

MASCOT Serverとは MASCOT Serverとは ・ 新たびま か 1-1 (P.1~) ・ 第量分析装置のデータをもとに、ペプチド配列あるいは タンパク質を同定するソフトウェア(検索エンジン) ・ 入力と参照先、出力 ・ 入力データ : 質量分析装置から得られたスペクトル情報 ・ 入力データ : 質量分析装置から得られたスペクトル情報 ・ 入力データ : 配列から計算された理論スペクトル (オプション: 過去の実測スペクトル) ・ 出力データ : 同定ペプチド・同定タンパク質の情報 ・ MASCOT Serverでできる事・まとめ - MASCOT Serverはウェブアプリケーション



MASCOT Serverでできる事・補足図

\rightarrow 1-2 (P.2 \sim)









Daemon 質量分析装置メーカーの

ソフトウェア経由

mgf,mzML,rawデータ

データ準備の必要なし

Mace Serve Mascot Server Mascot Server	変換済みファイルをWEB	ブラウザで検索
 ■ 検索方法 - 変換済みファイルをWEB ブラウザで検索 	Access Macces (Annuel) Protein identification software for mess spec. data	→ 4-2-2 (P.14~)
- Daemonでrawデータを 直接検索 - 質量分析装置メーカーの ソフトウェアから直接検索	C localhost/mascol/search_form_select_windows.html C Localhost/mascol/search_form_select_windows.html C MATRIX SCIENCE Science	
■ 対応フォーマット・ データ変換	Utome Access Mascol: Server Totalbase search help Contact Mome Access Mascol: Server Totalbase search help Contact Mascol: divabase search - Access Mascol: Server Mascol: divabase search - Access Mascol: Server Mascol: divabase search - Access Mascol: Server Mascol: divabase search - Access Mascol: Server Mascol: divabase search - Access Mascol: Server Mascol: divabase search - Access Mascol: Server	① ピークリストファイルを準備
■検索パラメーター ■結果画面	ACCESS MASCOT Server You can submit searches to this Mascot Server using the web brows parameters. For automated searches of batches of files, try tascot Mascot Daemon on a Windows PC can be found on the home page, searches from Mascot Distiller and many instrument data systems a selections.	② ブラウザを開きURLを指定して MASCOT Serverへアクセス
■ペプチド同定 ■ タンパク質同定	Peptide Mass Fingerprint The experimental data are a list of people mass values from the de section enzyme such as troppin. Teasementy	3 Home -> Access MASCOT Server
■ MIS 検索のオプション	Cressiliating like v Cressili	④「MS/MS Ions Search」の 「Perform Search」
■ 音理フログフム・ カスタマイズ	Perform search Example of results report Hore information modifications	 ⑤ 検索パラメータ並びに 入力データを指定
	Save your preferred default settings as a browser coolse. Tanget role (1) Settings Save your preferred default settings as a browser coolse. Tanget role (1) Settings Save your preferred default settings	<mark>⑥</mark> Start Search ボタンで検索開始
9	DeepLC model for retention times ind jts_uninod_fixed_mods v 6 Isan Search Reset Form	









13

14

入力データの準備:対応フォーマット・データ変換

→ 3 (P.7~)

MASCOT 検索を行う前に、装置のrawデータを判読可能で 必要な情報のみ抽出したデータに変換する必要があります。 MASCOT Server 自身ではrawデータを変換する事は できません。

抽出されている情報

対応する主なファイルフォーマット: mgf

Rawデータ変換プログラム



場合、RT情報を出力するプログラム(Mascot Distillerなど)でデータ処理する必要があります。









補足説明:検索パラメーター各項目について

No	項目名	説明	No	項目名	説明		項目名	説明
1	Your name	ユーザー名	10	Fixed modifications	修飾、対象のすべてのアミノ酸 について指定した内容に質量が 変更	19	Target FDR	同定基準となるFDR値 (q値)。 通常はDefalt値である1%
2	Email	電子メール。但しlocal版では メモとして使用する事も可能	11	Variable modifications	~~ 修飾、修飾がつくパターンと つかないパターンの両方を考慮	20	Machine	機械学習によるrefinementを 実施するかどうか (Percolator並びに
3	Search title	検索タイトル	12	Error tolerant	拡張2段階検索の実施			MS2Rescoreの実施)
4	Database	検索対象のデータベース	13	Peptide tol.±	ペプチドの実測値と理論値の 誤差範囲	21	DeepLC model	保持時間予測の使用、鍛えた データセット群(モデル)選択
5	Taxonomy	生物種絞り込み	14	#13C	13Cを含むペプチドの補正	22	MS2PIP model	MS2ピーク予測の使用、鍛え たデータセット群(モデル)の
6	Enzyme	タンパク質の切断パターン	15	MS/MS tol. \pm	フラグメントの実測値と理論値 の調美範囲			選択
		Enzyme設定について、切断			通常は使用されないピーク	23	Start Search	検索の開始
7	Allow up to	固所と認定された固所を 何度まで見逃す事を許容する か	15	Peptide charge	リストに電荷情報がない場合に 割り当てる電荷の情報	24	Reset Form	パラメータ設定を初期値に 戻す
8	Quantitation	タンパク質の定量計算	16	Data file	検索queryとなる入力データ			
9	Crosslinking	リンカー又は共有結合で結合 したペプチドの検索	17	Data format	入力データのフォーマット	[好ましいデフォルト設定	
20			18	Instrument	理論フラグメント作成を行う イ オンシリーズの定義セット	L	→ 山頭で武	





→ 5-4 (P.33~)

ほとんどの設定はConfiguration Editor (Home -> configuration Editor)で行います。各設定画面は 「<mark>13. MASCOT Serverのカスタマイズ(P.113~)</mark>」をご覧ください。



補足説明: Predefined Database について 1

SwissProt : AA

http://www.expasy.org/sprot/

Uniprot データベースの中の1つ、タンパク質配列を集めたデータベース。各エントリーに対して、 機能・ドメイン構造・修飾・バリアント・論文情報・他データベースへのリンク、など、精査された アノテーション情報が手動で付与されています。配列の冗長性はできるだけ無いように調整されていて、 2025年3月時点で約 **57万件**件のデータが登録。最初に選ぶデータベースとして最適です。

■ Uniprot proteomes : AA → MASCOTデータベースでは UP_N_B と表記 (Nは番号、Bは生物種) https://www.uniprot.org/

手動アノテーションされた上記 Uniprotに加え、自動かつ精査無しのデータベース**TrEMBL** の内容も併せた データベース。TrEMBLの方がSwissProtに比べ圧倒的にエントリー数が多く、2023年2月版で **252,633,200**件のデータが登録。SwissProtのみに比べ配列のカバー範囲が広く、SwissProtで マッチしなかった場合の次の選択肢に最適です。

■ NCBIprot (旧名称 NCBInr): AA

NCBI(National Center for Biotechnology Information)で公開されているタンパク質データベース「nr」。 「nr」とは「non-redundant」の略ですが、実際にはほぼ同じ配列のデータが数多く登録されており、 それが膨大なエントリー数の要因となっています。現在は使用をお勧めしていません (2024年2月で更新停止)。

補足説明: Predefined Database について 2

■ XXXXX_EST (Human_ESTなど): NA

ESTとはExpressed Sequence Tag の事で、cDNAライブラリの部分配列にあたります。 mRNAレベルでの塩基配列情報が含まれているデータベースで、タンパク質データベースでは 見つからないようなペプチド配列などが検出される事が期待されます。 一方でマッチしても次のステップに進みにくいため、目的をもって利用される事をお勧めします。

■ NIST_XXXX_YYYY (NIST_Human_HCD など) : SL

ピークリスト(過去に測定したペプチドのフラグメントピークの情報)データベースで、 NIST(National Institute of Standards and Technology)にて公開しているものです。

■ PRIDE_XXXXX (PRIDE_Human など) : SL

ピークリスト(過去に測定したペプチドのフラグメントピークの情報)データベースで、 data repository siteの**PRIDE**(Proteomics IDEntification database)にて公開しているものです。





■結果画面

表示例

[入力データ]	設定項目	設定内容		
CPTAC study6 Yeast +	Database	UP2311_S_cerevisiae (6,091) Sigma_UPS (50) Contaminants (247)		
Sigma_UPS	Enzyme	Trypsin/P		
query数:	Fixed Modification	Oxidation(M)		
8,675	Variable Modification	Carbamidomethyl (C)		
[同定数]	Peptide tol.±	20 ppm		
同定ペプチド数 3,437	Fragment mass tolerance \pm	0.6 Da		
同定タンパク質数	Missed cleavage	2		
863 (820グループ)	Instrument	Default		

 \rightarrow 7-1 (P.48 \sim)

[公開サーバー]

http://www.matrixscience.com/cgi/master_results_2.pl?file=../data/F981142.msr [ローカルサーバー]





Mascot Server	2.同定ペプチド数 → 7-2-9 (P.53~)
 検索方法 対応フォーマット・ データ変換 検索パラメーター 結果画面 検索query数 同定ペプチド数 同定ペプチド数 同定タンパク質(グループ)数 同定タンパク質の具体的な内容 タンパク質にアサインされている ペプチド スペクトルとペプチド理論値の マッチング 結果ファイルの出力 	 "Sensitivity and FDR"をクリックして展開すると、 同定タンパク質数、ペプチド数とFDRが表示される Target :通常データベース Decoy : Decoyデータベース(後述) Protein family members : 同定タンパク質数 Sequences : 同一ペプチドにマッチするスペクトルを 1つにまとめてカウント PSMs : 同一ペプチドにマッチするスペクトルを 1つにまとめないでカウント
 ペプチド同定 タンパク質同定 MIS 検索のオプション 管理プログラム・ カスタマイズ 29 	 ✓Sensitivity and FDR (reversed protein sequences) Target Decoy FDR 863 29 3.36% Sequences → above homology → 3437 34 0.99% Details about ML model performance are available in of the machine learning quality report. Decoy results are available in of the decoy report.
 Matter Market Market	3.同定タンパク質(グループ)数 → 7-2-10 (P.54~)
 結果画面 検索query数 同定ペブチド数 同定タンパク質(グループ)数 同定タンパク質の具体的な内容 タンパク質にアサインされている ペブチド スペクトルとペプチド理論値の マッチング 結果ファイルの出力 	Proteins (863) Report Builder Unassigned (4848) ⑤. permalink Protein families 1-10 (out of 820) 1 ○ Per page 1 2 3 4 5 6 82 Next Expand all Collapse all I · · · per page 1 2 3 4 5 6 82 Next Expand all Collapse all Clear V · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
 ■ タンパク質同定 ■ MIS 検索のオプション 	3 1 3::P07259 556 Multifunctional protein URA2 OS=Saccharomyces cerevisiae (s 13::P03965 135 Carbamoyl phosphate synthase arginine-specific large chain O

1 3::P00359 2 3::P00358 3 3::P00360

ſ

 508
 Glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase 3 OS=Saccharo...

 453
 Glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase 2 OS=Saccharo...

 161
 Glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase 1 OS=Saccharo...

- _____ ■ 管理プログラム・
 - マタマイズ

▶4

30



Summary画面:5.同定タンパク質とアサインペプチド①

d (0): 0 Ca	1 3:: 2 3:: 3 3::	P10592 P10591 P16474			557 H 554 H 147 Er	eat shock eat shock ndoplasm	protein protein ic reticu	n SSA2 (n SSA1 (ulum cha	DS=Saccharomyces cerevisiae (st. DS=Saccharomyces cerevisiae (st. Iperone BiP OS=Saccharomyces c				_	(
d (0): 0 Ca	1 3:: 2 3:: 3 3::	P10592 P10591 P16474			557 Hi 554 Hi 147 Er	eat shock eat shock ndoplasm	protein protein ic reticu	n SSA2 (n SSA1 (ulum cha)S=Saccharomyces cerevisiae (st.)S=Saccharomyces cerevisiae (st. Iperone BiP OS=Saccharomyces c					
3 9 8 °	2 3:: 3 3::	P10591 P16474			554 Hi 147 Er	eat shock ndoplasm	protein ic reticu	n SSA1 (ulum cha)S=Saccharomyces cerevisiae (st. Iperone BiP OS=Saccharomyces c	5				
d (0): 0 Ct	- 3 3::	P16474			147 Er	ndoplasm	ic reticu	ulum cha	perone BiP OS=Saccharomyces c	2				
s e s c d (0): 0 ⊂ C	⊳ .t													
d (0): 0 Cu	s It													
d (0): 0 Cu	⊧ It													
d (0): 0 Cu	۰ ا													
d (0): 0 Cu	ıt													
d (0): 0 Cu	Jt													
D40500	Score	Mass M	latches S	Sequence	s emP	AI				day (day)				
P10592	557	09599	41 (41)	20 (20) 4	.15 Hea	L SHOCK	protein	SSA2 US=Saccharomyces cerevis	siae (strai				
P10591	554	69786	41 (41)	28 (28) 4	.44 Hea	t shock	protein	SSA1 OS=Saccharomyces cerevis	siae (strai	同史々)	ッパク哲	の情報	
P16474	147	74479	10 (10)	9 (9) 0	.67 End	oplasmi	ic reticul	um chaperone BiP OS=Saccharon	myces cer				د
None											(詳しい	情報は征	夎述)	
								_						
ches (49 non-duplica	te, 10 dupli	cate)												
ndow														
	Mar (and b)	Mar (1)						1 0 1	n					
s Observed	Mr (expt)	Mr (Calc)	ppm 1	M Score	Expect	Ran	<u> </u>	1 2 3	p Newtown K					
360.7134	759.4122	755.4127	-0.54	0 23	0.004	1			K.NSTIPTK.K	<u></u>				
389.1940	116.3135	116.3138	-0.44	0 23	0.0046	1			K.MVAEAEK.F					
417.2091	832.4037	832.4039	-0.19	0 15	0.033	1			K.DLSTNQR.A					
426.2002	850.3857	850.3742	13.6	0 15	0.034	₿ 3	U		R.MVEEAEK.F + Oxidation (M)					
439.7519	877.4892	877.4909	-1.94	0 23	0.0055	1	U		K.VAYPITSK.L					
444.7366	887.4585	887.4600	-1.64	0 21	0.0083	3 1			R.STLDPVEK.V					
490.7442	979.4739	979.4757	-1.79	0 25	0.0034	1	U	,	R.ALSSOMSTR.I					
334,8570	1001.5490	1001.5505	-1.51	1 19	0.012			C	K. TKDNNLLGK. F					-
534, 7619	1067.5093	1067.5135	-3.88	0 26	0.0025				K ETAESYLGAK V		同定ペー	プチドの	桔報	
592 3264	1182 6382	1182 6397	-1.27	0 35	0 00031	b 1			K FELSCIPPAPE G					
592.3204	1106 6502	1102.0357	1.27	0 01	0.007	P I			K INTROTEDED C		(詳しい	情報は後	 逡 述)	
P P P C C C n	10592 10591 16474 16474 1000 1000 1000 1000 1000 1000 1000 1	10592 557 10591 554 16474 147 None	10592 557 69599 10591 554 69786 16474 147 74479 None	10592 557 69599 41 (41) 10591 554 69786 41 (41) 10591 554 69786 41 (41) 16474 147 74479 10 (10) Index Index Index Index thes (49 non-duplicate, 10 duplicate) dow dow Mr (expt) Mr (calc) ppm. 1 380.7134 759.4122 759.4127 -0.54 389.1940 776.3735 776.3738 -0.44 417.2091 832.4037 832.4039 -0.194 426.2002 850.3857 850.3742 13.6 439.7519 877.4892 877.4909 -1.94 444.7366 887.4585 887.4600 -1.64 490.7442 979.4739 979.4757 -1.79 334.8570 1007.5490 1067.5155 -3.88 592.3264 1182.6382 1182.6397 -1.27	10592 557 69599 41 (41) 26 (26 10591 554 69786 41 (41) 28 (28 16474 147 74479 10 (10) 9 (9 None Image: Construct of the state of the	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0 None Image: Constraint of the state	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 End INOR Image: Constraint of the state of	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasm None	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock protein 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock protein 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic reticul Interview Mr (expt) Mr (calc) ppm M score Expect Rank U 1 2 3 a80.7134 759.4122 759.4127 -0.54 0 23 0.0047 1	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock protein SSA2 OS-Saccharomyces cerevi 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock protein SSA1 OS-Saccharomyces cerevi 110591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock protein SSA1 OS-Saccharomyces cerevi 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS-Saccharom None	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock protein SSA2 OS-Saccharomyces cerevisiae (strai 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock protein SSA1 OS-Saccharomyces cerevisiae (strai 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS-Saccharomyces cerevisiae (strai None Image: Constraint of the strain of the st	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock protein SSA2 OS-Saccharomyces cerevisiae (strai 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock protein SSA1 OS-Saccharomyces cerevisiae (strai 116474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS-Saccharomyces cerevisiae (strai None Image: Construct and the strain of the	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock protein SSA2 OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock protein SSA1 OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 1069 00 0.67 Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 1075 0.000 1.0000 1.000 1.000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.0000 1.000 1.0000 1.00	10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock protein SSA2 OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock protein SSA1 OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS-Saccharomyces cerevisiae (strail 100me 100m

Summary画面:5.同定タンパク質とアサインペプチド②

→ 7-2-10 (P.56~)

			Score	Mass	Matches	Sequences	emPAI				
<	2.1	₫3::P10592	557	69599	41 (41)	26 (26)	4.15	Heat shock protein SSA2 OS=Saccharomyces cerevisiae (strai			
</!	2.2	≥3::P10591	554	69786	41 (41)	28 (28)	4.44	Heat shock protein SSA1 OS=Saccharomyces cerevisiae (strai			
•	2.3	₫3::P16474	147	74479	10 (10)	9 (9)	0.67	Endoplasmic reticulum chaperone BiP OS=Saccharomyces cer			
R	edisplay	/ All None	タンパク質のAcc	ession	(ID)部分を	クリックすると	と、より詳	<mark>詳細な</mark>			
			- 情報が表示される	Protei	n View 画	面となる(次ス	<u> スライド)</u>				
	表示	項目	説明								
	Scor	re	タンパク質のスコ 算出され、大きい はProtein Score	ア。タン ほど信う をもとl	パク質にフ 頼度の高い こ同定タン	^ア サインされ ヽペプチドが パク質を判!	ている/ 多いこ。 定する事	ペプチドのIon Scoreをもとに とを示しますが、現在のMASCOTで 事はしていません。			
	Mas	s	タンパク質の質量	。データ	7ベースに	登録されてい	いる配列	」情報から計算。			
	Mate	ches	タンパク質にアサ	インされ	1/zquery	数。()内の数	女字は、 そ	その中で同定基準を超えているもの。			
	Sequ	uences	queryのうち同じペプチド配列にマッチしている内容を1つにまとめてカウントしたもの。 ()についてはMatchesと同じく同定基準を超えているもののみをカウント。								
	emP	AI	Spectral Countingの1つであるemPAI。値が大きいほど量が多いという判断の基準となります。								

Drotoin View mm							
PIOLEIII VIEW 回回	Protein View: P10592						
$\sim 7.2 (P.50 \sim)$	Heat shock protein SSA2 OS=Saccharomyces cerevisiae (strain ATCC 204508 / S288c) OX=559292 GN=SSA2 PE=1 SV=3						
\rightarrow 7-3 (F.39 ²)	Detailed information about this protein hit is shown below. (help)						
	Database: UP2311_S_cerevisiae Score: 557 Monoisotopic mass (Mr,): 69599 Calculated p1: 4.95						
	Sequence similarity is available as an NCBI BLAST search of P10592 against nr.						
	Search parameters						
	MS data file: k1c_031308p_cptac_study6_68011.mgf Enzyme: Trypsin/9: cuts C-term side of KR. Fixed modifications: CarbamidomethyL(C) Variable modifications: Oxidation (M) Protein sequence coverage						
	Protein sequence coverage: 44% 全長に対するマッチペプチド						
	Matched peptides shown in <i>bold red</i> . 残基数の割合						
タンパク質について、マッチ したペプチドの情報などを 確認できます	1 NSRAVGIDLG TTYSCVAHFS NDRVDIIAND QCNRTTPSFV GFTDTERLIG 51 DAARNQAANN PANTVFDARE LIGENFYDDE VQCDRMCHEFF KLUDUCKPQ 101 IQVEFKGETK NFTPEQISSN VLGNRGETAE SYLGANNDA VVTVPAYTND 151 SQUATEDAG TIACINVLII INEPTAALA VGLDRKGEE HULIFDLGGG 201 TFUVSLISIE DGIFEVKATE, GUTHLGGEDF DURLYNHFYD EFKRKNRKDL 251 STNQRALRAL RTACERART LSSSAQTSVE IDSLFGIDF YTSITRAAFE 301 ELCALHEST LDVFENVLED AKLDRSQVDE IVLVGGSTKI FKVGKUYDY 351 FNCKEPMSEI NDERAVATGA AVQAALITCD ESSRTQDLLL LUVAPLSIGI 401 ETAGGVHTKL IFNNSTIFK KSEVFSTYAD NOGOVLIGVF EGERAKTKON 451 NLLGGFELG FPARMENDO ILVINGENG EINSAVEK GTGKSNKITI 551 SEAGDKLEGA DELEMVARAR KYFEEDERKS QRIASKNGLE SLAVSIKOTI 551 SEAGDKLEGA DELEMVARAR KYFEEDERKS QRIASKNGLE SLAVSIKOTI 551 SEAGDKLEGA DELEMVARAR KYFEEDERKS QRIASKNGLE SLAVSIKOTI 551 STNCKLEFF DIFENTIGE FGARPERE EFTVEUD Unformatted sequence string: <u>639 residues</u> (for pasting into other applications). Sort by © residue number O increasing mass Show © matched peptides only O predicted peptides also						
summary画面同様、マッチ したペプチドに関するより 詳しい情報が表示	Query Start - End Observed Mr(calc) ppm M Score Expect Rank U Peptide #5131 24 - 34 607.8089 1213.6033 1213.6051 -1.46 39 0.00013 1 R.VDIIANDCORR.T #5132 35 - 47 729.3178 1456.6633 -1.71 29 0.0013 1 U R.TPEFVGFDTDER.L #5529 55 - 69 796.3790 1590.7434 1590.7460 -1.64 32 0.00068 1 U K.NDAMMERNTYDEA.R #5552 55 - 69 531.2552 1590.7430 1606.7409 -1.33 0 100.013 1 U K.NDAMMERNTYDEA.R #5552 55 - 69 804.3763 1606.7409 -1.33 3 0.00019 1 U K.NDAMMERNTYDEA.R #5552 55 - 69 804.3763 1606.7409 -1.70 20 0.0033 2 U K.NDAMMERNTYDEA.R #5552 55 - 69 804.3763 1606.7409 -1.77 20 0.0033						

Mascel Server Mathematical Management Mascent Server	タン	パク	「暫に	アサ	イン	<u>+</u> +	いてい	NZ	5^	ペフ	パチド	
■ MASCOT Serverとは											7-2-10 (P.50	5~)
■ 検索方法 ■ 対応フォーマット・	▼59 peptia ☑ Auto-fit	<i>le matches</i> t to window	Query番号 論値のマッ	部分をク チングを	フリックす 確認でき	ると、ス る Pep	、ペクトル tideVie	レペプ w画面	ピチド iとな	理 る		,
データ変換	Ouerv 2364	Dupes	Observed 380.7134	Mr(expt) 759.4122	Mr(calc) 759.4127	ppm -0.54	M Score 0 23	Expect 0.0047	Rank	<u>U</u> 1 2	2 3 Peptide R.NSTIPTK.K	
■検索パラメーター	z 472 z 890		389.1940 417.2091	776.3735 832.4037	776.3738 832.4039	-0.44 -0.19	0 23 0 15	0.0046 0.033	1		K.MVAEAEK.F K.DLSTNQR.A	
■結果画面 - 検索query数	⊠1012 ⊠1238		426.2002 439.7519	850.3857 877.4892	850.3742 877.4909	13.6 -1.94	0 15 0 23	0.034	▶3 ▶1	บ บ	R.MVEEAEK.F + Oxidation (M) K.VAYPITSK.L	
- 同定タンパク質(グループ)数 - 同定タンパク質(グループ)数 - 同定タンパク質の具体的な内容	項目名	説明					項目名	説明				
 タンバク質にアサインされている ペプチド スペクトルとペプチド理論値の 	Query	Query番 ドの質量	号。MASCOTで に換算した際小	は入力デー さい順に番 ^袋	タについて、 号が割り振ら	ペプチ れます。	Score	Masco とのマ	ot Ion ッチン:	scoreで グ度合し	、実験値のMS2ピークと いを表します。	:理論値
マッチング - 結果ファイルの出力	Dupes	同じペプ したquer	チド配列でかつ yは、スコアが最	修飾や電荷も も高いものの	5同じ結果に のみ表示され	マッチ いそれ	Expect	同定基 デフォ	準値と ルト設	Scoreた 定の場合	から計算された期待値。 <mark>30.05以下なら同定</mark> 。	
■ペプチド同定	•	以外はしられてい	upes懶に恰納。 るかを表します。	剱子はquer 。	yかいく うまる	20)	Rank	データベース中の候補ペプチドとマッチングを行際、表示されているペプチド配列とのマッチング				5行った ノグが
■ タンパク質同定	Observed	実験値側	のペプチドの m	n∕z₀				全体の	甲での	何位でる	あったか。	
	Mr(expt)	m/zと電	荷から計算され	た、実験値側	则のペプチドの	の質量。	U	ロマークわてい	りがつ ないひ	いている nique ノ	5場合、他のエントリーと ペプチドである事を意味	共有さ します。
■ MIS 検索のオブション	Mr(calc)	配列から	計算された、理論	命値側のペン	プチドの質量。	,		数字は	ファミ	リーに属	するタンパク質と連動し	て
■管理プログラム・	Delta	Mr(expt)) – Mr(calc)。				数字	います アサイ:	。■印/ ンされ ⁻	があるタ ているこ	ンパク質に該当ペプチト ことを示します。	゛が
	М	Missed of	cleavageが実際	に適用され	た数。		Peptide	ヒットし なども	ったぺつ 併せて	プチド配着 表示。	列。修飾や前後のアミノ	睃残基
35												









8.結果のファイル出力 ② R	eport Bu	lilder → 7-2-11 (P.57~)
同定タンパク質ベースのファイル出力 Proteins (863) Report Builder Unassigned (4848) Protein families 1–10 (out of 820)	「Columns」 「Filters」 などといった機能	:表示する項目を調整する :表示するタンパク質に対して、スコアや アサインペプチド数などで絞り込み条件を 与える 能を使用する事も出来ます。
Report Builder タブをクリックすると、 表示が下図のように切り替わります		Proteins (86.3) Report Builder Unassigned. (4848) Protein family members (586 proteins) Columns: Standard (12 out of 16) Arrangement: Standard (doubly Cloid Make default Enabled Enabled Protein family members Protein family membe
Proteins (863) Report Builder Unassigned (4848) Protein family members (863 proteins) Columns: standard (12 out of 16) Filters: (none) Protein family members (863 proteins) Framily M 10 B Accession Score Mass Matches Match(sia) Sequences Score Tamily M 10 B Accession Score Mass Matches Match(sia) Sequences Score Tamily M 10 P311.5_cerevisiae Carevisiae Carevisiae <thcarevisiae< th=""> Carevisiae C</thcarevisiae<>	Scientiality addisity cmPA1 Description 34 13.67 Pyruvate kinase 1 05-Sac 26 4.15 Heat shock protein SSA1 C 9 0.67 Endoplasmic reticulum cha 9 0.67 Endoplasmic reticulum cha 11 0.45 Carbarroyd phosphate synt 12 12.15 Gyreenidelyvde 3-phospha 18 9.33 Gyreenidelyvde 3-phospha 10 2.23 Gyreenidelyvde 3-phospha	Account Account Account Sequences coverage Num of significant sequences pi Account Account Participation Account Verticers: "Num. of significant sequences" >= 2 Num. of significant sequences > 2 Remove Account
リストが作成され、表示内容をCSVファイルで出 事ができます(「 <mark>Export as CSV</mark> 」ボタン)。	力する	Update Export as CSV rEamily M DB Accession Score Mass Matches Match(sig) S 1 1 UP2311_S_cerevisiae #3::P00549 652 54009 54 54 2 1 UP2311_S_cerevisiae #3::P10592 557 69599 41 41

年日両両, キレめ1	→ 3.同定タンパク質(グループ)数	結果画面下部
和木凹凹・みとの1	Proteins (863) Report Builder Unassigned (4848)	§.permalink
	Protein families 1-10 (out of 820)	
結果回回上部 In Transver MASCUT Search Results	Accession v contains v → 4.同定タンパク	7質の具体的な内容
User : matrix	1 3::P00549 652 Pyruvate kit	ase 1 OS=Saccharomyces cerevisiae (strain ATCC
E-mail : support@matrixscience.com Search tille : Vsaet xeample (CPTAC study 6) MS data file : klc_031308p_cptac_study6_68011.mgf	2 1 3::P10592 557 Heat shock 2 3::P10591 554 Heat shock 3 3::P16474 147 Endoplasmi	oroteln SSA2 OS=Saccharomyces cerevisiae (stral orotein SSA1 OS=Saccharomyces cerevisiae (stral reticulum chaperone BiP OS=Saccharomyces cer
Databases 1:1: contaminants 201001/29 (247 sequences; 128,130 residues) 2: Sigma_Units 202040812 (50 sequences; 11,683 residues) 3: UP2311_S_cerevisiae 20240811 (6,091 sequences; 2,950,884 residues)	² ² ² ² → 5.タンパク	質にアサイン
Timestamp : 12 Aug 2024 at 11:09:31 GMT	*3 1 3::P07259 2 3::P03965 されている	ペプチド [展開]
	[*] [*] [*] [*] → 6.スペクトJ	レとペプチド
Type of search : MS/MS Ion Search Target FDR : 1% →8. 結果 ノア1ルの出力 (1)	1 3::P00359 2 3::P00359 2 3::P00356 理論値のマ	ッチング
Enzyme : :rypsin/P Fixed modifications : :d'Carbonidomethyl (C) Variable modifications ::d'Oxidation (M)		にリンクをクリック]
Mass values : Monoisotopic Protein mass : Unrestricted Peptide mass tolerance : ± 20 ppm	- 3::P00549 652 Provate kinase 1.0	S=Saccharomyces cere
Fragment mass tolerance : ± 0.6 Da Max missed cleavages : 2 Instrument type : Default	▼2 1 3::P10592 557 Heat shock protein 2 2 2 2 551 Heat shock protein 2 3 2::P10591 551	SA2 05-Saccharomyce 結果画面下部:
Number of queries :8,675 → 1. query 数	3 3:P16474 147 Endoplasmic reticul	m chaperone BiP 05-s rank 业直肢用发
Modification statistics for all protein families Legend	° 9 9 8 8	
Protein Family Summary (results refined with machine learning)	Threshold (0): 0 Cut	ミタンパク質の情報
Significance threshold p 0.01247 Max. number of families AUTO #[help] Target FDR (overrides sig. threshold) 1% FDR type Sequence v	Score Mass Matches Sequences emPAI ☑ 2.1 ≤3::P10592 557 69599 41 (41) 26 (26) 4.15 Heat shock p	otein SSA2 OS=Saccharomyces cerevisiae (strui
Display non-sig. matches Min. number of sig. unique sequences 1 V Denforgrams cut at 0	Z 2.2 ±3::P10591 554 69786 41 (41) 28 (28) 4.44 Heat shock p Z 2.3 ±3::P16474 147 74479 10 (10) 9 (9) 0.67 Endoplasmic	rotein SSA1 OS=Saccharomyces cerevisiae (st <mark>r</mark> il reticulum chaperone BiP OS=Saccharomyces c r
Prefere to doubling machine learning (Percolator) #[help]	Redisplay AII None	
DeepLC model for retention times #[help] full_hc_unmod_fixed_mods MS2PIP model for spectral similarity #[help] CID v	Auto-fit to window	同定ペプチドの情報
	Query <u>Dupes</u> Observed Mr(expt) Mr(calc) ppm M Score Expect Rank U J #366 380.7134 759.4122 759.4127 -0.540 23 0.0047 1	2 3 Peptide R.NSTIPIK.K
Target Decoy FDR	array 107.120 107.130 107.130 107.43 2.3 0.030 1 ar8590 417.2091 832.4037 832.4039 -0.19 15 0.033 1 ar81012 426.2002 850.3857 850.3742 13.6 0 15 0.033 1	K.DLSTNQR.A R.MVEEAEK.F
Destein family members 962 20 2.269 Sequences v) above homology v 3437 34 0.99%	1 238 439.7519 877.4892 877.4909 -1.94 0 23 0.0055 ↓ U	+ Oxidation (M) K.VAYPITSK.L R.STLDPVEK.V
Details about ML model performance are available in ethe machine learning quality report.	d d d d 2222 490.7442 979.4739 979.4757 -1.779 0 25 0.0034 ▶1 U d 22422 334.8570 1001.5490 1001.5505 -1.51 1 19 0.012 ▶1	R.ALSSOMSTR.I K.TKDNNLLCK.F
→ 7. 機械学習の品質レポート	±3052 534.7619 1067.5093 1067.5135 -3.88 0 26 0.0027 1 ±4072 6 592.3264 1182.6382 1182.6397 -1.27 35 0.00031 1	K. ETAESYLGAK. V K. FELSGIPPAPR. G
	2 ⁄4199 599.3334 1196.6523 1196.6554 -2.58 0 21 0.0077 ▶1 U	K.PELTGIPPAPR.G













refinement、再スコアリング

Individual feature performance

The individual feature performance plot shows the 'strength' of individual features. For each feature, q-values are calculated as if that feature was individually used for scoring PSMs without any other information. Then, the area under curve (AUC) is calculated for the empirical cumulative distribution function (ECDF) of the q-values. The higher the AUC, the better the feature is at discriminating between target and decoy PSMs without any other information.





49

ペプチドのスコア、同定基準、FDR(またはq-value)

Normal, Decoy 検索結果(ペプチドと期待値)を、結果の良い順に混ぜて並べる

Sequence	Score	N or D	N累計	D累計	FDR[D/N] (%)
NAGVEGSLIVEK	52	Ν	1	0	0
VGEVIVTK	51	Ν	2	0	0
TLNDELEIIEGMK	34	Ν	118	0	0
MATRIK	33	D	118	1	0.847
ISSIQSIVPALEIANAHR	31	Ν	119	1	0.840
VGLQVVAVK	19	Ν	512	5	0.977
TAKAESK	18	D	512	6	1.171
LSDGVAVLK	17	Ν	513	6	1.170
SCAFFLDK	16	D	513	7	1.365

FDRが1%を超える直前を 同定基準値とする

DeepLC

・ペプチド配列から保持時間を予測

- ・利用には、「MGFファイル内の各query情報内に、保持時間情報が書き込まれている事」が必要 →現状では MASCOT Distiller を使用しないと条件を満たせない
- ・保持時間情報はスペクトル情報と大きく異なるため、スペクトル情報とうまく組み合わされば、 「正解/不正解」識別に大変役立つ(各種資料では頻繁に「スペクトルとは次元が異なる」と表現)
- ・「トレーニングデータセットが何であったか?」に 基づいた選択肢
- ・推奨デフォルト値は「full_hc_PXD005573_mcp」



・モデル名の中に、利用に関する様々なヒントが 含まれている。詳細:以下URL http://localhost/mascot/help/ms2rescore_help.html#DEEPLCMODELS

Bouwmeester et al.: DeepLC can predict retention times for peptides that carry as-yet unseen modifications. Nature Methods 18, 1363–1369 (2021).

MS²PIP

・ペプチド配列から <mark>MS2スペクトル</mark> を予測							
・MASCOTではスコアに反映しない、「ピーク強度の一致度」、「誤差」も重要な要素							
・「トレーニングデータセットが何であったか?」に基づいた選択肢							
・以下の要素がモデルの名称に含まれている - Fragmentation (CID,HCD) - MS2 analyzer (linear ion trap,Orbitrap, - cutting pattern (tryptic.non-cutting)	るので、最適なモデルを選択する。 QTOF) ²⁰						
- label (TMT,iTRAQ)							
・詳細:以トURL	0 0.2 0.4 0.6 0.8 Pearson correlation						
http://localhost/mascot/help/ms2rescore	help.html#MS2PIPMODELS						
 Declercq et al.: Updated MS²PIP web server supports cutting- Gabriels et al.: Updated MS²PIP web server delivers fast and instruments and labeling techniques. Nucleic Acids Research (Degroeve et al.: MS²PIP prediction server: compute and visua Acids Research, 43(W1), W326–W330. (2015) Degroeve, S., & Martens, L.: MS²PIP: a tool for MS/MS peak in 	edge proteomics applications. Nucleic Acids Research (2023) accurate MS2 peak intensity prediction for multiple fragmentation methods, 2019) alize MS2 peak intensity predictions for CID and HCD fragmentation. Nucleic Intensity prediction. Bioinformatics 29(24), 3199–203. (2013)						
参考:結果画面表示の切	り替え						
Protein Family Summary (results refined wit	h machine learning)						
Significance threshold p< Target FDR (overrides sig. threshold) Display non-sig. matches	0.01247 Max. number of families AUTO ☑[help] 1% FDR type Sequence ∨ Min. number of sig. unique sequences 1 ∨ Dendrograms cut at 0						
Preferred taxonomyRefine results using machine learning (Percolator) @[help]- Use features calculated by Mascot- DeepLC model for retention times- MS2PIP model for spectral similarity@[help]	All entries						
	Apply						

参考:結果画面表示の切り替え

表示項目	説明	表示項目	説明		
Significance threshold p <	有意性の閾値 p の設定で、デフォルトは 0.05。現バージョンでは実質、「ペプチドの期 待値の閾値」と同義。"Target FDR"の値を 設定するとそちらが優先され、FDRの設定を	Dendrograms cut at	ファミリータンパク質の類似度を表している デンドログラムについて、スコアのカットオフ を指定。デフォルトではカットオフを実行しな い「0」が設定されている。		
	滴にすように 値の自動的に調整・変更。 結果として表示するタンパク質(ファミリー)	Preferred taxonomy	優先して表示させる生物種名を指定した 生物種に切り替え		
Max.number of families	数の上限値。デフォルトはAuto、すなわち同 定基準を超えるタンパク質をすべて表示。	Refine results using machine learning	refinement実施の有無。実施する事で同定 ペプチド数が増える。 Percolatorのcore features を計算・利用す るかどうか。現バージョンではrefinementを 実施した場合必ずこの項目にチェックが入る		
Target FDR (overrides sig.threshold)	FDR設定值。	(Percolator)			
	FDRのカウント対象。PSMはqueryを数え	Use features calculated by Mascot			
FDR type	上けるのに対し、Sequenceは同じペプチド 配列にマッチするqueryを1つにまとめて カウント。	Decarl C model for	ペプチド配列データから保持時間予測の計 算の実施と、その結果をPercolatorで利用す		
Display non-sig. matches	同定基準以下のペプチドすべてを結果に 表示。	retention times	るかとうか。選択版は計算時に使うハリメー ターセットで、どのようなトレーニングデータ セットを使ったかに基づいた名称がつけられ ている。		
Min. number of sig. unique sequences	同定タンパク質の基準として、アサインされ るユニークなペプチドをいくつとするかと いう設定(MASCOTのデフォルトは1)。 設定値を2以上にする事で同定タンパク質の リストの信頼性を引き上げる事ができる反面、 同定タンパク質数は大幅に減少。	MS2PIP model for spectral similarity	ペプチド配列データからMS2スペクトル予測 の計算の実施と、その結果をPercolatorに引き渡すかどうか。選択肢は計算時に使うパラ メーターセットで、どのようなトレーニング データセットを使ったかに基づいた名称がつ けられている。		





補足説明:7夕	ンパク質の	ペプチ	ドシェア状況	兄と結果画面 1 <mark>→ 9-6 (P.81~)</mark>
proteinA	.:p5 p4	р3	*p5,	p4 , p3 , p2 , p1 はマッチしたペプチド
proteinE	8:p5 p4	р3	prote	einAO same-set
proteinC	2: p5 p4	n3	}- prot	teinAO sub-set
proteinE	2 : p5	ро	sub 下部 表示	-set, same-set のタンハク質は グループと認識され一覧に されない
proteinF	•	р3	p1	
protein	: p4		p2	A,F,G のタンパク質は「Family Protein」としてまとめられる

補足説明: 7タンパク質のペプチドシェア状況と結果画面 2 → 9-6 (P.81~)



補足説明:7タンパク質のペプチドシェア状況と結果画面 3 → 9-6 (P.82~)

		Score	Mass	Matches Se	equences				
🗹 1.1	✓ProteinA	249	9096	ユニークへ	ペプチドを持つ	Protein A,F,G が			
	▼1 sameset of ProteinA ProteinB	249	9855	表示					
☑ 1.2	ďProteinF	148	12054	2 (2)	2 (2) desc6				
1.3	₽ProteinG	136	11389	2 (2)	2 (2) desc7				
Redispla	y All None			Protein BはProtein A の「sameset」として初期段階で表示されないが、クリックし展開					
				すると表示	7				

▼3 subsets and intersections (3 sub	set proteins i	n total)			
	Score	Mass	Subse	et of	
∠ ProteinC	177	9288	1.1	desc3	
∠ ProteinD	146	9947	1.1	desc4	
∠ ProteinE	116	11608	1.1	desc5	
				Protein C,D,E はPro 1.1と表現)の「subse 表示されないが、クリッ	otein A(上記図では t」として初期段階で クし展開すると表示





Mascd Server Malander Data bank with Mascot Server	補助検索:スペクトルライ	ブラリ検索
 MASCOT Serverとは 検索方法 対応フォーマット・ データ変換 検索パラメーター 検索パラメーター 結果画面 同定タンパク質・ 同定ペプチド MIS 検索のオプション ピークリストライブラリ 定量解析 クロスリンクペプチド検索 Error Tolerant Search (拡張2段階検索) 管理プログラム・ カスタマイズ 	 → 10-1 (P.83~) スペクトルライブラリ検索の検索対象: ■ スペクトルライブラリ検索の検索対象: ● 実測スペクトル (ピークリスト) スペクトルライブラリは以下2種類が可能 ● 自身のMASCOT Serverで行った検索結果のうち、 フィルターリング条件に適合したqueryのピークリスト ● 各種サイトで公開されているピークリストデータベース (PRIDE, NIST) ■ 配列データベース検索と組み合わせて 利用する事が可能 ■ 検索エンジン : MSPepSearch [NIST] 	Name: SIPAYLAETLYYAMK/3 MW: 2021.0820791015626 Comment: Spec=Consensus Mods=2/0,^,iTRAQ4plex Parent=674.702 Nreps=3 Naa=15 MaxRatio=1.000 DeltaMass=0.00 ClusterId=5258eb56-ee94-44f7-8 Protein=sp[ANXA5_HUMAN] Num peaks: 29 114.111 757.8 115.108 810.71 116.111 850.41 117.115 818.65 136.076 1030.9 204.146 73.61 213.088 32.62 232.142 282.79 291.216 257.88 299.142 91.74 317.232 79.55 327.174 28.27 332.161 61.64 345.226 312.34 346.22 72.4 422.257 104.24 422.257 104.24 423.257 104.24 424.257 104.24 429.089 26.44 444.417 1426.25 485.322 22.68 493.239 53.71 512.318 6.05 513.317 320.91 514.32 83.07 648.386 66.0 649.386 24.8 656.352 1.97 676.381 122.41 677.383 36.02



→ 10-2 (P.87~)

	10CO.4D. 1.		Score	Mass	Matches	Sequ	ences (emPAI	114	/113 11	5/113 11	6/113 1	17/113 1	18/113 1	19/113	121/113	Complement CA B OC
1	Ø2::CO46_H		164342	217600	3818 (3818)	103	(103)	46.75	1.	033	1.070	1.045	1.016	1.155	1.051	1.055	Complement C4-B OS=Homo sapiens
2	Ø2::CO4A_H	UMAN	103050	21/680	3814 (3814)	102	(102)	44.5/	1.	036	1.0/3	1.044	1.019	1.159	1.052	1.060	Complement C4-A OS=Homo sapiens
display	All None																
26 pep	tide matches (363 non-du	plicate, 356	3 duplicate)													
uto-fit	to window																
Query	Dupes	Observed	Mr (expt)) Mr(calc)	ppm M	Score	Expect	Rank	U	114/113	115/113	116/113	117/113	118/113	119/113	121/11	3 1 2 Peptide
52618		517.3046	1032.594	6 1032.5983	3 -3.52 0	22	0.026	▶1		0.909	1.155	0.945	-0.096	1.064	1.202	0.791	K. GQAGLQR . A
58592	▶1	533.2921	1064.569	6 1064.5703	3 -0.64 0	30	0.0079	1		1.084	1.260	1.285	1.150	1.313	1.346	1.099	K.AAANQMR.N
58697		533.7829	1065.551	2 1065.5543	3 -2.90 0	24	0.012	1		0.973	1.420	0.857	0.963	0.734	0.820	0.850	K.AAANQMR.N + Deami
52050	14	548.3186	1094.622	6 1094.6238	-1.08 0	29	0.0047	1		0.864	1.101	0.889	0.795	1.075	0.821	0.879	K.LTSLSDR.Y
10990	▶4	598.2969	1194.579	2 1194.5792	2 0.033 0	17	0.024	▶1		0.959	1.120	0.871	0.952	1.154	0.969	0.880	R.VQQPDCR.E
79303		419.2471	1254.719	5 1254.7140	4.38 0	29	0.015	▶1		1.006	0.954	1.220	0.793	1.234	0.837	0.89	R.EFHLHLR.L
81345	▶ 6	634.8576	1267.700	6 1267.7014	-0.57 0	32	0.0014	▶1		1.171	1.311	1.458	0.999	1.210	0.912	0.953	R.GQIVFMNR.E
31352	12	423.5749	1267.702	9 1267.7014	1.18 0	35	0.00061	▶1		0.934	1.581	1.814	0.721	0.943	0.883	0.946	R.GQIVFMNR.E
1457	27	635.3070	1268.599	4 1268.5989	9 0.46 0	24	0.023	▶1		1.030	1.090	1.039	1.069	1.396	1.159	1.218	K.FACYYPR.V
1483	24	423.8742	1268.600	8 1268.5989	9 1.51 0	36	0.0022	▶1		1.015	0.846	1.267	0.816	1.345	1.500	0.890	K.FACYYPR.V
2476		639.2738	1276.5330	0 1276.5339	9 -0.68 0	25	0.0043	▶1		0.856	1.140	1.163	0.848	1.046	0.802	1.121	R.CCQDGVTR.L
2812		427.2265	1278.657	7 1278.6722	2 -11.4 0	33	0.0083	▶1		0.902	1.574	2.265	1.076	0.999	-0.023	0.921	K.VVEEQESR.V
2947		640.3463	1278.678	0 1278.6722	2 4.55 0	27	0.012	▶1		0.477	1.157	0.977	0.581	-0.042	0.379	0.624	K.VVEEQESR.V
84000	▶1	428.9072	1283.699	8 1283.6963	3 2.71 0	37	0.003	▶1		0.835	1.173	1.298	0.742	1.371	0.851	0.700	R.GQIVFMNR.E + oxid
84556	19	429.8967	1286.668	3 1286.6674	4 0.64 0	51	3.8e-05	▶1		0.462	1.002	0.608	0.683	0.581	0.628	0.434	R.QGSFQGGFR.S
84560	▶7	644.3420	1286.669	4 1286.6674	1.55 0	27	0.0036	▶1		0.962	0.973	1.054	1.009	1.089	0.941	1.073	R.QGSFQGGFR.S
84743		430.2239	1287.649	9 1287.6515	5 -1.23 0	16	0.03	▶1		1.088	0.862	1.202	0.761	1.443	0.960	0.979	R.QGSFQGGFR.S + Dea
84744		430.2240	1287.650	2 1287.6515	5 -1.00 0	26	0.0037	▶1		0.752	0.994	0.973	0.686	1.281	0.681	0.845	R.QGSFQGGFR.S + Dea
									_								
_°.	ーク強	度を	使っフ	た各種	[定量]	解析	fiにす	拡	0								
	+»ı _	<u> </u>	N 11	4 X + ۱ -	D	4					144.64	/++ 🗆		1 55 -	T4K.+	<u>\</u>	
Ξ.	/こし、 *	ナーノ	ヽー隼	当出と	D1st1l	ler	[+定量	計モ	ジニ	ュール	機能	1 开 月	日で言	†昇□	川能な	います。	田か異なる
		•	· ·	5_, _							"sensel	12.1.2.			5,50 4		
							~			/. <u></u>							
	rver É	単独て	いまけぼう	口能	• M	S2	のピ	-7	7류	卸度	を使‐	ったり	解析。	iTR	AO	TΜ	Γなど
Se			- 11 -	- J DO	• • • • •	.04			J.			-, -,	111 T	1110	· • Q,	1 1/1	
se																	
se																	







ame = <u>IPI human</u> Family = C:/inetpub/mascot/sequence/IPI human/current/IPI human * fasta = IPI human 3.87.fasta Pathmame = C:/inetpub/mascot/sequence/IPI human/current/IPI human 3.87.fasta = In use 1 profile for the second second

me = Mouse Subsection Family = C:/inetpub/mascot/sequence/Mouse/current/Mouse * fasta = An Use Subsection fasta = An Use * fasta = An Use *

Here = (1) [si] Flenner = Kallingi Flenner = Kallingi Flenner = Kallingi Status = In use to 12 18:505-58 searches = 0 Status = In use to 12 18:505-58 searches = 0

Filename = [P].nument.sor.nov. Stats = In UP 12 18:50:56 #searches = 0 Stats Time = Med Feb 12 18:50:56 #searches = 0 Mem.mapped = TS Request to mem.map *TS Request unmap = NO Mem locked = NO Number of threads = -1 Current = YES Type = Amino acid

ritename – #00352_0220025.13513 Faitmane – () The topus/hastory Sequence/Mouse/c Status = In use <u>Statistics Recompress file</u> State Time = Wed Feb 12 18:50:56 # 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

補足説明: 各データベースの表示内容

 Name
 = SwissProt
 Family
 = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt_*.fasta

 Filename
 = SwissProt_2021_02.fasta
 Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt_2021_02.fasta

 Status
 = In use
 Statistics
 Unidentified taxonomy

 State Time = Fri Aug
 13 02:30:49 # searches = 0
 Mem mapped = YES

 Mem mapped = YES
 Request to mem map = YES
 Request unmap = NO

 Number of threads = -1
 Current = YES
 Type = Amino acid

項目名	説明	項目名	説明				
Name	データベースの名称	Request to mem map	MASCOT Serverの設定でデータベースを メモリにマッピングする事を試みる設定で あるか。				
Family	MASCOT Server側で管理している、ファイルの パス並びにファイルの名称ルールの情報。	Request	MASCOTのプログラムがメモリ上への マッピングを解除する命令を下した状態で				
Filename	現在認識されているfastaファイルの名称。	unmap	あるか。				
	データベースのバージョンもわかります。	Mem locked	データベースのメモリ上へのマッピングを固定				
Pathname	現在認識されているfastaとファイルが置かれて		(lock)する状態になっているかとっか。				
	(10) (A.	Number of	検索に使用可能なコア数の設定。通常は、最適				
Status	データベースの現在の状況。	thresholds	設定を目剿週用9 る設定でのる事を衣91-1]こ 表示。				
State Time	現在示されている Status を認識した日時。	Current	現在データベース関連のファイルが正しく認識 されているか。				
Mem mapped	データベースがメモリ上にマップされた状態で あるか。	Туре	配列の種類が Amino AcidかNucleic Acidか。				



