



SpectroDive™

powered by Pulsar

ターゲットプロテオミクスの簡略化のために

MRM、PRM、SureQuantにおける高精度な解析

ACCELERATING TARGETED PROTEOMICS

SpectroDiveは、迅速かつロバストで、シームレスなターゲットプロテオミクスソリューションを提供することで、エクスペリエンスの満足と生産性の最大化に貢献します。冗長な手動での分析と決別し、信頼性の高い結果を迅速に取得することができます。

ターゲットプロテオミクスは、選択したタンパク質セットを高い感度、精度、および再現性で定量することにフォーカスした分析手法です。これまで、この分析手法は、1) ターゲットパネルの作成、2) 信頼性の低いピークピッキングと識別のためのターゲットの手動での検証、という2つのボトルネックに悩まされていました。

これらの問題を克服するために、BiognosysはSpectroDiveを開発しました。SpectroDiveは、スペクトルライブラリーやFASTAファイル、ペプチド配列よりカスタムパネルを容易に作成可能で、強力なピークピッキングアルゴリズムにより、大規模なデータセット全体における数百のタンパク質の並列定量の効率化を行い、またFDRの自動コントロールにより、信頼性の高い結果を得ることができます。

加えてSpectroDiveは、検量線からの絶対定量にも対応し、1つのソフトウェアのみで、完全かつシームレスなターゲットプロテオミクスワークフローを提供します。

SpectroDive は、ターゲットプロテオミクスのポテンシャルを最大限に引き出します：

- **Seamless targeted workflow**
検量線作成と絶対定量を統合した分析の実行
- **Advanced peak picking**
mProphetアルゴリズムにより、信頼性の高いピーク識別
- **Custom panel generation**
Biognosysの組み込み検索エンジンPulsarの使用による、ディスカバリープロテオミクスからターゲットプロテオミクスまで対応した使いやすいパイプライン。さらにFASTAファイルまたはペプチド配列からのin silicoパネル作成をサポートし、オプションで経験的ライブラリ情報に基づくAIモデルの最適化によってさらに強化することが可能
- **Optimized scheduling**
高精度なiRTキャリブレーションに支援されたスケジューリングによる、ターゲット数の増大
- **Complete analysis environment**
ユーザーフレンドリーなインターフェースでのターゲットデータ解析と詳細な結果のレビュー

SpectroDive 12 2024ではin silicoパネル作成機能が追加された (T.Temu 2024, ASMS)



* Key publications using SpectroDive

対応している質量分析装置ベンダー

- Bruker
- SCIEX
- Thermo Scientific
- Waters

推奨システム要件

- Windows 10 (64bit)
- Intel or AMD CPU 4コア以上
- HDDの空き容量 256 GB以上 (2x data set size)
- メモリ 16 GB 以上



«SpectroDive 12は、堅牢なピークピッキングアルゴリズムと新しいin-silicoパネル作成機能を備えており、大規模な免疫ペプチドミクスと血漿プロテオミクスのターゲットバリデーションアッセイを迅速に設計および分析できます。»

Simonas Savickas, PhD,
Sr. Scientist Biognosys

利点

特長

パフォーマンス

確実なピークピッキングと、FDRに基づいた自動識別

拡張性

数百におよぶサンプルを、1つのプロジェクトで解析が可能

多用途性

様々なベンダーの質量分析機器、およびMRM、PRM、prm-PASEF、FAIMS PRM、SureQuantなどのデータ取得法との広い互換性

簡潔性

ネイティブな絶対定量のための検量線作成、カスタムパネル生成、生物学的解釈に対応

再現性

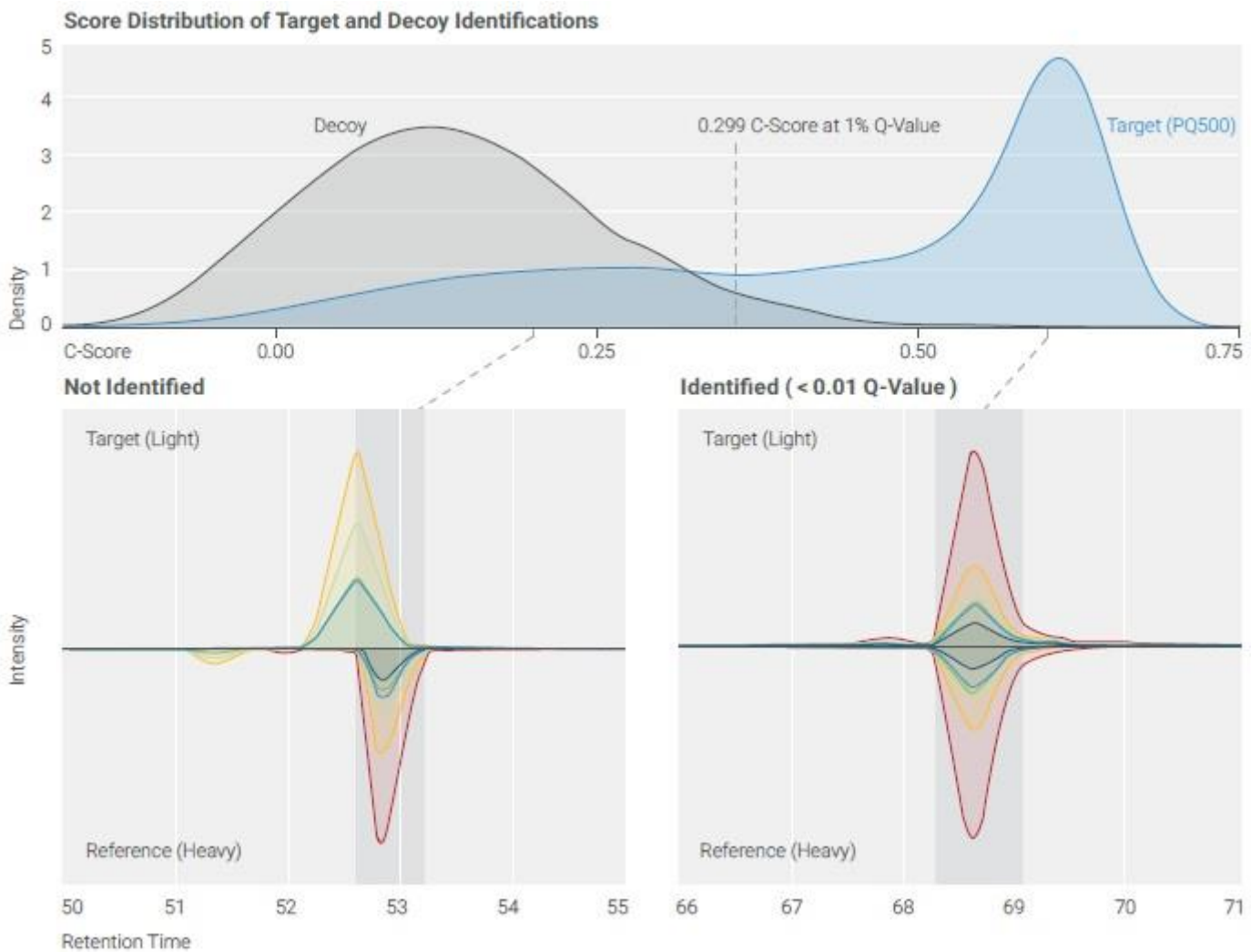
リニア/ノンリニア クロマトグラフィーのための、iRTに基づいたロバスタなスケジューリング

使用性

パラメータの最適化の自動調整により、容易なデータ解析が可能

DESIGNED FOR HIGH-THROUGHPUT ANALYSIS

SpectroDiveは、最先端のピークピッキングアルゴリズムと結果のFDRコントロールにより、ターゲットタンパク質の自動識別と定量化など、大規模な研究に最適化されたソリューションを提供します。



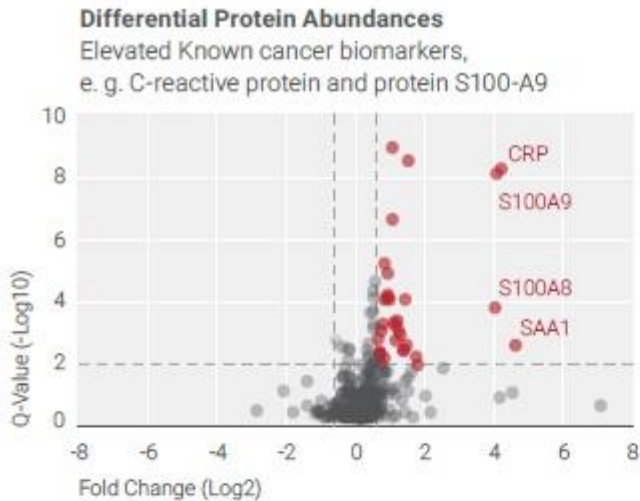
SpectroDiveは、機械学習ベースのピークピッキング機能を使用して、データ内の正しいピークを確実に検出します。これにより、ピーク境界を手動で調整する必要がなくなります。¹ 正しいピークが検出されると、ターゲットデコイ法を使用した偽発見率（FDR）解析に基づいて、ターゲットペプチドが自動的に識別されます。SpectroDiveは、解析中にオンザフライでデコイを作成するため、メソッドで明示的に測定する必要はありません。

これにより、アキュイジション時間を犠牲にすることなく、FDRを柔軟にコントロールできます。また、実験内のすべてのターゲットを手動で検証する必要がなくなったことも意味します。これらの重要なステップは、SpectroDiveをターゲットプロテオミクスデータのハイスループット解析に最適なツールにするために非常に有効です。

1) L. Reiter et al. 2011, Nat. Methods

APPLY LARGE PANELS TO LARGE DATASETS

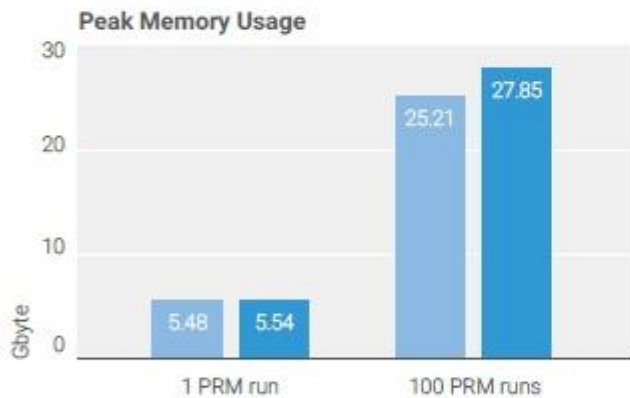
SpectroDiveは、たとえば500以上の血漿タンパク質の定量に使用できるPQ500リファレンスペプチドキットのような、大規模なタンパク質パネルに対して、効率的かつ最適化されたデータ解析を提供します。



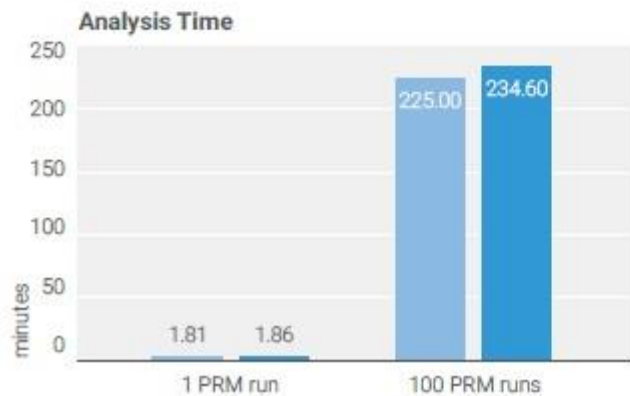
ヒト血漿は、臨床的および生物学的研究において広く使用されているマトリックスです。それは包括的な健康状態に関する情報を提供し、患者や健康な個人から比較的容易に集めることができます。SpectroDiveを使用すると、500を超えるヒト血漿タンパク質の絶対定量を可能にする安定同位体スタンダードを含むPQ500リファレンスペプチドキットを使用して、血漿サンプルを簡単に解析できるようになります。PQ500または独自のカスタムパネルを使用する場合のいずれでも、SpectroDiveによって、サンプルの生物学的洞察を容易に得ることができます。

Performance at Scale

Resource requirements largely independent of panel size (2h high-resolution PRM runs)



1ランあたりの解析時間が2分弱程度のため、SpectroDiveは、パネルのターゲットペプチド数にかかわらず、大規模なデータセットを解析することが可能です。また同時に、SpectroDiveは、強力な実験全体のビジュアライゼーションと、結果の信頼性を高めるためにディスカバリープロテオミクスで一般的に使用されている、クオリティーコントロールパラメータを備えています。信頼性の高い識別と組み合わせられた非常に効率的なアルゴリズムにより、SpectroDiveはターゲットプロテオミクスデータのハイスループット解析に理想的なツールです。



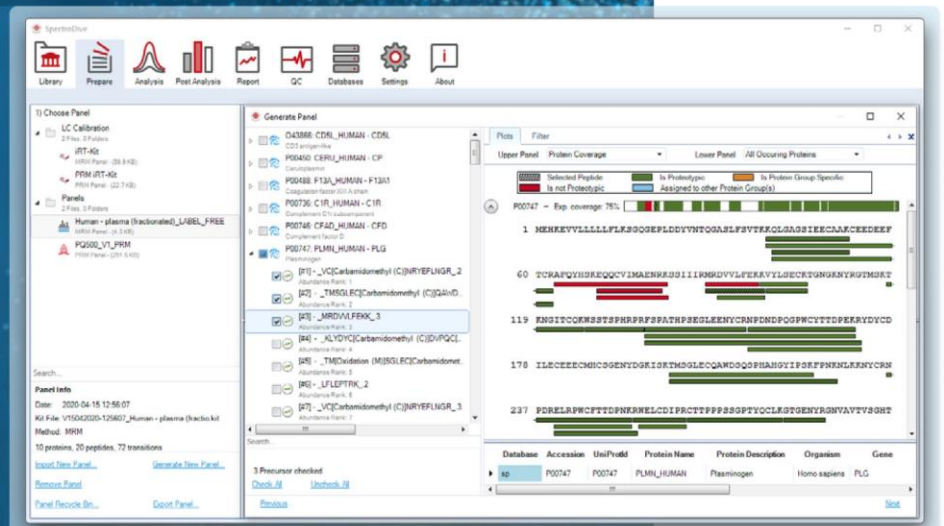
■ PQ500 Subset (100 peptides)
■ PQ500 (804 peptides)

FROM PANEL DEVELOPMENT TO BIOLOGICAL INTERPRETATION

SpectroDiveは、検量線作成とカスタムパネルのための最適化、高精度iRTキャリブレーションアシストスケジューリング、およびマニュアルでの修正が不要な直ちに公開できる結果出力などを提供し、ターゲットプロテオミクスから面倒な作業を取り除きます。

Seamless Panel Generation

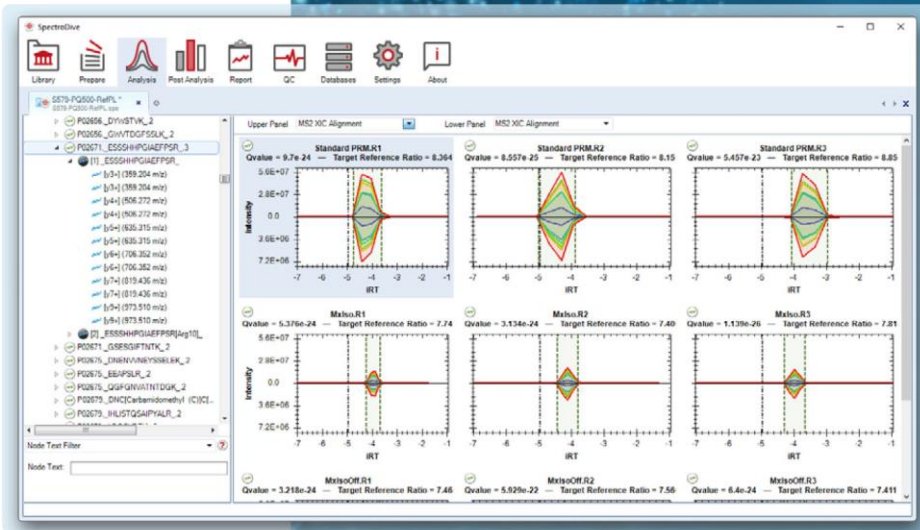
Pulsar検索エンジンで構築されたライブラリを使用して、精製された前駆体およびフラグメントイオン選択を使用してターゲットタンパク質のカスタムパネルを作成するか、FASTAファイルまたはペプチド配列から直接in silicoターゲットパネルを作成します。



Method Development and Refinement

スケジュール化された、あるいはされていないメソッドを作成し、質量分析装置でデータ取得を行う際に、直接使用できる形式でエクスポートが可能です。SpectroDiveの高精度なiRTキャリブレーションにより、スケジューリングメソッドの改良が可能になり、ターゲットの多重化も向上しました。





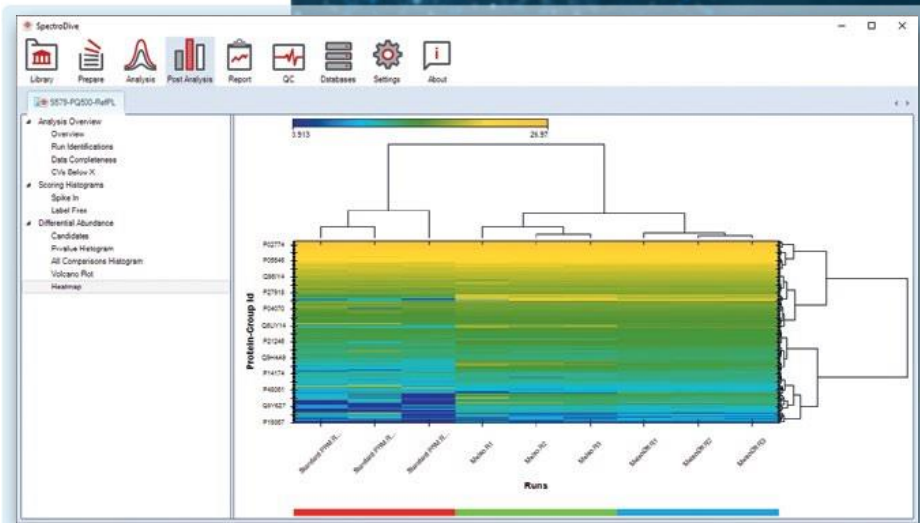
Analysis Review

すべてのランにおいて、ターゲットペプチドを簡単に確認できます。必要に応じて、抽出時の境界を調整したり、割り当てられたものを手動で拒否することができます。



Absolute Quantification with Calibration Curves

SpectroDive内で検量線、線形範囲、検出限界と定量限界をすべて計算可能です。また複数の検量線を使用して、パネルの特定の前駆体に最適な読み取り値を選択します。これによって、絶対定量をかつてないほど簡単に行えるようになりました。



Results Visualization and Export

発現量に差があるタンパク質の候補を表示し、直感的なプロットで解析結果を調べ、カスタマイズ可能なレポートとして解析結果をエクスポートできます。レポートスキーマは保存して、次のエクスポート時に再利用できます。

SpectroDive

SpectroDive について、もっと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

(Feb.,2025)