

# データのアップロード手順

検索解析結果の送付には、プロテオーム統合データベース jPOST の repository サイトの機能を利用します。

現在、プロテオーム研究の論文発表には、測定結果(いわゆる“生データ”)の開示が必要で、このためデータを寄託(deposit)する公的サイト(repository)が、主にイギリスとアメリカに設けられています。jPOST 計画では、国際標準に沿った寄託サイト jPOST repository を開設しており、今回の結果送付には、その「デモ版」サイト(以下「デモサイト」)を利用します。

## jPOST repositoryデモ版サイト (デモサイト) の使い方

<https://rep-demo.jpostdb.org/>

このデモサイトは基本的には jPOST repository と同じ機能を持ち、同じ情報の入力が必要です(従ってこのサイトは、jPOST repository にデータを寄託するための事前の練習用にも利用できます)。



### 1) ログインする

ユーザー登録済みの場合は、ページ右上、右から2番目の「Sign in」からログインします。

ユーザー未登録の場合は、まず、ページ右上端の「Sign up」をクリックします。連絡の取れるメールアドレス、パスワード、氏名、所属、ORCID ID (持っている場合)を入力して、ユーザーアカウントを作成します。

なお jPOST repository 本体では、入力されたメールアドレスに対して確認メールを送信しますが、このデモサイトでは確認は行いません。

### 2) メタデータ入力の準備をする

寄託・公開が必要なのは生データだけではなく、「そのサンプルの生物種」や「分画方法」、「消化酵素の種類」といった、主に実験手法に関わる情報、いわゆるメタデータも登録・公開が必要です。メタデータとは

即ち、「そのデータを用いて再度データベース検索などを行うときに必要な、そのデータの内容を説明する追加情報」と表現することもできます。

このメタデータの入力は手間がかかるため、jPOST では、実験手順とメタデータをまず、まとめて preset という形で登録し、その後で実際のデータを登録する、という流れでデータ寄託を進めます。

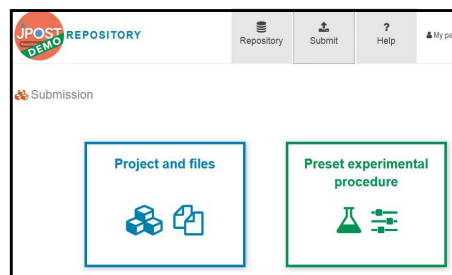
## 2-1) 画面最上段メニュー内の「Submit」ボタンを押す

「Project and files」と「Preset experimental procedure」という 2 個のボタンが出現します。メタデータの入力のためには、右にある緑色のボタン「Preset experimental procedure」をクリックします。

ここに表示されるように、jPOST ではメタデータを

Sample, Fractionation,  
Enzyme/Modification, MS mode

の 4 つのカテゴリに分類しています。



## 2-2) 「Sample」タブをクリック、タブがハイライト表示されていることを確認の上、「Add new Sample」ボタンをクリックする

各入力欄の右にある例を参考に、その実験についてのメタデータを入力します。**\***のついている項目は必須入力です。

なお、今回はダウンロードしたファイルを利用しており、演習ではメタデータは利用しません。しかし**入力しないと先に進めない**ので、**適当な文字を入力して進めてください**。

入力を終わると、「Confirm」ボタンをクリックします。表示内容を確認したら、「Submit Sample」ボタンをクリックします。

入力したデータが表示されたことを確認してください。

ID	Title	Species	Tissue	Cell type	Disease	File	Last modified
000000005	Sample	Arabidopsis thaliana (Mouse-ear cress)					2017-06-15

## 2-3) 「Fractionation」タブをクリック、タブがハイライト表示されていることを確認。「Add new Fractionation」ボタンをクリックする

「Sample」と同様、必須入力の部分は適当に入力して進めてください。

## 2-4) 以下同様に、「Enzyme/Mod.」タブ・「MS mode」タブをクリックして、「Add new ...」ボタンをクリックする

なお、これらの4項目は、どの順番で入力してもかまいませんし、複数個作成することも可能です(今回はその必要はありません)。

### 3) 再度、最上段メニューの「Submit」ボタンをクリックし、今度は「Project and files」ボタンをクリックする

次いで、実際のデータをアップロードする段取りを開始します。この過程は Define project, Select files, Upload files, Confirm の4段階に分けられていますが、メタデータ入力「Preset experimental procedure」の場合とは違って、こちらは(左から)順番に作業しなければなりません(厳密には、一部は順番を無視できるように設計されていますが、混乱を避けるため、今回は順番通りに入力することをお勧めします)。



#### 3-1) 「Add new Project」をクリックする

1つの研究結果は複数の生データファイルから構成されることもありますし、単一のファイルのこともあります。ここで「Project」と呼んでいるのは、データを公開するときの一つの単位、「分けてしまうと意味が判らなくなる最小(以上の)単位」です(例えば TMT, iTRAQ といった isobaric tag の実験は、その実験セットに対応するように測定結果ファイルを組み合わせないと、内容が理解できません)。

ここではその project の内容について入力します。同様に \* 付きの項目は必須入力です。

なお、「Announcement」の項目で「Now」を選ぶと、アップロードを完了したデータ(今回の場合は解析結果)が即座に、ネットから誰にでも見えるようになります。「Unfixed」にしておくと、当面1年間は公開されません(今回アップロードされた結果は、一定期間後に削除する予定です)。

最後に「Confirm」をクリックし、確認画面を見て、問題がなければ「Submit Project」をクリックします。

Field	Value
Title	Sample
Keywords	sample, BMS, MSSJ
Description	A sample project for the description of the jPOST repository demo site for BMS Conference, MSSJ.
Parent project	
Announcement	Unfixed
Principal Investigator	Someone
Affiliation	Somewhere
Note	

#### 3-2) 今入力した「プロジェクト」が下の表中に生成されているのを確認し、「Select」をクリック(※)

一人の研究者が複数のプロジェクトを作成することが可能なので、「今からアップロードするデータが、ど

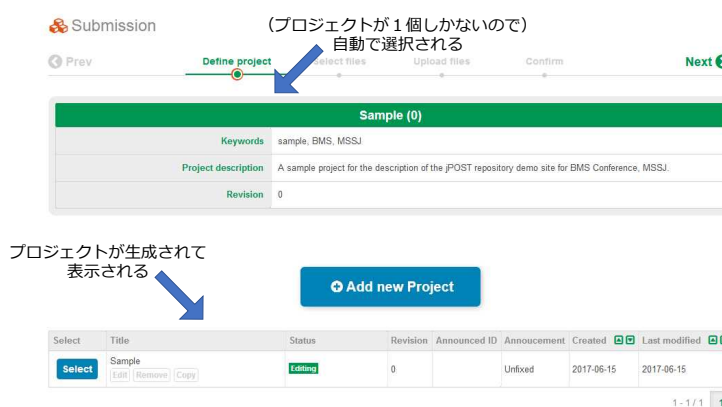
のプロジェクトのデータなのか」をここで指定します。「Add new Project」ボタンの上に、選択されたプロジェクトのデータが表示されます。

この機能を用いて、「プロジェクトだけ先に作成し、その後改めてデータをアップロードする」といった使い方も可能です。

データ寄託作業を完全に

終了すると、そのプロジェクトの Status は Editing から Submitted に変更され、選択できなくなります。

※ … 初期状態では「最も最近に作成されたプロジェクト」が自動的に選択されているので、プロジェクトが 1 個しかない場合は、特にこの作業を行う必要はありません。



### 3-3) 「Select files」を直接クリックするか、または「Next」をクリックしてファイル選択画面に進む

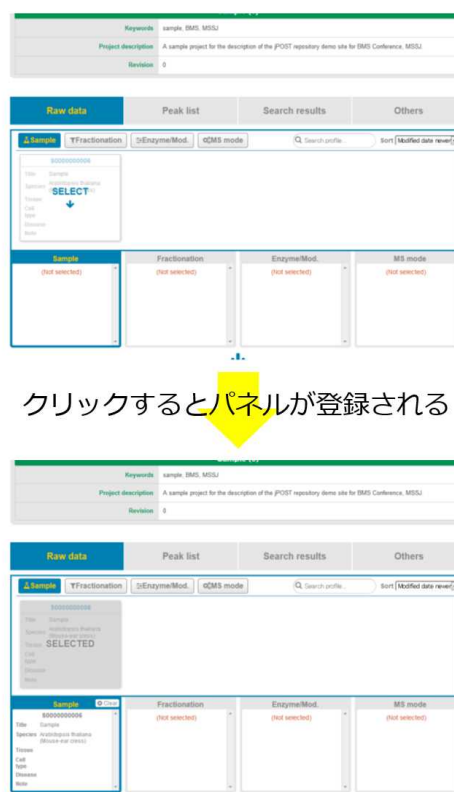
jPOST repository には任意のファイルがアップロードできますが、生データファイルのアップロードは必須です。また、生データには属性の説明(メタデータの付加)が必要で、このために、2) で作成したデータを利用します。

#### 3-3-1) 「Raw data」タブで、「Sample」「Fractionation」「Enzyme/Mod.」「MS mode」の4つの項目それぞれについて、(これからアップロードする生データについて) 2) で作成したメタデータを入力する

入力方法はシンプルです。2) で作成したメタデータが、コンパクトなパネルの形で表示されているので、それをクリックすることで入力が完了します。

まず「Sample」ボタンを押した状態で、そのすぐ下に表示されているメタデータのパネルをクリックすると、そのコピーが更に下の「Sample」という項目に入力されます。同様に、「Fractionation」「Enzyme/Mod.」「MS mode」のボタンを押して、各パネルをクリックしてください。

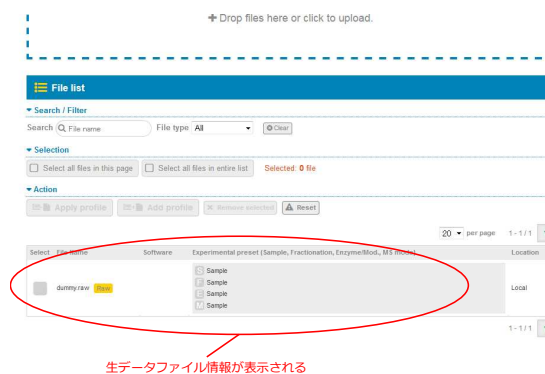
これは一見、二度手間ですが、例えば複数の生物種をサンプルとして使う可能性がある場合は、両方のメタデータを作成しておけば、データのアップロードのときに適切なパネルを選んでクリックするだけですむようになっています。



### 3-3-2) その下の青い点線で囲まれた領域に、生データファイルをドラッグ&ドロップする

今回はアップロードすべき生データはありませんが、生データファイルのアップロードはこのシステム上必須なので、配布したダミーファイルをアップロードしてください。

ファイル名と対応する(入力した)メタデータなどが、ページ最下部の表に表示されます。

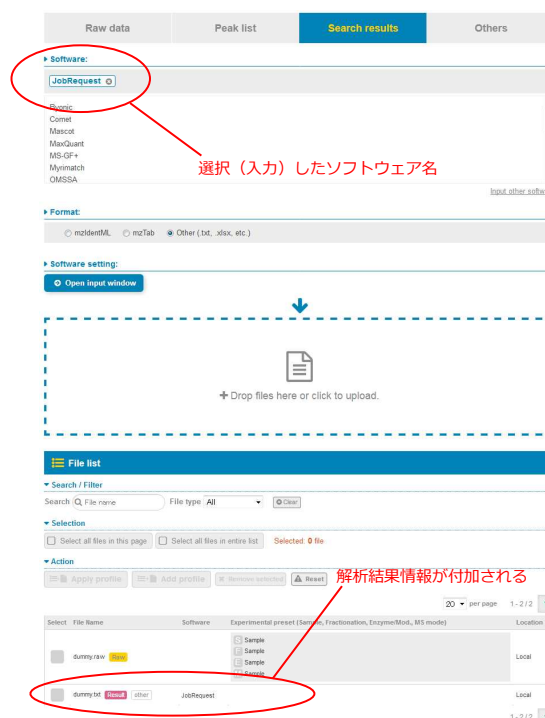


### 3-3-3) 「Search results」のタブをクリックし、ソフトウェア名とファイルフォーマットを入力する

検索に使ったソフトウェア名を選択肢から選びます。選択肢にない場合は、ソフトウェア選択欄の右下にある「Input other software」をクリックして入力してください。

更に、結果ファイルの形式を「Format」欄のラジオボタンから選びます。

なお、今回は「Peak list」、「Others」のタブの入力は必要ありません。



### 3-3-4) 3-3-2)と同様に、その下の青い点線で囲まれた領域に、解析結果ファイルをドラッグ&ドロップする

今回は、ここで皆さんの解析結果ファイルをドラッグ&ドロップしてください。

### 3-3) 「Upload files」を直接クリックするか、または「Next」をクリックしてファイルアップロード画面に進む

表示されているファイルを確認したら、「Upload files」ボタンをクリックします。

自動でファイルのアップロードが始まります。完了したら「Submission completed.」として、アップロード所要時間が表示されます(表示は分単位なので、1分以内に完了した場合は「1 min.」と表示されます)。

### 3-4) 「Confirm」を直接クリックするか、または「Next」をクリックして結果確認画面に進む

この画面で、このデータ寄託が「Partial submission」か、それとも「Complete submission」かを選択します。この用語は、HUPO (ヒトプロテオーム機構)が定めている形式で、以下のような内容を意味します:

**Complete submission** …以下の作業が必要です:

- 生データファイル、ピークリストファイル (mgf 形式または mzML 形式)、解析結果ファイル (mzIdentML

形式または mzTab 形式)を全てアップロード

- どのファイルとどのファイルが対応するかを(専用画面で)定義
- ファイルの内容は自動的に簡易チェックが行われ、結果ファイルに含まれるペプチドの 95 %以上で、それに対応するピークが見つけれられない場合は、エラーになって却下されます。

これは非常に厳しい基準ですが、ヒトプロテオーム計画に関係する研究の場合は、この基準を満たすことが必要条件です。

**Partial submission** … Complete submission 以外の全ての場合のデータ寄託。但し、

生データファイル1個 及び 結果ファイル1個 及び 「Fractionation」以外の3カテゴリ(即ち「Sample」「Enzyme/Mod.」「MS mode」)のメタデータpreset

はこの場合でも必須です。これは jPOST repository が、プロテオーム生データ repository の国際連携組織 ProteomeXchange Consortium の基準に準拠しているからです。今回はこちらを選びます。

#### 4) 問題がなければ「Submit project」をクリックする

ここでクリックすると、「Submit project」ボタンに描かれた南京錠のシルエットが、解錠状態から施錠状態に変更されます。これは「データがロックされた」ことを意味し、今後データの変更/修正はできません(論文投稿と関係する一部の機能はまだ使用できますが、今回は利用しません)。

Sample (0)	
Keywords	sample, BMS, MSSJ
Project description	A sample project for the description of the jPOST repository demo site for BMS Conference, MSSJ.
Revision	0

**Confirm project**

**Can't submit this project.**

- ▲ No search result file is found.
- ▲ No raw file is found.
- ▲ 0 species is found in this project.
- ▲ 0 instrument is found in this project.
- ▲ 0 modification is found in this project.

▲ The announcement date is temporarily set to 2018-06-15, but you can edit it later.  
\*We will notice you by e-mail on 1 week prior to the announcement date.

Partial submission     Complete submission  
Input additional information for complete submission

After submission, **you are not able to edit this project any more** with the exception of PubMed ID and Announcement date. Please check carefully and confirm your project.

**How to cite jPOST Repository**

JPOSTPept: an international standard data repository for proteomes  
Shujiro Okuda; Yu Watanabe; Yuki Moriya; Shin Kawano; Tadashi Yamamoto; Masaki Matsumoto; Tomoyo Takami; Daiki Kobayashi; Norie Araki; Akiyasu C. Yoshizawa; Tsuyoshi Tabata; Naoyuki Sugiyama; Susumu Goto; Yasushi Ishihama  
Nucleic Acids Research 45 (D1): D1107-D1111 (2017).  
doi: 10.1093/nar/gkx1080

Copy citation text

Submit project

ファイルが足りないと確認画面で怒られます

ファイルの提出作業は以上で完了です。お疲れ様でした。