Mascot Server version 2.6 新規インストール手順

この書類は、Mascot Server version 2.6 を新規にインストールする手順について説明しています。ver. 2.5 からアップグレードする場合はインストール DVD または弊社日本語資料サイト上の Mascot_Server_v2.6_アップグレード手順.pdf をご覧ください。

● ver. 2.6 新規インストールで特に注意して頂きたい事

インストール時には以下の点にご注意ください。

- ▼ ご利用のネットワークで **WEB** サーバーを使ったアプリケーションが 利用可能か、ネットワーク担当者にご確認ください。
- ▼ セキュリティソフトをご利用の場合、ファイアウォール機能に特に ご注意ください。Windows のファイアウォールの設定(項目 3、P.9 ~)も併せてご覧ください。
- ▼ ライセンスの発行と認証が必要となります。
- ▼ インストール作業の後、使用データベースのファイル取得が始まります。
- ▼ インターネットへの接続と、proxy サーバー設定(使用している場合)を事前に確認して頂くよう推奨いたします。ただしライセンシングについては以降の手順で記されているように接続できない場合にも対処法がございます。

● システム要件

MASCOT Server のインストールには以下の条件が必要です。

■ ディスクスペース

IIS (Internet Information Service)用に150MB、MASCOT の フルインストールに6GB 必要です。また結果ファイルの蓄積や新規データベースの追加を考えると、平均的なユーザーで最低でも **150GB** の空き容量が必要となります。またファイルフォーマットは NTFS でご利用ください。

■ メモリ

4GB 以上。できれば **32**GB や **64**GB での使用を推奨しています。

■ OS の種類と注意事項

いずれのバージョンの利用においても、サービスパック(SP)は常に最新のバージョンを 適用するようにしてください。

最も使用をお勧めするのは Windows 7 Professional または Ultimate 版 です。

▼ XP

サポートしておりません。

▼ VISTA

SP2 以降。Starter, Home Basic 以外のすべてのバージョンで可能ですが、Home Premium は処々の制約により非推奨です。

▼ 2008 Server

Core Edition, Itanium-based system 以外のすべての Edition に対応しています。

▼ Windows 7

すべてのバージョンで動作可能ですが、特定 Edition 以外では処々の制約がある事から、 **Professional 並びに Ultimate Edition を強く推奨**しています。

▼ Windows 2012

Hyper-V Edition, Storage Edition 以外のすべての Edition に対応しています。

▼ Windows 8

すべてのバージョンで動作可能ですが、8.1 の方を推奨いたします。また特定 Edition 以外では処々の制約がある事から、 **Professional 並びに Ultimate Edition を強く推奨**しています。

▼ Windows 10

すべてのバージョンで動作可能ですが、特定 Edition 以外では処々の制約がある事から、 Professional 並びに Ultimate Edition を強く推奨しています。

● インストール時に準備するもの

- 1. Mascot Server version 2.6 のインストール DVD
- 2. MASCOT Server のプロダクトキー情報(英数字 $4 \times 5 = 20$ 文字)
- 3. MASCOT Server のインターネットへの接続(接続できない場合でも別途方法有)
- 4. Windows ヘログインするユーザー名とパスワード(Admin 権限が必要)
- 5. (もし使っていれば) proxy サーバーへの接続設定

● インストール作業の流れ

*****最低限、5 までのステップで MASCOT が動くようになります。*****

- 1. PC へのログオン 、起動中の他アプリケーションソフトウェアの終了
- 2. IIS (Internet Information Service)のインストール
- 3. ファイアウォールの設定
- 4. MASCOT Server ver. 2.6 の インストール
- 5. MASCOT Server の ライセンス認証
- 6. MASCOT Server の データベース環境設定画面を開く
- 7. ネットワーク・proxy の設定
- 8. 配列データベース・ライブラリの追加
- 9. ファイルダウンロードとデータベース構築確認
- 10. MASCOT Server の動作確認
- 11. MASCOT データベース自動更新プログラムの設定 (別資料)
- 12. MASCOT Daemon インストール (別資料)

● インストールに要する時間

インストールに要する時間は目安として **40** 分程です。作業時間には新規インストール後自動的に行われるデータベースファイルの取得、更新の時間を含めていません。ファイル取得・更新時間の大まかな目安として半日~2 日程度かかります。その間特に気にせず確認作業や通常の検索をして頂いて構いません。

● インストールチェック表

項目 チョ	ミック 該当 P
作業前:以下のものを準備	·
インストール PC に関するシステム要件をチェック	
ver. 2.6 インストール DVD	
プロダクトキー(英数字 4×5=20 文字)	
Server のインターネットへの接続 (接続できない場合も別途方法有、	
詳細は手順書該当項目参照の事)	
MASCOT Server PC へのログインユーザー名とパスワードの確認	
(もし使っていれば) proxy サーバーへの接続設定	
作業内容	
1-1. Windows へのログイン	5
1-2.他アプリケーションの終了	5
2. IIS (Internet Infromation Service)のインストール	5
3. ファイアウォール設定	9
4. MASCOT Server ver.2.6 インストール	11
5. MASCOT Server ライセンス認証	17
6. MASCOT のデータベース環境設定画面を開く	28
7. ネットワーク・proxy の設定	30
8. 配列データベース・ライブラリの追加	32
9. ファイルダウンロードとデータベース構築確認	36
9-1. ダウンロード進捗の確認	36
9-2. ファイル変換・検索テスト進捗の確認	37
10. MASCOT Server の動作確認	39
11. MASCOT データベース自動更新プログラムの設定	別紙
12. MASCOT Daemon インストール	別紙

インストール手順

1. PC へのログオン、起動中の他アプリケーションソフトウェアの終了

Administrator 権限(管理者権限)を持ったユーザーでログオンしてください。またインストール作業を行う前に起動している他のアプリケーションソフトウェアをすべて終了してください。

2. IIS (Internet Information Service)のインストール

Windows の OS の種類により操作が異なります。 Windows 7 と windows 8/10 に分けてご案内いたします。

[Windows7]

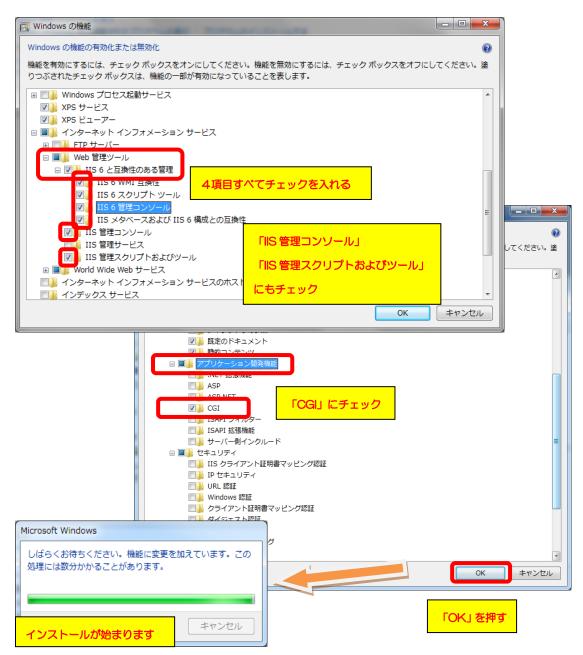
コントロールパネルを開きます。 (スタート→コントロールパネル)

コントロールパネル内で「プログラム」→「Windowsの機能の有効化または無効化」を選択します。



インターネットインフォメーションサービスの中で、以下の項目を選択しチェックを入れます。

- •「web管理ツール」 以下、
 - IIS6と互換性のある管理以下4項目すべて
 - IIS管理コンソール
 - IIS管理スクリプトおよびツール
- 「World Wide webサービス」の「アプリケーション開発機能」の「CGI」にチェックを入れ、「OK」ボタンを押すとIISのインストールが始まります。



インストール後、自動的に IIS サービスが開始します。IIS が動作中かどうか、 ウェブブラウザを使って確認する事ができます。 IIS をインストールしたコンピュータでウェブブラウザを起動し、アドレス部分に http://localhost/ と入力、エンターを押します。

以下のような画面がでればインストール成功です。



WEB ブラウザでトップ画面へアクセスした画面

[Windows10]

コントロールパネルを開き、「プログラム」を選択します。

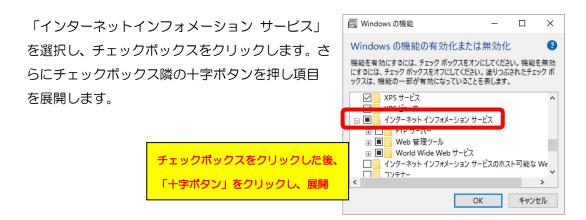
操作例)デスクトップ左下 windows マーク左クリック→コントロールパネル→プログラム



×

8

П



インターネットインフォメーションサービスの中で、以下の項目を選択しチェックを入れます。

■ Windows の機能

~

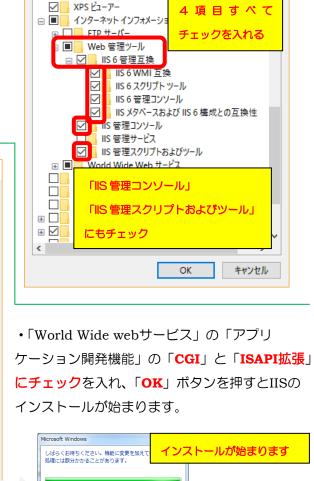
Windows の機能の有効化または無効化

ックスは、機能の一部が有効になっていることを表します。

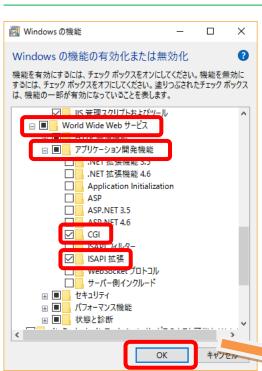
XPS サービス

機能を有効にするには、チェック ボックスをオンにしてください。機能を無効にするには、チェック ボックスをオフにしてください。 達りつぶされたチェック ボ

- ・「web管理ツール」-以下、
 - IIS6管理互換 以下4項目すべて
 - IIS管理コンソール
 - IIS管理スクリプトおよびツール

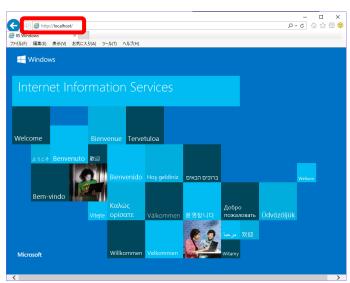


キャンセル



インストール後、自動的に IIS サービスが開始します。IIS が動作中かどうか、ウェブブラウザを使って確認する事ができます。

IIS をインストールしたコンピュータでウェブブラウザを起動し、アドレス部分に http://localhost/ と入力、エンターを押します。



WEB ブラウザでトップ画面へアクセスした画面

【重要】

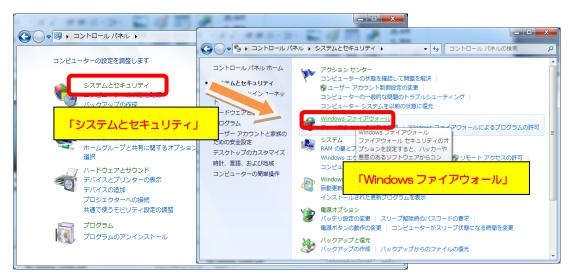
例では Windows7,10 でしたが、OS により IIS インストール時のオプションが異なります。 別の OS をご利用の方は、インストール DVD 内「manual.pdf」の「3.Installation:Windows」、 P.20~P.25 の各 OS における IIS インストール時のオプション選択項目を画像でご確認のう えインストールを行ってください。

*MASCOT は IIS 以外の Web サーバーでも動作します。詳細はインストール DVD 内「manual.pdf」の Appendix D 「Web Server Configuration」をご覧ください。IIS がインストール時最もトラブルが少なく作業も簡単であることから IIS の利用を強く推奨しています。

3. ファイアウォールの設定

デフォルト状態では Windows のファイアウォール設定によりローカルコンピュータ以外 からの HTTP プロトコル経由でのアクセスを受け付けません。設定を変更し HTTP とファイル とプリンタの共有のポートについてアクセス許可を与える必要があります。

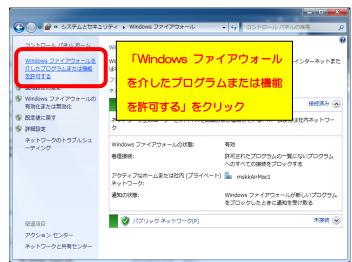
ファイアウォールの設定を変更するには、ウィンドウズマーク→**コントロールパネル**で、「**システムとセキュリティ**」、続けて、「**Windows ファイアウォール**」を選びます。

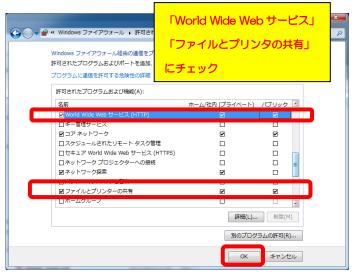


「Wndowsファイアウォールを 介したプログラムまたは機能を 許可する」をクリックします。

*インストール済みのアンチウイルス ソフトウェアなどの影響で設定変更 ができない場合、お手数ですが弊社 までご連絡ください。

ファイアウォールで遮断しない 例外のポートとして、「World Wide Web サービス(HTTP)」と 「ファイルとプリンタの共有」を 選択しチェックを入れます(右図)。 ネットワーク環境により、ホーム /社内(プライベート) のみで いいか、パブリックも含まなくて はならないか異なります。設定内 容がわからない場合、セキュリティ上問題が無いのであれば両方に チェックを入れるとMASCOTの



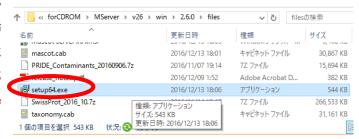


使用においてトラブルを回避しやすいです。設定後、「OK」ボタンを押します。

4. MASCOT ver 2.6 のインストール

Mascot Server version 2.6 のインストールに要する時間は、DVD 内に予め準備されている データベースファイル SwissProt リリース 2016_10, PRIDE_Contaminants_20160906 の セットアップも含め 30 分程度です。

初めにver.2.6 のインストール DVDを光学ドライブに 挿入 してください。 DVD は「MATRIX_SCIENCE」という名称でマウントされます。setup64.exeをダブルクリックしてください。

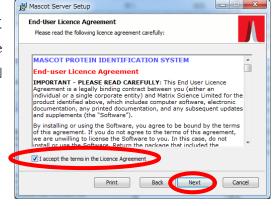


関連プログラムとして、VisualC++ 2012 などの インストールを MASCOT のインストール 前に求められる事があります。特に問題がなければインストールを行ってください。

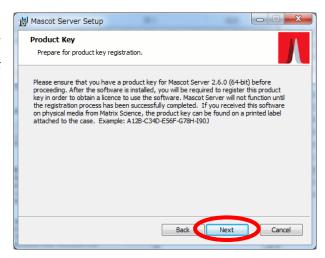
関連プログラムのインストールが終わると、 MASCOT Server のバージョンアップが始まり ます。「**Next**」を押してください。



License Agreement が表示されます。内容に問題がなければ 「I accept the terms in the License Agreement」にチェックを入れ、「**Next**」を押してください。



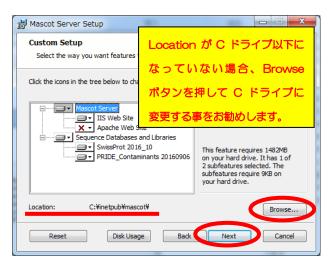
プロダクトキー入力が必須である事を 通知する画面が表示されます。「**Next**」を 押してください。



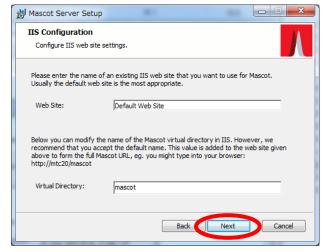
インストール内容とインストール箇所 を確認する画面が現れます。通常インスト ール場所として

C:¥inetpub¥mascot

と、Cドライブをお勧めいたします。Cドライブの残り容量が極端に少ない場合などはDドライブに指定してください。またDドライブの残り容量の方がCドライブよりも少ない時、インストール場所がDドライブに指定されることがあります。その場合は「Browse」ボタンを押してCドライブに変更する事をお勧めいたします。

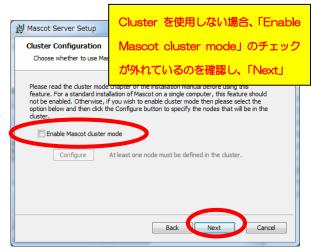


IIS 上での MASCOT フォルダの位置と 名称、並びに仮想フォルダの設定を行いま す。通常は特に変更を加えずそのまま 「Next」ボタンを押してください。



続いて Cluster システム(複数台の PC を利用する構成)の設定を行います。

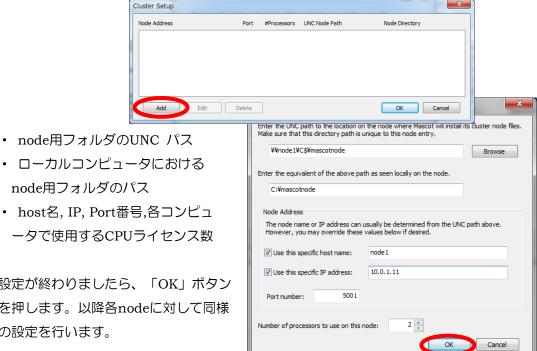
Cluster システム を利用しておらず 1 台 の PC だけで MASCOT Server の計算を行う 場合、チェックが付いていないのを確認して から「Next」ボタンを押してください。その 場合以下の Cluster 利用者向けの設定に関す る記述箇所を飛ばしてください。なお通常は Clusterを使っておらずチェックをはずす方 が正しい設定です。Cluster システム を



ご利用の方は「Enable Mascot Cluster mode」にチェックを入れ、「Configure」ボタンを 押して node PC に関する設定を行ってから「Next」ボタンを押してください(以下緑色の記述 箇所をご参照ください)。

【Cluster システム をご利用の場合】 Node に関する設定 ****

nodePCの追加を行います。「Add」ボタンを押し、下図のように各項目を設定します。

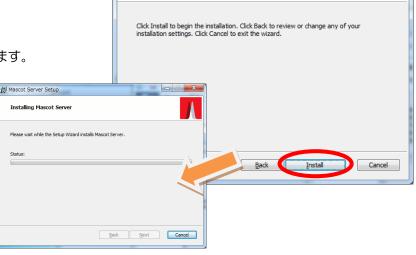


• host名, IP, Port番号,各コンピュ ータで使用するCPUライセンス数

設定が終わりましたら、「OK」ボタン を押します。以降各nodeに対して同様 の設定を行います。

すべての項目を設定し終わると、インストール開始となります。「**Install**」ボタンを押してください。

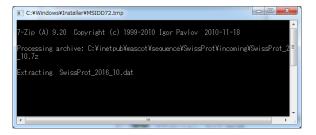
ファイルコピーが行われます。



Mascot Server Setup

Ready to install Mascot Server

SwissProtなどのデータベース設置を選択した場合、インストール後半で圧縮ファイルの展開と解凍が行われます。その操作中である事を表すコマンドプロンプトが途中表示される事があります。

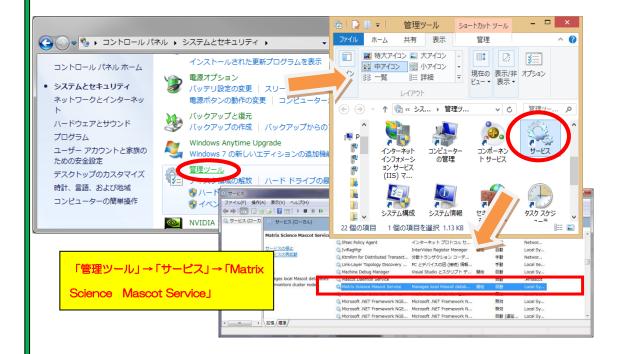


インストールが完了すると、右図のようなダイアログが現れます。「Open Mascot server status page」のチェックが入っているのを確認した上で、「Finish」ボタンを押してください。cluster利用者以外の方はこれでインストール終了です。



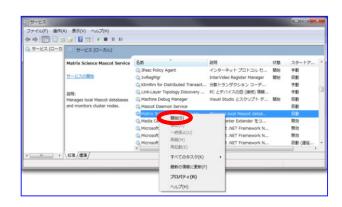
MASCOT Server をClusterシステムでご利用の場合、インストール後MASCOT Server のサービスは自動的に開始されません。MASCOTのサービスを mascotユーザーで開始するよう設定を変更した後、改めてサービスを開始する必要があります。

コントロールパネルの、「パフォーマンスとメンテナンス」 \rightarrow 「システムとセキュリティ」 \rightarrow 「管理ツール」 \rightarrow 「サービス」を選びます。サービス一覧の中で「Matrix Science Mascot Service」という項目を探し、ダブルクリックします(下図)。



(ローカル コンピュータ) Matrix Science Mascot Service のプロパティ 🛛 🤁 「ログオン」タブ内の「**アカウント**」にて、 全般 ログオン 回復 依存関係 ・アカウント:ログインユーザー(mascotなど) ○ ローカル システム アカウント(L) ・mascotパスワード:ログイン時のパスワード 参照(<u>B</u>)_ アカウント(T): .¥mascot を入力し、OKボタンを押します。 パスワード(<u>P</u>): ***** パスワードの 確認入力(C): 例ではアカウントmascotで、パスワードには 以下のハードウェア ブロファイルに対しこのサービスを有効または無効にできます(^): mascotのログイン時パスワードを入力していま ハードウェア プロファイル Profile 1 す。 有効(E) 無効(D) 「ログオン」タブでユーザー名と OK パスワード入力 キャンセル

MASCOT Service を選んだ状態で 右クリック→「<mark>開始</mark>」を選びます。 MASCOT Serviceが開始されます。 開始時にエラーが出た場合はお手数 ですが弊社までご連絡ください。



■ ***** **MASCOT** クラスターシステム利用者向けの特殊設定終わり *****

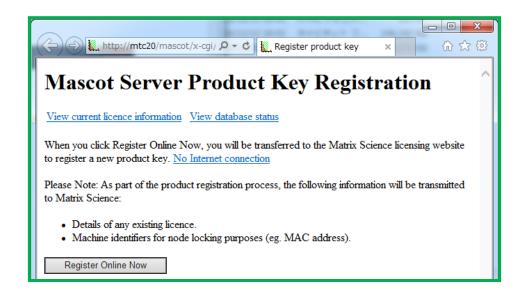
5. MASCOT の ライセンス認証

インストール後、**ライセンスの登録と認証が必要となります。**ライセンス認証は WEB ブラウザ画面を通じて行います。**ライセンス登録と認証は基本的にオンラインで行う**ため、MASCOT Server PC(あるいは server へ接続している別の PC) をインターネットへ接続した方が簡単に認証できます。但し PC を直接インターネットへ接続できない場合でもインターネットに繋がっている別の PC からライセンスの登録と認証を行う事ができます。

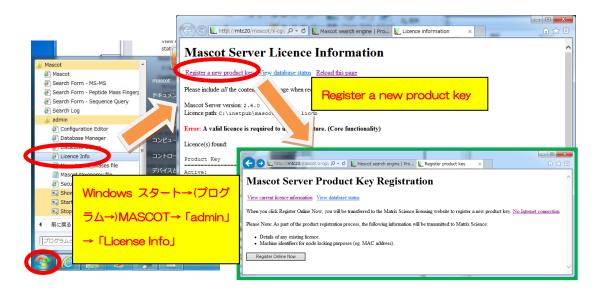
■ 5-1. ライセンス認証の案内画面を表示させる方法

ライセンス認証の案内画面は以下の3つの操作のうちいずれかを行う事で現れます。通常は 選択肢 1) で、バージョンアップ作業後自動的に表れる画面から認証操作を行います。

- 1) バージョンアップ操作直後に自動的に web ブラウザが起動し画面が現れる
- 2) ブラウザで Home -> Database Status → Register a new product key
- 3) 画面左下の「Windows スタート」→プログラム→MASCOT→admin→License Info
 - → Register a new product key
- 「認証画面」は下図のようなWEBページです。



● 選択肢 3) のスタートボタンから認証画面を表示する場合の操作



ライセンス認証の方法は、操作をしている端末がインターネットへ接続しているかどうかにより対処法が異なります。認証方法については、インターネットへ接続している場合、「5-2-A. ライセンス認証方法 (1): MASCOT Server がインターネットに繋がっている場合」を、つながっていない場合、「5-2-B. ライセンス認証方法 (2): MASCOT Server がインターネットに繋がっていない場合」をご参照ください。

■ 5-2-A. ライセンス認証方法 (1)

-MASCOT Server がインターネットにつながっている場合

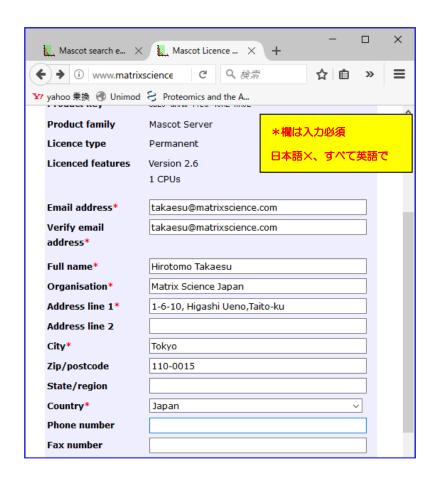
案内画面内にある「Register Online Now」ボタンを押してください。





続いてライセンス情報を登録する画面が現れます。赤い*が付いている項目に関しては必須 **項目**ですので必ず入力してください。入力内容については、下図例を参考にしてください。

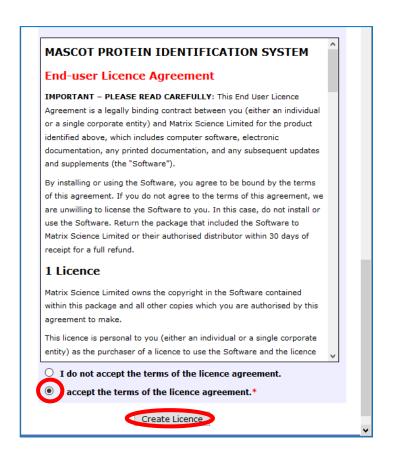
*登録情報は必ず英語で入力してください。日本語を使用しないでください。



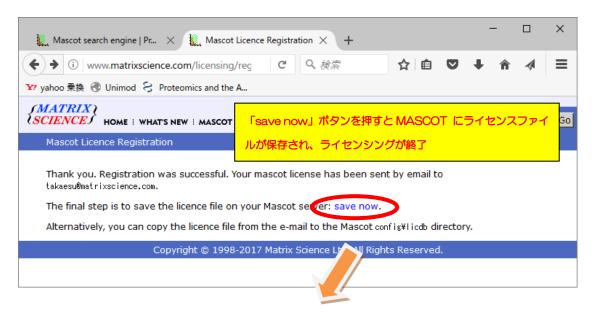
ライセンス登録者とは別にライセンス情報ファイルの管理を必要とするユーザーヘライセンスファイルを送りたい場合、続いて現れる「Email address(CC)」欄に、メールアドレスを入力してください。必要ない場合は空欄にしてください。また、ここで入力したユーザーが弊社より各種ソフトウェアのバージョンアップ等のお知らせが必要かどうかを選択してください。



下部にはMASCOT Server の ライセンスに関する規約が表示されます。文章に目を通して 頂いた上で問題ない場合には「I accept the terms of the licence agreement」を選び、 「Create licence」ボタンを押してください。



無事登録が終わると以下のような画面が表示され、登録したメールアドレスにライセンスファイルが送付されます。ライセンスファイルは、「(ライセンス文字列).lic」というファイル名です。「save now」のリンクを押すと自動的にMASCOT Server の所定の位置にライセンスがセットされ、MASCOT のライセンシングが完了します。ライセンスファイルが正しく保存されなかった場合、後述の「ライセンスファイルがMASCOT Serverに正しくコピーされない場合」を御覧ください。

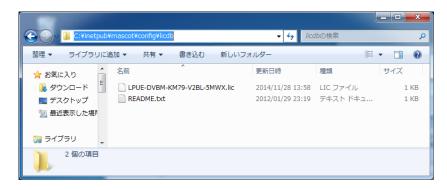




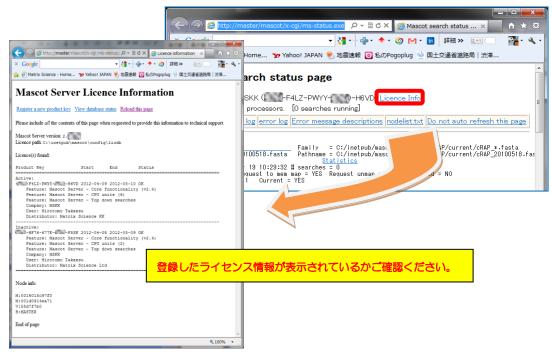
[ライセンスファイルがMASCOT Serverに正しくコピーされない場合]

上記操作でライセンシングが完了した場合以下操作は不要です。

メールに添付されたライセンスファイルを内部ネットワーク経由やフラッシュメモリなどで MASCOT Server PCまで運び、ファイルをMASCOTインストールフォルダ下の、config¥licdb へコピーしてください。MASCOTインストールフォルダは通常 C:¥inetpub¥mascot ですので、licdb フォルダの場所は C:¥inetpub¥mascot¥config¥licdb フォルダとなります。



ライセンスファイル設置直後からMASCOT Server が正常に動作します。ライセンス登録の内容を確認するため、Database StatusページのLicense info のリンクを押し、ライセンス情報が正しく表示されている事を確認してください。操作後も画面にライセンス登録を求めるエラーメッセージが出る場合は弊社までご連絡ください。

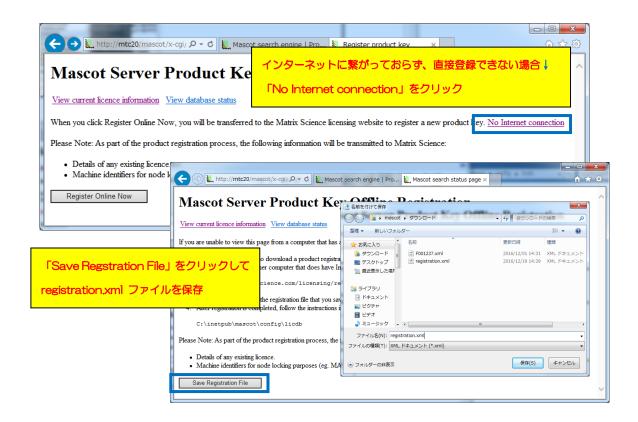


license info 画面

■ 5-2-B. ライセンス認証方法 (2):

- MASCOT Server がインターネットに繋がっていない場合

案内画面内にある「No Internet connection」をクリックして、遷移した画面で「Save Registration File」ボタンを押してregistration.xml ファイルを保存してください。



このファイルをインターネットに接続しているPCへ持ち運びブラウザのアドレス部分に http://www.matrixscience.com/licensing/register

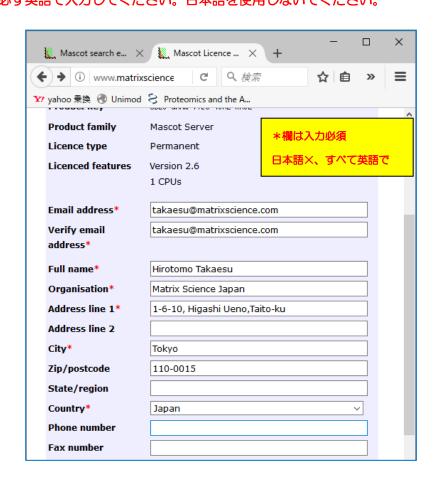
と入力して画面を開いてください。



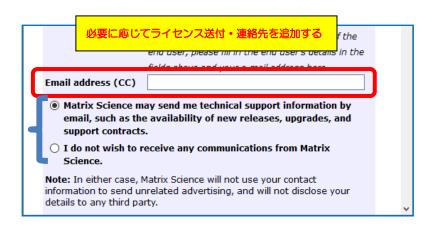
最初に保存したProduct registration file (registration.xml ファイル)をアップロードする 画面が現れます(下図)ので、registration.xmlファイルをアップロード→ Continueを クリックしてください。



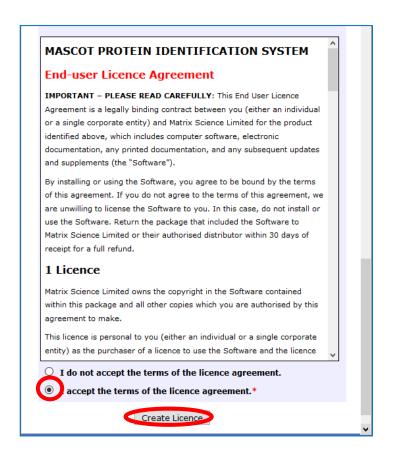
続いてライセンス情報を登録する画面が現れます。赤い * が付いている項目に関しては必須 項目ですので必ず入力してください。入力内容については、下図例を参考にしてください。 *登録情報は必ず英語で入力してください。日本語を使用しないでください。



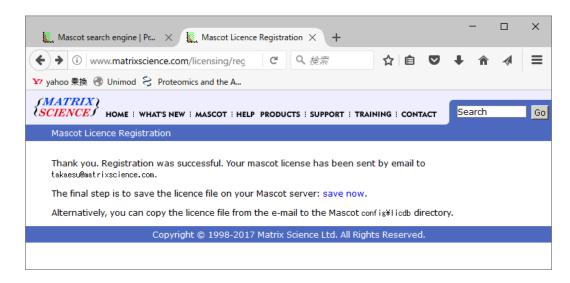
ライセンス登録者とは別にライセンス情報ファイルの管理を必要とするユーザーヘライセンスファイルを送りたい場合、続いて現れる「Email address(CC)」欄に、メールアドレスを入力してください。必要ない場合は空欄にしてください。また、ここで入力したユーザーが弊社より各種ソフトウェアのバージョンアップ等のお知らせが必要かどうかを選択してください。



下部にはMASCOT Server の ライセンスに関する規約が表示されます。文章に目を通して 頂いた上で問題ない場合には「I accept the terms of the licence agreement」を選び、 「Create licence」ボタンを押してください。



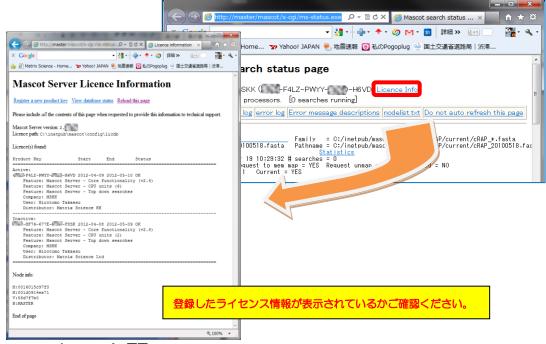
無事登録が終わると以下のような画面が表示され、登録したメールアドレスにライセンスファイルが送付されます。ライセンスファイルは、「(ライセンス文字列).lic」というファイル名です。



メールに添付されたライセンスファイルをネットワーク経由やフラッシュメモリなどで MASCOT Server PCまで運び、ファイルをMASCOTインストールフォルダ下の、config¥licdb へコピーしてください。MASCOTインストールフォルダは通常 C:¥inetpub¥mascot ですので、licdb フォルダの場所は C:¥inetpub¥mascot¥config¥licdb フォルダとなります。



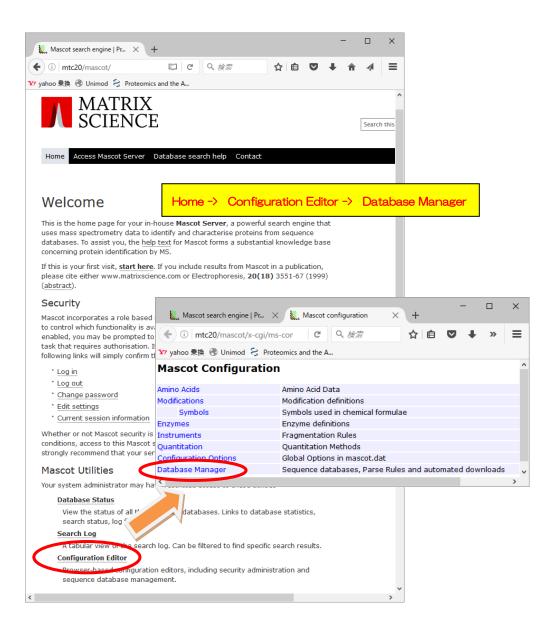
ライセンスファイル設置直後からMASCOT Server が正常に動作します。バージョンアップ後各データベースの構築が行われ、検索可能になるのに少し時間がかかります。ライセンス登録の内容を確認するため、Database StatusページのLicense info のリンクを押し、ライセンス情報が正しく表示されている事を確認してください。操作後も画面にライセンス登録を求めるエラーメッセージが出る場合は弊社までご連絡ください。



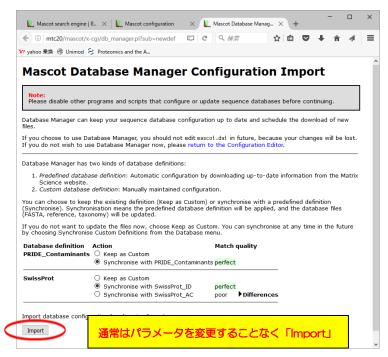
license info 画面

6. MASCOT の データベース環境設定画面を開く

インストール後、Database Manager ページ上で、使用するデータベースについて<mark>初期登録</mark> されている SwissProt と PRIDE_Contaminants の設定を確認し、さらに必要に応じて MASCOT 側で設定が定義されているデータベースから使用したいものを選びます。データベースの環境設定を行う画面へアクセスするためには MASCOT のライセンス登録後 Web ブラウザで Home → Configuration Editor → Database Manager を開きます (下図)。

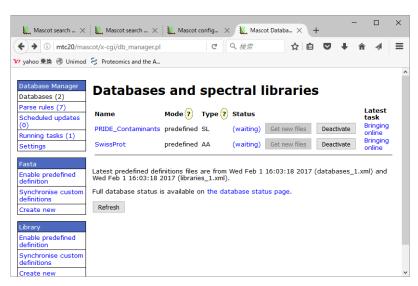


インストール後最初にDatabase Managerを開くと、以下のように初期設定画面が現れます。 最適設定が自動的に選ばれているため、そのままパラメータを変更することなく「Import」を 押します。(但しID部分を変更したい場合はその限りではありません)



Database Manager 初期設定画面

Importボタンを押すと画面が切り替わります(下図)。定義されているデータベースについては新しいデータベースファイルを自動的に取得しMASCOT用のデータベースの更新を試みます。更新状況は後述する確認方法で進捗をチェックしてください。



Import ボタンクリック後自動的に表示される「Databases」画面

画面表示確認後、必要に応じて以下の3つの操作を行ってください。

【Proxy設定】 → 「7.ネットワーク・proxyの設定」

ネットワークの設定が正しく行われていない場合データベースファイルの取得が始まりません。 Proxy サーバーなどご利用の場合は後述の「7.ネットワーク・proxyサーバーの設定」をご覧の上設定変更をしてください。

【使用データベースの追加設定】 → 「8.配列データベース・ライブラリの追加」

SwissProt, PRIDE_contaminants 以外のデータベースで、MASCOTが準備している公開データベース・ライブラリに対する設定を使って自動的にダウンロード・データベース構築を行う事ができます。後述の「8.配列データベース・ライブラリの追加」をご覧ください。

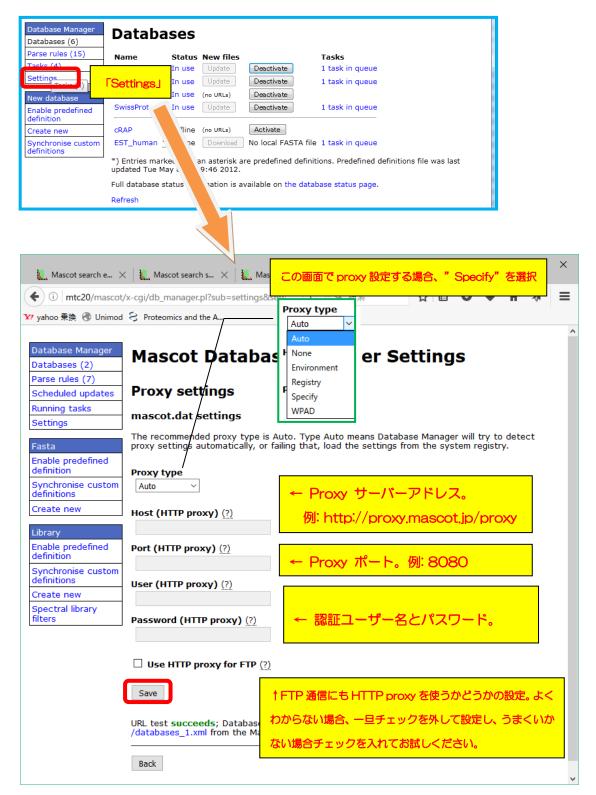
【ファイルダウンロードの進捗確認】 →「9.ファイルダウンロードとデータベース構築確認」

初期設定データベースや上記「8.配列データベース・ライブラリの追加」などで行われた ダウンロード・自動更新の進捗状況をご確認する方法については、「9.ファイルダウンロードと データベース構築確認」をご覧ください。

7. ネットワーク・proxy の設定

ご利用のネットワークにて proxy サーバーを使われていない方は特に設定変更する必要はございません。この章は飛ばし次の「8.配列データベース・ライブラリの追加」へお進みください。(proxy サーバーの意味があまりわからない方もひとまずこの章を飛ばしてください。)

ご利用のネットワークにて proxy サーバーをご利用の方は、MASCOT 上で Proxy サーバーの設定が必要です。Database manager 画面左に表示されている各セクションへのリンクで **Settings -> Proxy settings** と辿り、proxy の設定を行ってください。設定内容は次頁内に記しています。



Proxy Settings 画面

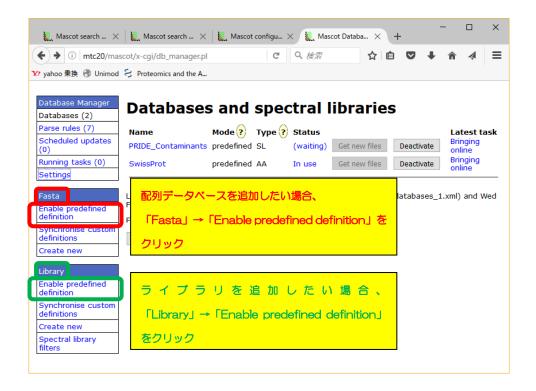
8. 配列データベース・ライブラリの追加

DVD 内に準備されている検索用データベースは SwissProt と PRIDE_Contaminants のみですが、MASCOT 用のデータベースとしてはその他にも公開されているデータベース や、ご自身で作成されたデータベースを使用する事ができます。

ここでは、公開データベースで MASCOT が既に設定内容を準備しているデータベースを MASCOT 上で使用可能にする方法についてご紹介します。

「Database Manager」の左フレームを御覧ください。

「Fasta」「Library」それぞれに、「Enable predefined definition」という項目があります。 追加したい方の「Enable predefined definition」リンクをクリックしてください(下図)。



MASCOT が既に定義を作成しているデータベース/ライブラリの一覧が現れます(次頁図)。配列データベース・ライブラリの名称と実態については、MASCOT の HELP ページをご覧ください。

▼弊社 HP のリンク

http://www.matrixscience.com/help/seq_db_setup.html http://www.matrixscience.com/help/seq_db_setup_library.html

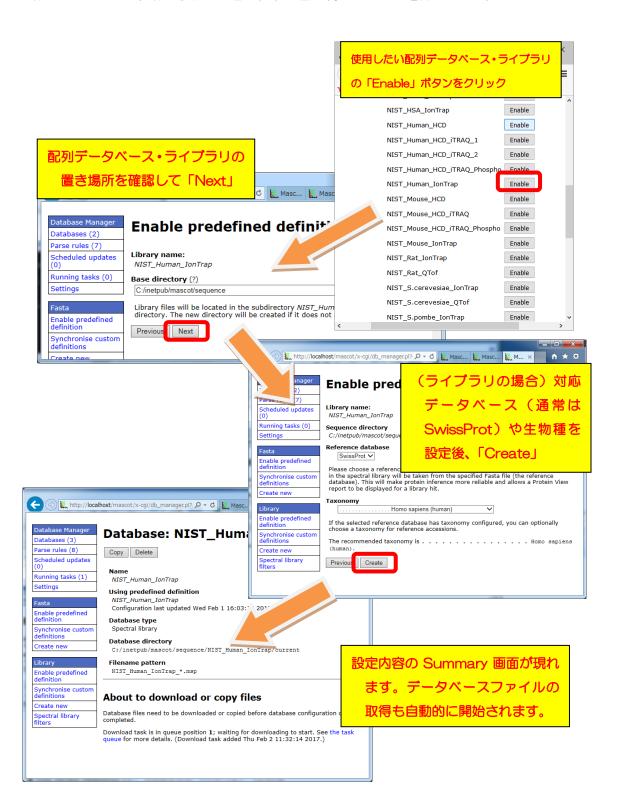
Name	
contaminants	Enable
cRAP	Enable
Environmental_EST	Enable
Fungi_EST	Enable
Human_EST	Enable
Invertebrates_EST	Enable
IPI_arabidopsis	Enable
IPI_bovine	Enable
IPI_chicken	Enable
IPI_human	Enable
IPI_mouse	Enable
IPI_rat	Enable
IPI_zebrafish	Enable
Mammals_EST	Enable
Mus_EST	Enable
NCBIprot	Enable
neXtProt	Enable
Plants_EST	Enable
Prokaryotes_EST	Enable
Rodents_EST	Enable
SwissProt_AC	Enable
SwissProt_ID	Enable
Trembl_AC	Enable
Trembl_ID	Enable
Unclassified_EST	Enable
UniRef100	Enable
Vertebrates_EST	Enable

Name	
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
NIST_Human_HCD_iTRAQ_1	Enable
NIST_Human_HCD_iTRAQ_2	Enable
NIST_Human_HCD_iTRAQ_Phospho	Enable
NIST_Human_IonTrap	Enable
NIST_Mouse_HCD	Enable
NIST_Mouse_HCD_iTRAQ	Enable
NIST_Mouse_HCD_iTRAQ_Phospho	Enable
NIST_Mouse_IonTrap	Enable
NIST_Rat_IonTrap	Enable
NIST_Rat_QTof	Enable
NIST_S.cerevesiae_IonTrap	Enable
NIST_S.cerevesiae_QTof	Enable
NIST_S.pombe_IonTrap	Enable
NIST_UPS1_IonTrap	Enable
PRIDE_Arabidopsis	Enable
PRIDE_B.burgdorferi	Enable
PRIDE_B.cereus	Enable
PRIDE_B.subtilis	Enable

配列データベース

ライブラリ (一部)

使用したい配列データベース・ライブラリの「Enable」ボタンをクリックすると、確認後データベースの更新が行われます。データベースの置き場所や、(ライブラリの場合)配列データベースとの連携・生物種の設定を確認したうえで「Create」ボタンを押し、データベースを作成してください。作成後設定内容を表す画面が現れるのでご確認ください。



■ Predefined definition として準備されている配列データベース

contaminants / cRAP

コンタミ (キャリーオーバー含む)、または生体内に頻出し通常解析対象とならない タンパク質をまとめたデータベース。

XXXX EST

EMBL にあるEST データベース(塩基配列)。

<対象生物種リスト:DB名XXXXに該当> Environmental, Fungi, Invertebrates, Mammals, Mus, Plants, Prokaryotes, Rodents, Unclassified, Vertebrates

IPI_YYYY

EBIで公開されているタンパク質データベース。2011年で更新が止まっています。 **〈対象生物種リスト:DB名YYYYに該当〉** arabidopsis, bovine, chicken, human, mouse, rat, zebrafish

NCBIprot

NCBIサイトにあるタンパク質のデータベース。以前は「NCBInr」という名称で利用されていました。登録件数が非常に多い。

Trembl

EBIのサイトにあるタンパク質のデータベース。登録件数がNCBIprotのように多い。

SwissProt

EBIのサイトにあるタンパク質のデータベース。**UniprotKB/Swiss-Prot**の事。 冗長性がなくコンパクトにまとめられています。

neXtProt

HUPOのHPP project で使用が推奨されているヒト用のタンパク質データベース。

■ Predefined definition として準備されているライブラリ

設置されているサイト、生物種、測定手法毎にまとめれています。ただしここで記され たすべての組み合わせが存在するわけではありません。

サイト

NIST / PRIDE

生物種

Human, Mouse, Rat, S.cereisiae, S.pombe, Arabidopsis, B.burgdorferi, B.cereus, B.subtilis, C.elegans, Chicken, Drosophila, D.rerio, E.coli, G.sulfurreducens, Soybean, Synechococcus, Synechocystis

* 生物種記述のルールに一部統一性がありませんが、ソフトウェアの表記を優先しています。

• 測定手法

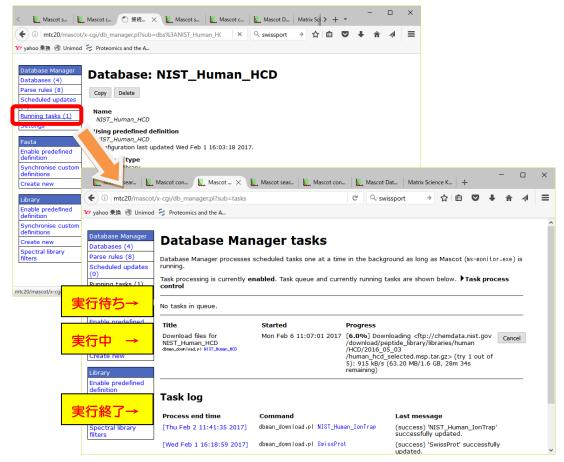
IonTrap, HCD, QTOF, iTRAQ, iTRAQ+Phospho など

9. ファイルダウンロードとデータベース構築確認

新たにデータベースを使用するように設定変更すると、データベースファイルのダウンロード、MASCOT用のデータベースファイル変換、検索テストが行われます。データベースファイルのダウンロード進捗状況確認についてはDatabase manager ページのRunning tasksで、ダウンロード後のファイル変換や検索テストの進捗状況確認は Database Status 画面で行います。

9-1. ダウンロード進捗の確認

各データベースのダウンロード操作は「Task」として扱われます。Taskの進捗度合いは次頁図のように「Running tasks」セクションにて確認する事ができます。「Database Manager」画面の左フレーム、「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(次頁図)。実行したTaskが実行終了の欄へ移行し、「Last message」の欄に「(success)'DB名' successfully updated」と表示されればダウンロード終了です。

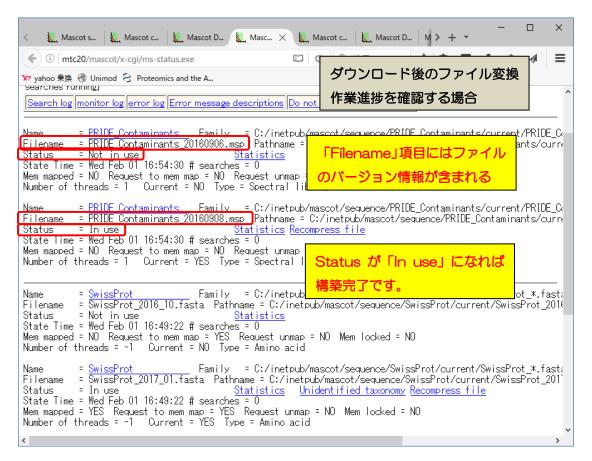


Database Manager: Running tasks 画面

9-2. ファイルの変換・検索テスト進捗の確認

ファイルダウンロードが終了後、MASCOT Serverプログラム側(ms-monitor.exe) が自動的にダウンロードしたファイルをMASCOT で検索できるようファイル変換を行います。 変換状況は、**Database Status** (Home -> Database Status) でデータベース毎に確認できます(次頁図)。

各データベースの「Filename」項目に、(**Database名**)_(バージョンまたは日付).fasta と表示されています。後部の(バージョンまたは日付)の記述部分でデータベースの新しさ を確認してください。また「Status」項目ではデータベースの現状を確認できます。



Database Status 画面:

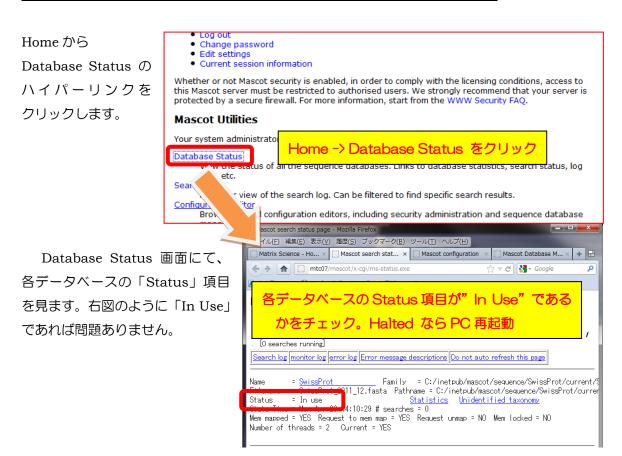
上記例のPRIDE_Contaminantsのように、2つの日付のデータベースが表示されているケースがあります。「Filename」項目と「Status」項目を見比べてください。例の上図では、日付が20160906のStatus 項目は「Not in use」となっています。一方より新しい20160908の方は「In use」となっています。これは20160906の方は既に使用されておらず、新しい20160908の方が現在使用可能となっている事を表しています。ダウンロードを開始したデータベースについて、Statusが「In use」になるまでお待ち下さい。Status項目の変遷については、後述の「10-1.Database Status画面における各データベースのStatus項目」も併せてご覧ください。

10. MASCOT Server の動作確認

すべての設定後、MASCOT Server の各種動作確認をしてください。動作確認の方法はご利用者にお任せいたしますが、弊社にてお勧めする確認事項は以下の2点です。

- 10-1. Database status 画面における、各データベースの Status 項目の確認
- 10-2. 検索テスト

10-1. Database status 画面における、各データベースの Status 項目の確認



ファイルダウンロード後のデータベース再構築ですが、

「データベースの構築」→「検索テスト」→使用可能 (In use)となります。Status が「**Creating compressed files N%**」となっている場合、データベースを構築中です。「**Running 1st test**」は検索テスト実行中です。共に問題ありません。次のステップに移行するまでお待ちください。

Status が「Halted:Failed to map」となっている場合、まずは PC を再起動してもう一度 ご確認ください。同じエラーが出た場合、status 項目のすぐ隣に現れているハイパーリンク 「compression warning」「Check error log」をクリックし、エラー内容を確認してわかる範囲でご対処頂き、ご不明な点がございましたら弊社までご連絡ください。

10-2. 検索テスト

検索のテストについては、(すでにご利用いただいたことのある方は)いつも実施している方法で検索してください。始めてご利用頂く方は DVD の mskk\sampledata の中に含まれている各種 mgf ファイルを使って検索を試みたり、質量分析装置の付属ソフトウェアからの検索を行ってみたりしてください。

うまくいかない場合、以下の手順で順に検索のテストを行って頂き、どの段階で問題が生じる かご確認ください。

1. すべてのケース: データベースを変えて検索してください。

上記方法で検索可能だった場合:最初に選択したデータベースに問題が生じている可能性があります。Home -> Database Status ページで該当データベースの status 項目をご覧ください(P.34~をご参照ください)。また問題が生じているデータベースの名称を確認するとともに、MASCOT Server の logs フォルダにある、monitor.log, errorlog.txtファイル内に該当データベースに関するメッセージがないかご覧ください。ご不明な場合はこれらのファイルを弊社までお送りください。

- 2. **Daemon や各社分析ソフトウェアから検索を行っている場合**:検索手段を変えて検索してください。
 - 他のソフトウェアからでなく MASCOT Server PC にある WEB ブラウザから検索テストを行ってください。
 - 他端末のブラウザや Daemon、メーカー付属の解析ソフトウェアがあればそこから検索を行ってください。
 - * ブラウザからの再検索方法が良くわからない場合、とりあえず home->Search log から 過去の検索結果を開き、再検索を行う方法などをご提案します。

上記方法で問題が解決した場合:ネットワークや MASCOT セキュリティシステム、 Daemon や各種ソフトウェアのバージョンの組み合わせに何らかのトラブルが発生している可能性があります。お手数ですが弊社までトラブルの内容をご連絡ください。

11 MASCOT データベース自動更新プログラムの設定 (別紙)

データベースの定期的な自動更新を希望される場合、Database Manager 画面から設定を 行う必要があります。

自動更新の設定方法に関しては、別紙「配列データベース管理マニュアル」 http://www.matrixscience.jp/pdf/jap_database_manager.pdf

の項目「Section 別設定内容::Database Manager Section」->「▼データベースファイルの 定期的な自動取得・更新設定」にまとめています。詳しくはそちらをご覧ください。

ただしデータベース設定直後のファイルダウンロードが完了しないと自動更新の時間設定が できません。その場合は時間をおいて再度設定を試みてください。

12. MASCOT Daemon インストール (別紙)

質量分析装置の解析用ソフトウェアからの検索でない場合、MASCOT Server の検索を自動的に行う Mascot Daemon のインストールも行って頂く事をお勧めいたします。daemon のインストール手順に関しては、別紙「Mascot Daemon マニュアル」

URL: http://www.matrixscience.jp/pdf/jap_2.6_mdaemon_manual.pdf
の「2.インストレーションと環境設定」-「2.2 新規インストレーション」にまとめてありますのでそちらをご覧ください。

● 技術サポート

インストール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