**MS2DecR: An R Package for MS/MS Deconvolution in Data-Independent Acquisition**

**Hiroyuki Yamamoto**

[h.yama2396@gmail.com](mailto:h.yama2396@gmail.com)

Japan Computational Mass Spectrometry (JCompMS) group

**Abstract**

Data-Independent Acquisition (DIA) in mass spectrometry generates complex MS/MS data that are invaluable for untargeted and targeted analyses in metabolomics, proteomics, and lipidomics. However, decoding DIA-MS/MS data poses challenges such as overlapping signals and high dimensionality. MS2DecR is an R package specifically designed to address these challenges by providing tools for MS/MS spectral deconvolution, peak alignment, and feature extraction. This package streamlines the analysis of DIA-MS/MS datasets, facilitating accurate compound identification and quantification. Here, we describe the features of MS2DecR and its application in DIA workflows.

**Keywords:** Data-Independent Acquisition, MS/MS, spectral deconvolution, feature extraction, R package.

**MS2DecR: Data-Independent AcquisitionにおけるMS/MSデコンボリューションのためのRパッケージ**

質量分析インフォマティクス研究会　山本 博之　h.yama2396@gmail.com

**Abstract**

質量分析のデータ独立型取得（DIA）は、メタボロミクス、プロテオミクス、リピドミクスにおける網羅的およびターゲット解析において、複雑なMS/MSデータを生成します。しかし、DIA-MS/MSデータの解読には、重なり合うシグナルや高次元性といった課題が伴います。MS2DecRは、これらの課題に対応するために設計されたRパッケージであり、MS/MSスペクトルのデコンボリューション、ピークアラインメント、特徴抽出のツールを提供します。このパッケージは、DIA-MS/MSデータセットの解析を効率化し、正確な化合物同定と定量を可能にします。本稿では、MS2DecRの特徴とそのDIAワークフローへの応用について説明します。

**Introduction**

データ独立型取得（DIA）は、生物学的サンプルから得られる包括的なMS/MSデータを収集するために広く用いられる質量分析手法です。DIAはデータ依存型取得（DDA）とは異なり、検出可能なすべてのイオンを系統的にフラグメント化し、解析のために複雑なスペクトルを生成します。

MS2DecRは、DIA-MS/MSデータの解読と解析の課題に対応するために開発されました。このRパッケージは、スペクトルデコンボリューション、ピークアラインメント、特徴抽出の効率的なアルゴリズムを提供し、メタボロミクス、プロテオミクス、リピドミクスの研究者にとって必須のツールとなっています。

**Method**

**1. スペクトルデコンボリューション**

MS2DecRは、高度なデコンボリューションアルゴリズムを使用して、DIA-MS/MSスペクトル内の重なり合うシグナルを分離します。これにより、個々の化合物を分離し、データの解釈性を向上させます。

**2. ピークアラインメント**

このパッケージは、保持時間やm/zの変動を考慮し、サンプル間での一貫したピークアラインメントを保証します。これにより、信頼性の高い比較解析が可能になります。

**3. 特徴抽出**

MS2DecRは、前駆体m/z値、フラグメンテーションパターン、ピーク強度といった主要な特徴を抽出し、下流解析に必要な包括的なデータセットを提供します。

**4. 可視化**

インタラクティブな可視化ツールにより、ユーザーはデコンボリューションされたスペクトル、アラインメントの品質、特徴抽出結果を評価でき、データ探索と解釈が向上します。

**Results**

MS2DecRは、さまざまなDIAアプリケーションをサポートします：

1. **メタボロミクス**: 複雑な生物学的サンプル中の代謝物の同定と定量。
2. **プロテオミクス**: タンパク質同定のためのペプチドフラグメンテーションパターンの特性評価。
3. **リピドミクス**: 脂質種およびその構造的多様性の解析。

**Conclusion**

MS2DecRは、DIA-MS/MSデータのデコンボリューションと解析に対する堅牢なソリューションを提供します。その機能は、複雑なスペクトルの解読を効率化し、研究者が有用な洞察を得ることを可能にします。将来的な開発では、機械学習手法を統合した特徴抽出の強化や、新しいMS技術への対応拡張を目指しています。

**公開情報**

MS2DecRは、オープンソースのRパッケージとしてGitHubで公開されています：<https://github.com/hiroyukiyamamoto/MS2DecR>。詳細なドキュメントとサンプルワークフローが提供されており、多様な研究への応用を支援します。