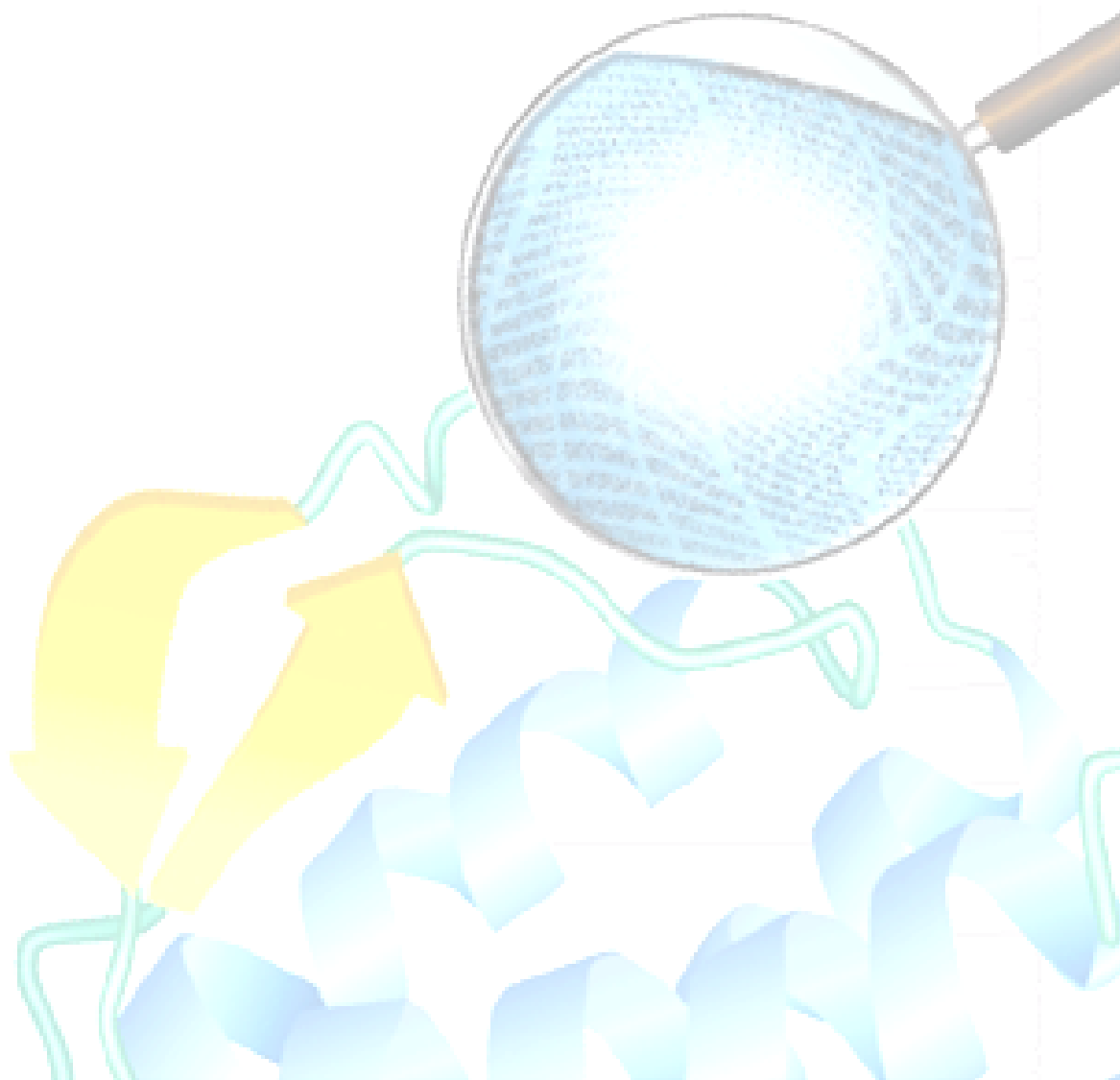


# Mascot *Distiller*

マニュアル Version 2.3



<b>1</b>	<b>概要</b>	<b>3 頁</b>
	Mascot Distiller のソフトウェア構成や機能の概要を説明しています。	
<b>2</b>	<b>新規インストール</b>	<b>4 頁</b>
	Mascot Distiller の新規インストール操作を説明しています。インストール開始後、表示されるダイアログに従って作業を進めてください。Windows 2000、XP Professional、Server 2003、Vista (Business/Ultimate)、2008 で動作します。64 ビット版の Windows にも対応していますが、32 ビットアプリケーションとして動作します。	
<b>3</b>	<b>ライセンスの発行手続き</b>	<b>7 頁</b>
	ライセンスの発行手続きとライセンスのインストール方法について説明しています。	
<b>4</b>	<b>動作システム構成</b>	<b>11 頁</b>
	各メーカーの質量分析計から出力されるデータファイルを読み込むための環境設定方法について説明しています。	
<b>5</b>	<b>アップグレード</b>	<b>14 頁</b>
	古いバージョンからのアップグレードの方法について説明しています。	
<b>6</b>	<b>アンインストール</b>	<b>15 頁</b>
	アンインストールの方法について説明しています。	
<b>7</b>	<b>使用方法</b>	<b>16 頁</b>
	ヘルプ書類へのアクセス方法を説明しています。	
<b>8</b>	<b>お問い合わせ</b>	<b>17 頁</b>

## 1 概要

Mascot Distiller は、質量分析計から出力される質量データファイル (raw data file) を可視化するとともに、Mascot 検索に適したピークリストの作成、Mascot 検索の実行、Mascot 検索結果の取込・可視化、de novo シーケンシング、シーケンスタグの作成、定量解析 (Precursor、ラベルフリー) などのデータ処理を行います。Mascot Distiller は Core モジュールと Core モジュールに追加するオプションモジュールで構成されています。

### Core モジュール

- すべての質量分析メーカーの質量データフォーマットに対応
- 質量データの可視化
- ピークリスト作成
- Mascot 検索の実行

### Daemon Toolbox (オプションモジュール)

- Mascot Daemon との接続環境構築

### Search Toolbox (オプションモジュール)

- Mascot 検索結果の読込と可視化
- de novo シーケンシング
- シーケンスタグの生成

### Quantitation Toolbox (オプションモジュール : Search Toolbox が必要です)

- Precursor プロトコル (<sup>18</sup>O, SILAC, ICAT, ICPL, AQUA, Metabolic 等) に対する定量解析
- ラベルフリー (Replicate, Average) に対する定量解析

### Developer Toolbox (オプションモジュール)

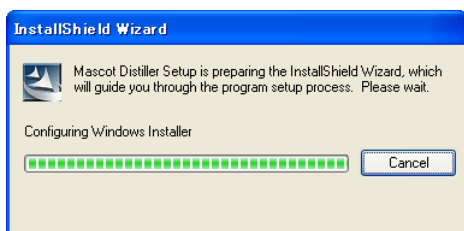
- Mascot Distiller ライブラリを利用するためのプログラム開発環境

### フリー・ビューアー

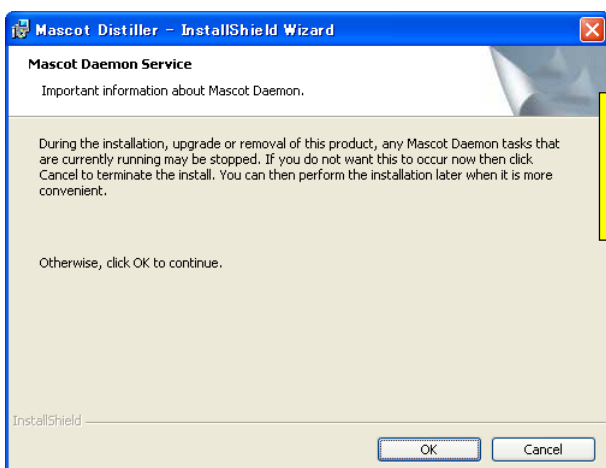
Mascot Distiller 上で処理された結果はプロジェクトファイル (\*.rov) として保存することができます。Mascot Distiller は「プロジェクトファイル・ビューアー」モードをサポートしており、Mascot Distiller ライセンスの有無にかかわらず、Mascot Distiller で作成されたプロジェクトファイル (\*.rov) を読み込み、プロジェクトの内容を表示することができますので、Mascot Distiller のライセンスをお持ちではない研究者との間で Mascot Distiller の処理結果を共有することができます。Mascot Distiller をインストールした後、または 30 日トライアルライセンスが切れた後に起動すると、ライセンスの取得を促すダイアログ [Licensing: Mascot Distiller] が表示されますので、ダイアログの右下にある [View-mode only] ボタンを押してください。Mascot Distiller は「プロジェクトファイル・ビューアー」として起動します。

## 2 新規インストール

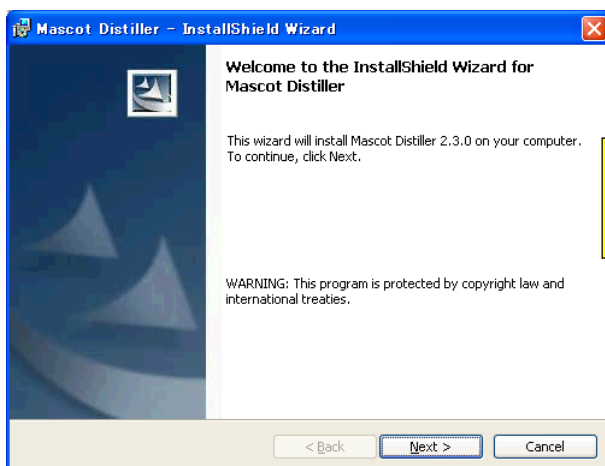
- (1) 起動しているアプリケーションソフトウェアがあればそれらを終了してください。
- (2) Mascot Distiller のインストール CD を光学ドライブに挿入し、インストール CD に含まれる [distiller\_2\_3\_x\_setup.exe] ファイルをダブルクリックして実行してください。あるいは、[http://www.matrixscience.com/distiller\\_support.html](http://www.matrixscience.com/distiller_support.html) ページの [setup.exe] リンクをクリックしたときに表示されるダイログの [実行] ボタンを押してください。インストールが始まります。
- (3) 表示されるウィザードに従いインストールを進めてください。



setup.exe を実行するとインストールのための準備が始まります。Windows Vista の場合はファイルを右クリックし、[管理者として実行] を選択してください。



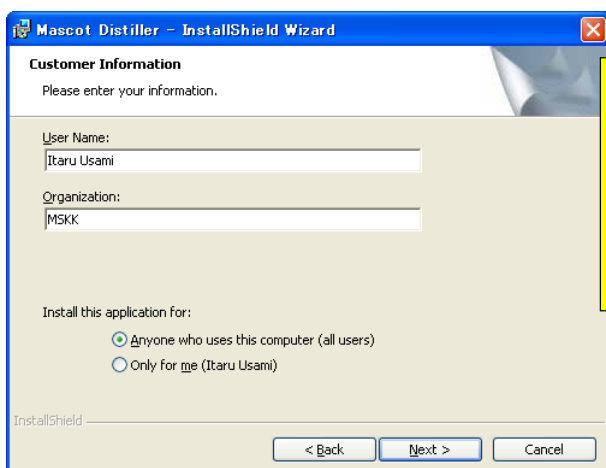
Mascot Daemon が稼働している場合はこのようなダイアログが表示されます。[OK] ボタンをクリックすると Mascot Daemon Service が停止します。



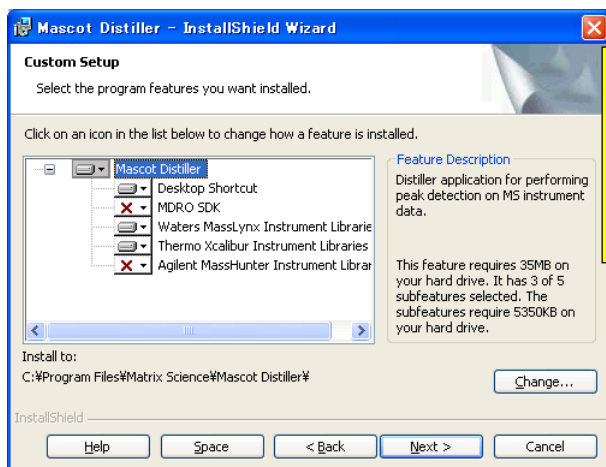
インストールの準備が完了するとこのダイアログが表示されますので [Next >] ボタンをクリックしてください。



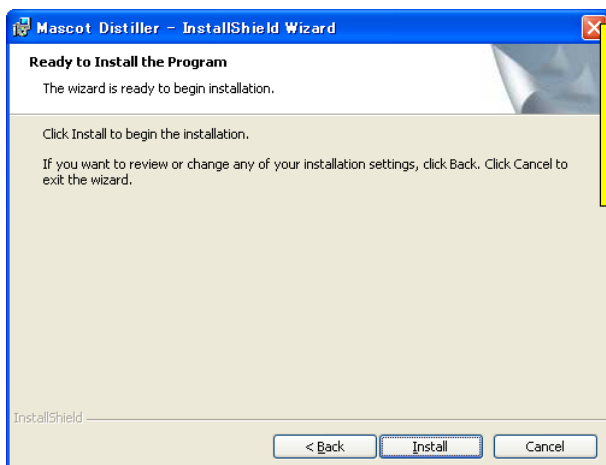
License Agreement をお読みください。内容に問題がないようでしたら「I accept the terms in the license agreement」のラジオボタンをチェックし、[Next >] ボタンをクリックしてください。



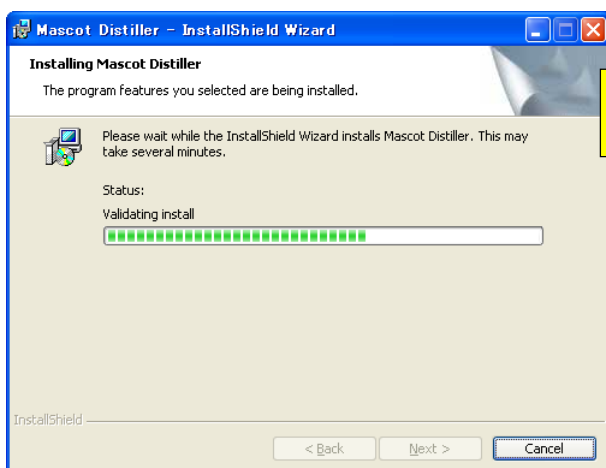
[User Name] および [Organization] 入力欄に適切な文字列を入力してください。Mascot Distiller を利用するユーザを指定することができますので、[Anyone who uses this computer (all users)] または [Only for me] を選択し、[Next >] ボタンをクリックしてください。



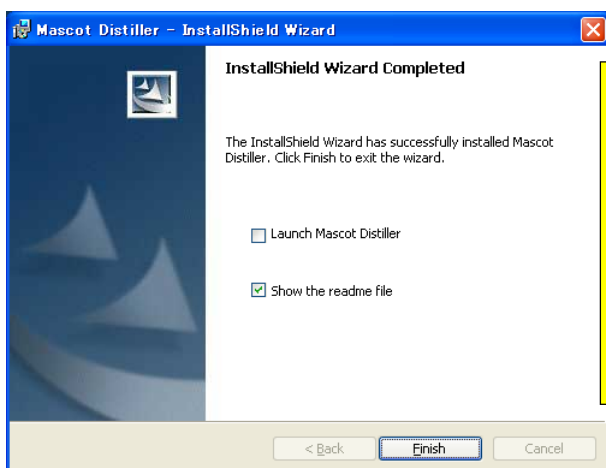
×印の MDRO SDK は別途ライセンスが必要です。Agilent MassHunter をお使いのお客様は HDD アイコンを選択してください。インストールするフォルダを確認し、[Next >] ボタンをクリックしてください。



インストールの準備が整った旨のダイアログです。[< Back]をクリックすることにより前のダイアログに戻ることができます。問題ないようでしたら[Install]ボタンをクリックしてください。



インストールが始まります。終了するまでしばらくお待ちください。



インストールが正常に終了するとこのダイアログが表示されます。「Launch Mascot Distiller」をチェックすると、インストール終了後に Mascot Distiller が自動的に起動します。[Finish]ボタンをクリックし、次の「3 ライセンス発行手続き」に進んでください。  
Mascot Distiller を「プロジェクトファイル・ビューアー」として利用する場合はこれで終了です。

これで新規インストール作業は終了です。次の「3 ライセンスの発行手続き」に進んでください。

Mascot Distiller を「プロジェクトファイル・ビューアー」として利用する場合は Mascot Distiller を起動してください。ライセンスの取得を促すダイアログ [Licensing: Mascot Distiller] が表示されますので、ダイアログの右下にある [View-mode only] ボタンを押してください。

### 3 ライセンスの発行手続き

Mascot Distiller を起動し、ライセンスの発行手続きを行ってください。登録フォーム（Web ブラウザによるオンライン登録フォームまたはファクシミリによるオフライン登録書類を選択することができます）に必要な事項を記入し、弊社宛にお送りください。折り返し、ライセンス情報を含む電子メールをお送りいたします。

お送りした電子メールの本文にライセンス情報が含まれていますので、本文全体をコピーしてください（クリップボードにその内容がコピーされます）。Mascot Distiller にはクリップボードの内容を自動的に読み込む機能がありますので、クリップボードにライセンス情報が含まれている場合はそれを自動的に読み取り、ライセンスのインストールが完了します。

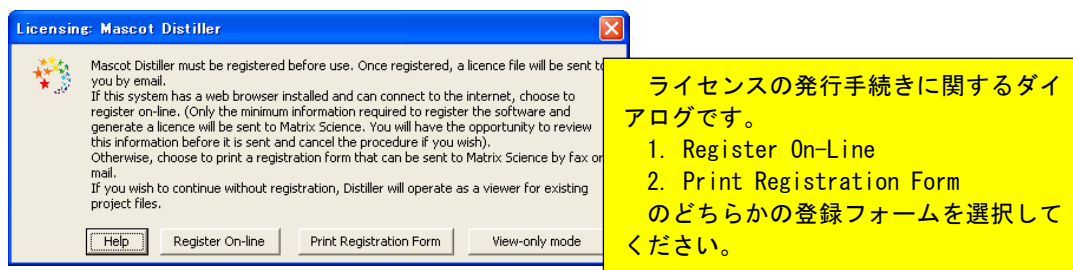
#### (1) Mascot Distiller の起動

デスクトップの Mascot Distiller アイコンをダブルクリックするか、または[スタート]→[すべてのプログラム]→[Mascot]→[Mascot Distiller]を選択し、Mascot Distiller を起動してください。



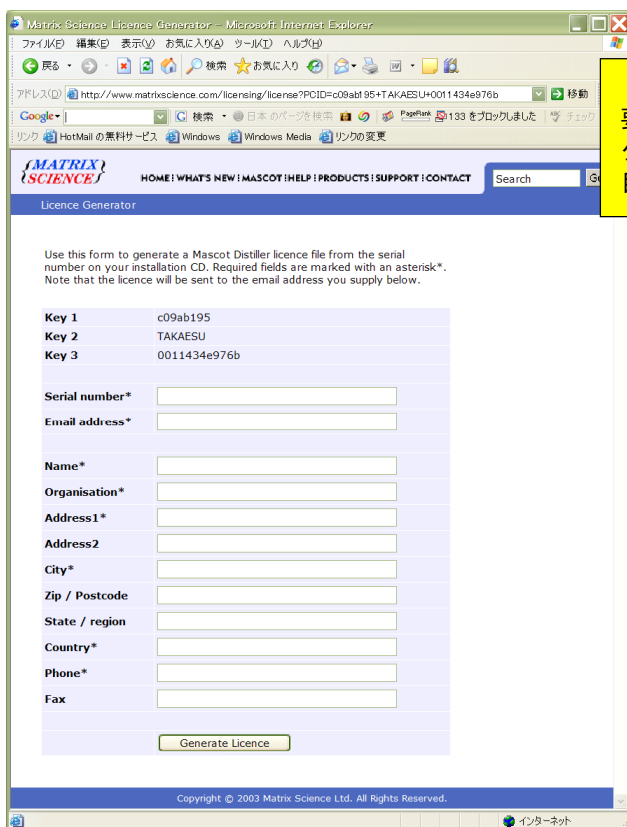
#### (2) 登録フォームの表示

所定のフォルダ(C:\Program Files\Common Files\Matrix Science\licdb)にライセンスファイルが存在しない場合や無効になっている場合は、ライセンスの発行手続きに関するダイアログが表示されます。



#### (3) オンラインによるライセンス発行手続き（オフラインを希望する場合は(4)をご覧ください）

PC に Web ブラウザがインストールされていて、インターネットへの接続環境が整っている場合は [Register On-line] ボタンをクリックしてください。弊社のライセンス発行サーバに接続され、次の画面が表示されます。

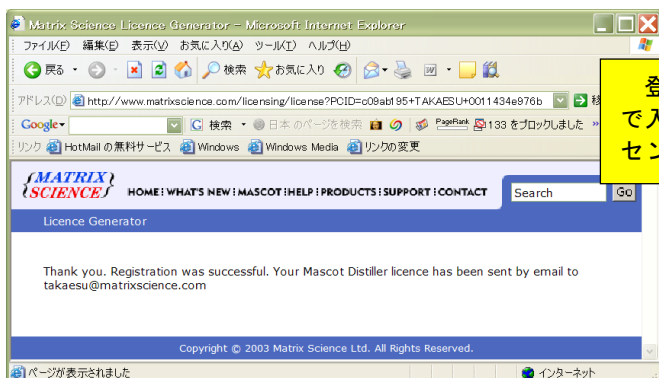


オンライン登録フォームの各項目に必要な事項を入力してください。アスタリスク（\*）が付いている項目は入力必須項目です。

アスタリスク（\*）が付いている項目は入力必須項目です。「Serial number」入力欄にはシリアル番号を入力します。シリアル番号は 68E9-3233-73A7 のような形式を持っています。シリアル番号が不明な場合は弊社技術サポートまでご連絡ください。

ここで入力された情報は Mascot Distiller のライセンス発行およびお客様への技術サポートの提供以外の目的(広告主や第三者への提供など)で使用することはありません。

入力項目への入力が終わりましたらページの最下位にある[Generate Licence]ボタンをクリックしてください。次のページが表示され、「Email address」項目で入力した電子メールアドレス宛にライセンスをお送りいたします。



登録が完了すると[Email address]項目で入力した電子メールアドレス宛にライセンスを送付しますのでご確認ください

なお、異なる PC への再インストールや既存ライセンスが無効になるような PC システム構成の変更（ネットワークカードを変更したような場合）を行った場合は、再度ライセンスを取得する必要がありますので弊社技術サポートまでご連絡ください。

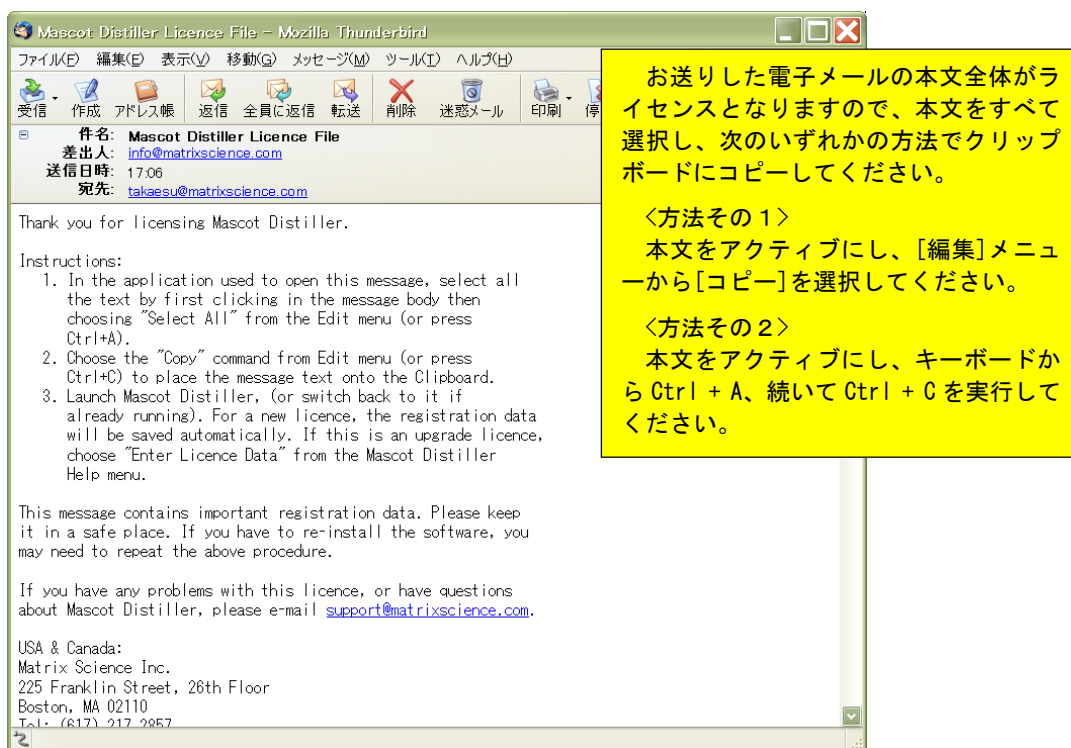
#### (4) ファクシミリによるライセンス発行手続き

インターネットへ接続できない場合やオンラインでの登録手続きを希望されない場合は [Print Registration Form] ボタンをクリックしてください。ファクシミリ送付シート (Licence\_request.rtf ファイル) が開きますので、必要事項を記入し弊社宛にファクシミリをお送りください。「Email address」項目で入力した電子メールアドレス宛にライセンスをお送りいたします。

#### (5) ライセンスのインストール

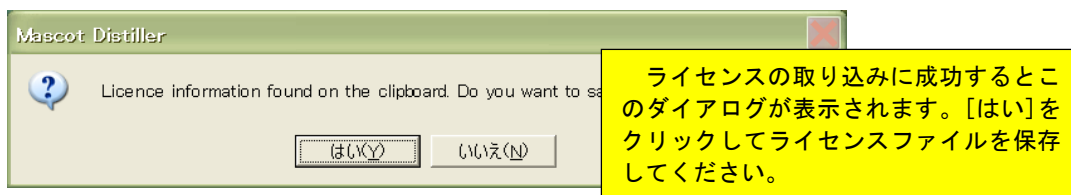
お送り頂きました登録情報に基づきライセンスを作成し、「Email address」項目で入力した電子メールアドレス宛にライセンスをお送りいたします。

Mascot Distiller は Windows のクリップボードに保存されたライセンス情報を自動的に取得することができます。お送りした電子メール（電子メールのメッセージ本文全体がライセンスになっているとお考えください）に関して、次の操作を行ってください。



- ① お送りした電子メールメッセージを開き、メッセージ本文が表示されているウインドウをクリックし（アクティブにし）、[編集]メニューから[すべて選択]を選択してください（あるいはキーボードの Ctrl キーを押しながら A キーを押してください）。メッセージ本文が反転し、選択されます。
- ② [編集]メニューから[コピー]を選択してください（あるいはキーボードの Ctrl キーを押しながら C キーを押してください）。メッセージ本文が Windows のクリップボードにコピーされます。

- ③ Mascot Distiller を起動してください。Mascot Distiller がすでに起動している場合は Mascot Distiller をアクティブにしてください。Windows のクリップボードにコピーされているライセンスが新規ライセンスの場合、Mascot Distiller は自動的にそのライセンスを取り込み、有効にします。Windows のクリップボードにコピーされているライセンスが新規ライセンスではなくアップグレードライセンス等の場合は、[Help]メニューの[Enter License Data]を選択してください。Mascot Distiller はライセンスを取り込み、有効にします。



- ④ 上記の操作がうまくいかない場合は、電子メールのメッセージ本文を ASCII (American Standard Code for Information Interchange) テキストファイル (ファイル名は Distiller.lic) として作成し、C:\Program Files\Common Files\Matrix Science\licdb フォルダに保存してください。

## 4 動作システム構成

Mascot Distiller は、Windows 2000、Windows XP Professional、Windows Server 2003、Windows Vista (Business/Ultimate)、Windows 2008 で動作します。64 ビット版の Windows にも対応していますが、32 ビットアプリケーションとして動作します。

Mascot Distiller から直接 Mascot 検索を実行する場合は Internet Explorer 5.5 以降が必要です。

Mascot Distiller は次の質量分析計データ処理ソフトウェアから出力されるデータファイルフォーマットをサポートしています。いくつかのデータファイルフォーマットについては、対応する質量分析計データ処理ソフトウェアに付属するライブラリファイル群(DLL あるいは OCX と呼ばれる Windows のプログラムライブラリで、Mascot Distiller がデータファイルを読み込む際に利用します)が必要です。質量分析計データ処理ソフトウェアがインストールされている PC に Mascot Distiller をインストールする場合は特別な環境設定等は必要ありませんが、質量分析計データ処理ソフトウェアがインストールされていない PC に Mascot Distiller をインストールする場合は、必要なライブラリファイルをインストールしてください。

### (1) Agilent MassHunter (Q-TOF)

ライブラリは必要ありませんが、Microsoft .NET Framework 2.0 が必要です。

### (2) Agilent wiff format (LC/MS TOF)

Agilent LC/MSD TOF ソフトウェアがインストールされている PC に Mascot Distiller をインストールしてください (Version A.02.01 で動作確認をしています)。

### (3) Applied Biosystems Data Explorer (Voyager、4x00)

4000 Series Explorer から出力される \*.T2D ファイルに対してはライブラリは必要ありません。

Voyager の\*.DAT ファイルを処理したい場合は Data Explorer がインストールされている PC に Mascot Distiller をインストールしてください。Data Explorer version 3.5 から 4.9 で動作確認をしています。なお、Data Explorer の仕様上、Data Explorer と Mascot Distiller を同時に起動するとエラーが発生しますので、同時に起動しないでください。

### (4) Applied Biosystems Analyst (QStar、QTrap)

ライブラリは必要ありません。

### (5) Bruker XMASS / XTOF (Reflex、Biflex 等)

ライブラリは必要ありません。

XMASS FT データに対しては常にプロファイルデータとして読み込んでください。また、PSD データファイルに対する電荷は 1 を指定してください。

### (6) Bruker / Agilent yep format (Bruker Esquire、Agilent LC/MS Trap)

ライブラリは必要ありません。

### (7) Bruker baf format (Apex、MicroTOF)

圧縮された質量データファイルを含んでいる場合は Bruker-Compass ソフトウェアが必要になりますので、CompassXtract Bonus-CD 2.0 を入手するか、Bruker 社のサイトから CompassXPort ソフトウェアをダウンロードしてください。

(※ CompassXPort は C:\Program Files\Common Files\Bruker Daltonik\AIDA\compression フォルダに compressor-Dlls をインストールします。)

#### (8) mzXML

mzXML スキーマのバージョン 2.0 か 2.1 のファイルをご利用ください。これ以前のバージョンはサポートしていません。バージョンの確認方法として、ファイルをテキストエディタで開き、最初の数行を見てください。次のような文章が記載されている場合は、mzXML\_2.0 あるいは mzXML\_2.1 のスキームです。

```
<?xml version="1.0" encoding="ISO-8859-1"?>
<mzXML
xmlns="http://sashimi.sourceforge.net/schema_revision/mzXML_2.1"
xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
xsi:schemaLocation="http://sashimi.sourceforge.net/schema_revision/mzXML_2.1
http://sashimi.sourceforge.net/schema_revision/mzXML_2.1/mzXML_idx_2.1.xsd">
```

最初の数行で MsXML.xsd のスキーマを参照している場合は、このファイルは Mascot Distiller がサポートしていない古いフォーマットです。

Applied Biosystems Analyst が出力した mzXML ファイルは、圧縮されたプロファイルデータを含んでおり、失われたデータポイントを復元することができないため、Mascot Distiller ではサポートしていません。

#### (9) Waters (Micromass) Masslynx (QToF, M@Idi, ToFSpec)

ライブラリは必要ありません。

#### (10) Thermo Finnigan Xcalibur (LCQ, LTQ, Orbitrap)

ライブラリは必要ありません。

#### (11) Shimadzu Kompact (Axima)

ライブラリは必要ありません。

Mascot Distiller は Axima CFR, Axima CFR plus, Axima QIT のデータファイルをサポートしています (初期の Kompact データファイルでの動作確認は行っていません)。データファイルを開くためには gzip.exe プログラム (Launchpad に含まれています) が必要です。Launchpad がインストールされている場合、gzip.exe プログラムは C:\Program Files\Kompact\programs ディレクトリにありますので、このディレクトリにシステムパスを通してください。

サポートしているキャリブレーション手法は、Least square (old and new)、Quadratic、Cubic、Two point です。Polynomial はサポートしていません。

PSD データについては、Cubic spline を使った Additional fragment correction をサポートしていますが、Quadratic fit はサポートしていません。

Complete LC Maldi run の場合は LCSpots0001.run ファイルを開いてください。全ての MS スペクトルが読み込まれると同時に、関連する MS/MS スペクトルに対応する run ファイルも読み込まれます。これらのファイルは同じフォルダに配置してください。なお、Cal1Spots および Cal2Spots は無視されます。

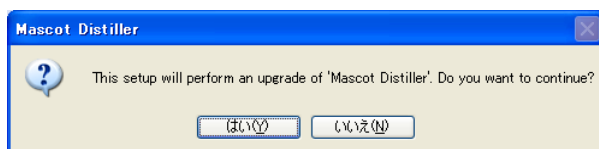
自動測定データの場合はベースとなる run ファイルを指定することにより、全ての MS および MS/MS スペクトルを読み込みます。たとえば、sample\_0001.run ファイルを読み込むことにより、N14 スポットの 1164 と 1440 プリカーサに対応する、sample\_0001-N14-1164\_0001.run および sample\_0001-N14-1440\_0001.run ファイルを読み込みます。

#### (12) Shimadzu LCMSsolution (LCMS-IT-TOF)

Shimadzu LCMS-IT-TOF Data Export ライブラリ (TTFLDataExport) 1.02 が必要です。

## 5 アップグレード

- (1) [http://www.matrixscience.com/distiller\\_support.html](http://www.matrixscience.com/distiller_support.html) ページの [setup.exe] リンクをクリックしたときに表示されるダイログの [実行] ボタンを押してください。アップグレードが始まります。



- (2) 表示されるウィザードに従いアップグレードを進めてください。

## 6 アンインストール

- (1) スタートメニューから[設定]→[コントロールパネル]を選択してください。
- (2) [アプリケーションの追加と削除]アイコンをダブルクリックしてください。
- (3) リストから Mascot Distiller を選択し、[削除]ボタンをクリックしてください。
- (4) InstallShield ウィザードに従い Mascot Distiller を削除してください。

## 7 使用方法

(1) Mascot Distiller の処理の流れクイックスタート

次の資料は Mascot Distiller の操作手順について説明しています。クイックスタートとしてご利用ください。

[http://www.matrixscience.jp/pdf/MascotDistiller\\_2\\_2\\_ProcessingQuickStart.pdf](http://www.matrixscience.jp/pdf/MascotDistiller_2_2_ProcessingQuickStart.pdf)

(2) Mascot Distiller ヘルプページ

Mascot Distiller を起動し、[Help] → [Mascot Distiller Help]を選択してください。ヘルプ書類が起動します。左側ウインドウの[目次]タブを有効にすると目次が表示されますので、[Core Functions]をクリックし、[Quick tour : Processing a single MS scan]または[Quick tour : Processing an LC-MS/MS dataset]の部分を参照してください。また、必要に応じてその他の項目をご参照ください。

## 8 お問い合わせ

何かお困りのことがありましたら弊社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

電子メール : support-jp@matrixscience.com

電話 : 03-5807-7897

ファクシミリ : 03-5807-7896

住所 : 〒101-0021 東京都千代田区外神田 6-10-12 KN ビル 3 階

© 2003-2009 マトリックスサイエンス株式会社、Matrix Science Limited