

# 国際協調に基づく 3つの質量分析データリポジトリメタデータ標準化とバリデーションに基づく統合を目指す

○高橋悠志<sup>1)</sup>, 吉沢明康<sup>1)</sup>, 松田史生<sup>2)</sup>, 木下聖子<sup>3)</sup>, 石濱泰<sup>4)</sup>, 奥田修二郎<sup>1)</sup>

1) 新潟大学大学院医歯学総合研究科, 2) 大阪大学大学院情報科学研究科, 3) 創価大学大学院理工学研究科, 4) 京都大学大学院薬学研究科

PROTEOMICS



## jPOST repository

<https://repository.jpostdb.org>

jPOST (Japan ProteOme Standard Repository / Database) はリポジトリ・再解析・データベースから成るプロテオーム統合データベースであり、その中でも **jPOST リポジトリ** は FAIR 原則に従って質量分析データを寄託し、これを蓄積するための情報基盤である。ウェブブラウザのみで完結する直感的なユーザインタフェースを提供しており、エンバーゴ機能や大容量ファイルの高速分割アップロードが可能などの特徴を持つ。2026 年 9 月現在、約 4,300 プロジェクトが登録済みであり、総データ量は 190 TB を超える。近年では、JPDM (Journal of Proteome Data and Methods) 誌にデータディスクリプタ論文と共に投稿されたメタデータを活用することでプロテオームデータの再解析を加速させる試みが開始されている。



## GlycoPOST

<https://glycopost.glycosmos.org>

GLYCOMICS

jPOST リポジトリの設計を踏襲して作られた **GlycoPOST** はグライコームにおける質量分析生データリポジトリであり、GlyCosmos プロジェクトで管理されている。GlycoPOST のメタデータは **MIRAGE** (Minimum Information Required for A Glycomics Experiment) ガイドラインに準拠している。MIRAGE MS ガイドラインは長年に渡って糖鎖分子のみを対象としたグライコミクスデータのガイドラインしか提示してこなかったため、GlycoPOST ではグライコミクスデータしか受け入れることができなかった。しかし、近年のガイドライン改訂に伴ってグライコプロテオミクスデータの報告ガイドラインも公開されたため、GlycoPOST においてもグライコプロテオミクスデータの受け入れができるよう、システム更新が実施された。



## MB-POST

<https://repository.massbank.jp>



METABOLOMICS

日本発の化合物リファレンス・マスペクトル・データベースである MassBank に高品質なスペクトルデータを大幅に追加するため、メタボロミクス領域では人間による curation のみに頼らずに大量のリファレンス・スペクトルを収集するパイプラインの構築を目指して 2023 年度より Shin-MassBank プロジェクトが開始された。**MB-POST** (MassBank-POST) は jPOST リポジトリや GlycoPOST と同様の設計を採用しており、化合物を質量分析で測定した生データとその測定条件を記述するメタデータを格納するリポジトリである。Shin-MassBank プロジェクトのパイプライン中で MB-POST は投稿される測定データを一挙に引き受け、後ろに控える MassBank Human や MassBank *in silico*、および MassBank Links へ受け渡す。

## jPOST : jeSDRF (JPDM) メタデータ品質管理のためのバリデータ開発

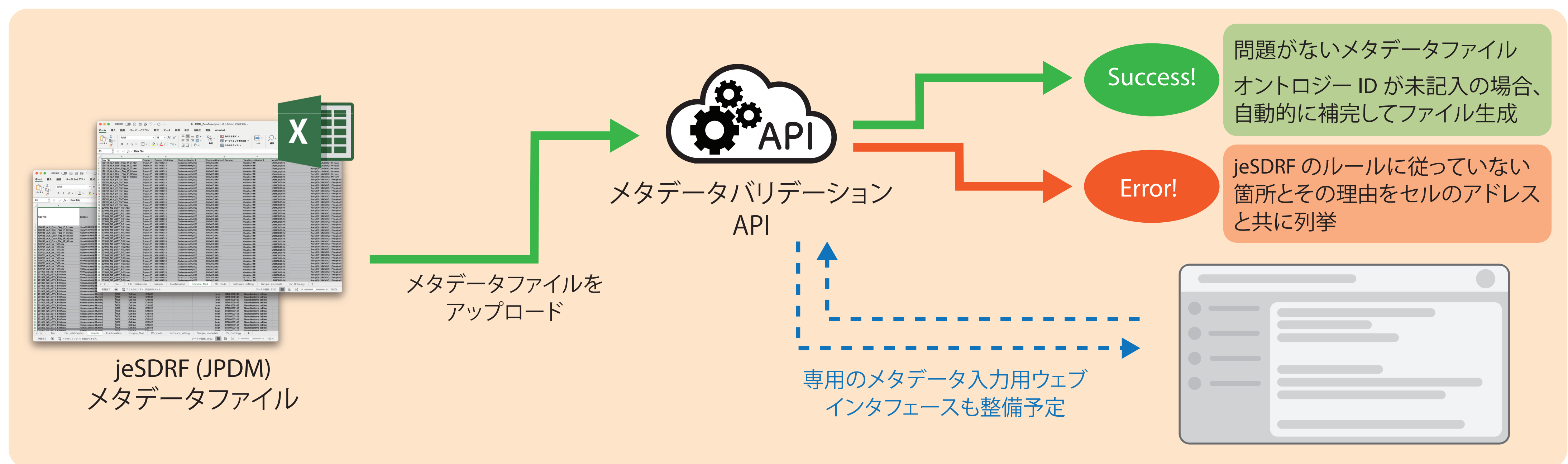
- jPOST では投稿データの再解析を進める上で、不足するメタデータを **JPDM** 誌に投稿されたデータディスクリプタ論文から収集している
- しかし、HUPO-PSI ではマイクロアレイにおける MAGE-TAB に習い、試料と結果ファイルの対応関係を記述する標準仕様として **SDRF Proteomics** の策定を進めている
- そこで、JPDM では従来の独自メタデータファイル形式を **jeSDRF** (JPDM-empowered SDRF) 形式と改称し、SDRF Proteomics との互換性を持たせる方針となった
- jPOST の再解析パイプラインを円滑に動かすためには高品質なメタデータが必要となるため、現在 jeSDRF 形式メタデータのバリデーションシステムを開発している

### -jeSDRF メタデータバリデーションシステム

- 再解析前の手作業でのメタデータ確認・微調整が必要となるメタデータ品質問題を改称するのが狙い
- 従来の Excel ワークシートをアップロードすると、ワークシートの構造や入力内容を検証
- 表記揺れなどを洗い出し、オントロジー ID が未入力の場合については、該当するオントロジー ID を自動補完

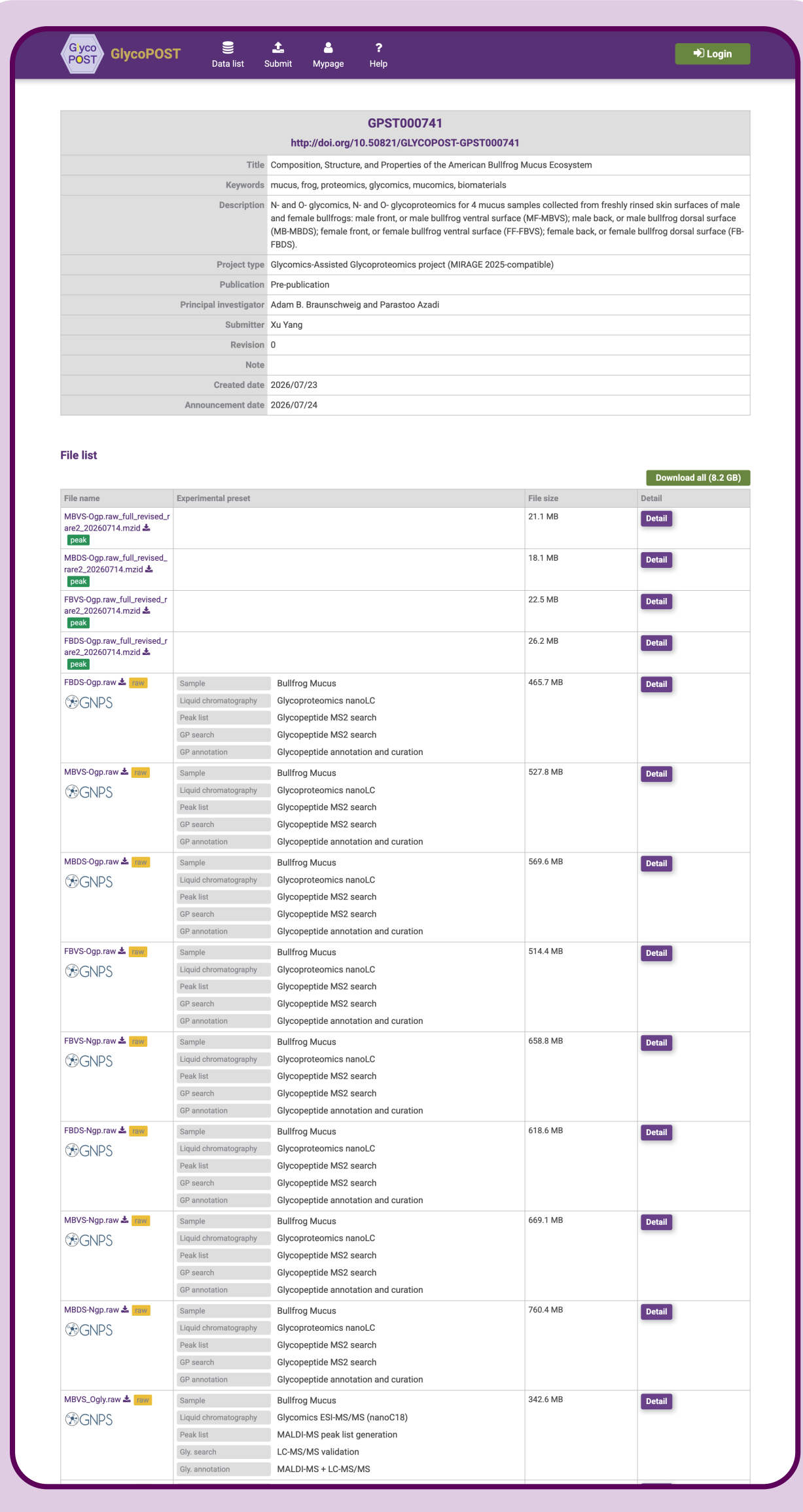
- 当面は編集者・査読者の間で査読プロセスを効率化するためにパイロット的に活用

- 最終的にはメタデータ入力用の専用ユーザインタフェースを用意し、投稿者が入力内容をリアルタイムにバリデーションしつつ Excel ファイルに入力するより快適にメタデータを記入できる環境を整備していく予定



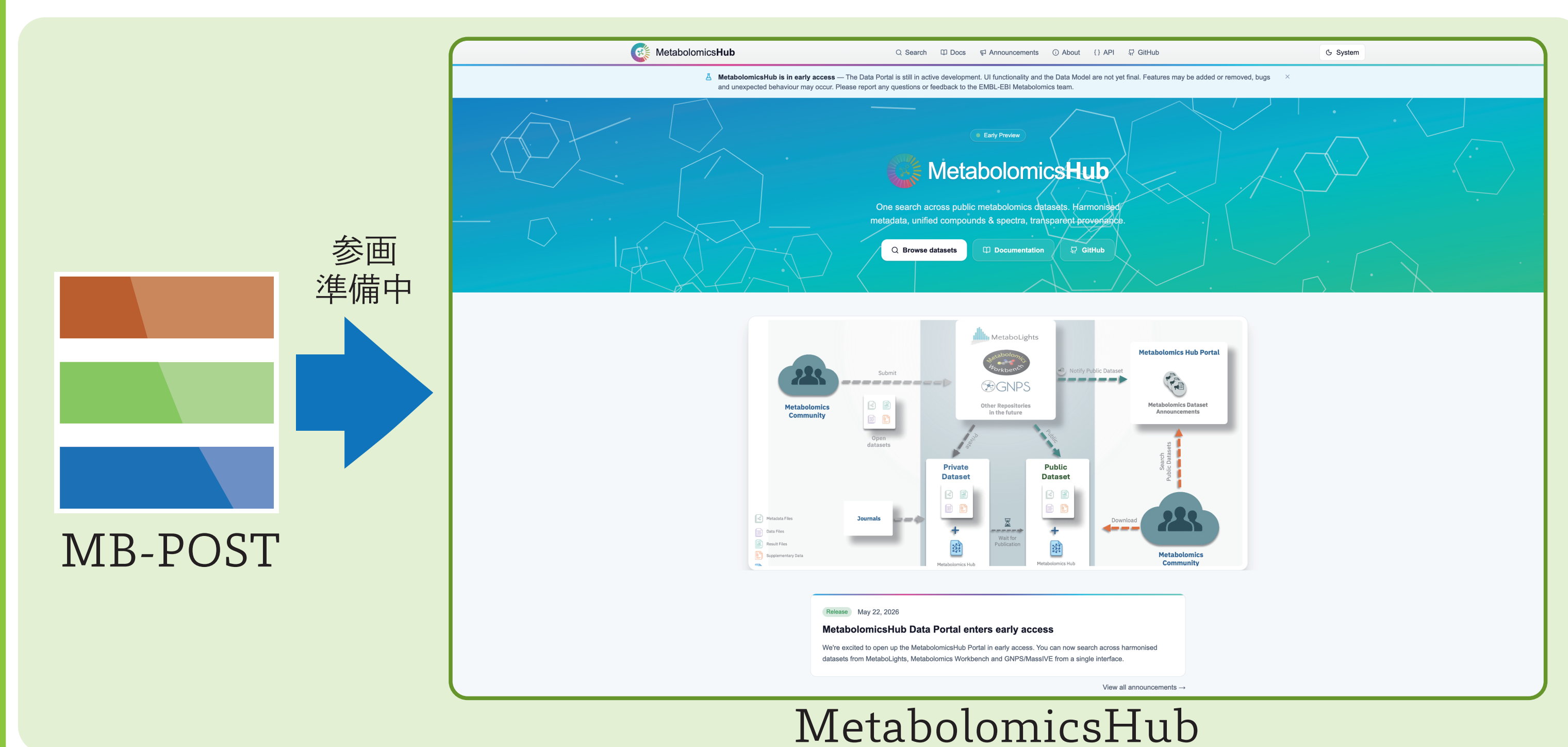
## GlycoPOST : グライコプロテオミクスデータへの対応

- **MIRAGE MS** ガイドラインの更新に伴い、GlycoPOST には従来のグライコミクスデータに加えて今後はグライコプロテオミクスデータも投稿可能となった
- 生データファイルにプリセット (メタデータ) を付与する際にグライコミクスのプリセットとグライコプロテオミクスのプリセットが明確に区別できるよう、各プロジェクト (データセット) に「プロジェクトタイプ」の概念を導入した
- **Glycomics-assisted glycoproteomics** によって得られたデータにはグライコミクスおよびグライコプロテオミクスの両方のプリセットを付与できる
- 従来の **MIRAGE** ガイドライン準拠のプロジェクトはレガシープロジェクトとなり、**2027 年末**を目処に読み取り専用になる予定



## MB-POST : MetabolomicsHub への参画を目指す

- 現在、国際的なメタボロームデータリポジトリの連携の枠組みとして **MetabolomicsHub** (<https://www.metabolomicshub.org>) の活動が始まっており、MetaboLights、MetabolomicsWorkbench、GNPS の 3 リポジトリが加盟済み
- MB-POST もこの枠組みに参画して国際的な標準メタボロームデータリポジトリの 1 つとして活動していくため、現在 MetabolomicsHub が提示している Common Data Model を満たすよう、システムの更新作業を行っている



謝辞 本研究・開発は科学技術振興機構 (JST)・NBDC 事業推進室による統合化推進プログラム予算によって実施した。



Oct. 5, 2026 品川ザ・グランドホール, 東京 トーゴーの日シンポジウム 2026

Licensed under a Creative Commons 表示 4.0 国際ライセンス  
©2026 高橋悠志 (新潟大学大学院医歯学総合研究科)

