# Mascot Daemon 2.5

取扱説明書





——— 目次 ———

1	概要	3
	1.1 タスク	• • • • • 3
	1.2 フィルタプログラム (Data Import Filters)	• • • • • 3
	1.3 運用形態	• • • • • 4
	1.4 他のプログラムとの連携	• • • • • 4
0		F
2	インストレーションと現現設定	
	2.1 動作環境	• • • • • 5
	2.2 新規インストレーション	•••• 5
	2.3 バージョンアップ	• • • • • 6
	2.4 Database エンジンと Task database ファイル	•••• 7
	2.5 ライセンスの使用許諾	• • • • • 9
	2.6 アンインストール	• • • • • 10
3	チュートリアル	11
	3.1 Mascot Daemonの記動	11
	3.2 検索条件ファイルの作成	11
		• • • • • 12
	3.4 検索結果の表示	• • • • • 12
	3.5 フォローアップ・モード	• • • • • • 13
4	リファレンス	• • • • • • • • 15
	4.1 メニュー	• • • • 15
	4.2 [Preferences]ダイアログ	• • • • • 16
	4.3 [Parameter Editor]タブ	• • • • • 18
	4.4 [Task Editor]タブ	• • • • • 22
	4.5 [Event Log]タブ	• • • • • 28
	4.6 [Status]タブ	• • • • • 29
5	補兄	
Ű		
	5.1 Mascot Daemon Engine を	
	Windows のサービスとして動かす方法	•••• 30
	5.2 タスク・データベース	• • • • • 30
	5.3 Stop Masses リスト	• • • • • 31

# 1 概要

Mascot Daemon は Mascot 検索プロセスの自動化を支援する、Mascot Server のクライアントソフトウエアです。次の動作モードをサポートしています。

- (1) バッチ・モード (Batch) 複数の質量データファイルに対して逐一 Mascot 検索を実行します。検索開始日時を指定することもできます。
- (2) リアルタイムモニター・モード (Real-time monitor) 指定したフォルダ(ローカルあるいはネットワーク上)を監視し、そのフォルダ内に新たに作成された質量データファイ ルを取得して、Mascot 検索を実行します。
- (3) フォローアップ・モード (Follow-up)

検索結果のスコアあるいは期待値が、あらかじめ指定したそれらの数値に達しなかった場合、別の検索条件を使って自 動的に再検索を実行します。定期的に更新される配列データベースに対して自動的に再検索を実行させることもできます。

### 1.1 タスク

Mascot Daemon は検索を「タスク」単位で管理します。タスクは次の6つの情報で構成されています。

- (1) タスク名
- (2) 検索条件(検索条件ファイル「\*.par」ファイルとして前もって作成)
- (3) 質量データファイル(生の質量データファイルの場合はフィルタプログラムを指定)
- (4) 検索の実行時期
- (5) 再検索条件(Follow-up の条件)
- (6) 外部プログラムの起動(検索結果の Auto-export 機能、External processes 機能のサポート)

タスクは4つの状態(実行中:Running、中断:Paused、完了:Completed、キャンセル:Canceled)をとることができます。 Paused タスクは再実行(Resume)することができます。Paused タスクと Completed タスクはキャンセルまたは削除することができます。

## 1.2 フィルタプログラム (Data Import Filters)

Mascot Daemon はテキスト形式のピークリストファイルおよび生の質量データファイルをサポートしています。テキスト形式 のピークリストファイル (たとえば MGF ファイル) は特別な処理をせずにそのまま Mascot Server に投入することができます が、生の質量データファイルについては、対応するフィルタプログラムを利用してピーク抽出処理を行い、Mascot Server に投 入できるピークリストファイル (たとえば MGF ファイル) を作成する必要があります。Mascot Daemon は Mascot Distiller お よび Windows のコマンドラインで実行できるフィルタプログラムをサポートしています。

#### (1) Mascot Distiller : http://www.matrixscience.com/distiller.html

全ての質量分析計ベンダーの生の質量データファイルを処理することができます。別途ライセンスが必要です。

#### (2) Thermo ExtractMSn

Thermo Fisher Scientific 社が提供する Xcalibur RAW ファイル処理プログラムです。すでにプログラムの開発・保守は 終了していますので、Q-Exactive などで使われている新しいバージョンの Xcalibur が出力する RAW ファイルには対応して いません。

- (3) AB Sciex MS Data Converter : http://www.absciex.com/software-downloads-x2110
   AB Sciex 社が提供するプログラムです。Wiff ファイルおよび TOF/TOF データファイルを処理することができます。
- (4) ProteoWizard MSConvert: http://proteowizard.sourceforge.net/downloads.shtml さまざまな質量データフォーマットに対応しています(http://proteowizard.sourceforge.net/formats.shtml)。

#### (5) フィルタプログラムの追加

Windows のコマンドラインから実行できるプログラムであれば Mascot Daemon の[Data import filer]リストに追加する ことができます。詳しくは Mascot Daemon のヘルプページの「Adding a new data import filter」項をご覧ください。

# 1.3 運用形態

ひとつの Mascot Server に対し、複数の Mascot Daemon を利用することができます。たとえば、複数の質量分析計をお持ち の場合、それぞれの質量分析計のために用意した PC に Mascot Daemon をインストールすることもできますし、研究者が所有す る PC に Mascot Daemon をインストールし、研究所内にある、種類が異なる質量分析計や複数の質量分析計から出力される質量 データファイルを一元的に処理することもできます。

# 1.4 他のプログラムとの連携

External processes 機能を使うことにより、タスク開始前後および Mascot 検索実行前後のタイミングで外部のプログラムを 実行することができます。

# 2 インストレーションと環境設定

### 2.1 動作環境

Mascot Daemon は、

- ・32bit および 64bit の Windows XP SP3 あるいは 2003 Server SP2 以上
- ・Microsoft .NET framework 4.0 (client prifile 以上)
- ・Microsoft Internet Explorer が正しく動作している

の動作環境を持った PC にインストールすることができます。Mascot Daemon は HTTP プロトコルを利用して Mascot Server と 通信しますが、弊社がインターネット上で公開している Mascot Server (http://www.matrixscience.com/cgi/) とは通信でき ませんのでご注意ください。

## 2.2 新規インストレーション

Mascot Daemon をインストールする前に、Mascot Server が正しく動作していることを確認してください。また、Mascot Server と同じバージョンの Mascot Daemon をインストールしてください。インストール作業は数分で終了します。

- Mascot Daemon をインストールしたい PC の Web ブラウザから Mascot 検索を実行し、Mascot Server が正しく動作することを確認してください。もし Mascot Server が正しく動作しない場合は、この問題を解決した後に、Mascot Daemon をインストールしてください。
- (2) Web ブラウザを起動し、Mascot Server の「Welcome」トップページ「http://ホスト名/mascot/」にアクセスしてください。
- (3) 「Welcome」トップページの中程にある「Mascot Daemon」項の[Install]リンクをクリックしてください。「Installing Mascot Daemon」ページが表示されます

Mascot Daemon

Mascot Daemon is a client application which automates the submission of data files to a Mascot server. It runs under Microsoft Windows 2000 and later. Install Upgrade | Troubleshoot

(4)項目「3.」の[setup]リンクをクリックすると Mascot Daemonの インストーラである「daemon\_setup. exe」が「C:¥Users¥ユーザ 名¥Downloads」フォルダにダウンロードされます。それを実行 すると、Windows が 32bit か 64bit かを自動的認識し、右図の ような「Setup Wizard」が起動しますので、表示されるダイア ログの内容に従ってインストレーションを進めてください。な お、Microsoft .NET framework がインストールされていない場 合はその旨のメッセージが表示されますので、次に示すどちら かのリンクからダウンロードしてインストールし、再度 「daemon\_setup. exe」を実行してください。



- Microsoft .NET framework 4 Client Profile : http://www.microsoft.com/en-gb/download/details.aspx?id=17113
- Microsoft .NET framework 4 : http://www.microsoft.com/en-gb/download/details.aspx?id=17851

- (5) インストールが終了して[Finish]ボタンを押すと、Mascot Daemon は自動的に起動し、右図に示す[Preferences]ダイアロ グの[Internet]タブが表示されます。自動的に起動しない場合 は、[スタート]→[すべてのプログラム]→[Mascot]→[Mascot Daemon]を選択し、Mascot Daemon を起動してください。[Mascot Server URL, up to and including cgi directory]入力欄に Mascot Server の URL (http://ホスト名/mascot/cgi/)を入力 し、[Save]ボタンを押してください。Mascot Server との接続 が確立されると Mascot Daemon の再起動を促されますので、 Mascot Daemon を再起動してください。
- (6) Mascot Daemon を再起動すると、右図に示すウインドウが表示
   されます。これで Mascot Daemon のインストール作業は終了で
   す

Mascot Daemon: Preferences	s
Intranet Data import filters OD	DBC connection   Timer settings   Authentication   General
Mascot server URL, up to an ( e.g. http://your_server/mas	nd including cgi directory. scot/cgi/ )
http://ideanost/mascu/cg/	
HTTP timeout (seconds)	300
HTTP access type	Registry default
HTTP proxy server	
HTTP protocol	C HTTP/1.0 @ HTTP/1.1



# 2.3 バージョンアップ

Mascot Daemon と Mascot Server は対になって動作しますので、互いに同じバージョンであることが必要です。Mascot Server をアップグレードして正しく動作することを確認した後に、Mascot Daemon のアップグレード作業を行ってください。

- 既存の Mascot Daemon が格納されている「C:¥Program Files (x86)¥Matrix Science¥Mascot Daemon」フォルダをバッ クアップしてください。
- (2) Windows の[スタート]→[コントロールパネル]→[プログラム]→[プログラムと機能]から既存の Mascot Daemon をアン インストールしてください。
- (3) Web ブラウザを起動し、Mascot Server の「Welcome」トップページ「http://ホスト名/mascot/」にアクセスし、ページの中程にある「Mascot Daemon」項の「Upgrade」リンクをクリックしてください。「Upgrading Mascot Daemon」ページが表示されます。

#### Mascot Daemon

Mascot Daemon is a client application which automates the submission of data files to a Mascot server. It runs under Microsoft Windows 2000 and later. Instat Upgrade Droubleshoot

(4)項目「2.」の setup リンクをクリックすると Mascot Daemonの インストーラである「daemon\_setup. exe」が「C:¥Users¥ユーザ 名¥Downloads」フォルダにダウンロードされます。それを実行 すると、Windows が 32bit か 64bit かを自動的認識し、右図の ような「Setup Wizard」が起動しますので、表示されるダイア ログの内容に従ってインストレーションを進めてください。な お、Microsoft.NET framework がインストールされていない場 合はその旨のメッセージが表示されますので、次に示すどちら



かのリンクからダウンロードしてインストールし、再度「daemon\_setup.exe」を実行してください。

- Microsoft .NET framework 4 Client Profile http://www.microsoft.com/en-gb/download/details.aspx?id=17113
- Microsoft .NET framework 4 http://www.microsoft.com/en-gb/download/details.aspx?id=17851
- (5) インストールが終了して[Finish]ボタンを押すと、Mascot Daemon は自動的に起動し、右図に示す[Preferences]ダイアロ グの[Internet]タブが表示されます。自動的に起動しない場合 は、[スタート]→[すべてのプログラム]→[Mascot]→[Mascot Daemon]を選択し、Mascot Daemon を起動してください。[Mascot Server URL, up to and including directory]入力欄に Mascot Server の URL (http://ホスト名/mascot/cgi/)を入力し、[Save] ボタンを押してください。Mascot Server との接続が確立され ると Mascot Daemon の再起動を促されますので、Mascot Daemon を再起動してください。
- (6) Mascot Daemon を再起動すると、右図に示すウインドウが表示
   されます。これで Mascot Daemon のインストール作業は終了で
   す

	DBC connection Timer settings Authentication General
Mascot server URL, up to a	nd including cgi directory,
(e.g. http://your_server/ma	scot/cgi/)
http://localhost/mascot/cgi.	
HTTP timeout (seconds)	300
HTTP access type	Registry default
HTTP proxy server	
a second and a second sec	C HTTP/1.0 @ HTTP/1.1
HTTP protocol	

# 2.4 Database エンジンと Task database ファイル

Mascot Daemon 2.4までは、

Database エンジンとして「Microsoft Access」 Task database ファイルとして「taskDB.mdb」

を使用していました。一方、Mascot Daemon 2.5 からは、

Database エンジンとして「VistaDB」 Task database ファイルとして「taskdb.vdb5」

を使用しています。従いまして、Mascot Daemon 2.4 で使用していた「taskDB. mdb」ファイルの内容を引き継いで Mascot Daemon 2.5 でも使用したい場合は、VistaDB のユーティリティである「DataMigrationWizard. exe」を使って「taskdb. vdb5」ファイル にインポートしてください。

 (1)「C:¥Program Files¥Matrix Science¥Mascot Daemon」フォルダ にある「 DataMigrationWizard.exe」をダブルクリックしてく ださい。「Start」ウインドウが表示されますので [Next] ボタ ンを押してください。「Select the type of database to migrate」 ウインドウが表示されます。

	Data Wigration Wizard	
Start		
This data migration wizard will guide you through Migration will create a new VistaDB database wi Options are available to customize the schema a	h the steps of migrating data from existing databases to VistaDB 5. Whithe schema and data you select. and migration options prior to migrating.	
Press Next to start		

(2) [Source Database]リストから「Microsoft Access (MDB, ACCDB)」 を選択し、[Next] ボタンを押してください。「Select the source SQL Server / Access source database and VistaDB 5 destination database」ウインドウが表示されます。

- (3) [Attach a database file]の入力欄に Mascot Daemon 2.4の TaskDB.mdb ファイルを指定してください(右図では 「D:¥backup¥daemon¥2.4¥TasdDB.mdb])。次に「VistaDB 5 destination database」入力欄にインポート先となる taskdb.vdb5 ファイルを指定してください(右図では 「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥taskdb.vdb5」)。[Next]ボタンを押してください。もし、 taskdb.vdb5 ファイルが存在する場合は「Destination database exists」ウインドウが表示されますので、上書きを確認した上 で[Next]ボタンを押してください。「Customize the columns, indexes and relations」ウインドウが開きます。
- (4) TaskDB. mdb ファイルの内容が表示されます。このまま[Next] ボタンを押してください。「Prepare to start migration」ペ ージが表示されますので[Next]ボタンを押してください。 「Progress…」ページが表示されます。

(5) インポートが開始され、進捗状況が表示されます。「Migration finished」が表示されればインポート終了です。[Next]ボタン を押してください。「Finished!」ウインドウが表示されますの で[Finish]ボタンを押してください。

 (6) Mascot Daemon を起動すると、Task database を更新する旨の ダイアログが表示されますので、[OK]ボタンを押してください。 Mascot Daemon が起動すればインポートは終了です。



	gration Wizard
Select the source SQL Selver / Access source of Data source: Microsoft Access Database File (OLE DB) Server Name:	VistaBI 5 destination database VistaBI 5 destination database CXProgramDataMatrix Science#Mascat Daemon#task.dbvdbD
Let on to the same     Let on to the same     Let Window Attentication     Let SUB Silver Attentication     Let SUB Silver Attentication     Let Substantian     Concert to addition     Concert to addition	Security Passed Colo Page Use the next code page for characters 192 — EF426 (27) - 80 Traid characters at locked characters Placeor OLE hadres from bitmaps Database Locke profile w
Browse Test Connection Step 3 of 7	Cancel < Back Next> Frink

Customize the columns,	Columns Indexes Foreig	n Keys Constraints		
	Column Name	New Column Name	Data Type	New Data Tv.
Select All Unselect All	V Title number	file number	ht	Int
Tables and Views	V 🖬 task UID	task UID	Int	Int
	📝 🗉 file name	file name	NVarChar	NVarChar
Tables	Inext action	next action	DateTime	DateTime
🛛 🔝 Mascot_Daemon_Files	V I file comment	file comment	NVarChar	NVarChar
🖉 🛄 Mascot_Daemon_Results	V 🗊 file size	file size	Int	Int
🖉 🛄 Mascot_Daemon_Tasks	V 🗊 size_checked	size_checked	DateTime	DateTime
	V intermediate	intermediate	NText	NText
	🔽 🗉 sample number	sample number	Int	Int
	V 🗊 mascot task id	mascot task id	NVarChar	NVarChar
	🔽 🔝 peak_list	peak_list	NVarChar	NVarChar
	-			





# 2.5 ライセンスの使用許諾

Mascot Daemon は Mascot Server にバンドルされたソフトウエアです。Mascot Server ライセンスをお持ちのお客様は、お客様が所有している任意の PC に Mascot Daemon をインストールすることができます。

# 2.6 アンインストール

- (1) [スタート]→[コントロールパネル]→[プログラム]→[プログラムと機能]を選択してください。現在インストールされているプログラムがリスト表示されます。
- (2)リストから[Mascot Daemon version 2.5.\*]を選択して右クリックし、[アンインストール]を選択してください。

# 3 チュートリアル

Mascot Daemon を利用した Mascot 検索の流れは、Web ブラウザを利用した Mascot 検索の流れと基本的に同じです。すなわち、

- (1) 検索条件を設定し、
- (2) 質量データファイルを指定して Mascot 検索を実行し、
- (3) 必要に応じて Mascot 検索の進捗状況を確認し、
- (4) 検索終了後に検索結果を閲覧する。

という流れになります。ここでは、「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥data」フォルダにある MS/MS の質量デ ータファイルを使って Mascot Daemon の使い方を説明していきます。

### 3.1 Mascot Daemon の起動

[スタート] → [すべてのプログラム] → [Mascot] → [Mascot Daemon]を選択してください。スタートアップ画面 が表示された後に Mascot Daemon が起動し、図 3-1 に示す ウインドウが表示されます。Mascot Daemon のウインドウは 4つのタブ([Parameter Editor]、[Task Editor]、[Event Log]、[Status]) と 3 つのメニュー([File]、[Edit]、[Help]) から構成されています。



#### 図 3-1 Mascot Daemon の起動画面

### 3.2 検索条件ファイルの作成

一番右にある[Parameter Editor]タブをクリックしてく ださい。図 3-2 のように、Web ブラウザに表示される検索条 件設定画面と同じような画面に切り替わります。ここで検 索条件を設定し、検索条件ファイル(拡張子「.par」を持っ たテキストファイル)として保存します。

図3-2を参照しながら検索条件として次の内容を設定し、 [Save As ...]ボタンを使って、「tourl.par」というファイ ル名で保存してください。

[Database] →「SwissProt」を選択 [Enzyme] →「Trypsin」を選択 [Peptide tol. ±] →「0.1」を入力、「Da」を選択 [Data format] →「Micromass (.PKL)」を選択 [MS/MS tol. ±] →「0.3」を入力、「Da」を選択 [Instrument] →「ESI-QUAD-TOF」を選択

図 3-2 [Parameter Editor]タブ:検索条件の設定

Mascot Daemon	
<u>File Edit H</u> elp	
Status Event Log Iask Editor Parameter Editor	
Parameter set Filename: [C:\Program Files (x86)\Matrix\default.parNewOpenSave	Save As
All Searches User name Mascot Kensaku User email [mkensaku@matrixscien	ce.com
Search title Submitted from <taskname> by Mascot Daemon on <localhost> Taxonomy All entries</localhost></taskname>	D 🗸 hits
Detabase gallut NEBIn/ SwissProt	kDa
Fixed modifications Average Max.missed cleavag	pes 1 -
Variable Oxidation (M) Select Modifications Peptide charge 2+	and 3+ 💌 # 13C 🛛 💌
MS/MS	<b>•</b>

なお、Mascot Daemon を起動すると、デフォルトの検索条件として default.par ファイルが読み込まれると同時に、 [Preferences]ダイアログの[Internet]タブで指定された Mascot Server に接続します。

# 3.3 タスクの作成と実行

Mascot Daemon では、検索の単位をタスクとして定義します。 タスクは次の6つの項目で構成されています。(1)~(4)は必須設 定項目、(5)および(6)はオプション設定項目です。

(1) タスク名

- (2) 検索条件(「\*.par」ファイルとして作成)
- (3) 質量データファイル(生の質量データファイルの場合はそれに対応するフィルタプログラム)
- (4) 検索の実行時期
- (5) 再検索条件(Follow-up の条件)
- (6) 外部プログラムの起動

ここでは、「3.2 検索条件ファイルの作成」で作成した検索条件ファイル「tour1.par」と、質量データファイル

「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot

Daemon¥data¥01260005.pkl」を使って「Simple test search」タ スクを作成し、実行します。右から2番目の[Task Editor]タブ をクリックし、図 3-3を参照しながら、次の内容を持つタスクを 定義してください。

① [Task] → タスク名として「Simple test search」を入力
 ② [Parameter set] → [...]ボタンから「tour1.par」を読込む

```
③ [Data file list] → [Add Files]ボタンから質量データ
ファイル「01260005.pkl」を読込む
```

[Run]ボタンを押してタスクを実行すると、図 3-4 に示す

[Status]タブに切り替わります。実行されたタスクが新しいタスクとして認識されるまではタスク名の前に砂時計が 表示されます。検索が開始されると時計マークが表示され、Status 欄には running が表示されます。

# 3.4 検索結果の表示

検索が終了すると、図 3-4 の[Status]タブの内容は図 3-5 のようになります。タスク名の前には検索が終了したことを示す緑の チェックマーク(✔)が表示されます。チェックマーク左の + マ ーク(タスクノードと呼びます)をクリックすると、フォルダア イコンとデータファイル名[01260005.pk1]が表示されます。 [01260005.pk1]をクリックすると、右側ウインドウに検索結果の 概要が表示されます。閾値スコアよりも大きなスコアを持つ複数 のタンパク質がヒットした場合は、最もスコアが高いタンパク質 の情報とプロテインスコアが表示されます。閾値を超えるタンパ ク質がヒットしなかった場合は[Accession]欄に<no result>と表 示されます。

[Result file URL]欄に表示されている URL は Mascot Server 上に保存された検索結果ファイルが指定されており、そこをクリ

#### 図 3-3 タスクの作成と実行



図 3-4 [Status]タブと検索中を示す時計マークのタスク

Mascot Daemon Eile <u>E</u> dit <u>H</u> elp		
Status         Even           Task Database         E: Simple test search	nt Log Iask Editor Parameter f Status Task Orunning 1: Simple test search	ditor Parameter set tour1.par
	<	
Refresh (F5)	Pause <u>R</u> esume Clone	<u>Cancel</u> <u>D</u> elete

#### 図 3-5 [Status]タブと検索結果の概要表示

Eile Edit Hele
The Fort Helb
Status         Event Log         I ask Editor         Parameter Editor
Tark Deabase     Tark Deabase       ● 1 Tark Deabase     Data lie       C 1 Tark Deabase     Data lie       Data lie     C.Shogan Files (J85) Matix Science/Mascot Deemon/dat:       Seach tie     Sauch tied iron Simple test seach by Mascot Deemon on ME       Accession     C/C, ALLMI       Protein MW     11731       Score     84       Description     Cytochrone c 05-Alligator missispipensis PE=1 SV-2       Database     Swin:Prot_2012_05.fata       Read tiel UL.     http://tochrone/tocs/neta/master_results.pl?/life       Seach submitted     2012/05/08 10:21:10
Refresh (F5) Payse Besume Clone Cancel Delete

ックするとWebブラウザが起動し、対応する検索結果ページが 表示されます。なお、[Data import filter]として Mascot Distiller を利用した場合は、 [Result file URL]欄の下に [Mascot Distiller]欄が追加され、Mascot Distiller のプロ ジェクトファイル名が表示されます。そこをクリックすると Mascot Distiller が起動し、ピーク抽出処理等の処理結果が 表示されます。

[Status]タブの中では、タスクの状態を示すために、図 3-6 に示すアイコンが使われます。

リアルタイムモニター・モードでは、常に新しい質量データ ファイルを待ち受ける(アイドリング)状態にありますので、 タスクは完結せず、常に砂時計アイコンが表示されます。

図 3-6 タス	<b>スクの状態を示すアイコンの意味</b>
0	時計アイコン : 動作中(検索中)のタスク
	鎖アイコン : Follow-up タスク
2	砂時計アイコン : タスクの中断処理中
<b>S</b>	チェックアイコン : 完結したタスク
8	バッテンアイコン:キャンセルされたタスク
	中断アイコン:中断したタスク

動作中のタスクは中断させることができます。また、完結したタスクと中断したタスクは削除することができます。タスク 名をクリックして選択すると[Status]タブ下方にあるボタンがアクティブになりますので、処理したい内容に対応するボタン ([Pause]、[Resume]、[Clone]、[Cancel]、[Delete])を押してください。[Clone]ボタンを押すと、そのタスクが「Copy of タ スク名」として複製され、[Task Editor]タブに表示されます。[Status]タブの[Delete]ボタンを使ってタスクを削除しても、 それに対応する Mascot Server 上の検索結果ファイル (C:¥inetpub¥mascot¥data¥yyymmdd¥Fxxxxx.dat)は削除されません。 Mascot Daemon の Task database ファイル (C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥taskdb.vdb5)からそのタスクと 関連情報エントリが削除されるだけです。検索結果は Mascot Server 上に残り、Mascot search log ページからいつでも参照す ることができます。なお、タスク名を右クリックしても上記と同じ内容の操作を行うことができます。

[Event Log]タブには、タスクの進捗状況やエラーメッセージなどが表示されます。このログは「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥Mascot\_Daemon\_Event\_Log.csv」ファイルに記録されています。

# 3.5 フォローアップ・モード

例えば、

「トリプシンで消化した試料から得られた MS/MS の質量デー タを Human 由来のタンパク質に対して検索を行い、有意なヒ ットが得られなかった (スコアが閾値よりも小さいあるいは 期待値が 0.05 よりも大きい)時は、すべての切断特性をも った消化酵素である [None]を使って再検索を実行する」

というような、再検索を伴う条件付き検索を行いたい場合は、 フォローアップ・モードが有効です。

最初に2つの検索条件を定義します。ひとつは通常のタスク用、 もうひとつはフォローアップ・タスク用です。[Parameter Editor] タブを開き、通常のタスク用として、図 3-7 に示すような検索条 件([Enzyme]は「Trypsin」、[Data format]は「Sequest(.DTA)」 など)を設定し、[Save As]ボタンで「tour2.par」として保存し てください。同様に、フォローアップ・タスク用として、図 3-7 の[Enzyme]を(「Trypsin」から)「None」にして、[Save As]ボ タンで「tour3.par」として保存してください。

次に、フォローアップ・タスクを定義・実行した後、通常のタ スクを定義・実行します。[Task Editor]タブを開き、まず最初 に、図 3-8 のようにフォローアップ・タスクを定義します。[Task] で「No enzyme follower」を入力し、[Parameter set]の[...]ボ タンから「tour3.par」ファイルを読み込み、[Schedule]フレー

図 3-7 tour2.par の検索条件

Parameter set Filename: C:¥	ProgramData¥Matrix Science¥I	Masc¥tour2.par New Open Save Save As
All Searches		
User name	<mascot_user_full_name></mascot_user_full_name>	User email <mascot_user_email></mascot_user_email>
Search title	<taskname> (<parameters>), s.</parameters></taskname>	ubmitted from Daemon on <localhost></localhost>
Taxonomy	Homo sapi	siens (human)   Report top AUTO   hits
Database	NCBInr NCBInrOLD	Decoy database F Protein mass kDa
Fixed modifications		Monoisotopic (* Enzyme Trypsin 💌 Average C Max. missed cleavages 1 💌
Variable modifications	Oxidation (M)	Select Modifications Peptide charge 2+ and 3+
		Peptide tol. ± 0.8 Da • # 13C 0 •

#### 図 3-8 フォローアップ・タスクの定義と実行

Owner	er New Run
Parameter set C:¥ProgramData¥Matrix¥tour3.par	Data import filter  - None  - Options
Data file list A follow-up tack does not have a pre- defined list of data files. It runs continuously, waiting to receive data from other tasks.	Schedule C Start now C Start at 303月2016-14-39 C Real-time monitor C Feldowup Search priority 0
	Actions Auto-export External processes Follow-up
	No follow-up required  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0

ムの[Follow-up]を選択した後、[Run]ボタンを押して「No enzyme follower」タスクを実行してください。自動的に[Status] タブに切り替わりますので、左側ウインドウのツリーに「No enzyme follower」のフォローアップ・タスクが追加されている

ことを確認してください。タスク名の左側にはこのタスクがフォ ローアップ・タスクであることを示す鎖アイコンが表示されます。

[Task Editor]タブに戻り、図 3-9 のように「Trypsin first pass search」タスクを定義してください。検索条件ファイルとして 「tour2.par」を、質量データファイルとして「C:¥Program Files¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥data」フォルダにある2 つの DTA ファイルを読み込んでください。

#### LCQ\_Digest03.0486.0492.2.dta LCQ\_Digest03.0921.0924.2.dta

フォローアップの条件は、「If probability that match is random > 1 in」を選択し、期待値が 0.05 (1/20) になるように 「20」を入力してください。[Pass data to]はすでに実行して待 機状態になっている「No enzyme follower」タスクを選択してく ださい。

[Run]ボタンを押して「Trypsin first pass search」タスクを 実行すると、まず「tour2.par」の検索条件で検索が実行され、 期待値が 0.05 よりも大きい(スコアが閾値よりも小さい)、有意 ではない検索結果が得られた場合は、その質量データファイルは アイドリング状態で待機している「No enzyme follower」タスク に渡され、「tour3.par」の検索条件で再検索されます。検索が終 了すると、[Status]タブにはこれらの検索結果が図 3-10 のよう なツリー構造で表示されます(タスク番号が6と7)。

「LCQ\_Digest03.0486.0492.2.dta」に対する検索に関しては期 待値が 0.05 よりも小さい有意なタンパク質がヒットしているた め、「No enzyme follower」タスクを利用した再検索は実行され なかったのに対し、「LCQ\_Digest03.0921.0924.2.dta」に対する 検索に関しては 0.05 よりも大きな値が得られたため、「No enzyme follower」タスクを使用して再検索が実行されています。この検 索結果から、「LCQ\_Digest03.0921.0924.2.dta」データファイル に対応するペプチドはトリプシン消化によって得られたペプチ ド (Tryptic peptide) ではなかったことがわかります(検索結果 は図 3-11 のようになります)。

このように、フォローアップ・モードは、同じ質量データファ イルに対して異なる検索条件で再検索したい場合に威力を発揮 します。なお、[Status]タブの「LCQ\_Digest03.0921.0924.2.dta」 アイコンを「No Enzyme follower」タスクのアイコンにドラッグ &ドロップすることにより、「No Enzyme follower」タスクを実 行することもできます。

Mascot Daemon では様々なタイプのフォローアップ・タスクを 定義することができます。たとえば、NCBInr 配列データベースに

#### 図 3-9 通常のタスクの定義と実行



#### 図 3-11 フォローアップ・タスクの検索結果ページ



対して検索を実行して有意にヒットしなかった質量データファイルについて、後日更新された NCBInr 配列データベースに対して、指定した時間間隔(分、時、日、週、月)で再検索するためのフォローアップ・タスクを定義することもできます。

# 4 リファレンス

### 4.1 メニュー

#### (1) [File]メニュー

次の[Exit]以外のコマンドは[Parameter Editor]タブを開いて いるときに有効です。また、[Parameter Editor]タブにも同じ機 能のボタンが配置されています。

[New ...]

検索条件の設定をデフォルトに戻します。

#### [Open ...]

検索条件ファイルの読み込みダイアログを表示します。

#### [Save]

読み込まれている検索条件ファイルに現在の検索条件を上書き保存します。

#### [Save As ...]

検索条件ファイル名を指定して現在の検索条件を保存します。

#### [Exit]

Mascot Daemon GUI を終了します。この操作では Mascot Daemon Engine プログラムは停止しません。Mascot Daemon Engine プログラムを終了したい場合は、Windows のタスクトレーにある歯車アイコンを右クリックして[Exit]を選択してください。

#### (2) [Edit]メニュー

[Cut]から[Clear]までのコマンドは[Parameter Editor]タブあるいは[Task Editor]タブを開いているときに有効です。

#### [Cut]

選択したテキストをクリップボードにコピーした後に削除します。

#### [Copy]

選択したテキストをクリップボードにコピーします。

#### [Paste]

クリップボードのテキストをカーソル位置に挿入します。または選択したテキストを置き換えます。

#### [Clear]

選択したテキストを削除します。

#### [Preferences]

[Preferences]ダイアログを表示します。

#### [ODBC Information ...]

現在使用しているタスク・データベース ODBC connection の詳細を示すダイアログを表示します。

#### [Refresh]

[Status]タブの表示内容を更新します。

#### (3) [Help]メニュー

[Mascot Daemon Help ...]

オンラインヘルプを表示します。

#### [Register Mascot Distiller]

Mascot Distiller の Mascot Daemon 接続モジュール・ライセンスを登録する際に使用します。登録には弊社が発行したシ



図 4-1 メニュー

リアル番号が必要になります。

#### [About ...]

Mascot Daemon のバージョンをチェックすることができます。

# 4.2 [Preferences]ダイアログ

[Preferences]ダイアログの中で使われる値はグローバルな設定値として Windows OS のレジストリに保存されるため、値を 変更した場合は Mascot Daemon (GUI および Engine) を再起動する必要があります。

#### (1) [Internet]タブ

Mascot Daemon と接続する Mascot Server の URL を入力してく ださい。指定した Mascot Server に接続できない場合は warning メッセージが表示されます。なお、弊社がインターネット上で公 開している Mascot Server の URL は使えません。

Web サーバがユーザ名とパスワードを要求する設定になってい る場合は、これらの情報を[Authentication]タブの[Web Server Authentication]欄に入力してください。

Mascot Daemon と Mascot Server を接続するための4つの HTTP 関連の設定値は、通常デフォルト値で問題ありません。[HTTP access type]として[Proxy server]を選択した場合は[HTTP proxy server]欄に HTTP プロキシサーバの URL を入力してください。 [HTTP timeout(seconds)]の値は、設定ファイルなどの小さなフ



ァイルを転送する際に使われます。大きなサイズの質量データファイルのアップロードや検索結果レポートのダウンロードに 対する timeout 設定は Mascot Daemon のプログラム内に書き込まれています。

Mascot Daemon と Mascot Server 間に認証が必要な Proxy server が存在する場合は「HTTP/1.0」を選択してください。

#### (2) [Data import filters]タブ

[Root folder for files cached by data import filters] $\lambda$ 力欄にはタスクに関係するファイル(ピークリストファイル、 Mascot Distiller のプロジェクトファイル、検索結果の CSV 出力 ファイルなど)を格納するフォルダパスを指定してください。

「Thermo ExtractMSn」、「AB SCIEX MS Data Converter」、 「ProteoWizard msConvert」の3つのフィルタプログラムを標準 でサポートしていますので、これらのフィルタプログラムをイン ストールした後に、それぞれの入力欄に実行プログラムのファイ ルパスを指定してください。[Task Editor]の[Data import filter]ドロップダウンメニューにそれらが表示され、選択する ことができるようになります。

Windows のコマンドライン実行形式プログラムであれば、フィ

#### 図 4-3 [Data import filters]タブ



ルタプログラムとして[Data import filter]タブに追加することができます。詳しくは Mascot Daemon のメニューバー[Help] →[In Depth]→[Data Import Filter]→[Add a new filter]をご覧ください。

#### (3) [ODBC connection]タブ

Mascot Daemon と Task database ファイルをどのように接続す るかを定義します。Database engine、ODBC ドライバー、Task database ファイルパスの組み合わせになりますが、詳しい構成方 法に関しては Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Getting Started]→[Database Engines]をご覧ください。

#### 図 4-4 [ODBC connection]タブ

Mascot Daemon:	Preferences
Intranet Data impo	t filters ODBC connection Timer settings Authentication General
To change ti edit the defa	ne task database used by Daemon, first select the database engine, then ult ODBC connection string
Engine	Embedded (VistaDB)
Driver={	No driver required >:
Path=	C:#ProgramData#Matrix Science#Mascot Daemon#TaskDB.vdb5 ;
	Save Cancel

#### (4) [Timer settings]タブ

Mascot Daemon の応答時間を変更することができますが、設定 値によってはMascot Daemon によってPCのリソースが消費され、 PC の操作性が低下することがありますので注意してください。

#### [Timer tick interval]

タスクは独自のタイマーを持っており、ここで設定した 時間間隔毎にタスクの進捗状況をチェックします。この動 作は PC のリソースを消費するため、短い時間は設定しない でください。設定範囲は1~60、推奨値は10です。

#### [Delay after opening empty dataset]

フィルタプログラムからの出力が無くなってからの時間 を指定します。動作に問題がなければ0を指定することも できます。設定範囲は0~3600、推奨値は10です。

#### [File size must be constant for at least]

リアルタイムモニター・モードにおいて、質量データファイルの作成プロセスが完了したかどうかのチェック間隔時間 を指定します。推奨値は 60 です(10 以下の値は設定しないでください。逆に、60 でエラーが発生する場合はこの値を大 きくしてください)。

#### [Minimum delay between monitor searches]

リアルタイムモニター・モードにおいて、指定した質量データファイルの存在チェック間隔時間を指定します。推奨値 は 60 ですが、ファイル群の存在場所(ローカルディスクあるいはネットワーク上のディスク)やワイルドカードにマッチ するファイル数によって最適値は異なります。ローカルディスク上に存在する少数のファイルに対しては 10 程度の値で 問題ありません。

#### [Minimum delay between follower searches]

フォローアップ・モードにおいて、質量データファイルの存在チェック間隔時間を指定します。推奨値は 60 です(動作 に問題がなければ 60 未満の値を設定することができます)。

#### [Take action polling interval]

Mascot Daemon Service プログラムがタスク・データベース(TaskDB.mdb)をチェックする時間間隔です。推奨時間は15 秒です(10以下には設定しないでください)。

#### 図 4-5 [Timer settings]タブ

Mascot Daemon: Preferences	×
Intranet Data import filters ODBC connection	tings Authentication General
Timer tick interval (between 1 and 60 seconds)	10
Delay after opening empty dataset (seconds)	10
File size must be constant for at least (seconds)	60
Minimum delay between monitor searches (seconds)	60
Minimum delay between follower searches (seconds)	60
Task action polling interval (seconds)	15
Save	Cancel

#### (5) [Authentication]タブ

Mascot Server のセキュリティー設定が有効になっており、ユー ザ名とパスワードでログインする必要がある場合は[Mascot Security]フレームにその内容を入力してください。他のユーザ名で も検索することができるユーザ権限を設定している場合は、[Task Editor]タブの[Owner]フレームがアクティブになり、ドロップダウ ンリストから許可されたユーザ名を選択することができます。

Web サーバがユーザ名とパスワードを要求するように設定されて いる場合は[Web Server Authentication] フレームにその内容を入力 してください。同様に、プロキシサーバがユーザ名とパスワードを 要求するように設定されている場合は [Proxy Server Authentication] フレームにその内容を入力してください。

#### (6) [General]タブ

検索パラメータをテキストファイルとして保存するか、Task databese に格納するかを選択することができます。

Mascot Distiller は CPU リソースのすべてを使ってピーク抽出処 理や定量計算を実行するため、Mascot Daemon の反応が鈍くなりま すので、「Below normal」または「Low」を選択して Mascot Distiller の CPU リソース使用優先度合いを下げることができます。

#### 図 4-6 [Authentication]タブ

Mascot Daemon: Preferences
Intranet Data import filters ODBC connection Timer settings Authentication General
Web Server Authentication
User name
Password
Proxy Server Authentication
User name
Password
Mascot Security
User name iUsami
Password
Save Cancel

#### 図 4-7 [General]タブ

Mascot Daemon: Preferences	x
Intranet Data import filters ODBC connection Timer settings Authentication General	)
Save search parameters in:  ⓒ Text Files  ි Database	
Mascot Insight integration 🔽	
Engine process priority: Below normal	
Save Cancel	

### 4.3 [Parameter Editor]タブ

検索条件を設定し、設定した内容を検索条件ファイル(\*.par) として保存します。作成した検索条件ファイルは[Task Editor] タブの[Parameter set]フレームで使用します。Mascot Daemon を 起動すると自動的に default.par ファイルが読み込まれ、その内 容が検索条件として反映されます。

#### (1) [Parameter set]フレーム

#### [Filename]

現在読み込まれている検索条件ファイル名が表示されま す。

#### [New]ボタン

表示されている検索条件を破棄し、新たに検索条件を設 定したい場合に押してください。

#### [**O**pen ...]ボタン

すでに保存してある検索条件ファイルを読み出したい場合に押してください。

#### [Save]ボタン

表示されている検索条件を default. par ファイルとして保存したい場合に押してください。

#### 図 4-8 [Parameter Editor]タブ



[Save As ...]ボタン

表示されている検索条件を新しいファイル名で保存したい場合に押してください。

#### (2) [All Searches]フレーム

PMF 検索および MIS 検索に共通する検索条件を指定します。

#### [User name], [User email]

ユーザ名、電子メールアドレスを入力してください。Mascot セキュリティーが有効になっている場合は次のタグを使用 することができます。なお、タグを構成する文字は大文字小文字を区別します。

<mascot\_user\_name>: ユーザ名に置き換えます。

<mascot\_user\_full\_name>: ユーザのフルネームに置き換えます。

<mascot\_user\_email>: ユーザの電子メールアドレスに置き換えます。

#### [Search title]

ここで入力した内容は検索結果ページの[Search title]行に表示されます。また、次のタグを使用することができます。 <mascot\_user\_\*>(\*=id, name, full\_name, email)は Mascot セキュリティーが有効になっている場合に機能します(Mascot セキュリティーが無効の場合は、検索結果ページの対応する行はブランクになります)。なお、タグを構成する文字は大文字小文字を区別します。

- ① <taskname>:タスク名に置き換えます。
- ② <parameters>:検索条件ファイル名に置き換えます。
- ③ <localhost>: PC のホスト名に置き換えます。
- ④ <localuser> : Windows ログインユーザ名に置き換えます。
- ⑤ <datafilename>: 質量データファイル名に置き換えます。
- ⑥ <datafilepath>: 質量データファイルパス名に置き換えます。
- ⑦ <cachedpeaklist>:フィルタプログラムが作成するピークリストファイルパス名に置き換えます(存在する場合)。
- ⑧ <samplenumber>: サンプル番号に置き換えます(存在する場合)。
- ⑨ <mascot\_user\_id>: ユーザ ID に置き換えます。
- ⑩ <mascot\_user\_name>:ユーザ名に置き換えます。
- ① <mascot\_user\_full\_name>: ユーザのフルネームに置き換えます。
- <sup>12</sup> 〈mascot\_user\_email〉: ユーザの電子メールアドレスに置き換えます。

#### [Taxonomy]

検索対象としたい生物種を選択してください。

#### [Report Top]

検索結果ページに表示させたいヒットしたタンパク質数を選択してください。

AUTO を選択した場合は、有意なスコアを持つタンパク質が表示されます(「Protein Summary Report」の表示モードでは、有意なスコアを持つタンパク質と、閾値スコアを超えない閾値スコアに最も近いタンパク質を表示しますので、有意なスコア持つタンパク質が得られない検索結果においては、最も高いスコアを持つタンパク質を表示します)。

#### [Database]

検索対象としたい配列データベースを選択してください。[Ct1]キーを押しながら複数の配列データベースを選択する ことができます。

#### [Enzyme]

タンパク質を消化するために使用した消化酵素を指定してください。

「None」を選択した場合は、全ての「部分アミノ酸配列(sub-sequence)」に対して(すなわち、全ての切断特性を考慮 して)検索を実行しますので、検索対象となるペプチドの数は「Trypsin」の場合と比較して数桁多くなるため、検索時間 は増加し、閾値スコアは相対的に高くなります。HMC ペプチドのような、消化酵素由来ではない生体内ペプチドに対して 検索したい場合は「None」を選択してください。

「Trypsin」などの消化酵素を指定した検索で有意なタンパク質がヒットしないときは、「None」を選択する前に「semiTrypsin」を選択して再検索するほうが効率的です。「semiTrypsin」は「Trypsin」と「None」の中間的な切断特性

を持っており、KおよびRのC末側で切断し(KおよびRの次にPが存在する場合は切断しません)、N末端側は任意に切断 します。C末端、N末端で任意に切断されていると考えられる場合は「None」を選択してください。

注意: CNBr を選択した場合は、Variable modifications リストから「Met->Hsl(Homoserine lactone)」あるいは 「Met->Hse(Homoserin)」を選択してください。

#### [Max. Missed Cleavages]

ペプチドの未切断サイト数を選択してください。

酵素消化によって得られたペプチド混合物の中に未消化サイトを持つペプチドが存在する場合は、そのサイト数(実験 条件にもよりますが、通常は「1」あるいは「2」程度)を選択してください。タンパク質が完全に酵素消化され、試料 中に不完全に消化されたペプチド断片は存在しないと断言できる場合は「0」を選択してください。検索対象となるペプ チド数がより少なくなるため、閾値スコアは相対的に小さくなります。明確な理由なしに大きな値を選択するのは避けて ください。値が大きくなるほど検索対象となるペプチド数は増加し(したがって検索時間も増加し)、閾値スコアは相対的 に高くなります。

#### [Select Modifications]

[Select Modifications]ボタンを押すと図 4-9 に示すダ イアログが表示されます。左側の修飾リストから目的の修 飾を選択し、[Fix Modifications]欄あるいは[Variable Modifications]欄の左横にある[>]ボタンを使って移動 してください。[<]ボタンで元に戻すことができます。

Mascot Server は、化学修飾に対応する「Fixed modifications」と翻訳後修飾あるいは偶発的な修飾に対応 する「Variable modifications」とを区別しています。

[Fixed modifications]として指定されたアミノ酸残基ま たはアミノ酸末端は、すべてその修飾を受けたものとして 検索が実行されます。たとえば、「Carboxymethyl (C)」を 選択した場合は、システインの質量(103 Da)は修飾を受け



た質量である 161 Da (103-1+59)として検索が実行されます。アミノ酸残基またはアミノ酸末端は、その修飾を受けた時の 質量で固定されますので、検索時間の増加はありません。

一方、[Variable modifications] として指定されたアミノ酸残基またはアミノ酸末端は、その修飾を受ける場合と受けない場合の2通りを考慮した検索が実行されます。たとえば、「0xidation (M)」を選択した場合、もしペプチドの中に3つのメチオニンが存在するときは、0、1、2、3個の酸化メチオニン残基の存在を考慮し、質量データに最もよく一致する検索結果を表示します。[Variable modifications]を加味した検索はタンパク質同定においては非常に強力な手法ですが、選択する修飾の数に比例して検索対象となるペプチドの数が幾何級数的に増加し(検索時間も級数的に増大し)、閾値スコアは相対的に高くなるため、有意な同定結果が得にくくなります。一般的に、試料に含まれるペプチドのうち一部のペプチドが翻訳後修飾を受けていると考えられますので、第1段階の検索では、[Variable modifications]の選択数をゼロまたは最小限にとどめて、まず試料に含まれると思われる有意なタンパク質を同定し、第2段階の検索で、同定したタンパク質に対して構造解析を行うという検索プロセスがより効率的です。

なお、デフォルトの状態では代表的な修飾がリストに表示されています。Mascot Server に設定されている全ての修飾 を表示させたい場合は[Show all modifications]をチェックしてください。

#### [Decoy database]

Decoy データベースに対する検索を自動実行させたい場合はチェックしてください。主に FDR(False Discovery Rate) を確認したいときに使用します。詳しくは次のページをご覧ください。

#### http://www.matrixscience.com/help/decoy\_help.html

#### [Protein Mass]

指定した質量以下の連続したアミノ酸配列に対して検索を実行します。入力欄が空欄の場合はこの機能は無効です。た とえば、10,000 Da を指定した場合は、10,000 Da の「長さ」を持つウインドウが配列データベース上を移動するイメー ジになります。従いまして、検索対象は、分子量1万以下のタンパク質エントリと、分子量が1万以上のタンパク質エン トリに対しては質量値が1万以下の連続した部分アミノ酸配列となります。

#### [Peptide Charge]

通常は使用しません。質量データにプリカーサイオンの電荷情報が含まれない場合は対応する電荷を選択してください。

#### [Monoisotopic / Average]

質量データがモノアイソトピック(<sup>12</sup>C)の場合は[Monoisotopic]を、平均値の場合は[Average]を選択してください。

#### [Peptide tol. $\pm$ ]

ペプチド分子またはイオンの質量誤差を指定してください。次の単位をサポートしています。

- ① %
  - 2 mmu (milli-mass units, 0.001Da)
- 3 ppm
- ④ Da

#### [#13C]

抽出されたピークがモノアイソトピック(<sup>12</sup> C)ではなく「<sup>13</sup> C」あるいは「<sup>13</sup> C<sub>2</sub>」が含まれる場合にはリストから1また は2を選択してください。質量誤差は、

#### 質量誤差 > |実験値-理論値-1または2|

で計算されます。

#### (3) [MS/MS]フレーム

MIS 検索の検索条件を指定します。

#### [MS/MS Ions Search]

チェックすると MIS 検索が有効になります。

#### [Data format]

質量データファイルのファイルフォーマットを指定してください。次のファイルフォーマットをサポートしています。

- ① Mascot generic (.MGF)
- ② Finnigan (.ASC)
- ③ Micromass (.PKL)
- ④ Sequest (.DTA)
- ⑤ mzData (.XML)
- 6 mzML (.mzML)

#### [Quantitation]

定量解析手法を選択してください。

#### [Error tolerant search]

Error Tolerant 検索を自動実行させたい場合はチェックしてください。なお、次の制限がありますので注意してくださ い。

- ① 消化酵素を指定しなければいけない。
- ② 「Variable modification」の指定数は2個まで(設定ファイル「mascot.dat」中で変更することができます)。
- ③ Decoy 検索との併用はできない。
- ④ Quantitation 検索との併用はできない。

#### [MS/MS tol. $\pm$ ]

プロダクトイオンの質量誤差を指定してください。次の単位をサポートしています。

① mmu (milli-mass units、 0.001Da)

② Da

#### [Instrument]

質量分析計のタイプを選択してください。 質量分析計のタイプに対応するプロダクトイオンの種類(イオンシリーズ)に

ついては次のページをご覧ください。

http://www.matrixscience.com/help/search\_field\_help.html#INSTRUMENT

# 4.4 [Task Editor]タブ

タスクを作成し、Mascot 検索を実行します。 [Task] フレーム の入力欄(デフォルトは「Untitled」) に文字列を入力してタスク 名を設定してください。それぞれのタスクにはタスク ID (通し番 号) が付けられます。タスク名は[Status] タブおよび[Event Log] タブ内でタスク ID とともに表示されます。タスクには次の 3 種 類の動作モードがあり、それぞれ[Data file list] フレームのレ イアウトが異なります (図 4-10 はバッチ・モードのフレームレ イアウトです)。

#### バッチ・モード (batch)

指定した(1つまたは複数の)質量データファイルをひとつ ずつ、順番に Mascot 検索を実行します。Mascot 検索開始日時 を指定することもできます。

#### 図 4-10 [Task Editor]タブ

Owner Task Untitled	New Run
Parameter set	Data import filter
Data file list Drag and drop data files into the area below or click on Add	Start now     Start at     O4 4月 2016 - 14:30     Real-time monitor     Fallow-up     Search priority     O      Actions     Auto-export     External processes
	Follow-up No follow-up required
Delete Add Folder Add Files	Discard results     Repeat at intervals of     Pase data to     When any set of the

#### リアルタイムモニター・モード (Real-time monitor)

指定したフォルダ(ローカルあるいはネットワーク上)を監視し、そのフォルダに新たに作成された質量データファイル を取得し、Mascot 検索を実行します。すなわち、質量分析計のデータ処理ソフトウエアが作成した質量データは、Mascot Daemon を介して自動的に Mascot Server に投入されますので、タンパク質同定にかかわる質量データ処理プロセスを自動化 することができます。

#### フォローアップ・モード (Follow-up)

検索結果のスコアあるいは期待値が、あらかじめ指定した条件に達しなかった場合、別の検索条件で再検索を実行します。

#### (1) [Owner]フレーム

Mascot セキュリティーが有効になっており、他のユーザ名でも検索することができるユーザ権限を設定している場合にア クティブになります。ドロップダウンリストからユーザ名を選択してください。

#### (2) [Task]フレーム

入力欄 (デフォルト値は「Untitled」) にタスク名を入力してください。ここで入力したタスク名は[Status]タブ、[Event Log]タブ、検索結果ページの[Search title]行に表示されます。[Status]タブ内に表示されているタスクの「Clone」を作成 した場合は、タスク名の前に「Copy of」が加えられます。[New]ボタンは設定内容をデフォルトに戻します。[Run]ボタンを 押すとタスクが実行されます。

#### (3) [Parameter set]フレーム

[...]ボタンを押して、[Parameter Editor]タブで作成・保存された検索条件ファイル(\*.par)を読み込んでください。検 索条件ファイルが保存されるデフォルトのフォルダは「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥parameters」です。

#### (4) [Data import filter]フレーム

質量データファイルが質量分析計ベンダー独自のバイナリ形式(拡張子が.rawや.wiff など)の場合は、対応するフィ ルタプログラムを使って質量ピーク抽出処理を行った後に Mascot 検索を実行する必要があります。ドロップダウンリストか ら質量データファイルに対応するフィルタプログラムを選択し、その右にある[Options ...]ボタンを押してください。ピー ク抽出などの処理条件を設定するためのダイアログが表示されますので、処理条件を設定した後、[OK]ボタンを押してくだ さい。[Run]ボタンを押すと、質量データファイルはフィルタプログラムでピーク抽出処理され、作成されたピークリストが Mascot Server に投入されます。デフォルトでは次のフィルタプログラムをサポートしています。

#### 1 Mascot Distiller

Mascot Daemon がインストールされている PC に Mascot Distiller がインストールされている場合に表示されます。全て の質量分析計ベンダーの質量データファイルを処理することが できます。

「Mascot Distiller」を選択した後、[Options …]ボタンを押 すと図 4-11 に示すダイアログが表示されますので、[Data File Format]フレームから質量データファイルのファイルフォーマッ トを選択し、[...]ボタンから適切な処理条件ファイル (Processing Options ファイル:\*.opt)を読み込んでください。 [Multi-Sample Files]フレームはAB | MDS Sciex の Analyst.WIFF ファイル用の設定項目です。WIFF ファイルが複数のサンプルデー タから構成されている場合の検索方法(統合か個別か)を指定す ることができます。[Scan Range (multi-scan files)]フレーム ⊠ 4-11 Mascot Distiller

Mascot Distiller data import options     Data File Format     Themo Xcalibur	Default for unknown scan type C Centroided C Profile / continuum
Mascot Distiller Processing Options C#Program Flee#Matrix S#Orbitrap_low_res_MS2_4.opt	Edit Save As
Multi-Sample Files C Merge all samples into single search G Separate search for each sample	Intensity values     Area     C S/N
Scan Range (multi-scan files) Start End Units Minutes	Distiller Project     Save
Output PMF Masses as C m/z • MH+ C Mr	MS/MS Fragments as
Quantitate Protein Hits	to
Reset	OK Cancel

では、データ処理の範囲を LC の保持時間や質量分析計のスキャン番号で指定することができます。[Output MS/MS Fragment as]フレームでは、出力データとしてのプロダクトイオンの電荷を指定することができます。Mascot Server はプロダクトイオンの電荷を1価あるいは2価と仮定して検索しますので、3価以上のプロダクトイオンが存在する場合は「MH+」を選択し、多荷のプロダクトイオンの m/z 値を1価の質量に変換して出力するようにしてください。 [Distiller Project File]フレームの[Save]をチェックすることにより、Mascot Distiller の処理内容をプロジェクトファイル(\*.rov)として自動的に保存します。定量計算を行った場合は、計算対象となるタンパク質の範囲([Range] の場合はヒット番号)を指定してください。

#### Thermo ExtractMSn

Mascot Daemon がインストールされている PC に ExtractMSn と その関連ファイルがインストールされおり、メニューバー[Edit]  $\rightarrow$  [Preferences] $\rightarrow$ [Data import filters]タブの[Full path to Thermo ExtractMSn]入力欄にそのファイルパスが指定されている 場合に表示されます。Xcalibur RAW ファイルを処理(プリカーサ 毎の DTA ファイルを作成し、それらをひとつにまとめて MGF ファ イルを作成)することができます。

[Data import filter]から「Thermo ExtractMSn」を選択した 後、[Options ...]ボタンを押すと図 4-12 に示すダイアログが表 示されますので、適切な処理条件を設定し、[OK]ボタンを押して ください。詳しくは Mascot Daemon のメニューバー[Help]→ [Mascot Daemoon Help]→[In Depth]→[Data Import Filters]→ [Thermo ExtractMSn]の項をご覧ください。また併せて次のペー ジもご覧ください。 図 4-12 Thermo ExtractMSn

Thermo ExtractMSn data import options	
First scan	
Last scan	
Min. precursor mass 600	
Max. precursor mass 3500	
Grouping tolerance 1.4	
Intermediate scans 1	
Precursor charge All	•
Min. scans / group 1	
Min. peaks 10	
Min. intensity	
Min. S/N 3	
Min. major peaks 5	
Reset	OK Cancel

http://www.matrixscience.com/help/instruments\_xcalibur.html

#### ③ AB SCIEX MS Data Converter

Mascot Daemon がインストールされている PC に AB SCIEX MS Data Converter がインストールされおり、メニューバー[Edit] → [Preferences]→[Data import filters]タブの[Full path to AB SCIEX MS Data Converter]入力欄にそのファイルパスが指定 されている場合に表示されます。Wiff および TOF/TOF データを処 理することができます。

[Data import filter]から「AB SCIEX MS Data Converter」を 選択した後、[Options ...]ボタンを押すと図 4-13 に示すダイア ログが表示されますので、適切な処理条件を設定し、[OK]ボタン を押してください。詳しくは Mascot Daemon のメニューバー [Help]→[Mascot Daemoon Help]→[In Depth] →[Data Import Filters]→[AB Sciex MS Data Converter]の項をご覧ください。 また併せて次のページもご覧ください。

### ⊠ 4-13 AB SCIEX MS Data Conveter

AB SCIEX MS Data Converter	data import options		_
Raw data format	10.66		-
Raw data format	Protects Pilot and at the s		-
reak picking	Proteinmiot centrolding		-
Peak list format	MGF		-
Compression (mzML)	zlib		-
Precision (mzML)	64-bit float single precision		-
Create index (mzML)	<b>v</b>		
Reset		ОК	Cancel

http://www.matrixscience.com/help/instruments\_analyst.html#Converter

#### (4) ProteoWizard msConvert

Mascot Daemon がインストールされている PC に ProteoWizard msConvert がインストールされおり、メニューバー [Edit] → [Preferences] → [Data import filters] タブの [Full path to ProteoWizard msConvert]入力欄にそのファイルパスが指定され ている場合に表示されます。様々なフォーマットの質量データファイルを処理することができます。

#### http://proteowizard.sourceforge.net/formats.shtml

[Data import filter]から「ProteoWizard msConvert」を選択 した後、[Options ...]ボタンを押すと図 4-14 に示すダイアログ が表示されますので、適切な処理条件を設定し、[OK]ボタンを押 してください。入力する質量データファイルのフォーマットは自 動で認識され、「MGF」あるいは「mzML」のフォーマットで出力さ れます。詳しくは Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Mascot

#### 図 4-14 ProteoWizard msConvert

ProteoWizard msConvert data	import options	×
Peak list format	MGF	
Precision m/z (mzML)	64-bit float single precision	
Precision intensity (mzML)	32-bit float single precision	
Omit index (mzML)		
Use compression (mzML)	<b>v</b>	
Filter options	-filter "peakPicking true 1-" -filter 'threshold count !	
Reset	OK Cancel	1
		1
(L		

Daemoon Help]→[In Depth] →[Data Import Filters]→[ProteoWizard msConvert]の項をご覧ください。

#### (5) [Data file list]フレーム

タスクの種類(動作モード)により、フレームレイアウトが異なります。

#### ① バッチ・モード

[Schedule]フレームの[Start now]または[Start at] が選択されている場合の動作モードです。ひとつまた は複数の質量データファイルに対して、逐次的に Mascot 検索を実行します。質量データファイルは[Add Files ...]ボタンを押して表示されるダイアログから指 定してください。[Data import filer]でフィルタプロ グラムを選択した場合は[Add Folder ...]ボタンも有効 になり、「Masslynx」、「Bruker XMASS/XTOF」、「Bruker Esquire」、「Agilent LC/MSD Trap」などのフォルダ単 位の質量データを指定することができます。また、

#### 図 4-15 [Start now/at]モードのフレーム

ile Edit Heln	
tatus   Event Log Task Editor   Parameter Editor	
Tark	
Owner Task	
Untiled	New Run
Parameter set	Data import filter
default	Vone Von
_	
Data file list	Second
Drag and drop data files into the area	(• Start now
brag and drop data mea mito drea	
below or click on Add	C Start at 05 4月 2016 - 10:38 📑
below or click on Add	C Start at 05 4月 2016 - 10:38 🚊
below or click on Add	C Start at 05 4月 2016 - 10:38
below or click on Add	C Start at 05 4月 2016 - 10.38
below or click on Add	C Start at 05 4 月 2016 - 10:38
below or click on Add	Start at         05 4/R 2016 - 10.38           Read-time monitor         Follow-up           C Follow-up         Search priority           Actions         Auto-export           External processes         Fill water
below or click on Add	Start at     05 4/3 2016 · 10.38       Read-time monitor     Follow-up       Search priority     0       Actions     Auto-export       External processes
befow or click on Add	Start at     05 4/7 2016 - 10.38       Real-time monitor     Follow-up       Follow-up     Search priority       Follow-up     External processes       Follow-up     Follow-up
below or click on Add	Start at     05 4/7 2016 - 10.38       Read-time monitor     Fellow-up       C Follow-up     Search priority       Actions     Auto-export       External processes       Follow-up     Image: Search priority       Follow-up     Search priority       To follow-up     Image: Search priority       Follow-up     Search priority       Image: Search priority     Image: Search priority       Follow-up     Image: Search priority       Image: Search priority     Image: Search priority       Image: Search priority     Image: Search priority       Follow-up     Image: Search priority       Image: Search priority     Image: Search prior
below or click on Add	Start at     05 4/7 2016 - 10.38       Read-time monitor     Read-time monitor       Follow-up     Search priority       Actions     Auto-export       External processes       Follow-up       No follow-up       To locard results       Discord results       Repeate at intervals of

Windows のファイルブラウザ上で選択したファイル群またはフォルダ群を[Data file list]ウインドウにドラッグ& ドロップすることもできます。

[Data file list]ウインドウに読み込んだ質量データファイルまたはフォルダを削除する場合は、削除したいファ イルまたはフォルダを選択し、[Delete]ボタンを押してください。

[Merge MS/MS files into single search]をチェックすると、[Data file list]ウインドウにある全ての質量デー タファイルを結合してひとつにし、Mascot 検索を実行します(XML 形式のデータファイルは統合できません)。[Data import filter]でフィルタプログラムが指定されているときは、フィルタプログラムによって処理された質量データ ファイルが「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥MGF¥タスク名¥mascot\_daemon\_merge.mgf」ファイルと して統合されます。なお、フィルタプログラムとして「Mascot Distiller」を指定したときは、[Status]タブには Mascot Distiller Project ファイルのリンクは表示されませんが、各質量データファイルに対するプロジェクトファイルは 「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥MGF¥タスク名」フォルダに保存されています。

フィルタプログラムとして「AB SCIEX MS Data Converter」を指定したときは、[Add Folder ...]ボタンではなく [Job Run ...]ボタンになります。[Job Run ...]ボタンを押すとテキストを入力するためのダイアログが表示されます ので、「4800¥ProteinPilot Getting Started Guide¥iTRAQ Reagents - 8Plex 8 Protein Mix¥3¥1¥2」のような Pseude パスを入力してください。

#### ② リアルタイムモニター・モード

[Schedule]フレームで[Real-time monitor]が選択さ れている場合の動作モードです。リアルタイムモニタ ー・モードでは、ワイルドカードを含むフォルダパス やファイルパスを使って質量データファイルを指定し ます。[New files only]をチェックすると、タスクを 実行した時点ですでに存在した質量データファイルは 無視されます。[Include sub-folders]をチェックする と、[Specify path to root folder]欄で指定したフォ ルダおよびそのサブフォルダに存在する質量データフ ァイルに対して検索を実行します。

Eile Edit Help Status   Event Los Task Edtor   arameter Editor	
Owner Task Untitled	New Run
Parameter set default	Data import filter  None  Options
Specify path to root folder  Browse  Optional wild card file or folder name	C Start row Start av C Real-sime monitor C Real
<b>*</b> *	Follow-up No follow-up required
Include sub-folders	Repeat at intervals of 1      days

なお、ワイルドカードにより指定されるファイル数 は非常に多くなる場合がありますので、もしタスクを

実行した後に指定内容の間違いに気づいた場合はそのタスクを強制終了してください([Status]タブに移動し、対応 するタスク名を右クリックし、[Pause]を選択した後に[Delete]を選択してください)。

ワイルドカード(「\*:任意個の文字」および「?:1個の文字」)の使用例を示します。[Specify path to root folder] 欄で「D:¥Data¥P\*¥Q\*¥200311??」のように指定した場合、

# D:¥Data¥Proteins¥QStar¥20031102

#### D: ¥Data ¥Peptides ¥QTrap ¥20031103

などのフォルダパスが対象となりますので、[Optional wild card file or name]欄で「\*.wiff」を指定すること により、これらの指定内容に一致する次のような質量データファイルが検索対象となります。

#### D:\Data\Proteins\QStar\20031102\Trypsin234.wiff

質量データファイルを含むフォルダを対象としたい場合、たとえば、

#### D:\#Data\Proteins\QTof\Default.pro\Data\Trypsin234.raw

フォルダの場合は、[Specify path to root folder]欄で「D:¥Data¥Proteins¥QTof¥\*.pro¥Data」を、[Optional wild card file or name]欄で「\*.raw」のように指定することができます。しかし、[Specify path to root folder]欄で「D:¥Data¥Proteins¥QTof¥\*.pro¥Data¥\*」を指定し、[Optional wild card file or name]欄を空欄にした場合は、対象となるフォルダ階層が深すぎるため(すなわち「D:¥Data¥Proteins¥QTof¥\*.pro¥Data¥\*¥\*」を指定することになり)、動作しません。

[Include sub-folders]をチェックした場合は、[Specify path to root folder]欄で指定したフォルダ及びそのサ

ブフォルダに存在する質量データファイルが検索対象となりますが、検索対象がフォルダの場合は動作しません。 なお、「AB SCIEX MS Data Converter」を使って Oracle データベースから取得した TOF/TOF データに対しては、動 作しません。

#### ③ フォローアップ・モード

[Schedule] フレームで[Follow-up] が選択されてい る場合の動作モードです。フォローアップ・モードで 作成・実行されたタスクは「アイドリング状態」で待 機し、他のタスクで指定されたフォローアップ条件に 合致した結果として回されてきた質量データファイル に対して Mascot 検索を実行しますので、[Data file list] フレームは使いません。複数のフォローアップ・ タスクを組み合わせ、より複雑な検索処理プロセスを 作成することができます。

#### 図 4-17 [Follow-up]の[Data file list]フレーム

Owner Task	New Run
Parameter set	Data import filter  None  Options
Luas me ist A follow-up task does not have a pre- defined list of data files. It runs continuously waiting to receive data from other tasks.	Schedule         C         Start tow           C         Start stat         105.4.19, 2016 - 10.3.8           C         Start stat         105.4.19, 2016 - 10.3.8           C         Fallowup         Search priority           C         Fallowup         Search priority           C         Fallowup         Search priority           C         Fallowup         Search priority
	Fallow-up No follow-up required Discard results Repeat at intervals of 1 doys

#### (6) [Schedule]フレーム

タスクの種類(動作モード)を指定します。 [Start now]と[Start at]はバッチ・モードに対応します。 [Real-time monitor]はリアルタイムモニター・モードに対応します。

[Follow-up]はフォローアップ・モードに対応します。

[Search priority]は実行したタスクの優先順位を指定します。[0]から[-20]の値を指定することができ、数値が小さいほど優先順位が低くなります。

#### (7) [Actions]フレーム

[Auto-export]ボタンを押すと、図 4-18 に示すダイアログが 表示されますので、[Choose first]で検索モード(PMF または MS/MS)を、[Choose second]で出力フォーマットを選択し、 [Format]フレームで出力したい項目をチェックした後、ページ の最後にある[OK]ボタンを押してください。Mascot 検索が終 了した後に、指定された出力フォーマットで検索結果の内容が 「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥MGF¥タスク 名」フォルダにファイル出力されます。なお、出力項目は Mascot 検索が実行される前に設定されていますので、Mascot 検索結果がその出力項目を含まない場合はエラーが返される ことがあります。Mascot 検索の条件や内容を考慮して出力項 目を選択してください。

[External processes] ボタンを押すと[Mascot Daemon External processes]ダイアログが表示されます。動作させたい外部プログラムを、

- ① タスクの開始前 (Before starting task)
- ② 検索の実行前 (Before each search)
- ③ 検索終了時 (After each search)
- ④ タスクの終了時 (After completing task)

の各ポイントで指定し、実行させることができます。なお、ここで設定した内容はタスクの構成情報として、タスク毎に 記録されます。

[Wait for completion]をチェックした場合は、外部プログラムが終了するのを待つことになりますが、もし外部プログラムが正常終了せずに固まった状態(hung)になった場合は、タスクはそれに引きずられ先に進みません。もし、外部プログラムがエラーを出力して停止した場合は、そのエラーは Event Log 欄に出力され、Task は次のステップへと進行します。

[Halt on error]をチェックした場合は、外部プログラムがエラーを出力して停止した時点でタスクは途中終了します。

#### 図 4-18 Auto-exportの詳細設定

Choose first	C PMF © MS/MS
Choose second	No export required
rmat	
Significance threshold p<	0.05 C Identity C Homology
Farget FDR (percentage)	<not set=""></not>
ons score cut-off	0
Max. number of hits	AUTO
Protein scoring	C Standard © MudPIT
include same-set proteins	Г
include sub-set proteins	0
Group proteins into families	Г
Require bold red	
Unigene index	None
Use Percolator	
Preferred taxonomy	All entries

なお、External processes 機能は Mascot Daemon Engine プログラムが管理しています。もし、Mascot Daemon Engine プ ログラムを Windows のサービスプログラムとして動作させていて、外部プログラムがデスクトップ・アプリケーションの場 合は、Mascot Daemon Engine サービスプログラムがこの外部プログラムを実行できるように設定してください。

External processes では次のタグを使用することができます。<resulturl>タグのように、処理が終了するまで値を持た ないものがあります。また、タグは大文字小文字を区別します。

```
<taskname〉: タスク名
(taskname〉: タスク名
(localhost〉: コンピュータ名
<localuser〉: ログオンユーザ名
<datafilename〉: 質量データファイル名
<datafilepath〉: 質量データファイルパス
<cachedpeaklist〉: 「Data import filter」プログラムが作成したピークリストファイルパス
<cachedpeaklist〉: 「Data import filter」プログラムが作成したピークリストファイルパス
<samplenumber〉: サンプル番号
<mascot_user_id〉: Mascot セキュリティユーザ ID
<mascot_user_name〉: Mascot セキュリティユーザイA
<mascot_user_full_name〉: Mascot セキュリティユーザインペーム
<mascot_user_full_name〉: Mascot セキュリティユーザメールアドレス
<resulturl〉: 検索結果ページURL
<resultfilename〉: 検索結果ファイルパス</pre>
```

External processes の設定例を示します。図 4-19 の上段に示し た設定の下でタスクを実行すると、タスクが開始される前に、net コマンドを使って PC のログインユーザである「usami」に「タスク 名 is starting」のメッセージを送り(PC のディスプレイ上にはこ のメッセージを含むダイアログが表示されます)、Mascot 検索が終 了した時点で検索結果ページを読み込んだブラウザが起動し、タス クが終了した時点で「usami」に「タスク名 has finished」のメッ セージを送ります。なお、Web ブラウザはデスクトップ・アプリケ ーションですので、Mascot Daemon Engine プログラムがサービスプ ログラムとして動作している場合は、デスクトップ・アプリケーシ ョンを実行できるように設定してください。

図 4-19 の下段は「Microsoft Windows Script」を使用した例です。 上段の例と同様に、タスクを実行すると、タスクの開始時及び終了 時に net コマンドを使って PC のログインユーザである「usami」に メッセージ(「タスク名 is starting」と「タスク名 has finished」) を送りますが、同時に「C:¥temp¥links.txt」ファイルが作成され、 各々の Mascot 検索に対する検索結果ページの URL が一行ずつ追加さ れていきます。ここで使用した simple.vbs スクリプトは次のような 内容を持っています。また、ここで使用したスクリプトはデスクト ップ・アプリケーションではありません。

#### <スクリプトファイル名 : simple.vbs>

#### Option Explicit

'Result file name and result URL are passed as command line arguments

Dim objArgs, ResultFileName, ResultURL

Set objArgs = WScript.Arguments

図 4-19 [External processes]の設定例

Mascot Daemon: External proc	esses	×
Before starting task		
net send usami " <taskname> is sta</taskname>	rting"	•
☐ Wait for completion	Halt on error	
Before each search		
No external process	•	-
Wait for completion	Halt on error	
After each search		
"C:\Program Files\Internet Explorer	\iexplore.exe'' <resulturl></resulturl>	•
☐ Wait for completion	Halt on error	
After completing task		
net send usami " <taskname> has fi</taskname>	nished"	•
Wait for completion	Halt on error	
	OK Cano	el
Mascot Daemon: External proc	accac	- 572

The serie usanit (taskridine) is	starting"
Wait for completion	Halt on error
Before each search	
No external process	▼
Wait for completion	Halt on error
After each search	
wscript C:\temp\simole.vbs " <n< td=""><td>esultfilename&gt;" " <resulturl>" 🛛 💌</resulturl></td></n<>	esultfilename>" " <resulturl>" 🛛 💌</resulturl>
Wait for completion	Halt on error
After completing task	
net send usami " <taskname ha<="" td=""><td>s finished" 🗨</td></taskname>	s finished" 🗨
1) (sit for completion)	Halt on error

ResultFileName = objArgs(0)

ResultURL = objArgs(1)

'Format result URL as hyperlink and append to links file

Dim fso, MyFile, ForAppending

For Appending = 8

Set fso = CreateObject("Scripting.FileSystemObject")

Set MyFile = fso.OpenTextFile("c:\temp\links.txt", ForAppending, True)

MyFile.WriteLine "<A HREF=" & CHR(34) & ResultURL & CHR(34) & ">" & ResultFileName & "</A>"

(8) [Follow-up]フレーム

再検索を実行するための条件を設定します。

再検索条件として[If score less than]を選択してスコアの 値を、[If probability that match in random > 1]を選択し て期待値の値(0.05を指定したい場合は20を入力)を設定しま す。検索結果のスコアが指定値を下回った場合(検索結果の期 待値がその値を上回った場合)に、その質量データファイルは [Repeat at intervals of]で指定した時間間隔で再検索される か、あるいは[Pass data to]で指定した(あらかじめ実行して ある)フォローアップ・タスクに渡され、その検索条件に従って再検索されます。

フォローアップ機能は様々な目的に利用することができます。





- (例1)設定したスコアまたは期待値に達しなかった質量データファイルに対し、指定した時間間隔で再検索させるようにすることができます。再検索は設定条件を満たさなくなるまで無期限に続けられます。データベースが定期的に更新される場合などに有効です。
- (例2) ひとつの質量データファイルに対して、異なる複数の配列データベースを検索させることができます。たとえ ば、最初に NCBInr データベースを検索させ、設定したスコアあるいは期待値に達しなかった場合は dbEST デ ータベースを再検索させることができます。

[Discard results]をチェックすると、[Status]タブの検索結果ツリーには各々の検索結果は追加されなくなりますが、設 定したスコアあるいは期待値に達しなかった検索の場合は、[Event Log]タブにその内容を伝えるメッセージ(たとえば 「Search results discarded (score is less than 61 specified threshold)」)が表示されます。

[Repeat at interval of]をチェックすると、設定したスコアあるいは期待値に達しなかった質量データファイルは指定した間隔(分、時間、日、週、月)で再検索されます。

[Pass data to]をチェックすると、設定したスコアあるいは期待値に達しなかった質量データファイルはリストから選択 したフォローアップ・タスクに渡され、再検索されます(フォローアップ・タスクはあらかじめ実行し、"アイドリング状態" にしておく必要があります)。

# 4.5 [Event Log]タブ

[Event Log]タブには Mascot Daemon が実行したイベントに関 するログ情報が表示されます。warning や error に関するメッセ ージもここに表示されます。表示されるログ情報はMascot Daemon が起動した時点から始まります。過去のログはカンマで区切られ た CSV ファイルの形式で次のファイルに記録されます。なお、 Mascot Daemon Service プログラムの出力メッセージは Windows Event Log に記録されるもこともありますので、必要に応じて確 認してください。

図 4-21	[Event	Log]タ	ブ
--------	--------	-------	---

Mascot D	aemon		-			
ile <u>E</u> dit	<u>H</u> elp					
atu: Eve	nt Log	sk Editor   Par	ameter E	Editor		
	Time	Date	Task	Task label	Data file	Log entry
Event	14:25:29	2016/04/04				Mascot Daemon engine version 2.5.1 (64-bit)
Event	14:25:44	2016/04/04				Using embedded VistaDB database: C:¥ProgramData¥Matrix
Event	14:25:45	2016/04/04				Found Mascot Distiller library (MDRO) version 2.5.0.0
🗊 Event	14:25:45	2016/04/04				Found Mascot Distiller Workstation version 2.5.1.0
🗊 Event	10:38:49	2016/04/05				Mascot Daemon engine St
🔁 Event	10:38:49	2016/04/05				Mascot Daemon engine version 2.5.1 (64-bit)
🗊 Event	10:39:04	2016/04/05				Using embedded VistaDB database: C:¥ProgramData¥Matrix
🗊 Event	10:39:05	2016/04/05				Found Mascot Distiller library (MDRO) version 2.5.0.0
Event	10:39:05	2016/04/05				Found Mascot Distiller Workstation version 2.5.1.0
Event	13:42:24	2016/04/05	9	10mix test2		Starting new task
Event	13:42:35	2016/04/05	9	10mix test2		Connected to Mascot server at http://localhost/mascot/cgi/
Event	13:42:45	2016/04/05	9	10mix test2	10mix2.mgf	Search submitted
Event	13:45:28	2016/04/05	9	10mix test2	10mix2.mgf	Search completed
Event	13:45:40	2016/04/05	9	10mix test2		Task completed

C:\ProgramData\Matrix Science\Mascot Daemon\Mascot\_Daemon\_Event\_Log.csv

## 4.6 [Status]タブ

[Status]タブでは、[Task Database]、[タスク名]、[質量デー タファイル名]の関係をツリー構造で表示するとともに、タスク の状態や検索結果の概要を確認することができます。

左側ウインドウの最上位に位置する[Task Database]を選択す ると、右側ウインドウにはそれに含まれるタスクに付随する情報 が一覧表示されます。左側ウインドウの[タスク名]を選択すると、 右側ウインドウにはそれに含まれる検索概要(質量データファイ ル名や検索結果 URL など)がリスト表示されます。左側ウインド ウの[質量データファイル名]を選択すると、右側ウインドウには その検索の概要が表示されます。なお、右側ウインドウの最上位 にあるタイトルカラムをクリックすると、表示されているリスト の並びを昇順・降順に切り替えることができます。また、タイト

Mascot Daemon		
Cle         Edit         Help           Task Editor         Parame           Diate         2 Single tast earch           Task Fight Int para search         7 Tippen Int para search           Task Fight Int para search         7 Tippen Int para search           Task Fight Int para search         9 Tippen Int para search           Task Fight Int para search         9 Tippen Int para search           Task Fight Int para search         9 Tippen Int parameter           Parameter         10 Compared Task Parameter           Para	er Edtor Data file Saarch Tile Accession Protein MW Score Database Reeut file URL Search schmitted Search completed	Value           CVPhogen/DatAWlatic ScienceVMascot DeemonVdataVe           ce Stringsm/DataWlatic ScienceVMascot DeemonVdataVe           HBB, HUMAN           19588           67           Hengdobin adunt beta OS+Hono sapiens GN+HBB PE- SwistPic_2016_03.fata           Hbp://Jocalhost/mascat/cgi/noster_results.pl7Hi           2016/04/05 14:54:14
exe_27dta exe_8dta	<	,

ルカラムの幅は境界線をマウスでドラッグすることにより変更することができます。

タスクの状態は、タスク名の左側にあるアイコンで確認することができます。各アイコンは次の意味を持っています。

- 🚯 : Running task (タスク実行中のアイコン)
- Im : Follow-up task (フォローアップ・タスクのアイコン)
- 🝸 :Trying to pause a running task(タスクを一時停止させる際の待ちアイコン)
- 🥪 :Completed task (タスク完了のアイコン)
- 🙈 :Cancelled task (キャンセルされたタスクのアイコン)
- 🕕 : Paused task(一時停止したタスクのアイコン)

タスクは一時停止(Pause)、再検索(Resume)、複製(Clone)、削除(Delete)することができます。タスク名を右クリックし、 表示されたリストから実行したい操作を選択してください(あるいは、タスク名をクリックし、下方に配置されているボタン を押してください)。

[Clone]を選択することにより、そのタスク情報は[Task Editor]タブに「Copy of タスク名」として複製されますので、類 似の条件を持った新しいタスクを作成するときに便利です。

[Delete]を選択してタスク全体を削除できますが、タスクにぶら下がっている個々の[質量データファイル名]を削除することはできません。また、タスクを削除すると Mascot Daemon が管理するタスク・データベースファイルからその情報が削除されますが、Mascot Server が管理する結果ファイルが削除されることはありません。

[質量データファイル名]をドラッグして、[フォローアップ・タスク名]にドロップすると、そのフォローアップ・タスクの 条件で再検索を実行することができます。

[Status]タブの画面は[Task action polling interval (seconds)]の設定値([Edit]→[Preferences]→[Timer settings]タ ブ)に従ってリフレッシュされます。リフレッシュする毎にタスク・データベースファイルを読み込み、PCのリソースを消費し ますので、この設定値は小さくせずに、必要に応じて[Refresh (F5)]ボタンを押してください。

ひとつのタスク・データベースファイルは異なる PC にインストールされた複数の Mascot Daemon で共有することができます。 それぞれのタスクはそのタスクを作成した Mascot Daemon が所有者になり、タスクの一時停止 (Pause)、再検索 (Resume)、削除 (Delete)を行うことができますが、複製(Clone)は全てのクライアントに許可されています。

# 5 補足

# 5.1 Mascot Daemon Engine を Windows のサービスとして動かす方法

Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Mascot Daemoon Help]→[In Depth] →[Running Daemon as a service]の項をご覧 ください。

# 5.2 タスク・データベース

#### (1) VistaDB

VistaDB エンジンは Mascot Daemon に組み込まれていますので、Mascot Daemon をインストールすれば何の設定も必要なく そのまま利用することができます。他の Database エンジンを使う特別な理由がないようでしたら VistaDB をお使いください。

#### ① Task database の作成

VistaDBのTask databaseファイル「taskdb.vd5」はMascot Daemon をインストールすると次のように自動的に作成されます。

C:\ProgramData\Matrix Science\Mascot Daemon\taskdb.vdb5

もし、このファイルが壊れて使えなくなった場合は、次のフォルダに空の taskdb. vd5 がありますので、それをコピー してお使いください。

C:\ProgramData\Matrix Science\Mascot Daemon\VistaDB

#### ② Access のデータのインポート

Access の Task database ファイルである「TaskDB. mdb」の中味を VistaDB の「taskdb. vd5」にインポートするためのユ ーティリティプログラム「C:¥Program Files¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥DataMigrationWizard. exe」を使って簡単 にデータの引っ越しをすることができます。具体的な操作手順は「2.4 Database エンジンと Task database ファイル」項 をご覧ください。

#### ③ Task database の編集

Task database のテーブル構造は変更することはで きませんが、テーブルの値は変更することができます。 たとえば、Mascot Server を新しい PC に移動した場 合、もし PC のホスト名が変われば Mascot Server の URL も変わりますので、Mascot Daemon の[Result file URL]行に表示されている検索結果 URL リンクはすべ てリンク切れになります。ユーティリティプログラム 「C:¥Program Files¥Matrix Science¥Mascot

Daemon¥DBASampleTool.exe」を使って Task database ファイルの[Mascot\_Daemon\_Results]テーブルの値に 含まれるホスト名を変更してください。

- Mascot Daemon を終了してください。また、タ スクトレイにある Mascot Daemon Engine も右 クリックして[Exit]してください。
- [taskdb.vd5] ファイルをバックアップしてく ださい。

3. 「C:¥Program Files¥Matrix Science¥Mascot

Daemon¥DBASampleTool.exe」をダブルクリックしてください。「VistaDB Table Editor」が起動します。

4. メニューバー[File]→[Open Database]から「C:¥ProgramData¥Matrix Science¥Mascot Daemon¥taskdb.vdb5」を開

#### 図 4-23 VistaDB Table Editor : ホスト名の確認

taskdb.vdb5 - VistaDB Table Editor				
Ele Database Table View	CLR Procs Tools Windo	w Help		
🇊 🍠 - 🚚 🏂 🏂 🎉 🕻 Exclusiv	e Read-Write Access 🔹 🛄	回 🔯 回 🖬 五 🛄 回 🛦 🖹 🕑 河 🌾 🕈 🕤		
⊟- 🗓 taskdo.vdbδ	Index Filter Scope Find			
-st Query Tables Based_Deemon_D8_ver	Index (None>	•		
Mascot_Daemon_Files     Mascot_Daemon_Files     Mascot_Daemon_Parameter     Mascot_Daemon_Besuits				
	4 4 1 /23 🕨	N 5		
E Columns		result_uri	submitted	returned ^
Constraints	_2.dta	http://do_terver/mascot/cgi/master_results.pl?Ne=/data/20160405/F102557.dat	2016/04/05 14:51:57	2016/04/05
- Direign Keys	_3.dta	http://old_server/mascot/cgi/master_results.pl?file=_/data/20160405/F102558.dat	2016/04/05 14:52:25	2016/04/05
Triggers	_4.tta	http://old_server/mascot/cgi/master_results.pl?Ne=_/data/20160405/F102559.dat	2016/04/05 14:52:52	2016/04/05
- Viewa	5.dta	http://old_server/mascot/cgi/master_results.pl?Ne=/data/20160405/F102560.dat	2016/04/05 14:53:20	2016/04/05
- California Relationships	7.tta	http://old_server/mascot/cgi/master_results.pl?file=./data/20160405/F102561.dat	2016/04/05 14:53:47	2016/04/05
Programmability	s_8.cta	http://old_server/mascot/cgi/master_results.pl?file=./data/20160405/F102562.dat	2016/04/05 14:54:14	2016/04/05 -
	1	т.		F.
	0			

#### 図 4-24 VistaDB Table Editor:ホスト名の変更

taskdb.vdb5 - VistaDB Table Editor		~
Ele Database Table View	CLR Procs Tools Window Help	
🕽 🍠 🔹 🚚 📑 🏂 🎉 🍃 Exclusi	ve Read-Write Access • 🔲 🔄 🔄 击 治 📋 🔄 👎 🕱 🗹 浸 🕨 🖉 🦉	
Assoct_Daemon_D8_ver	Gary Expression Lim 1 GA M = Wap Test for valiant ecoption roomth) UFBATE Mascoc_Daemon_Results SET result_url = REFLACE (result_url,'http://localhost','http://old_server');	*
Mascot_Daemon_Files Mascot_Daemon_Files Mascot_Daemon_Parameter Imascot_Daemon_Results Image:		-
Constraints     Foreign Keys     Triccers	Eventsh Query (FB) Clear Results (F7) New Query (FB) Qpen Query (FB) Seve Query (F10)	
mascot_Daemon_Tasks     wascot_Daemon_Tasks     wascot_Daemon_Tasks     marks     wascot_Daemon_Tasks     wascot_Daemon_T	lor Qoen SQL Query LIPDATE Mascot,Deamon,Results SET result,ur! = REFLACE/result,url/http://loca/test/http://old.gerver?; SQL Query comment	* H
× >	Bows selected 0 «	÷.

いてください。

- 5. 左側のイクスプローラーから[Table]→[Mascot\_Daemon\_Results]→[Data]の順に選択してください。
- 6. 右側ウィンドウを右の方にスクロールして[result\_url]のカラムを探し、そこに記述されているホスト名を確認し てください。
- 7. 左側イクスプローラーの[Query]を選択してください。
- 右側ウインドウの[Query Expression]入力欄に SQL クエリー実行文を入力してください。たとえば、「old\_server」 というホスト名を「new\_server」に変更する場合は次の実行文になります。

UPDATE Mascot\_Daemon\_Results SET result\_url =

REPLACE(result\_url, 'http://old\_server', 'http://new\_server');

- 9. [Execute Query]ボタンを押してください。
- 10 ホスト名が正しく変更されたことを確認してください。
- 11 メニューバー[File]→[Close Database]を選択してください。
- 12. 「VistaDB Table Editor」を終了してください。

#### (2) Access

Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Mascot Daemoon Help]→[Getting Started] →[Database Engines]→[Access]の 項をご覧ください。

#### (3) PostgreSQL

Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Mascot Daemoon Help]→[Getting Started] →[Database Engines]→[PostgreSQL] の項をご覧ください。

### (4) SQL Server

Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Mascot Daemoon Help]→[Getting Started] →[Database Engines]→[SQL Server] の項をご覧ください。

#### (5) mySQL

Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Mascot Daemoon Help]→[Getting Started] →[Database Engines]→[mySQL]の 項をご覧ください。

#### (1) Oracle

Mascot Daemon のメニューバー[Help]→[Mascot Daemoon Help]→[Getting Started] →[Database Engines]→[Oracle]の 項をご覧ください。

### 5.3 Stop Masse リスト

PMF 検索の際に、あらかじめ指定した質量が質量データの中に存 在する場合、その値を無視する「Stop Mass 機能」を利用すること ができます。「Stop Mass 機能」を有効にするためには、次のファイ ルをひとつ上の階層の Mascot Daemon フォルダにコピーしてくださ い。

#### C:\ProgramData\Matrix Science\Mascot Daemon\

#### stop\_masses¥Mascot\_Daemon\_PMF\_stop\_masses.txt

Stop Mass の指定方法は、モノアイソトピック m/z と平均 m/z を カンマ(,) で区切り、一行に記述します。図 5-5 に示す記述例を ご覧ください。

#### 図 5-5 Stop Mass リスト

all Mascot_Daemon_PMF_stop_masses.txt - メモ権	
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)	
This file contains a list of m/z values that will be automatically excluded from any peptide mass fingerprint searches submitted from Mascot Daemon.	
Values listed here are the prominent trypsin autolysis fragments listed in Parker, K.C. et al. (1998) Identification of yeast proteins from two-dimensional gels: working out spot cross-contamination. Electrophoresis, 19, 1920–1932.	5
Format is (strictly) pairs of monoisotopic and average m/z values separated by a comma. For example: 515.33,515.64	
510.33.510.04 1045.57,1048.02 2211.11.2212.43 2283.18,2284.64	
2293.17, 2300.04 2225.13, 2226.46 2238.14, 2240.48	

Mascot Daemon 2.5 取扱説明書 2016年4月 第1版 © 2016 マトリックスサイエンス株式会社



マトリックスサイエンス株式会社

電子メール : support-jp@matrixscience.com

電話: 03-5807-7895 ファクシミリ:03-5807-7896

住 所:〒101-0021 東京都千代田区外神田 6-10-12 KN ビル3階