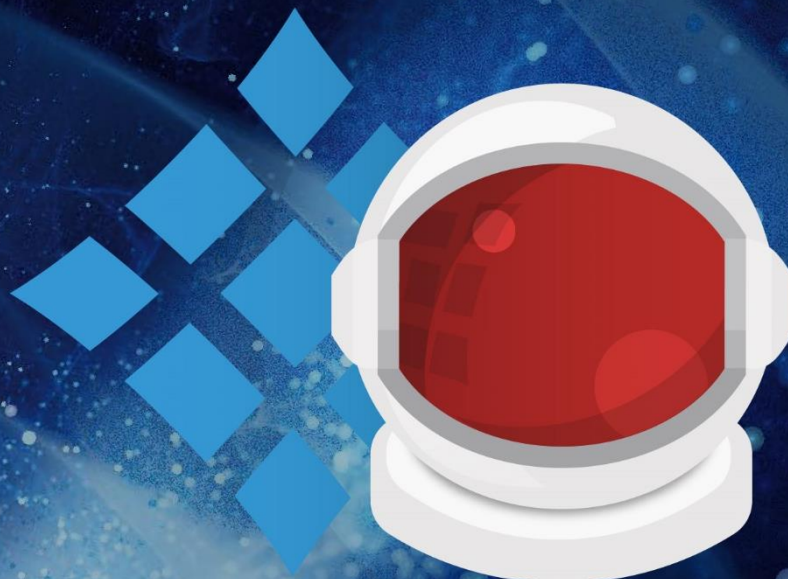


# DIAプロテオミクス 解析ソフトウェア



**Spectronaut<sup>®</sup>**  
*powered by Pulsar*

TAKE YOUR DIA DATA  
TO THE NEXT LEVEL

The Most Complete and Versatile Solution  
for Quantitative Proteomics

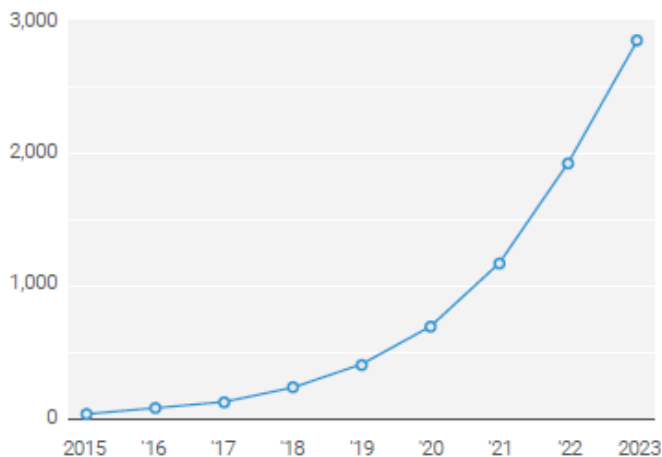
# THE GOLD-STANDARD FOR DIA PROTEOMICS ANALYSIS

Spectronaut®は、簡単な操作で実行可能な、迅速かつロバストでシームレスなプロテオミクスソリューションを提供します。絶え間ない最先端のイノベーションにより、Spectronautはデータ取得における最新テクノロジーをサポートし、継続的な改良がおこなわれています。

データ独立取得（DIA）は、ディスカバリープロテオミクスにおいて、高深度のカバレッジや優れた再現性、複雑な生物情報をもつ多数のサンプル間の高い正確性を提供します。<sup>1</sup>

2013年の最初のリリース以降、私たちは新しい質量分析装置への対応やパフォーマンスの向上に関して、Spectronautを改良し続けてきました。その結果、Spectronautはベンダーに依存しないDIAプロテオミクスの最も重要な解析ソリューションとなり、ライフサイエンス研究に大きな影響を与えています。

Total Mentions of Spectronaut in Scientific Publications Status 01/2024



**Spectronaut®**は、次のような幅広い機能を備え、最新のDIAプロテオミクスの生産性を高めます。

- **Benefit from powerful directDIA™ workflows:** ライブラリー作成のための追加のサンプル測定を必要とせず、ダイレクトにタンパク質を定量します。
- **Take advantage of AI-augmented DIA Software:** 豊富なデータでトレーニングされたモデルにより、幅広いワークフローと使用事例をカバーします。
- **Analyze post-translational modifications (PTMs) with confidence:** DIAの全ポテンシャルを使用して、翻訳後修飾（PTM）の検出と局在、制御を行います。
- **Generate high-quality libraries with Pulsar:** False Discovery Rateをコントロールした、DDAやDIAまたはハイブリッドライブラリーの作成を行います。
- **Enjoy full support for ion mobility technologies:** PASEFとdiagonal PASEF、FAIMS Proをサポートします。
- **Experience the most powerful data visualization for DIA proteomics:** 直感的なユーザーインターフェースを搭載しています。

1) Bruderer et al., MCP, 2017,16, 2296-2309

## 対応している質量分析装置ベンダー

- Bruker
- SCIEX
- Thermo Fisher Scientific
- Waters

## 推奨システム要件

(100kプレカーサーライブラリーをもつ200ランの実験データの場合)

- Windows 10 (64bit) / Windows Server 2016 or Linux Ubuntu
- Intel or AMD CPU 4コア以上
- HDDの空き容量 2 TB以上 (2x data set size)
- メモリ 128 GB



« Spectronautは、私たちのDIAプロジェクトに非常にマッチします。私たちが目指す定量的な信頼性と、ワークフローに必要なスピードと拡張性を提供してくれました。»

**Prof. Dr. Jesper Velgaard Olsen,**  
CPR University of Copenhagen

## 特長

## 利点

パフォーマンス

比類なき正確さとスピード

拡張性

directDIAとLinux/Windowsのクラウドサポートによる大規模プロジェクトへの対応

多用途性

各社の質量分析装置との互換性、およびHRM™, SWATH™, FAIMS-DIA, dia-PASEF®などのワークフローの対応

簡潔性

生データから生物学的解釈までを、単一のアプリケーションで実行

再現性

厳密なFalse Discovery Rateコントロールによるロバストな定量データ

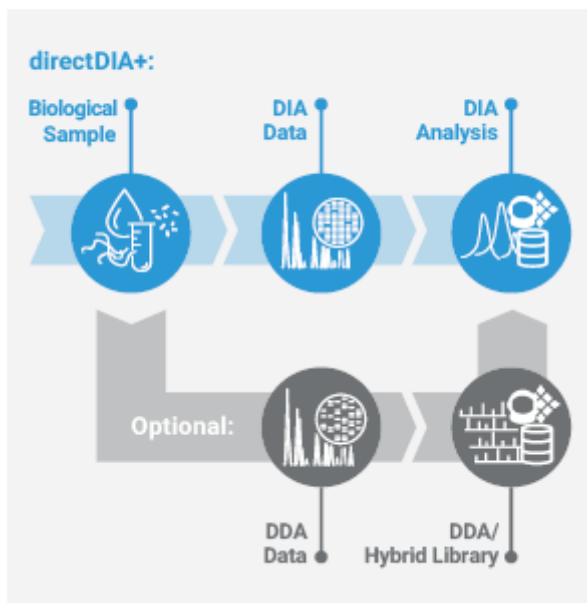
ユーザビリティ

パラメータの最適化の自動調整により、容易かつロバストなデータ解析が可能

# THE DIRECTDIA+ ROUTE TO THE PROTEOME

SpectronautのdirectDIA™では、タンパク質の同定と定量に直接実行し、これはPTMとラベリング実験をネイティブでサポートする、唯一のライブラリーフリーのワークフローです。directDIAでは、高度に分画されたサンプルによる、プロジェクト固有のライブラリーを使用する場合に匹敵した高深度のプロテオームカバレッジを提供します。

**DIA Analysis Using directDIA or a Project-specific DDA Library**

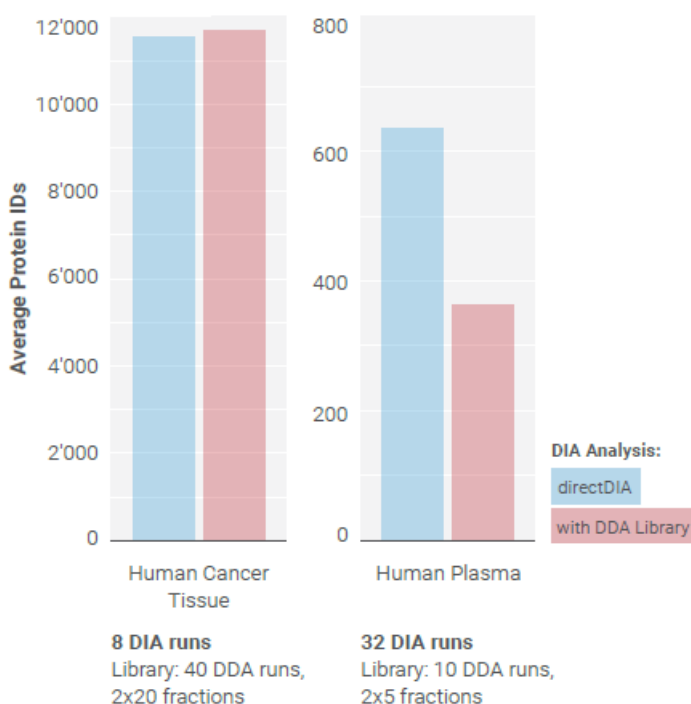


これまで、データ独立取得（DIA）分析は、データ依存性取得（DDA）より作成されたスペクトルライブラリーを必要としていたため、分析装置による追加実験が必要でした（図1）。

SpectronautのライブラリーフリーのDIA解析（directDIA）は、従来のプロジェクトDDAライブラリー匹敵するパフォーマンスをもち、高速かつコストを節約した代替手段を提供します（図2）。

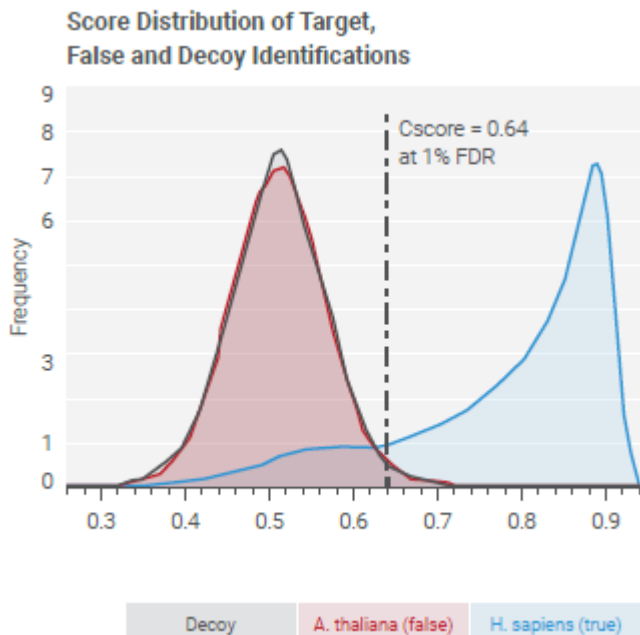
スペクトルライブラリーを用いることを優先したい場合は、簡単に実行可能な、DDAデータとdirectDIAを組み合わせたハイブリッドワークフローがサポートされています。またSpectronautは、クロマトグラフィーの違いや、ライブラリーレベルのFalse Discovery Rateのコントロールが可能で、さらにプロテオミクスプロジェクトを直ちに開始できるように、高品質な生物種特異的な検索アーカイブがあらかじめ搭載されています。

**Comparison of directDIA to Using a Project-specific DDA Library**



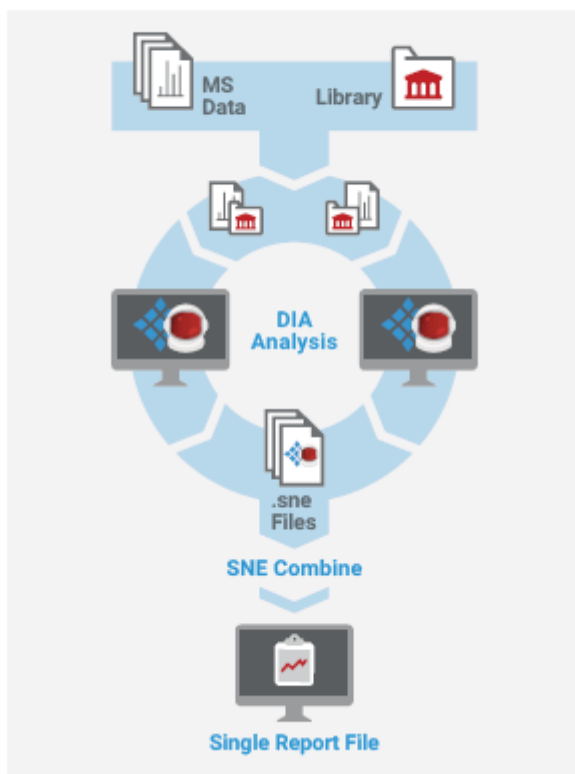
# HIGH PERFORMANCE AND RELIABILITY AT SCALE

Spectronautは、DIAプロテオミクスにおけるロバストかつ信頼性の高いデータ解析のための包括的なソリューションです<sup>2</sup>。革新的なデータ処理とFalse Discovery Rateコントロールソリューションにより、大規模なプロテオミクスデータセットを正確かつ効率的に処理します。



信頼性の高いプロテオミクス解析を行うためには、ペプチドレベルとタンパク質レベルの両データセットで、偽陽性同定率 (False Discovery Rate, FDR) を正しく推定することが不可欠です。同定スコアは、ターゲットとするタンパク質データベースのすべてのペプチドに対して計算され、またFDRを推定するために、in-silicoでデコイペプチドが作成され、それらに対するスコアも計算されます。FDRは、同定されたものの全体のうちの、デコイの割合によって推定されます。理想的には、デコイのスコア分布は、生体サンプルとは無関係なペプチドのスコア分布と相似するはずで、実在するターゲットペプチドのスコアは高くなります (図1)。厳格なFDRコントロールが維持されていることを確認するために、私たちは2種類の試験を実施して、ソフトウェアの性能を評価しています。

## Parallel Processing in the Cloud or High-Performance Cluster



Spectronautでは、独自の高度な並列処理機能により、時間と計算能力を最大限に活用できます。本ソフトウェアでは、数千サンプルからなる大規模データセットに対して、クラウド上の複数のノードで同時に処理を行ったり、全サンプルデータがそろっていない場合、取得済みのサンプルデータのみを使用して解析を始めたたりすることができます (図2)。

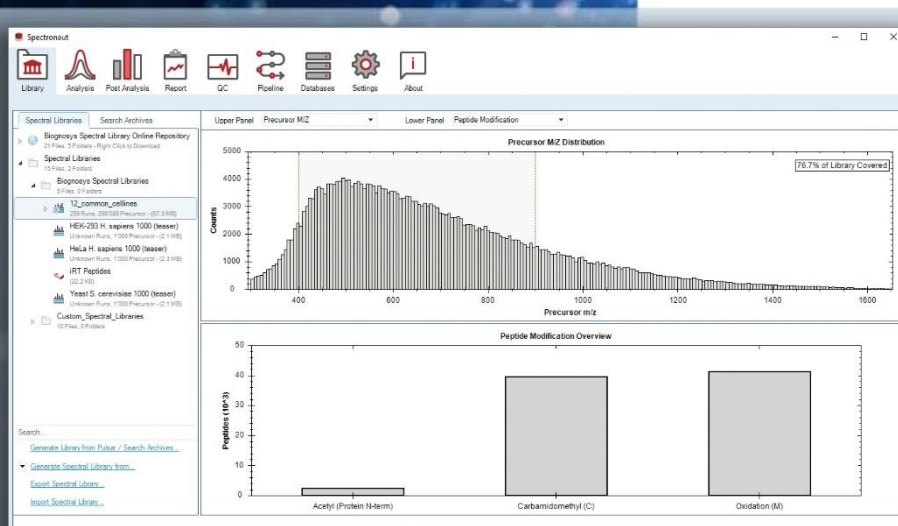
2) **Rosenberger et al.**, Nat. Methods 2017,14, 921-927

# PLUG-AND-PLAY DIA

Spectronautは、ライブラリの作成から結果の生物学的解釈まで実行可能な、DIAの最先端のオールインワンソリューションです。簡単なセットアップと直感的なユーザーインターフェイスを備えており、サンプルのデータファイルを追加するだけで、直ちに解析を始めることができます。

## Build and Import Spectral Libraries

DDA、DIAおよびハイブリッドライブラリのためにBiognosys独自のデータベース検索エンジンPulsarを備えています。さらに、MaxQuant, Mascot, Proteome Discoverer, ProteinPilotなどの外部検索エンジンやテキストファイル形式の検索結果の読み込みもサポートしています。



## Run and Review Your Analyses

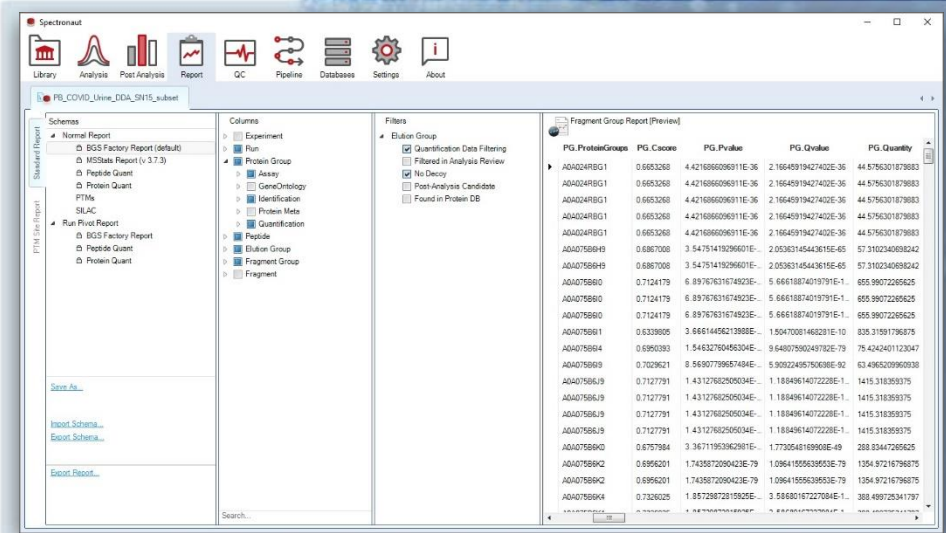
Spectronautのウィザードでは、DIA解析の設定を簡単かつ迅速に行うことができます。生データは、抽出イオンクロマトグラム (XIC) やイオンモビリティプロット、クロスラン強度アライメント、タンパク質カバレッジなどの様々な視覚化オプションを使用して、解析中または解析後に精査することができます。





## Explore Your Results with Ease

インタラクティブブラウザを利用して、タンパク質のカバレッジをすばやく確認できます。また様々なプロットオプションを使用して、目的のタンパク質のデータ品質と相対的存在量を確認することもできます。



## Generate Custom Reports

解析結果レポートはカスタマイズ可能で、フラグメントイオンレベルまでの情報を取得することができ、詳細なPTMの位置レポートの作成も可能です。搭載済みのレポートスキーマは、他のソフトウェアとのデータの連結を容易にさせることができます。



## Draw Experiment-level Conclusions

直感的なデータ視覚プロットで、実験結果の探索を行います。Spectronautでは、すべてのサンプル条件間で統計学的な比較を行い、比較データはワンクリックで出力が可能です。また他のソフトウェアを必要とせず、PTMプロファイルのプロットも表示できます。

# Spectronaut®

Spectronaut® について、さらに詳しい情報や無料トライアルライセンスをご希望の場合は、[biosupport@filgen.jp](mailto:biosupport@filgen.jp)までお問い合わせください。

## Biognosys

**Biognosys** は、最先端のプロテオミクスツールを研究者が利用できるようにすることでライフサイエンスを変革することを専門とする、次世代プロテオミクスのリーダーです。また、プロテオームを理解し、あらゆる分野の研究者に、タンパク質発現と生物学的システムにおける定量化についての深い見方を提供するための一連の製品とサービスを提供しています。

製造元

**Biognosys AG**

Wagistrasse 21 / 8952 Schlieren

Switzerland

TEL : +(41) 44 738 2040

URL : [www.biognosys.com](http://www.biognosys.com)

## 輸入販売元



**フィルジェン 株式会社**  
バイオインフォマティクス部

【お問い合わせ】

〒459-8011 愛知県名古屋市緑区定納山1丁目1409番地

TEL : 052-624-4388 FAX : 052-624-4389

E-mail : [support@filgen.jp](mailto:support@filgen.jp) URL : <https://filgen.jp/>

代理店

(Jul.,2024)