

Mascot Server 2.6 New

1. スペクトル・ライブラリ検索

スペクトル・ライブラリに対する検索エンジン NIST MSPepSearch を実装しました。これまでと同じ検索条件設定・検索実行環境の下で、アミノ酸配列データベース (AA)、塩基配列 DB (NA)、スペクトル・ライブラリ (SL)の3種類のデータベースを任意に組み合わせる Mascot 検索を実行し、これまでと同じ書式で検索結果が表示されます。

MASCOT MS/MS Ions Search

Your name: Matrix Science Email: support-jp@matrixscience.com

Search title: Search testing for AA, NA and SL database using 2.6.0

Database(s): cRAP (AA), Human_EST (NA), NIST_Human_HCD (SL)

Amino acid (AA): NCBIProt, SwissProt
 Spectral library (SL): PRIDE_Contaminants, PRIDE_Human

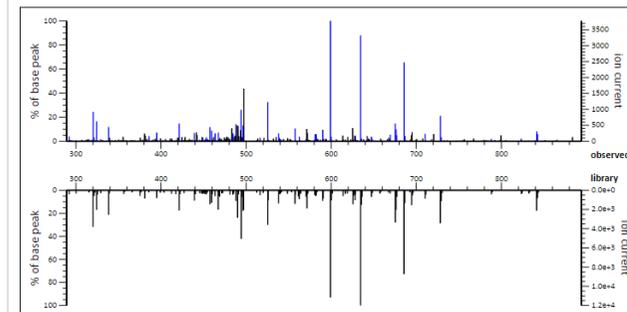
AA, NA, SL を自由に組み合わせ検索することができます。

Peptide View

MS/MS Fragmentation of QHAFAHESHLDK
 Found in EF3A_YEAST in SwissProt (reference database of NIST.S.cerevisiae_IonTrap). Elongation factor 3A OS=Saccharomyces cerevisiae (strain ATCC 204508 / S288c) GNEVF03 PE=1 SV=4

Match to Query 6490: 1514.726562 from(505.91613034) intensity(38613.0160) score(5857) rawscore(6857) rt(ncsconds(3158.44465) index(3891))

Title: 3892_Scan 5857 (rt=3159.45) [C:\NDbowbade\Wlc_001_306p_optac_study6_6B011_RAW]
 Data file: klc_001306p_optac_study6_6B011.mgf



測定値 (observed: 上) とスペクトル・ライブラリ (library: 下) のスペクトルを対比できるように表示します。

Monoisotopic mass of neutral peptide Mr(calc): 1514.7268

Variable modifications: 0

Ions Score: 651 Expect: 1.5e-005

Matches: 50/144 Fragment ions using 389 most intense peaks (help)

#	a	a ⁺	a ⁺ *	a ⁺ **	b	b ⁺	b ⁺ *	b ⁺ **	Seq	y	y ⁺	y ⁺ *	y ⁺ **	#
1	84.0444	42.5258	67.0178	34.0126	112.0393	56.5233	95.0128	48.0100	G					13
2	221.1033	111.0533	204.0768	102.5420	249.0982	125.0527	232.0717	116.5395	H	1404.7019	702.8546	1387.6753	694.2412	12
3	282.1404	141.0702	275.1139	138.0606	320.1353	160.5713	303.1098	152.0680	A	1267.6430	634.3251	1250.6164	625.8118	11
4	439.2089	220.1044	422.1823	211.5946	467.2037	234.1055	480.1772	225.5922	F	1196.6068	598.3099	1179.5793	590.2933	10
5	510.2459	255.6229	493.2194	247.1133	539.2409	269.6241	521.2143	261.1106	A	1049.5374	525.2724	1032.5108	516.7591	9
6	647.3049	324.1524	630.2763	315.6428	675.2908	338.1535	659.2732	329.6402	H	978.5003	489.7533	961.4738	481.2405	8
7	760.3889	380.6981	743.3624	372.1948	788.3833	394.6943	771.3573	386.1923	I	841.4414	421.2243	824.4149	412.7111	7
8	889.4315	445.2194	872.4050	436.7051	917.4254	459.2169	900.3869	450.7038	E	739.3573	364.6829	711.3308	355.1686	6
9	976.4835	488.7254	959.4370	480.2221	1004.4835	502.7329	987.4319	494.2198	S	599.3148	300.1610	582.2892	291.8477	5
10	1113.5225	557.2649	1096.4959	548.7516	1141.5174	571.2823	1124.4908	562.7490	H	512.2827	256.6450	495.2562	248.1317	4
11	1226.6065	613.3069	1209.5900	605.2938	1254.6014	627.3044	1237.5749	619.2911	L	375.2238	188.1155	359.1973	179.8023	3
12	1341.6335	671.3204	1324.6099	662.8071	1369.6294	685.3178	1352.6018	676.8046	D	292.1397	131.5735	245.1132	123.0602	2
13									K	147.1128	74.0600	130.0863	65.5468	1

マッチしたプロダクトイオンは赤字で表示します。

2. スペクトル・ライブラリ構築

「Spectral library filters」機能を実装しました。お客様がこれまでに実行した Mascot 検索結果ファイルから、指定した条件 (検索期間、期待値、スコア、検索条件) に合致する MS2 スペクトルを抽出し、お客様独自のスペクトル・ライブラリを構築することができます。

Database Manager

Databases (7)

Parse rules (25)

Scheduled updates (1)

Running tasks (0)

Settings

Fasta

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Library

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Spectral library filters

Database: testSL

Copy Delete

Name: testSL

Database type: Spectral library (created from search results)

Database directory: C:/inetpub/mascot/sequence/testSL/current

Filename pattern: testSL_#.msp

Create MSP file from search results

Peptide match filters are:

(expect < 0.001 AND CLE contains "Trypsin")

Edit filters

The next step is to create the initial MSP file from search results. Please specify a date range in the format YYYY-MM-DD (year, month, day of month).

Start date (YYYY-MM-DD): 2017-01-01

End date (YYYY-MM-DD): 2017-01-16

When you click Start, Database Manager will scan the Mascot data directory (./data) for results files between the start and end date. Peptide matches from a file are imported to the library if they pass the filters.

Once the initial MSP file has been created, you can schedule recurring import tasks.

Start

検索期間、期待値、スコア、検索条件 (Enzyme、配列 DB 名、Taxonomy、Modification、Instrument、User name、Title 文字列、Quantitation) に合致した MS2 スペクトルを使ってライブラリを作成します。

MASCOT search status page

Version: 2.6.0 - MSKK (7KWJ-368G-ZR8H-SC72-5MRS) [Licence Info](#)

4 logical, 1 physical Intel processors (No hyper-threading in cpu, quad core). CPUs: 0 / 2 / 3 available, using 0 / 2 / 3. [0 search]

[Search log](#) [monitor log](#) [error log](#) [Error message descriptions](#) [Do not auto refresh this page](#)

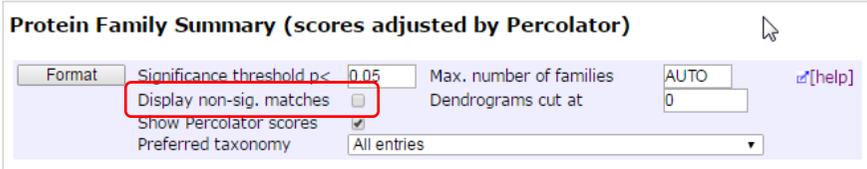
Name = SwissProt Family = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt_#.fasta
 Filename = SwissProt_2016_11.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt_2016_11.fasta
 Status = In use [Statistics](#) [Unidentified taxonomy](#) [Recompress file](#)
 State Time = Mon Jan 16 14:22:21 # searches = 0
 Mem mapped = YES Request to mem map = YES Request unmap = NO Mem locked = NO
 Number of threads = -1 Current = YES Type = Amino acid

Name = testSL Family = C:/inetpub/mascot/sequence/testSL/current/testSL_#.msp
 Filename = testSL_2017-01-16-12-28-18.msp Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/testSL/current/testSL_2017-01-16-12-28-18.msp
 Status = In use [Statistics](#) [Recompress file](#)
 State Time = Mon Jan 16 14:22:21 # searches = 0
 Mem mapped = NO Request to mem map = NO Request unmap = YES Mem locked = NO
 Number of threads = 1 Current = YES Type = Spectral library

Database status ページ上では SL (*.msp) ファイルは FASTA ファイルと同様に管理されます。

3. その他新機能

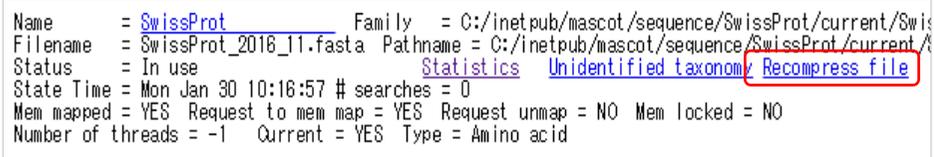
1. 検索結果ページ：有意なペプチド (p<0.05) だけを表示するように変更し、「Display non-significant matches」チェックボックスを追加しました。



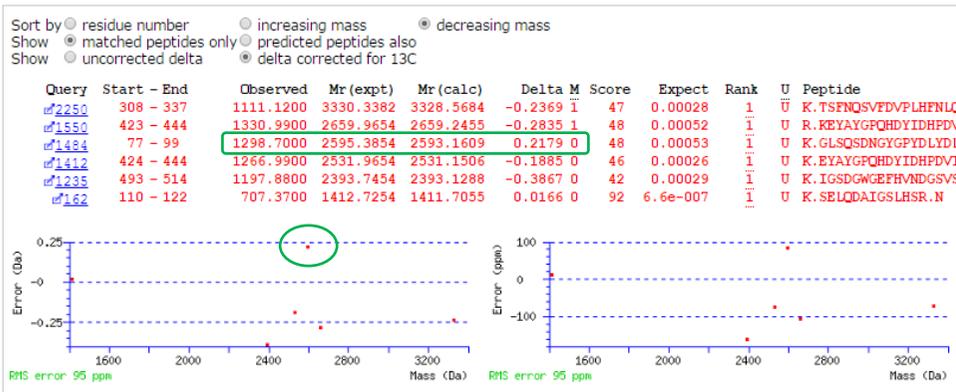
2. FDR：計算対象として PSM か Sequence を選択できるようにしました



3. 配列 DB 管理：<Recompress file> リンクを追加し、Mascot を停止させることなく DB の再構築をできるようにしました。

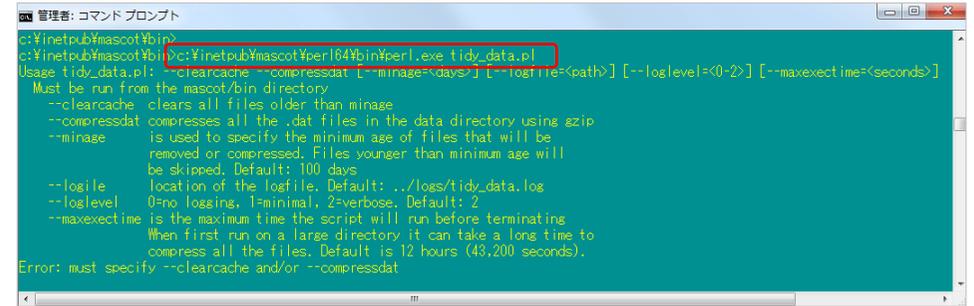


4. 質量誤差：¹³C に対する修正質量誤差を表示できるようにしました。



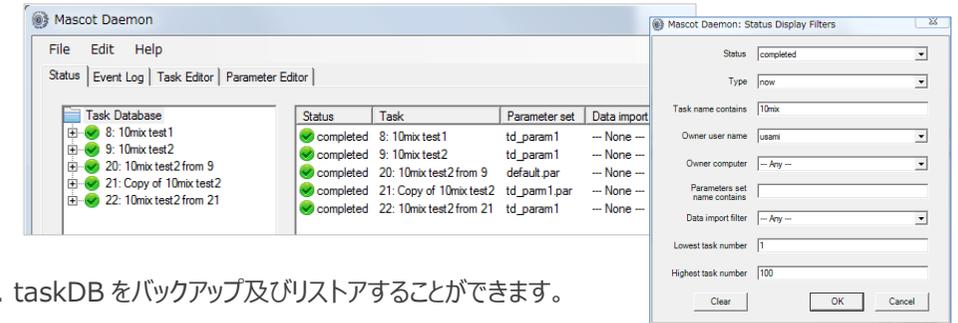
5. Percolator：これまでは rank1 のペプチドだけを計算対象としていましたが、全ての rank に対して計算し、Percolator スコア順にリストするようにしました。

6. 整理整頓：古い検索結果の圧縮や cache ファイルの削除を行うユーティリティー・プログラム「tiny_data.pl」を準備しました。



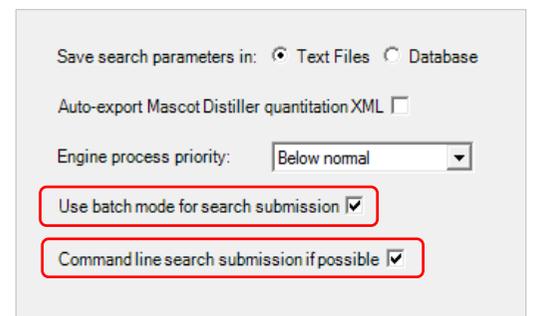
4. Mascot Daemon 新機能

1. Status の表示項目を日付やキーワードで絞り込むことができます。



2. taskDB をバックアップ及びリストアすることができます。

3. Mascot Server PC にインストールした場合は Web サーバを経由せずに直接 Mascot に検索投入することができます。



4. 複数の Task を同時に実行しても Task をバッチ処理することができます。