

研究開発実施報告

□概要

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
開発対象データベースの名称(URL)	メタボバンク (https://mb.ddbj.nig.ac.jp)
研究代表者氏名	有田 正規
所属・役職	情報システム研究機構 国立遺伝学研究所 教授 (2020年3月時点)

□目次

§1. 研究実施体制.....	2	② 招待講演.....	7
§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等.....	3	③ 口頭講演.....	8
(1) データベース一覧.....	3	④ ポスター発表.....	9
(2) ツール等一覧.....	3	(4) 知的財産権の出願.....	9
§3. 実施内容.....	4	(5) 受賞・報道等.....	9
(1) 本年度の研究開発計画と達成目標.....	4	① 受賞.....	9
(2) 進捗状況.....	4	② メディア報道.....	9
§4. 成果発表等.....	6	③ その他の成果発表.....	9
(1) 原著論文発表.....	6	§5. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)	10
① 論文数概要.....	6	1. 進捗ミーティング.....	10
② 論文詳細情報.....	6	2. 主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリー	
(2) その他の著作物(総説、書籍など).....	7	チ活動等.....	10
(3) 国際学会および国内学会発表.....	7		
① 概要.....	7		

§1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者または主たる共同研究者氏名	所属機関・役職名	研究題目
遺伝研	有田 正規	情報システム研究機構 国立遺伝学研究所・教授	メタボローム・リポジトリの開設と運用
理研	福島 敦史	理化学研究所環境資源科学研究センター・研究員	植物データアノテーション高度化
かずさ	平川 英樹	かずさDNA研究所・ゲノム情報解析施設・施設長	食品データアノテーション高度化
奈良先	金谷 重彦	奈良先端大学院大学 情報科学領域・教授	生理活性オントロジーの構築

§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等

(1) データベース一覧

【主なデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	MetaboBank	メタボバンク	http://mb.ddbj.nig.ac.jp (10月稼働予定)

【その他のデータベース】

No.	名称	別称・略称	URL
1	KNApSack	ナップザック	kanaya.naist.jp/KNApSack/
2	Metabonote	メタボノート	http://metabonote.kazusa.or.jp/
3	RIKEN Plant Metabolomics MetaDatabase (RIKEN PMM)	理研植物メタボロミクスメタデータベース	http://metabobank.riken.jp/

(2) ツール等一覧

No.	名称	別称・略称	URL
1	MS-DIAL MS-FINDER		http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/
2	PowerGetBatch		http://www.kazusa.or.jp/komics/software/PowerGetBatch

§3. 実施内容

(1) 本年度の研究開発計画と達成目標

遺伝研

MetaboBank データのバージョン化とリポジトリ開設、Metabolonote 等を MetaboBank ファミリーとして統合

- ・ 検索用スペクトルライブラリ(二次データ)の作成
- ・ 検索用ライブラリを作成し、頒布できるソフトウェア・パイプラインの構築
- ・ かずさと理研 CSRS の実測データをリポジトリに移行。遺伝研でサーバ構築。

変更点

当初の達成目標は遺伝研において MetaboBank サーバを稼働させることであったが、実現できていない。メタデータ情報の一部に遺伝研 DDBJ で開発する BioProject, BioSample データベースを利用するため、ログインアカウント情報を DDBJ 側と共有する必要が生じた。その開発は DDBJ 側と足並みを揃える必要があり、Metabo Bank のみ独立してリリースすることが出来ない。現在、統合アカウントシステムを(本取り組みとは別予算で)開発しており、MetaboBank サーバの構築と公開は 2020 年 10 月(トーゴの日)を予定している。

当初の達成目標は遺伝研において検索用スペクトルやメタ代謝マップを掲載した Wiki サーバを立ち上げることであったが、実現できていない。Wiki サーバに掲載予定の理論スペクトルやスペクトルライブラリは作成したものの、それらをどのように掲載するか方針が立っていない。また質量分析学会に譲渡した MassBank サーバとの役割分担も学会側と相談できていないため、MetaboBank サーバに合わせて情報 Wiki として公開するのがよいか検討中である。

かずさ

植物二次代謝物のスペクトル・ライブラリ作成

- ・ 保有するメタボロームデータ 104 件を RDF 化し、MetaboBank より公開。
- ・ 公共リポジトリ MetaboBank に、コンテンツを登録。
- ・ 。最新の解析ツールを用いてメタボローム実験データの再解析を実施。

理研

MetaboBank における GC/MS セクションの開始

- ・ 保有する公開可能なメタボローム測定データを精査して、MetaboBank より公開。
- ・ 公共リポジトリ MetaboBank に、実測データのコンテンツを登録。
- ・ 公共リポジトリ MetaboBank のデータ解析ソフトウェアとして MS-DIAL 等をアップデート。

奈良先

メタ代謝マップの MassBank wiki 連携

- ・ 100 種の生物に焦点を絞り、各生物に対し 100 種以上の代謝物を KNApSAcK Core へ蓄積。
- ・ 硫黄を含む二次代謝経路情報、テルペン、フラボノイド等代謝経路情報の蓄積。

(2) 進捗状況

遺伝研

マススペクトルからの構造推定に役立つライブラリ作成を実施した。頒布できるライブラリとして以下を作成し、MetaboLights リポジトリや理研 DropMet サイトより公開した。

- ・ All-Ions-Fragmentation (AIF)測定用のスペクトルおよび保持時間ライブラリ 140 化合物
- ・ リピドミクス用のスペクトルおよび保持時間ライブラリ

またリピドミクスにおける化合物名表記や、同定精度の信頼性に関するガイドラインを作成し、国際コンソーシア

ムの形で提言を発表した。当該コンソーシアムでは、ヒト脂質分布の標準値の策定に協力した。

MetaboBank サービスに向けたメタデータ入力システム(エクセル利用)を作成し、メタデータの記載項目と記載方法を開発チーム内で検討、改善した。植物のみならず様々なデータを BioSample/BioProject と合わせた形で登録できるように、理研およびかずさチームと協力してメタデータ設計をおこなった。

理研

昨年度に引き続き、植物の GC/MS 測定データを中心としてメタデータ化およびデータ登録、公開を行った。ウェブ国際標準規格に沿った RDF 形式のメタデータと共に測定データ(生データおよび解析済みデータ)は理研植物メタボロミクスメタデータベース(<http://metabobank.riken.jp/>)に格納し、そのウェブサイトは開発中である。本年度期間中に 29 件のメタボロームデータセット(理研 CSRS の DropMet データ含)を公開した(計 53 データセットが公開、2020 年 6 月調べ)。さらに、かずさ DNA 研究所にて RDF 化した Metabolonote データセットのうち植物種データ 80 件を試験的に理研植物メタボロミクスメタデータベースから公開した。これら理研 CSRS とかずさ DNA 研究所で蓄積してきたメタボロームデータ公開への取り組みは、遺伝研で構築されるメタボロームデータ公共リポジトリ(MetaboBank)において初期データとしての役割を担う。並行して、アップデートされた MS-DIAL と他解析ツールによる登録済 GC/MS データの再解析によって、生体サンプルより抽出したマススペクトルデータの整理(スペクトル・ライブラリの構築)や代謝物プロファイル結果について過去データとの比較を進めている。

かずさ

RDF 化したメタデータのうち植物由来のメタデータはデータ連携協定により理化学研究所環境資源科学研究センターの RIKEN Plant Metabolome MetaDatabase(<http://metabobank.riken.jp/pmm/db/plantMetabolomics>)から公開されている。また、かずさ DNA 研究所から公開している MassBase (<http://webs2.kazusa.or.jp/massbase/>)内のメタボロームデータに対して最新の解析ツールを用いた再解析の準備を始めている。また、かずさ DNA 研究所において所有しているメタボローム実験データのうちメタデータが作成されていないものについては作成し RDF 化を進めている。

奈良先

昨年度においてアルカロイド生合成経路の実装を行い、プロトタイプを公開した(<http://www.knapsackfamily.com/CobWeb/top.php>)。KNApSAcK family にはアルカロイド化合物が 18,000 種登録されている。その中で、代謝経路が報告されている化合物は 600 種程度である。そこで、化合物における原子の結合関係にもとづいた、アルカロイド生合成出発物質の予測法を研究開発し、予測結果を www.knapsackfamily.com/knapsack_core/top.php より公開した。

また、メタボローム研究の論文誌を詳細に調査すると、一つの論文当たりの対象とする代謝物はおおよそ 50 前後である。そこで、これらの研究を支援することを目標に、ヒト、微生物、植物などの 100 種の生物に焦点を絞り、それぞれの生物に対して、少なくとも 100 種の代謝物を蓄積すべく調査を進めた。また、アルカロイドの外に硫黄を含む二次代謝経路情報、テルペン、フラボノイド、フェニルプロパノイドに関わる代謝経路調査を進めた。

§4. 成果発表等

(1) 原著論文発表

① 論文数概要

種別	国内外	件数
発行済論文	国内(和文)	1 件
	国際(欧文)	8 件
未発行論文 (accepted, in press 等)	国内(和文)	0 件
	国際(欧文)	0 件

② 論文詳細情報

1. Katsuya Ohbuchi, Nozomu Sakurai, Hiroyuki Kitagawa, Masaru Sato, Hideyuki Suzuki, Hirotaka Kushida, Akinori Nishi, Masahiro Yamamoto, Kazuhiro Hanazaki, Masanori Arita, "Differential annotation of converted metabolites (DAC-Met): Exploration of Maoto (Ma-huang-tang)-derived metabolites in plasma using high-resolution mass spectrometry", *Metabolomics*, vol. 16, No. 5, pp. 63, 2020 (DOI: 10.1007/s11306-020-01681-3).
2. Tada I, Tsugawa H, Meister I, Zhang P, Shu R, Katsumi R, Wheelock CE, Arita M, Chaleckis R, "Creating a Reliable Mass Spectral-Retention Time Library for All Ion Fragmentation-Based Metabolomics.", *Metabolites*, vol. 9, No. 11, pp. 251, 2019 (DOI: 10.3390/metabo9110251)
3. Lipidomics Standards Initiative Consortium, "Lipidomics needs more standardization", *Nature Metabolism*. vol. 1, No. 1, pp. 745-747, (DOI: 10.1038/s42255-019-0094-z).
4. Tsugawa H, Satoh A, Uchino H, Cajka T, Arita M, Arita M, "Mass Spectrometry Data Repository Enhances Novel Metabolite Discoveries with Advances in Computational Metabolomics." *Metabolites*, vol. 9, No. 6, pp. 119, 2019. (DOI: 10.3390/metabo9060119).
5. Tsugawa H, Nakabayashi R, Mori T, Yamada Y, Takahashi M, Rai A, Sugiyama R, Yamamoto H, Nakaya T, Yamazaki M, Kooke R, Bac-Molenaar JA, Oztolan-Erol N, Keurentjes JJB, Arita M, Saito K, "A cheminformatics approach to characterize metabolomes in stable-isotope-labeled organisms.", *Nature methods*, vol. 16, No. 4, pp. 295-298, 2019. (DOI: 10.1038/s41592-019-0358-2).
6. Vos RA, Katayama T, Mishima H, Kawano S, Kawashima S, Kim JD, Moriya Y, Tokimatsu T, Yamaguchi A, Yamamoto Y, Wu H, Amstutz P, Antezana E, Aoki NP, Arakawa K, Bolleman JT, Bolton E, Bonnal RJP, Bono H, Burger K, Chiba H, Cohen KB, Deutsch EW, Fernández-Breis JT, Fu G, Fujisawa T, Fukushima A, García A, Goto N, Groza T, Hercus C, Hoehndorf R, Itaya K, Juty N, Kawashima T, Kim JH, Kinjo AR, Kotera M, Kozaki K, Kumagai S, Kushida T, Lütteke T, Matsubara M, Miyamoto J, Mohsen A, Mori H, Naito Y, Nakazato T, Nguyen-Xuan J, Nishida K, Nishida N, Nishide H, Ogishima S, Ohta T, Okuda S, Paten B, Perret JL, Prathipati P, Prins P, Queralt-Rosinach N, Shinmachi D, Suzuki S, Tabata T, Takatsuki T, Taylor K, Thompson M, Uchiyama I, Vieira B, Wei CH, Wilkinson M, Yamada I, Yamanaka R, Yoshitake K, Yoshizawa A C, Dumontier M, Kosaki K, Takagi T, "BioHackathon 2015: Semantics of data for life sciences and reproducible research", *F1000 Research*, vol. 9, No. 1, pp. 136, 2020, (DOI: 10.12688/f1000research.18236.1).
7. Fukushima A, Kuroha T, Nagai K, Hattori Y, Kobayashi M, Nishizawa T, Kojima M, Utsumi Y, Oikawa A, Seki M, Sakakibara H, Saito K, Ashikari M, Kusano M, "Metabolite and Phytohormone Profiling Illustrates Metabolic Reprogramming as an Escape Strategy of Deepwater Rice during Partially Submerged StressMetabolites", *Metabolites*, vol. 10, No. 2, pp. 68, 2020 (DOI: 10.3390/metabo10020068).
8. Vu NT, Kamiya K, Fukushima A, Hao S, Ning W, Ariizumi T, Ezura H, Kusano M, "Comparative co-expression network analysis extracts the SHSP70 gene affecting to shoot elongation of t

omato", Plant Biotechnology (Tokyo), vol. 36, No. 3, pp. 143-153, 2019. (DOI: 10.5511/plantbiotechnology.19.0603a).

9. 桑畑 和明, 佐久間 柚衣, 川島 雪生, 福島 敦史, 長嶋 雲兵, 草野 都, 立川 仁典, "量子化学計算による植物が生産する UV-B 防御物質の物性値予測", Journal of Computer Chemistry, Japan, vol. 18, No. 2, pp.109-114, 2019. (DOI: なし).

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

該当なし

(3) 国際学会および国内学会発表

① 概要

種別	国内外	件数
招待講演	国内	13 件
	国際	5 件
口頭発表	国内	3 件
	国際	3 件
ポスター発表	国内	5 件
	国際	3 件

② 招待講演

〈国内〉

1. 福島敦史, "理研植物メタボロームメタデータベースの開発", 日本バイオインフォマティクス学会 2019 年年会 第 8 回生命医薬情報学連合大会 IIBMP2019 BoF セッション「質量分析データベース・リポジトリの最前線」, 東京, 日本, 2019 年 9 月 9 日
2. 福島 敦史「RIKEN Plant Metabolome MetaDatabase の開発」日本農芸化学会 2020 年度大会シンポジウム「精密な食機能デザイン研究を切り拓く先端オミクスソリューション」, 福岡, 日本, 2020 年 3 月 27 日 uk
3. 有田 正規「バイオインフォマティクスが推し進めるバイオの世界」バイオインフォマティクスフォーラム, 8/24, 那覇, 2019
4. Masanori Arita "Repository and Academic Journals: the challenge of MetaboBank for data reuse", 京都生体質量分析研究会シンポジウム, 02/19, 2020
5. 櫻井 望「メタボローム解析の紹介」臨海ハッカソン DDBJing, 6/11, 隠岐, 2019
6. 櫻井 望「ノンターゲットメタボローム解析のマススペクトルデータ」第 46 回 BMS コンファレンス, 7/8, 札幌, 2019
7. 櫻井 望「メタボロームデータベースのこれまでとこれから」第 46 回 BMS コンファレンス, 7/10, 札幌, 2019
8. 櫻井 望「公共メタボロームデータレポジトリ MetaboBank の開発」IIBMP2019 BoF セッション「質量分析データベース・リポジトリの最前線」, 9/9, 東京, 2019
9. 櫻井 望「有用成分探索のための未知成分リファレンス構築の重要性～食品メタボロームレポジトリを通じて～」2019 年度第一回脂質駆動学術産業創生研究部会, 2/7, 京都, 2020
10. Nozomu Sakurai, Kunihiro Suda "Food Metabolome Repository: a reference of metabolite peaks for discovery and utilization of unknown chemicals" The 4th KBMSS Symposium, Kyoto, Japan, February 19, 2020
11. Nozomu Sakurai "Construction of a reference to unknown metabolites for the discovery of unused plant derived specialized metabolites" JSPF Symposium 13 "New Trends in Plant Che

mical Research by the Interconnection between Chemical Biology and Metabolite Chemistry”, Osaka, Japan, March 20, 2020

12. 櫻井 望, 秋元 奈弓「新規フラボノイドを探索する FlavonoidSearch ツール」日本農芸化学会 2020 年度大会シンポジウム, 3/27, 福岡, 2020
13. 平川英樹、染色体レベルでの植物ゲノム配列の解読およびデータベース構築、国立遺伝学研究所、2019 年 9 月 2 日、第 2 回植物インフォマティクス研究会

〈国際〉

1. Arita M "Cheminformatics for Predicting Structures from Mass Spectra" 1st Annual Conference of Chinese Society of Metabolomics (plenary), Shanghai, China, April 20 (19-21), 2019
2. Arita M "Data sharing and the power of omics integration" 6th Global Forum of Leaders for Agricultural Science and Technology (GLAST), Chengdu, China, Nov 12, 2019
3. Nozomu Sakurai "Construction of a metabolome database for uncovering the chemical world in foods", International Symposium on a New Era in Food Science and Technology 2019, Gifu, Japan, October 9, 2019
4. Nozomu Sakurai, Nayumi Akimoto "Discovery of novel flavonoids in nature by metabolome analyses and the FlavonoidSearch system" The 9th International Conference on Polyphenols and Health, Kobe, Japan, November 29, 2019
5. Hideki Hirakawa "Genome assembly of crops in Kazusa DNA Research Institute", Asia-Pacific Agrobiological Genome Symposium 2019, Jeonju, Korea, October 16, 2019

③ 口頭講演

〈国内〉

1. 平川英樹、原田大士朗、市原寿子、Ghelfi Andrea、Fawcett Jeffrey、白澤沙知子、杉原英志、田村卓郎、中村保一、中谷明弘、磯部祥子、田畑哲之、植物ゲノム情報統合ポータルサイト Plant GARDEN の構築、第 42 回日本分子生物学会年会 福岡、2019 年 12 月 3 日

第 13 回メタボロームシンポジウム 筑波大学、2019 年 10 月 16-18 日

2. 多田一風太, 津川裕司, 有田正規 "MS-DIAL4.0 による統合解析"
3. 津川裕司, 池田和貴, 高橋みき子, 有田正規, 有田誠 "MS-DIAL4.0 による lipidomics standards initiative に基づく 120 脂質クラスの包括的解析"

〈国際〉

The 15th International Conference of the Metabolomics Society, Hague, June 23-27, 2019

1. Atsushi Fukushima, Mikiko Takahashi, Nozomu Sakurai, Toshiaki Tokimatsu, Hideki Nagasaki, Hideki Hirakawa, Takeshi Ara, Makoto Kobayashi, Miyako Kusano, Kazuki Saito, Masanori Arita, Norio Kobayashi, "RIKEN Plant Metabolome MetaDatabase: an integrated plant metabolome data repository based on the semantic web"
2. Hiroshi Tsugawa, Yoshifumi Mori, Yasuhiro Higashi, Aya Satoh, Sven Meyer, Kazuki Saito, Masanori Arita "MS-DIAL 4.0: a computational workflow for ion mobility tandem mass spectrometry data in metabolomics"
3. Ipputa Tada, Romanas Chaleckis, Hiroshi Tsugawa, Isabel Meister, Pei Zhang, Craig E. Wheelock, Masanori Arita "Correlation-based deconvolution (CorrDec) method for data-independent acquisition mass spectrometry"

④ ポスター発表

〈国内〉

1. Hideki Nagasaki, Kenta Shirasawa, Sachiko Isobe, Ken Hoshikawa, Mohamed Zouine, Koh Aoki, Hideki Hirakawa, "Clarification of the Genome Structure of Micro-Tom, a Model Cultivar of Tomato (*Solanum lycopersicum*) -Phenotypic and genotypic variations between distributed Micro-Tom lines" 第2回植物インフォマティクス研究会 国立遺伝学研究所、2019年9月2日
2. 長崎英樹, 白澤健太, 磯部祥子, 星川健, Mohamed Zouine, 青木孝, 平川英樹、世界各地で分譲されている Micro-Tom 5 系統の遺伝子型から見る違い、第 16 回ナス科コンソーシアム 東北大学、2019年10月17日

第 13 回メタボロームシンポジウム 筑波大学、2019 年 10 月 16-18 日

3. 長崎英樹、大澤祥子、荒武、福島敦史、高橋みき子、小林紀郎、櫻井望、平川英樹、有田正規「植物・食品メタボローム解析メタデータの RDF 化と測定生データの再解析」
4. 福島敦史、高橋みき子、櫻井望、時松敏明、長崎英樹、平川英樹、荒武、小林誠、草野都、斉藤和季、有田正規、小林紀郎、"RIKEN Plant Metabolome MetaDatabase の開発"
5. 川島武士 "進化発生生物学にメタボローム解析を取り込む"

〈国際〉

発表者、タイトル、学会名、場所、月日

1. Hideki Nagasaki, Hiromi Kajiya-Kanegae, Akito Kaga, Ko Hirano, Eri Ogiso-Tanaka, Makoto Matsuoaka, Masao Ishimoto, Masatsugu Hashiguchi, Hidenori Tanaka, Ryo Akashi, Hiroyoshi Iwata, Sachiko Isobe, "Genomic Diversity of the NARO Soybean Mini-core Collection", International Plant & Animal Genome XXVIII, Jan 11, 2020

The 15th International Conference of the Metabolomics Society, Hague, June 23-27, 2019

2. Katsuya Obuchi, Nozomu Sakurai, Hiroyuki Kitagawa, Hirotaka Kushida, Akinori Nishi, Masahiro Yamamoto, Kazuhiro Hanazaki, Masanori Arita "DAC-Met : Exploring the metabolic fate of the herbal components in "maoto" decoction through a differential annotation strategy"
3. Nozomu Sakurai, Kunihiro Suda "Food Metabolome Repository: A database for cross-sample specificity-based peak prioritization in untargeted metabolomics"

(4) 知的財産権の出願

該当なし

(5) 受賞・報道等

① 受賞

1. 理研 CSRS 奨励賞、高橋みき子、山田豊、2020年6月10日
2. 理研梅峰賞、津川裕司、2020年3月12日
https://www.riken.jp/pr/news/2020/20200319_1/index.html

② メディア報道

特になし

③ その他の成果発表

1. 日本学術会議 提言「持続可能な生命科学のデータ基盤の整備にむけて」(2019.11.18)

§5. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)

1. 進捗ミーティング

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2019年 5月30-31日	チーム内ミーティング(非公開)	遺伝研	7人	メタボロームリポジトリ MetaboBank の研究開発進捗報告のためのミーティング
2019年 7月18日	チーム内ミーティング(非公開)	かずさ DNA 研究所	9人	研究進捗報告のためのミーティング
2019年 7月26日	チーム内ミーティング(非公開)	かずさ DNA 研究所	4人	同上
2019年 8月29日	チーム内ミーティング(非公開)	理研東京連絡事務所	6人	同上
2019年 9月25日	チーム内ミーティング(非公開)	理研横浜	8人	同上
2019年 11月28日	チーム内ミーティング(非公開)	遺伝研	8人	同上
2020年 2月4日	チーム内ミーティング(非公開)	理研横浜	8人	同上

2. 主催したワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ活動等

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2019年10月17日	13回メタボロームシンポジウム 特別セミナー	筑波大学	80名	NBDC 統合プロジェクトにおけるメタボローム活動の紹介
2019年6月22日	LipoQuality International Workshop on Lipid omics	理研横浜	60名	新学術領域リポクオリティ, シンガポール国立大学と合同でリポミクス技術に関する国際ワークショップ
2019年5月31日	有田 正規「データ時代における学術出版とデータベース」	日本教育会館	200名	第90回日本医学図書館協会総会における講演
2019年5月30日	有田 正規「学術データは誰のものか」	日本医師会館	200名	日本医学会第五回研究倫理教育研修会における講演

以上

別紙1 既公開のデータベース・ウェブツール等

No.	正式名称	別称・略称	概要	URL	公開日	状態	分類	関連論文
1	KNApSAcK	ナップザック	二次代謝産物データベースKNApSAcKをコアシステムとした統合型データベースです。遺伝子アノテーションではArabidopsis、Bacillus、Humanが公開されています。タンパク質の金属イオン結合部位のデータベースMetalMine、インドネシア生薬データベースJAMUや漢方薬のデータベースKAMPOも含んでいます。更に、世界119カ国から7356の植物種データが格納されています。これらのデータは出版されている科学論文から集めているものです。	kanaya.naist.jp/KNApSAcK/		維持・発展	データベース等	
2	Metabolonote	メタボロノート	メタボロミクス実験の詳細な実験手法に関する情報（メタデータ）のみを専門的に取り扱うデータベースです。セマンティックMediaWikiを利用したシステムにより、ユーザー登録（無料）をすることでだれでも気軽に各自のメタデータを記録・編集することができます。メタデータを実際のデータ（生データファイルや、ピークアノテーション情報、ピークのスペクトル情報など）と切り離して管理することにより、1) 実験後すぐに、さらには実験前であっても、メタデータを記載することができるため、実験設定の詳細を忘れてしまう前に記録に留めておくことができます。また、2) 一度記録したメタデータは、論文や実際のデータを管理するその他のデータベースから共通して参照できるというメリットがあります。Metabolonoteのコアシステムは公開されているため、ユーザー独自のMetabolonoteをLIMSや公開サイトとして構築できるほか、フォーマットを独自に定義することで、メタボロミクス以外のデータ管理についても使用することが可能です。	http://metabolonote.kazusa.or.jp/		維持・発展	データベース等	
3	MS-DIAL		実測データからのスペクトル抽出、アノテーション用ソフトウェア	http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/		維持・発展	ツール等	
4	MS-FINDER		実測データからのスペクトル抽出、アノテーション用ソフトウェア	http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/		維持・発展	ツール等	
5	PowerGet		実測データからのスペクトル抽出、アノテーション用ソフトウェア	http://www.kazusa.or.jp/komics/software/PowerGet		維持・発展	ツール等	
6	RIKEN Plant Metabolome MetaDatabase	RIKEN PMM	理研とかずさが蓄積したメタボローム情報のメタデータを整理したRDFサーバ	http://metabobank.riken.jp/		新規	データベース等	