

服务、商务及其他要求

一、项目概况

队列样本代谢组及脂质组检测服务，完成 7500 名队列研究对象血浆非靶向及靶向代谢组学+脂质组学检测。

二、采购内容及主要技术参数要求

（一）采购内容

血浆非靶向及靶向代谢组学+脂质组学检测。

（二）主要技术参数要求

1.1 血浆关键代谢物靶向定量检测

★服务范围：

完成 7500 例人血浆样本的靶向定量代谢组学检测分析，采用基于 LC-MS/MS 平台对 300 种以上小分子代谢产物进行绝对定量检测分析。

★主要技术参数要求

1.1.1 样本要求

血样 ≤ 50 uL；

1.1.2 检测方法要求

1) 检测小分子代谢产物必须同时包括氨基酸、短链脂肪酸、中长链脂肪酸、酚类、吡啶类、有机酸、胆汁酸、肉碱、糖类及碳水化合物，绝对定量化合物数量需 >300 个；

2) 质控数据包括：标准品混合物、内标、混合生物样本及空白质控；

3) 每种代谢物提供 5 点（含）以上标准曲线；每类代谢物定量均需使用同位素内标，且同位素内标不少于 60 个；

4) 需提供：线性范围、检出限、定量限、精密度、准确度。

1.1.3 数据分析要求

1) 质量控制：对 QC 样本间进行相关性分析以检测数据稳定性；提供带有 QC 样本的主成分分析（Principal Component Analysis, PCA）得分图；

2) 采用各种假设检验以及主成分分析(PCA)，偏最小二乘判别分析(PLS-DA)，正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)等单维和多维方法进行整体情况分析和差异代谢物筛选；

3) 提供差异代谢物筛选单维统计分析、多维统计结果，并能提供相应的箱线图、火山图、韦恩图、热图等；

4) 提供潜在生物标志物筛选分析结果，并提供相应的箱线图、小提琴图等；

5) 进行通路分析，提供 KEGG 及 GO 富集分析数据并提供相关的网络图、条形图、气泡图等图片；

6) 对潜在生物标志物进行诊断建模，包括随机森林 (Random Forest, RF)、支持向量机 (Support Vector Machine, SVM) 和 Boruta 分析等；

7) 提供多组学联合分析，建模分析及聚类分析，并利用 Cytoscape 软件提供后续分析支持。

1.2 血浆非靶向代谢组学检测

★服务范围：

完成 7500 例人血浆样本的非靶向代谢组学检测分析，采用基于高分辨液质联用质谱仪平台，对血浆中的代谢物进行非靶向检测分析。

★主要技术参数要求

1.2.1 样本要求

血样 ≤ 100 μL ；

1.2.2 检测方法要求

1) 使用高分辨液质联用质谱仪采集；正、负离子分开采集；每个样本正、负采集时间总和需 ≥ 20 min。

2) 在整个数据采集阶段，仪器的质量精度需要在 10 ppm 以内。

3) 采用非靶代谢组学前处理方法，提取包括有机酸及其衍生物、有机杂环化合物、苯环型化合物、苯丙烷类和聚酮、有机氧化合物、生物碱及其衍生物、有机氮化合物、核苷、核苷酸和类似物等亲水性化合物，及部分亲水性脂质化合物，二级匹配化合物数量需 > 1500 ；

1.2.3 数据分析要求

1) 质量控制：取一部分样本的混样制备 QC 样本，穿插在正式样本中进样。整个实验过程中，QC 样本的 TIC 响应 Variation 小于 15%，RT 变化小于 0.2 min，提供带有 QC 样本的主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 得分图；

2) 非靶向代谢组学数据库需包含自建库和开源数据库，自建库需包含大于 1500 个亲水性代谢物质，开源数据库需至少包含 HMDB、Metlin、MoNA、GNPS 等

主流开源数据库；

3) 采用各种假设检验以及主成分分析(PCA), 偏最小二乘判别分析(PLS-DA), 正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA) 等单维和多维方法进行整体情况分析和差异代谢物筛选；

4) 提供差异代谢物筛选单维统计分析、多维统计结果, 并能提供相应的箱线图、火山图、韦恩图、热图等；

5) 提供潜在生物标志物筛选分析结果, 并提供相应的箱线图、小提琴图等；

6) 进行通路分析, 提供 KEGG 及 GO 富集分析数据并提供相关的网络图、条形图、气泡图等图片；

7) 对潜在生物标志物进行诊断建模, 包括随机森林 (Random Forest, RF)、支持向量机 (Support Vector Machine, SVM) 和 Boruta 分析等；

1.3 血浆非靶向脂质组学检测

★服务范围：

完成 7500 例人血浆样本的非靶向脂质组学检测分析, 采用基于高分辨液质联用质谱仪平台, 对血浆中的脂质代谢物进行非靶向检测分析。

★主要技术参数要求

1.3.1 样本要求

血样 ≤ 100 uL；

1.3.2 检测方法要求

1) 使用高分辨液质联用质谱仪采集；正、负离子分开采集；每个样本正、负采集时间总和需 ≥ 20 min。

2) 在整个数据采集阶段, 仪器的质量精度需要在 10ppm 以内。

3) 采用非靶向脂质组学的前处理方法提取样本, 提取包括脂肪酸、甘油酯、甘油磷脂、鞘脂、糖脂质、聚酮类、固醇脂类, 孕烯醇酮脂类等脂质化合物, 二级匹配化合物数量需 > 1500 种；

1.3.3 数据分析要求

1) 质量控制：取一部分样本的混样制备 QC 样本, 穿插在正式样本中进样。整个实验过程中, QC 样本的 TIC 响应 Variation 小于 15%, RT 变化小于 0.2 min, 提供带有 QC 样本的主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 得分图；

2) 非靶向脂质组学数据库需包含自建库和开源数据库, 自建库需包含大于

3000 个脂质代谢物质，开源数据库需至少包含 HMDB、Metlin、MoNA、GNPS、Lipidblast、Lipidmaps、Lipidsearch 等主流开源数据库；

3) 采用各种假设检验以及主成分分析(PCA)，偏最小二乘判别分析(PLS-DA)，正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)等单维和多维方法进行整体情况分析和差异脂质代谢物筛选；

4) 提供差异脂质代谢物筛选单维统计分析、多维统计结果，并能提供相应的箱线图、火山图、韦恩图、热图等；

5) 提供潜在生物标志物筛选分析结果，并提供相应的箱线图、小提琴图等；

6) 进行通路分析，提供 KEGG 及 GO 富集分析数据并提供相关的网络图、条形图、气泡图等图片；

7) 对潜在生物标志物进行诊断建模，包括随机森林 (Random Forest, RF)、支持向量机 (Support Vector Machine, SVM) 和 Boruta 分析等。

★三、商务要求：

(一) 服务期限：自合同签订之日起一年，具体期限由采购人根据中标人履行情况考核确定。

(二) 付款方式：合同签订后，通过预实验后 20 个工作日内支付合同项目金额的 30%作为项目开展预付款项，项目中期支付 30%，通过验收合格后支付全部费用。

(三) 验收要求

1、完成时间：合同签定后 6 个月内。

2、产品必须提供质控 SOP，关键检测参数必须达到相关合格标准。

3、供方应将所供数据的用户手册、以移动硬盘拷贝的形式提供代谢组学数据的原始下机文件及生信分析及注释后的代谢组学数据、售后维护承诺、随机工具等交付给需方。

(四) 售后服务要求

1、每例实验需提供明细实验步骤和结果，包括所有测序原始数据，个性化生物信息学数据分析；

2、如因供应商原因导致项目失败，如服务或产品质量不合格等，供应商承担全部责任并退还付款。

3、项目周期：代谢组项目查库、上机与分析不超过 6 个月。

4、数据存贮周期:不少于 12 个月。

5、保密要求:投标人应对项目实施过程及实施过程中获取的所有相关数据、信息、修订资料等材料保密,包括但不限于原始资料、技术路线、实验报告及与实验有关的资料结果、服务价格等涉及项目的内容,未经采购人书面允许,不得以任何形式传播或泄露相关信息。保密期限:自合同生效日起永久保密。

注:本章中上述打★号的为本次招标项目的实质性要求,不允许有负偏离,否则作无效投标处理。