

Spectronaut®  
*powered by Pulsar*

# Spectronaut® 19

## アップグレード情報

# 1 Major improvements in directDIA

- スコアリングの改善: 大規模かつ多様なDIA データセットに基づいて、検出されるタンパク質グループが平均で10%増加し、プレカーサーが平均で13%増加しました。
- 定量化の改善: 大規模かつ多様なコントロールされた定量実験に基づいて、真の候補タンパク質数が11%増加しました。

# 2 Powered by AI

- 深層学習モデルの主要なパフォーマンスが最大40%向上しました。
- 深層学習ベースの干渉補正アルゴリズムであるdeepQuantを使用するオプションが追加されました。
- ジメチル化、ユビキチン化、mTRAQなどの拡張された翻訳後修飾およびラベルのリストに対する推定が改善されました。

# 3 Significant computational performance

- Spectronaut 18.0と比較して、timsTOFおよびAstralデータでのdirectDIAが40%高速化しました。
- directDIA RAM使用量の削減: メモリの増加が90%削減し、directDIAとSNECombine ワークフローを使用すると、理論上512GBのRAMで10,000 サンプルを処理できます。
- Spectronautで保存された実験 (.SNE) ファイルサイズが最大80%削減されました。
- 一時的なハードドライブの必要量が、最大86% (HTRMSからのdirectDIA) 削減されました。
- 一時的なハードドライブの必要量が、最大50% (ベンダーフォーマットの生ファイルからのdirectDIA) 削減されました。

# 4 New acquisition method support

- directDIAとライブラリーベースのDIA解析において、BrukerのtimsTOFプラットフォームのdiagonal-PASEFがサポートされました。
- Analysis perspectiveにおいて、新たにdiagonal-PASEFの可視化が行えるようになりました。

# 5 Improved support for labeled DIA workflows

- ランレベルチャネルのq-valuesのサポートが追加されました。
- チャネルレベルで生物学的状態をアノテーション付けできるようになりました。

## 6 New features for analyzing post translational modifications

- エンリッチされた実験とエンリッチされていない実験をリンクすることにより、入力データの正規化を行うようになりました。
- サイト占有率の計算がサポートされました。
- Analysis perspectiveとPost Analysis perspectiveにおいて、新しい可視化機能が追加されました。

## 7 Improved command line interface

- 新しい SNEMergeオプションにより、バッチ処理または並列処理が容易になります。複数のSNEファイルを1つにマージします。
- 入力データ正規化の新しいオプションが追加されました。
- コマンドにエラーがある場合は、適切かつ即時に終了するようになりました。
- 明確なオプションスコープにより、パイプラインごとにコマンドを分離するようになりました。
- POSIX互換性が向上しました。

## 8 New Visualizations and Reportables

- Elution Group Level -> EG.InputNormalizationFactor
- Elution Group Level -> EG.QuantityPerProtein
- PTM Site Report -> PTM.QuantityPerProtein
- PTM Site Report -> PTM.InputNormalizationFactor
- PTM Site Report -> PTM.Stoichiometry
- 新しいR.PTMSitesのカテゴリで、翻訳後修飾ごとにすべての同定されたサイトがリストされるようになりました。
- ペプチド vs タンパク質定量値のプロットが追加されました。
- Post Analysis perspectiveのAnalysis overviewにおいて、翻訳後修飾の局在化の平均値が計算されます。
- Experimentセットアップのサンプルリンクページが追加されました。

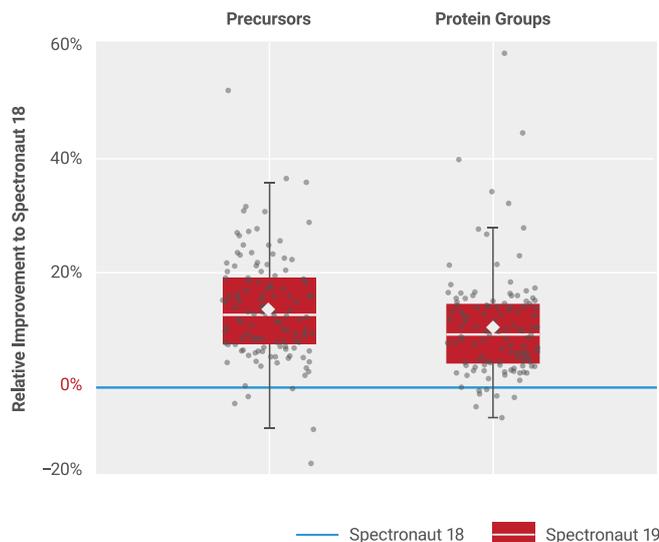
## 9 New and Changed Analysis Settings

- [New] DIA Analysis -> PTM Workflow -> Input Normalization Strategy
- [New] DIA Analysis -> PTM Workflow -> PTM Localization -> Stoichiometry Calculation Strategy
- [New] DIA Analysis -> Quantification -> DeepQuant Correction [Beta]
- [New] DIA Analysis -> Workflow -> Hybrid (DDA + DIA) Library
- [New] directDIA -> Pulsar Search -> Speed-up -> diaPASEF Processing -> Fast
- [New] directDIA -> Pulsar Search -> Identification -> directDIA Workflow -> RT Sampling Reduction
- [Change] Spectronaut 19では、differential abundance解析にMS2定量データのみを使用します。以前は、デフォルトではMS1とMS2の両方が使用されていました。

# 新記録のタンパク質同定数

## Even More Identifications

Comparison for a Range of Diverse Datasets



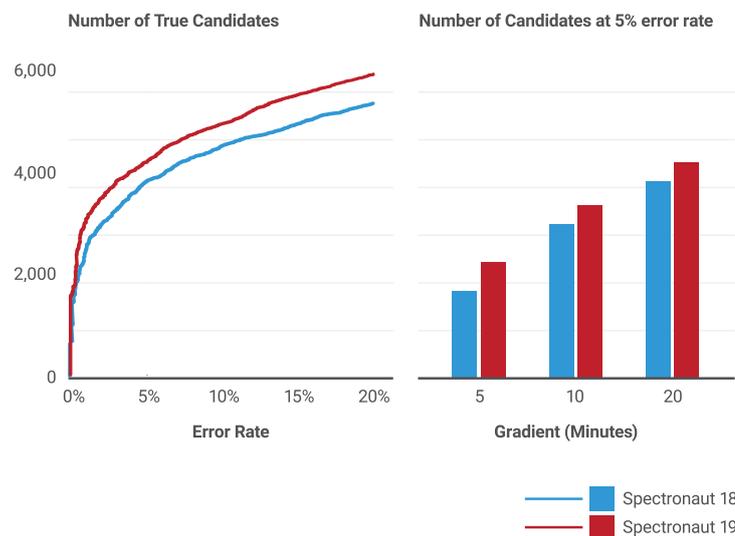
Spectronautはタンパク質同定率の新記録を出し続けています。Spectronaut 18と比較すると、バージョン19ではタンパク質同定数が平均10%、プレカーサー同定数が14%増加し、CVが20%未満のタンパク質グループとプレカーサーの同定数がそれぞれ10%と16%増加しました。

Spectronautを使用すれば、機器の種類、グラジエントの長さ、サンプルの種類、複雑さを問わず、最高のタンパク質カバレッジが得られることを確信できます。

# 生物学的に重要なターゲットの増加

## Candidate Discovery

Deeper Candidate Discovery in Controlled Quantitative Experiment



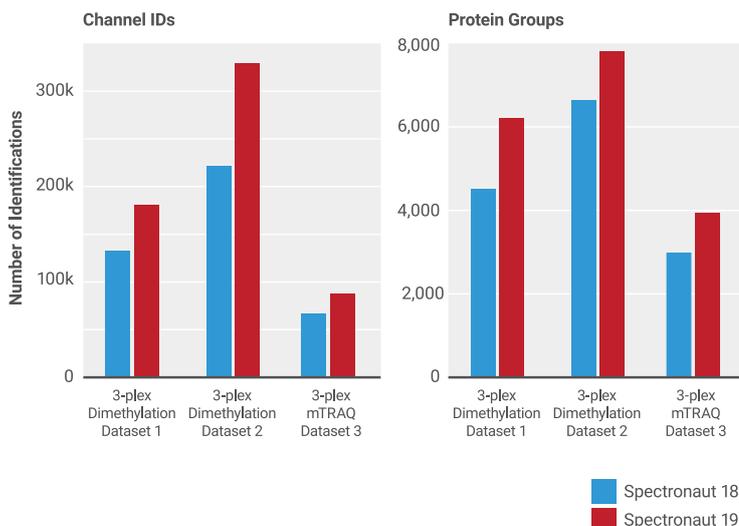
ほとんどのDIA実験の目的は、発現量に差があるタンパク質を発見することです。このベンチマークのために、「H. Sapiens」をバックグラウンドにして、10種類の異なる条件で「A. thaliana」と「C. elegans」をさまざまな量でスパイクしました。CQEにはBrukerのtimsTOF HTを用いて、3種類の異なるグラジエントで繰り返し実験を行いました。

Spectronaut 19ではすべての実験で、グラジエントの長さやfold change (大小を問わず)の間で、生物学的に関連性の高いターゲットがより多く得られました。これにより候補タンパク質を高感度に発見できることで、実験をより実用的にすることができます。

# さらなるプロテオミクスワークフローのサポート

## Improved Labeled Workflow

Increased Identifications for Isotopically Labeled Samples



Spectronaut 19では、チャンネル別の条件設定とチャンネルベースの差分分析によるplexDIAワークフローの拡張サポートと、チャンネルレベルのFDR制御の新しいオプションが導入されています。

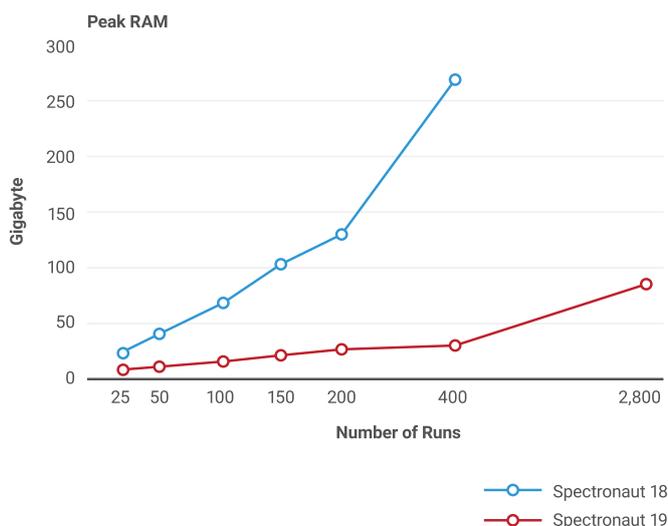
Spectronaut 19による解析では、3プレックスジメチル標識サンプル (M. Thielert et al., Mol Syst Biol 2023) および 3プレックス mTRAQ (J. Derks et al., Nature Biotechnology 2023) のチャンネル ID とタンパク質グループの同定が改善されました。

この新バージョンの Spectronaut では、diagonal dia-PASEF解析も新たにサポートされ、またサンプルインプットとPTM化学量論による正規化の導入により、PTMワークフローのサポートが拡張されています。

# メモリ消費量の改善による大規模実験の効率化

## RAM Requirement Improvements

Peak RAM Requirement for Increasing Number of Runs



Spectronaut 19ではRAM消費量が大幅に改善され、大規模な実験を効率化できるようになりました。

これは、現代の大規模プロテオミクス解析に対応するために Spectronaut 19が提供する多くの改善点の1つです。

【お問い合わせ先】

フィルジエン株式会社 バイオインフォマティクス部

TEL : 052-624-4388 (9:00~17:00)

FAX : 052-624-4389

E-mail : [biosupport@filgen.jp](mailto:biosupport@filgen.jp)