

第五章 采购需求

一、项目概况

我院围绕抑郁症客观诊断与疗效预测关键科学问题，持续推进多组学研究布局。基于前期研究阶段性成果，现拟进一步采购 LC-MS/MS 非靶向代谢组学测试服务，用于脑重大专项多中心大样本队列验证与模型优化分析，为后续靶向定量检测及临床试剂盒转化奠定基础。具体内容如下：

二、项目内容

1、服务内容

通过 LC-MS/MS 非靶向代谢组学技术，无偏性筛查血液等生物样本中代谢物的动态变化，筛选高特异性、可复现的生物标记物组合。包含实验方案设计、高分辨质谱检测、代谢组学数据分析与生物信息学服务、技术支持与培训。

(1) 实验方案设计

结合复杂疾病病因的系统流行病学研究思路，针对采购人所招标产品制定科学、系统、可扩展的研究设计方案。方案需统筹大样本临床队列、多维临床信息与多组学数据，构建从非靶向代谢组学发现、多组学联合解析、靶向定量验证、临床转化应用的完整研究路径，为后续持续研究和成果转化提供支撑。具体要求包括：

1) 方案设计契合度：结合研究课题背景及疾病临床特征，基于文献调研、分子病因机制、公共数据库及系统生物学理论，提出与科研目标高度匹配的非靶向代谢组学研究方案。

2) 方案设计创新性：在大队列临床研究方法学、非靶向代谢组检测技术及生物信息统计分析等方面体现创新性，突出多组学整合分析与关键调控机制解析能力。

3) 方案设计完整性：方案需整合临床流行病学设计、非靶向代谢组学检测、多组学联合分析及生物统计建模，形成结构完整、逻辑清晰的研究体系。

4) 方案设计延展性与转化性：方案需具备前瞻性设计，明确候选生物标志物的靶向定量验证思路，并提出向临床检测指标及试剂盒研发转化的可行技术路径，支持样本规模扩大及后续多组学拓展验证研究。

(2) 高分辨质谱检测

1) 可检出不少于 800 个可靠代谢物。包括：1、氨基酸类代谢物；2、能量代谢相关代谢物；3、糖类代谢物；4、核苷酸类代谢物；5、脂类代谢物；6、肠道菌群特异性代谢物；7、有机酸类代谢物；8、部分外源性环境污染物及其代谢物；9、部分药物及其药物代谢物。

2) 数据库中基于本实验室采购的标准品建立的代谢物数量不少于 3500 种（需提供商用标准品或委托合成标准品的采购证明，证明资料需能体现出相关内容），且每个物质都需具有保留时间、一级精确质量和二级图谱的鉴定信息。代谢物数据库信息基于本地实验室采集的保留时间（单批次内窗口 ≤ 0.1 min）、一级 MS1 的 m/z 精确质量（误差 ≤ 10 ppm）和二级 MS2 的质谱图图谱（与数据库中图谱相比，余弦相似性得分大于 0.75）的鉴定信息建立。

(3) 代谢组学数据分析与生物信息学服务

1) 提供所有检测结果的 EXCEL 表，包括代谢物分类及注释，检测结果中的编码为样品管壁提供的编码。提供质控样本的检测结果，并根据客户需求提供相关代谢物的色谱图和质谱图。

2) 提供组间比较结果及相应的生信分析，包括但不限于进行数据分析与转化（归一化、标准化）、单变量差异代谢物分析（T 检验、U 检验、Z 检验、ANOVA 等）、无监督聚类（HCA、PCA、k-means、t-SNE）、有监督生物标志物筛选（PLS-DA、OPLS-DA、随机森林）、代谢物及分组变量相关性分析（Pearson、Spearman、Kendall、差异相关等）、通路富集分析、时间趋势分析等分析手段。

3) 除常规分析外，提供代谢通路深度挖掘分析，并提供文献发表级的大图 5 张以上，同时提供相应的数据挖掘内容与结果说明。

(4) 技术支持与培训

1) 提供不少于 3 次的项目汇报或培训，在数据分析阶段，需要提供一对一的专业技术支持。

2) 出现突发情况或技术问题时，可及时提供远程或现场技术支持。

2、技术要求

(1) 样本运输要求

1) 收样后在用户指定时间内完成样本分装以及检测。

2) 所有样本运送必须采用符合相关标准的冷链物流车或转送车辆及冷链物流箱进行运输，并配备温度监控进行温控记录。

3) 样本检测完成后剩余样品返还采购人。

(2) 检测方法要求

1) 针对不同性质的代谢物成分, 每份样本在质谱正、负离子模式下分别采用 2 种及以上液相分离方式, 每份样本应采用不低于四种方法进行检测 (提供证明资料 (如: 文献、官网截图、检测报告等) 复印件加盖公章, 证明资料需能体现出相关内容)。

2) 为满足不同性质代谢物的检测覆盖度, 同时避免方法切换导致的质控问题并提高检测通量, 应在不同仪器上固定设置不同检测方法, 每份样本的检测平台应包含至少 3 台以上十万级分辨率高分辨质谱仪, 分别配套二维液相色谱 (提供高分辨质谱仪、二维液相色谱购置证明及高分辨质谱仪满足上述技术要求证明)。

(3) 质控要求

1) 采用不少于 40 种同位素内标做质控, 监控回收率、保留时间的稳定性、离子质量精度和色谱分离效率等实际运行情况。

2) 质控样品中内标的信号波动的中位 RSD (相对标准偏差) 小于 5%。

3) 前处理采用高通量自动化移液工作站 (提供高通量自动化移液工作站购置证明材料)。

4) 采用专业的代谢组学分析软件进行代谢物峰图数据筛选, 通过人工二次审核流程, 对每一个代谢物的色谱峰、积分、MS1 和 MS2 进行二次确认, 以确保数据的可靠性 (提供分析软件介绍、软件截图、人工审核流程说明等证明材料)。

5) 提供 5000 例及以上大样本量队列的检测经验实例和质量控制方案。

(4) 数据分析与交付

1) 投标人需具备千人队列代谢组学检测及数据分析经验, 拥有熟练的生物信息学分析团队。项目核心团队成员应满足以下条件: 具有科学技术、医学、临床或相关专业副高级及以上职称; 具有主导/深度参与代谢组学项目研究和数据分析能力, 具有代谢相关疾病生物标志物筛选和靶向验证经验, 具备较强的科学素养和技术专业性并能够投入较多时间在本项目上 (团队成员须为供应商在职人员); 项目核心团队成员作为第一作者/共同第一作者或通讯作者/共同通讯作者发表过代谢组学相关 SCI 研究论文 (作者单位须为投标人单位)。投标人需提供以下证明材料: 团队成员清单; 身份证明材料; 职称证书原件扫描件; 论文证明

材料（包括论文全文或首页、摘要中文翻译、公开数据库检索截图等）；社保证明材料（需提供投标截止日期前 6 个月内任意 1 个月由供应商单位为上述人员缴纳社保的证明或劳务合同）。上述材料均需加盖供应商公章。

2) 输出主要分析结果和分析报告：提供所有检测结果的 EXCEL 表、下机原始数据、主要分析结果图表等；

3) 交付介质可为移动硬盘或网络传输链接；

4) 数据隐私及保密：供应商须承诺对交付数据严格保密。

5) 在检测及分析过程中，如果出现异常，需要及时与采购人沟通，提供可行的补救或解决方案；

三、服务期限

自合同签订后 1 年内。

四、服务地点

投标人实验室所在地。

五、履约验收：

(1) 主体：北京安定医院

(2) 时间：自供应商提起验收之日起 30 日内组织验收

(3) 方式：自行验收

(4) 程序：分段/分期验收

(5) 内容和验收标准：

应严格按照《财政部关于进一步加强政府采购需求和履约验收管理的指导意见》（财库〔2016〕205号）、《政府采购需求管理办法》（财库〔2021〕22号）的要求进行验收。