Mascot Server version 3.0 新規インストール・アップグレード手順 追加操作

この書類は、Mascot Server version 3.0 を新規にインストール、またはアップグレード後に行わなければならない 操作に関する補足説明が記された資料です。

以下のソフトウェアをご利用の方は、Mascot Server ver.3.0 をインストール後インストール後に追加の対処が必要 になる可能性があります。

I. Thermofisher scientific 社	: Proteome Discoverer
2. Bruker 社	: Biotools または BioPharma Compass
3. Proteome Software 社	: Scaffold 5, Scaffold Q+S, Scaffold DDA

以降各ソフトウェアについてより詳しく説明し、対処方法についてご案内します。

1. Thermofisher scientific 社: Proteome Discoverer

Proteome Discoverer にてすべての機能を有効とするため、弊社サイトにて公開されているパッチプログラムを入手 して、MASCOT Server 上でファイルを入れ替える作業を行う必要があります。

操作手順は以下の通りです。

操作手順:

1. Mascotの Home 画面へアクセスし Database Status を開きます。画面上部をご覧頂き、Mascot Serverのバージョンが 3.0.0 であることを確認します。異なる場合は以下でご案内するパッチプログラムの入れ替えをしないでください。

MATRIX SCIENCE	Search this site	MASCOT search status page
me Access Mascot Server Help Support d Training d Monthly newsletter d About		Version: 3.0.0 - MSKK (NXEV-MSNN-44RK-774S-CESZ) <u>Licence Inf</u> 24 logical, 1 physical Intel processors (hyper-threading enabled, 12
ascot Server 3.0 sot Server is a powerful search engine that uses mass spectrometry data to identify characterise proteins from primary sequence databases. Mascot has no limits and can ch data sets of unlimited size against sequence databases with billions of proteins. It's new in Mascot Server 3.0	Quick Links > Log in > Search Log > Database Status > Compuration Edite > Log out	Active databases: 27. Inactive databases: 2. Max databases: 256.
 Mascot Server licence is for in-house use only. Access to this Mascot server must be ricted to authorised users. We strongly recommend that your server is protected by a ure firewall. 		Name = <u>AmbystomaMexicanum</u> Family = C:/inetpub/mascot/sequence/Ambystom Filename = AmbystomaMexicanum_20220624.fasta Pathname = C:/inetpub/mascot/sequ Status = In use <u>Statistics Compression warnings Recom</u> State Time = Tup Oct 15 11:35:10 # searches = 0

- 2. Mascot_Server_3_0_client_pl_for_PD.zip (I5 kB)をダウンロードします。 <u>https://www.matrixscience.com/downloads/Mascot_Server_3_0_client_pl_for_PD.zip</u> この zip ファイルには、修正された Perl スクリプトが含まれています。
- 3. Mascot サーバー上で、C:¥inetpub¥mascot¥cgi¥client.pl のバックアップを作成します。 (Linux の場合は/usr/local/mascot/cgi/client.pl などです)。ファイルを別の場所にコピーしてください。
- 4. ダウンロードした ZIP ファイルを解凍して得られる client.pl を、上記ファイルと置き換えます。(上書き保存など)
- 5. Proteome Discoverer から Communication Test を実行します。

なお現段階において、Proteome Discovererとの互換性の問題は他にありません。Mascot PDノードは、.msrの結果を 「dat28」フォーマットに自動的に変換する Mascot API スクリプト(client.pl)を使用します。 PDノードの「Mascot」は、DeepLC または MS²PIP を使用した結果の絞り込みについて現在サポートしていません。

2. Bruker 社: Biotools または BioPharma Compass

MASCOT Server ver.3.0 では結果ファイルフォーマットが変更になりました。新しいファイルフォーマットは(.msr)です。 Bruker 社の Biotools または BioPharma Compass の現行バージョンでは、MASCOT の検索結果を入手するために 古いバージョンの MASCOT API を利用しており、必要なファイルは.dat となります。ファイルフォーマットの違いに対処 するための 方法については、次頁に記載されている[MASCOT Server 設定変更] をご参照ください。

3. Proteome Software 社: Scaffold 5, Scaffold Q+S, Scaffold DDA

MASCOT Server ver.3.0 では結果ファイルフォーマットが変更になりました。新しいファイルフォーマットは(.msr)です。 ProteomeSoftware 社 のソフトウェア、Scaffold 5, Scaffold Q+S, Scaffold DDA では、検索結果の取り込み に .dat ファイルが必要ですが、ver.3.0 では標準設定において .dat を生成しません。そのための対処法は以下 A,B の 2 種類があります。お好みの方法をお選びください。

A. MASCOT の結果画面、Export ボタン隣から "Mascot DAT File" を選択し、"Export"ボタンを押します(下図)。

Re-search All O Non-significant O Unassigned 	⊿ [help]	Export	As	Mascot DAT File V	
------------------------------------------------------------------	-----------------	--------	----	-------------------	--

B. 次頁に記載されている [MASCOT Server 設定変更]を実施してください。ユーザーが特に操作をしなくても.dat が自動的に作成されるよう、MASCOT Server の設定が変更されます。



Bruker 社または Proteome Software 社のソフトウェアとの連携に関する問題を解消するための設定変更操作です。 MASCOT Server の設定 変更を行ってファイルフォーマットを旧バージョンで採用していた .dat ファイルのまま利用を 続けるように指定します。

1. Home -> Configuration Editor -> Configuration Options

	Home Access Mascot Server Help Support 🗹 Training 🗹 Monthly news	etter 🗹 About
	Mascot Server 3.0	Quick Links
	Mascot Server is a powerful search engine that uses mass spectrometry data to and characterise proteins from primary sequence databases. Mascot has no limits	identify > Log in and can > Search Log
Mascot Config	uration	eins. > Database Status > Configuration Editor
Amino Acids	Amino Acid Data	> Log out
Modifications	Modification definitions	red to the total sector of total s
Symbols	Symbols used in chemical formulae	
Linkers	Linker definitions	
Enzymes	Enzyme definitions	•
Instruments	Fragmentation Rules	
Quantitation	Quantitation Methods	
Crosslinking	Crosslinking Methods	
Configuration Options	Global Options in mascot.dat	
Database Manager	Sequence databases, Parse Rules and automated downloads	

画面下部にあるパラメーター「AlwaysCreateDat28ResultsFile」の値を 0 から 1 に変更し、画面下部の"Apply" ボタンを押します。

SearchSubmitAcceptedFileTypes	Mascot generic,mzML (.mzML)
SearchSubmitDefaultPeptideCharge	2+, 3+ and 4+
SearchSubmitOutputFormat	msr
AlwaysCreateDat28ResultsFile	1
	Add New Option APPLY

ご案内事項は以上です。

ł

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

