MSSJ2013 3P - 11

# Mass++: 質量分析データの一括解析
# Mass++: Batch analysis of mass spectrometry data

○田中聡[1]・藤田雄一郎[1]・吉沢明康[1]・福田充[2,3]・宇都宮眞一[1]・梶原茂樹[1]・青島健[2]・小田吉哉[2]・田中耕一[1]　1(株)島津製作所田中最先端研究所　2エーザイ(株)　3アイバイオテック(株)

○S.Tanaka[1], Y.Fujita[1], A.C.Yoshizawa[1], M.Fukuda[2,3], S.Utsunomiya[1], S.Kajihara[1], K.Aoshima[2], Y.Oda[2], K.Tanaka[1]　1 KTLAST Shimadzu　2 Eisai Co., Ltd.　3 iBio-Tech Co., Ltd.

Related Presentation : 1P-07, 3P-08, 3P-09, 3P-10

SHIMADZU　Eisai Co., Ltd.　ms3d FIRST Program

## 1. Introduction

質量分析は日に日に進歩しライフサイエンスにおいてなくてはならない技術の一つになっている。しかしその反面、技術の進歩等に伴いデータは増大化・複雑化し、研究者がそのデータを一つ一つ手動で確認・解析を行なうには非常に時間と手間がかかる。

その様な事態に対応する為我々は質量分析用ソフトウェアMass++ で一括解析機能を作成した。Mass++ の一括解析機能は以下を特徴とする。(1) 解析ソフトウェアと一体になっており、ユーザが一度手動で行なった解析をパイプラインとして定義できる。(2) プラグイン構造により独自に開発した機能を組み込む事ができる。

## 2. Mass++

Mass++ は最先端研究開発支援(FIRST)プログラムにより開発され、フリーで公開されている質量分析用解析ソフトウェアである。データ読込、表示、スムージング、ベースライン補正、同定、定量等さまざまな機能を持つ。

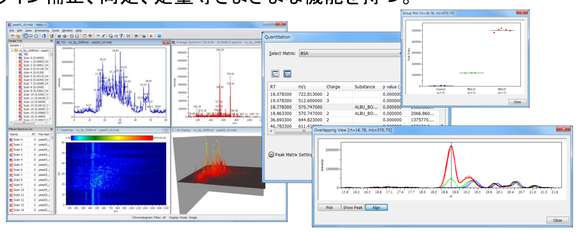


Fig. 1. Mass++

プラグイン構造を特徴としており、ソフトウェアを自由にカスタマイズできる。
また C/C++, C++/CLI, C#.NET, VB.NET 等を用いて自由に機能の開発を行なえる。

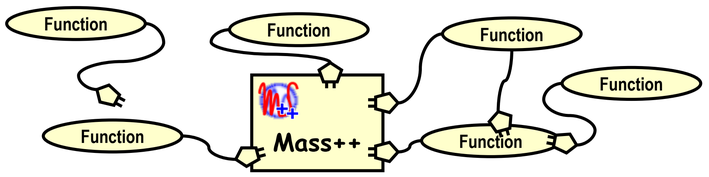



Fig. 2. Plug-in Structure

種々の読込機能がプラグインとして提供されており、いろいろなフォーマットのデータを読み込む事ができる。

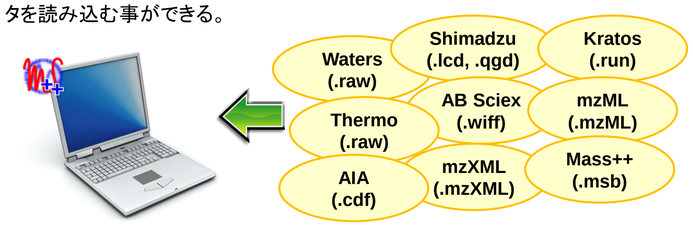



Fig. 3. Supported Data Formats

Mass++ は以下のサイトで公開されており、無償でダウンロードできる。

http://www.first-ms3d.jp/achievement/software/mass2

また Google Groups によるコミュニティも存在する。

https://groups.google.com/group/massplusplus/

## Acknowledgement

本研究は、日本学術振興会の最先端研究開発支援プログラムにより、助成を受けたものである。

## 3. Batch Analysis on Mass++

Mass++ は、複数のファイルに対して同一の解析・処理を一括実行する Batch Processing 機能を提供している。

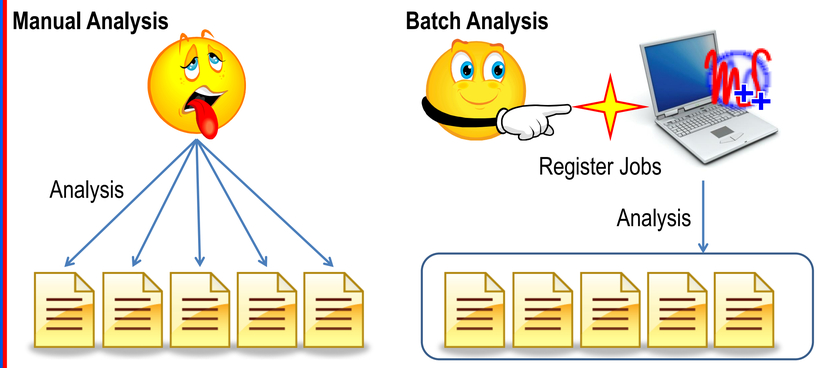
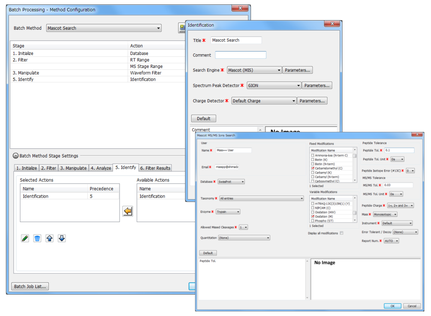



Fig. 4. Batch Analysis

Mass++ の Batch Processing では、以下の手順でジョブの登録を行なう。

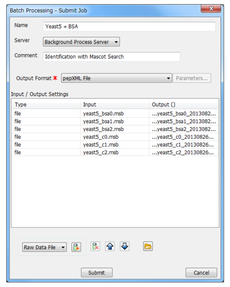
(1) 解析を行なう為のジョブを登録する。



Batch Methods
- Spectrum Filter (RT, Scan Number, Stage)
- Waveform filter
- Identification (Mascot, X! Tandem)
- Quantitation
- Peak Detection
- Database Settings
- Baseline Subtraction
- etc.

Fig. 5. Batch Processing – Method Configuration

(2) 入力ファイル、出力ファイル(フォーマット) を設定する。



Output Formats
- Tab Separate Values (.txt)
- mzXML file (.mzXML)
- mzML file (.mzML)
- Mass++ Original Format (.msb)
- Identification Result (.pepXML)
- MassBank Record (.txt)
- Mascot Generic Format (.mgf)
- Image File (.png)
- etc.

Fig. 6. Batch Processing – Submitting Job

(3) Submit ボタンをクリックするとコマンドプロンプトが表示され、(2) で選択した全てのファイルに対し一括解析を行なう。

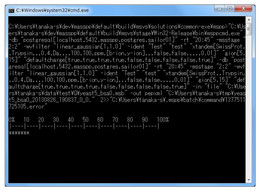


Fig. 7. Batch Processing – Running Jobs

## Using Operation History

Mass++ はいろいろな解析機能を備えており、ユーザによる解析内容を履歴として持っている。この履歴を利用して実際に解析を行なったサンプルとは別のサンプルに対して同様の解析を自動で行なう事ができる。

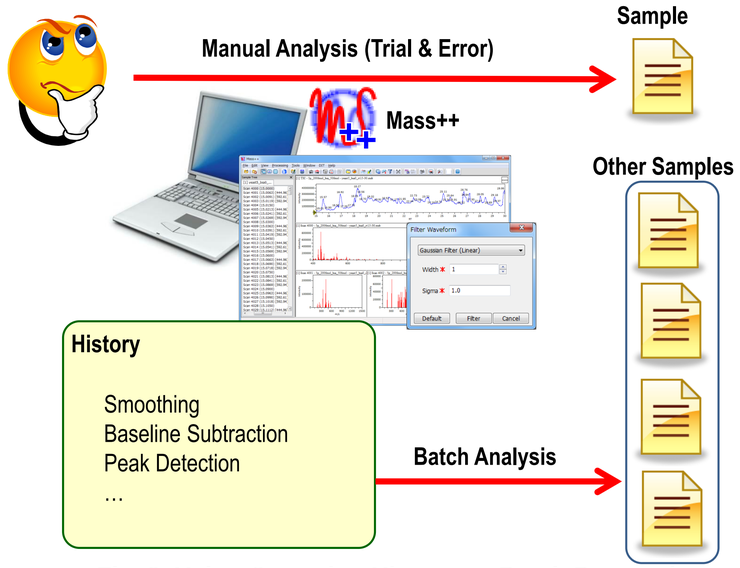



Fig. 8. Using Operation History on Batch Processing

## Development of Batch Methods

Mass++ はプラグイン開発キットを提供しており、これを用いて誰でも Mass++ のプラグインを開発できる。このプラグイン開発機能を利用して独自の自動化処理をバッチ・メソッドとして Mass++ に組み込む事ができる。

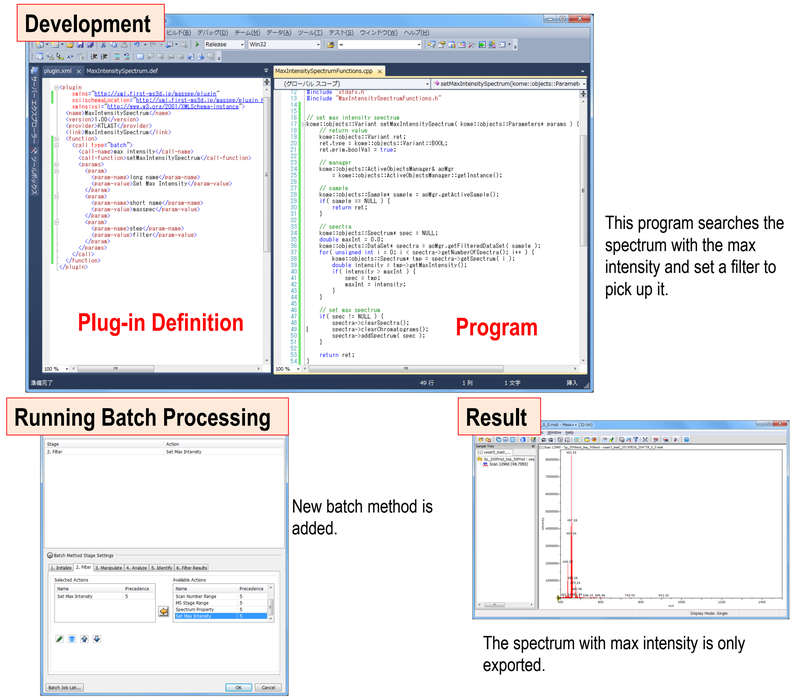



Fig. 9. Example of Developing Batch Method.