

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】「次世代低分子マスペクトルデータベース シン・マスバンクの構築」

研究代表者：

松田 史生（大阪大学 大学院情報科学研究科 教授）

研究分担者：

奥田 修二郎（新潟大学 医学部 メディカル AI センター 教授）

平山 明由（慶應義塾大学 先端生命科学研究所 准教授）

和泉 自泰（九州大学 生体防御医学研究所 准教授／大阪大学 大学院理学研究科 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）



©2025 松田 史生(大阪大学) licensed under CC表示4.0国際

1. 研究進捗状況と成果

「次世代低分子マスマススペクトルデータベース シン・マスマスの構築」について各チーム間の密接な協力により、2025 年度の目標をすべて達成した。

【項目 1】MB-POST の構築：本 PJ の中核となるメタボロームデータレポジトリである MB-POST の構築および予備データの登録をすすめ、2025 年 10 月 8 日に公式サイト (<https://shin.massbank.jp/>) 上の MB-POST のリンクを更新し、公式サイトでの公開とした（図 1）。登録プロジェクト数は、公開時の 100 プロジェクトから 2026 年 5 月時点で 170 プロジェクトへと順調に増加している。

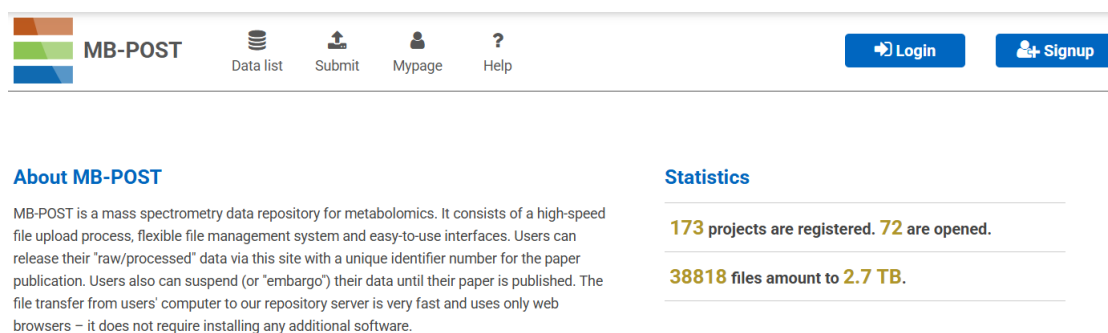


図 1 公開した MB-POST (<https://repository.massbank.jp>)

【項目 2】MassBank Human の構築：メタボロームデータから高精度注釈付きマスマススペクトルを生成する再解析パイプラインの構築を進めた。構築した再解析パイプラインを用いて、ヒト、マウス由来の 100 DDA データセットの再解析を行った。生成した総計 21,923 スペクトルを MassBank Human データベースおよび MassBank Human GitHub から公開した。

【項目 3】MassBank in silico の構築：MassBank in silico サーバーのβ版を構築した。現在までに、3.2 で開発した 9.5 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。

【項目 4】MassBank のデータ拡充・普及・国際連携：MassBank Human に蓄積した高品質マス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 1139 件を MassBank に提供した。ユーザー講習会を学会と連携して 2 回実施した。第 19 回メタボロームシンポジウム(2025 年 10 月 15–18 日 神戸大学)において展示を行った。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総計 4 回行った。

【項目 5】MassBank Links ポータルの開発：2025 年度は DBCLS が開催する Togathon および国内版バイオハッカソンに積極的に参加し、川島秀一研究員にアドバイスをもらいながら MassBank データの RDF 化を推進した。2025 年度は第一版として、RDF ポータルに掲載済みである。

2. 代表的な成果事例

1. Yushi Takahashi, Akiyasu C. Yoshizawa, Takato Kiuchi, Ryosuke Hayasaka, Taihei Torigoe, Masatomo Takahashi, Takaki Oka, Yuki Matsuzawa, Motohiro Ogawa, Yoshihiro Izumi, Hiroshi Tsugawa, Akiyoshi Hirayama, Fumio Matsuda, and Shujiro Okuda, Reviving Data Potential - the Reanalysis-Driven Metabolomics Data Repository MB-POST. Analytical Chemistry, (in revision)
概要：MB-POST は、質量分析によるメタボロミクスデータの投稿を受け付け、保管・管理に加え、アクセス番号の発行を司るデータリポジトリである。

以上