

先端科学技術研究科 修士論文要旨

所属研究室 (主指導教員)	計算システムズ生物学 (金谷 重彦 (教授))					
学籍番号	2311219	提出日	令和 8 年 1 月 13 日			
学生氏名	橋本 沙知					
論文題目	MassBank に基づく機械学習モデルによる電子イオン化質量スペクトル予測					
要旨						
メタボロミクス解析は近年、生命科学の解明においてますます重要になっている。そのため、LC-MS などの質量分析データから化合物を同定する手法が広く利用されている。しかし、質量分析データの解釈には専門的な知識が必要であり、多くの場合、データベースを参照して同定が行われている。一般的な化合物の多様性に比べ、質量スペクトルデータベースの数は限られており、汎用的な化合物同定には依然として課題が残されている。本研究では、MassBank などのデータベースを利用し、分子グラフから質量スペクトルのピークを生成するモデルを構築する。このモデルを用いて、分子同定を支援するための汎用的な予測ライブラリの構築を目指す。						