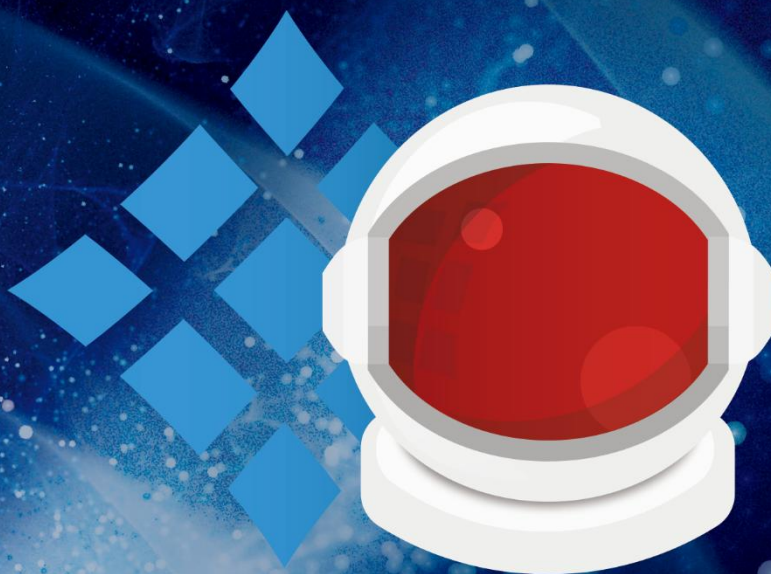


DIAプロテオミクス 解析ソフトウェア



Spectronaut

powered by Pulsar

TAKE YOUR DIA DATA
TO THE NEXT LEVEL

The Most Complete and Versatile Solution
for Quantitative Proteomics

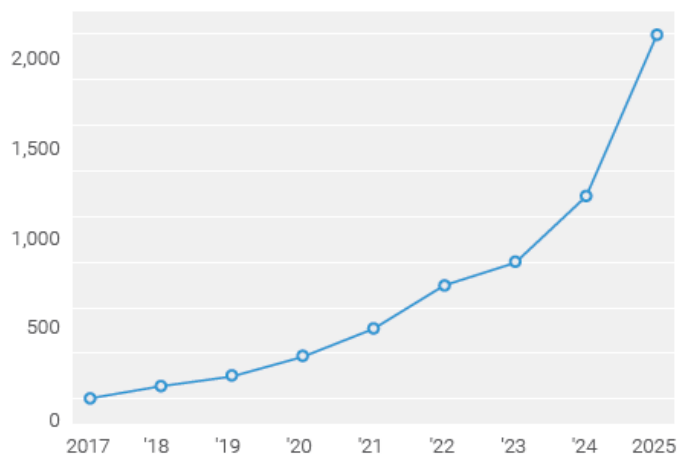
THE GOLD-STANDARD FOR DIA PROTEOMICS ANALYSIS

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、継続的な改良が行われています。

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。¹

2013年の最初のリリース以降、Biognosys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。

Figure 1. Total Mentions of Spectronaut in Scientific Publications Source: Google Scholar "Spectronaut"



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 and immunopeptides with confidence:** 新しいKuiper検索エンジンで、これまでに見えない翻訳後修飾の深度と免疫ペプチドミクスの洞察を解放しましょう。
- **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



特長

パフォーマンス

拡張性

多用途性

簡潔性

再現性

ユーザビリティ

利点

Pulsarの比類なき正確さとスピードに加え、新しい検索エンジン Kuiperが、非特異的な検索の深層を解き明かします。

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

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

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

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

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

« Spectronautは、特に大規模なDIAリン酸化ペプチドデータと高度な修飾の局在化の徹底的な分析により、私たちのインフォマティクス能力を強力に補強します。»

Prof. Dr. Matthias Mann
Max Planck Institute of Biochemistry

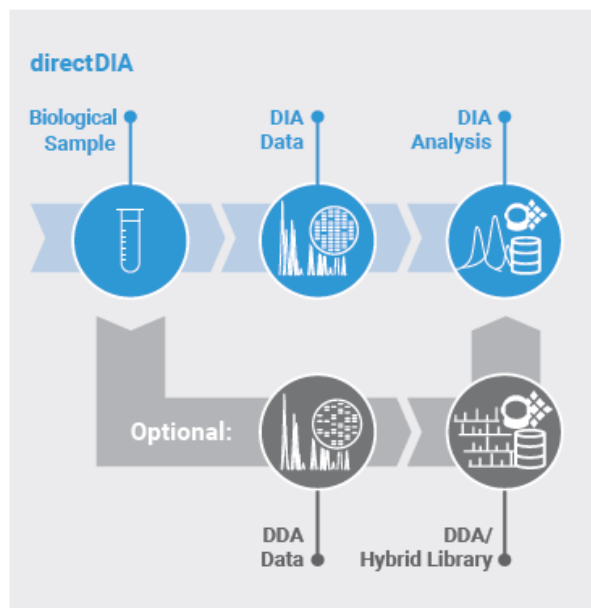
« Spectronautは、その高いパフォーマンスと使いやすいインターフェースにより、我々が推奨するDIAソフトウェアです。複雑なマルチプレックスDIAデータセットの解析を、容易かつ確実に行うことができます。»

Prof. Yansheng Liu
Yale University School of Medicine

THE directDIA ROUTE TO THE PROTEOME

SpectronautのdirectDIAでは、タンパク質の同定と定量を直接実行し、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。

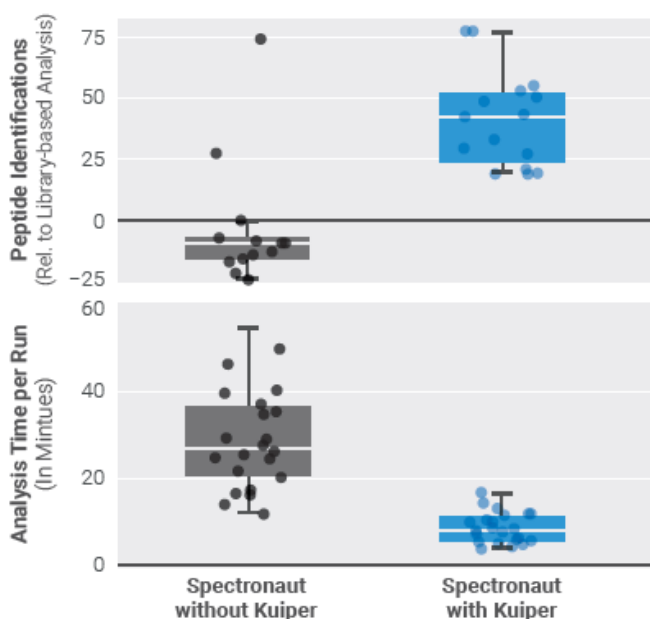
Figure 2. DIA Analysis Using *directDIA* or a Project-specific DDA Library



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（Figure 2）。

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ごとのDDAライブラリーに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（Figure 2）。Kuiperを搭載したSpectronautは、免疫ペプチドミクスなどの難しいアプリケーションに対して、高深度かつ超高速なdirectDIAカバレッジを実現し、従来のライブラリーベースのワークフローの必要性を排除します。

Figure 3. *directDIA* powered by Kuiper outperforms library-based analyses in Spectronaut



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データや追加のDIA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。

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²。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。

Figure 4. Score Distribution of Target, False and Decoy Identifications

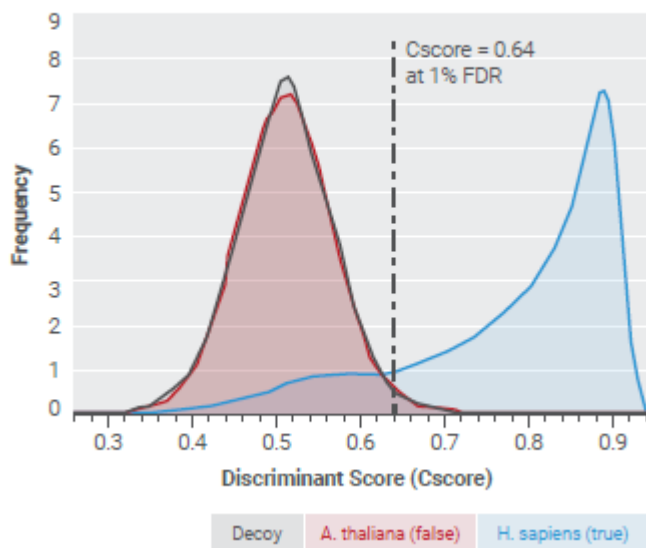
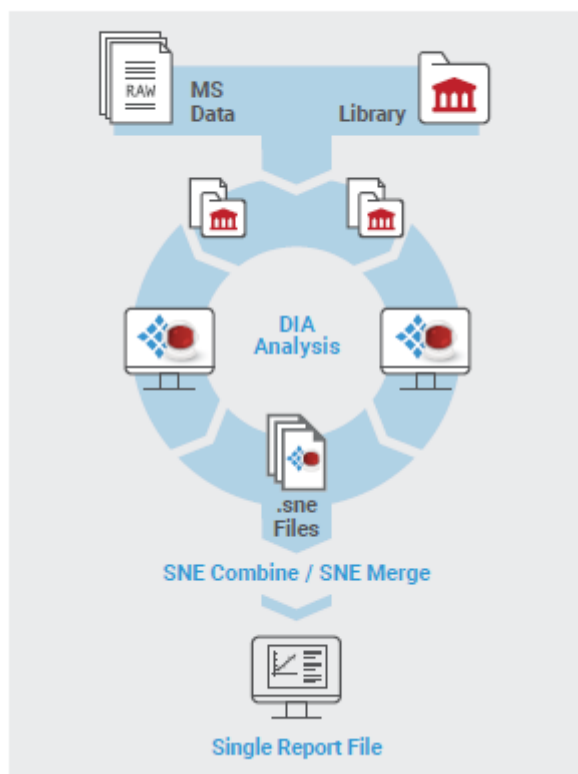


Figure 5. Parallel Processing in the Cloud or High-Performance Cluster



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 (Figure 4)。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。

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 (Figure 5)。

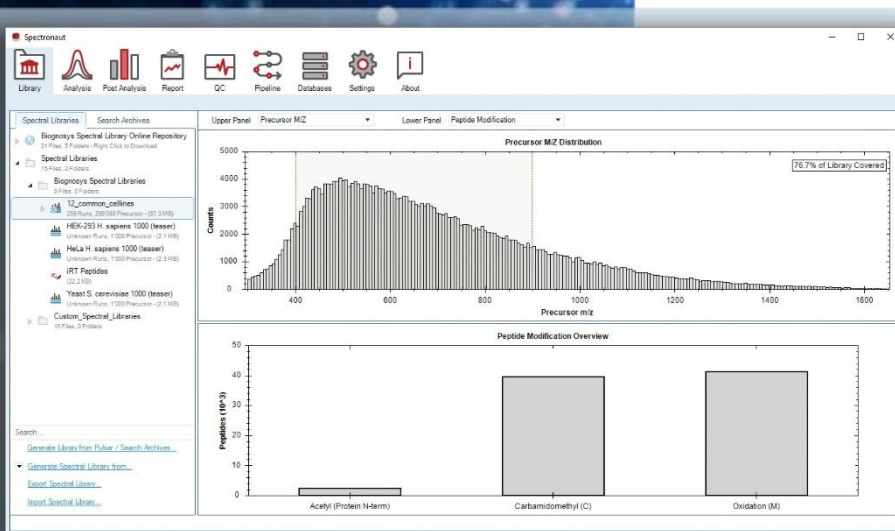
2 Rosenberg et al., Nat. Methods 2017,14, 921-927

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ーのために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

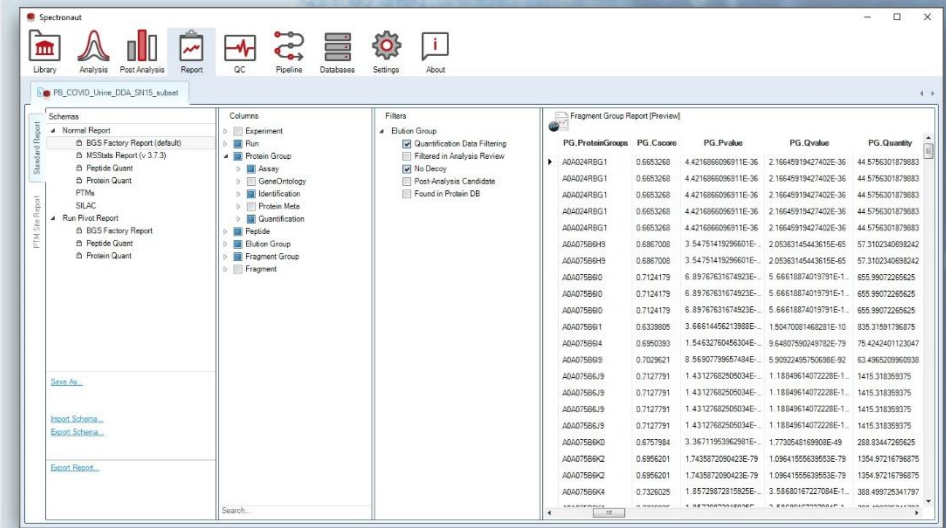
Spectronautのウィザードでは、DIA解析の設定を簡単かつ迅速に行うことができます。生データは、抽出イオンクロマトグラム (XIC) やイオンモビリティプロット、クロスラン強度アライメント、タンパク質カバレッジなどの様々な視覚化オプションを使用して、解析中または解析後に精査することができます。





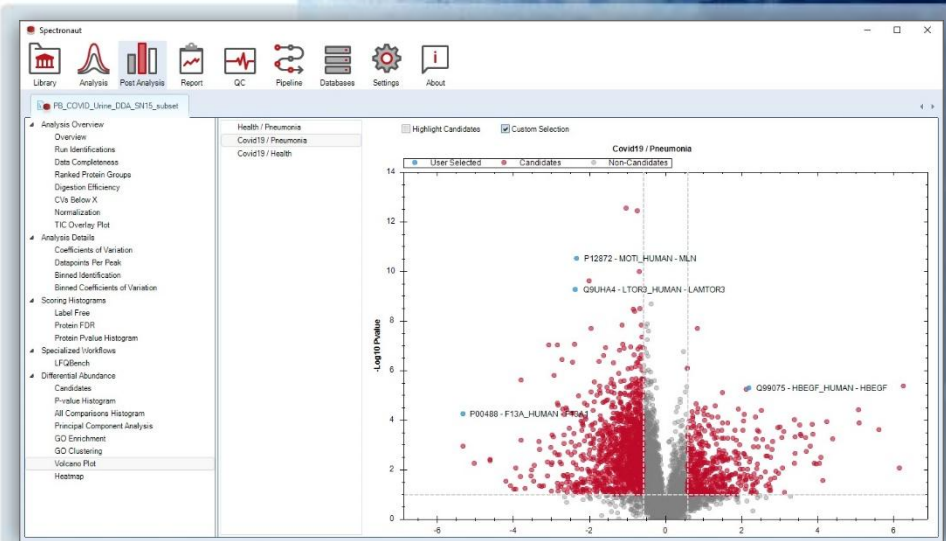
Explore Your Results with Ease

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します。



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、support@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

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 URL: <https://filgen.jp/>

代理店

(Jun.,2026)