sign Up to see what your friends like.

# 例：Meta-analysis tools in AtMetExpress: HCA

# 例：Meta-analysis tools in AtMetExpress: a heatmap

# 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が計測可能

- AtMetExpress GUI tool はメタボロームデータのメタアナリシスを簡便にする