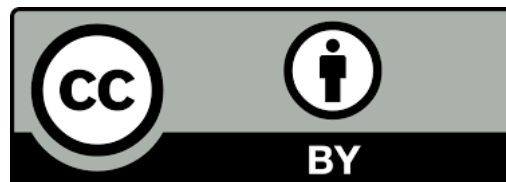


# メタボロームからみる 物質合成



## Poster 28

有田正規<sup>1</sup>、金谷重彦<sup>2</sup>、  
櫻井望<sup>1</sup>、平川英樹<sup>3</sup>、福島敦史<sup>4</sup>

(1. 遺伝研 2. 奈良先端大  
3. かずさDNA研 4. 理研CSRS)

# ゲノムマイニング

Nature “the human genome” Feb 2001

Analysis | 15 February 2001

[Mining the draft human genome](#)

Ewan Birney, Alex Bateman [...] & Tim J. Hubbard



“In this issue, ..., nine data-mining papers that interrogate the genome ...”

## Genome Mining

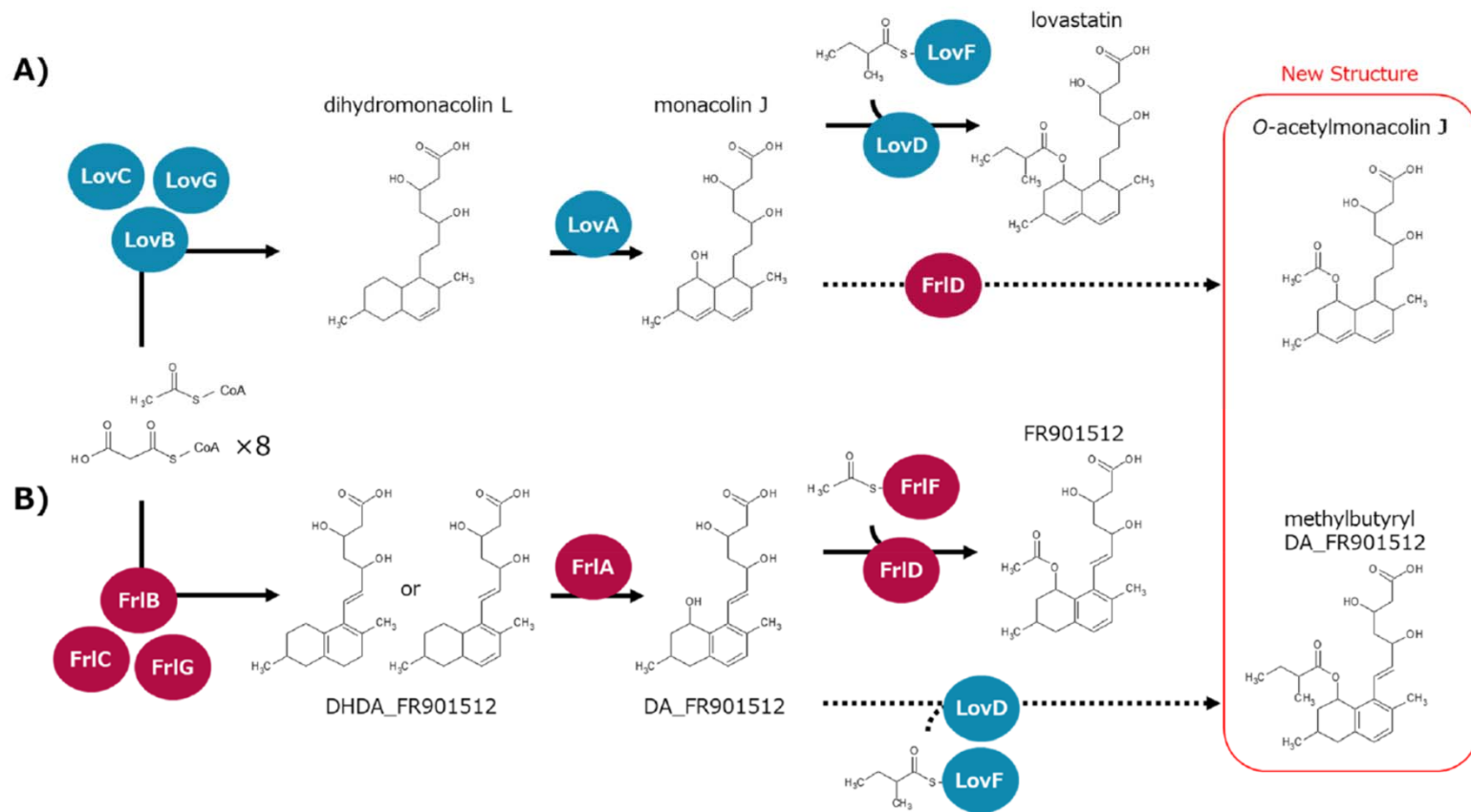


Genome mining involves the identification of previously uncharacterized natural product biosynthetic gene clusters within the genomes of sequenced organisms, sequence analysis of the enzymes encoded by these gene clusters, and the experimental identification of the products of the gene clusters.

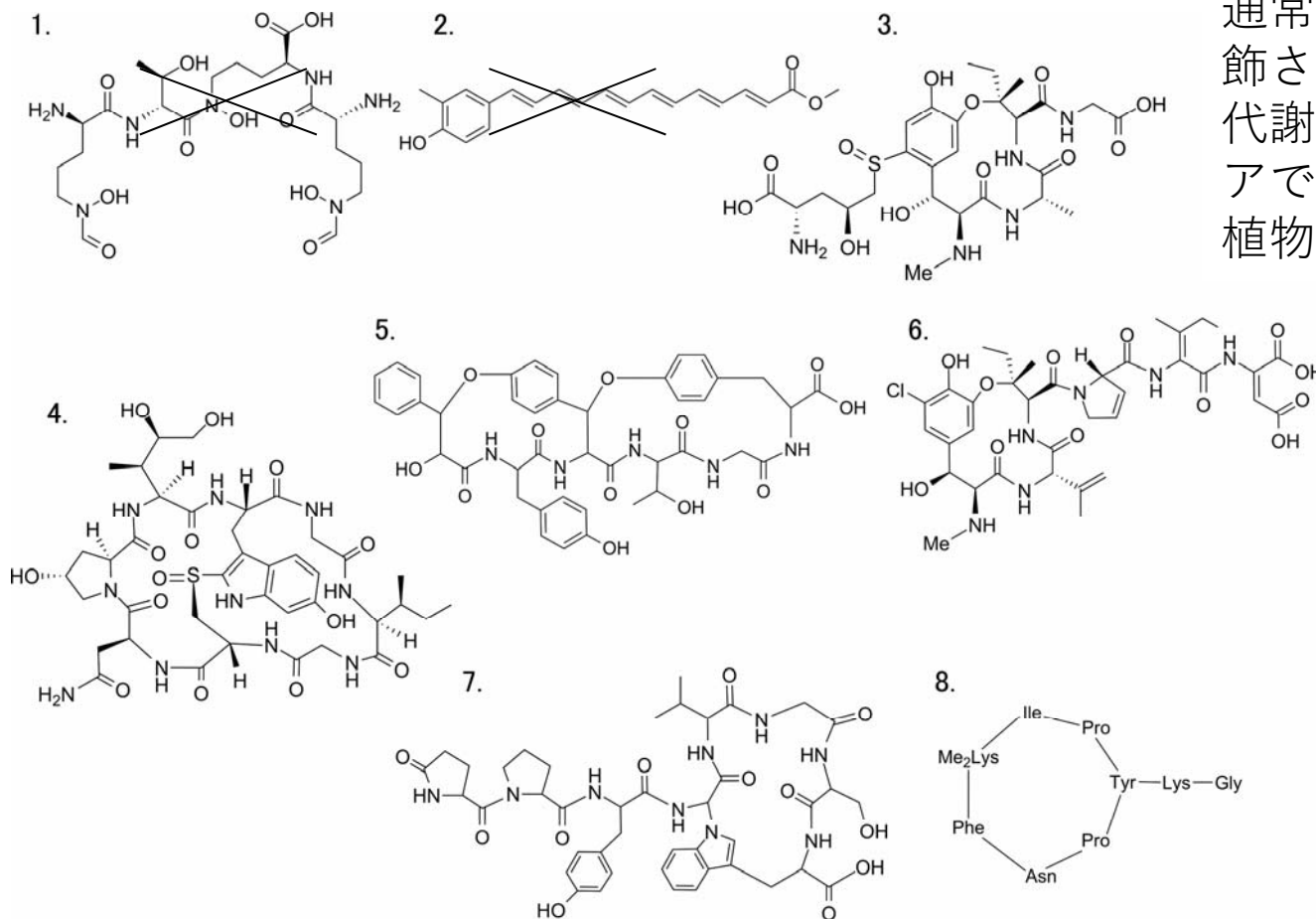
From: [Comprehensive Natural Products II, 2010](#)

# 合成生物学がおもしろい

いわゆる PKS, NRPS が主体



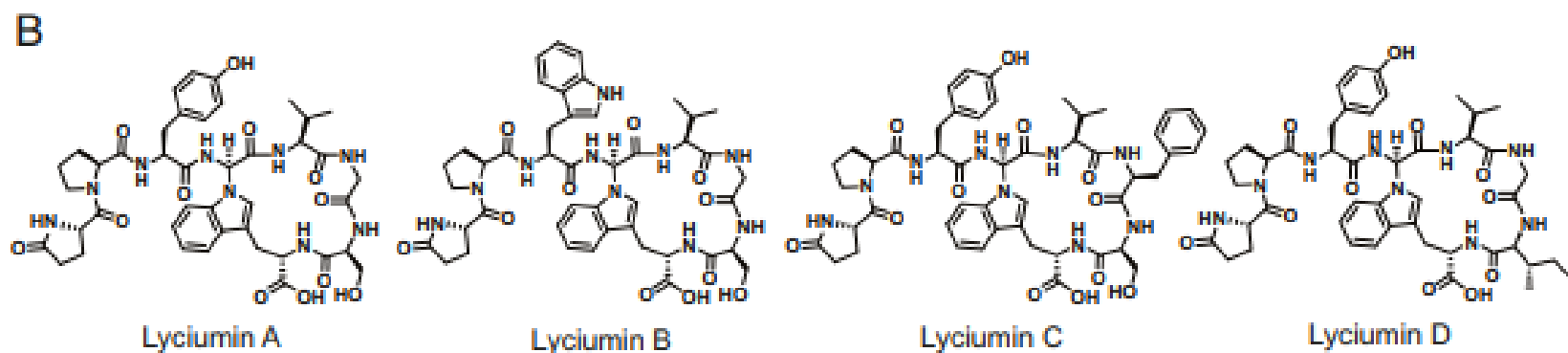
# RiPP: ribosomally synthesized and post-translationally modified peptides



通常のペプチドが修飾されてできる二次代謝物群。バクテリアで知られ、菌類・植物にも存在

1. coelichelin; 3. ustiloxin B; 4. α-amanitin; 5. asperipin-2a; 6. phomopsin A; 7. lyciumin A; 8. epichloëcyclin

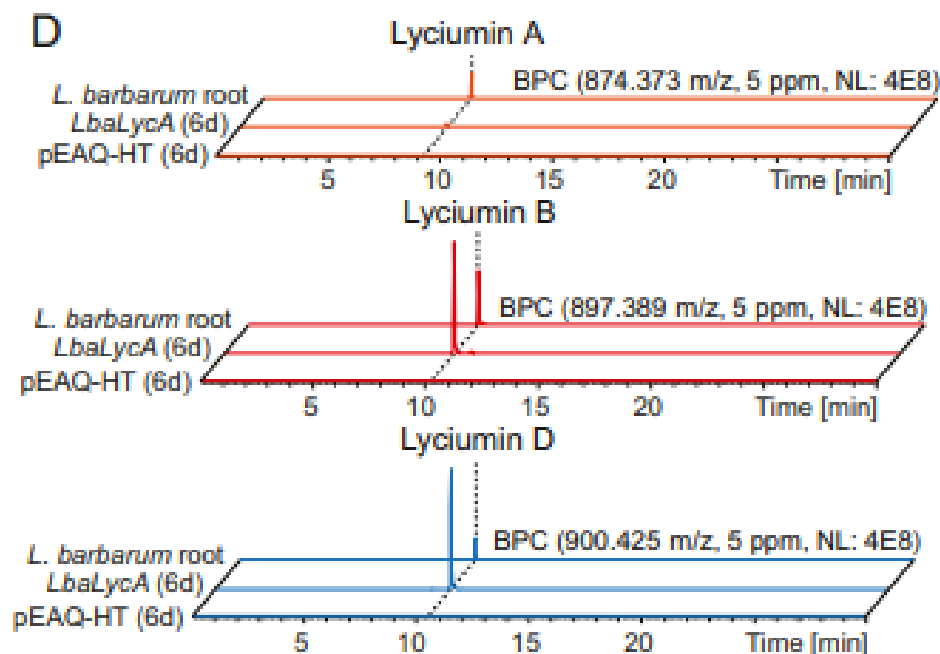
# 植物ゲノムマイニング



**C** >LbaLycA

```

MELHHHYFFILLSLAFIASHAANLSPEVYWKVKLPNTPMPRP
IKDALHYSEASEGDVHKLRQPWGVGSWYQAANEGDIKKLRQP
YGVGIWYQAANEGDVKKLRQPWGVGSWYQAANEGDVKKLRQP
WGVGSWYQAANEGDVKKLRQPWGVGSWYQAANEGDANEGDVK
KLRQPYGVGIWYQAANEGDVKKLRQPWGVGSWYQAANEGDVK
KLRQPWGVGSWYQAANEGDVKKLHQPWGVGSWYQAANEGDVK
KLPQPWGVGSWYQAANEGDVKKLRQPYGVGIWYEAANEGQVK
KLRQPYGVGSWYNTATKKDVNENLPVTPYFFETDLHQGKKMN
LPSLKNYNPAPILPRKVADSIPFSSDKIEEILKHFSIDKDSE
GAKMIKKTIKMCEEQAGNGEKKYCATSLESMVDFTSSYLGTN
NIIALSTLVEKETPEVQIYTIEEVKEKANGKGVICHKVAYPY
AIHYCHSVGSTRTFMVSMVGSDGTKVNAVSECHEDTAPMNPK
ALPFQLLNVKPGDKPICHFILDDQIALVPSQDATQVSEN
    
```



データが蓄積され、自由にマイニングできる時代に

# メタボロームマイニング

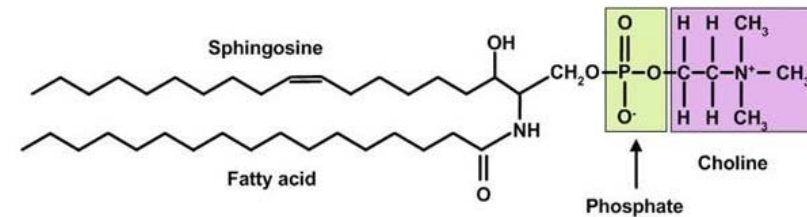
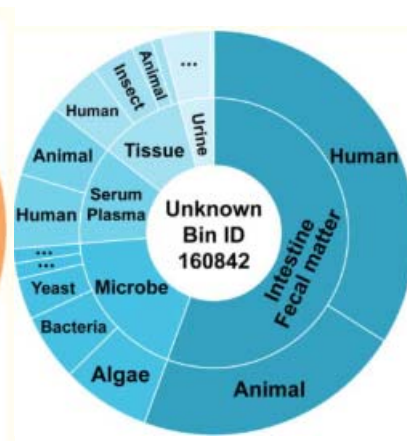
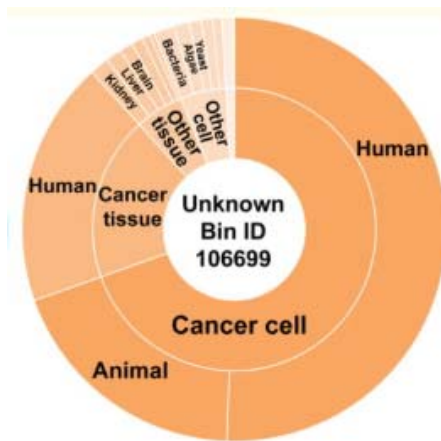
未知の天然物は、普通の生物にもまだまだある

Epimetabolite ... non-mainstream metabolites with biological activities

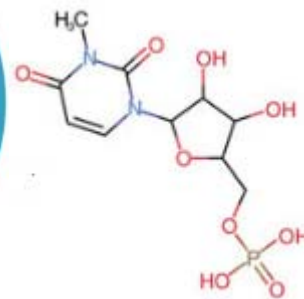
New class of lipids ...  
acylsphingomyelin,  
acyl-hexosyl ceramide

*N*-methyl UMP  
In cancer cells

*N*-methyl alanine  
in fecal matters



Sphingolipids: Sphingomyelin



# マイニングのプロセス

## ゲノム

1. 配列リポジトリより、PKS等のグルーピング (DDBJ, RefSeq etc.)
2. HMMによる機能推定 (dedicated tools)
3. 構造推定、メタボロームの援用
4. 遺伝子KO等による検証 (experimental)

## メタボローム

1. リポジトリより、未知ピークのグルーピング (BinBase, etc.)
2. 組成式の同定 (dedicated tools)
3. MS/MSスペクトルによる構造推定 (ネットワーク解析)
4. 標品による検証 (experimental)



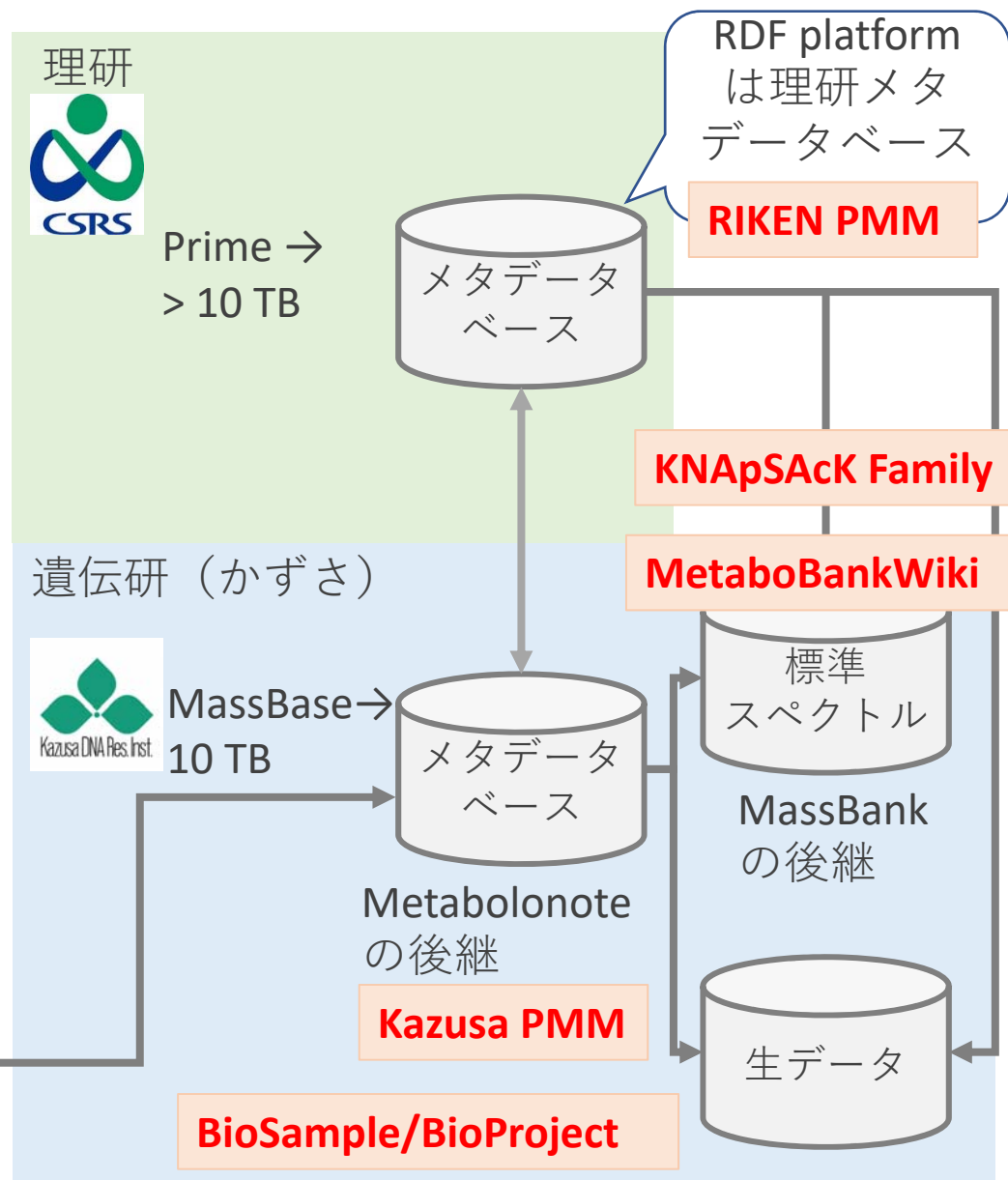


# MetaboBank 全体構想 (未公開)

欧州のMetaboLights,  
米国のMetabolomics  
Workbenchに並ぶ、生デー  
タのリポジトリ。  
DDBJサービスとして開設。  
令和二年度には一般から  
投稿を受付。

データはOmics  
DI (omicsdi.org)  
および metabolomeXchange  
登録。

ユーザー



# 理研PMMに集約



Database

4

## plantMetabolomics

plantMetabolomics

metabobank.riken.jp

46プロジェクト  
54の生データセット  
が検索可能 (GC/MS)

かずさDNA研のデータも  
今年はこちらに統合

生データは、かずさDNA研  
や理研のサーバにリンク

このデータベースの中のクラス



ダウンロード



SPARQL



足あと



問い合わせ

- プロジェクト
- 実験
- 質量分析スペクトルファイル
- 測定条件
- データセット
- データ解析
- サンプル
- サンプル調製
- 生データファイルリスト
- その他のクラス

### 統計情報

統計情報	
トリプル数	218967
クラス数	65
プロパティ数	144
クラスごとのインスタンス数	
プロジェクト	46
実験	74
質量分析スペクトルファイル	1396
測定条件	61
データセット	0
データ解析	51
サンプル	5906
サンプル調製	106
生データファイルリスト	54
組織	31
時間	12
実験デザイン	64
測定	6687
測定の種類	1
測定プラットフォーム	3

# まとめ

- メタボロームマイニングが可能な時代
- オミックス統合はまだ難しい

Open Access Perspective

## **Systems Biology and Multi-Omics Integration: Viewpoints from the Metabolomics Research Community**

by Farhana R. Pinu <sup>1,\*</sup> , David J. Beale <sup>2</sup> , Amy M. Paten <sup>3</sup> , Konstantinos Kouremenos <sup>4,5</sup>,  
Sanjay Swarup <sup>6</sup>, Horst J. Schirra <sup>7</sup>  and David Wishart <sup>8,9</sup> 

植物データで遊びたい人はぜひ PMM, Plasmaへ  
[metabobank.riken.jp](http://metabobank.riken.jp)  
[plasma.psc.riken.jp](http://plasma.psc.riken.jp)