

# 質量分析データ活用に向けたMassBank Links環境の整備

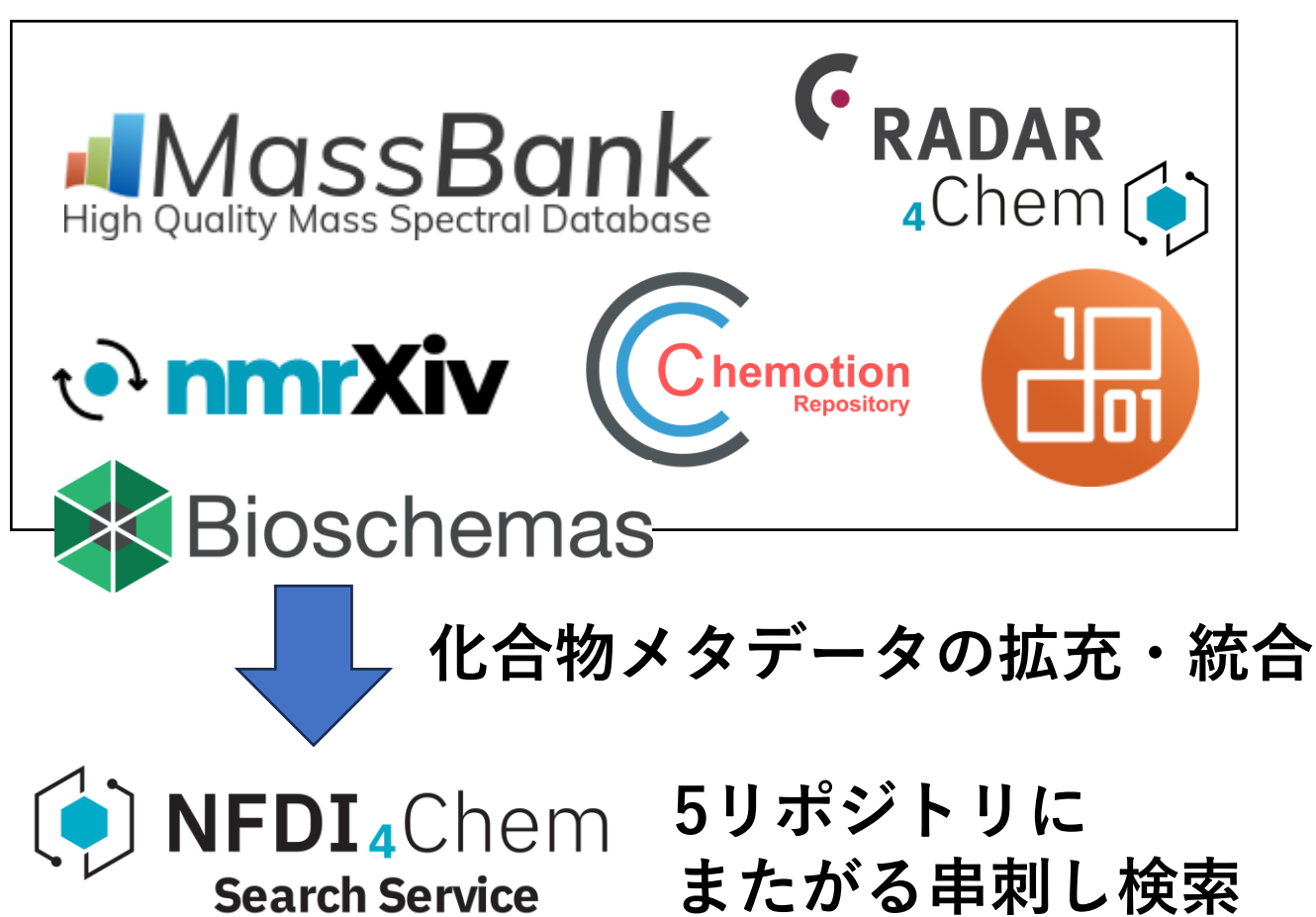
津川裕司<sup>1</sup>, 西田孝三<sup>1</sup>, 松沢佑紀<sup>1</sup>, 岡昂輝<sup>1</sup>, Bujinkham Buyantogtokh<sup>1</sup>

<sup>1</sup>. 東京農工大学 工学研究院 システムバイオロジー分野

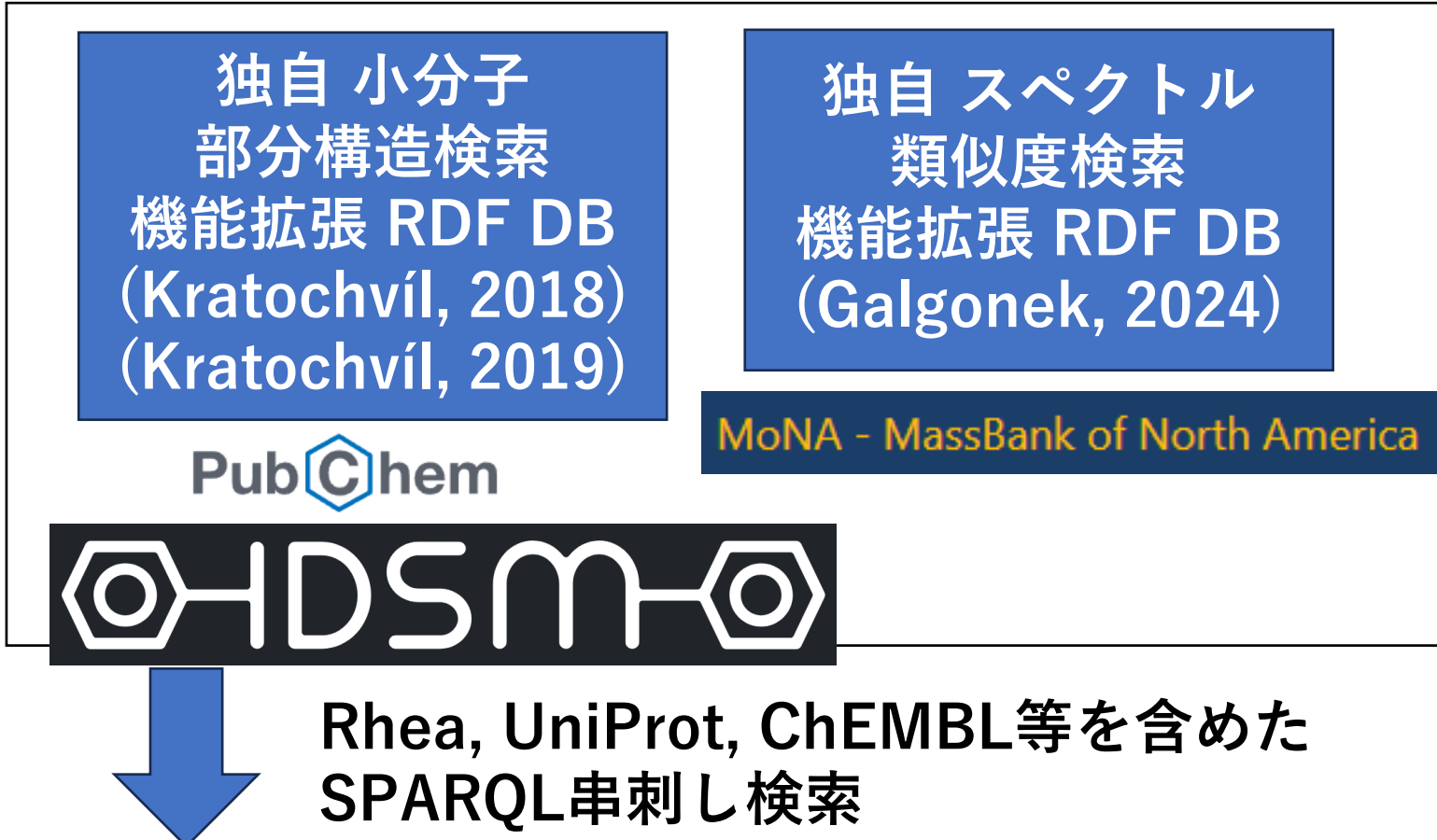


## 1. 海外での質量分析に関するRDFの利活用

### 欧州における既存研究



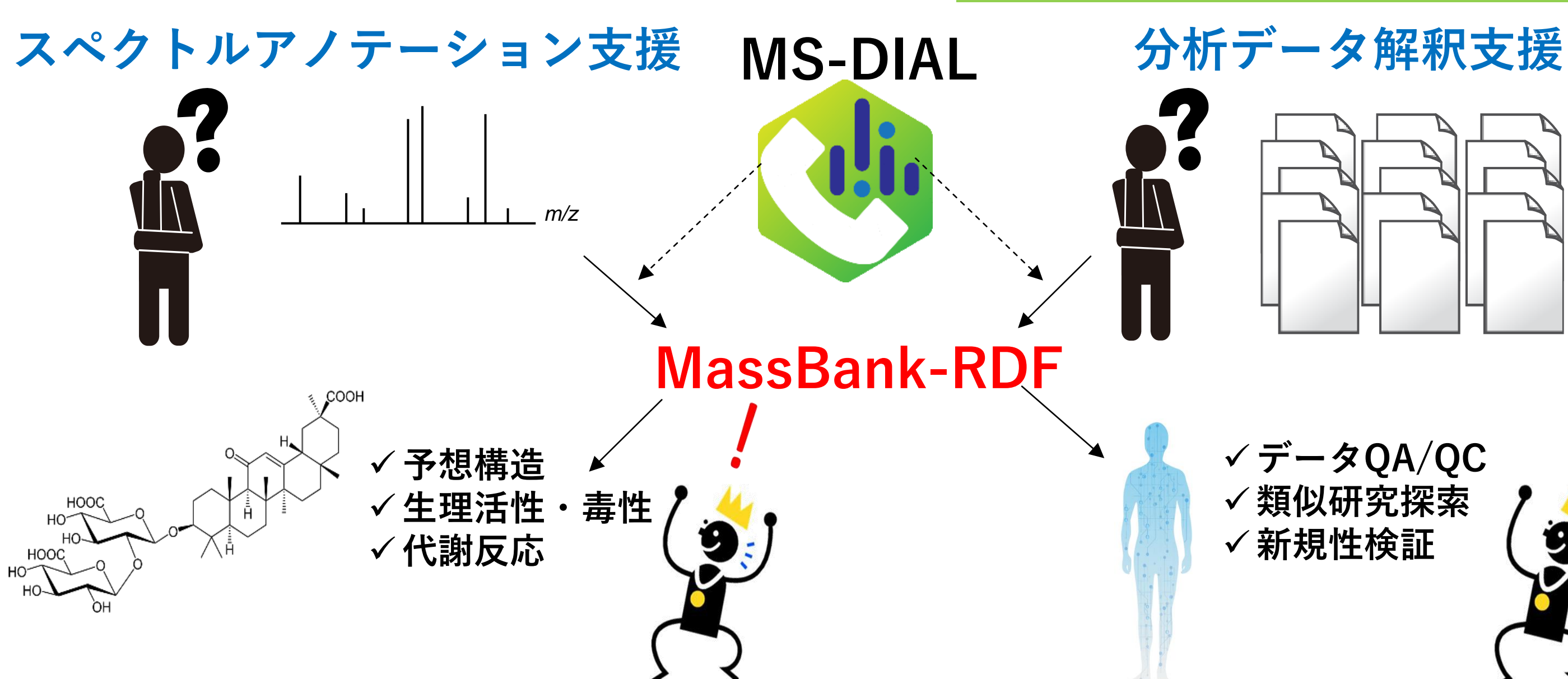
化合物メタデータの拡充・統合  
5リポジトリにまたがる串刺し検索



独自小分子部分構造検索機能拡張 RDF DB (Kratochvil, 2018)  
独自スペクトル類似度検索機能拡張 RDF DB (Galgonek, 2024)  
Rhea, UniProt, ChEMBL等を含めた SPARQL串刺し検索

主目的: 化合物・スペクトルDBをまたいだセマンティック検索の実現

## 2. 何を目的に、MassBank-RDFを作るのか?

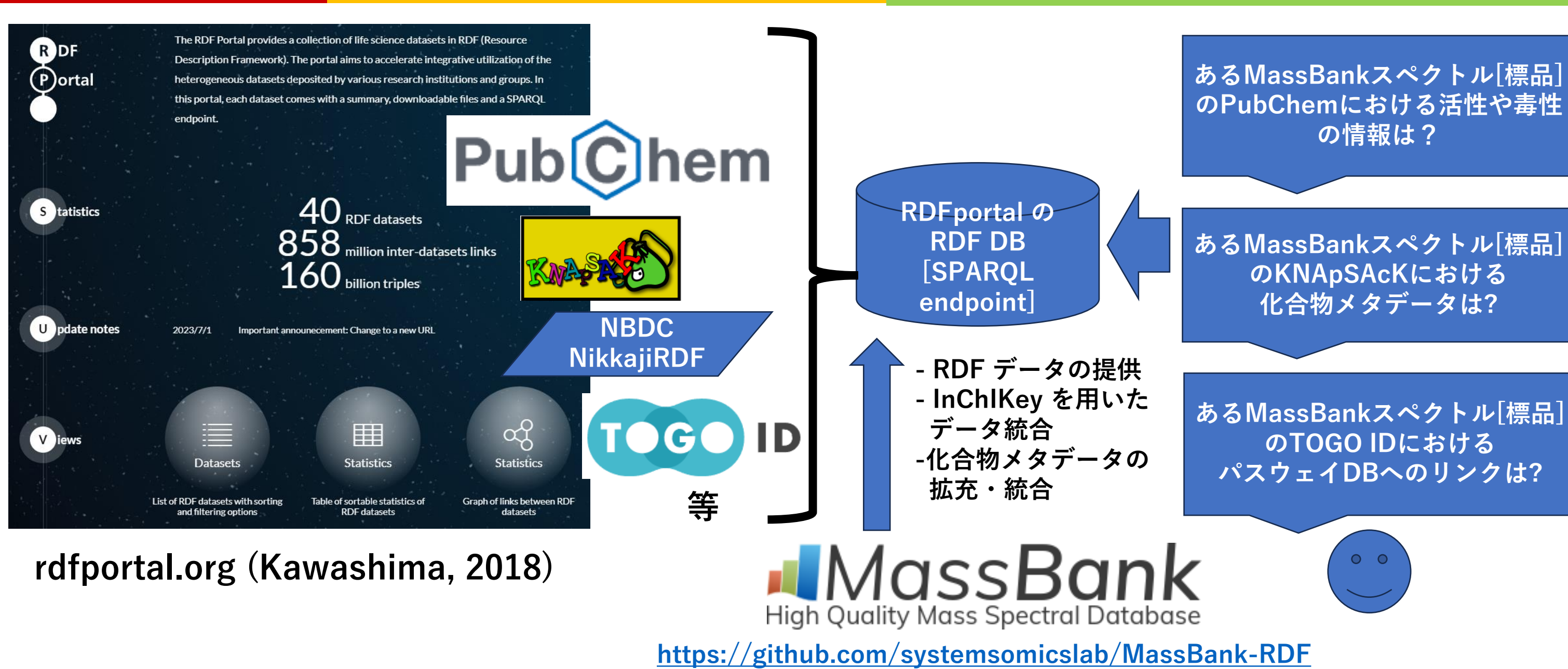


### MassBank-RDF

- ✓ 予想構造
- ✓ 生理活性・毒性
- ✓ 代謝反応

- ✓ データQA/QC
- ✓ 類似研究探索
- ✓ 新規性検証

## 3. 分析データ解釈支援を目的としたRDFデータの提供

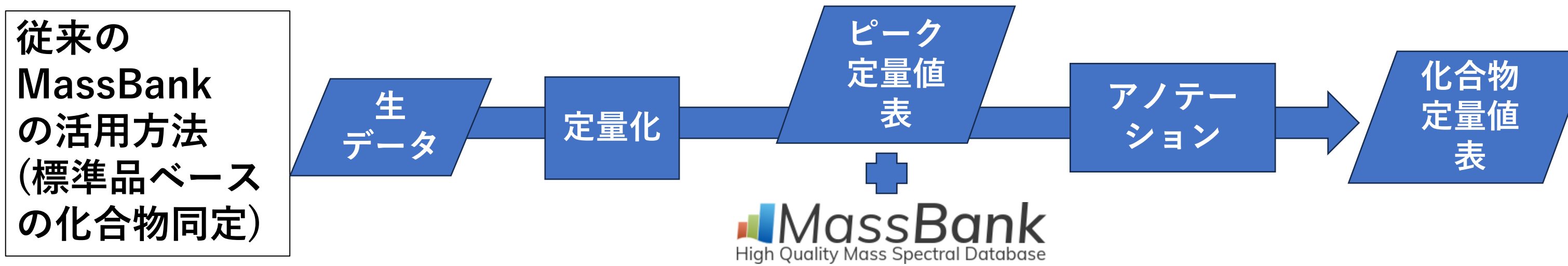


rdportal.org (Kawashima, 2018)

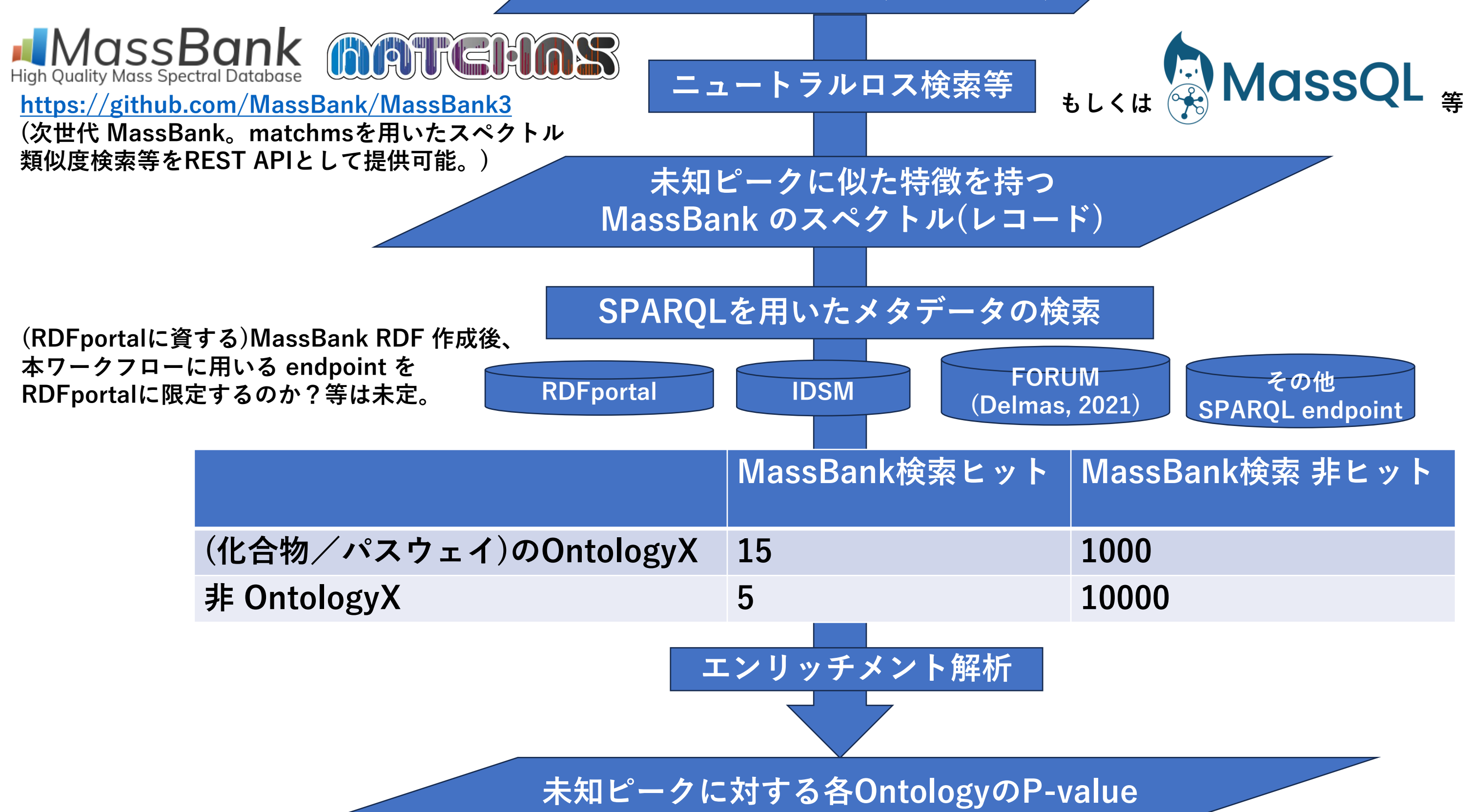
MassBank High Quality Mass Spectral Database  
<https://github.com/systemsomicslab/MassBank-RDF>

RDFportal中の[複数の]データソースとMassBankのスペクトル[化合物]に対応するメタデータが統合されることで、一所[RDFportalのSPARQL endpoint]で高度な検索が可能になる。

## 4. スペクトルアノテーション支援を目的としたRDF活用



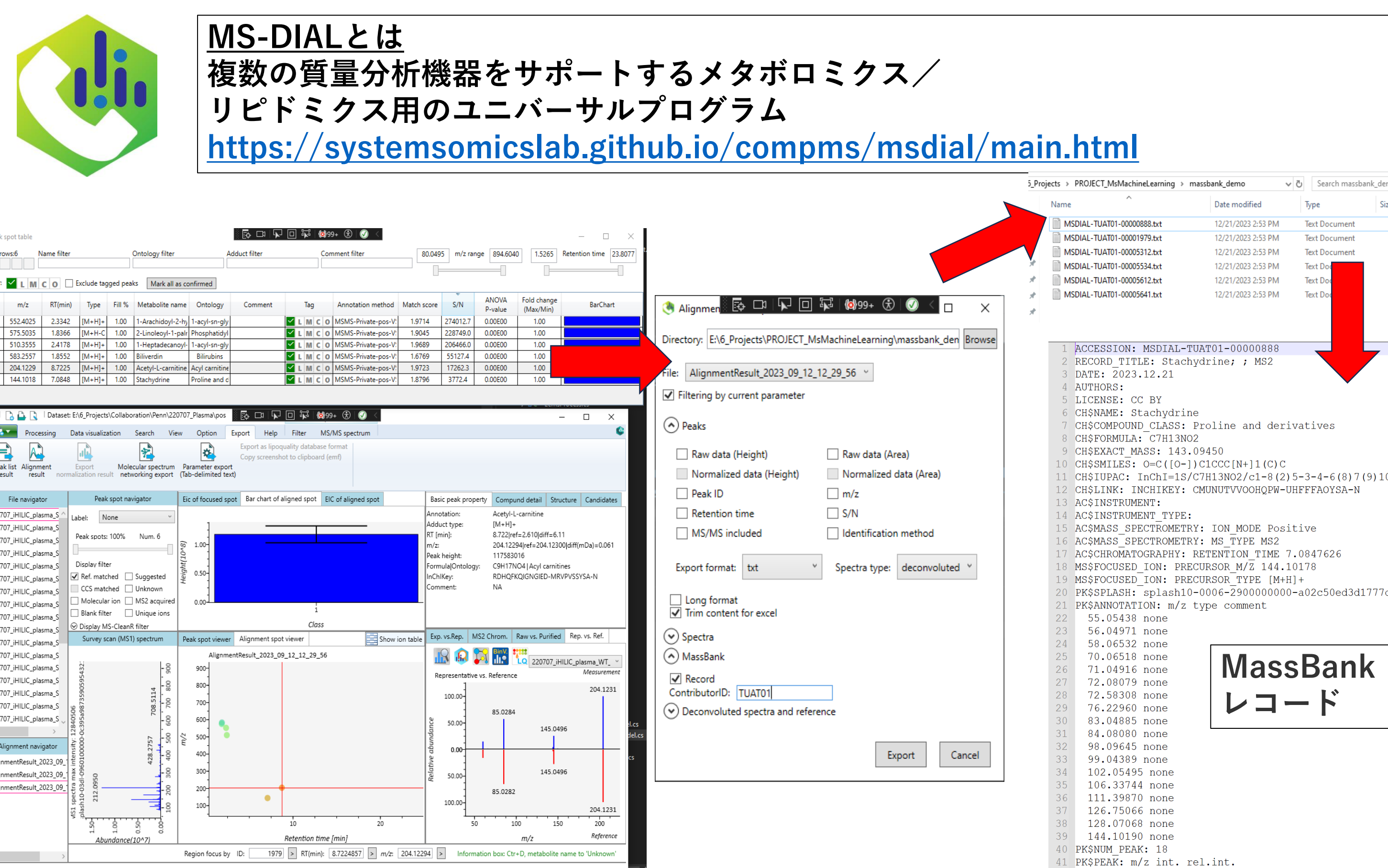
### 新たなMassBankの利活用法



従来の標準品ベースの化合物同定では同定されないピークが多く存在する。(従来のMassBank活用法だけでは、DBとしての価値の限界が見えている。)  
MassBankをRDFとして用いることで「標準品ベースの化合物同定」に留まらない新たなMassBankの利活用法(MassBankのスペクトルに対応する化合物につながるメタデータを用いたエンリッチメント解析)を示す。

## 5. MS-DIAL/MS-FINDERによるMassBank登録の支援

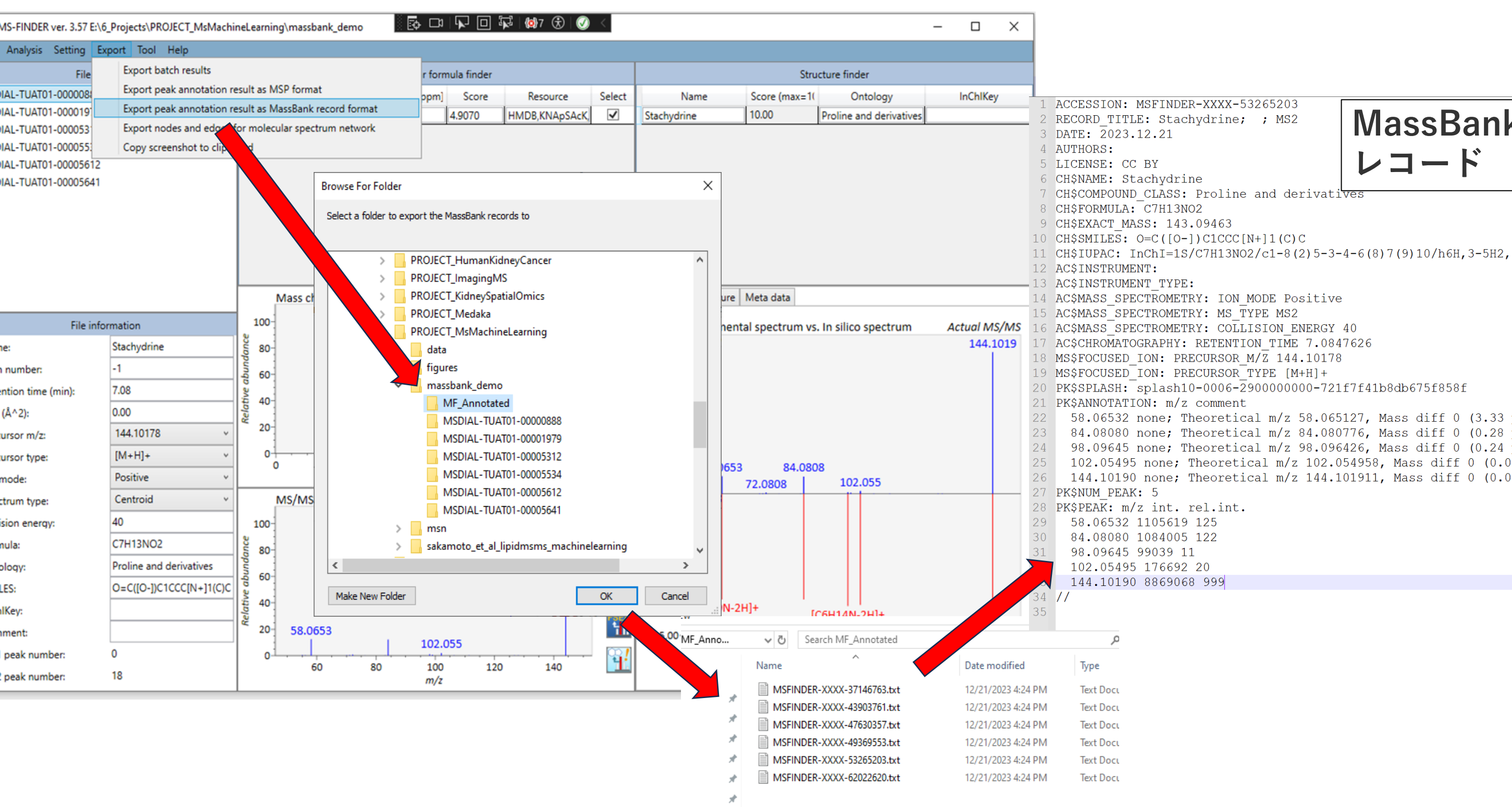
MassBankの課題として(これまでは)スペクトルが基本的に標品によるものであり、そのレコード数(DB規模)の伸びに限界。その「数」の問題をMS-DIAL/MS-FINDERからの登録支援により改善。



MS-DIALとは  
複数の質量分析機器をサポートするメタボロミクス/リポミクス用のユニバーサルプログラム  
<https://systemsomicslab.github.io/compms/msdial/main.html>

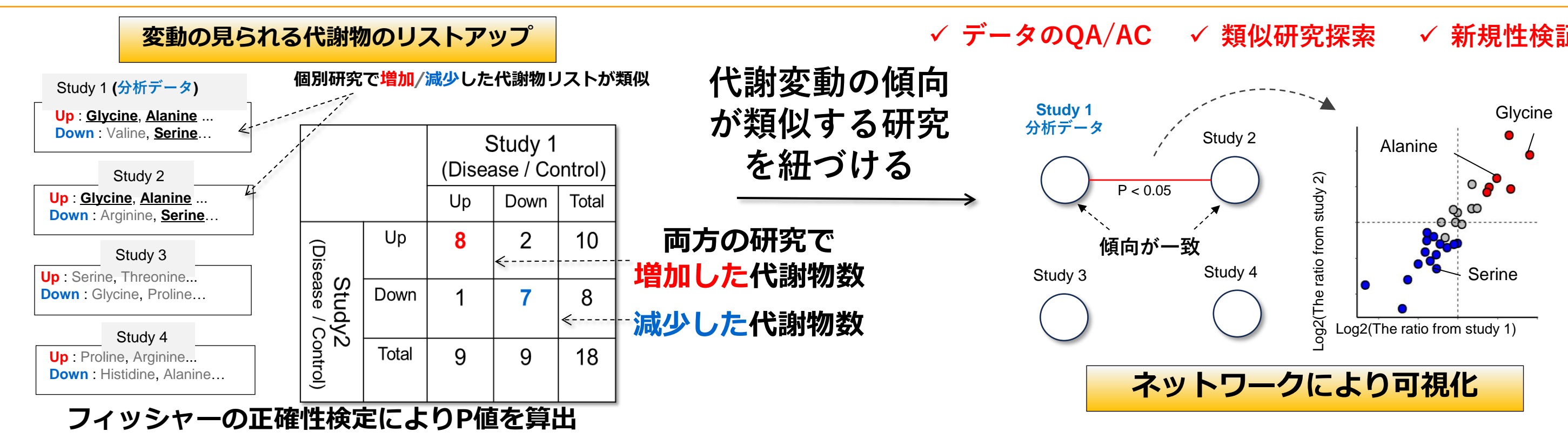
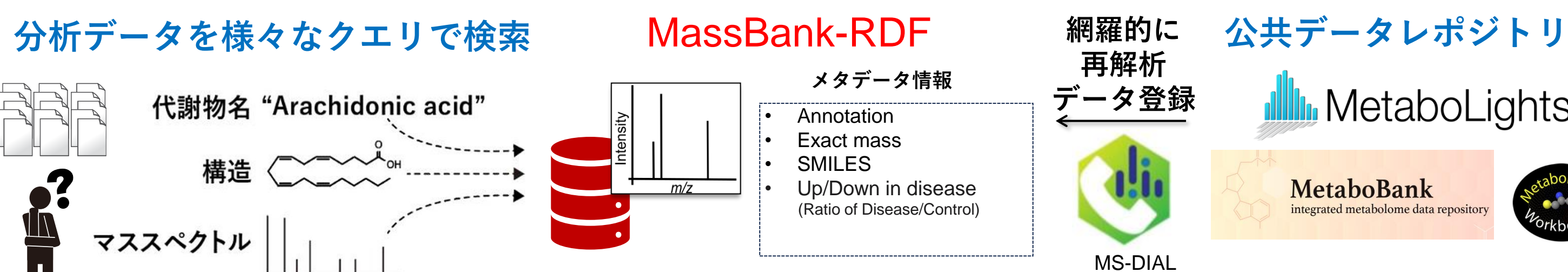
MassBankレコード

MS-FINDERとは  
EI-MS(GC/MS)およびMS/MSスペクトルのマイニングをサポートする化合物のアノテーション用のユニバーサルプログラム  
<https://systemsomicslab.github.io/compms/msfinder/main.html>



MassBankレコード

## 6. MassBank-RDFを活用したメタロームデータの統合解析



MassBank-RDFによって分析データのQA/QC、類似研究探索、新規性検証が可能になる。

## 7. MassBank Links 構想



MassBankに関するすべてのリソースに1つのWebサイトからアクセスできるように。

## 8. 謝辞

本研究開発はJST-NBDC (JPMJND2305) の支援を得て行われました。