

2025 年度年次報告書

ライフサイエンスデータベース統合推進事業 統合化推進プログラム

【研究課題名】「創発的再解析のためのメタボローム統合データベース」

研究代表者：

早川 英介（九州工業大学 大学院情報工学研究院 准教授）

研究分担者：

早川 英介（理化学研究所 環境資源科学研究センター 客員研究員）

河野 信（北里大学 未来工学部 教授）

津川 裕司（東京農工大学 グローバルイノベーション研究院 准教授）

西田 孝三（理化学研究所 生命機能科学研究センター 技師）



©2025 早川 英介(理化学研究所) licensed under CC表示4.0国際

1. 研究進捗状況と成果

本課題では、複数のメタボロミクス研究データを群間比較に基づく代謝変動の類似性により研究横断的に統合・再解析する基盤を提供する統合データベース integMET の開発を行っている。本年度は、データ拡充・外部公開準備・外部 DB 連携・メタデータ整備・機械学習との接続・応用解析事例の検討を並行して進め、外部公開に向けた基盤を多面的に強化した。

主な成果として、研究間の代謝変動の類似性をネットワーク可視化する機能を提供する β 版インターフェースをクラウド環境上に構築し、integmet.org ドメイン内に展開した。開発メンバーおよび研究協力者の共有の元で運用検証およびフィードバック収集をすすめており、2026 年度の正式版公開に向けた基盤を整えた。また、従来のグラフを基盤としたデータの整備・可視化だけではなく、研究 (study)、群間比較 (differential profile)、代謝物 (metabolite) といった異なるレイヤーにおける情報をテーブル形式で閲覧することが可能なデータ構造およびインターフェースも構築した。本 DB データの相互運用性向上のため、研究関連メタデータの RDF 化およびその検証を実施した。並行して、接続先となる外部データベースの選定をキュレーション品質と生物学的解釈の有用性をもとに再検討し、本 DB データと外部メタデータの統合パイプラインを構築した。データの拡張面では、メタボロミクスレポジトリに未登録の論文データを収集・統合するために、文献データベース API と大規模言語モデルを活用したデータの自動抽出・標準化パイプラインを構築し、本 DB に統合することを可能にする基盤を整備した。あわせて、レポジトリ由来の 1 次データを標準フォーマット mzTab-M へ変換したうえで本 DB に統合するパイプラインの開発にも取り組んだ。機械学習との連携では、ノード属性分類の試験的実装と、外部 DB データを統合した知識グラフのリンク予測に向けた前処理を進めた。本 DB の活用事例としては、がん関連研究を対象とした統合再解析を行い、既知の代謝リプログラミングと整合する研究間関連性に加え、研究横断的な代謝変動の共通性に基づく新たな解釈手法の検討を進めた。

これらの一連の取り組みにより、本 DB は搭載データの量的拡充に加えて、外部 DB 連携・メタデータ整備・統合解析手法の発展を通じた生物学的解釈の拡張性も高まり、より網羅的かつ深く活用しうるメタボロームデータベースへと進展した。

2. 代表的な成果事例

- Asia-Oceania Mass Spectrometry Conference (AOMSC2025)における口頭発表をはじめ、学会・シンポジウムで本データベースの紹介およびそれを活用した解析の発表を行った。(Network-based Integration of Cross-Study Metabolomics Data, AOMSC 2025, 2025 年 6 月 24 日)
- integMET の β 版データベースをクラウド上に構築・展開 (integmet.org) し、プロジェクト関係者に限定したクローズド運用検証およびフィードバック収集を開始した。

以上