

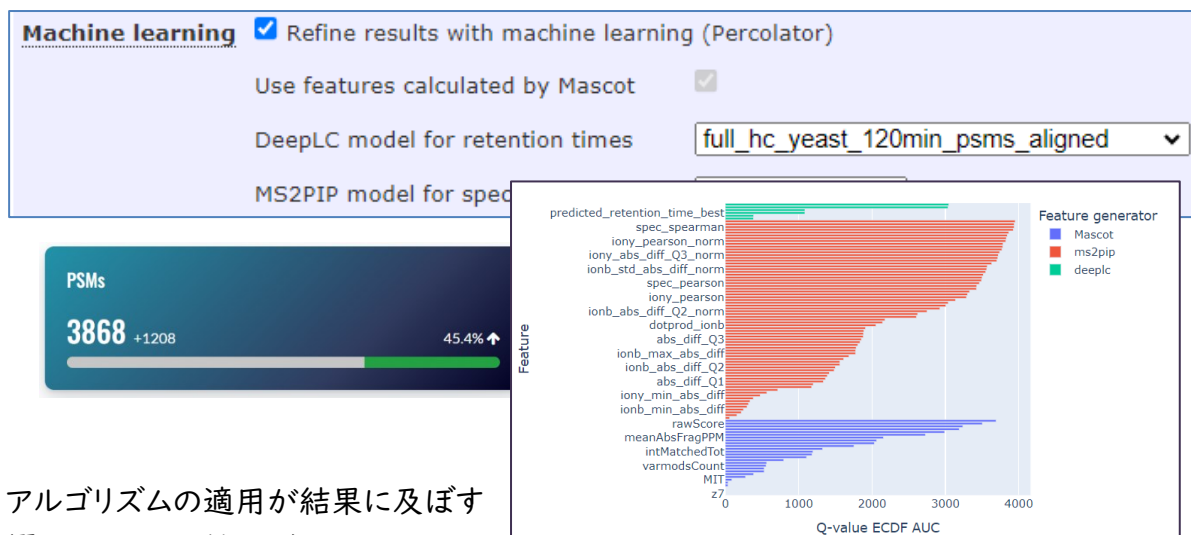
Mascot Server ver. 3.0 新機能紹介

1. 機械学習アルゴリズムの採用：同定ペプチド数の増加

新たなアルゴリズム **MS²Rescore** を MASCOT に組み込みました。**MASCOT** の検索結果のスコアに加え様々な要素を組合わせた再スコアリングを行い、同定ペプチド数を増やします。

MS²Rescore は、保持時間予測アルゴリズム DeepLC と MS/MS スペクトル予測アルゴリズム MS²PIP の結果を Percolator と組合わけて再スコアリングを行います。

検索時あるいは検索後の結果画面にて、再スコアリングを実施するかどうか、並びに予め準備された DeepLC と MS²PIP のモデルを選択します。非常に簡単な操作によって MS²Rescore を適用した結果を得る事ができます。



アルゴリズムの適用が結果に及ぼす影響について、比較ができます。また再スコアリングに反映された要素(feature)の貢献状況について確認する事もできます。

機械学習アルゴリズムと再スコアリングについて、詳しくは以下 URL ページをご覧ください。

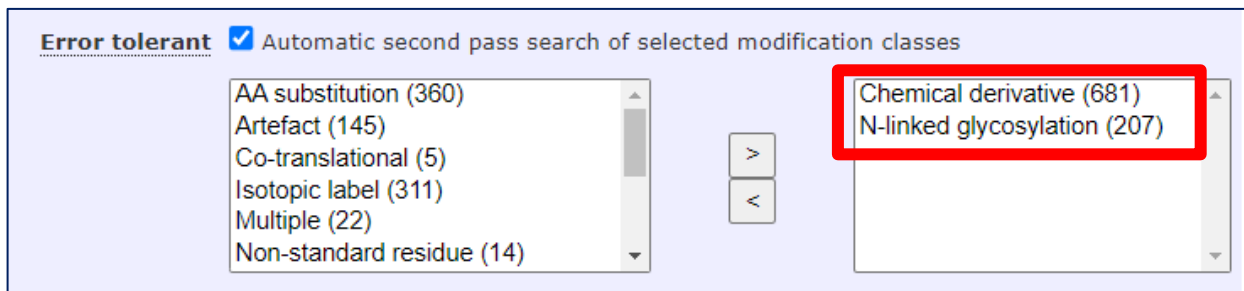
<https://www.matrixscience.com/help.html#REFINING>

保持時間予測アルゴリズムを有効活用するためには、検索時のピークリストファイルに raw データの保持時間情報を含ませる必要があります。**Mascot Distiller** があれば簡単にそれを実行する事ができます。

2. Error Tolerant 検索[二段階検索]の改善

Error Tolerant 検索 [2段階拡張検索] とは、1)指定以外の修飾、2)非特異的切断を伴うペプチド、3)アミノ酸残基置換 の3つを検出することができる2段階検索です。

Mascot ver.3.0 では修飾についてサブグループの定義が実装され、上記1)の計算において考慮する修飾のサブグループを選択できるようになりました(下図)。検索速度が速くなるとともに、検索時に考慮する修飾数が減るためこれまでよりも同定しやすくなります。



3. ファイルフォーマットの変更、ファイルアクセス速度の改善

結果ファイルの情報が記されたファイルについて、これまで採用していたプレーンテキストの.dat から、.msr (Mascot Search Result)ファイルに変更となりました。これにより、ファイルアクセス速度が向上し、結果画面が表示されるまでの時間が短縮されます。ユーザー/関連プログラムのニーズに応じ、.dat 形式でファイル出力したり、検索結果を直接.dat 形式のファイルとして保存する事を続ける事も可能です。

4. その他の改善点

- ・ Mascot Daemon の改良 : 定量計算用拡張スクリプトの搭載、など
- ・ 検索デフォルト値の変更 : Decoy データベース検索の指定がなくなり標準で実施、など
- ・ 不要な表示機能の削除 : Select summary / Peptide summary report 画面の段階的な廃止、など。

ご不明な点がございましたら support-jp@matrixscience.com (技術サポート)にご連絡ください。



マトリックスサイエンス株式会社

support-jp@matrixscience.com

TEL : 03-5807-7895 FAX : 03-5807-7896

〒110-0015 東京都台東区東上野1-6-10 ARTビル1階