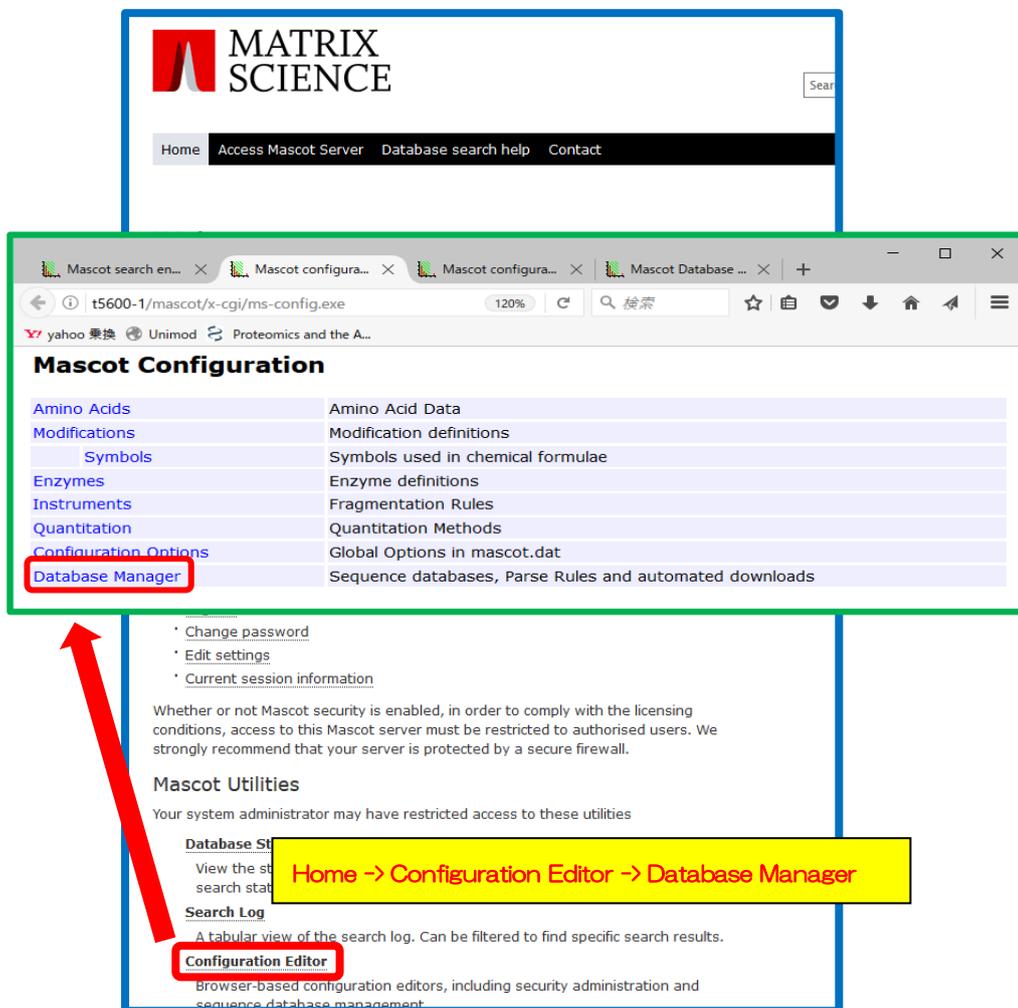


# 配列データベース管理マニュアル

## ● はじめに (Database manager ページへのアクセス方法)

本資料は、配列データベース・ライブラリの設定を行う管理画面「Dataabase Manager」に関する資料です。「Database Manager」ではデータベースファイルの追加・設定変更、データベース自動更新やそれに伴うネットワーク接続について設定できます。

Database manager のページを開くには、WebブラウザでHome → Configuration Editor → **Database Manager**とリンクをたどります。



## ● 本資料で取り扱う内容と掲載ページ

□ Database Manager 初期設定	P.4
▼ 新規インストール後の初期設定画面	P.4
□ Database Manager	P.6
▼ Databases	
- 使用しているデータベース一覧、データベース更新の実行	P.8
- 自動更新(更新タイマー)の設定	P.11
▼ Parse rules	
- 配列データベースのAccession, Description抜き出しルール設定	P.12
▼ Scheduled updates	
- 設定済みの自動更新一覧、自動更新taskのログ確認	P.12
▼ Running tasks	
- 稼働中の更新taskの状況確認	P.13
▼ Settings	P.14
- MASCOT Server のインターネットへの接続の許可	P.16
- MASCOT Server の 外部公開プログラムへの接続許可	P.16
- プロキシサーバー設定	P.17
- Sequenceフォルダのデフォルト設定位置	P.18
- ライブラリの参照配列データベースの設定	P.18

<b>□ Fasta</b>	<b>P.19</b>
▼ <b>Enable predefined definition</b>	
- データベース新設・MASCOTで準備している定義を利用	P.20
▼ <b>Synchronise custom definitions</b>	
- 既存データベースとMASCOT で予め準備された設定の紐付け確認	P.23
▼ <b>Create new</b>	
データベース新設、“Enable predefined definition”以外の方法	P.24
- template: テンプレート使用	P.25
- Copy of : 既存の設定をコピー	P.33
- Custom :最初から自身で設定	P.41
<b>□ Library</b>	<b>P.52</b>
▼ <b>Enable predefined definition</b>	
データベース新設・MASCOTで準備している定義を利用	P.53
▼ <b>Synchronise custom definitions</b>	
設定データベースとMASCOT で予め準備された設定の紐付け確認	P.56
▼ <b>Create new</b>	
データベース新設、“Enable predefined definition”以外の方法	P.57
- template : テンプレートを使用	P.58
- copy :既存の設定をコピー	P.64
- custom: 最初から自身で設定	P.71
-Create from search results : fasta検索結果をライブラリ化	P.83
▼ <b>Spectral library filters</b>	
作成済みのライブラリフィルター一覧、ライブラリ作成の再実行	P.89

## □ Database Manager 初期設定

### ▼ 新規インストール後の初期設定画面

新規インストール/バージョンアップ後最初に**Database Manager**を開くと、下図のように初期設定画面が現れます。使用可能な状態にあるデータベースについて、「Predefined database definition」（後述、fasta→P. 19、library→ P.52）と照らし合わせてどの項目にマッチするかを確認し項目を選択する画面です。通常は**デフォルト選択項目のまま「Import」ボタンを押します**。 Importボタンを押すと初期設定は終了し、設定画面に切り替わります。

**Mascot Database Manager Configuration Import**

**Note:**  
Please disable other programs and scripts that configure or update sequence databases before continuing.

Database Manager can keep your sequence database configuration up to date and schedule the download of new files. If you choose to use Database Manager, you should not edit `mascot.dat` in future, because your changes will be lost. If you do not wish to use Database Manager now, please [return to the Configuration Editor](#).

Database Manager has two kinds of database definitions:

1. *Predefined database definition*: Automatic configuration by downloading up-to-date information from the Matrix Science website.
2. *Custom database definition*: Manually maintained configuration.

You can choose to keep the existing definition (Keep as Custom) or synchronise with a predefined definition (Synchronise). Synchronisation means the predefined database definition will be applied, and the database files (FASTA, reference, taxonomy) will be updated. If you do not want to update the database files in the future by choosing Synchronise Custom, please choose Keep as Custom.

通常はパラメータを変更することなく「Import」

Import database configuration by choosing Import.

**Import**

---

**Databases and spectral libraries**

Name	Mode ?	Type ?	Status	Latest task
PRIDE_Contaminants	predefined	SL	(waiting)	Get new files Deactivate Bringing online
SwissProt	predefined	AA	In use	Get new files Deactivate 1 task in queue

Latest predefined definitions files are from Mon Feb 27 18:18:46 2017 (databases\_1.xml) and Mon Feb 27 18:18:46 2017 (libraries\_1.xml).  
Full database status is available on [the database status page](#).

**Refresh**

### 【初期設定後、データベースファイルの自動取得とデータベース更新の進捗を確認する方法】

定義を確認したデータベースについて、データベースファイルのダウンロード・更新が自動的に試みられます。ファイル自動取得の進捗確認方法については **P.13 「Running tasks」** をご覧ください。

### 【ネットワークご利用時Proxyサーバーをご利用のお客様のみ:Proxyサーバーの設定】

ご利用のネットワークにて proxy サーバーをご利用の場合、MASCOT 上で Proxy サーバーの設定が必要です。詳細については Settings の「**proxy サーバー設定 (P. 17)**」をご覧ください。

### 【インストール直後にSwissProt, PRIDE\_Contaminants 以外の初期設定配列データベース・ライブラリを使用可能にする方法】

インストール DVD 内に準備されている検索用データベースは SwissProt（配列データベース）と PRIDE\_Contaminants(ライブラリ)のみですが、MASCOT 用の配列データベース・ライブラリとしてそれら以外にも利用可能です。

データベースを追加・使用する方法については、「**FASTA (P. 19)**」セクション、あるいは「**Library (P. 52)**」セクションをご覧ください。

## □ Database Manager

Database Manager セクションには大きく分けて5つの設定項目があります。

### ▼ Databases (P.8)

- 使用データベースに関する情報・使用/不使用の設定(P.8)
- データベースファイルの更新 (P.8~10)
- 自動更新タイマーの設定 (P.11)

### ▼ Parse rules (P.12)

accession/description箇所の認識方法に関する設定

### ▼ Scheduled updates (P.12)

各データベースに設定したファイル自動更新設定内容と実行ログ（データベース別）の一覧 (P.12)

### ▼ Running tasks (P.13)

ファイル取得やライブラリ抽出作業の進捗・実行ログの一覧（時系列）

### ▼ Settings (P.14)

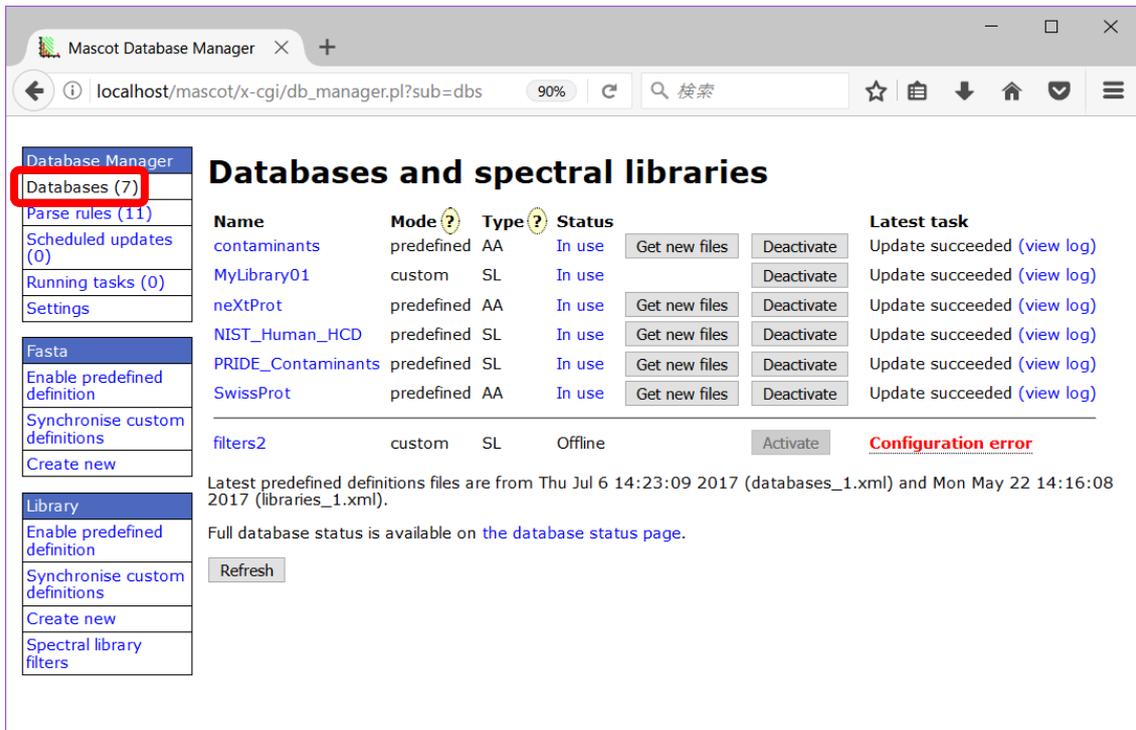
外部ネットワークへの接続、ライブラリ/配列ファイルの設置場所など

以降、これら5項目についてまとめています。

## ▼ [Databases]

- 使用データベースに関する情報・使用/不使用の設定 (P.8)
- データベースファイルの更新 (P.8~10)
- 自動更新タイマーの設定 (P.11)

「Databases」は、Database Manager を開いた際に現れる最初の画面、または左フレームの一番上「Database Manager」→「**Databases**」をクリックすると現れる設定です（下図）。データベースに関する基本的な情報を確認できるほか、データベース使用/不使用の切り替え、並びにデータベースファイルの更新を行うことができます。さらに各データベース名をクリックすることで、データベース設定内容の詳細を確認する画面へ移行します。



The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The left sidebar has a menu with 'Databases (7)' highlighted. The main content area is titled 'Databases and spectral libraries' and contains a table of database entries. Below the table, there is a note about the latest predefined definitions files and a 'Refresh' button.

Name	Mode	Type	Status	Latest task
contaminants	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
MyLibrary01	custom	SL	In use	Update succeeded (view log)
neXtProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
NIST_Human_HCD	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
PRIDE_Contaminants	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
SwissProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
filters2	custom	SL	Offline	Configuration error

Latest predefined definitions files are from Thu Jul 6 14:23:09 2017 (databases\_1.xml) and Mon May 22 14:16:08 2017 (libraries\_1.xml).  
Full database status is available on [the database status page](#).

Refresh

- 使用しているデータベースに関する情報・使用/不使用の設定
- データベースファイルの更新

「Databases」では、使用するデータベースの選択やデータベースファイルの更新（ダウンロードの開始）を行う事ができます（下図）。

Name	Mode	Type	Status			Latest task
<a href="#">contaminants</a>	predefined	AA	In use	Get new files	Deactivate	Update succeeded ( <a href="#">view log</a> )
<a href="#">MyLibrary01</a>	custom	SL	In use		Deactivate	Update succeeded ( <a href="#">view log</a> )
<a href="#">neXtProt</a>	predefined	AA	In use	Get new files	Deactivate	Update succeeded ( <a href="#">view log</a> )
<a href="#">NIST_Human_HCD</a>	predefined	SL	In use	Get new files	Deactivate	Update succeeded ( <a href="#">view log</a> )
<a href="#">PRIDE_Contaminants</a>	predefined	SL	In use	Get new files	Deactivate	
<a href="#">SwissProt</a>	predefined	AA	In use	Get new files	Deactivate	
<a href="#">rs2</a>	custom	SL	Offline		Activate	

DBの状態

DB更新

Activate /Deactivate 切替。データベースの使用/不使用を切り替えます。

線上部は "Activate"  
下部は "Deactivate"  
されているデータベース

データベースの名称部分（ハイパーリンク）をクリックすると、該当データベースの設定やバージョン、ファイル取得の状況についてより詳しく見る事ができます（次頁図）。

Mascot Database Manager: SwissProt - Mozilla Firefox

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) 履歴(S) ブックマーク(B) ツール(I) ヘルプ(H)

Matrix Science - Home x Mascot configuration x Mascot Database Ma... x

mtc20/mascot/x-cgi/db\_manager.pl?sub=d

よく見るページ Firefox を使ってみよう 最新ニュース

mtc20/mascot/x-cgi/db\_ma...r.pl?sub=dbs%3ASwissProt

## Database: SwissProt

**Database Manager**

- Databases (8)
- Parse rules (16)
- Tasks (0)
- Settings

**SwissProt**

- Copy
- Delete

**Name**  
SwissProt

設定ファイル configuration.xml 内での名称。  
あるいは「predefined definition」内の名称。

**Using predefined definition**  
SwissProt\_ID

Configuration last updated Tue May 8 17:19:46 2012.

**Database type**  
Amino acid (protein d FASTA ファイルが置かれている場所

**Database directory**  
C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current

**Filename pattern**  
SwissProt\_\*.fasta

**Matching files in directory**

- SwissProt\_2012\_03.fasta (243 MB) (current)
- SwissProt\_2012\_03.dat (2.4 GB) (current)

---

**Database status**

In use

Deactivate

Activate/Deactivate 切り替え

**Scheduled updates**  
(no schedules defined)

Edit schedule

自動更新スケジュール編集(詳細は後述)

**Most recent finished task**  
[Wed May 9 03:17:26 2012] (success) No new FASTA file available; database SwissProt is up to date.

Update database now

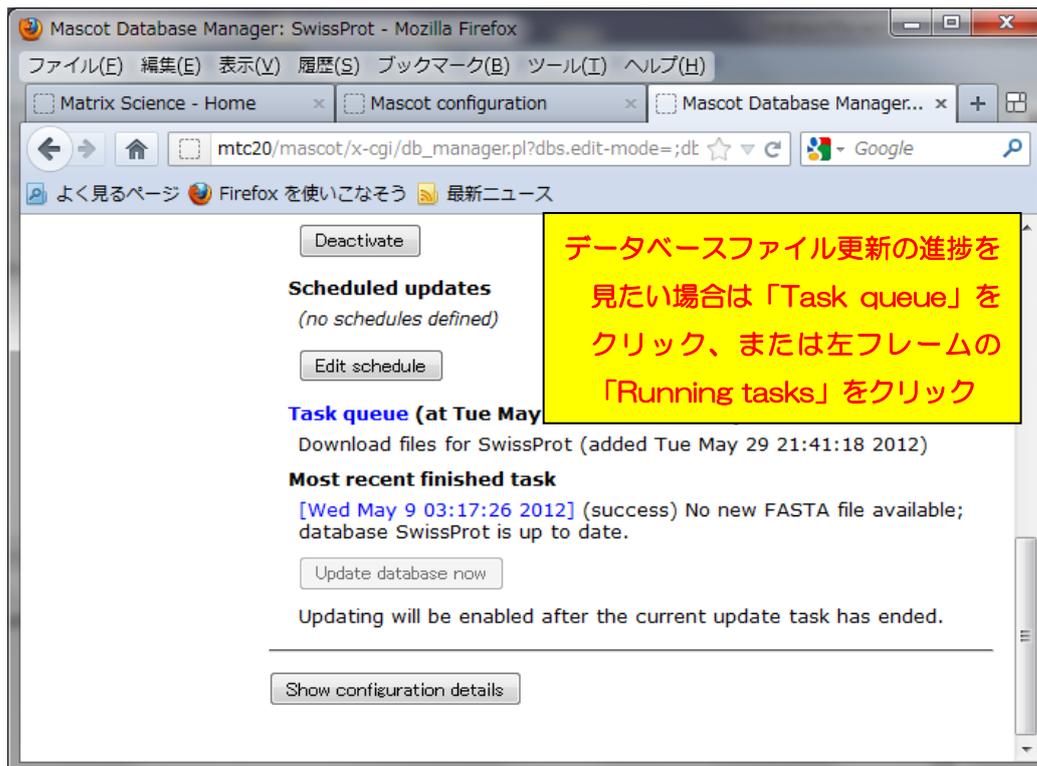
データベースファイル更新

Show configuration details

さらに詳細な設定内容が見たい場合

各ページにある「**Update**」または「**Update database now**」 ボタンを押すと、データベースファイルの更新がその場でスタートします。Taskとして進捗度合いが画面に表示されます。

- \* ネットワークにて Proxy サーバーをご利用されている場合、Database Manager ページで Proxy サーバーの設定が必要です。設定方法について詳しくは「Settings」の「proxy サーバー設定」(P.17) をご覧ください。



## - 更新タイマーの設定

前述の各データベースの設定確認画面にある「**Edit Schedule**」を押すと、該当データベースの取得を定期的に行うための設定画面が現れます。操作方法は下図をご覧ください。定期実施の設定は、毎日<Daily>、毎週<Weekly>、毎月<Monthly>の3種類があります。

The image consists of three overlapping screenshots illustrating the steps to edit the update schedule for a database.

**Step 1:** The top screenshot shows the 'Databases' management page. A table lists databases with columns for Name, Status, New files, and Tasks. The 'SwissProt' database is highlighted with a red box, and a yellow callout box with the text '① DB名をクリック' (Click the DB name) points to it.

**Step 2:** The middle screenshot shows the 'Scheduled updates' section for the SwissProt database. The 'Edit schedule' button is highlighted with a red box, and a yellow callout box with the text '② 「Edit schedule」' (Click 'Edit schedule') points to it.

**Step 3:** The bottom screenshot shows the 'Database configuration: SwissProt' page. Under the 'Scheduled updates' section, the 'Monthly' option is selected with a radio button. The 'Monthly' configuration is set to 'on the 25th at 00:45', which is highlighted with a red box. The 'Save' button is also highlighted with a red box, and a yellow callout box with the text '③ 定期更新のスケジュール設定後「Save」' (After setting the update schedule, click 'Save') points to it.

## ▼ [parse rules]

[accession/description](#) 箇所の認識方法に関する設定

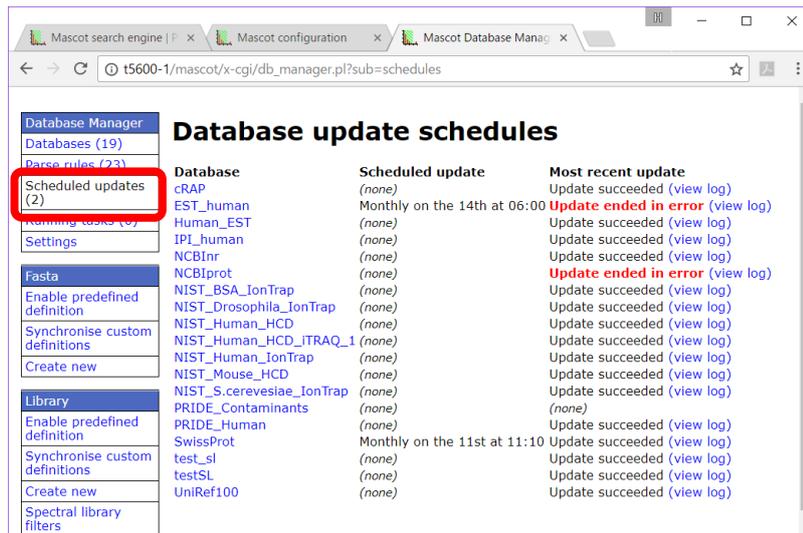
左フレームにある「**Parse rules**」では、fastaから各エントリーの accession/description 記述場所を特定するための「抜き出しルール」について、設定内容一覧を確認することができます。（下図）

Rule string	Used by
>[ <sup>^</sup> ] * ¥(. *¥)	contaminants, neXtProt and SwissProt
¥¥¥(. *¥)>	contaminants, neXtProt and SwissProt
¥([ <sup>^</sup> ] * ¥)	MyLibrary01, NIST_Human_HCD and PRIDE_Contaminants
[ <sup>^</sup> ] * ¥¥(. *¥)	MyLibrary01 and NIST_Human_HCD
>¥([ <sup>^</sup> ], *¥)	contaminants
>rxp:¥([ <sup>^</sup> ] * ¥)	neXtProt
DbVersion=¥(20[0-9][0-9]-[0-1][0-9]-[0-3][0-9]¥)	neXtProt
>..[[ <sup>^</sup> ] *   ¥([ <sup>^</sup> ] * ¥)	SwissProt
¥ * ¥(ID [-A-Z0-9_]. *¥)	SwissProt
^ID ¥([ <sup>^</sup> ] * ¥)	SwissProt
Swiss-Prot *, *Release *¥([0-9_][0-9_] *¥)	SwissProt

## ▼ [Scheduled updates]

[各データベースに設定したファイル自動更新設定と実行ログの一覧](#)

左フレームにある「**Scheduled updates**」では、各データベースの自動更新の設定一覧を見ることができます。設定は実施の時系列でなく、データベース別に表示されています。またそのタスクの実行状況について、ログを確認することができます（次項図）。



## ▼ [Running tasks]

現在実行中の、スケジュールされたタスクの進捗/ログ

ファイル更新/ピークリスト抽出の進捗を確認するには下図のように「**Running tasks**」セクションで確認してください。左側のtable内にある「Database Manager」→「**Running tasks**」をクリックすると、現在実行・実行待ちとなっているTaskが一覧で表示されます。Taskは「実行待ち」「実行中」「実行終了」の各セクションに分かれて表示されています。

「Running Tasks」をクリック

実行中のファイルダウンロード進捗を確認できる

実行待ち →

実行中 →

実行終了 →

Title	Started	Progress
Download files for Human_EST dbman_download.pl Human_EST	Tue Feb 28 15:04:01 2017	[0.0%]

Process end time	Command	Last message
[Mon Feb 27 18:26:09 2017]	dbman_download.pl PRIDE_Contaminants	(success) 'PRIDE_Contaminants' is up to date.
[Mon Feb 27 18:25:33 2017]	dbman_download.pl SwissProt	(success) 'SwissProt' successfully updated.
[Mon Feb 27 18:18:46 2017]	Predefined definitions file download	(success) Latest predefined definitions file saved to disk.

## ▼ [Settings]

外部ネットワークとの接続、配列データベース/ライブラリファイル置き場所に関する設定

MASCOTの動作に重要で導入初期などに行う設定の「Settings」セクションについて説明いたします。大きく分けて以下の5項目の設定変更が可能です。

- MASCOT Server のインターネットへの接続許可
- MASCOT Server の 外部プログラムへの接続許可
- プロキシサーバー設定
- Sequenceフォルダのデフォルト設定位置
- ライブラリの参照配列データベース設定

Settings セクション画面は、画面左側の「Database Manager」→「Settings」をクリックして開きます。

The screenshot shows the Mascot Database Manager web interface. The left sidebar contains a menu with the following items: Database Manager, Databases (7), Parse rules (11), Scheduled updates (0), Running tasks (0), **Settings** (highlighted with a red box), Fasta, Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new, Library, Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new, Spectral library filters.

The main content area is titled "Databases and spectral libraries" and contains a table with the following data:

Name	Mode	Type	Status	Latest task
contaminants	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
MyLibrary01	custom	SL	In use	Update succeeded (view log)
neXtProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
NIST_Human_HCD	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
PRIDE_Contaminants	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
SwissProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
filters2	custom	SL	Offline	Configuration error

Below the table, there is a note: "Latest predefined definitions files are from Thu Jul 6 14:23:09 2017 (databases\_1.xml) and Mon May 22 14:16:08 2017 (libranes\_1.xml). Full database status is available on the database status page." A "Refresh" button is located at the bottom of the table area.

Settingsの画面（下図）は、上から順に、

「**MASCOT Server のInternet 接続の可否**」「**MASCOT Server の 外部プログラムへの接続の可否**」、「**プロキシ設定**」、「**Sequenceフォルダのデフォルト配置位置**」、「**ライブラリデータベースの参照配列データベースの指定**」に関する項目やリンクのボタンが並んでいます。

Mascot Database Manager Settings

**Internet access settings**

**Allow Internet access?**

Database Manager may access the Internet for two purposes:

1. Download the latest configuration information from the Matrix Science website.
2. Download new database files.

If the Mascot Server machine has no Internet connection, or if you do not wish Database Manager to access the Internet, this behaviour can be disabled.

Internet access is **enabled**.

Changing this setting will take effect immediately. Update tasks that are currently running will be allowed to continue until they are done.

**Allow external full-text reports?**

By default, if a database definition has an external full-text report source (an external URL), Mascot report scripts will download and display the extra data when protein details are viewed. This behaviour can be disabled.

External full-text report access is **enabled**.

Changing this setting will take effect immediately for all active and inactive database definitions.

**Proxy settings**

You may need to define proxy settings to enable Database Manager to access the Internet, depending on your local network and Internet connection.

Proxy settings defined in `mascot.dat`:

- HTTP proxy strategy: *Auto*
- FTP proxy strategy: *direct connection*

URL test **succeeds**; Database Manager can access [http://www.matrixscience.com/downloads/databases\\_1.xml](http://www.matrixscience.com/downloads/databases_1.xml) from the Mascot server machine. (FTP proxy settings not tested.)

**Sequence directory settings**

Sequence databases are usually stored in a single sequence directory. The default path is `C:/inetpub/mascot/sequence`, but this can be changed below.

Note that you can always change the sequence directory for individual database definitions when creating a new database definition.

Sequence directory:

(If you leave the value empty, it will be reset to the default path.)

**Spectral library settings**

All spectral libraries must have a reference database (FASTA). The reference database is chosen when the library is created (custom definition) or enabled (predefined definition).

If the reference database does not exist or is not a protein sequence database (AA), then Database Manager will offer SwissProt as the default choice.

**Reference database**

以降、各項目について詳しく説明しています。

- **MASCOTサーバーのインターネットへの接続許可**  
**【Internet access settings】 - 【Allow Internet access ?】**

MASCOT ではデータベースファイル取得やデータベースの定義ファイルチェックのためインターネットに接続します。これらの機能を使用せずインターネットへの接続を希望しない場合、**【Internet access settings】**項目で設定を変更する事ができます。

**Internet access settings**

**Allow Internet access?**

Database Manager may access the Internet for two purposes:

1. Download the latest configuration information from the Matrix Science website.
2. Download new database files.

If the Mascot Server machine has no Internet connection, or if you do not wish Database Manager to access the Internet, this behaviour can be disabled.

Internet access is **enabled.** ←現在の設定内容

Changing this setting will take effect immediately. Update tasks that are currently running will be allowed to continue until they are done.

←設定切り替え

- **MASCOT Server の 外部プログラムへの接続許可**  
**【Internet access settings】 - 【Allow external full-text reports?】**

MASCOT には、結果画面の中でタンパク質の詳細情報を表示する箇所があります。詳細情報はローカルコンピュータにダウンロードされたファイルから取得する場合と、外部のサーバーから取得する場合があります。詳細情報を得るためにヒットタンパク質の情報を外部サーバーへ投げる事を好まない場合、**【Allow external full-text reports?】**項目で設定を変更する事ができます。

**Allow external full-text reports?**

By default, if a database definition has an external full-text report source (an external URL), Mascot report scripts will download and display the extra data when processing. This behaviour can be disabled.

External full-text report access is **enabled.** ←現在の設定内容

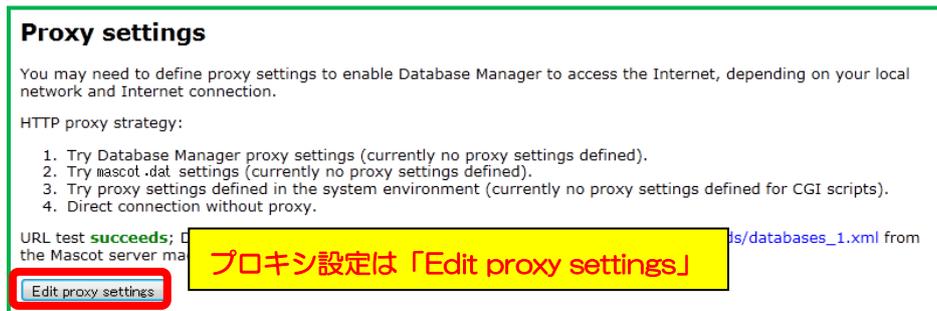
Changing this setting will take effect immediately for all active and inactive database definitions.

←設定の切り替え

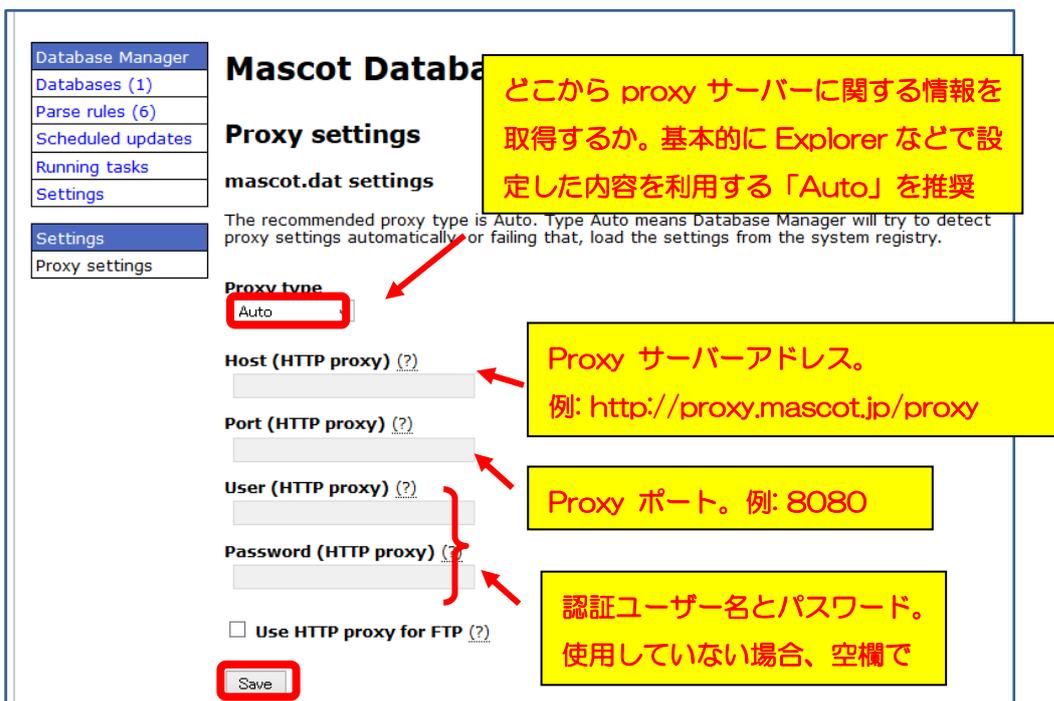
## - Proxyサーバー設定【Proxy settings】

前述の通りMASCOTではデータベースファイル取得やdatabaseの定義ファイルのチェックのためインターネットに接続しますが、使用しているネットワーク環境によってはProxyサーバー経由でないとインターネットへ接続できないことがあります。

【Proxy settings】項目ではProxyサーバーに関する設定を行います。設定画面へ移行するには、【Proxy settings】項目内の「**Edit proxy settings**」ボタンを押します。



続いてプロキシサーバーの設定画面が現れます（下図）。設定画面では Proxy サーバーのアクセス先、ポートに加え、必要があればユーザー名やパスワードを入力する箇所があります。また、HTTPだけでなくFTP についても設定する箇所があります。入力・設定後画面下部「**Save**」を押してください。



## - Sequence フォルダデフォルト設置位置【Sequence directory settings】

MASCOT で使用するデータベースのファイルはファイル容量が大きく、しばしばファイルの置き場所に問題が生じる事があります。ファイルの置き場所のデフォルト設定を変更するには【**Sequence directory settings**】の項目を書き換え、設定を適用するため「**Set**」ボタンを押してください（下図）。

### Sequence directory settings

Sequence databases are usually stored in a single sequence directory. The default path is `C:/inetpub/mascot/sequence`, but this can be changed below.

Note that you can always change the sequence directory for individual database definitions when creating a new database definition.

Sequence directory:  ←現在の設定内容。必要に応じて書き換える

(If you leave this field blank, the path will be reset to the default path.)

←設定更新の適用

## - ライブラリの参照配列データベース設定【Spectral library settings】

MASCOT で使用するライブラリのデータベースは、配列データベース検索との結果統合などを理由に参照となる配列データベースを指定する必要があります。[**spectral library settings**]では現状のデフォルト設定内容を確認できます。ただし明確な理由がない限り、「**SwissProt**」をそのままご利用ください。

### Spectral library settings

All spectral libraries must have a reference database (FASTA). The reference database is chosen when the library is created (custom definition) or enabled (predefined definition).

If the reference database does not exist or is not a protein sequence database (AA), then Database Manager will offer SwissProt as the default choice.

Reference database:  ←現在の設定内容。デフォルトである「SwissProt」を推奨

←設定更新の適用

## □ Fasta

MASCOTの検索対象データベースには、**1.アミノ酸配列データベース(AA)**、**2.塩基配列データベース(NA)**、並びに **3.スペクトルライブラリ(SL)**の3種類があります。このうち**1**のアミノ酸配列データベースと**2**の塩基配列データベースを追加するときには、左フレーム「**Fasta**」項目から行います（下図）。「Fasta」には以下の3つの選択項目があります。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The left sidebar has a 'Fasta' menu item highlighted with a red box. The main content area is titled 'Databases and spectral libraries' and contains a table with the following data:

Name	Mode	Type	Status	Latest task
contaminants	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
MyLibrary01	custom	SL	In use	Update succeeded (view log)
neXtProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
NIST_Human_HCD	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
PRIDE_Contaminants	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
SwissProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
filters2	custom	SL	Offline	Configuration error

Below the table, there is a 'Refresh' button and a message: 'Latest predefined definitions files are from Thu Jul 6 14:23:09 2017 (databases\_1.xml) and Mon May 22 14:16:08 2017 (libraries\_1.xml). Full database status is available on the database status page.'

- **Enable predefined definition (P.20)**

データベース新設。MASCOT側で準備している定義を利用

- **Synchronise custom definitions (P.23)**

既存データベースとMASCOT で予め準備された設定の紐付け確認

- **Create new (P.24)**

データベース新設。” Enable predefined definition” 以外の方法

以降、各選択項目について説明します。

## ▼ Enable predefined definition

### MASCOT側で準備している定義を利用したデータベース新設

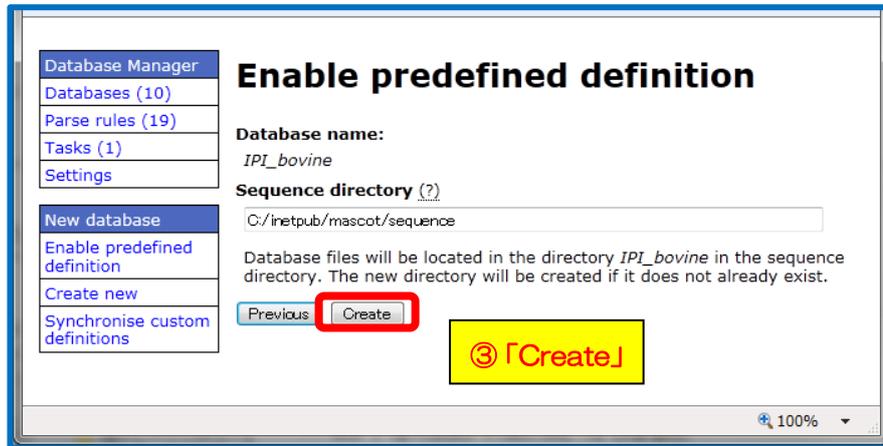
よく使用されるデータベースについては、あらかじめMASCOT側で様々な設定を施した定義（predefined definition）を準備しています。これらのデータベースを新たに使用する時にこの選択項目をご利用ください。Predefined definition にないデータベースを使用したい場合、またはpredefined definitionにあるデータベースだが名称を変えたい場合などは後述の「Create new」(P.24～) をご覧ください。

「**Enable predefined definition**」にて、SwissProt, NCBIprot (旧NCBINr)、nextProt、(生物種)\_EST、IPIデータベースなどを検索対象データベースとして使用することができます。使用したいデータベースについて、「**Enable**」ボタンを押してください（下図）。ボタンを押すだけでファイルのダウンロードなどすべて自動的に行われ、ダウンロードと構築完了後、データベースが使用可能となります。

The screenshot shows the 'Mascot Database Manager' interface. The main heading is 'Enable predefined database definition'. Below the heading, there is a paragraph explaining that predefined definitions are configuration entries for commonly used databases. A table lists various databases with 'Enable' buttons. Two yellow callout boxes provide instructions: ① 'Enable predefined definition' をクリックし and ② 使用したいデータベースの 'Enable' ボタンを押す. The 'Enable' button for 'neXtProt' is highlighted with a red box.

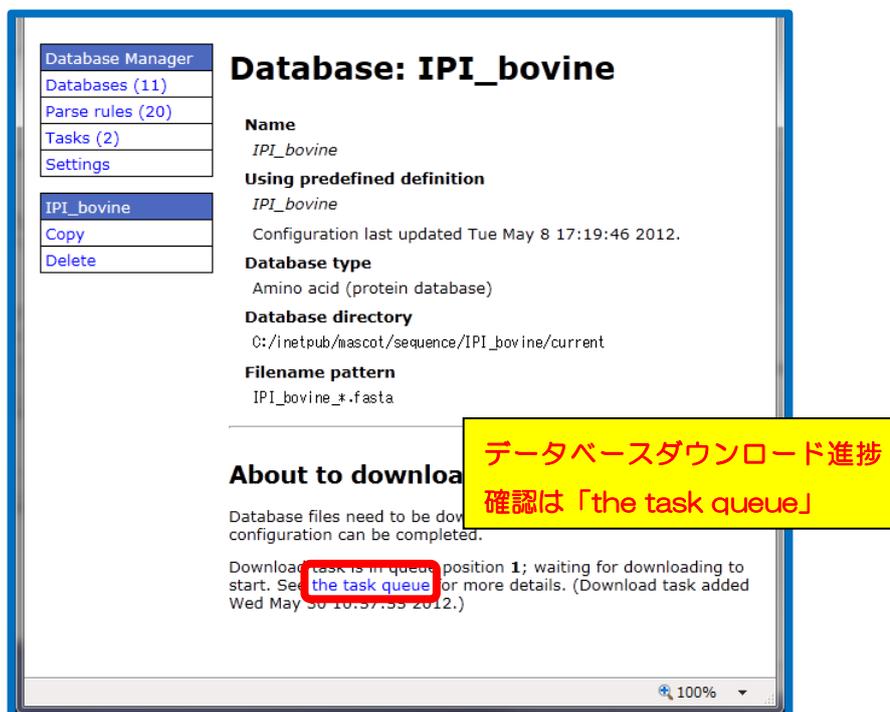
Name	Enable	Notes
contaminants	Enable	Could be synchronised with NCBINr.
cRAP	Enable	Already set up as cRAP.
Environmental_EST	Enable	
Fungi_EST	Enable	
Human_EST	Enable	Already set up as Human_EST.
Invertebrates_EST	Enable	
IPI_arabidopsis	Enable	
IPI_bovine	Enable	
IPI_chicken	Enable	
IPI_human	Enable	Already set up as IPI_human.
IPI_mouse	Enable	
IPI_rat	Enable	
IPI_zebrafish	Enable	
Mammals_EST	Enable	
Mus_EST	Enable	
NCBIprot	Enable	Already set up as NCBIprot.
neXtProt	Enable	
Plants_EST	Enable	

配列データベースファイルの置き場所を「Sequence directory」で確認し必要があれば変更します。確認後、「Create」ボタンを押します（下図）。



データベースの定義に関するSummaryが表示されます。この段階で、既に該当データベースはMASCOTにて使用対象のデータベースと認識されています(Activate)。使用可能となるためには、これと並行して行われているデータベースファイルの取得の完了と、MASCOTで使用するためのデータベース再構築の完了が必要です。

データベースファイル取得状況は、ハイパーリンクの「**the task queue**」をクリックし確認します（下図）。



データベースファイルダウンロードの進捗状況が表示されます。

### Database Manager tasks

Database Manager processes scheduled tasks one at a time in the background as long as Mascot (ms-monitor.exe) is running.

Task processing is currently **enabled**. Task queue and currently running tasks are shown below. ▶ **Task process control**

#	Queued task	Added	
1	Download files for IPI_bovine	Wed May 30 10:57:55	<input type="button" value="Cancel"/>

Title	Started	Progress	
Download files for Environmental_EST dbman_download.pl Environmental_EST	Wed May 30 10:33:01 2012	[12.0%] Downloading <ftp://ftp.ebi.ac.uk/pub/databases/embl/misc/acc_to_taxid.mapping.txt.gz> (try 1 out of 5): 210 kB/s (296 MB/568 MB, 22m 5s remaining)	<input type="button" value="Cancel"/>

### Task log

ファイルのダウンロード後にMASCOTで使用できるようデータベースの構築が行われます。ダウンロード後のデータベース構築の進捗については、Database Status (Home -> Database Status) にてご確認ください。該当データベースの**Status**項目が **"In Use"**となれば終了です。

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

```

Name      = IPI_human          Family   = C:/inetpub/mascot/sequence/IPI_human/current/IPI_human_*.fa
Filename  = IPI_human_3.87x.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/IPI_human/current/IPI_human_3.8
Status    = In use           Statistics
State Time = Tue May 29 10:59:57 # searches = 0
Mem mapped = YES Request to mem map = YES Request unmap = NO Mem locked = NO
Number of threads = 4 Current = YES

```

「Status」が「In use」になればOK

```

Name      = IPI_mouse          Family   = C:/inetpub/mascot/sequence/IPI_mouse/current/IPI_mouse_*.fa
Filename  = IPI_mouse_3.87.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/IPI_mouse/current/IPI_mouse_3.87
Status    = In use           Statistics
State Time = Tue May 29 10:59:57 # searches = 0
Mem mapped = YES Request to mem map = YES Request unmap = NO Mem locked = NO
Number of threads = -1 Current = YES

```

```

Name      = NCBIInr          Family   = C:/inetpub/mascot/sequence/NCBIInr/current/NCBIInr_*.fasta

```

## ▼ Synchronise custom definitions

既存データベースとMASCOT で予め準備された設定の紐付け確認

「**Synchronise custom definitions**」は既存のデータベースの中でpredefined definitionのエントリーと一致度が高い時、定義内容をpredefined definitionの内容に変更するオプションです（下図）。

The screenshot shows a web browser window with the URL `t5600-1/mascot/x-cgi/db_manager.pl?sub=dbs.merge;dbs.new.def-class=db`. The page title is "Synchronise database definitions". The left sidebar has a menu with "Synchronise custom definitions" highlighted in red. The main content area has the following text:

The following custom definitions match predefined definitions and could be synchronised.

The advantage of synchronisation is automatic updates. As long as the Mascot server machine is connected to the Internet, configuration of the synchronised entry will be automatically kept up to date with the Matrix Science website, and the database files (FASTA, reference, taxonomy) can be automatically downloaded at the frequency of your choice.

Synchronisation will keep local settings fixed, such as directory names. Database files and parse rules will be updated to the latest version. The database can stay online while synchronisation is in progress, but its configuration cannot be changed.

	Action	Match quality
NCBIInr	<input checked="" type="radio"/> Keep <input type="radio"/> Synchronise with contaminants	poor ▶ Differences

At the bottom left of the main content area, there is a "Do it" button.

以前自分で作成したデータベースが predefined definitionとして登録されている内容とほぼ同じである場合、predefined definitionの設定内容と入れ替えることで、**今後ファイルの取得先やファイルフォーマットが変わった時でもMASCOT側が自動的に対応し設定変更をしてくれます。**

ただし**候補として表示する内容が必ずしも正しいわけではありません。**あくまでも抜き出しルールやファイルフォーマットの一致度から判断されている内容ですのでその点ご注意ください。

## ▼ Create new

データベース新設。 ” Enable predefined definition” 以外の方法

新規の配列データベース作成方法には、前出の「predefined definition」を使用する方法を含め4つの方法があります。次項以降、各項目について個別に説明します。

### 【新規データベースを追加する4つの方法】

1. **【predefined database definition】** P. 20～  
既出。すべての設定がひとまとめになった組み合わせをそのまま使用。ファイル設置場所を除き各種設定の変更ができない。データベースの名称も予め準備されたものをそのまま使用する。  
\* SwissProt, NCBIprot (IB NCBIlnr), IPI の他、EMBL の EST や trembl など
2. **【template】** P. 25～  
上記項目1の「predefined definition」を使用するが、データベースの名称を変更して利用。  
\* ファイル公開サイト (NCBI, EBI など) で採用している共通フォーマットの fasta ファイルを利用する場合。または【predefined database definition】でリストアップされたデータベースと設定の中身は同じだが、日付を固定したり特定生物種のみ抜き出した別名のデータベースを作成したりする場合を想定
3. **【copy】** P. 33～  
お手元の MASCOT で使用している既存データベース設定をベースに、名前を変更して利用。  
\* 出発点が predefined のリストからでなく既に使用中のデータベース。コピー元のデータベースで利用されている fasta ファイルをコピーして利用するかも選べます。既存データベースの異なるバージョンを複数登録したり、単純な抜出ルールのオリジナルデータベースをベースに作成する場合等を想定
4. **【Custom】** P. 41～  
完全に自分で各設定を記入・選択  
\* 1～3以外。自分で作成した Fasta ファイルなどの利用を想定

## - 2. 【template】

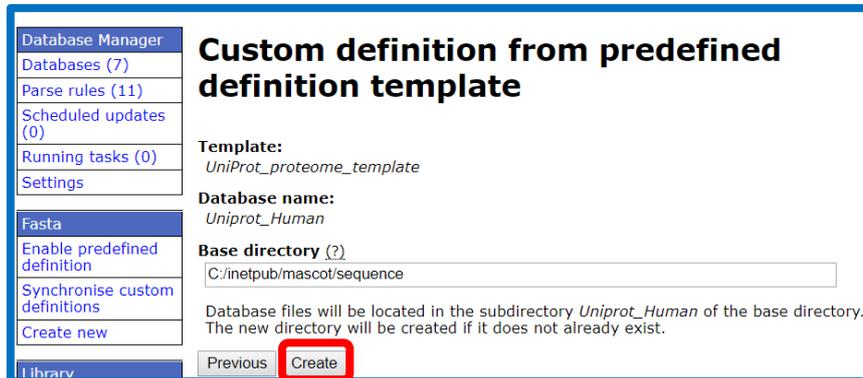
predefined definitionを利用するが、名前のみ変更して利用

template 利用は、抜き出しルールなどのフォーマットとしてMASCOTが準備しているセット「predefined definition」をテンプレートとして使うものの、データベースの名称を変更して利用する方法です。ファイル公開サイトで採用している共通フォーマット（ID[Accession] 記述のルールが同一）のデータベースを利用する場合や、predefined definitionデータベースのバージョン違いをセットしたい場合に利用します。例えば2011年で更新が止まったIPIデータベースの代わりに、IPIに該当する情報も含まれるuniprot データベースから特定生物種のみを抜き出したデータベースを作成して代わりに使いたい場合、templateを利用して新規データベースを作成します。**Template を利用した新規データベース作成の例として、この「uniprot\_human」データベースの作成方法を説明します。**

Database manager の、左フレーム「Fasta」→「Create new」を選びます（下図左）。 続いて現れる画面で、「Database name」に登録するデータベースの名称を入力し、「Use predefined definition template」で利用したいtemplateを選びます。例では「Uniprot proteome template」を選んでいきます。選択後、「Next」を押します（下図右）。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. On the left, the 'Database Manager' sidebar has a 'Create new' button highlighted with a red box. The main content area is titled 'New database definition'. The 'Database name' field contains 'Uniprot\_Human'. Below this, there are radio buttons for 'Custom' and 'Use predefined definition template'. The 'Use predefined definition template' option is selected and highlighted with a red box, with a yellow callout box pointing to it containing the text '「Use predefined definition template」'. Below this, a dropdown menu shows 'UniProt\_proteome\_template'. At the bottom, a 'Next' button is highlighted with a red box.

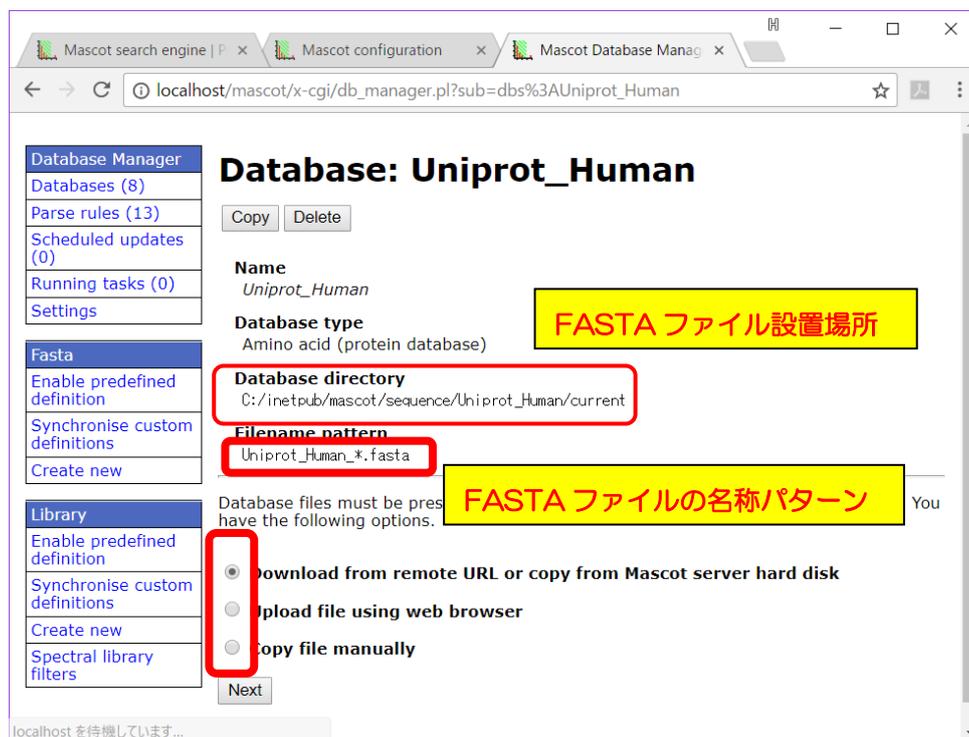
データベースファイルの置き場所を決め、「**Create**」を押します。



この時点ではFASTAファイルが所定の場所に置かれておらず、Inactive なデータベースとしてMASCOT側に登録されています。使用するためには別途取得したファイルを指定のファイル名に変えてから指定のフォルダに設置した上でActivateする必要があります。ファイルを設置する方法には以下3つの方法があります。

1. URLを指定しファイルをダウンロードして取得
2. WEBブラウザ経由で手元のfastaファイルをサーバーに送る
3. サーバー上の所定のフォルダにファイルを直接設置

次頁以降、各ファイル設置方法について説明します。



## 【1.ファイルの設置方法で「Download from remote URL～」を選択した場合】

fastaファイルが設置されているインターネット上のURLを指定します。選択後接続先設定を「Save」し、元の画面に戻ったのちに「Start downloading」ボタンを押してください。ファイルのダウンロードが実施されます。ファイル取得後はP.30～の操作を行います。

Database Manager  
Databases (8)  
Parse rules (13)  
Scheduled updates (0)  
Running tasks (0)  
Settings

Fasta  
Enable predefined definition  
Synchronise custom definitions  
Create new

Library  
Enable predefined definition  
Synchronise custom definitions  
Create new  
Spectral library filters

### Database: Uniprot\_Human

Copy Delete

Name  
Uniprot\_Human

Database type  
Amino acid (protein database)

Database directory  
C:/inetpub/mascot/sequence/Uniprot\_Human/current

Filename pattern  
Uniprot\_Human\_\*.fasta

### Download files from URL or copy from Mascot Server disk

The FASTA file can also be downloaded from a remote URL or copied from the Mascot Server hard disk.

Set up download URL

Filename pattern  
Uniprot\_Human\_\*.fasta  
Edit filename pattern

The downloaded files will be renamed to match the filename pattern.

Previous Start downloading

① 「Set up download URL」を押し、

② ファイルダウンロード先を指定後「Save」を押す

③ 元の画面に戻ったのちに「Start downloading」を押してダウンロードを実施する

Main file URL  
Delete original file after updating  
Version file URL or path to source file on Mascot Server hard disk (?)  
Delete original file after updating  
Reference file URL or path to source file on Mascot Server hard disk (?)  
Delete original file after updating  
The original file can only be deleted if it resides on the Mascot Server hard disk and Database Manager has sufficient permissions in the source directory.  
Cancel Save

## 【2.ファイルの設置方法で「Upload file using web browser」を選択した場合】

「Upload file using web browser」を選択した場合、次の画面（下図）でFASTAファイルを選択する画面が現れます。「**FASTA file to upload**」で使用するFASTAファイルを選び、「**Upload**」ボタンを押してください。ブラウザを介してファイルがMASCOT サーバーへアップロードされます。ファイル設置後はP.30～の操作を行います。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface for the 'Uniprot\_Human' database. The 'FASTA file to upload' section is highlighted, showing a file selection button circled in red. Below it, the 'Upload' button is also circled in red. Two yellow callout boxes provide instructions: '① FASTA ファイルを選び、' and '② Upload ボタンを押す'.

### 【3.ファイルの設置方法で「copy file manually」を選択した場合】

「**Database directory**」で指定されているフォルダ、例では

C:\inetpub\mascot\sequence\Uniprot\_Human\current

に、ダウンロードしたファイルを設置し、名称を「**Filename pattern**」で指定された形に書き換えます。但し名称中の「\*」部分は任意の文字列、例えばダウンロード日などに変更します。ファイル取得後はP.30~の操作を行います。

**Database: Uniprot\_Human**

Name: Uniprot\_Human

Database type: Amino acid (protein database)

**Database directory**: C:/inetpub/mascot/sequence/Uniprot\_Human/current

**Filename pattern**: Uniprot\_Human\_\*.fasta

**Copy files manually**

**Filename pattern**: Uniprot\_Human\_\*.fasta

Please,

1. copy the FASTA file to C:/inetpub/mascot/sequence/Uniprot\_Human/current ;
2. rename the file to match the filename pattern, e.g. Uniprot\_Human\_20170808.fasta (in the pattern, \* matches any string of characters);
3. and refresh this page to continue.

① 指定されたフォルダに

② 指定された名称・ルールに基づきファイル名を変更した Fasta ファイルをコピーする

④ Refresh ボタンを押す

ファイル名変更例) Uniprot\_Human\_20120608.fasta (\*はファイル名に書かない事)

③ ファイル名コピーし、指示されたパターンに合うようにファイル名を変更。

Uniprot\_human\_20120530.fasta  
FASTA ファイル  
43.7 MB

## 【ファイル設置後の操作】

ファイルを所定の方法でフォルダに設置すると、Fastaファイルが自動的に認識され、「No local FASTA file」の表記がなくなります。「**Activate**」ボタンを押せば、データベース構築が開始されます（下図）。データベースの構築状況は「Database Status」（MASCOT の Home画面→Database Status リンク）画面でご確認ください。該当データベースのstatus項目が **"in use"** となれば構築完了です。

The image shows two screenshots from the Mascot database management interface. The top screenshot displays the 'Database: Uniprot\_Human' configuration page. The 'Database status' section indicates the database is 'Offline', and the 'Activate' button is highlighted with a red circle. A yellow callout box contains the text: **ファイル名が認識されたら「Activate」**. The bottom screenshot shows the 'Database Status' page, which lists the status of various databases. The 'Uniprot\_Human' entry is circled in red, and a yellow callout box contains the text: **Database Status 画面で データベース構築確認**.

## [関連]

Template が想定する利用方法の中に、NCBIやEBIなどフォーマットが統一されているサイトから条件を絞り込んだ配列データベースを取得してそれをMASCOTのデータベースに利用する方法があります。ここではそのうちの一つ、uniprot から生物種を抜き出して利用する方法を例に設定をご紹介します【[緑線箇所](#)】。

## ◇ uniprotからtaxonomy;humanを抜き出してFASTAファイルにする方法

ユーザーからのニーズが高い、uniprotから特定生物種のエントリーだけを抜き出してFASTAファイルにする方法も併せてご紹介します。

1. 抜き出したい生物種のTax ID を確認します。Tax ID はMASCOTの生物種設定でも採用しているNCBIのtaxonomy ID です。調べたい場合は以下のサイトでフリーワード検索をして番号をお確かめください。

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/taxonomy>

Tax ID 例 ) Mus musculus : 10090, rattus norvegicus : 10116 など。

The screenshot shows the NCBI Taxonomy browser interface. The search bar contains 'Rattus norvegicus'. The search results show the following information:

**Rattus norvegicus**

Taxonomy ID: 10116  
 Genbank common name: Norway rat  
 Inherited blast name: rodents  
 Rank: species  
 Genetic code: Translation table 1 (Standard)  
 Mitochondrial genetic code: Translation table 2 (Vertebrate Mitochondrial)  
 Other names:  
 common name: brown rat

**Entrez records**

Database name	Subtree links	Direct links
Nucleotide	<a href="#">270,518</a>	<a href="#">270,517</a>
Nucleotide EST	<a href="#">1,103,577</a>	<a href="#">1,103,577</a>
Nucleotide GSS	<a href="#">867,131</a>	<a href="#">867,131</a>
Protein	<a href="#">110,744</a>	<a href="#">110,744</a>
Structure	<a href="#">1,736</a>	<a href="#">1,736</a>
Genome	<a href="#">44</a>	<a href="#">44</a>

NCBI, Taonomy Browser <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/taxonomy>

2. uniprot のサイト [www.uniprot.org](http://www.uniprot.org)へアクセス

### 3. キーワード **organism:TAX ID** と **keyword:"complete proteome"** で検索

例) organism:9606 keyword:"complete proteome"

キーワード検索  
例) organism:9606 keyword:"complete proteome"

ダウンロードボタン

SwissProt データ数

Entry	Protein names	Gene names	Organism	Length
Q5VUE5	Calcium-binding domain-containing protein C1orf53	C2CD4D, FAM148D	Homo sapiens (Human)	353
Q8NC38	Uncharacterized protein C1orf53	C1orf53	Homo sapiens (Human)	145
Q8N4J0	Putative uncharacterized protein ZN...	ZNF436-AS1, C1orf213	Homo sapiens (Human)	126
Q9H8K7	UPF0586 protein C9orf41	C9orf41	Homo sapiens (Human)	409
Q9Y471	Uncharacterized protein C10orf88	C10orf88	Homo sapiens (Human)	445
	Putative cytidine monophosphate...	CMAHP, CMAH	Homo sapiens (Human)	72

検索後、FASTAファイルを手にするには、画面上部の「Download」をクリックし、formatとして「FASTA」を選択して「Go」ボタンを押します。

Download selected (0)  
 Download all (68511)  
 Format: FASTA (canonical)  
 Preview first 10  
 Go

\* 2015年4月15日時点で68,511件のエントリーがヒットします。うち  
 アノテーションがついているSwissProtのエントリーが 20,203件です。

取得したファイルはMASCOT の検索対象データベースファイルとして利用可能です。

<uniprotからtaxonomy:humanのデータを抜き出したFASTAファイル取得方法:おわり>

### 3. 【copy】

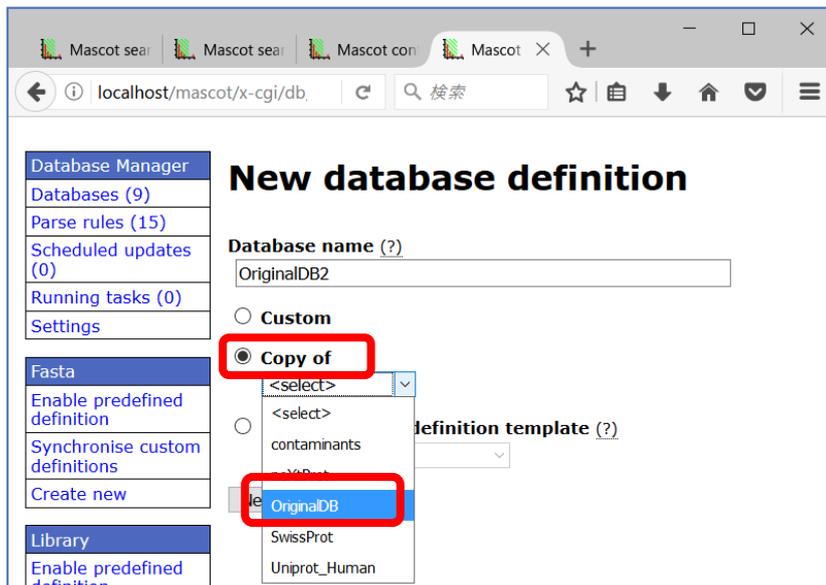
既にお手元の **MASCOT** で使用しているデータベース設定をベースに名前を変更して使用

copy 利用は、設定ファイル内のテンプレートからでなく、既に利用しているデータベースの中からベースとする設定を選んでデータベース構築を行います。例えば既存データベースの異なるバージョンを複数登録したり、単純な抽出ルールのオリジナルデータベースを複数作成したりする場合の利用等を想定しています。ここでは、Copyによるデータベース作成方法について説明いたします。例として、**OriginalDB** と同じフォーマットのデータベース「**OriginalDB2**」の作成を通じて操作を説します。

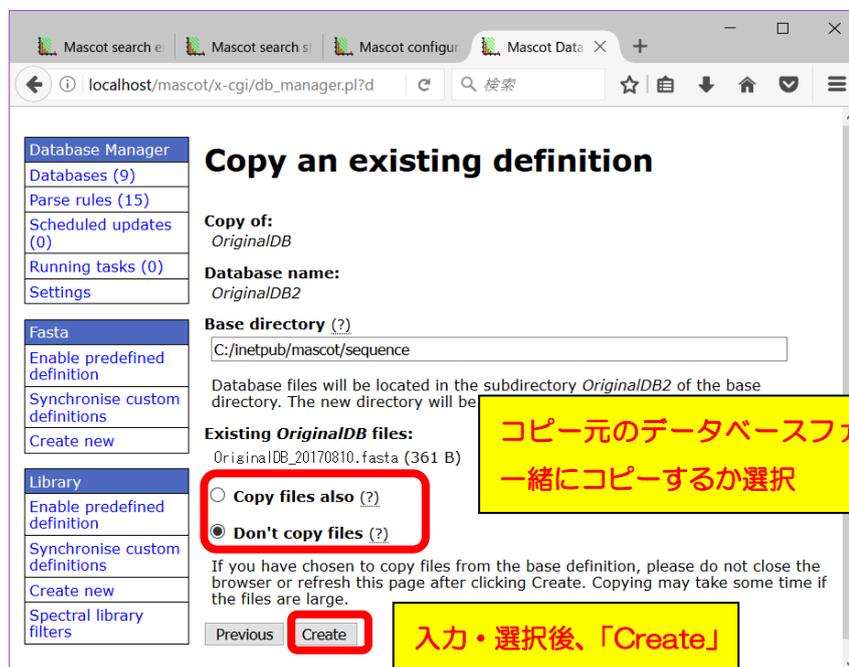
まず、Database Manager においてDatabase manager ページの左フレーム「Fasta」→「**Create new**」を選びます（下図）。

Name	Mode	Type	Status	Latest task
contaminants	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
MyLibrary01	custom	SL	In use	Update succeeded (view log)
neXtProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
NIST_Human_HCD	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
PRIDE_Contaminants	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
SwissProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
filters2	custom	SL	Offline	Configuration error
			Offline	No local FASTA file

遷移した画面（下図）で「Database name」に新規作成のデータベースの名称「OriginalDB2」を入力します。また、「**copy of**」でコピー元である「**OriginalDB**」を選びます。記入・選択後、画面下の「**Next**」ボタンを押します。



遷移した画面でFastaファイルの置き場所について確認されます。また、ファイルそのものもコピー元のデータベースからコピーして利用するかユーザーに訪ねてきます。コピーの必要がない場合は、「don't copy files」を選択し、「**Create**」ボタンを押します。



**[Copy files also]**を選んでいた場合、元のデータベースからfastaファイルがコピーされ、名称も定められたパターンに変更されます。続けて P.39~の操作を実施してください。

**「Don't copy files」** を選択した場合、所定の場所にFastaファイルを自分で設置する必要があります。Fastaファイルを準備する方法はいくつかあり、その方法についての選択肢が現れます。

**Database: OriginalDB2**

Copy Delete

**Name**  
OriginalDB2

**Database type**  
Amino acid (pro)

**Database direct**  
C:/inetpub/mascot

**Filename patter**  
OriginalDB2\_\*.fas

Database files must be activated. You have the following options:

- Download from remote URL or copy from Mascot server hard disk
- Upload file using web browser
- Copy file manually

Next

**ファイルの設置方法**

1. ダウンロードの URL 設定を設定しすぐにダウンロード
2. web ブラウザからファイルをアップロード
3. マニュアル操作で設置場所にファイルコピー

以降、各選択肢における操作方法をそれぞれ説明しています。

## 【1.ファイルの設置方法で「Download from remote URL ～」を選択した場合】

fastaファイルが設置されているインターネット上のURLを指定します。選択後接続先設定を「**Save**」し、元の画面に戻ったのちに「**Start downloading**」ボタンを押してファイルを取得します。設置後の操作は **P.39**～となります。

Database Manager

Databases (10)

Parse rules (15)

Scheduled updates (0)

Running tasks (0)

Settings

Fasta

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Library

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Spectral library filters

### Database: OriginalDB2

Copy Delete

Name  
OriginalDB2

Database type  
Amino acid (protein database)

Database directory  
C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB2/current

Filename pattern  
OriginalDB2\_\*.fasta

Download ① 「Set up download URL」を押し、disk

The FASTA file can also be downloaded from a remote URL or copied from the Mascot Server hard disk.

Set up download URL

Filename pattern  
OriginalDB2\_\*.fasta

Edit filename pattern

The downloaded files will be renamed to match the filename pattern.

Previous Start downloading

③ 元の画面に戻ったのちに「Start downloading」を押してダウンロードを実施

### Database configuration: OriginalDB2

Main file URL or path to source file on Mascot Server hard disk

Delete original file after updating

Version file URL or path to source file on Mascot Server hard disk (?)

Delete original file after updating

Reference file URL or path to source file on Mascot Server hard disk (?)

Delete original file after updating

The original file can only be deleted if it resides on the Mascot Server hard disk and Database Manager has sufficient permissions in the source directory.

Cancel Save ② ダウンロード先を指定後、「Save」

## 【2.ファイルの設置方法で「Upload file using web browser」を選択した場合】

遷移した画面（下図）でFASTAファイルを選択する画面が現れます。「**FASTA file to upload**」で使用するFASTAファイルを選び、「**Upload**」ボタンを押してください。設置後の操作は P.39～となります。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The main content area displays the configuration for 'Database: OriginalDB2'. Below this, the 'Upload FASTA file' section is visible. The 'FASTA file to upload' section has a '参照...' button circled in red. A yellow callout box with red text says '① FASTA ファイルを選び、'. Below the 'FASTA file to upload' section, the 'Upload' button is circled in red. Another yellow callout box with red text says '② Upload ボタンを押す'.

### 【3.ファイルの設置方法で「copy file manually」を選択した場合】

「**Database directory**」で指定されているフォルダ、つまり例では

C:\inetpub\mascot\sequence\OriginalDB2\current

に、ダウンロードしたファイルを設置し、名称を「**Filename pattern**」で指定された形に書き換えます。但し名称中の「\*」部分は任意の文字列、例えばダウンロード日などに変更します。設置後の操作は **P.39**～となります。

The screenshot shows the Mascot web interface for a database named 'OriginalDB2'. The interface is divided into several sections:

- Database Manager:** Includes links for Databases (10), Parse rules (15), Scheduled updates (0), Running tasks (0), and Settings.
- Fasta:** Includes links for Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, and Create new.
- Library:** Includes links for Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new, and Spectral library filters.

The main configuration area for 'Database: OriginalDB2' includes:

- Name:** OriginalDB2
- Database type:** Amino acid (protein database)
- Database directory:** C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB2/current (highlighted with a red box and a yellow callout: ① 以下で指定されたフォルダに)
- Filename pattern:** OriginalDB2\_\*.fasta

The 'Copy files manually' section includes:

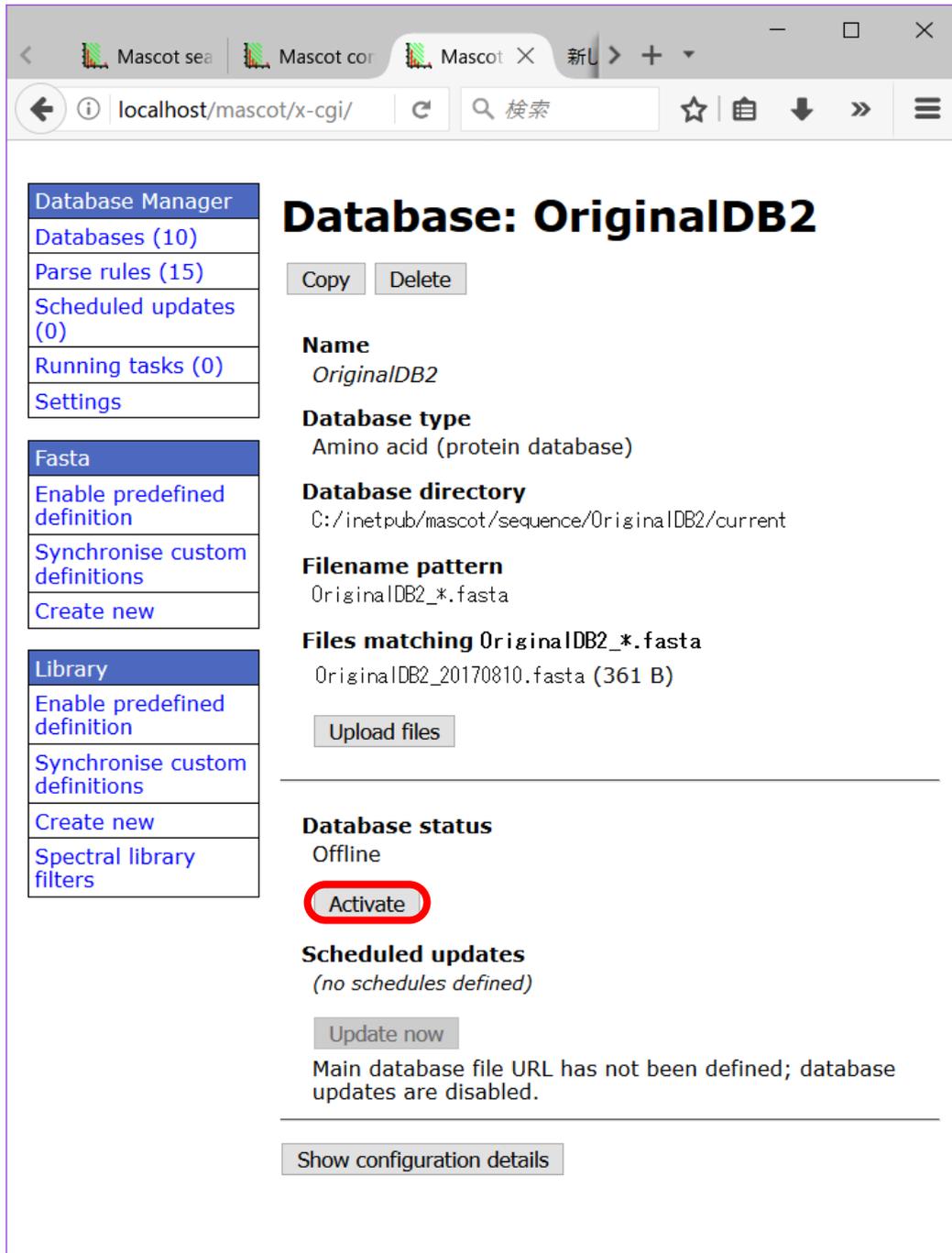
- Filename pattern:** OriginalDB2\_\*.fasta (highlighted with a red box and a yellow callout: ② 指定された名称・ルールに基づきファイル名を変更したFASTAファイルをコピーする)

An inset window shows a file explorer view of the 'current' directory, containing a file named 'OriginalDB2\_2\_20170810.fasta'.

At the bottom of the page, there are 'Previous' and 'Refresh' buttons.

### 【ファイル設置後の操作】

ファイルを所定の方法でフォルダに設置すると、FASTAファイルが自動的に認識され、「No local FASTA file」の表記がなくなります。「**Activate**」ボタンを押せば、データベース構築が開始されます（下図）。



The screenshot shows a web browser window with the URL `localhost/mascot/x-cgi/`. The page title is "Database: OriginalDB2". On the left, there is a navigation menu with sections: "Database Manager" (Databases (10), Parse rules (15), Scheduled updates (0), Running tasks (0), Settings), "Fasta" (Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new), and "Library" (Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new, Spectral library filters). The main content area displays the following information:

- Copy** **Delete**
- Name**  
*OriginalDB2*
- Database type**  
Amino acid (protein database)
- Database directory**  
C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB2/current
- Filename pattern**  
OriginalDB2\_\*.fasta
- Files matching OriginalDB2\_\*.fasta**  
OriginalDB2\_20170810.fasta (361 B)
- Upload files**
- Database status**  
Offline  
**Activate** (button circled in red)
- Scheduled updates**  
(no schedules defined)  
**Update now**
- Main database file URL has not been defined; database updates are disabled.
- Show configuration details**

データベースの構築状況は「Database Status」画面でご確認ください（下図、MASCOTのHome画面→Database Status リンク）。



The screenshot shows the Mascot Database Status page with the following information:

```
State Time = Wed Aug 09 19:04:14 # searches = 0
Mem mapped = NO Request to mem map = NO Request unmap = NO Mem locked = NO
Number of threads = 1 Current = YES Type = Spectral library
```

Database 1:

```
Name = PRIDE_Contaminants Family = C:/inetpub/mascot/sequence/PRIDE_Contaminants/current/PRIDE_C
Filename = PRIDE_Contaminants_20160908.msp Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/PRIDE_Contaminants/curr
Status = In use Statistics Recompress file
State Time = Wed Aug 09 19:04:14 # searches = 0
Mem mapped = NO Request to mem map = NO Request unmap = NO Mem locked = NO
Number of threads = 1 Current = YES Type = Spectral library
```

Database 2:

```
Name = SwissProt Family = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt *.fasta
Filename = SwissProt_2017_05.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt_201
Status = In use Statistics Unidentified taxonomy Recompress file
State Time = Wed Aug 09 19:04:14 # 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
```

Database 3:

```
Name = OriginalDB Family = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB/current/OriginalDB_*.fa
Filename = OriginalDB_20170810.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB/current/OriginalDB
Status = In use Statistics Recompress file
State Time = Mon Aug 14 11:43:22 # 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
```

Database 4 (highlighted):

```
Name = OriginalDB2 Family = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB2/current/OriginalDB2_*.
Filename = OriginalDB2_20170810.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB2/current/Original
Status = In use Statistics Recompress file
State Time = Mon Aug 14 14:04:24 # 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
```

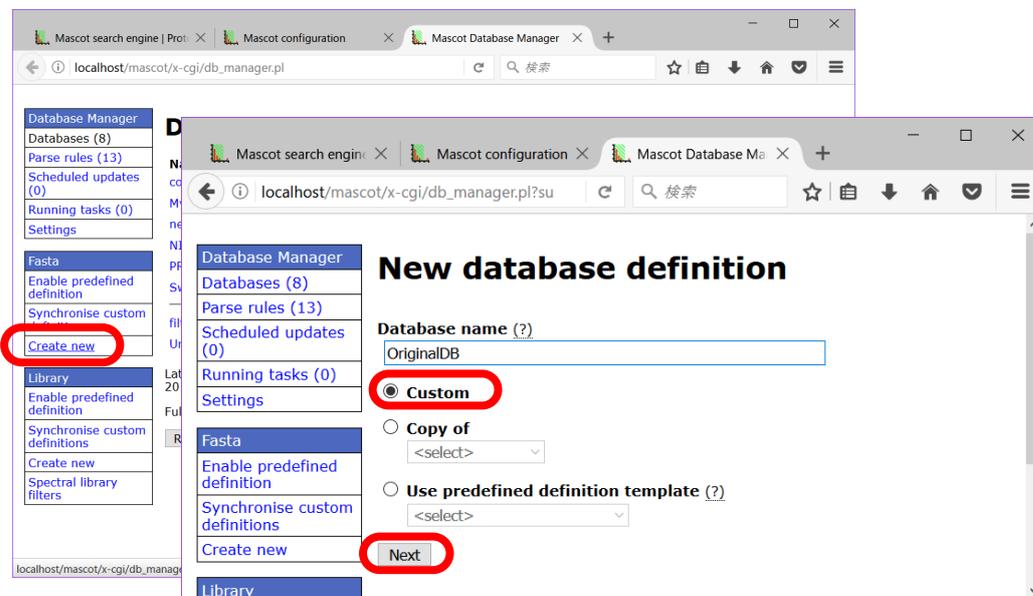
目的データベースの status  
項目が「In use」となれば  
使用可能

#### 4. 【Custom】

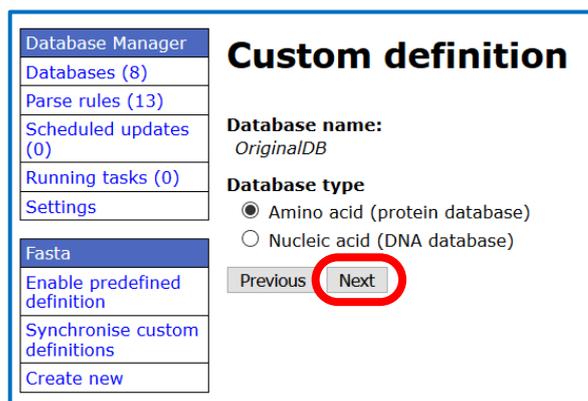
最初から自分で各設定を記入・選択

1～3 で挙げた設定方法は、基本的に名前とファイルの設置場所以外変更できません。1～3のいずれも利用できない場合、本項目「Custom」を利用します。例では自らFastaファイル「OriginalDB」を作成しMASCOT用の検索データベースとして使用するケースを使って紹介します。

Database manager の、左フレーム「Fasta」→「Create new」を選びます（下図）。現れた画面で「Database name」にデータベースの名称を入力し、作成種類として「Custom」を選びます。選択後、「Next」を押します。



遷移した画面で配列データベースの種類 アミノ酸/塩基配列 を選び、「Next」を押します。



データベースの設定画面に遷移します。インターネット上にあるfastaファイルを自動で取得する設定にしたい場合、「Download database files」を選び、FASTAファイル、versionファイル、reference ファイルの取得先を記入します。自動取得先がわからない場合、今後も手動でファイルの更新を行う予定の場合、あるいは更新する必要がない場合、「**Upload or Copy files manually**」を選びます（通常はこちらを選択することが多いと思います）。各項目の選択後、「**Create**」ボタンを押します（下図）。

The screenshot shows the 'Custom definition' page in the Mascot Database Manager. The page is titled 'Custom definition' and has a sidebar on the left with navigation links: Database Manager, Databases (8), Parse rules (13), Scheduled updates (0), Running tasks (0), Settings, Fasta, Library, and Spectral library filters. The main content area is for configuring a new database. The 'Database name' is 'OriginalDB'. The 'Custom definition type' is 'Amino acid (protein database)'. The 'Base directory' is 'C:/inetpub/mascot/sequence'. There are three radio button options for file acquisition: 'Download or copy files automatically', 'Upload or copy files manually', and 'Reference file URL or path to source file on Mascot Server hard disk (optional)'. The 'Upload or copy files manually' option is selected. The 'Create' button is highlighted with a red box. Several yellow callout boxes provide Japanese annotations: '「Sequence directory」配列データベースファイルの置き場所' points to the base directory field; '「Download database files」自動更新プログラムにおけるファイルの取得先' points to the 'Download or copy files automatically' option; '「Upload or Copy files manually」上記設定にて自動ダウンロードしない場合に選択' points to the selected 'Upload or copy files manually' option; and '入力、選択後「Create」' points to the 'Create' button.

この時点ではFastaファイルが所定の場所に置かれておらず、Inactive なデータベースとしてMASCOT側に登録されています。使用するためには別途取得したファイルを指定のファイル名に変えてから指定のフォルダに設置した上で**Activate**する必要があります。ファイルを設置する方法には3つあります。

1. URLを指定しファイルをダウンロード取得
2. WEBブラウザ経由で手元にあるFastaファイルをサーバーに送る
- 3.サーバー上の所定のフォルダにFastaファイルを直接設置

以降、各ファイル設置方法について説明します。なお、実例として説明している方法、fastaファイルを自分で編集して準備する方法においては「**2. WEBブラウザ経由で手元にあるFastaファイルをサーバーに送る**」あるいは「**3.サーバー上の所定のフォルダにFastaファイルを直接設置(P.46～)**」を選びますが、説明の関係上1の操作もご案内いたします。

**Database: OriginalDB**

Copy Delete

**Name**  
OriginalDB ファイル名称

**Database type**  
Amino acid (protein database) ファイルの設置場所

**Database directory**  
C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB/current

**Filename pattern**  
OriginalDB\_\*.fasta

Database files must be present before database configuration can continue. You have the following options.

Download from remote URL ファイルの設置方法

Upload file using web browser

Copy file manually

(前画面にもあった画面と同じく、) ダウンロードのURL設定を設定し直しすぐにダウンロード

webブラウザからファイルをアップロード

マニュアル操作で設置場所にファイルコピー

Next

## 【1.ファイルの設置方法で「Download from remote URL～」を選択した場合】

fastaファイルが設置されているインターネット上のURLを指定します。選択後接続先設定を「Save」し、元の画面に戻ったのちに「**Start downloading**」ボタンを押してファイルを取得します。ファイル取得後はP.47 以降の操作を行います。

Database Manager

Databases (9)

Parse rules (15)

Scheduled updates (0)

Running tasks (0)

Settings

Fasta

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Library

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Spectral library filters

### Database: OriginalDB

Copy Delete

Name  
OriginalDB

Database type  
Amino acid (protein database)

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

Filename pattern  
OriginalDB\_\*.fasta

### Download files from URL or copy from Mascot Server disk

The FASTA file can also be downloaded from a remote URL or copied from the Mascot Server hard disk.

Set up download URL

Filename pattern  
OriginalDB\_\*.fasta

Edit filename pattern

The downloaded files will be renamed to match the filename pattern.

Previous Start downloading

② 「Set up download URL」を押し、

### Database configuration: OriginalDB

Main file URL or path to source file on Mascot Server hard disk

Delete original file after updating

Version file URL or path to source file on Mascot Server hard disk (?)

Delete original file after updating

Reference file URL or path to source file on Mascot Server hard disk (?)

Delete original file after updating

The original file can only be deleted if it resides on the Mascot Server hard disk and Database Manager has sufficient permissions in the source directory.

Cancel Save

③ ファイルダウンロード先を指定後「Save」を押す

③ 元の画面に戻ったのちに「Start downloading」を押してダウンロードを実施する

## 【2.ファイルの設置方法で「Upload file using web browser」を選択した場合】

遷移した画面で、アップロードするFastaファイルを選択します（下図）。「**FASTA file to upload**」の参照ボタンを押して、使用するFastaファイルを選び、「**Upload**」ボタンを押せばOKです。ファイル設置後はP.47 以降の操作を行います

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The browser address bar is `localhost/mascot/x-cgi/db_manager.pl?dbs.file-source=upload&st`. The main content area is titled "Database: OriginalDB" and includes a sidebar with navigation options like "Database Manager", "Fasta", and "Library". The "FASTA file to upload" section is highlighted with a yellow box and a red circle around the "参照..." button. A yellow callout box with the text "① FASTA ファイルを選び、" points to the "参照..." button. Another yellow callout box with the text "② Upload ボタンを押す" points to the "Upload" button.

\*アップロードするFastaファイルについては、P.46の右下図のようなFastaフォーマットのファイルをご自身でインターネットなどから入手して準備されるか、エディタで自らFastaフォーマットに則ったファイルを作成して予め準備してください。

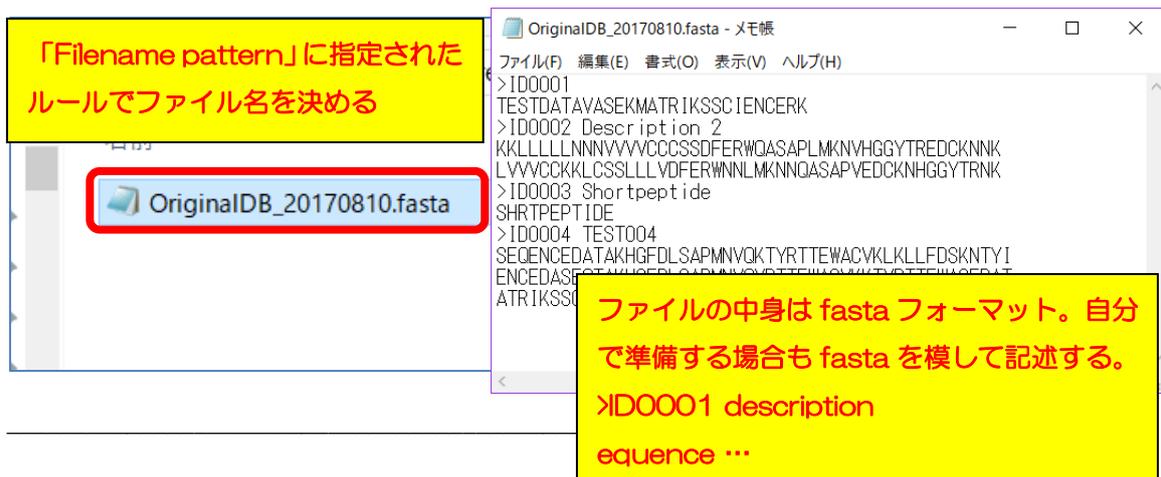
### 【3.ファイルの設置方法で「copy file manually」を選択した場合】

「Database directory」で指定されているフォルダ、つまり例では  
 C:\inetpub\mascot\sequence\OriginalDB\current



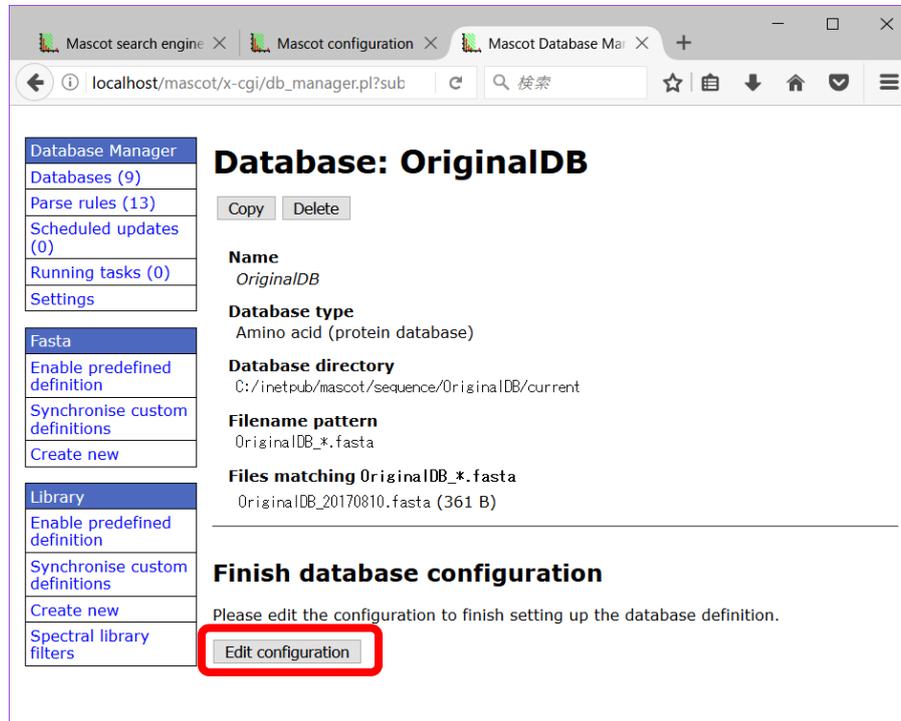
に、ダウンロードしたファイルを設置し、下図のように名称を「Filename pattern」で指定された形に書き換えます。但し名称中の「\*」部分は任意の文字列、例えばダウンロード日などに変更します。例では「**OriginalDB\_20170810.fasta**」という名称にしています。

ファイル設置後はP.47 以降の操作を行います。



## 【ファイルの設置後の設定】

Fastaファイルを正しい名称にして所定の場所に正しく置くと、Database Manager 画面で認識されます。設定をさらに進めるため、「**Edit Configuration**」ボタンを押します。



続いて、IDとDescription の抜き出しルール設定を行います。各々の抜き出しルール設定画面では、MASCOT が候補となるルールを最大5つユーザーに提示します（次頁図）。ユーザーはFastaファイル内の各行の記述と抜き出された内容を見比べた上で、最適な抜き出し方をしているルールを選択し、「Choose」ボタンを押します。選択における判断方法については次頁図をご参照ください。

続いて現れる画面で最終的にルールを適用した場合のIDが5例表示されますので、問題がなければ「**Choose**」ボタンを押します。

**Database configuration: OriginalDB (step 1/2)**

**FASTA file**

Files matching OriginalDB\_\*.fasta  
OriginalDB\_20170810.fasta (361 B)

Accession parse rule (?)  
(none)  
**Choose**

Description parse rule (?)  
(none)  
**Choose**

**Accession parse rule for OriginalDB**

**Raw test data (4 samples)**

- >ID0001
- >ID0002 Description 2
- >ID0003 Shortpeptide
- >ID0004 TEST004

**Suitable parse rules**

Parse rule	Match	Extracted data
<input type="radio"/> >¥(.)*¥	4/4	1. ID0001 ▶ 3 more matches (Warning: contains spaces)
<input type="radio"/> >¥([^\ ])*¥	4/4	1. ID0001 ▶ 3 more matches
<input checked="" type="radio"/> >¥([^\ ])*¥	4/4	1. ID0001 ▶ 3 more matches
<input type="radio"/> >¥([^\ ])*¥	4/4	1. ID0001 ▶ 3 more matches
<input type="radio"/> ¥(.)*¥	4/4	▶ 3 more matches
<input type="radio"/> ¥([^\ ])*¥	4/4	▶ 3 more matches

▶ **Unsuitable parse rules (44)**

**Cancel** **Create new parse rule** **Choose**

① Accession の「Choose」

② 「Extracted data」を見て、重複がなく自分が求めている抜き出し方をされているルールを選ぶ。

③ 先頭の 1 エントリーだけで判断しづらい場合、「more matches」を展開して、他のエントリーの状況も確認する

④ 決まったら「Choose」

同様の操作を「Description」でも実行します（下図）。実行後、「Next」ボタンを押します。

**Database configuration: OriginalDB (step 1/2)**

**FASTA file**

Files matching OriginalDB\_\*.fasta  
OriginalDB\_20170810.fasta (361 B)

**Accession parse rule (?)**  
>%(["^"]\*%)  
Choose  
Matches from OriginalDB\_20170810.fasta:  
1. ID0001  
2. ID0002  
3. ID0003  
4. ID0004

**Description parse rule (?)**  
(none)  
Choose  
Cancel Next  
Accession and description parse next step.

**Description parse rule for OriginalDB**

Raw test data (4 samples)

1. >ID0001  
2. >ID0002  
3. >ID0003  
4. >ID0004

**Suitable**

Parse rule Match Extracted data  
● >%(["^"]\*%) 4/4  
1. ID0001  
▼ 3 more matches  
2. ID0002 Description 2  
3. ID0003 Shortestide  
4. ID0004 TEST004

**Database configuration: OriginalDB (step 1/2)**

**FASTA file**

Files matching OriginalDB\_\*.fasta  
OriginalDB\_20170810.fasta (361 B)

**Accession parse rule (?)**  
>%(["^"]\*%)  
Choose  
Matches from OriginalDB\_20170810.fasta:  
1. ID0001  
2. ID0002  
3. ID0003  
4. ID0004

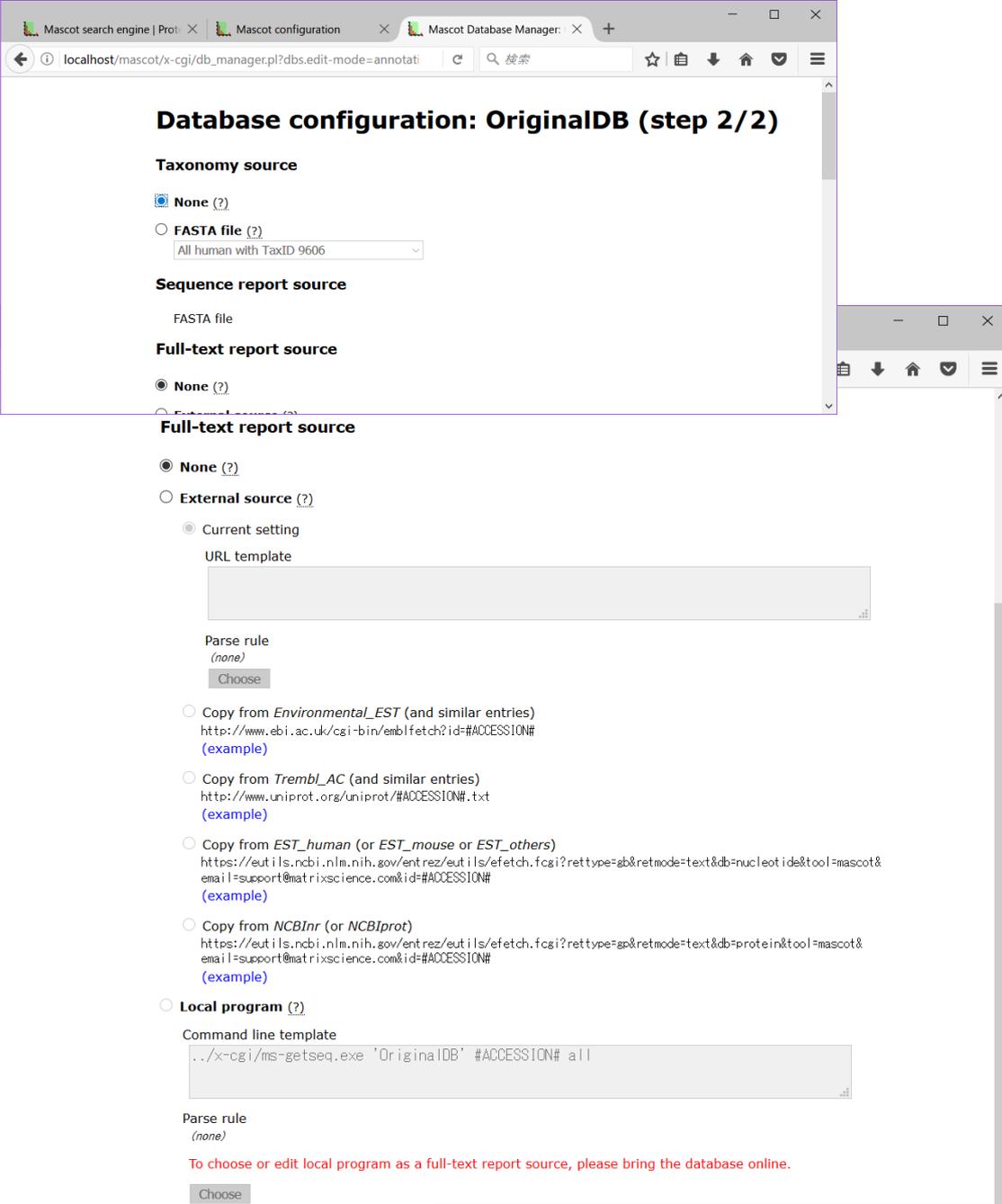
**Description parse rule (?)**  
>%(["^"]\*%)  
Choose  
Matches from OriginalDB\_20170810.fasta:  
1. ID0001  
2. ID0002 Description 2  
3. ID0003 Shortestide  
4. ID0004 TEST004  
Cancel Next

⑤ Descriptionの「Choose」

⑥ 遷移した画面で、Accession同様、適したルールを選んで画面下の「Choose」を押す

⑦ 元の画面に戻り、Accession、Descriptionともに目的の抜き出し方になっているのを確認したら「Next」ボタンを押す

Taxonomy やタンパク質情報のレポート形式を指定します。通常はこれらの設定を行うことはなく、デフォルト設定のまま画面下の「**Save and finish**」ボタンを押します（下図）。



**Database configuration: OriginalDB (step 2/2)**

**Taxonomy source**

- None (?)
- FASTA file (?)  
All human with TaxID 9606

**Sequence report source**

FASTA file

**Full-text report source**

- None (?)
- External source (?)

**Full-text report source**

- None (?)
- External source (?)
  - Current setting  
URL template  
  
Parse rule  
(none)
  - Copy from *Environmental\_EST* (and similar entries)  
<http://www.ebi.ac.uk/cgi-bin/embifetch?id=#ACCESSION#>  
(example)
  - Copy from *Trembl\_LAC* (and similar entries)  
<http://www.uniprot.org/uniprot/#ACCESSION#.txt>  
(example)
  - Copy from *EST\_human* (or *EST\_mouse* or *EST\_others*)  
<https://eutils.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/efetch.fcgi?rettype=gb&retmode=text&db=nucleotide&tool=mascot&email=support@matrixscience.com&id=#ACCESSION#>  
(example)
  - Copy from *NCBIInr* (or *NCBIprot*)  
<https://eutils.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/efetch.fcgi?rettype=gb&retmode=text&db=protein&tool=mascot&email=support@matrixscience.com&id=#ACCESSION#>  
(example)
- Local program (?)  
Command line template  
  
Parse rule  
(none)  
**To choose or edit local program as a full-text report source, please bring the database online.**

⑧ Taxonomy、タンパク質レポートの設定を行う画面。通常は特に設定変更せず、そのまま画面下部の「Save and finish」ボタンを押す

個別のデータベース設定画面に戻ります。Save直後では Active状態になっていないので、「**Activate**」ボタンを押せば、データベースの構築が開始されます。最終的に構築が完了しDatabase Status画面 (Home -> Database status)にて、新規に作成したデータベースのstatusが「**In use**」になった時点で利用可能となります。

The image shows two screenshots from the Mascot software interface. The top screenshot is the 'Database: OriginalDB' configuration page. It shows various settings like Name, Database type, Directory, and Filename pattern. The 'Database status' is currently 'Offline'. A red box highlights the 'Activate' button, and a yellow callout box with a circled '9' says '「Activate」 Database 構築開始'.

The bottom screenshot is the 'Mascot search status page' showing a list of databases. The 'OriginalDB' entry at the bottom is highlighted with a red box, and its status is 'In use'. A yellow callout box with a circled '10' says '目的データベースの status 項目が「In use」となれば 使用可能'.

**Database: OriginalDB**

Copy Delete

**Name**  
OriginalDB

**Database type**  
Amino acid (protein database)

**Database directory**  
C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB/current

**Filename pattern**  
OriginalDB\_\*.fasta

**Files matching OriginalDB\_\*.fasta**  
OriginalDB\_20170810.fasta (361 B)

Upload files

**Database status**  
Offline

Activate

**Scheduled updates**  
(no schedules defined)

Update now

⑨ 「Activate」 Database 構築開始

Mascot search engine | Mascot search status page | Mascot configuration | Mascot Database Manager

localhost/mascot/x-cgi/ms-status.exe

Status = In use [Statistics](#) [Recompress file](#)

State Time = Wed Aug 09 19:04:14 # searches = 0

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

Number of threads = 1 Current = YES Type = Spectral library

Name = PRIDE\_Contaminants\_ Family = C:/inetpub/mascot/sequence/PRIDE\_Contaminants/current/PRIDE\_Contaminants\_\*.fasta

Filename = PRIDE\_Contaminants\_20160908.msp Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/PRIDE\_Contaminants/current/PRIDE\_Contaminants\_20160908.msp

Status = In use [Statistics](#) [Recompress file](#)

State Time = Wed Aug 09 19:04:14 # searches = 0

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

Number of threads = 1 Current = YES Type = Spectral library

Name = SwissProt\_ Family = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt\_2017\_06.fasta

Filename = SwissProt\_2017\_06.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt\_2017\_06.fasta

Status = In use [Statistics](#) [Unidentified taxonomy](#) [Recompress file](#)

State Time = Wed Aug 09 19:04:14 # 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

⑩ 目的データベースの status 項目が「In use」となれば 使用可能

Name = OriginalDB\_ Family = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB/current/OriginalDB\_\*.fasta

Filename = OriginalDB\_20170810.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalDB/current/OriginalDB\_20170810.fasta

Status = In use [Statistics](#) [Recompress file](#)

State Time = Thu Aug 10 11:23:17 # 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

## □ Library

MASCOTの検索対象データベースには、**1.アミノ酸配列データベース(AA)**、**2.塩基配列データベース(NA)**、並びに **3.スペクトルライブラリ(SL)**の3種類があります。このうち**3.**のスペクトルライブラリの追加などの操作は、左フレーム「**Library**」項目から行います。「Library」には以下の4つの選択項目があります。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The main content area is titled 'Databases and spectral libraries' and contains a table of database entries. The left sidebar has a 'Library' menu item highlighted with a red circle. Below the table, there is a note about predefined definitions and a 'Refresh' button.

Name	Mode	Type	Status	Latest task
contaminants	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
MyLibrary01	custom	SL	In use	Update succeeded (view log)
neXtProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
NIST_Human_HCD	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
PRIDE_Contaminants	predefined	SL	In use	Update succeeded (view log)
SwissProt	predefined	AA	In use	Update succeeded (view log)
filters2	custom	SL	Offline	Configuration error

Latest predefined definitions files are from Thu Jul 6 14:23:09 2017 (databases\_1.xml) and Mon May 22 14:16:08 2017 (libraries\_1.xml).  
Full database status is available on [the database status page](#).

### ▼ Enable predefined definition (P.53)

スペクトルデータベース新設。MASCOT側で準備している定義を利用

### ▼ Synchronise custom definitions (P.56)

既存スペクトルデータベースとMASCOT で予め準備された設定の紐付け確認

### ▼ Create new (P.57)

スペクトルデータベース新設。” Enable predefined definition” 以外の方法

### ▼ Spectral library filters (P.89)

自身の検索結果からライブラリデータを抽出する際の条件

以降、各選択項目について説明します。

## ▼ Enable predefined definition

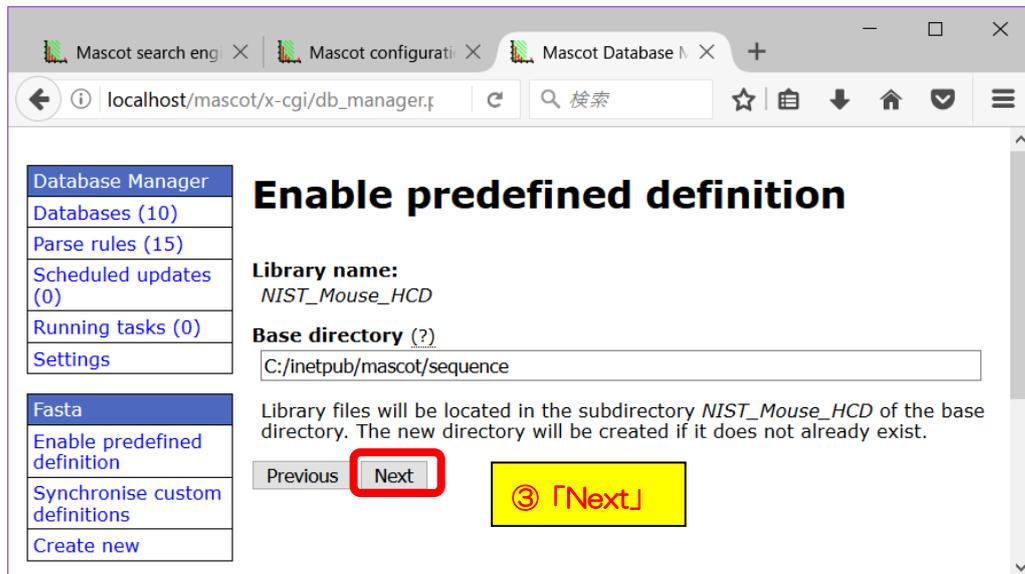
よく使用される公開データベースについては、あらかじめMASCOT側で様々な設定を施した定義（predefined definition）を準備しています。これらのデータベースを新たに使用する時にこの選択項目をご利用ください。Predefined definition にないデータベースを使用したい場合、またはpredefined definitionにあるデータベースだが、名称を変えたい場合などは後述のP.68 ～「template」をご覧ください。

「**Enable predefined definition**」では、NISTやPRIDEで公開されている代表的な生物種についてのライブラリを使用することができます。使用したいデータベースについて、「**Enable**」ボタンを押してください（下図）。ファイルのダウンロードなどすべて自動的に行われます。

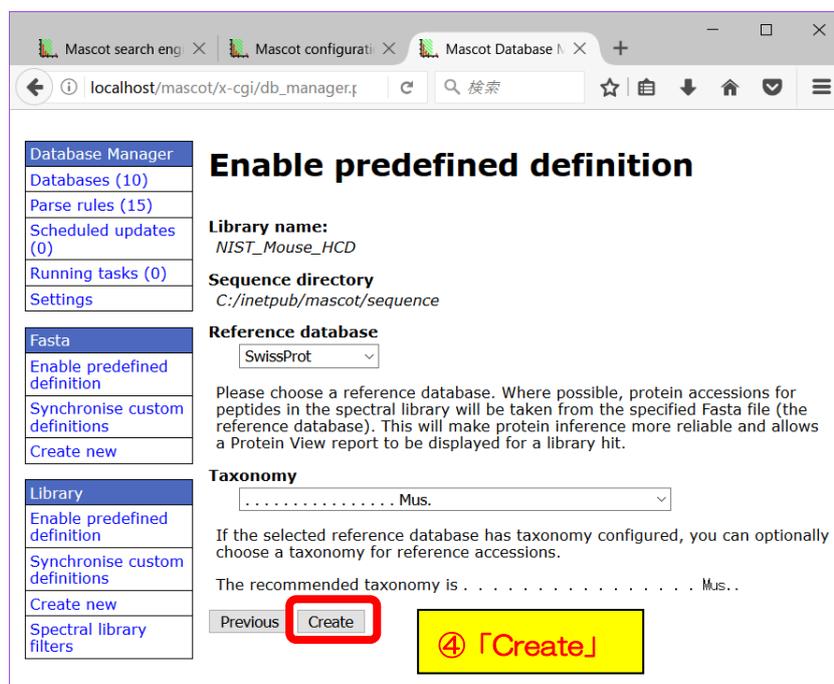
The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The main heading is "Enable predefined library definition". Below the heading, there is a table of predefined libraries. The table has two columns: "Name" and "Enable". The "Enable" column contains buttons for each library. The "Enable predefined definition" link in the left sidebar is highlighted with a red box. The "Enable" button for "NIST\_Mouse\_HCD" is also highlighted with a red box. Two yellow callout boxes provide instructions: ① 「Enable predefined definition」をクリックし (Click 'Enable predefined definition') and ② 使用したいデータベースの「Enable」ボタンを押す (Press the 'Enable' button for the database you want to use).

Name	Enable
NIST_BSA_IonTrap	Enable
NIST_C.elegans_IonTrap	Enable
NIST_Chicken_IonTrap	Enable
NIST_D.rerio_IonTrap	Enable
NIST_Drosophila_IonTrap	Enable
NIST_E.coli_IonTrap	Enable
NIST_HSA_IonTrap	Enable
NIST_Human_HCD	Enable <small>Already set up as NIST_Human_HCD.</small>
NIST_Mouse_HCD	Enable
NIST_Mouse_HCD_iTRAQ	Enable

配列データベースファイルの置き場所を「**Base directory**」で確認し必要があれば変更します。確認後、「**Next**」ボタンを押します。



参照する配列データベースと、ライブラリの生物種を指定します。通常はデフォルト設定のままにしておいてください。設定に問題がなければ「**Create**」ボタンを押します。



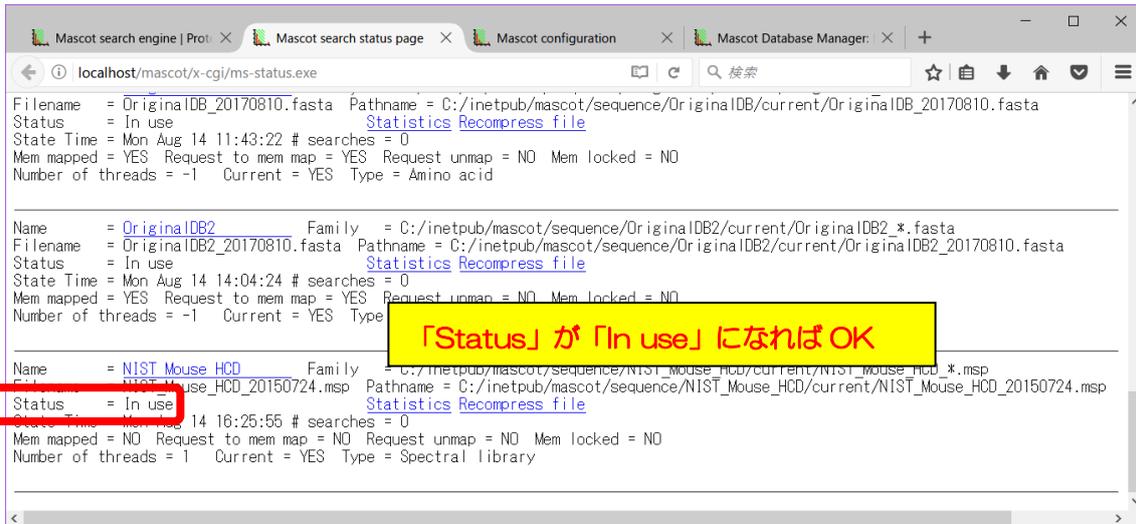
ファイルのダウンロードが開始されます。続いて、データベースの定義に関するSummaryが表示されます。この段階で既に該当データベースがMASCOTにて使用対象のデータベースとして認識されていますが、使用可能となるにはバックグラウンドで実行が開始されたデータベースファイルの取得とそのファイルをもとにしたMASCOT用データベースの構築の完了が必要です。データベースファイル取得状況を確認したい場合は、ハイパーリンクの「**the task queue**」をクリックします。

The screenshot shows a web browser window with the URL `localhost/mascot/x-cgi/db_manager.php`. The main content area is titled "Database: NIST\_Mouse\_HCD" and includes several sections:

- Database Manager**: A sidebar menu with links for Databases (11), Parse rules (15), Scheduled updates (0), Running tasks (1), and Settings.
- Fasta**: A sidebar menu with links for Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, and Create new.
- Library**: A sidebar menu with links for Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new, and Spectral library filters.
- Database configuration details**:
  - Name**: `NIST_Mouse_HCD`
  - Using predefined definition**: `NIST_Mouse_HCD`, Configuration last updated Mon May 22 14:16:08 2017.
  - Database type**: Spectral library
  - Database directory**: `C:/inetpub/mascot/sequence/NIST_Mouse_HCD/current`
  - Filename pattern**: `NIST_Mouse_HCD_*.msp`
- About to download or copy files**:
  - Database files need to be downloaded or copied before database configuration can be completed.
  - Download task is in queue position **1**; waiting for downloading to start. See [the task queue](#) for more details. (Download task added Mon Aug 14 16:21:42 2017.)

A red box highlights the [task queue](#) link in the text. A yellow box contains the Japanese text: **データベースダウンロード進捗確認は「the task queue」**

またファイル取得後の、MASCOT用データベース構築状況の確認については、「Database Status」にて確認します。該当データベースのStatus項目が “**In Use**”となれば構築が完了し検索可能となります。



## ▼ Synchronise custom definitions

「**Synchronise custom definitions**」は、既存のライブラリの中で predefined definitionのエントリーと一致度が高いライブラリが存在する時、定義内容を predefined definitionの内容に変更するオプションです。以前自分で作成したライブラリが predefined definitionとして登録されている場合、そちらに変更した方が今後ファイルの取得先やファイルフォーマットが変わった際にMASCOT側が自動的に対応し設定変更をしてくれます。ただし候補として表示する内容が必ずしも正しいわけではありません。あくまでも抜き出しルールやファイルフォーマットの一致度から判断されている内容ですのでその点ご注意ください。

## ▼ Create new

新規のライブラリ作成方法には、前出の「predefined definition」を使用する方法を含め 5 つの方法があります。

### 【新規ライブラリを追加する5つの方法】

#### 1. 【predefined database definition】 P. 53～

既出。すべての設定がひとまとめになった組み合わせをそのまま使用。ファイル設置場所を除き各種設定の変更ができない。

\* NIST\_Human\_HCD、PRIDE\_Human など

#### 2. 【template】 P. 58～

上記項目 1 の「predefined definition」を使用するが、ライブラリの名称は変更。

\* 1. 【predefined database definition】でリストアップされたデータベースと設定の中身は同じだが、日付・バージョンを固定する場合など

#### 3. 【copy】 P. 64～

既にお手元の MASCOT で使用しているライブラリ設定をベースに、名前を変更して利用

\* 出発点が predefined のリストからでなく既に使用中のライブラリを使用する。コピー元のデータベースで利用されている msp ファイルをコピーして利用するかどうか選べる。既存データベースの異なるバージョンを複数登録したり、単純な抽出ルールのオリジナルデータベースを作成したりする場合の利用等を想定

#### 4. 【Custom】 P. 71～

完全に自分で各設定を記入・選択

\* 1～3以外、自分で作成した msp ファイルなどの利用を想定。あるいはご自身の検索結果から抽出した結果のライブラリ

#### 5. 【Create from search results】 P. 83～

これまで MASCOT Server で行った FASTA 検索結果をライブラリとして使用

\* 同定タンパク質のターゲットがある程度固定されている場合の利用を想定。

次頁以降、各方法について説明しています。

## - 2. 【template】

### predefined definitionを利用するが、名前のみ変更して利用

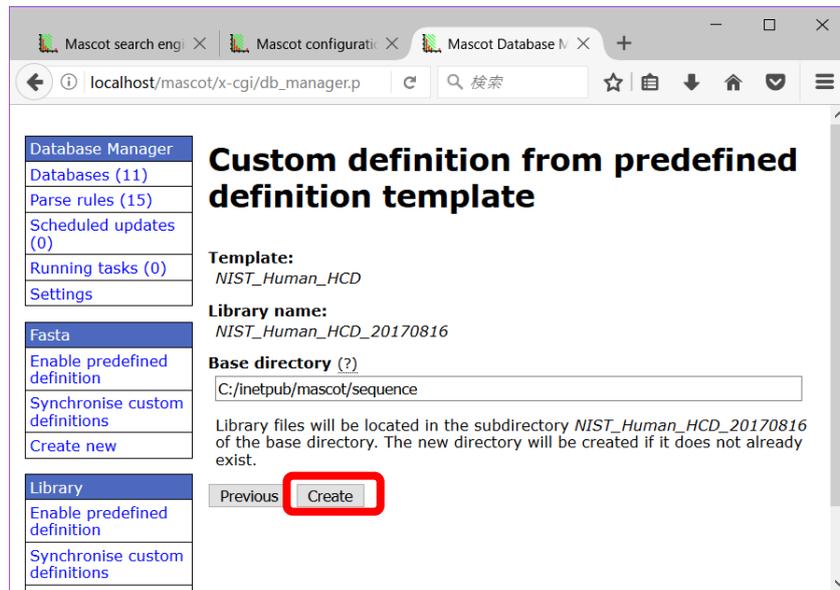
template 利用は、抜き出しルールなどのフォーマットとしてMASCOTが準備しているセット「predefined definition」をテンプレートとして使うものの、ライブラリの名称を変更して利用する方法です。主にpredefinedのバージョン違いをセットしたい場合に利用します。例として、**NIST\_Human\_HCD** でバージョン(日付)を固定したライブラリの例で説明します。

左フレームの「Library」以下にある「**Create new**」ボタンを押します。続いて現れる画面で、「Library name」にデータベースの名称を入力します。さらにデータベース作成方法の中で「**Use predefined definition template**」を選び、使用したいテンプレートを 選択して「**Next**」ボタンを押します。

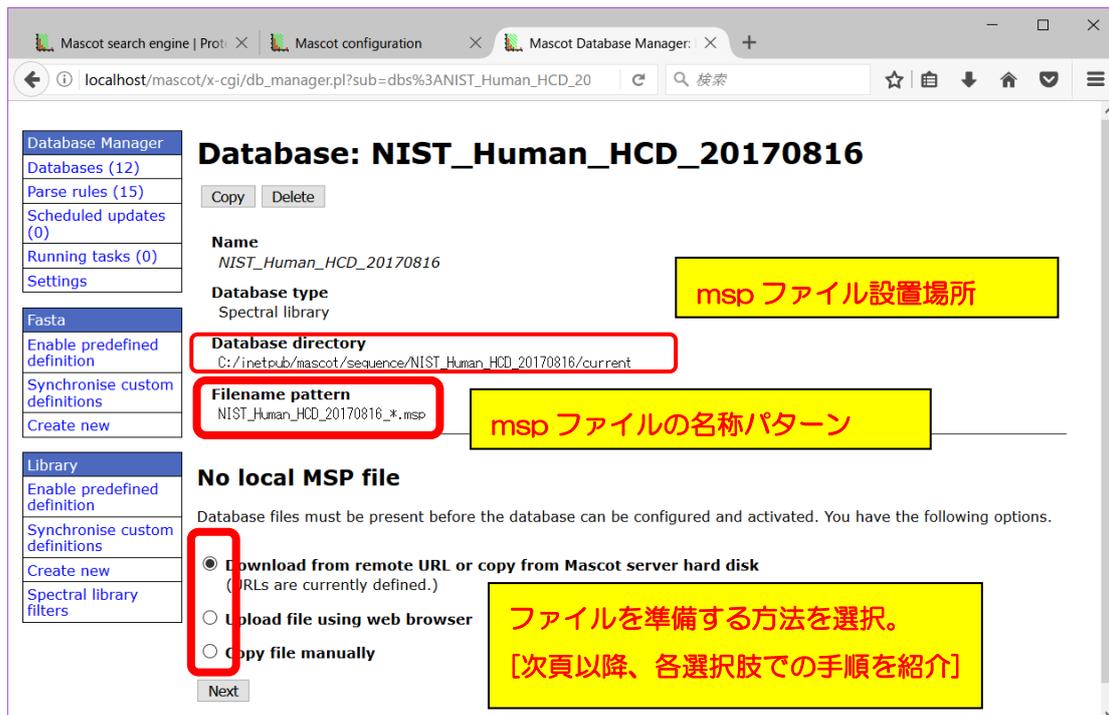
② 現れる画面で、Library の名称を入力する。続けて「Use predefined definition template」で「NIST\_Human\_HCD」を選択し、「Next」ボタンを押す。

① 「Create new」ボタンを押す。

続いて現れる画面で、mspファイルの置かれる場所を確認し「Create」ボタンを押します。



この時点ではmspファイルが所定の場所に置かれておらず、Inactive なデータベースとしてMASCOT側に登録されています。



使用するためには別途取得したファイルを指定のファイル名に変え、指定のフォルダに設置した上でActivateする必要があります。ファイルを設置する方法には以下の3つあります。

1. URLを指定しファイルを取得
2. WEBブラウザ経由で手元のfastaファイルをサーバーに送る
3. サーバー上の所定のフォルダにファイルを直接設置

以降、各ファイル設置方法について説明します。

### 【1.ファイルの設置方法で「Download from remote URL～」を選択した場合】

mspファイルが設置されているURLを指定します。遷移した画面で、必要に応じて「**Edit download URLs**」ボタンを押してファイル接続先を編集した後、「**Start downloading**」ボタンを押してファイルを取得します。取得後はP.63以降の操作を実施してください。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface for a database named "NIST\_Human\_HCD\_20170816". The interface includes a sidebar with navigation options like "Database Manager", "Fasta", and "Library". The main content area shows the database name, type (Spectral library), and directory. Below this, there is a section for "Download files from URL or copy from Mascot Server disk" which includes a "FASTA file URL" field with a value starting with "ftp://chemdata.nist.gov/download/pep...", a red-bordered "Edit download URLs" button, and a "Filename pattern" field with a value "NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp" and a red-bordered "Edit filename pattern" button. At the bottom, there is a "Start downloading" button. Two yellow callout boxes provide instructions: the first points to the "Edit download URLs" button with the text "① 必要に応じて msp ファイルの取得先を編集" and the second points to the "Start downloading" button with the text "② 「Start downloading」ボタンを押し、ファイルの取得を開始".

## 【2.ファイルの設置方法で「Upload file using web browser」を選択した場合】

遷移後の画面（下図）でmspファイルを選択する画面が現れます。「MSP file to upload」にある「参照」ボタンを押し、使用するMSPファイルを選んで、「Upload」ボタンを押してファイルをアップロードしてください。設置後はP.63以降の操作を実施してください。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface for the database 'NIST\_Human\_HCD\_20170816'. The 'MSP file to upload' section is highlighted, showing a file selection button labeled '参照...' (Reference...) and an 'Upload' button. Two yellow callout boxes provide instructions: ① 「参照」ボタンを押してアップロードするファイルを選び、 (Select the file to upload by clicking the 'Reference' button) and ② 「Upload」ボタンを押します。 (Click the 'Upload' button).

### 【3.ファイルの設置方法で「copy file manually」を選択した場合】

「Database directory」で指定されているフォルダ、例では

C:\inetpub\mascot\sequence\NIST\_Human\_HCD\_20170816\current

に、ダウンロードしたファイルを設置し、名称を「Filename pattern」で指定された形に書き換えます。但し名称中の「\*」部分は任意の文字列、例えばダウンロード日などに変更します。設置後はP.63以降の操作を実施してください。

**Database: NIST\_Human\_HCD\_20170816**

Copy Delete

Name  
NIST\_Human\_HCD\_20170816

Database type  
Spectral library

**Database directory**  
C:/inetpub/mascot/sequence/NIST\_Human\_HCD\_20170816/current

Filename pattern  
NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp

**Copy files manually**

Filename pattern  
NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp

Please,

1. copy the MSP file to C:/inetpub/mascot/sequence/NIST\_Human\_HCD\_20170816/current;
2. rename the file to match the filename pattern, e.g. NIST\_Human\_HCD\_20170816\_20170821.msp (in the pattern, \* matches any string of characters);
3. and refresh this page to update the database.

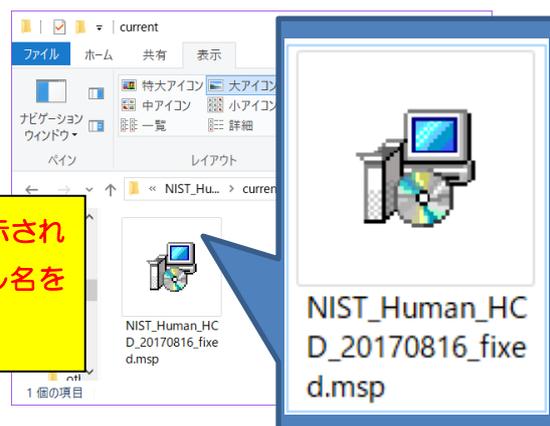
Previous Refresh

ファイル名変更例)

NIST\_Human\_HCD\_20170816\_fixed.fasta

(\*はファイル名に書かない事)

②補足 ファイルをコピーし、指示されたパターンに合うようにファイル名を変更。



## 【ファイル設置後の操作】

ファイルを所定の方法でフォルダに設置すると、mspファイルが自動的に認識され、画面が変化します。「**Activate**」ボタンを押せば、ライブラリデータベース構築が開始されます（下図、上）。ライブラリの構築状況は「Database Status」（MASCOT のHome画面→ Database Status リンク）画面でご確認ください（下図、下）。ターゲットライブラリの status項目が “**in use**” となれば構築完了です。

The top screenshot shows the 'Database Manager' interface for the database 'NIST\_Human\_HCD\_20170816'. The 'Database status' is 'Offline', and the 'Activate' button is circled in red. A yellow box highlights the 'Files' section with the text 'ファイル名が認識されたら「Activate」'.

The bottom screenshot shows the 'Database Status' page. The 'NIST\_Human\_HCD\_20170816' entry is circled in red, and a yellow box highlights the text 'Database Status 画面で データベース構築確認'.

### 3. 【copy】

既にお手元の **MASCOT** で使用しているライブラリ設定をベースに名前を変更して使用

copy 利用は、設定ファイル内のテンプレートからでなく、既に利用しているライブラリの中からベースとする設定を選んでデータベース構築を行います。例えば既存ライブラリの異なるバージョンを複数登録したり、単純な抽出ルールのオリジナルデータベースを作成したりする場合の利用等を想定しています。

copyを利用してライブラリを新規作成する方法をご案内いたします。**例として、NIST\_Human\_HCD でバージョン(日付)を固定したデータベースの作成手順を説明します。**

左フレームの「Library」以下にある「**Create new**」ボタンを押します（下図）。続いて現れる画面で、「**Library name**」にデータベースの名称を入力します。また、データベース作成方法の中で「Copy of」を選び、ベースとして利用したい既存ライブラリ（例ではNIST\_Human\_HCD）を選択して「**Next**」ボタンを押します。

The screenshot shows the 'New spectral library definition' page in the Mascot Database Manager. The left sidebar has a 'Library' section with a 'Create new' button highlighted by a red box and labeled ①. The main form has a 'Library name (?)' field with 'NIST\_Human\_HCD\_20170816'. Below it, the 'Copy of (?)' radio button is selected and highlighted with a red box, with 'NIST\_Human\_HCD' selected in the dropdown menu. The 'Next' button is also highlighted with a red box. A yellow callout box labeled ② explains that 'Copy of' should be selected with 'NIST\_Human\_HCD' and the 'Next' button pushed.

次に現れる画面では、a.ライブラリファイルの設置場所 と、b.コピー元のmspファイルを新規データベースでもコピーして利用するかどうか の2つを設定します。設定後、「**Create**」ボタンを押してライブラリ設定を作成します（下図）。

**Database Manager**

- Databases (11)
- Parse rules (15)
- Scheduled updates (0)
- Running tasks (0)
- Settings

**Fasta**

- Enable predefined definition
- Synchronise custom definitions
- Create new

**Library**

- Enable predefined definition
- Synchronise custom definitions
- Create new
- Spectral library filters

## Copy an existing definition

**Copy of:**  
NIST\_Human\_HCD

**Library name:**  
NIST\_Human\_HCD\_20170816

**Base directory (?)**  
C:/inetpub/mascot/sequence

Library files will be located in the subdirectory *NIST\_Human\_HCD\_20170816* of the base directory. The new directory will be created if it does not already exist.

**Existing NIST\_Human\_HCD files:**  
NIST\_Human\_HCD\_20160504.msp

**Copy files also (?)**  
 **Don't copy files (?)**

If you have chosen to copy files from the base definition, please do not close the browser or refresh this page after clicking Create. Copying may take some time if the files are large.

Previous **Create**

③ コピー元のデータベースの msp ファイルをそのまま使うか選択する

④ 各種設定を確認し、「Create」ボタンを押す

### (Copy files also を選んだ場合)

元のライブラリと同じmspファイルが current フォルダ以下にコピーされます。以降の手順については、**P.70**～をご覧ください。

### (Don't copy files を選んだ場合)

この時点ではmspファイルが所定の場所に置かれておらず、Inactive なライブラリとして MASCOT側に登録されています。使用するためには別途取得したファイルを指定のファイル名に変えてから指定のフォルダに設置した上でActivateする必要があります。ファイルを設置する方法には次頁の3つの方法があります。

1. URLを指定しファイルをダウンロードして取得
2. WEBブラウザ経由で手元のfastaファイルをサーバーに送る
3. サーバー上の所定のフォルダにファイルを直接設置

以降、各ファイル設置方法について説明します。

The screenshot shows the Mascot Database Manager configuration page for the database 'NIST\_Human\_HCD\_20170816'. The page is divided into several sections:

- Database Manager:** Includes links for Databases (12), Parse rules (15), Scheduled updates (0), Running tasks (0), and Settings.
- Fasta:** Includes links for Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, and Create new.
- Library:** Includes links for Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new, and Spectral library filters.

The main configuration area includes:

- Database: NIST\_Human\_HCD\_20170816** (with Copy and Delete buttons)
- Name:** NIST\_Human\_HCD\_20170816
- Database type:** Spectral library
- Database directory:** C:/inetpub/mascot/sequence/NIST\_Human\_HCD\_20170816/current (highlighted with a red box and labeled 'msp ファイル設置場所')
- Filename pattern:** NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp (highlighted with a red box and labeled 'msp ファイルの名称パターン')
- No local MSP file:** Database files must be present before the database can be configured and activated. You have the following options.
  - Download from remote URL or copy from Mascot server hard disk (URLs are currently defined.)
  - Upload file using web browser
  - Copy file manually

A 'Next' button is located at the bottom of the configuration area.

## 【1.ファイルの設置方法で「Download from remote URL～」を選択した場合】

mcpファイルが設置されているURLを指定します。遷移した画面で、必要に応じて「**Edit download URLs**」ボタンを押してファイル接続先を編集した後、「**Start downloading**」ボタンを押してファイルを取得します（下図）。ファイル取得後はP.70～の操作を行います。

**Database: NIST\_Human\_HCD\_20170816**

Name: *NIST\_Human\_HCD\_20170816*

Database type: Spectral library

Database directory: C:/inetpub/mascot/sequence/NIST\_Human\_HCD\_20170816/current

Filename pattern: NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp

**Download files from URL or copy from Mascot Server disk**

FASTA file URL: ftp://chemdata.nist.gov/download/pep/.../human\_hcd\_selected.msp.tar.gz

**Edit download URLs**

Filename pattern: NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp

**Edit filename pattern**

The downloaded files will be renamed...

**Start downloading**

① 必要に応じて msp ファイルの取得先を編集

② 「Start downloading」ボタンを押し、ファイルの取得を開始

## 【2.ファイルの設置方法で「Upload file using web browser」を選択した場合】

遷移後の画面（下図）でmspファイルを選択する画面が現れます。「**MSP file to upload**」の「参照」ボタンをクリックして、使用するMSPファイルを選び、「**Upload**」ボタンを押せばOKです。アップロード前にmspファイル名をfilename pattern通りにしなくとも、MASCOT側で自動的に合う名称に変更されます。

ファイル設置後はP.70~の操作を行います。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The browser address bar indicates the URL is localhost/mascot/x-cgi/db\_manager.pl?dbs.file-source=uplc. The main content area is titled 'Database: NIST\_Human\_HCD\_20170816' and includes fields for Name, Database type (Spectral library), Database directory, and Filename pattern. Below this is the 'Upload MSP file' section, which includes a note about large files and a 'Filename pattern' field. Two yellow callout boxes with red text provide instructions: ① 「参照」ボタンを押してアップロードするファイルを選び、 and ② 「Upload」ボタンを押します。 The '参照...' button and the 'Upload' button are circled in red in the screenshot.

### 【3.ファイルの設置方法で「copy file manually」を選択した場合】

「**Database directory**」で指定されているフォルダ、例では

C:\inetpub\mascot\sequence\NIST\_Human\_HCD\_20170816\current

に、予め準備したmspファイルを設置し、名称を「**Filename pattern**」で指定された形に書き換えます。但し名称中の「\*」部分は任意の文字列、例えばダウンロード日などに変更します。ファイル取得後はP.70～の操作を行います。

**Database: NIST\_Human\_HCD\_20170816**

Copy Delete

Name  
NIST\_Human\_HCD\_20170816

Database type  
Spectral library

**Database directory**  
C:/inetpub/mascot/sequence/NIST\_Human\_HCD\_20170816/current

**Filename pattern**  
NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp

**Copy files manually**

**Filename pattern**  
NIST\_Human\_HCD\_20170816\_\*.msp

Please,

1. copy the MSP file to C:/inetpub/mascot/sequence/NIST\_Human\_HCD\_20170816/current;
2. rename the file to match the filename pattern, e.g. NIST\_Human\_HCD\_20170816\_20170821.msp (in the pattern, \* matches any string of characters);
3. and refresh this page to update the database.

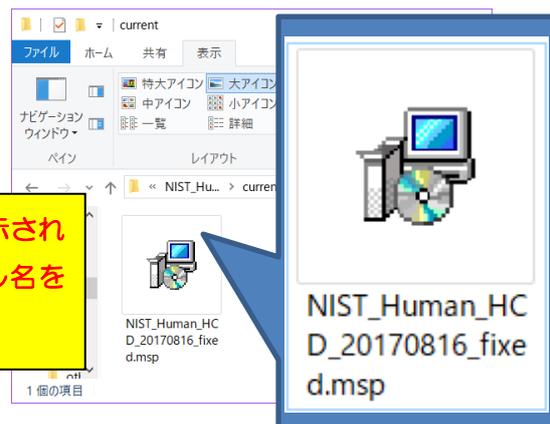
Previous Refresh

ファイル名変更例)

NIST\_Human\_HCD\_20170816\_fixed.fasta

(\*はファイル名に書かない事)

②補足 ファイルをコピーし、指示されたパターンに合うようにファイル名を変更。



## 【ファイル設置後の操作】

ファイルを所定の方法でフォルダに設置すると、mspファイルが自動的に認識され、画面が変化します。「**Activate**」ボタンを押せば、ライブラリ構築が開始されます（下図）。データベースの構築状況は「Database Status」画面（MASCOT のHome画面→Database Status リンク）でご確認ください。目的のライブラリについて、status 項目が“**in use**”となれば構築完了です。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The main content area displays details for the database 'NIST\_Human\_HCD\_20170816'. The 'Database status' is 'Offline', and the 'Activate' button is circled in red. A yellow box highlights the text 'ファイル名が認識されたら「Activate」'.

The screenshot also shows the 'Database Status' page, which displays the status of various databases. The 'NIST\_Human\_HCD\_20170816' database is highlighted with a red box, and a yellow box highlights the text 'Database Status 画面で データベース構築確認'.

```
Name = PRIDE_Contaminants Family = C:/inetpub/mascot/sequence/PRIDE_Contaminants/current/PRIDE_Contaminants_*.msp
Filename = PRIDE_Contaminants_20160908.msp Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/PRIDE_Contaminants/current/PRIDE_Contaminants_20160908.msp
Status = In use
State Time = Wed Aug 16 09:57:56 # searches = 0
Mem mapped = NO Request to mem map = NO Request unmap = NO Mem locked = NO
Number of threads = 1 Current = YES Type = Spectral library

Name = SwissProt Family = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt_*.fasta
Filename = SwissProt_2017_05.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current/SwissProt_2017_05.fasta
Status = In use
State Time = Wed Aug 16 09:57:56 # searches = 0
Mem mapped = YES Request to mem map = YES Request unmap = YES Mem locked = YES
Number of threads = -1 Current = YES Type = Amino acid

Name = NIST_Human_HCD_20170816 Family = C:/inetpub/mascot/sequence/NIST_Human_HCD_20170816/current/NIST_Human_HCD_20170816_*.msp
Filename = NIST_Human_HCD_20170816_fixed.msp Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/NIST_Human_HCD_20170816/current/NIST_Human_HCD_20170816_fixed.msp
Status = Creating compressed files 12% complete
State Time = Mon Aug 21 11:29:11 # searches = 0
Mem mapped = NO Request to mem map = NO Request unmap = NO Mem locked = NO
Number of threads = 1 Current = NO Type = Spectral library
```

#### - 4. 【Custom】

完全に自分で各設定を記入・選択

1~3 で挙げたライブラリの設定方法は、基本的に名前とファイルの設置場所以外を変更する事ができません。既存のデータベースのルールで当てはまらない抜き出しルールの組み合わせを適用する必要がある場合、本項目「Custom」を利用します。例では「**OriginalSL**」というライブラリを作成するケースとして紹介します。

Database manager の、左フレーム「Library」→「**Create new**」を選びます（下図）。 現れた画面で「Database name」にデータベースの名称を入力し、「**New custom definition**」を選びます。選択後、「**Next**」を押します。

Mascot Database Manager

logsgatos/mascot/x-cgi/db\_manager.pl?dbs.new.base\_path=C%3A%A%2Ffinetpub%2Fmasco...

### New spectral library definition

Database Manager

- Databases (10)
- Parse rules (15)
- Scheduled updates (0)
- Running tasks (0)
- Settings

Fasta

- Enable predefined definition
- Synchronise custom definitions
- Create new

Library

- Enable predefined definition
- Synchronise custom definitions
- Create new
- Spectral library filters

Library name (?)

Copy of (?)

NIST\_Human\_HCD

Use predefined definition template (?)

NIST\_Human\_HCD

**New custom definition (?)**

Create from search results

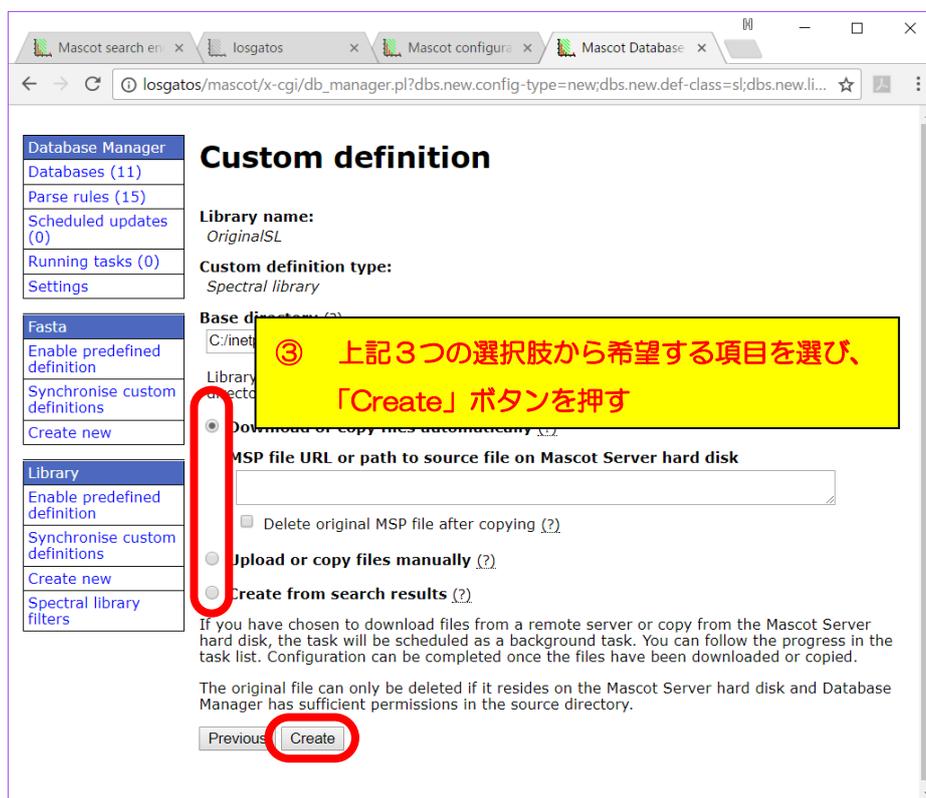
Next

② ライブラリの名称を入力、「New custom definition」を選んで「Next」

① 「Create new」リンクをクリック

続いて、mspファイルの置き場所とmspファイルの準備の仕方について設定する画面が現れます。mspファイルを準備する方法には次の3つあります。

1. URLを指定しファイルをダウンロード、あるいはpathを指定してファイルをコピー
2. WEBブラウザ経由で手元のmspファイルをアップロード、あるいは指定フォルダにファイルを直接置く
3. fastaデータベースの検索結果から条件に合う結果を抽出しライブラリにする



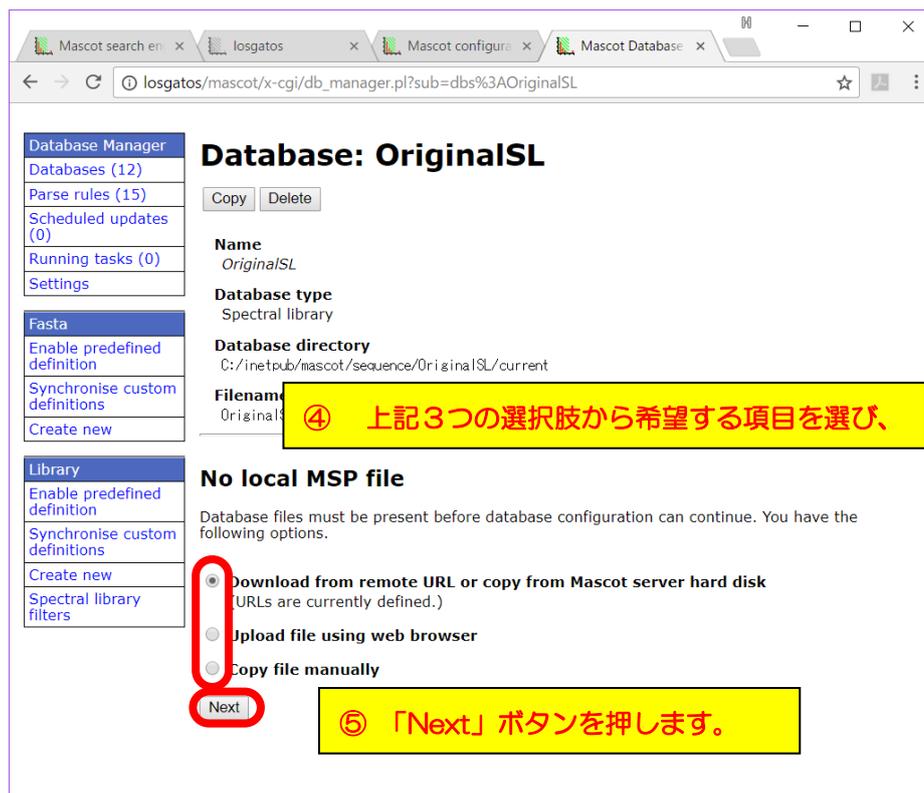
上記3択から選択し「**Create**」ボタンを押すことで次の課程に進みます。前述の選択肢1,2については選択後に（Createボタンを押して）遷移する画面が同じ、mspファイルを準備する方法について、さらに3つの選択肢（次項、先頭3行）が現れます。

1-1. URLを指定しファイルをダウンロード、あるいはpathを指定してファイルをコピー

2-1. WEBブラウザ経由で手元のmspファイルをアップロード

2-2. フォルダにファイルを置く

以降、これら各ファイル準備方法について説明します。



【1-1. 「Download from remote URL or copy from Mascot server hard disk」を選択した場合】

利用するファイルの場所を指定し、コピーなどは自動的に行う設定です。「**Edit download URLs**」をクリックし、遷移した画面でファイルの場所を指定します（次頁図）。公共サイトなどから取得する場合はURLを、MASCOT Server上のローカルコンピュータからコピーする場合はファイルのpathを記入します。記入後、Save ボタンを押して元の画面に戻り、「**Start downloading**」ボタンを押します。ダウンロード後はP.77～の操作を行います。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The top part displays the 'Database: OriginalSL' configuration page. The left sidebar contains navigation menus for 'Database Manager', 'Fasta', and 'Library'. The main content area shows the database name 'OriginalSL', its type 'Spectral library', and its directory 'C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalSL/current'. The 'FASTA file source path' is set to 'C:/inetpub/mascot/sequence/PRIDE\_Contaminants/current/PRIDE\_Contaminants\_20160908.msp'. A red box highlights the 'Edit download URLs' button. A yellow callout box with a red arrow points to this button, containing the text: ① 「Edit download URLs」を押し、.

Below this, the 'Filename pattern' is 'OriginalSL\_\*.msp', with an 'Edit filename pattern' button. A note states: 'The downloaded files will be renamed to match the filename pattern.' A red box highlights the 'Start downloading' button. A yellow callout box with a red arrow points to this button, containing the text: ③ 元の画面に戻ったのちに「Start downloading」を押してダウンロード/コピーを実施する.

The bottom part of the screenshot shows the 'Library configuration: OriginalSL' page. The 'Main file URL or path to source file on Mascot Server hard disk' is the same path as above. A checkbox for 'Delete original file after updating' is present. A note states: 'The original file can only be deleted if Database Manager has sufficient permissions.' A red box highlights the 'Save' button. A yellow callout box with a red arrow points to this button, containing the text: ② 入力欄に、ダウンロードであれば URL を、コピーであれば path を記入して「Save」.

## 【2-1. ファイルの設置方法で「upload file using web browser」を選択した場合】

手元にあるファイルをウェブブラウザのアップロード機能を通じてMASCOT Server へ置きます。”MSP file to upload “の「ファイルを選択」ボタンを押し、ライブラリに使用するmspファイルを選択します。この時名称は必ずしも「Filename pattern」の記述の通りでなくとも自動的に修正されます。

元の画面に戻ってから「Upload」ボタンを押してください（下図）。ブラウザを通じてライブラリファイルがMASCOT サーバーにアップロードされます。ファイル設置後はP.77～の操作を行います。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The browser address bar indicates the URL: `logstos/mascot/x-cgi/db_manager.pl?dbs.file-source=upload&sub=dbs%3AOriginalSL`. The page title is "Database: OriginalSL".

On the left sidebar, there are sections for "Database Manager" (Databases (12), Parse rules (15), Scheduled updates (0), Running tasks (0), Settings), "Fasta" (Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new), and "Library" (Enable predefined definition, Synchronise custom definitions, Create new, Spectral library filters).

The main content area shows the following details for the "OriginalSL" database:

- Name:** OriginalSL
- Database type:** Spectral library
- Database directory:** C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalSL/current
- Filename pattern:** OriginalSL\_\*.msp

The "Upload MSP file" section contains the following elements:

- Text: "Please select the MSP file to upload." and "Note that if the file is large (more than 50 megabytes), it is better to transfer the file to the Mascot Server hard disk by some other means than uploading via web browser."
- Filename pattern:** OriginalSL\_\*.msp (with an "Edit filename pattern" button)
- MSP file to upload:** A button labeled "ファイルを選択" (Select file) is highlighted with a red box. The text "選択されていません" (Not selected) is next to it.
- Text: "The uploaded file will be renamed to match the filename pattern."
- Buttons: "Previous" and "Upload" (highlighted with a red box).

Two yellow callout boxes provide instructions:

- ① msp ファイルを選び、 (Select the msp file)
- ② Upload ボタンを押す (Press the Upload button)

## 【2-2. ファイルの設置方法で「copy file manually」を選択した場合】

「Database directory」で指定されているフォルダ、この例の場合

C:\inetpub\mascot\sequence\OriginalSL\current

に、準備したファイルを設置し、名称を「Filename pattern」で指定された形に書き換えます。但し名称中の「\*」部分は任意の文字列、例えばダウンロード日などに変更します。

ファイル設置後はP.77～の操作を行います。

Database Manager

Databases (12)

Parse rules (15)

Scheduled updates (0)

Running tasks (0)

Settings

Fasta

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Library

Enable predefined definition

Synchronise custom definitions

Create new

Spectral library filters

### Database: OriginalSL

Copy Delete

Name  
OriginalSL

Database type  
Spectral library

**Database directory**  
C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalSL/current

Filename pattern  
OriginalSL\_\*.msp

### Copy files manually

Filename pattern  
OriginalSL\_\*.msp

Edit filename pattern

Please,

1. copy the MSP file to C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalSL/current
2. rename the file to match the pattern, \* matches any string
3. and refresh this page to content

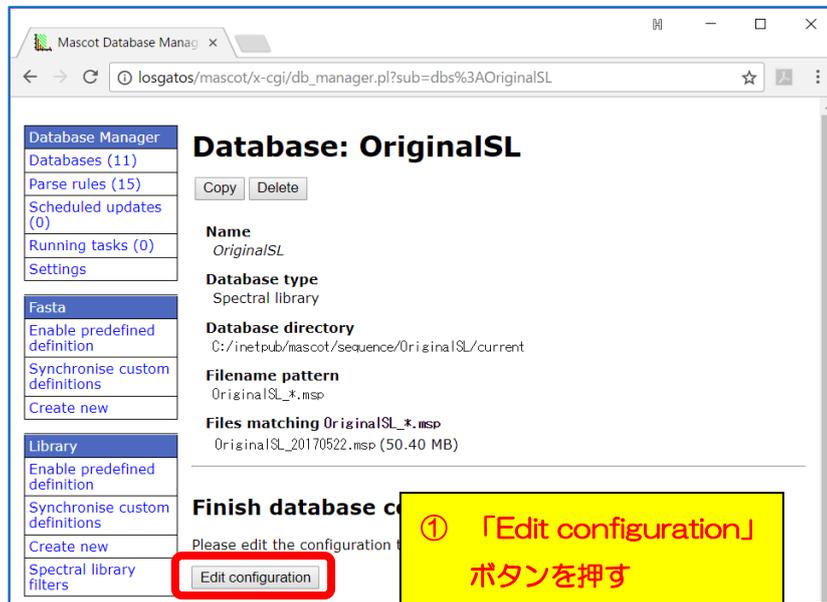
Previous Refresh

① msp ファイルを置く場所が指定。この場合、  
C:\inetpub\mascot\sequence\OriginalSL\current

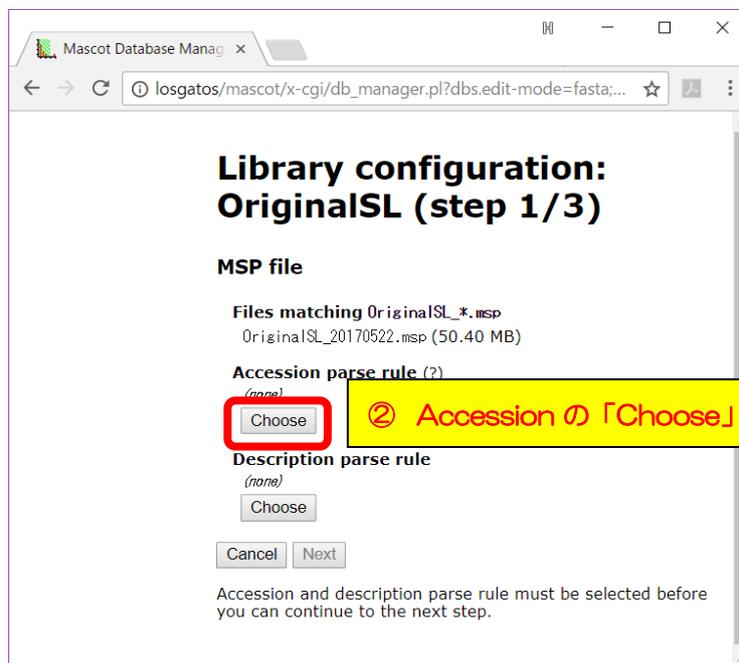
② 「Filename pattern」に指定された  
ルールでファイル名を決める。  
例)OriginalS+\_20170522.msp

## 【ファイルの設置後の操作】

FASTAファイルを正しい名称にして所定の場所に正しく置くと、Database Manager 画面でmspファイルが認識されます。設定をさらに進めるため、「**Edit Configuration**」ボタンを押します（下図）。



続いて、IDとDescription の抜き出しルール設定を行います。各々の抜き出しルール設定画面へ移行すると、MASCOT 側で候補となるルールを最大5つ選択しユーザーに提示します（下図）。



mascotファイル内のProtein項目の記述が取り出されたリストが提示されています。そこからAccessionについて最適な抜き出し方をしているルールを選択し、「**Choose**」ボタンを押します。

続いて現れる画面で最終的にルールを適用した場合のIDが5例表示されますので、問題がなければ「**Choose**」ボタンを押します（下図）。正しい設定項目が選択できた場合、P.79を飛ばし、P.80以降の操作を行ってください。正しい項目が選べなかった場合、P.79の操作を行います。

③ mascotファイル内各エントリーの「protein」項目がリストアップされている。

④ 「Extracted data」を見て、重複がなく自分が求めている抜き出し方をされているルールを選ぶ。

⑤ 最先頭の1エントリーだけで判断しづらい場合、「more matches」を展開して、他のエントリーの状況を確認する

⑥ 決まったら「Choose」

**Accession parse rule for OriginalSL**

Raw test data (10 samples)

```

1. sp|TRYP_PIG|
2. sp|GFP_AEQV1|
3. sp|K2M3_SHEEP|
4. sp|ALBU_BOVIN|
5. sp|K2C1_HUMAN|
6. sp|RS27A_HUMAN|
7. sp|MYG_HUMAN|
8. sp|EGF_HUMAN|
9. sp|FABPH_HUMAN|
10. sp|CATA_HUMAN|

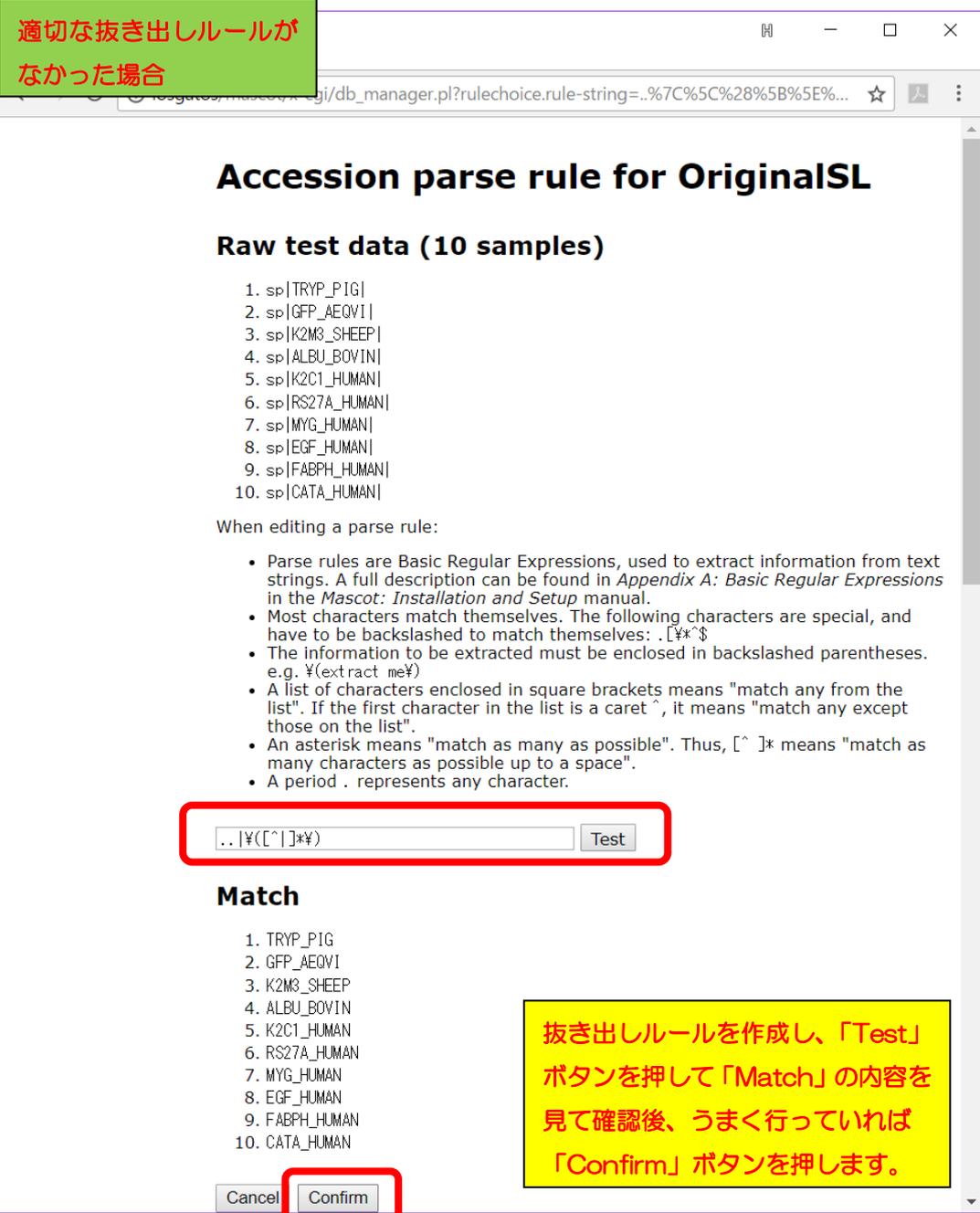
```

Parse rule	Match	Extracted data
<input type="radio"/> ¥(.*)	10/10	1. sp TRYP_PIG  ▶9 more matches
<input type="radio"/> ¥([^\ ]*)	10/10	1. sp TRYP_PIG  ▶9 more matches

► Unsuitable parse rules (48)

Cancel Create new parse rule **Choose**

最適な選択肢がない場合、「Create new parse rule」ボタンを押して、条件に合うルールを作成します。ルールは「正規表現」に基づく記述です。詳細はsetup & installation manual または弊社までお問い合わせください。作成後、ルールが問題ないかは「Test」ボタンを押し、「Match」を見て確認します。確認後問題がなければ、「Confirm」ボタンを押します（下図）。



適切な抜き出しルールがなかった場合

## Accession parse rule for OriginalSL

### Raw test data (10 samples)

1. sp|TRYP\_PIG|
2. sp|GFP\_AEQVI|
3. sp|K2M3\_SHEEP|
4. sp|ALBU\_BOVIN|
5. sp|K2C1\_HUMAN|
6. sp|RS27A\_HUMAN|
7. sp|MYG\_HUMAN|
8. sp|EGF\_HUMAN|
9. sp|FABPH\_HUMAN|
10. sp|CATA\_HUMAN|

When editing a parse rule:

- Parse rules are Basic Regular Expressions, used to extract information from text strings. A full description can be found in *Appendix A: Basic Regular Expressions* in the *Mascot: Installation and Setup* manual.
- Most characters match themselves. The following characters are special, and have to be backslashed to match themselves: `.[¥*^$`
- The information to be extracted must be enclosed in backslashed parentheses. e.g. `¥(extract me¥)`
- A list of characters enclosed in square brackets means "match any from the list". If the first character in the list is a caret `^`, it means "match any except those on the list".
- An asterisk means "match as many as possible". Thus, `[^ ]*` means "match as many characters as possible up to a space".
- A period `.` represents any character.

`..|¥([^\]|)*¥` Test

### Match

1. TRYP\_PIG
2. GFP\_AEQVI
3. K2M3\_SHEEP
4. ALBU\_BOVIN
5. K2C1\_HUMAN
6. RS27A\_HUMAN
7. MYG\_HUMAN
8. EGF\_HUMAN
9. FABPH\_HUMAN
10. CATA\_HUMAN

Cancel Confirm

抜き出しルールを作成し、「Test」ボタンを押して「Match」の内容を見て確認後、うまく行っていれば「Confirm」ボタンを押します。

同様の操作を「Description」でも実行します（下図）。実行後、「Next」ボタンを押します。

The screenshot shows the 'Description parse rule for OriginalSL' configuration page. It includes a list of raw test data, a table of suitable parse rules, and a section for unsuitable parse rules. The 'Choose' button is highlighted in red. Below the screenshot, a smaller window shows the 'MSP file' configuration screen, where the 'Next' button is also highlighted in red.

**Description parse rule for OriginalSL**

**Raw test data (10 samples)**

1. sp|TRYP\_PIG|
2. sp|GFP\_AEQV1|
3. sp|K2M3\_SHEEP|
4. sp|ALBU\_BOVIN|
5. sp|K2C1\_HUMAN|
6. sp|RS27A\_HUMAN|
7. sp|MYG\_HUMAN|
8. sp|ECGF\_HUMAN|
9. sp|FABPH\_HUMAN|
10. sp|CATA\_HUMAN|

**Suitable parse rules (3)**

Parse rule	Match	Extracted data
<input type="radio"/> .. ¥([^\] *¥)	10/10	1. TRYP_PIG ▶9 more matches
<input checked="" type="radio"/> ¥(. *¥)	10/10	1. sp TRYP_PIG  ▶9 more matches
<input type="radio"/> ¥([^\] *¥)	10/10	1. sp TRYP_PIG  ▶9 more matches

**▶ Unsuitable parse rules (48)**

Cancel Create new parse rule Choose

**MSP file**

**Files matching OriginalSL\_\*.msp**

OriginalSL\_20170522.msp (50.40 MB)

**Accession parse rule (?)**

..|¥([^\]|\*¥)

Choose

**Matches from OriginalSL\_20170522.msp:**

1. TRYP\_PIG
2. GFP\_AEQV1
3. K2M3\_SHEEP

**Description parse rule**

¥(. \*¥)

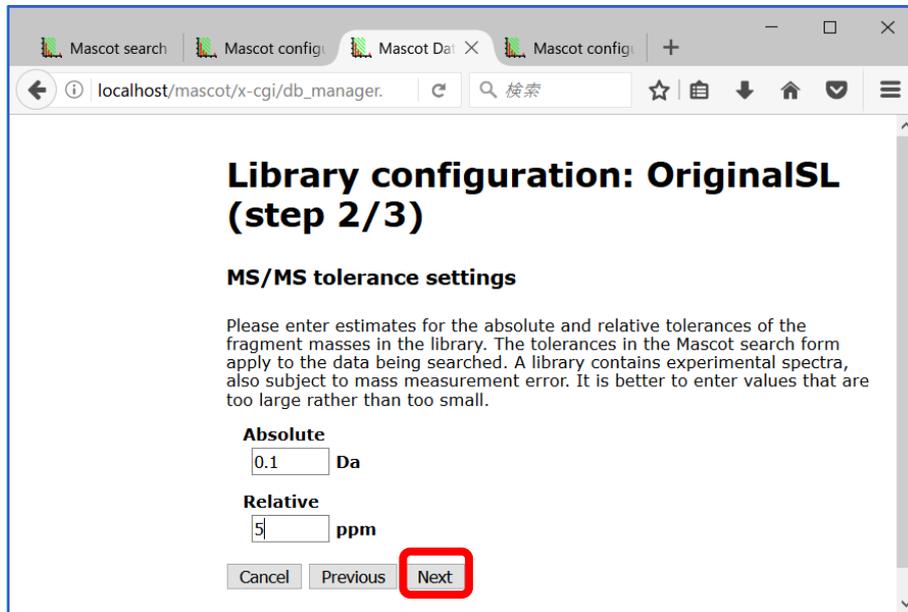
Choose

**Matches from OriginalSL\_20170522.msp:**

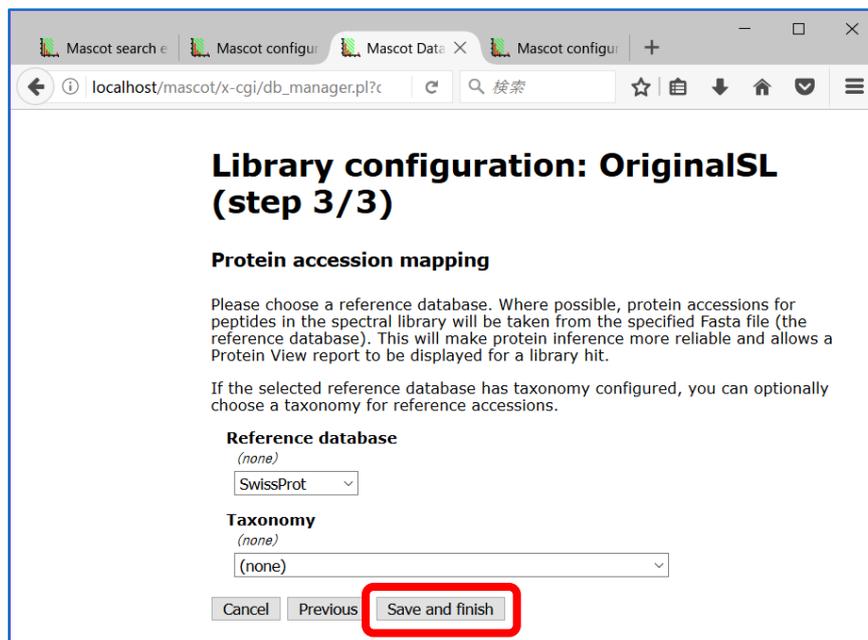
1. sp|TRYP\_PIG|
2. sp|GFP\_AEQV1|
3. sp|K2M3\_SHEEP|

Cancel Next

続いて、ピークリストの選出に利用する誤差範囲の設定を行います。検索パラメータとは別に、ピークリストデータベース側に予め行う設定です。誤差の絶対値を**Absolute** (Da)に、相対値を**Relative** (ppm)として入力し、「**Next**」ボタンを押します（下図）。



参照する配列データベースを定義します。通常はデフォルトである「SwissProt」を選びます。また生物種の設定も行います。すべて設定後、「**Save and finish**」ボタンを押します。



個別のライブラリデータベース設定画面に戻ります。Save直後では Active状態になっていないので、「**Activate**」ボタンを押せば、データベースの構築が開始され、検索に利用できるようになります（下図、上）。Database Status画面 (Home -> Database status)にて、新規に作成したライブラリのstatusが「**In use**」になると利用可能となります（下図、下）。

The screenshot shows the Mascot database manager interface. The main panel displays the configuration for the 'OriginalSL' database. The 'Database status' section shows 'Offline' and an 'Activate' button, which is highlighted with a red box. A yellow callout box points to this button with the text: 「Activate」 Database 構築開始.

Below the configuration page, a status log is visible. The log entry for 'OriginalSL' is highlighted with a red box. A yellow callout box points to the 'Status = In use' line with the text: 目的データベースの status 項目が「In use」となれば 使用可能.

```

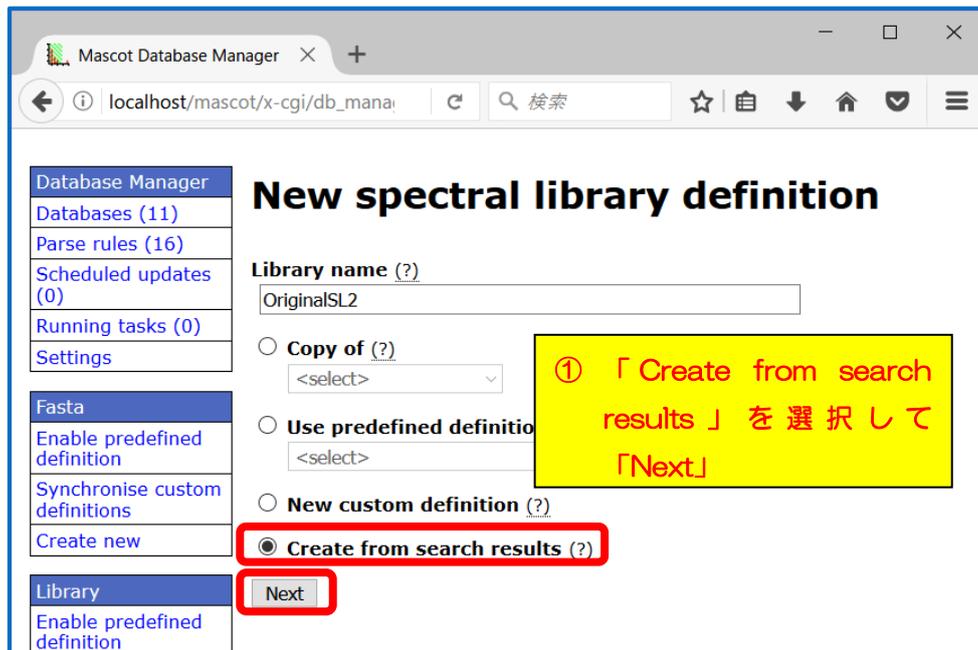
Name = SwissProt Family = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current
Filename = SwissProt_2017_05.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/SwissProt/current
Status = In use Status = In use
State Time = Tue Aug 22 16:50:56 # searches = 0
Mem mapped = YES Request to mem map = YES Request to mem map = YES
Number of threads = -1 Current = YES Type = Amino acid sequence

Name = OriginalSL Family = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalSL/current
Filename = OriginalSL_20170522.msp Pathname = C:/inetpub/mascot/sequence/OriginalSL/current
Status = Creating compressed files - 20% complete
State Time = Wed Aug 23 15:26:09 # searches = 0
Mem mapped = NO Request to mem map = NO Request to mem map = NO Mem locked = NO
Number of threads = 1 Current = NO Type = Spectral library

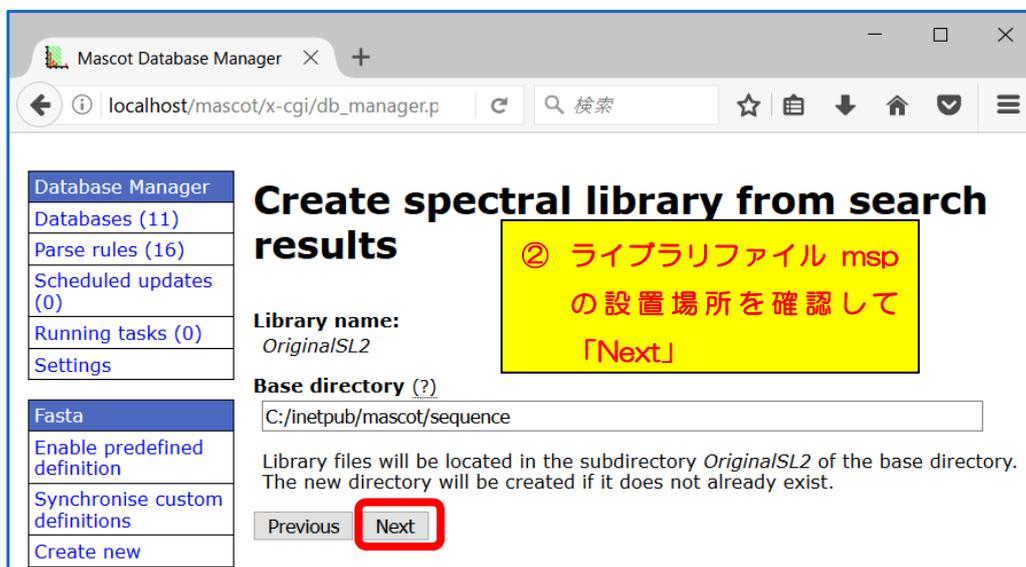
```

## 【ファイルの準備方法で「Create from search results」を選択した場合】

公開されたmspファイルを利用するのではなく、過去にご利用のMASCOT Serverで行ったfasta検索結果から抽出したピークリストをスペクトルライブラリにするには、「**Create from search results**」を選び、「**Next**」ボタンを押します（下図）。



ライブラリファイルの設置場所を定義し、「**Next**」ボタンを押します（下図）。



続いて、対応する配列データベースの選択と、ピークリストの選出に利用する誤差範囲の設定を行います。配列データベースと生物種については検索時に使用したパラメータとできるだけ同じものを選択してください。また誤差範囲は検索パラメータとは別にピークリストデータベース側に行う設定です。絶対値を**Absolute** (Da)に、相対値を**Relative** (ppm)に近似の値を入力し、「**Create**」ボタンを押します（下図）。

The screenshot shows the 'Create spectral library from search results' page in the Mascot Database Manager. The form contains the following fields and options:

- Library name:** OriginalSL2
- Sequence directory:** C:/inetpub/mascot/sequence
- Reference database:** SwissProt
- Taxonomy:** Homo sapiens (human)
- Fragment mass tolerance:** 0.6 Da
- Peptide mass tolerance:** 500 ppm
- Buttons:** Previous, Create

Two yellow callout boxes provide instructions:

- ③ 検索に利用した配列データベース・生物種が選択されているかを確認。
- ④ 検索時に指定した MS/MS tolerance に近い数字を、絶対/相対値で入力。

The 'Create' button is highlighted with a red box, and a yellow callout box ⑤ 設定内容を確認し、「Create」ボタンを押す。 points to it.

データベースの枠組み設定に続き、過去のfasta検索結果からライブラリとなるスペクトルデータを抽出する条件を指定します。「Edit filters」ボタンを押します（下図）。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface for the 'OriginalSL2' database. The left sidebar contains navigation menus for 'Database Manager', 'Fasta', and 'Library'. The main content area displays database details and a section titled 'Create MSP file from search results'. In this section, the 'Peptide match filters' are currently set to '(none)'. The 'Edit filters' button is highlighted with a red rectangular box. A yellow callout box with a red border and a circled '6' icon contains the Japanese text: 「Edit filters」ボタンを押す。

各種条件を指定します（下図並びに次項図）。

The screenshot shows the 'Peptide match filters for OriginalSL2' configuration page. It provides instructions on how to set filters, such as 'The library must have at least one score or expect value filter, typically expect < 0.01.' Below the text, there is a form with an 'Expect value' input field, a dropdown menu set to '<math>\leq</math>', and a text box containing '0.01'. The 'Expect value' input field is highlighted with a red rectangular box. A yellow callout box with a red border and a circled '7' icon contains the Japanese text: Expect value など、取り込みに使用する条件を指定してください。

**Peptide match filters for OriginalSL2**

The library must have at least one score or expect value filter, typically `expect < 0.01`.

Each individual filter is in a filter group. To add more filters to the group, use the OR button. To add more groups, use the AND button. The peptide match must pass all filter groups to be accepted, but within each group, only one filter needs to succeed.

To remove a filter, leave its value field empty. To remove a filter group, remove all its filters.

Filters are used in two complementary ways:

1. When Database Manager chooses results files to process, only files that might contain suitable peptide matches are included.
2. When Database Manager loops over peptide matches in a results file, only matches that pass the filter are imported to the library.

For example, if you have a filter DB = SwissProt and no other DB filters, then only results files that were searched against SwissProt are processed. (Or in a multi-database search, had SwissProt as one of the databases.) When Database Manager loops over its peptide matches, only those that actually come from SwissProt are imported.

Expect value

**AND**

Database name

⑧ AND/OR ボタンを使って、条件を組み合わせてください。

条件を作成したところで、論理的な矛盾がないかをテストするため「Test」ボタンを押します（下図）。画面下部に「**Test result**」の表示があり、緑字で「OK」が出れば問題ありません。そのまま「**Save**」ボタンを押します。

**Peptide match filters for OriginalSL2**

The library must have at least one score or expect value filter, typically `expect < 0.01`.

Each individual filter is in a filter group. To add more filters to the group, use the OR button. To add more groups, use the AND button. The peptide match must pass all filter groups to be accepted, but within each group, only one filter needs to succeed.

To remove a filter, leave its value field empty. To remove a filter group, remove all its filters.

Filters are used in two complementary ways:

1. When Database Manager chooses results files to process, only files that might contain suitable peptide matches are included.
2. When Database Manager loops over peptide matches in a results file, only matches that pass the filter are imported to the library.

For example, if you have a filter DB = SwissProt and no other DB filters, then only results files that were searched against SwissProt are processed. (Or in a multi-database search, had SwissProt as one of the databases.) When Database Manager loops over its peptide matches, only those that actually come from SwissProt are imported.

Expect value

**AND**

Database name

**Boolean expression:**  
(expect < 0.01 AND Database name = SwissProt)

Test result: **OK**

⑨ 作成した条件の組み合わせに論理的な破綻がないかを確認するため、「Test」ボタンを押してチェックします。

⑩ 問題がなければ緑文字で「OK」と表示されます。「Save」ボタンを押して設定を保存してください。

元の画面に戻ったのち、「**Import search results**」ボタンを押してください（下図）。

The screenshot shows the Mascot Database Manager interface for the 'OriginalSL2' database. The sidebar on the left includes sections for 'Database Manager', 'Fasta', and 'Library'. The main content area displays database details such as Name, Database type, Database directory, and Filename pattern. A yellow callout box with a red border contains the text '㉑ 「Import search results」ボタンを押してください。' (㉑ Press the 'Import search results' button). The 'Import search results' button is highlighted with a red rectangle.

検索日に関するデータの絞り込みを行います。検索の日付、並びにファイルパスのワイルドカード表示による追加の絞り込みが可能です。条件を設定したら「**Add import task to queue**」ボタンを押します（下図）。

The screenshot shows the 'Import search results in OriginalSL2' form. The 'Results file date range' field is highlighted with a red rectangle and contains the text 'From midnight (0:00) on 2017-07-03 to midnight (23:59) on 2017-07-06'. The 'Filepath wildcard' field contains the text '../data/\*/\*'. A yellow callout box with a red border contains the text '㉒ さらに、検索日による絞り込みを行い、' (㉒ Additionally, narrow down by search date). Another yellow callout box with a red border contains the text '㉓ 「Add import task to queue」ボタンを押してデータ取り込みを開始します。' (㉓ Press the 'Add import task to queue' button to start data import). The 'Add import task to queue' button is highlighted with a red rectangle.

ライブラリの作成、データの取り込みが開始されます。作成の進捗は“**Running tasks**”にて確認できます（下図）。

Database Manager

- Databases (12)
- Parse rules (17)
- Scheduled updates
- Running tasks (1)**
- Settings

**Running tasks**

This page will refresh every 10 seconds.

# Queued task

#	Queued task	Added
1	Scan for results files between 2017-07-03 and 2017-07-06 and import in OriginalSL2 dbman_scan_for_library.pl OriginalSL2 --start-date 2017-07-03 --end-date 2017-07-06 --filepath-wildcard ../data/*/*	Wed Aug 23 18:07:29 2017

Waiting for next queued task to start...

**Task log**

Process end time	Command
[Wed Aug 23 18:04:05 2017]	dbman_scan_for_library.pl OriginalSL2 --filepath-wildcard ../data/*/* --search --start-date 2017-08-07 --end-date 2017-08-1
[Mon Aug 14 16:23:17 2017]	dbman_download.pl NIST_Mouse_HCD
[Tue Jun 27 12:13:13 2017]	dbman_download.pl NIST_Human_HCD
[Wed May 31 15:10:18 2017]	dbman_scan_for_library.pl filters4 --search --start-date 2017-05-24 --end-date 2017-05-31

Database Manager

- Databases (12)
- Parse rules (17)
- Scheduled updates (0)
- Running tasks (1)
- Settings

**Database Manager tasks**

Database Manager processes scheduled tasks one at a time in the background as long as Mascot (ms-monitor.exe) is running.

Task processing is currently **enabled**. Task queue **control**

This page will refresh every 10 seconds.

No tasks in queue.

Title	Started	Progress
Scan for results files between 2017-07-03 and 2017-07-06 and import in OriginalSL2 dbman_scan_for_library.pl OriginalSL2 --start-date 2017-07-03 --end-date 2017-07-06 --filepath-wildcard ../data/*/*	Wed Aug 23 18:08:00 2017	<b>35.7</b> % ../data/F001281.dat: Argument "SwissProt" isn't numeric in sort at C:/inetpub/mascot/perl64/site/lib/DBManager/Workhorse/SLFilterCompiler.pm line 154.

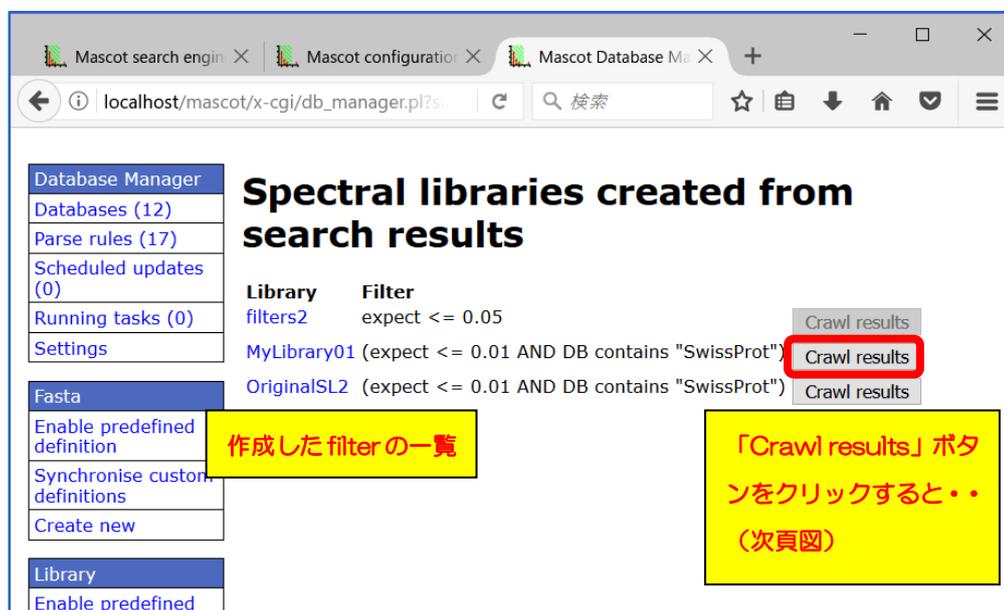
**Task log**

Process end time	Command
[Wed Aug 23 18:04:05 2017]	dbman_scan_for_library.pl OriginalSL2 --filepath-wildcard ../data/*/* --search --start-date 2017-08-07 --end-date 2017-08-1

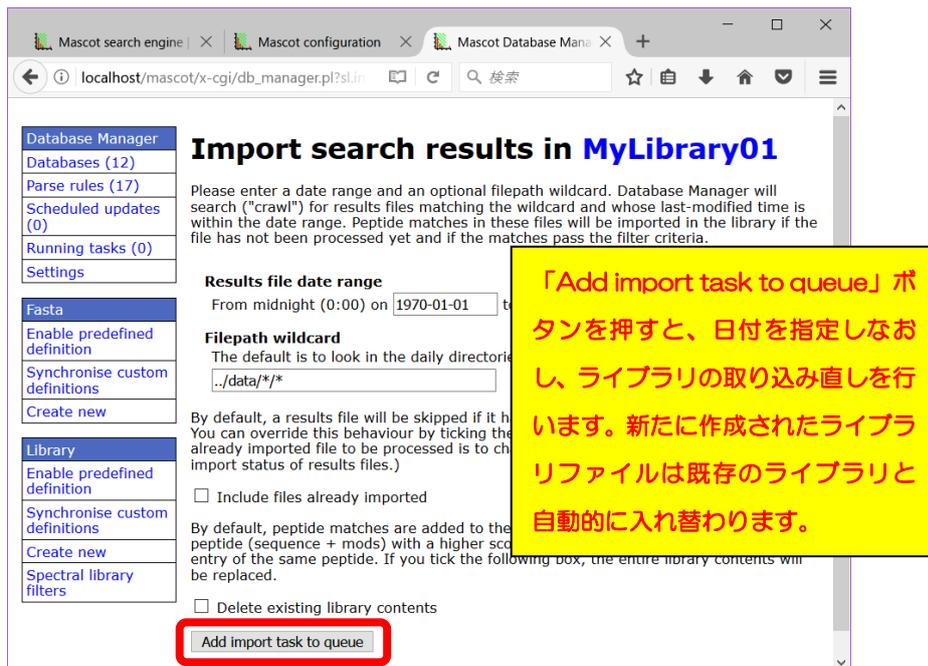
ライブラリの取り込みについては以上です。

## ▼ Spectral library filters

作成済みの library filter の一覧を確認することができます（下図）。



また同じフィルターリング検索を、対象日付を改めて再度スペクトル抽出を行うことができます（次頁図）。抽出されたデータからmspファイルが新たに作成され、対象ライブラリのmspファイルと自動的に入れ替わります。



The screenshot shows the Mascot Database Manager interface. The main heading is "Import search results in MyLibrary01". Below this, there are several sections for configuration:

- Results file date range:** From midnight (0:00) on 1970-01-01 to
- Filepath wildcard:** The default is to look in the daily directory. The input field contains `../data/*/*`.
- Library:** Includes options for "Include files already imported" and "Delete existing library contents".

A yellow callout box contains the following Japanese text:

「Add import task to queue」ボタンを押すと、日付を指定しなおし、ライブラリの取り込み直しを行います。新たに作成されたライブラリファイルは既存のライブラリと自動的に入れ替わります。

The "Add import task to queue" button is highlighted with a red rectangle.

## ● 技術サポート

アップグレードに関してご質問等ありましたら弊社技術サポートにご連絡ください。

電子メール : support-jp@matrixscience.com

電話 : 03-5807-7897      ファックス : 03-5807-7896