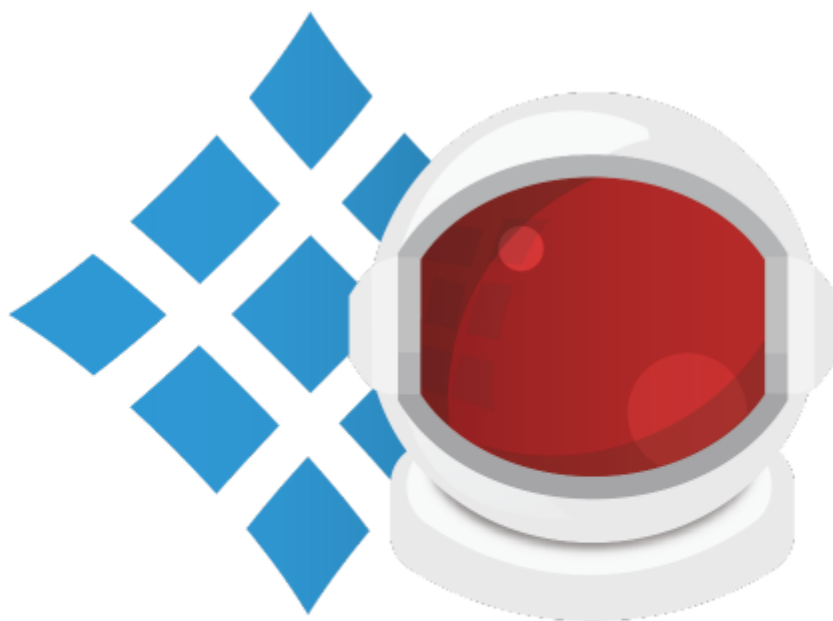




Spectronaut®
powered by Pulsar

Spectronaut® 21

アップグレード情報

1 Powered by advanced ML scoring and AI models

- タンパク質グループの同定数が平均で10%増加しました。
- 免疫ペプチドの同定数が平均で11%増加しました。
- 次世代AIモデルが未知の翻訳後修飾を正確に予測します。
- トリプシン消化ペプチドと非特異的ペプチドの両方について、AIによる予測精度が向上しました。

2 Improved Computational Performance

- 並列処理時のマージステップが最大30%高速化
- 免疫ペプチドミクス（クラスIおよびII）におけるdirectDIA処理が10%高速化
- timsTOFにおけるdirectDIA処理が平均で15%高速化
- XICを保存した場合、SNEファイルサイズが50%縮小
- サンプルをランダムに選択してライブラリー作成を行う新しいdirectDIAワークフロー

3 Improved PTM processes and reporting

- 翻訳後修飾部位の局在化の精度向上により、データ品質が向上
- 翻訳後修飾部位レポートをタンパク質グループごとに集約するオプションを追加
- 部位特異的質量論の計算のさらなる改善
- 翻訳後修飾部位特異的な統計情報と可視化機能を追加

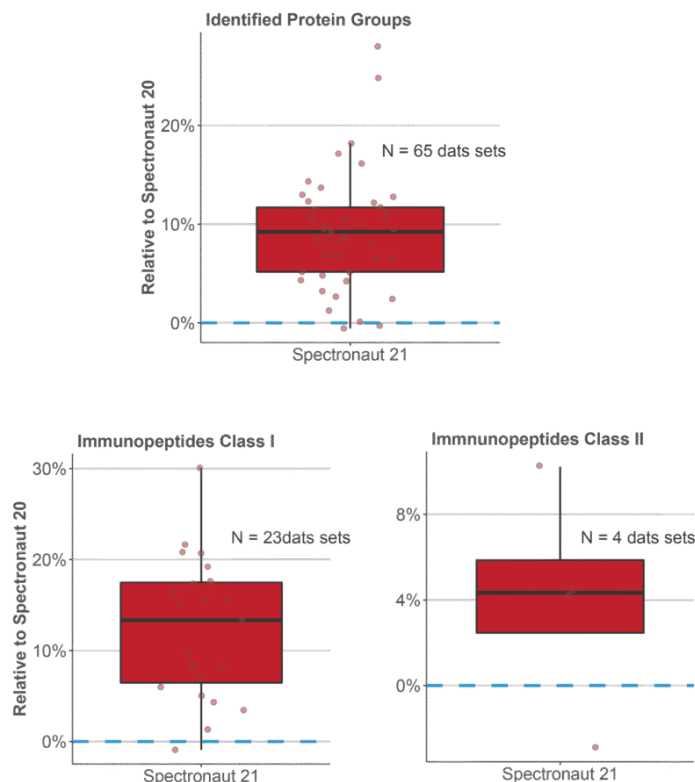
4 Changes in Analysis Settings and Reporting

- directDIAのIdentificationの設定を簡素化しました。デフォルトの動作は変更ありません。
- directDIAおよびライブラリー作成の質量許容範囲設定を簡素化しました。
- ツリービューでペプチドをインソースフラグメンテーションイベントごとにグループ化する新しいオプションを追加しました。
- チャネルごとの同定結果の概要（例：SILAC実験）を追加しました。
- directDIA中にランを自動的にサブサンプリングして解析スループットを向上させるオプションを追加しました。
- 一部のGlobal設定をより適切なカテゴリに再編成しました。
- directDIAの設定に「Calibration Carry-over」と「Profile Strategy」オプションを追加しました。

5 Bug fixes and other improvements

- 一部のペプチドにUNKNOWNという誤ったラベルが付けられる問題を修正しました。
- Condition設定でReferenceの選択を解除できない問題を修正しました。
- Library Perspectiveより、ライブラリーをテキストベース形式でエクスポートすると、ソフトウェアが停止することがある問題を修正しました。
- R.Attributesのレポート列を使用すると、エクスポートされたテーブルでセルの配置が正しくないことがある問題を修正しました。
- UIの「diagonalPASEF reprocessing」警告メッセージが消えない問題を修正しました。
- 手動ピーク積分でピークが正しく再スコアリングされない場合がある問題を修正しました。
- 解析実行中に一時保存パスを変更すると解析が中断される問題を修正しました。
- Spectronautアンインストーラーに関連する複数の問題を修正しました。
- レポートのエクスポート処理中に、ユーザーが実験の解析後の更新を起動できる問題を修正しました。
- 合計デルタ質量が0の2つのVariable Modificationsによって、ペプチドが誤って変更なしと扱われる問題を修正しました。
- 個々のランでタンパク質同定数が0の実験におけるエラー処理を改善しました。

隠された情報を解き明かす



Spectronaut 21では、高度な機械学習とディープラーニングを活用した次世代のdirectDIAにより、解析ワークフローをさらに進化させることができます。65のベンチマークデータセット全体で平均10%多くのタンパク質を、また27のMHCクラスIおよびIIデータセット全体で平均11%多くの免疫ペプチドを同定可能です。

その結果、より深く詳細なデータセットが得られ、既存のワークフローを変えることなく、これまで見逃していた可能性のある生物学的知見を明らかにすることができます。

希少な変化をより日常的に検出：PTMの全貌を解明

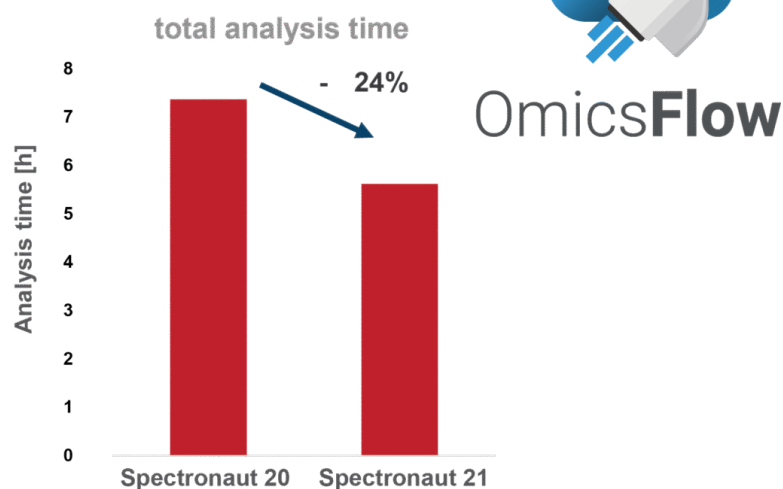


PTM（翻訳後修飾）解析の可能性を、従来の枠組みを超えて広げましょう。Spectronaut 21に搭載された高度なディープラーニングモデルにより、データセット全体にわたる一般的な修飾と稀な修飾の双方を、確信を持って検出することが可能になります。同時に、イオンモビリティ指標を含む次世代のスコアリング手法を活用した修飾部位特定機能の強化により、より高い精度と網羅性を備えたPTMマッピングが実現します。

その結果、データに対するより包括的かつ信頼性の高い知見が得られ、複雑な修飾パターンから、生物学的に意義のある明確な洞察へと、より確信を持って進むことができるようになります。

拡張可能な処理能力

N = 181 plasma samples processed
in parallelization with OmicsFlow



クラウド上でワークフローをより高速かつ効率的に実行しましょう。サンプルごとの並列処理とラン単位でのマージをスマートにオーケストレーションすることで、あらゆるステップが加速します。

Spectronaut 21は計算時間を15%短縮します。同時に、解析ファイルサイズも15~50%削減されるため、データ転送量が抑えられ、高いパフォーマンスが維持されます。

その結果、生データの解析後に発見される規則性、相関、傾向からより深い洞察を得るまでのプロセスがよりスムーズかつ迅速になり、待ち時間ではなく研究そのものに集中できるようになります。

【お問い合わせ先】

フィルジェン株式会社 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 : support@filgen.jp