

【課題番号】 課題 5

【課題名】 MECO データベースからの新規代謝物同定

### 1) 課題とその背景

MECO@PRIME (<http://prime.psc.riken.jp/meko/>) は平成 25 年度統合データ解析トライアルの成果でもあるシロイヌナズナ代謝物のプロファイリングデータベースである。このデータベースは、様々なシロイヌナズナの遺伝子ノックアウト体をガスクロマトグラフィー質量分析計で計測し、同定できた代謝物の一覧をまとめている。また同定に用いた計測データも全て公開している。

### 2) 課題の解決方法の概要

MECO データベースの中で代謝物名が決まっていないスペクトルに対する化合物名を予測する。全ての未同定スペクトルに対応する必要はなく、MECO データを入力とし、代謝物名を出せる限り予測するプログラムとする。手法としては、NIST データベースのような外部ライブラリを用いてスペクトル比較を用いるもの、MECO 内で既に名前が決まっているスペクトルとの類似性から化合物構造を予測するものなどが考えられる。

### 3) 課題の解決方法の概略図

