

2024 年度 研究開発実施報告

概要

研究開発課題名	次世代低分子 マス スペクトルデータベース シン・マスバンクの構築
開発対象データベースの名称(URL)	Shin-MassBank (https://shin-massbank.jp)
研究代表者氏名	松田 史生 (50462734)
所属・役職	大阪大学 大学院情報科学研究科 教授 (2025 年 3 月時点)



目次

概要	1
§1. 研究実施体制	4
§2. 研究開発対象とするデータベース・ツール等	5
(1) データベース一覧	5
(2) ツール等一覧	5
§3. 実施内容	6
(1) 本年度に計画されていた研究開発項目・タスク	6
(2) 進捗状況	6
開発項目1 MB-POST の構築	6
開発項目2 MassBank Human の構築	7
開発項目3 MassBank in silico の構築	10
開発項目4 MassBank のデータ拡充・普及・国際連携	14
開発項目5 MassBank Links ポータルの開発	18
§4. 成果発表等	20
(1) 原著論文発表	20
① 論文数概要	20
② 論文詳細情報	20
(2) その他の著作物(総説、書籍など)	21
(3) 国際学会および国内学会発表	21
① 概要	21
② 招待講演	21
③ 口頭講演	22
④ ポスター発表	22
(4) 知的財産権の出願（国内の出願件数のみ公開）	24
① 出願件数	24
② 一覧	24
(5) 受賞・報道等	24
① 受賞	24
② メディア報道	24
③ その他の成果発表	24
§5. 主要なデータベースの利活用状況	25
1. アクセス数	25
① 実績	25
② 分析	25
2. データベースの利用状況を示すアクセス数以外の指標	25
3. データベースの利活用により得られた研究成果(生命科学研究への波及効果)	25
4. データベースの利活用によりもたらされた産業への波及効果や科学技術のイノベーション(産業や科学技術への波及効果)	25

§6. 研究開発期間中に主催した活動(ワークショップ等)	26
(1) 進捗ミーティング	26
(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	26

§1. 研究実施体制

グループ名	研究代表者・研究分担者氏名	所属機関・役職名	研究題目
松田グループ	松田 史生	大阪大学・教授	MassBankのデータ拡充とスペクトルデータ高品質化法の開発
奥田グループ	奥田 修二郎	新潟大学・教授	メタボロームデータリポジトリの開発とデータ拡充
平山グループ	平山 明由	慶應義塾大学・准教授	MassBank Humanの構築とデータ拡充
和泉グループ	和泉 自泰	九州大学・准教授	MassBank <i>in silico</i> の構築とデータ拡充
津川グループ	津川 裕司	東京農工大学・准教授	MassBank LinksおよびRDF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】

N o.	名称	別称・略称	URL
1	Shin-MassBank	シン・マスバンク	https://shin.massbank.jp

【その他のデータベース】

N o.	名称	別称・略称	URL
1	MB-POST		https://repository.massbank.jp
2	MassBank Human		https://human.massbank.jp
3	MassBank in silico		http://insilico.massbank.jp/

(2) ツール等一覧

N o.	名称	別称・略称	URL
1	スペクトル二次解析ソフトウェア		https://github.com/fumiomatsuda/Data-processing-of-product-ion-spectra
2	インシリコスペクトル生成、構造推定ソフトウェア		現時点で未公開
3	MS-DIAL/MS-FINDER		https://github.com/systemsomicslab/
4	MassBank RDF		https://github.com/systemsomicslab/

§3. 実施内容

(1) 本年度に計画されていた研究開発項目・タスク

開発項目1 MB-POST の構築

- ・1.2 6 版構築公開(メタ情報がプロテオミクス)
- ・1.3 初期データアップロード
- ・1.4 メタボロミクス用メタデータ策定

開発項目2 MassBank Human の構築

- ・2.1 MassBank Human サーバーの 6 版を構築
- ・2.2 スペクトル再解析法の開発:平均化
- ・2.5 スペクトルデータ再解析のテスト

開発項目3 MassBank in silico の構築

- ・3.2 in silico MS/MS スペクトルライブラリの開発
- ・3.3 保持時間予測機能の開発
- ・3.4 アノテーション法の開発
- ・3.5 6 版 MassBank in silico サーバーの構築
- ・3.7 MassBank サーバーの高速化

開発項目4 MassBank のデータ拡充・普及・国際連携

- ・4.1 MassBank データ登録テスト
- ・4.2 MassBank のユーザー講習会を実施
- ・4.3 国際連携(Metabolomics 学会への参加)
- ・4.4 展示出展(メタボロミクスシンポジウム)
- ・4.5 アドバイザリ年 2 回(6 月、12 月)

開発項目5 MassBank Links ポータルの開発

- ・5.1.1 MassBank レコードの RDF 化の方針決定
- ・5.2. 脂質 in silico MS/MS スペクトルの開発推進
- ・5.3.1 MS-DIAL/MS-FINDER と MassBank を繋ぐプログラム開発・公開
- ・5.4.1 MB-POST の再解析基盤の構築

(2) 進捗状況

開発項目1 MB-POST の構築

生体サンプル由来の生マススペクトルデータを収集し、それに必要なデータデポジット、閲覧、ダウンロード機能を持った物理サーバーの構築、メタデータ形式の設定を行う。現状の課題である、メタデータ、オントロジーの整備を進めるため、プロテオミクスデータレポジトリである jPOST の構築してきたシステムを活用する。メタボロミクスとプロテオミクスではデータ取得方法に 90%程度の共通点があるため、プロテオミクスと協調したメタデータ形式を採用して、将来的なマルチオミクスデータへの対応を可能にする。

・1.2 β 版構築公開(メタ情報がプロテオミクス)

MB-POST (<https://repository.massbank.jp>) のリポジトリとしての機能について外部からアクセスして利用できる状態での運用を開始できる状態になるよう開発を実施した。当初の受入れメタ情報としては、jPOST リポジトリが採用しているプロテオミクスでのメタ情報を基本として設計したが、メタボローム用メタデータに最適化した形で開発した。公開可能なサーバーシステムの開発を実施し、12 月 24 日に外部からアクセスできるテスト環境を構築した。

・1.3 初期データアップロード

アップロードの検証として、松田 G、平山 G、和泉 G が持つサンプルデータでアップロードのテストを実施した。アップロードの速度、入力の手間などユーザーとしての利用環境を検証した後、各グループが持つ提供可能なデータの全体のアップロードを実施し、登録データの拡充に務めてきた。2025 年 4 月 30 日現在 27 プロジェクトが投稿済、うち19が公開済、累計データサイズは 105.6 GB となっている。各グループが持つ代表的なサンプルデータの登録作業のプロセスからバグ等を含めたシステムの改修を実施してきている。

・1.4 メタボロミクス用メタデータ策定

生物種、サンプル、サンプル調製法、データ取得法等のメタデータおよびそのオントロジーについては、当初は jPOST リポジトリで提供されるプロテオミクスデータのものと同通化して開始したが、それをメタボローム研究における情報として過不足ないものにするため、メタボローム研究に特化した Controlled Vocabulary (CV) を9件追加した。各グループでもつデータに必要な情報の整理に加え、世界中で実施されるメタボローム解析において必要とされるメタデータおよびそのオントロジーについて、プロジェクト8件、ファイル2件、ファイル関係性3件、サンプル24件、実験準備7件、解析条件14件、ソフトウェア設定9件の入力項目を設定し、その中で計14種類のオントロジーと上記 CV を用いた形で整備し、MB-POST に実装した。

開発項目2 MassBank Human の構築

ヒト由来高品質マスマスペクトルライブラリの MassBank Human を構築する。MB-POST に集積した生体由来の代謝物のマスマスペクトルデータには、ノイズが多い、冗長性が高い、計測精度が低いなどの課題があり、検索時に擬陽性を生む原因となっている。そこで、ユーザーニーズの最も高いヒトに注目し、生マスマスペクトルデータの積算を行うことで、ノイズ・冗長性の除去、計測精度を向上した高品質マスマスペクトルデータを生成する再解析法を構築する。作成した高品質マスマスペクトルデータを公開し、ユーザーが取得したマスマスペクトルの過去の検出例を検索できる新たな機能を提供する。

・2.1 MassBank Human サーバーの β 版を構築

昨年度公開した MassBank Human サーバー (<https://human.massbank.jp>) の改良を実施した。今年度は、検索機能として、Compound Name からレコードを検索する Compound Name Search、調べたい MS/MS のスペクトルからレコードを検索する MS/MS Search を実装した (図 1)。開発項目 3.7 MassBank サーバーの高速化で開発した検索システムを用い、従来の MassBank に比べ高速でレコードを検索可能となった。また、検索でヒットしたレコードを GitHub にアクセスし、保存することが可能になった。開発項目 2.5 スペクト

ルデータの再解析で作成されたデータのうち 6 データセット、合計 13,370 スペクトルを MassBank Human 及び GitHub (<https://github.com/Shin-MassBank/MassBank-Human>) にて公開した。

Compound Name Search

MassBank Human

Basic Search

Sample category

Species

Sample type

Tissue

Method type & Chromatography type

Mass type

Ionization

Polarity

Instrument mode

Fragmentation method

Advanced Search

MS/MS Search

MassBank Human

Enter MS1 tolerance (ppm)

Basic Search

Sample category

Species

Sample type

Tissue

Method type & Chromatography type

Mass type

Ionization

Polarity

Instrument mode

Fragmentation method

Advanced Search

<http://human.massbank.jp/>

シンプルな検索 (Basic Search)

1. 検索したい情報を入力する
Compound Name Searchの場合は、Compound Name
MS/MS Searchの場合は、Precursor ion, MS1 tolerance (ppm),
MS/MS情報, MS2 tolerance (Da)
2. Basic Searchをクリックする

サンプルや測定の情報を加味した検索 (Advanced Search)

1. Basic Searchの情報を入力する
2. 以下の情報をプルダウンで選択する
Sample category, Species, Sample type, Tissue,
Method type & Chromatography type, Mass type,
Ionization, Polarity, Instrument mode, Fragmentation method
3. Advanced Searchをクリックする

図 1 MassBank Human の検索画面

2.2 スペクトル再解析法の開発: 平均化 (阪大)

2023 年度までに、ddatoolbox というスペクトル平均化作業用の Python モジュールを作成した。また、類似のスペクトルをクラスター化するヒューリスティックな手法を実装し、100 データファイルからの平均化作業を可能とした。また、精密質量から化合物の組成式を推定する機能を持ったソフトウェアを開発した。2024 年度は、これまで作成した Python スクリプトをもとに、MS スキャンデータを平均化することで、より正確にイオンフォーム ($[M+H]^+$, $[M+Na]^+$) を推定する機能を ddatoolbox に付与した。さらに再解析パイプライン要素技術の構築および実装を進め、現在図 2 に示すパイプラインが構築できている。

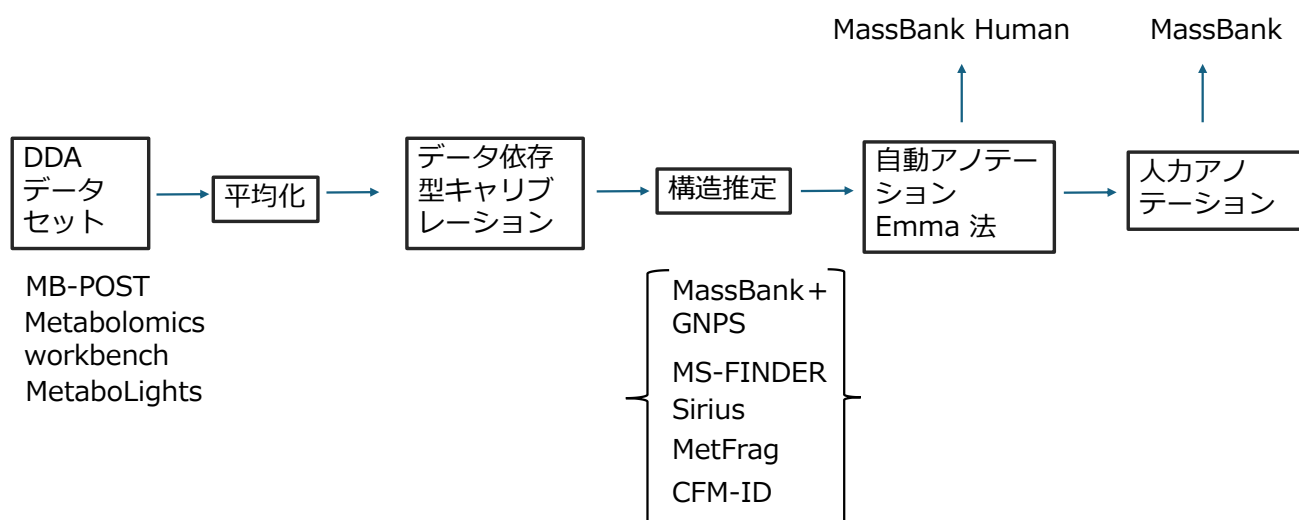


図 2 構築中の再解析パイプライン

平均化:2023 年度の成果をもとに、100 以上のデータファイルから平均化作業を行えるようにした。

データ依存型キャリブレーション:作製した平均化スペクトルに対して、イオンフォームやスペクトル類似度を指標に、プリカーサーイオン、およびプロダクトイオンの組成式を推定する機能を実装した。推定した組成式の m/z 理論値と、実測値との系統的なずれを評価し、さらに、データ依存型キャリブレーションを行う機能を実装した。

化合物推定:作製した平均化スペクトルを、MS-FINDER、MetAlign、SIRIUS 等のソフトウェアに入力し、構造アノテーション結果を得るパイプラインを構築した。また、これらの化合物アノテーションスコアをもとに、アノテーション結果の FDR を推定する手法、2nd rank 法を開発した（論文 1）。

自動化合物アノテーション;ソフトウェアの出力をもとに自動的に化合物アノテーションレベルを決定する機能を実装した。MassBank コンソーシアムの EU メンバーである Emma Schymanski が作製した、化合物アノテーションレベルをもとに、EU メンバーとの議論を行い、具体的なレベル分け基準を設定した（表 1）。

現在、慶應大学チームと協働で 19 個の公共データベース由来の DDA データセットに対して、構築した解析パイプラインで自動化合物アノテーション作業を行った（表 2）。その結果、MB-POST に格納した 2 つのデータセット HSA001, HSA002 から、Class 2a のスペクトルをそれぞれ 73 個、83 個得ることができることを確かめた。また、全データセットからは、1943 個得ることができた。今後はこれらの品質を人力のアノテーションで確認し、MassBank Human, MassBank へと格納していく。

表 1 化合物アノテーションレベルの分類基準。

	要件			
レベル区分	MassBank に 2 件以上ヒット有	SIRIUS5 or 6 で FDR<0.1 でトップヒット	MetFrag, CFM-ID, MS-FINDER のどれかで 10 位以内にヒット	HMDB に該当あり(構造が一意に決まる)
Level2a	○	○	○	○
Level3a	×	○	○	○

Level3b	○	○	○	×
Level3c	×	○	○	×

表 2 構築した再解析パイプラインによる化合物アノテーション結果。本 PJ で構築したデータレポジトリ MB-POST に格納したデータの再解析結果を下線で赤字で示した。

DDA データセット				生成スペクトル数		
シン・マス バンク ID	データレポジ トリ ID	由来	データ ファイ ル数	Level 2a	Level 3b	Level 3c
HSA001	MPST000004	Plasma	19	73	293	939
HSA002	MPST000004	Plasma	19	88	68	263
HSA003	ST002338	facel	50	88	365	623
HSA004	ST002338	facel	50	26	95	213
HSA005	ST001264	plasma	31	3	29	50
HSA006	ST001264	plasma	31	26	120	332
HSA007	MTBLS417	Plasma	60	96	221	436
HSA008	MTBLS417	Plasma	60	16	66	414
HSA009	ST001171	Serum	253	385	1313	4136
HSA010	ST001914	facel	101	324	1033	6985
HSA019	ST002044	Serum	286	141	221	1052
HSA020	ST002044	Serum	286	107	367	914
HSA021	ST002044	Serum	286	106	348	1939
HSA022	ST002044	Serum	286	205	573	1335
HSA014	MTBLS6402	Cell	27	39	39	122
HSA015	MTBLS6402	Cell	27	56	186	765
HSA031	MTBLS3233	Feces	59	33	67	144
HSA032	MTBLS3233	Feces	60	103	279	612
HSA033	MTBLS3854	Plasma	50	28	97	271
			総計	1943	5780	21545

・2.5 スペクトルデータ再解析のテスト

開発項目 2.2 スペクトル再解析法の開発によって開発された改良版のスペクトル再解析法を用いて、ヒト由来のスペクトルデータの再解析を行った。海外のメタボロームデータリポジトリ (Metabolomics Workbench や MetaboLights) 及び開発項目 1 で開発した MB-POST に 2025 年 3 月まで登録されたヒト由来データを全て識別し、Data dependent analysis で測定され、再解析可能な大規模データの一覧を取得した。平均化及び MassBank *in silico* を用いたアノテーションを 30 データセット実施した。

開発項目3 MassBank in silico の構築

MassBank Human に蓄積した高品質マスマスペクトルデータに、構造情報を付与する解析パイプラインを構築する。まず化合物構造から *in silico* 予測したマスマスペクトルのライブラリである MassBank *in silico* を構築、公開する。これをもとにクエリのスペクトルに化合物構造を付与する手法と化合物クラス(オントロジー)を付与する手法を開発し、ユーザーがマスマスペクトルに構造情報を付与する機能を提供する。また、MassBank Human に蓄積した高品質マスマスペクトルデータに、化合物構造とオントロジーの付与を行う。さらに、大量の *in silico* 予測スペクトルを取り扱うために MassBank サーバーの高速化を行う。

・3.2 in silico MS/MS スペクトライブラリの開発(和泉 G)

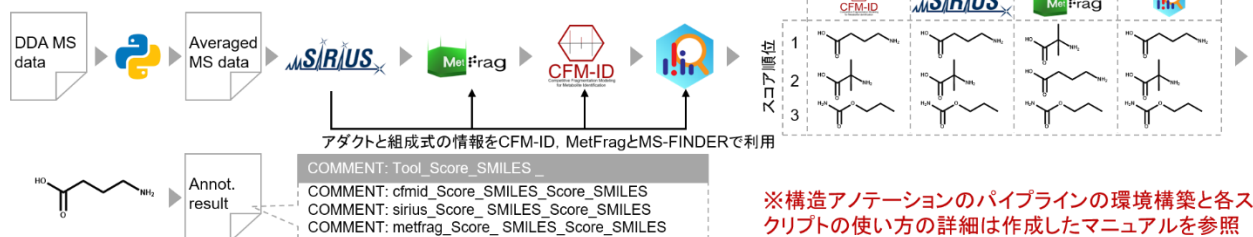
2024 年度は、開発項目2 MassBank Human の再解析パイプラインの要素技術である構造アノテーションの開発を行った。具体的には、MetFrag, CFM-ID, MS-FINDER SIRIUS を統合した構造アノテーションパイプラインの開発を完了させた(2.2 スペクトル再解析法の開発:平均化参照、表 3、図 3)。

さらに、HMDB や KEGG に登録されている代謝物を対象に、高精度の in silico MS/MS 予測スペクトルを算出するために、8 版 MassBank in silico サーバーの拡充を行った。具体的には、KEGG に登録されている親水性代謝物約 13,000 種を対象に結合解離エネルギーと水素再配置規則に基づき、定性的なフラグメント情報を算出し、8 版 MassBank in silico サーバーに in silico MS/MS スペクトルを登録した。現在までに、HMDB と KEGG に登録されている合計 95,362 種の親水性代謝物に対する in silico MS/MS スペクトル情報の登録を完了させ、中間評価時の目標である 5 万化合物の公開を達成した(図 4)。

表 3 各アノテーションツールの概要

ツール名	説明	優位性	アノテーション方法
MetFrag 	最大二段階までのin silico fragment を算出し、プロダクトイオンと一致したin silico fragment の数が最も多い構造候補をアノテーションする。スコアリングでは、質量と相対強度 (質量と相対強度が大きいほどハイスコアになる)、結合乖離エネルギー、ニュートラルロスの情報に基づいてスコアリングされる。	ニュートラルロスの情報の利用	in silico fragmentアサイン数と物性情報
CFM-ID 	機械学習によるフラグメンテーション予測に加え、脂質や糖のフラグメンテーション規則を手動で追加した方法。機械学習によるフラグメンテーション予測では、2段階までの全ての開裂部位に基づくin silico フラグメントを算出し、マルコフ過程に基づく確率モデルからin silico MS/MSスペクトルを予測しており、正確な結合強度予測値 (開裂に必要な結合乖離エネルギー) に基づいてin silico fragmentationの高精度化を図っている (https://www.jstage.jst.go.jp/article/massspectrometry/7/1/7_A0066/_html/-char/ja)。さらに環構造に対しては一次元の配列に変換した説明変数による開裂予測モデルを用いることによって高精度化している。 1342 compound (METLIN)	確率モデルに加え、正確な結合強度予測値およびニュートラルロスや脂質等の特徴的なフラグメントの解析結果をマニュアルで追加することによって予測精度を改善した。	コサイン類似度
MS-FINDER 	実験MS/MS情報に基づいてまとめられた水素再配置規則を用いてin silico フラグメントとプロダクトイオンの一致度のスコアリングを行い、構造アノテーションする。	水素再配置規則による高精度なin silico フラグメンテーションを行っている。	in silico fragmentアサイン数と物性情報
SIRIUS (CSI:FINGER-ID) 	プロダクトイオンの情報に基づく分子フィンガープリントを算出する予測モデルを用いて (未知代謝物のMS/MSスペクトルから) 未知の代謝特性の分子フィンガープリントを予測し、構造データベースの分子フィンガープリントと照合することによって構造アノテーションする。 6258 compound (GNPS Public Spectral Libraries)	既知の部分構造とそのプロダクトイオンの情報に基づく部分構造のアノテーションによって、化合物クラスを高精度に予測する。	コサイン類似度

構造アノテーションのパイプライン



構造アノテーションスクリプトの開発

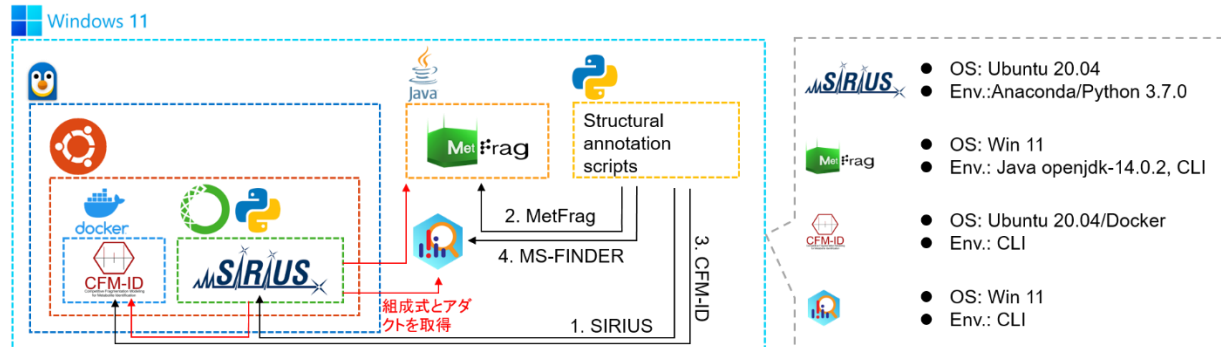


図 3 構造アノテーションパイプラインの構築

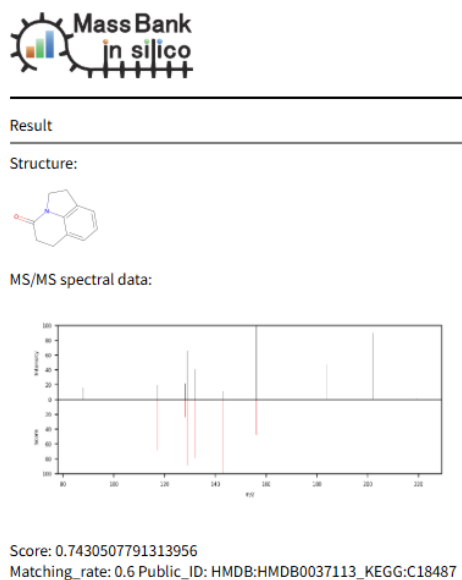


図 4 MassBank in silico を活用した実測スペクトル情報からの構造アノテーションの検索結果

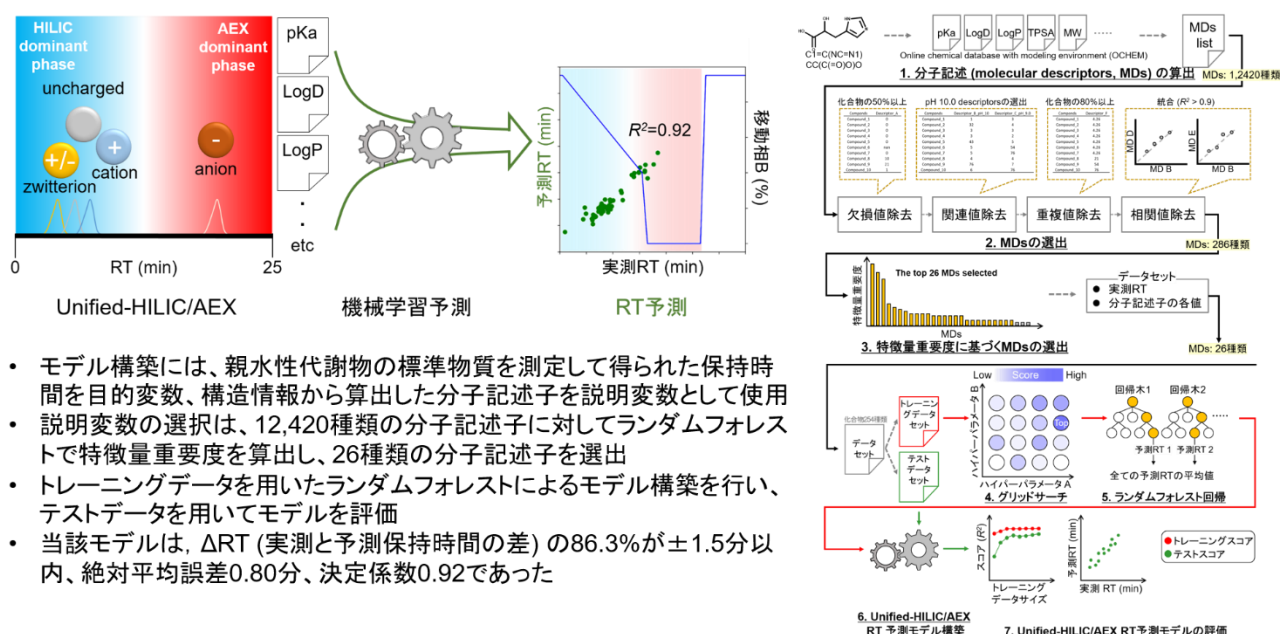
3.3 保持時間予測機能の開発(和泉 G)

化合物のアノテーションの精度向上を目的として、松田 G や平山 G で汎用的に使用されている LC/MS 測定法における低分子化合物の保持時間予測モデルを開発する。和泉 G で汎用的に使用している LC/MS 分析法である親水性相互作用陰イオン交換クロマトグラフィー質量分析 (HILIC/AEX/MS)、イオンクロマトグラフィー質量分析 (IC/MS)、逆相クロマトグラフィー質量分析 (RP-LC/MS) に対する保持時間予測モデルを構築する。2024 年度は、IC/MS の保持時間予測モデルの構築を進めた。具体的には、Chemaxon から親水性代謝物の分子記述子情報を全て取得し、情報を整理した。その後、IC/MS (アニオン・カチオン) で測定した標準品の保持時間情報を活用して、2 種の保持時間予測モデルの構築

を進めている。

・3.4 アノテーション法の開発(和泉 G)

開発項目 3.3 3.4 で開発された in silico MS/MS スペクトルライブラリおよび各種 LC/MS 分析法における保持時間予測情報をもとにアノテーション法の解析ツールの開発を進めた。2024 年度は、HILIC/AEX/MS データを使用してアノテーション法の解析プログラムを開発した(図 5)。ヒト血漿(SRM1950)抽出液のノンターゲットメタボロミクスデータに対し、in silico MS/MS prediction と保持時間予測による構造アノテーションを行った結果、216 種類の代謝特性に対する構造アノテーションに成功した。特に、in silico MS/MS prediction によって割り当てた構造候補は、保持時間予測を加味することで約 50%が偽陽性として削減された。



・3.5 β 版 MassBank in silico サーバーの構築(和泉 G)

昨年度までに、レンタルサーバーを取得し、MassBank サーバシステムを改変することで MassBank in silico サーバー (<http://insilico.massbank.jp/>) の β 版を構築した。2024 年度は、3.2 で開発した約 10 万種の親水代謝物の既存ルールに従った in silico MS/MS スペクトル情報を MassBank in silico サーバーに登録し、公開した。

・3.7 MassBank サーバーの高速化(和泉 G)

昨年度までの検証の結果、MassBank サーバーの高速化には、これまでの MassBank の形式を踏襲しながら最初からコードを書き直した方がスムーズであると結論付けた。ヨーロッパの MassBank グループから了承も頂き、開発を開始した。開発版の検索速度は、従来版と比べて、最大 1000 倍の高速化

を達成した(図 6)。

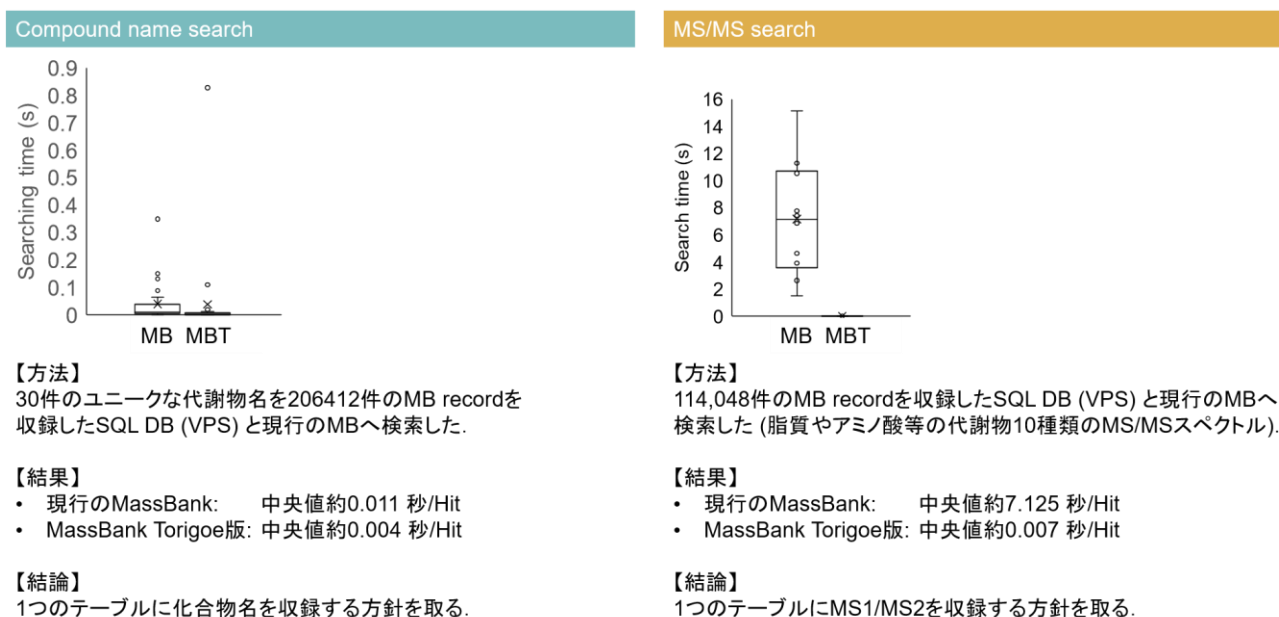


図 6 現行の MassBank と開発版の処理速度比較結果

開発項目4 MassBank のデータ拡充・普及・国際連携

MassBank のデータ拡充、普及、国際化を行う。MassBank Human に蓄積した高品質マススペクトルデータの中から、MassBank *in silico* で化合物構造とオントロジーが十分に付与されたものを集め、年に 1-2 回プロジェクト参加者による専門家レビューを行い、承認されたものを MassBank に登録する。これにより MassBank のデータを拡充させ、ライフサイエンスの基盤強化につなげる。また、本 PJ の普及のために国内学会での宣伝ブース出展(年 1 回程度)、国際学会での発表、ワークショップ提案(年 1-2 回程度)、ユーザーミーティング(年 1 回程度)を行う。さらに、産官学のユーザーコミュニティ10 名程度のアドバイザリ会議を年 1-2 回実施し、ユーザーコミュニティのニーズの把握と、ユーザーコミュニティからの活発なデータ提供が可能な体制を構築する。

4.1 MassBank データ登録

2023 年度は、MassBank Human に蓄積した高品質マススペクトルデータの中から、化合物構造とオントロジーが十分に付与された MassBank レコードを集め、専門家レビューを行い、10件を承認した。MassBank human の GitHub ページ上に、MassBank の MassBank-data レポジトリのブランチを作成して、10件をアップロードし、本家 MassBank-data レポジトリへの登録を依頼するプルリクエストを行った。これらの作業を通じて、MassBank レコードフォーマットの詳細、作業プロトコルの確認ができた。2024 年度は、MassBank Human に蓄積した高品質マススペクトルデータへの化合物アノテーション法の構築を行った。そこから、化合物構造が十分に付与された MassBank レコードを集める作業の自動化を進めた。また、代謝物アノテーションレベルについて、MassBank EU グループとの意見交換を行った。これらの成果をもとに、2025 年 5 月にメンバーが一堂に会して、代謝物アノテーション結果の専門家レビ

ユーを実施する計画である。

・4.2 MassBank のユーザー講習会を実施

日本質量分析学会スペクトルデータ部会と連携して下記の講習会を 2 回実施した。

1) 松田史生、講演「マスマスペクトルデータベース MassBank の使い方」、第 29 回質量分析技術者研究会 2024 年度第 1 回例会 / 第 5 回スペクトルデータ部会シンポジウム、大阪大学 基礎工学研究科 (ハイブリッド)、2024 年 5 月 15 日 (参加者現地 20 名オンライン 70 名程度)

2) 松田史生、技術講習「マスマスペクトルデータ共有に向けた連携の最前線」、第 6 回日本質量分析学会スペクトルデータ部会 / 第 8 回東北談話会共催シンポジウム、オンライン、2025 年 3 月 14 日 (参加者 100 名程度)

・4.3 国際連携 (Metabolomics 学会への参加)

海外の MassBank コミュニティーとの国際連携を進めるために国際学会発表を行った。

1) Fumio Matsuda; Akiyoshi Hirayama; Ryosuke Hayasaka; Masatomo Takahashi; Akiyasu C. Yoshizawa; Kozo Nishida; Taihei Torigoe; Takato Kiuchi; Yuki Matsuzawa; Hiroshi Tsugawa; Shujiro Okuda; Yoshihiro Izumi: The Shin-MassBank project: Enrichment of MassBank records using human metabolome datasets. 72nd ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics (Anaheim, USA) 2024/6/4

2) Fumio Matsuda; Akiyoshi Hirayama; Ryosuke Hayasaka; Masatomo Takahashi; Akiyasu C. Yoshizawa; Kozo Nishida; Taihei Torigoe; Takato Kiuchi; Yuki Matsuzawa; Hiroshi Tsugawa; Shujiro Okuda; Yoshihiro Izumi: Shin-MassBank project: Generation of high-quality product ion spectra from public metabolome DDA datasets. Metabolomics 2024 (Osaka, Japan). 2024/6/16-20

3) Fumio Matsuda; Akiyoshi Hirayama; Ryosuke Hayasaka; Masatomo Takahashi; Akiyasu C. Yoshizawa; Kozo Nishida; Taihei Torigoe; Takato Kiuchi; Yuki Matsuzawa; Hiroshi Tsugawa; Shujiro Okuda; Yoshihiro Izumi: Shin-MassBank project: Generation of high-quality spectra from human metabolome datasets. International Mass Spectrometry Conference 2024 (Melborn, Australia) 2024/8/17-23

また、ドイツ Leibniz Institute of Plant Biochemistry の Steffen Neumann をリーダーとする MassBank EU チームメンバーとのオンラインミーティングを 3 回行い、マスマンクレコードフォーマットの拡張に関する意見交換を行った。うち一回は、Metabolomics 2024 に参加するため来日したメンバーらと対面での意見交換を実施できた (表 4、図 7、8)。

表 4 MassBank EU チームメンバーとのミーティング

日時	内容	場所	参加者数	目的
2024 年 6 月 18 日	第 3 回 MassBank EU メンバーとのミーティング (非公開)	大阪・AT C・アジレン ト会議室	12 人	プロジェクトの進捗報告＋ MassBank サーバー新バ ージョンに関する情報交換

2025 年 1 月 7 日	第 4 回 MassBank E U メンバーとのミーティン グ(非公開)	オンライン	16 人	RDF 策定内容のすり合わ せ。代謝物アノテーションレ ベルの意見交換。
2025 年 3 月 28 日	第 5 回 MassBank E U メンバーとのミーティン グ(非公開)	オンライン	15 人	レコードフォーマット改定内 容の確認

・4.4 展示出展(メタボロミクスシンポジウム)

最もコアなユーザーのコミュニティとして想定している第 18 回メタボロームシンポジウム 2024 年 10 月 23 日(水)ー25 日(金) 山形県鶴岡市 鶴岡メタボロームキャンパスへの出展を行った。メタボロームシンポジウムには約 400 名の参加があり、100 名にチラシを配布できた。また、データレポジトリである MB-POST の B 版の展示およびデモを行い、本 PJ のアドバイザーである三枝大輔(帝京大学准教授、スペクトルデータ部会担当、東北メガバンク、図 9)、三浦大典(産総研 バイオメディカル研究部門)、岩橋福松(住友化学、創薬メタボロミクス)から機能に関するコメントを得ることができた(表 5)。また、大口のユーザーとして想定している下記研究者らにデモを行い必要な機能などについての情報を収集した。おおむね使いやすさが好評であり、大阪大学からは、リバイス中の論文用のデータの寄託をテストケースとして実施することにつながった。

- ・福崎英一郎(大阪大学教授・食品メタボロミクス)
- ・蓮沼誠久(神戸大学教授・微生物メタボロミクス)
- ・有田誠(慶応大学教授、理研 TL・リポドミクス)
- ・及川彰(京都大学教授・食品メタボロミクス)
- ・池田和貴(かずさ DNA 研 GL・リポドミクス)

表 5 第 18 回メタボロームシンポジウムの MB-POST デモに対するコメント

名前	所属	コメント内容
及川彰	京都大学	生物種や n 数が異なるデータをデポジットする際にどのように登録するのか？ 論文等から自動でメタデータを作成できるようなシステムを搭載してほしい
早川英介	九州工大	再解析を実施する際には、メタデータの充実が必須(早川先生が行いたい再解析にはサンプルの詳細情報(ex. WT や KO の詳細、処理の内容など)が必須となる)
		Principal investigator の情報としては名前を記載するのではなく、ORCID 等一義的に特定できるものにした方がよい(デポジットされているデータの品質を調査する際に一義的に決まる情報でスクリーニングをかけたい) => jPOST で検討？
福崎英一郎	大阪大	佐藤さん@宮崎農試の方のデータデポジットをやってみて、以後論文投稿の際には積極的にデータデポジットを行っていただける=>やってみたコメント。ゲームのルール of 明示が必要。
岩橋福松	住友化学	Preset を input/output できるようにしてほしい(社内他部署と preset を共有したい; デポジットする担当者間での違いを防ぎたい)
馬越泰	島津製作所	Raw data をデポジットする際のセキュリティは大丈夫か?(raw data にはデータ保存先の PC 情報等が含まれている)
池田和貴	かずさ DNA	MB in silico についてある程度候補を絞り込めるだけでもありがたい。LC で分離できない化合物の構造アノテーションの精度は低いので改善されると良い。
高原健太郎	サーモフィ	MB Post にアップロードする際に、raw data 自体の信頼性は評価しているの

	ツシヤー サイエンティフィック	か？SMB のシステムを Docker で管理し, Local で使えるようにしてほしい。
三枝大輔	帝京大	Preparation の Internal standard に関して SPLASH や太陽日産のアミノ酸のミックスなど頻用される IS を選択できるようにしたほうが嬉しい。QC は何を使っているか記載が欲しい。Announcement の指定に関して Now を選択した際に注意ポップアップが欲しい。
三浦大典	産総研	カラムモードに関して記載があると嬉しい。

・4.5 アドバイザリ年 2 回(6 月、12 月)

アドバイザリ委員として、石濱泰(京都大学教授、日本質量分析学会会長、jPOST)、豊田岐聡(大阪大学教授、日本質量分析学会 Mass Spectrometry 編集長)、三枝大輔(帝京大学准教授、スペクトルデータ部会担当、東北メガバンク)、三浦大典(産総研 バイオメディカル研究部門)、岩橋福松(住友化学、創薬メタボロミクス)の5名に嘱託した。2024 年度は小アドバイザリ委員会を1回(メール審議)、アドバイザリ委員会を1回(オンライン)開催し、成果及び実施計画を説明した(表 6)。2025 年 1 月 30 日アドバイザリ委員会では 10 件以上にわたるコメントが挙がり、今後の研究開発に反映する計画である(図 10)

表 5 2024 年度のアドバイザリ委員会実施状況

日時	内容	場所	参加者数	目的
2024 年 7 月 25 日	小アドバイザリ委員会(非公開)	メール審議	—	実施状況の報告、実施計画への収集
2025 年 1 月 30 日	アドバイザリ委員会(非公開)	オンライン	16 人	成果、および実施計画へのコメント収集

表 6 2025 年 1 月 30 日 アドバイザリ委員会(非公開)での主なコメント

1. MB-POST へのデータ登録を増やすための戦略	ASMS が国際学会のワークショップを行い国際連携を図るべき。 夢を語るポスター発表、プレゼンテーションを行うべき。(ご利益を次のターゲットの学会でやる) ユースケースを明確化し、利益を理解してもらえるように学会と連携。食品:農芸化学会、生物工学会、薬学会なのはユーザーの増加が見込める。 プロテオ:レポジトリがどんどん増えていく。ヨーロッパ、アメリカ以外の動向も見て、日本のポジションをとるのが重要。
2. 再解析ターゲット	ヒトの次のターゲット:植物、食品、環境、地球科学、製薬(プロテオの戦略は国プロの領域に張り付く) このうちデータが出てきて人が多いのは、環境化学会でアドバイザー拡充は鳥取環境大山本氏が適任 存在感を出すにはデータを出してくれそうなところに出る。質量分析学会、分生、医用マス、植物、食品か？ MS 誌と連携し、データを掲載の義務付けを行うとよい。その際、J-Stage Data とのすみわけを考量する必要がある。
3. RDF	RDF での統合について、遺伝研黒川先生などからの問い合わせがあるので、対応できるようにすべき。

開発項目5 MassBank Links ポータルの開発

5.1.1 MassBank レコードの RDF 化の方針決定(津川 G)

2024 年度の目標であった MassBank の RDF 化についての方針決定については、DBCLS の研究員および MassBank-EU のメンバーと様々に意見を交わした結果、おおむね達成できたと言える。具体的な方針として：

1. 現在の MassBank レコードのメタデータ情報は原則すべて RDF 化する
2. オントロジーは原則、国際的に定義された controlled vocabulary (CV) を用いる

の2点であると言える。たとえば、化合物表現の基本的なオントロジーは schema.org で定義される CV を用いている。一方、まだ国際的に CV が定義されていないものに関しては、仮想的に `@prefix mbo: <http://www.massbank.jp/ontology/>` と定義して、MassBank 独自のオントロジーを表現した。今後まだ CV 化されていない MassBank 独自のオントロジーに関しては、proteomics standards initiative (PSI) に定義登録を依頼するなどして、国際化を進めていく。また、MB-POST 内のメタデータ共有のため、プロジェクト内でのオントロジー共通化を協議の上、進めていく。RDF ポータルへの登録に必要な TTL ファイル (RDF データそのもの)、Model.yaml ファイル (RDF schema の生成に必要な定義ファイル)、Prefix.yaml ファイル (TTL ファイルで定義されている Prefix のリスト)、RDF Schema (YAML ファイルをインプットとし、公開されている RDF-config というプログラムで生成したもの)、SPARQL Query 例 (本 RDF の想定される使い方)、Metadata.yaml ファイル (TTL ファイルの作成者などのメタデータ情報) の準備は完了し、DBCLS のメンバーにも承諾いただいた段階にある。MassBank 内のすべてのレコードも TTL ファイルに変換済みであり、合計で 117,295 TTL ファイルを生成した。本情報は、https://github.com/systemsomicslab/MassBank-RDF/tree/main/draft_ttl/MassBank_RDF_ttl で公開済である。今後は、実際に RDF ポータルにて公開し、国際化と機能面向上のための改善に取り組む (図 11)。

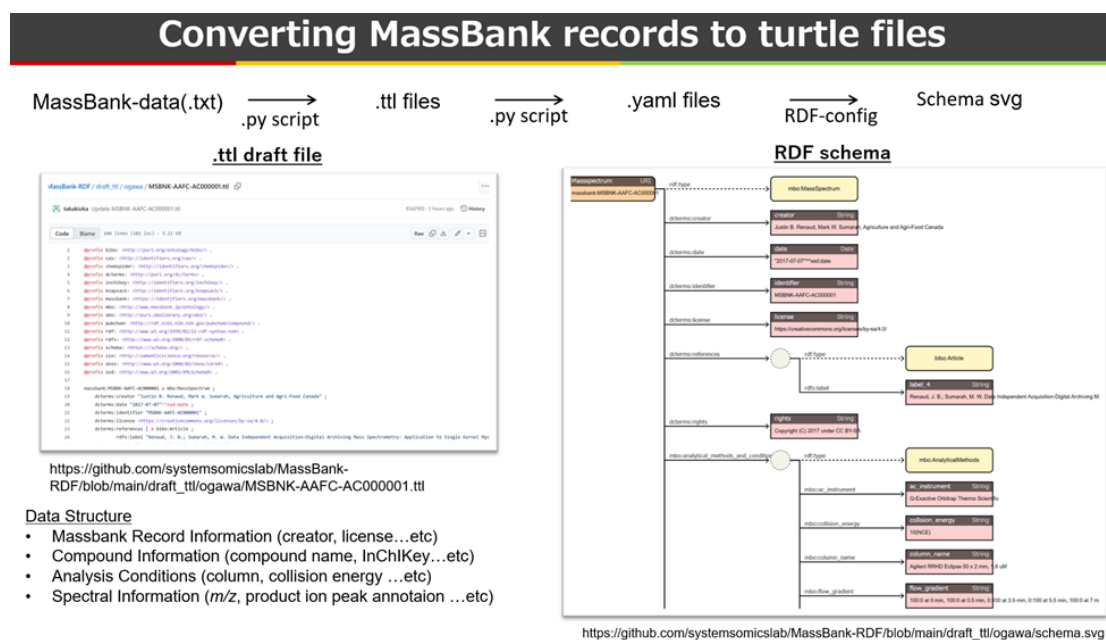


図 11 MassBank RDF の概要

・5.2. 脂質 in silico MS/MS スペクトルの開発推進(津川 G)

脂質 in silico MS/MS スペクトルは随時更新を行い、論文化へと繋げている。衝突誘起解離(CID)法から得られる脂質 MS/MS スペクトルの拡充、MS-DIAL への実装、生体試料への適用という流れで、2024 年度には Nature Aging に 1 報、Analytical Chemistry に 2 報、成果を掲載した。また、比較的新しいフラグメンテーション法である electron activated dissociation (EAD) から得られる脂質 MS/MS スペクトルのアノテーションアルゴリズムの実装を行ったことで、従来よりも詳細な脂質構造を明らかにする手法を開発し、MS-DIAL 5 として Nature Communications に発表した。

・5.3.1 MS-DIAL/MS-FINDER と MassBank を繋ぐプログラム開発・公開(津川 G)

昨年度に引き続き、MS-DIAL と MS-FINDER の MassBank フォーマットサポートプログラムの開発を行った。2024 年度は、松田・和泉グループが実際に MS-DIAL/MS-FINDER を用いてバグの抽出および津川グループへのフィードバックおよび改善というループを回すことで継続開発を行ったことで、比較的安全性の高い実装が完了したと言える。また実際に、本プログラムから出力した MassBank フォーマットを MassBank に登録する操作を行い、MassBank Github が定めるバリデーションプログラムを通過できることを確認した。プログラム一式は、<https://github.com/systemsomicslab/MsdialWorkbench> にて公開している。

・5.4.1 MB-POST の再解析基盤の構築(津川 G)

2024 年度では、MB-POST の再解析に資するバイオインフォマティクスワークフローを構築するため、Linux 上にてコマンドラインで動作する MS-DIAL の開発を行った。実際に開発を行った後はまず、Windows OS 上で通常の Graphical User Interface (GUI) バージョンから得られる結果とコマンドラインから得られる結果が同一のものを出力することを確認した。また、Linux 上で動作することも確認した。本バージョンはすでに、上記 Github で公開していることに加え、以下のホームページ上でチュートリアルページも作成している。<https://systemsomicslab.github.io/msdial5tutorial/utls.html#console-app>

§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)	0 件
	国際(欧文)	10 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

論文は e-Rad に登録・リストをコピー 以下は計算用メモ

1. Fumio Matsuda: Data Processing of Product Ion Spectra: Methods to Control False Discovery Rate in Compound Search Results for Untargeted Metabolomics/ Mass Spectrometry 13 (1), A0155-A0155 <https://doi.org/10.5702/massspectrometry.A0155>
2. Nami Sakamoto, Takaki Oka, Yuki Matsuzawa, Kozo Nishida, Aya Hori, Makoto Arita, Hiroshi Tsugawa*. MS2Lipid: a lipid subclass prediction program using machine learning and curated tandem mass spectral data. *Metabolites* 14, 602, 2024.
3. Hiroaki Takeda, Yuki Matsuzawa, Manami Takeuchi, Mikiko Takahashi, Kozo Nishida, Takeshi Harayama*, Yoshimasa Todoroki, Kuniyoshi Shimizu, Nami Sakamoto, Takaki Oka, Masashi Maekawa, Mi Hwa Chung, Yuto Kurizaki, Saki Kiuchi, Kanako Tokiyoshi, Bujinlkham Buyantogtokh, Misaki Kurata, Aleš Kvasnička, Ushio Takeda, Haruki Uchino, Mayu Hasegawa, Junki Miyamoto, Kana Tanabe, Shigenori Takeda, Tetsuya Mori, Ryota Kumakubo, Tsuyoshi Tanaka, Tomoko Yoshino, Mami Okamoto, Hidenori Takahashi, Makoto Arita*, Hiroshi Tsugawa*. MS-DIAL 5 multimodal mass spectrometry data mining unveils lipidome complexities. *Nature Communications* 15, 9903, 2024.
4. Saki Kiuchi, Yasuhiro Otoguro, Tomoaki Nitta, Mi Hwa Chung, Taiki Nakaya, Katsuya Oobuchi, Kazunori Sasaki, Hiroyuki Yamamoto, Hiroshi Tsugawa*. Using variable data independent acquisition for capillary electrophoresis-based untargeted metabolomics. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry* 35, 2118–2127, 2024.
5. Hiroshi Tsugawa*, Tomoaki Ishihara, Kota Ogasa, Seigo Iwanami, Aya Hori, Mikiko Takahashi, Yutaka Yamada, Naoko Satoh-Takayama, Hiroshi Ohno, Aki Minoda, Makoto Arita*. A lipidome landscape of aging in mice. *Nature Aging* 4, 709–726, 2024.
6. Federico Torta, Nils Hoffmann, Bo Burla, Irina Alecu, Makoto Arita, Takeshi Bamba, Steffany AL Bennett, Justine Bertrand-Michel, Britta Brügger, Mónica P Cala, Dolores Camacho-Muñoz, Antonio Checa, Michael Chen, Michaela Chocholoušková, Michelle Cinel, Emeline Chu-Van, Benoit Colsch, Cristina Coman, Lisa Connell, Bebiana C Sousa, Alex M Dickens, Maria Fedorova, Finnur Freyr Eiríksson, Hector Gallart-Ayala, Mohan Ghorasaini, Martin Giera, Xue Li Guan, Mark Haid, Thomas Hankemeier, Amy Harms, Marcus Höring, Michal Holčapek, Thorsten Hornemann, Chunxiu Hu, Andreas J Hülsmeier, Kevin Huynh, Christina M Jones, Julijana Ivanisevic, Yoshihiro Izumi, Harald C Köfeler, Sin Man Lam, Mike Lange, Jong Cheol Lee, Gerhard Liebisch, Katrice Lippa, Andrea F Lopez-Clavijo, Malena Manzi, Manuela R Martinefski, Raviswamy GH Math, Satyajit Mayor, Peter J Meikle, María Eugenia Monge, Myeong Hee Moon, Sneha Muralidharan, Anna Nicolaou, Thao Nguyen-Tran, Valerie B

O'Donnell, Matej Orešič, Arvind Ramanathan, Fabien Riols, Daisuke Saigusa, Tracey B Schock, Heidi Schwartz-Zimmermann, Guanghou Shui, Madhulika Singh, Masatomo Takahashi, Margrét Thorsteinsdóttir, Noriyuki Tomiyasu, Anthony Tournadre, Hiroshi Tsugawa, Victoria J Tyrrell, Grace van der Gugten, Michael O Wakelam, Craig E Wheelock, Denise Wolrab, Guowang Xu, Tianrun Xu, John A Bowden, Kim Ekroos, Robert Ahrends, Markus R Wenk*. Concordant inter-laboratory derived concentrations of ceramides in human plasma reference materials via authentic standards. *Nature Communications* 15, 8562, 2024.

7. Hiroaki Takeda*, Manami Takeuchi, Mayu Hasegawa, Junki Miyamoto, Hiroshi Tsugawa*. A procedure for solid phase extractions using metal oxide coated silica column in lipidomics. *Analytical Chemistry* 96, 17065–17070, 2024.
8. Fumika Mi-Ichi*, Hiroshi Tsugawa, Tam Kha Vo, Yuto Kurizaki, Hiroki Yoshida, Makoto Arita. Characterization of Entamoeba fatty acid elongases; validation as targets and provision of promising leads for new drugs against amebiasis. *PLoS pathogens* 20, e1012435, 2024.
9. Takaki Oka, Yuki Matsuzawa, Momoka Tsuneyoshi, Yoshitaka Nakamura, Ken Aoshima, Hiroshi Tsugawa*. Multiomics analysis to explore blood metabolite biomarkers in an Alzheimer's Disease Neuroimaging Initiative cohort. *Scientific reports* 14, 6797, 2024.
10. Kanako Tokiyoshi, Yuki Matsuzawa, Mikiko Takahashi, Hiroaki Takeda, Mayu Hasegawa, Junki Miyamoto, Hiroshi Tsugawa*. Using data-dependent and independent hybrid acquisitions for fast liquid chromatography-based untargeted lipidomics. *Analytical Chemistry* 96, 991-996, 2024.

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

1. 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	11 件
	国際	3 件
口頭発表	国内	1 件
	国際	0 件
ポスター発表	国内	7 件
	国際	9 件

② 招待講演

〈国内〉

1. 奥田修二郎、木内貴仁、吉沢明康、松田史生、「メタボロミクス用質量分析データリポジトリ MB-POST の構築とその運用」、第 72 回質量分析総合討論会 2024、つくば、6 月 11 日
2. 津川裕司、脂質代謝情報を切口とした統合オミクス解析の実例、第 12 回プロテオミクス・トレーニングコース、2025 年 2 月、国内
3. 津川裕司、「Data independent acquisition を用いたメタボローム解析法とその応用」、第 18 回メタボロームシンポジウム、2024 年 10 月、国内
4. 津川裕司、メタボロミクスデータサイエンス研究を通じた代謝多様性の理解、化学工学会第 55 回秋季大会、2024 年 9 月、国内

5. 津川裕司、代謝物アノテーション拡張に向けた質量分析データサイエンス、第 50 回 BMS コンファレンス、2024 年 9 月、国内
6. 津川裕司、メタボロミクスデータサイエンス研究を通じた代謝多様性の理解、化学工学会第 55 回秋季大会、2024 年 9 月、国内
7. 津川裕司、生命の時空間的脂質代謝変動を捉えるバイオインフォマティクス研究、ERATO 公開シンポジウム in JASIS、2024 年 9 月、国内
8. 津川裕司、Decoding metabolomics data to understand metabolisms of living organisms、RIKEN Seminar、2024 年 6 月、国内
9. 津川裕司、マルチモーダル質量分析データマイニングによる脂質多様性の理解、第 5 回スペクトルデータ部会シンポジウム、2024 年 5 月、国内
10. 和泉自泰、超微量生体試料からの定量的マルチオミクス解析への挑戦、JASIS 2024、千葉、2024 年 9 月 5 日

〈国際〉

1. 津川裕司、MS-DIAL 5 environment to facilitate multimodal mass spectrometry data mining that unveils lipidome complexities. TSMS 2024, June 27.
2. 津川裕司、Using MS-DIAL 5 for untargeted lipidomics data processing and the in-depth structure elucidation using EAD、Metabolomics 2024 SCIEX lunch time talk、2024 年 6 月、国際
3. Yoshihiro Izumi, Development of a mass spectrometry-based multi-omics analysis platform for next-generation metabolic research. 第 8 回 京都生体質量分析研究会・第 3 回 天然香気研究会 合同国際シンポジウム、京都、2025/2/27

③ 口頭講演

〈国内〉

1. 奥田修二郎、「プロテオーム・グライコーム・メタボロームでの課題間連携と技術の横展開」、DICP 研究交流会、JST 東京本館、10 月 4 日

〈国際〉

1. とくになし

④ ポスター発表

〈国内〉

1. 奥田修二郎、「MB-POST:メタボローム用質量分析データリポジトリの開発」、DICP 研究交流会、JST 東京本館、10 月 4 日
2. 高橋悠志、吉沢明康、松田史生、木下聖子、石濱泰、奥田修二郎、「マルチオミクス質量分析データの蓄積と再解析を支えるデータリポジトリ基盤」、トーゴの日シンポジウム、品川ザグランドホール、10 月 5 日
3. 高橋悠志、吉沢明康、木内貴仁、松田史生、奥田修二郎、「MB-POST: A novel data repository for storing high-quality spectral data in metabolomics mass spectrometry」、第 97 回日本生化学会大会、横浜、11 月 6 日

4. 早坂亮祐、平山明由、微量サンプルを対象にしたメタボローム解析における夾雑物質との向き合い方、第 50 回 BMS コンファレンス (2024) 記念シンポジウム、川崎、2024 年 9 月 19 日
5. 早坂亮祐、鳥越大平、高橋政友、和泉自泰、平山明由、松田史生、ヒトサンプル由来高品質スペクトルライブラリ MassBank Human の構築、第 18 回メタボロームシンポジウム in 鶴岡、鶴岡、2024 年 10 月 23 日
6. 鳥越大平、早坂亮祐、平山明由、高橋政友、和泉自泰、松田史生、ノンターゲットメタボロミクスデータの利活用に向けた MassBank Human と MassBank in silico の開発、トーゴの日シンポジウム 2024、東京、2024 年 10 月 5 日
7. 鳥越大平、高橋政友、Omidreza Heravizadeh、中谷航太、池田和輝、馬場健史、和泉自泰、Unified-HILIC/AEX の保持時間予測による親水性代謝物の構造アノテーションの評価、第 18 回 メタボロームシンポジウム、鶴岡、2024 年 10 月 23 日

〈国際〉

1. Fumio Matsuda; Akiyoshi Hirayama; Ryosuke Hayasaka; Masatomo Takahashi; Akiyasu C. Yoshizawa; Kozo Nishida; Taihei Torigoe; Takato Kiuchi; Yuki Matsuzawa; Hiroshi Tsugawa; Shujiro Okuda; Yoshihiro Izumi: The Shin-MassBank project: Enrichment of MassBank records using human metabolome datasets. 72nd ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics (Anaheim, USA) 2024/6/4
2. Fumio Matsuda; Akiyoshi Hirayama; Ryosuke Hayasaka; Masatomo Takahashi; Akiyasu C. Yoshizawa; Kozo Nishida; Taihei Torigoe; Takato Kiuchi; Yuki Matsuzawa; Hiroshi Tsugawa; Shujiro Okuda; Yoshihiro Izumi: Shin-MassBank project: Generation of high-quality product ion spectra from public metabolome DDA datasets. Metabolomics 2024 (Osaka, Japan). 2024/6/16-20
3. Fumio Matsuda; Akiyoshi Hirayama; Ryosuke Hayasaka; Masatomo Takahashi; Akiyasu C. Yoshizawa; Kozo Nishida; Taihei Torigoe; Takato Kiuchi; Yuki Matsuzawa; Hiroshi Tsugawa; Shujiro Okuda; Yoshihiro Izumi : Shin-MassBank project: Generation of high-quality spectra from human metabolome datasets. International Mass Spectrometry Conference 2024 (Melborn, Australia) 2024/8/17-23
4. Yushi Takahashi, Akiyasu C. Yoshizawa, Fumio Matsuda, Kiyoko F. Aoki-Kinoshita, Yasushi Ishihama, Shujiro Okuda, Mass spectrometry data repositories facilitate the multi-omics experimental data accumulation and reanalysis. APBJC2024, Okinawa, Oct 24 2024
5. Ryosuke Hayasaka; Tomoyoshi Soga; Akiyoshi Hirayama. Metabolomic analysis of efficiently recovered small extracellular vesicles derived from cancer cells. 72nd ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics (Anaheim, USA) 2024/6/5
6. Ryosuke Hayasaka; Tomoyoshi Soga; Akiyoshi Hirayama. Metabolomic analysis of extracellular vesicles derived from isocitrate dehydrogenase 1 mutation HCT116 cells. Metabolomics 2024 (Osaka, Japan). 2024/6/16-20
7. Taihei Torigoe, Masatomo Takahashi, Omidreza Heravizadeh, Kazuki Ikeda, Kohta Nakatani, Takeshi Bamba, Yoshihiro Izumi. Comprehensive structural annotation of polar metabolites in human plasma using unified-HILIC/AEX retention time prediction and HRMS/MS substructure information. 72nd ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics (ASMS 2024), Anaheim, California, 2024/6/3.
8. Yuri Imado, Masatomo Takahashi, Yuki Soma, Kohta Nakatani, Taizo Hanai, Yoshihiro Izumi, Takeshi Bamba. Intra-laboratory validation of four LC/MS quantitative analytical methods for human plasma metabolomics data integration. 72nd ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics (ASMS 2024), Anaheim, California, 2024/6/6.

9. Taihei Torigoe, Masatomo Takahashi, Omidreza Heravizadeh, Kazuki Ikeda, Kohta Nakatani, Takeshi Bamba, Yoshihiro Izumi. Predicting retention time in unified-HILIC/AEX/HRMS/MS for comprehensive structural annotation of polar metabolome. 20th Annual Conference of the Metabolomics Society (Metabolomics 2024), Osaka, 2024/6/17-18.

(4) 知的財産権の出願（国内の出願件数のみ公開）

① 出願件数

種別		件数
特許出願	国内	0 件

② 一覧

国内出願

該当なし

(5) 受賞・報道等

① 受賞

該当なし

② メディア報道

該当なし

③ その他の成果発表

該当なし

§5. 主要なデータベースの利活用状況

1. アクセス数

① 実績

表 1 研究開発対象の主要なデータベースの利用状況

名称	種別	2024 年度(月間平均値)
MB-POST	訪問者数	45.4
	訪問数	66.2
	ページ数	10,296
MassBank-RDF	訪問者数	584
	訪問数	5,218
	ページ数	
MsdiagWorkbench (MS-DIAL ・ MS-FINDER の Github)	訪問者数	29,580
	訪問数	98,795
	ページ数	
MassBank Human	訪問者数	465.0
	訪問数	1063.9
	ページ数	2425.6
MassBank In silico	訪問者数	363.7
	訪問数	666.8
	ページ数	696.5

② 分析

現在 PJ の立ち上げ中であり、今後の対外宣伝活動を通じてユーザーを獲得していく。

2. データベースの利用状況を示すアクセス数以外の指標

特になし。

3. データベースの利活用により得られた研究成果(生命科学研究への波及効果)

特になし

4. データベースの利活用によりもたらされた産業への波及効果や科学技術のイノベーション(産業や科学技術への波及効果)

本 PJ の成果を JST GteXPJ や NEDO バイオものづくり PJ 等に展開する検討を進めている。

§6. 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

チーム内ミーティングは今年度の開催回数、MassBank EU メンバーとのミーティングは通算の開催回数

年月日	名称	場所	参加人数	目的・概要
2024 年 4 月 18 日	第 1 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2024 年 5 月 23,24 日	第 2 回チーム内ミーティング+合宿(非公開)	大阪大学	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2024 年 6 月 16 日	第 3 回 MassBank EU メンバーとのミーティング(非公開)	オンライン	12 人	レコードフォーマット改定に向けたミーティング
2024 年 7 月 25 日	第 3 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2024 年 8 月 29 日	第 4 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2024 年 9 月 26 日	第 5 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2024 年 11 月 22 日	第 6 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	11 人	研究進捗報告のためのミーティング
2024 年 12 月 26 日	第 7 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2025 年 1 月 7 日	第 4 回 MassBank EU メンバーとのミーティング(非公開)	オンライン	16 人	レコードフォーマット改定に向けたミーティング
2025 年 1 月 30 日	アドバイサリ委員会(非公開)	オンライン	16 人	成果、および実施計画へのコメント収集
2025 年 1 月 30 日	第 8 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2025 年 2 月 27 日	第 9 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	11 人	研究進捗報告のためのミーティング
2025 年 3 月 27 日	第 10 回チーム内ミーティング(非公開)	オンライン	12 人	研究進捗報告のためのミーティング
2025 年 3 月 28 日	第 5 回 MassBank EU メンバーとのミーティング(非公開)	オンライン	15 人	レコードフォーマット改定に向けたミーティング

(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

なし。

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	Shin-massbank	シンマスバンク	生物サンプルから得たMS2スペクトルを蓄積するデータ処理パイプラインを開発する。MB-POST（ユーザーフレンドリーな生データリポジトリ）、MassBank Human（ヒト由来高品質マススペクトルライブラリ）、MassBank in silico（in silicoスペクトルデータベース）、MassBank Links（RDF機能）の4つのデータベースから構成される。	https://shin.massbank.jp/	2023.9.12	新規	データベース等	準備中
2	MassBank Human		ヒトDDAデータセット由来のMS2スペクトルライブラリ	http://human.massbank.jp/	2024.3.31	新規	データベース等	準備中
3	MassBank in silico		in silicoスペクトルデータベース	http://insilico.massbank.jp/	2024.3.31	新規	ツール等	準備中
4	MassBank Links		マスバンクレコードと外部データベース・ツールとの連携	https://github.com/systemsomicslab	2023.10.01	維持・発展	ツール等	準備中
5	MB-POST		メタボローム質量分析データのリポジトリデータベース	https://repository.massbank.jp	2024.12.24	新規	データベース等	準備中