

MALDI-TOF MS・FTIR データ解析ソフトウェア

CLOVER MS Data Analysis Software

最小限の操作で、 スペクトルに基づく機械学習予測モデルを構築

MALDI-TOF MS と FTIR データを
同じプラットフォームで処理できる唯一のクラウド型のソフトウェアです。

予測モデルの構築は同定困難な微生物菌株を迅速かつ正確に識別するための有望なアプローチであり、薬剤耐性 (AMR) の検出や識別困難な菌株タイピング研究に役立ちます。

例) 薬剤耐性株と感受性株のKlebsiella菌株を識別



薬剤耐性株

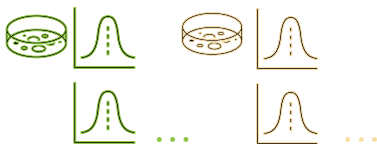


感受性株



既存の方法では困難

→ 予測モデルを構築する必要



既知のサンプルから
識別したいサンプルのカテゴリを作成

機械学習 (ML) による
トレーニング & 予測モデルの取得

モデル評価後、ブラインドデータを使用して、それらのサンプルがどのカテゴリであるか識別できるようになります。

スペクトルのアップロードから検証のための予測モデルの構築を迅速かつ正確なワークフローで解析できます。



非常に直感的で
習得が容易



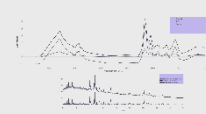
Webベースなので
どこからでもアクセス



データや実験を
共有



様々な装置メーカーの
データを処理



MALDI-TOF MS
と FTIR データ

1 プロセス

MALDI-ToFとFTIRスペクトルを、テストされたアルゴリズムで段階的に処理します。

- ノイズ除去
- ベースライン減算
- スムージング(平滑化)と微分
- アライメント
- 平均スペクトルビルダー
- 正規化
- ピーク検出アルゴリズム



2 分析

再現性から品質管理チェックまで、特定のツールを使用してスペクトルを分析します。

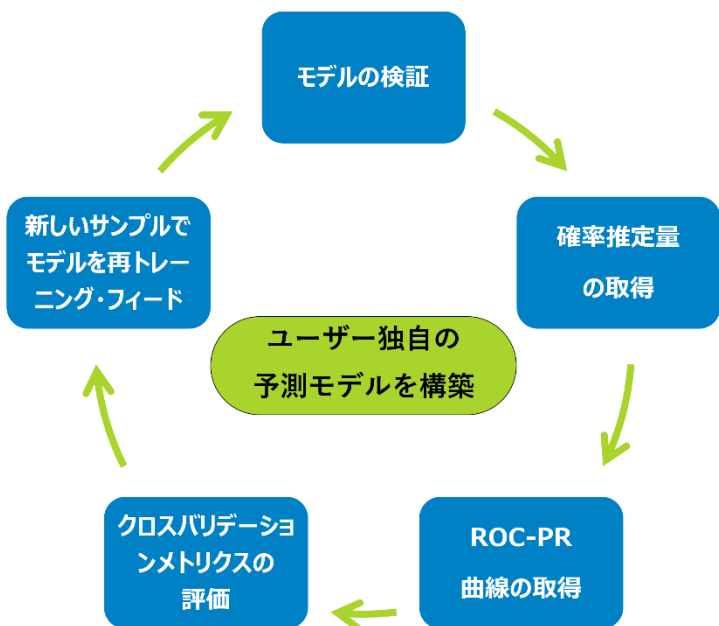
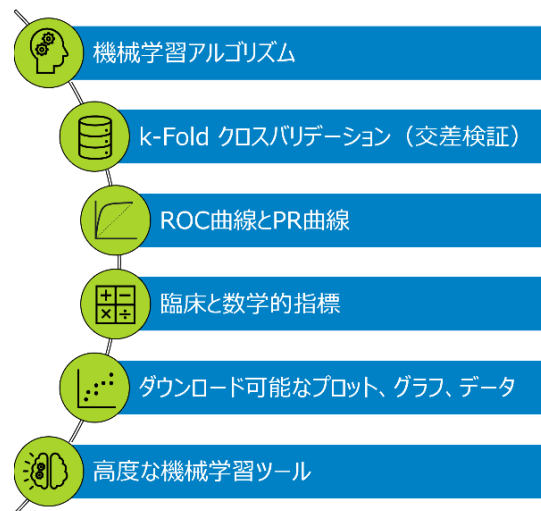
- 改良されたアルゴリズムによるバイオマーカー分析
- 外れ値検出
- スペクトルの品質管理
- 相関分析とピーク分布による再現性試験
- 抗生物質の加水分解検出分析



3 トレーニング

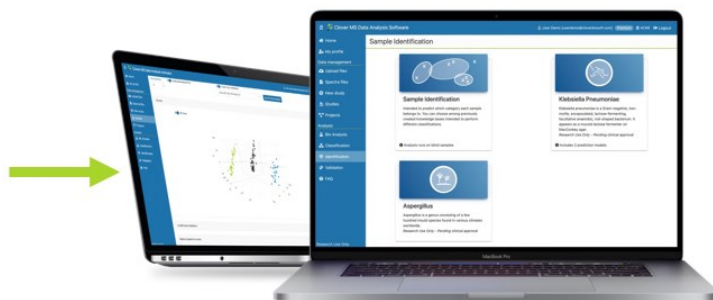
データをトレーニングセットとバリデーションセットに分け、MLアルゴリズムのトレーニングに使用します。

- データセットから予測モデルを作成するための最適な機械学習アルゴリズム
- アルゴリズムによる臨床の指標、ダウンロード可能なテーブル、プロット、グラフ



4 予測と識別

学習済みモデルから新しいサンプルを予測・識別できます。



フィルジェン 株式会社 Filgen®
biosciences & nanosciences

【お問い合わせ】 バイオインフォマティクス部
TEL : 052-624-4388 FAX : 052-624-4389
E-mail : biosupport@filgen.jp URL : https://filgen.jp/

代理店

(Mar.2024)