



SpectroMine™
powered by Pulsar

DDAプロテオミクスにおける

比類なきパフォーマンス

カバレッジの拡大・迅速な解析・優れたエクスペリエンス

THE NEXT FRONTIER OF INNOVATION IN DDA PROTEOMICS

私たちのパワフルかつユーザーフレンドリーなDDAプロテオミクスソリューションは、最先端のパフォーマンスとスピード、さらに最新のデータ取得法のサポートを提供します。SpectroMineは、最先端のPulsar検索エンジンが統合されており、イオンモビリティテクノロジーをフルサポートし、ディープラーニングによる強化によって、より多くの識別が可能になっています。

データ取得におけるイオンモビリティ (IM) や、サンプルのマルチプレックス化を高める新しいアイソバリックタグといった最近のイノベーションにより、データ依存性取得 (DDA) の定量精度が向上し、その適用範囲が拡大しました。このようなテクノロジーの進歩には、新しいタイプのデータを処理するための多用途のソフトウェアが必要です。

Biognosys は、データ独立取得 (DIA) 処理技術および業界トップのDIAソフトウェアであるSpectronautの共同発明者および開発者として最もよく知られています。最新のDDAプロテオミクスの要求に対応するために、DIAデータの解析用に開発された強力なアルゴリズムに基づいて、私たちはSpectroMineを開発しました。SpectroMineは、さまざまなタイプのデータ¹を検索でき、高品質のアイソバリックラベリング定量 (ILQ)²を実行し、最近では新しい創薬ターゲット同定パイプラインであるLiP-MSに使用されました。³

SpectroMine は、DDAを最大限に活用します：

- **Deep-learning augmentation**
卓越した識別とスピードのための高度な検索アルゴリズム
- **Isobaric labeling quantification**
最新のアイソバリックタグとブロックノーマライゼーションのサポート
- **Library-based DDA search**
少ないサンプル量でも、高深度のプロテオームカバレッジを取得
- **Ion mobility technology support**
PASEFとFAIMS Proをサポート
- **Complete analysis environment**
ユーザーフレンドリーなインターフェースでのDDAデータ解析と詳細な結果のレビュー
- **First class technical support**
サイエンティストによるサポート

1) Bader et al., Mol Syst Biol, 2020 16:e9356

2) Hörnberg et al., Nature, 2020 584, 252–256

3) Piazza et al., Nat Commun, 2020 11, 4200

アイソバリックラベリング開発のマイルストーン



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 2 TB以上 (2x data set size)
- メモリ 64 GB 以上



« SpectroMineは、マルチプレックスプロテオミクス解析において革命をもたらします。データ解析のスピードとクオリティーは、比類ないものです。 »

Mikhail Savitski, PhD
EMBL Heidelberg

利点

特長

パフォーマンス

ディープラーニングによる強化に基づいた高深度のプロテオームカバレッジ

拡張性

ブロックノーマライゼーションによる大規模ILQ実験データの高速検索と定量化

多用途性

DDA, DIAさらにPRMデータの検索と、FAIMS ProとPASEFのサポート、TMT, iTRAQ, EASI-tagとTMTProのアイソバリックラベリング定量

簡潔性

直感的なユーザーインターフェースでの完全な解析環境

再現性

信頼性のあるロバストな解析結果かつ、容易にシェアが可能

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

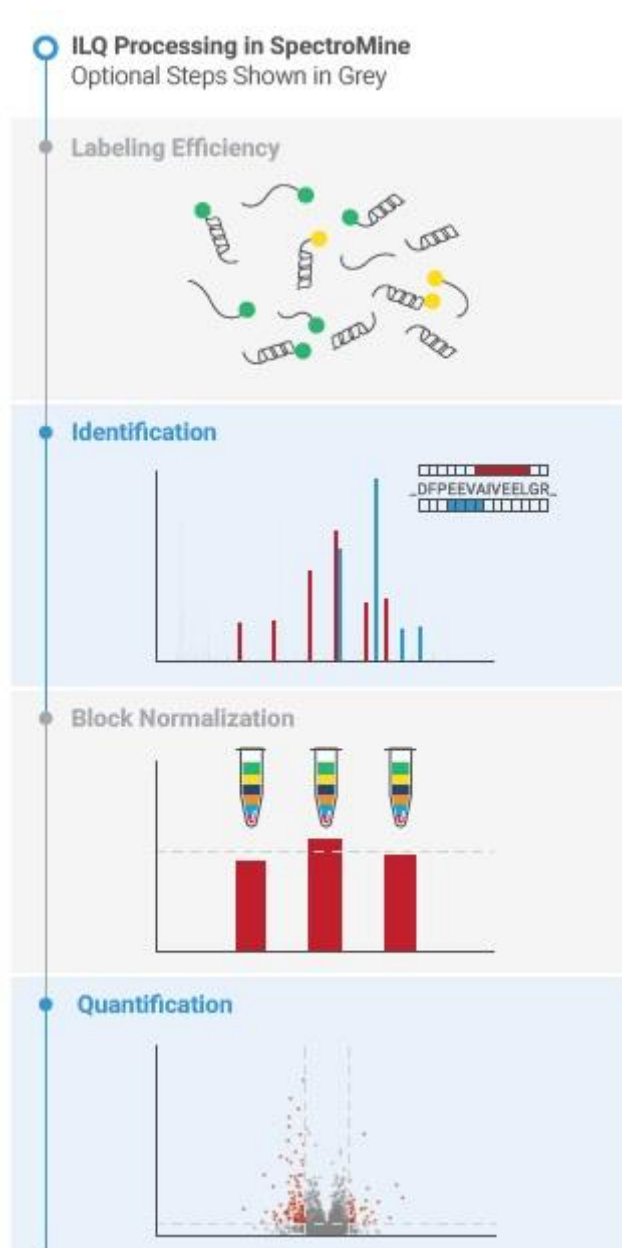
EFFORTLESS ISOBARIC LABELING QUANTIFICATION

SpectroMineは、アイソバリックラベリング実験における完全なプラットフォームを提供します。

TMTproやEASI-tagを含むすべての主要なラベリング試薬用の解析テンプレートにより、最新のイノベーションを起こし続けることを容易にします。



アイソバリックラベリング定量の概要



DDAとアイソバリックラベリング定量 (ILQ) の組み合わせは、ディスカバリープロテオミクスにおいて選択されるワークフローであり、一度の実験で複数の生物学的サンプルの同時定量を可能にします。ILQは、高深度のプロテームカバレッジと、定量における高い信頼性と再現性を実現します。¹

SpectroMineでは、ILQ解析のセットアップを迅速かつ効率的に行うことができます。自動キャリブレーションと高性能なデフォルト設定により、最小限のユーザー設定で、最適な結果を得ることができます。サンプル数がレポーターのマルチプレックス数を超える実験の場合、サンプルをブロックにまとめることができます。

SpectroMineは、これらブロックを横断し、実験全体でのノーマライゼーションを提供します。さらにラベリング効率を評価するためのワークフローにより、解析チャンネル間のサンプル調整に関連した違いを、迅速に修正できます。

定量結果は、SpectroMine上で直接表示でき、カスタマイズ可能なレポート形式、またはMSstatsなどの外部ツールを使用したダウンストリーム処理を行うために、すでにパッケージ化されたスキーマでエクスポートできます。

1) Muntel et al., J Proteome Res, 2019, 18, 1340-1351

THE MOST POWERFUL SEARCH ENGINE

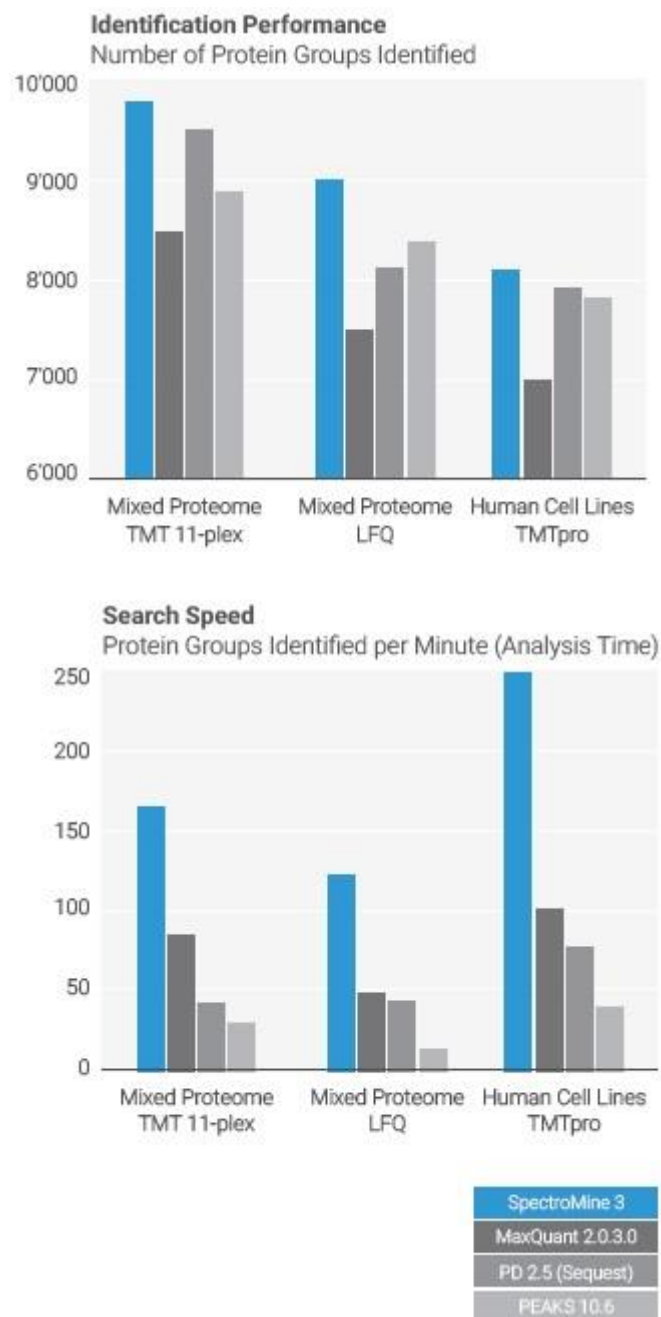
SpectroMineは、業界トップかつベンダー非依存のデータベース検索エンジンPulsarを搭載しており、DDAプロテオミクスに高深度のプロテオームカバレッジと迅速な解析を実現します。

インデックス保持時間（iRT）と断片化予測における高度なディープラーニングモデルにより、SpectroMineは卓越したプロテオームカバレッジを実現します。私たちは、調和のとれた検索スペース設定、タンパク質推定、および偽発見率（FDR）コントロールを使用して、さまざまなソフトウェア製品のテストを行いました。ILQとラベルフリー定量（LFQ）の両方の結果で、SpectroMineが幅広いDDA実験で最も多くの識別と最速の処理時間を提供することを示しています（図を参照）。

SpectroMineでは、FAIMS ProやPASEFイオンモビリティテクノロジーなど、すべての主要ベンダーの最新の機器を最大限に活用して、最先端の識別パフォーマンスと処理時間の短縮を実現します。

また同時にSpectroMineは、データの整合性を確保し、データの共有を可能にする直感的なインターフェイスを提供します。FDRは厳密にペプチドスペクトルマッチ（PSM）、ペプチドおよびタンパク質レベルで制御され、幅広い品質管理の視覚化も利用できます。結果を整理しておくために、それらは検索アーカイブに保存され、注釈付きの生データへのフルアクセスが可能になり、無料のSpectroMine Viewerを介して誰とでも簡単に共有できるようになります。

SpectroMineと主要な競合ソフトウェアを使用したパブリックデータセット^{1,2}の解析



1) O'Connell et al., J. Proteome Res., 2018, 17, 1934-1942

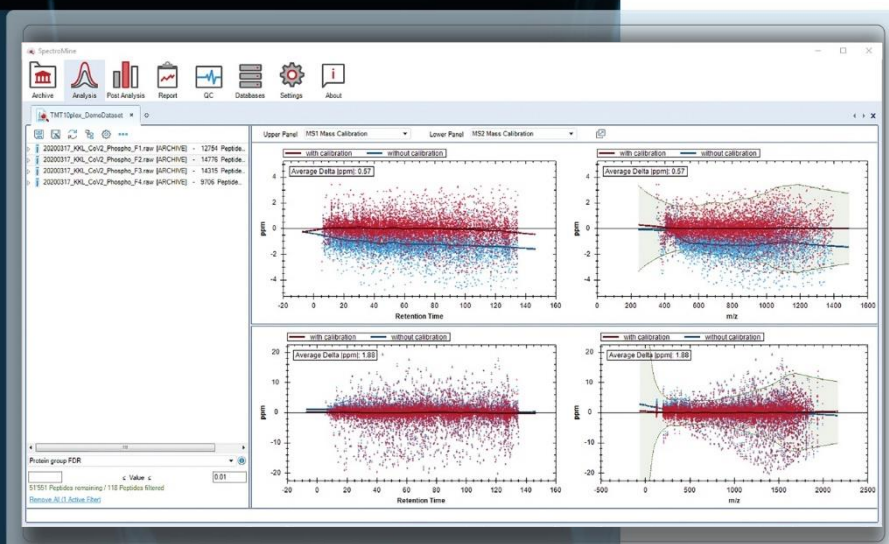
2) Li et al., Nat. Methods, 2020, 17, 399-404

THE ALL-IN-ONE WORKFLOW

SpectroMineは、データ解析、レビュー、解釈、およびエクスポートのためのさまざまな組み込み機能を備えたオールインワンソリューションです。直感的なユーザーインターフェイスには、解析のセットアップをガイドするために、すでに設定済みのウィザードが付属しており、簡単かつユーザーフレンドリーなプロセス実行が可能です。

Automated Mass Calibration

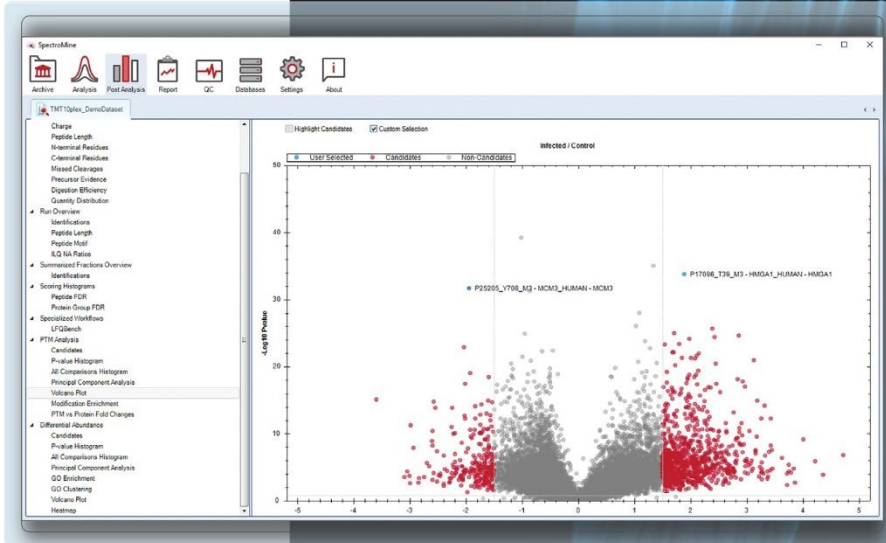
解析後に、ランサマリー、RTキャリブレーション、マスキングなどのさまざまな視覚化を用いて、実験の確認を行います。目下の実験に応じて、各MSレベルで自動マスキングが提供されます。



Peptide-Spectrum Match (PSM) Plots

ランレベルからスキャンレベルまでの結果の探索を行います。PSMは、すべてのレベルの対応するマススペクトルとともに視覚化されます。SpectroMineでは、結果の最適な表示を行うための設定調整が可能です。





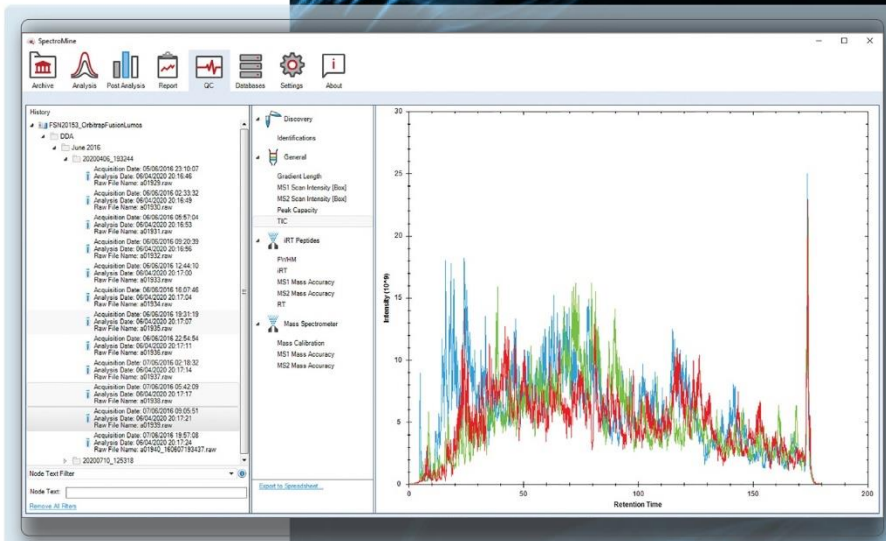
Differential Abundance Analysis

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。SpectroMineでは、すべてのサンプル条件間の比較に、ペアワイズt検定を実行します。ボルケーノプロットで、有意差をもつ候補を視覚的に識別し、ワンクリックで出力が可能です。

E.Revision	E.Name	S.Name	PG.Unipeptide	PG.TMT10_126	PG.TMT10_127N	PG.TMT10_127C	PG.TMT10_128N	PG.TMT10_128C
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	P19338	174766	100468	184037	160049	1488328
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	P19338	174766	100468	184037	160049	1488328
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	P19338	174766	100468	184037	160049	1488328
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	P19338	174766	100468	184037	160049	1488328
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9996	703661	696006	67993.9	68987.1	712121.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9996	703661	696006	67993.9	68987.1	712121.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9996	703661	696006	67993.9	68987.1	712121.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9996	703661	696006	67993.9	68987.1	712121.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9729	146724	15288.9	144322.1	156822.9	149941.3
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9729	146724	15288.9	144322.1	156822.9	149941.3
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9729	146724	15288.9	144322.1	156822.9	149941.3
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9729	146724	15288.9	144322.1	156822.9	149941.3
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9537	97518.77	92473.89	89361.77	93276.1	93514.18
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9537	97518.77	92473.89	89361.77	93276.1	93514.18
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9537	97518.77	92473.89	89361.77	93276.1	93514.18
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9537	97518.77	92473.89	89361.77	93276.1	93514.18
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9894	121603.3	12306.3	112790.4	120590.5	122996.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9894	121603.3	12306.3	112790.4	120590.5	122996.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9894	121603.3	12306.3	112790.4	120590.5	122996.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9920	121603.3	12306.3	112790.4	120590.5	122996.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9920	121603.3	12306.3	112790.4	120590.5	122996.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9920	121603.3	12306.3	112790.4	120590.5	122996.5
3.0.21019.47784	TMT10qex_DemoDataset	All Runs	G9920	121603.3	12306.3	112790.4	120590.5	122996.5

Generating 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ます。カスタムレポートテンプレートを作成して、データ出力の自動化を行うことも可能で、また作成済みのレポートスキーマは、他のパイプラインと互換性があります。



Quality Control

SpectroMine搭載の自動品質管理機能をiRT Kitとともに利用して、MS1とMS2の精度、検出数、感度などを含むいくつかのパフォーマンスなどの重要な装置パラメータを経時的に監視します。

SpectroMine

SpectroMine 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、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

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

代理店

(Dec.,2021)