

2024年12月

# ユーザー様向け PEAKS 12

## 変更点及び注意点

2024年11月に Bioinformatics Solutions 社から、PEAKS 12.5 (PEAKS12 のパッチ版) がリリースされました。ここでは、PEAKS 既存ユーザー様向けに、PEAKS 12.5 の主な変更点をご紹介します。

ご不明な点がございましたら、インフォコム株式会社までお問い合わせ下さい。



**最初に。。。**

PEAKS 12.5 での推奨環境は以下のとおりです。

- OS : Windows 10/11 (64bit)
- 最小構成
  - ◇ 16 threads, 32GB RAM
- 推奨構成
  - ◇ Desktop ライセンス
    - 30+ threads processors, 72GB+ RAM, compatible GPU
  - ◇ Workstation ライセンス
    - 60+ threads Processor, 128GB RAM, compatible GPU
- BSI 社が推奨する理想的環境
  - ◇ Intel Core i7・i9/Xeon or AMD Ryzen 7/9/threadripper processors, 40 threads or more, 96-128GB RAM, compatible GPU

※DeepNovo を実行する場合、64GB 以上の空きメモリと、8 GB 以上の専用メモリを持つ NVIDIA CUDA compute capability  $\geq 8$  GPU を搭載したマシンをお勧めします。

※DIA データベース検索を行う場合、64GB 以上の空きメモリと、8GB 以上の専用メモリを持つ NVIDIA CUDA compute capability  $\geq 5$  GPU を搭載したマシンをお勧めします。

※GPU は CUDA バージョン 12.3 以降に更新する必要があります。

## ① 旧バージョンプロジェクトとの互換性について

**PEAKS12.5 では 11/11.5/12 で作成したプロジェクトはそのまま取り込めますが、PEAKS12.5 で追加された機能は自動的に反映されないため、新機能を含む解析結果を希望する場合は再計算が必要です。**

**また、10.5 以前のバージョンで作成されたプロジェクトとの互換性が無く、開く事ができません。PEAKS 12.5 へアップグレード後、10.5 以前のバージョンを継続利用されたい方は、別フォルダにインストールしてください。**

旧バージョン PEAKS のご利用も希望される場合は、同じ PC で PEAKS12.5 と旧バージョン PEAKS の両方を使用することが可能です。

V11/11.5/12 で作成された Enzyme/PTM/Database のユーザー設定ファイル等を移行する方法については、「PEAKS12.5 アップグレード手順書」をご覧ください。

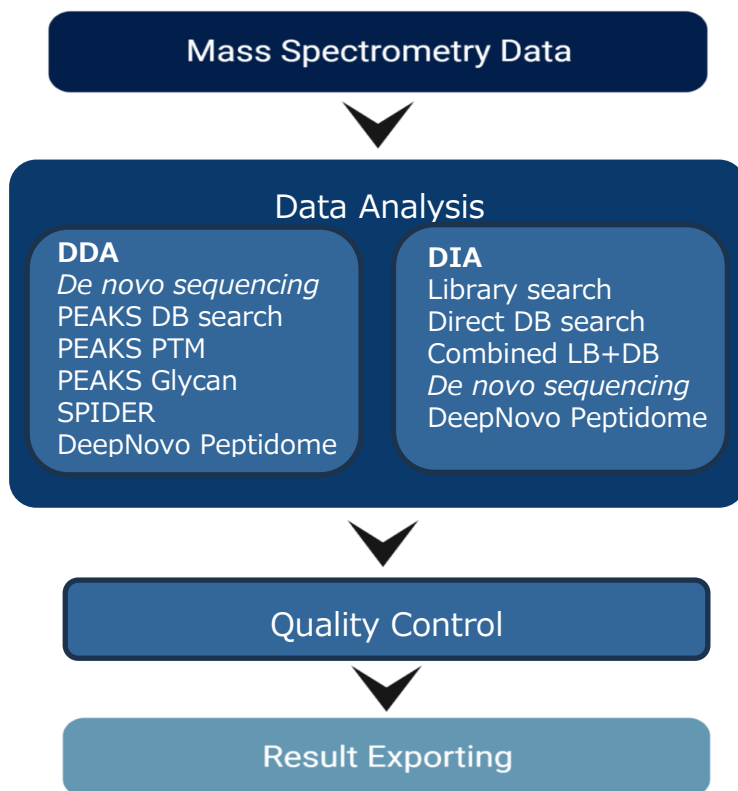
## ② What's New PEAKS 12.5

PEAKS12.5 は、DDA と DIA を両方解析できる all-in-one ソフトウェアソリューションで、各種ベンダーからの Raw データと共通フォーマットをサポートするベンダーニュートラルなプラットフォームです。

PEAKS12.5 では、CPU と GPU の両方の利用における処理時間の改善、新しい AT Scan DIA テクノロジーのサポート、改善された DIA データと結果 View、及び更新された Hybrid-PRM/DIA ワークフローが導入されました。

### [トピックス]

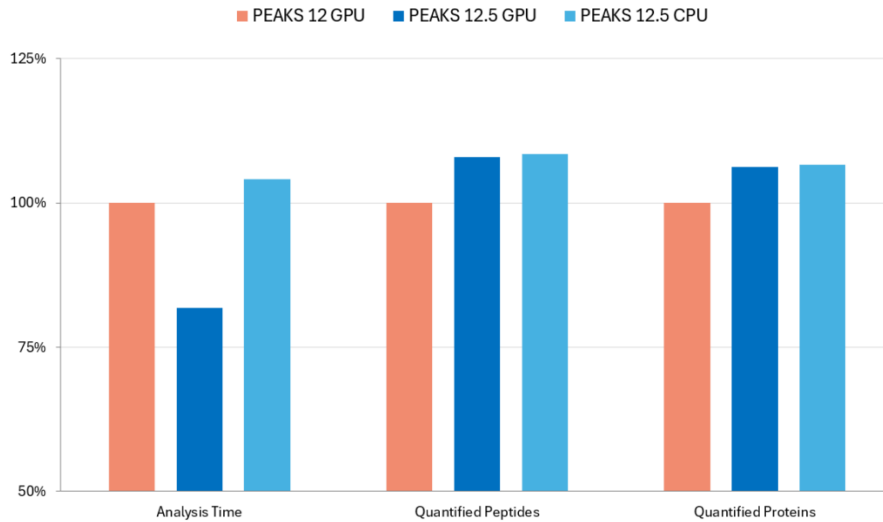
- ① DIA 解析において CPU と GPU の両方で処理速度が改善されました
- ② ZT Scan DIA をサポートするようになりました
- ③ DIA データの LC/MS data view が改善されました
- ④ Hybrid-PRM/DIA ワークフロー機能が改善されました



次ページ以降で、詳細な最新機能をご紹介します。

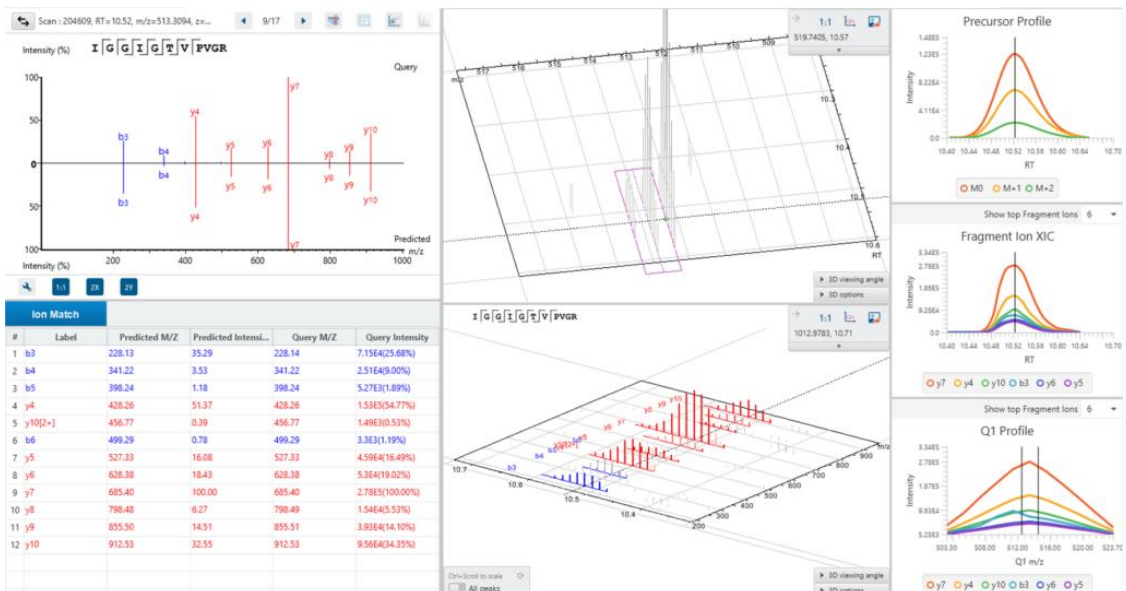
### ① DIA 解析において CPU と GPU の両方で処理速度が改善されました

PEAKS12.5 は、GPU 使用時に PEAKS12 よりも約 20% 高速に DIA データ処理が可能になりました。更にアルゴリズムを改良し、CPU リソースをより有効に活用して解析速度がアップしました。



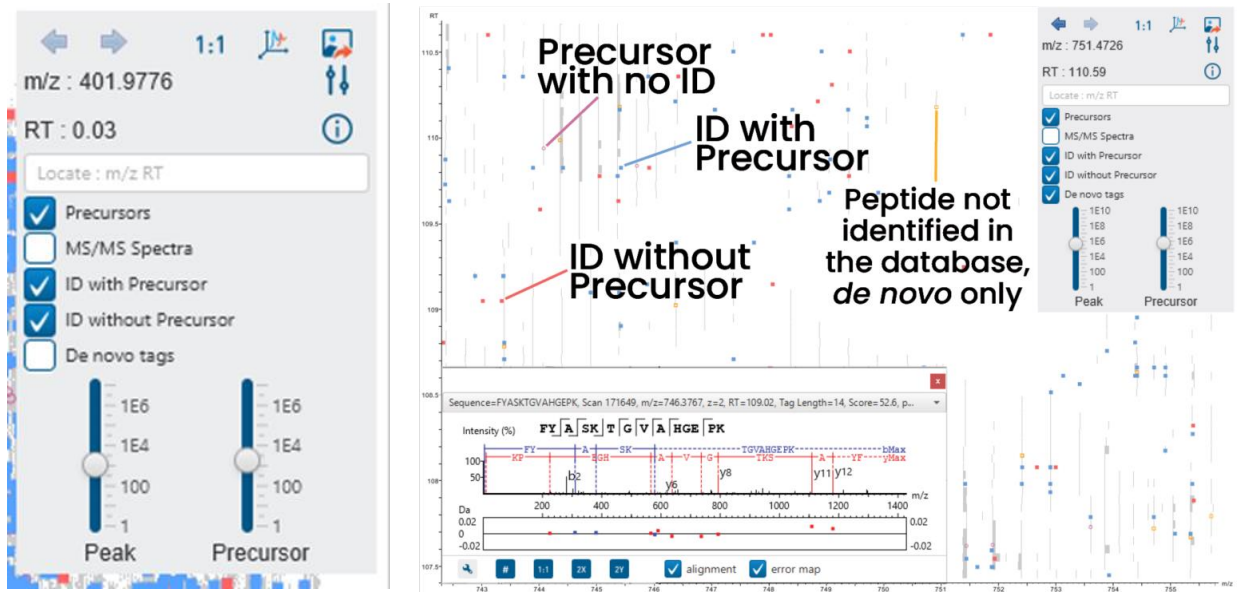
### ② ZT Scan DIA をサポートするようになりました

Sciex 社の最新の AT Scan DIA テクノロジーをサポートするようになりました。PEAKS アルゴリズムは、ZT Scan DIA からの Q1 dimension 情報をスコアリング機能に統合し、Identification・感度・再現性・定量精度を向上させます。



### ③ DIAデータのLC/MS data viewが改善されました

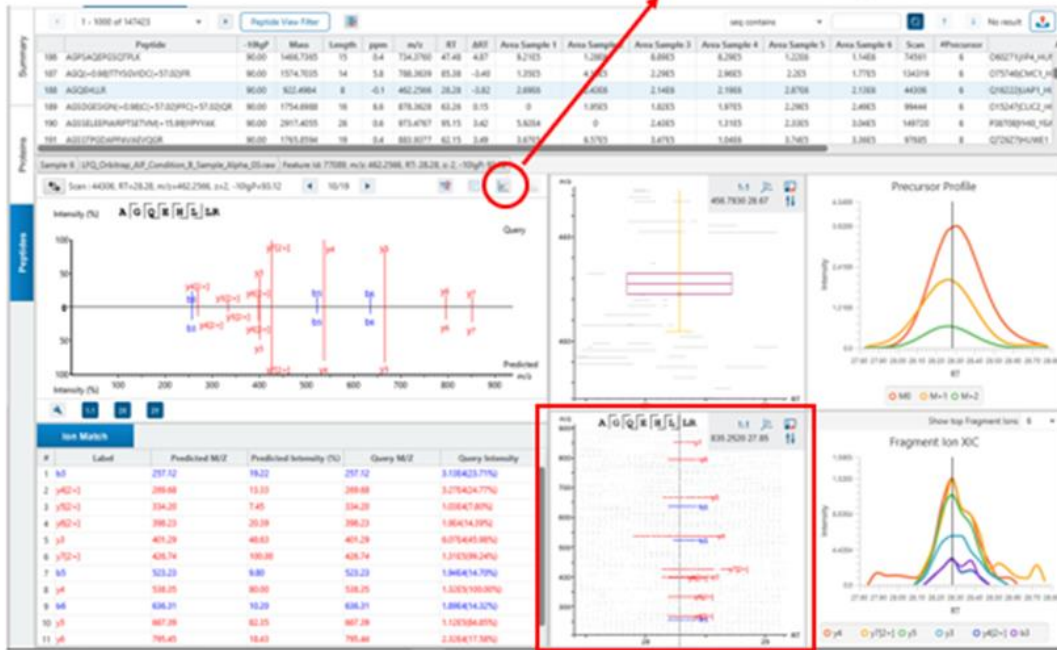
DIAデータにおいて、PEAKS Data RefineのLCMS viewでは、Precursor, MS/MS window, Identification及びde novoタブを視覚化させるためのオプションが追加されました。PrecursorがあるIdentificationと無いIdentificationを簡単に区別できるようになり、PrecursorがあるIdentification (ID with Precursor)は青で、Precursorが無いIdentification (ID without Precursor)は赤で色付けされています。



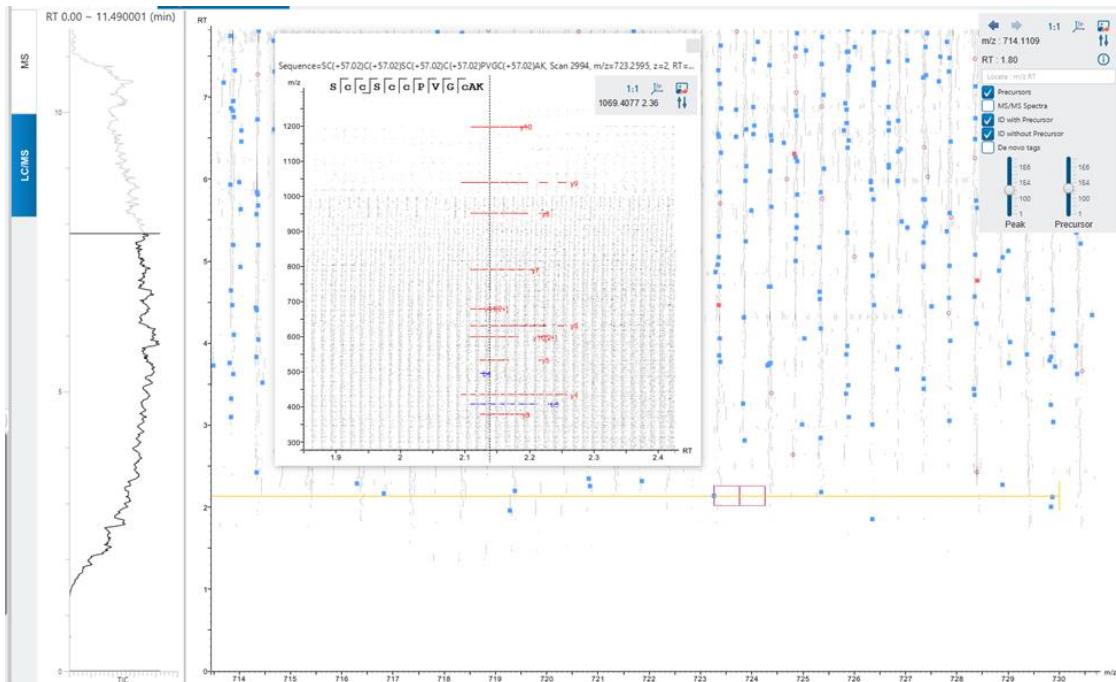
マップ上のFeatureにマウスカーソルを置くと、そのFeatureに関する情報が表示され、クリックするとラグメントLCMSスナップショット(同定されている場合)が表示されます。

Peptide タブでは、LCMS map 上で Precursor と、より明確にリンクされます。また「Show Spectrum in LCMS View」を選択すると、data refine view でフラグメントン LCMS スナップショットを開くことができます。

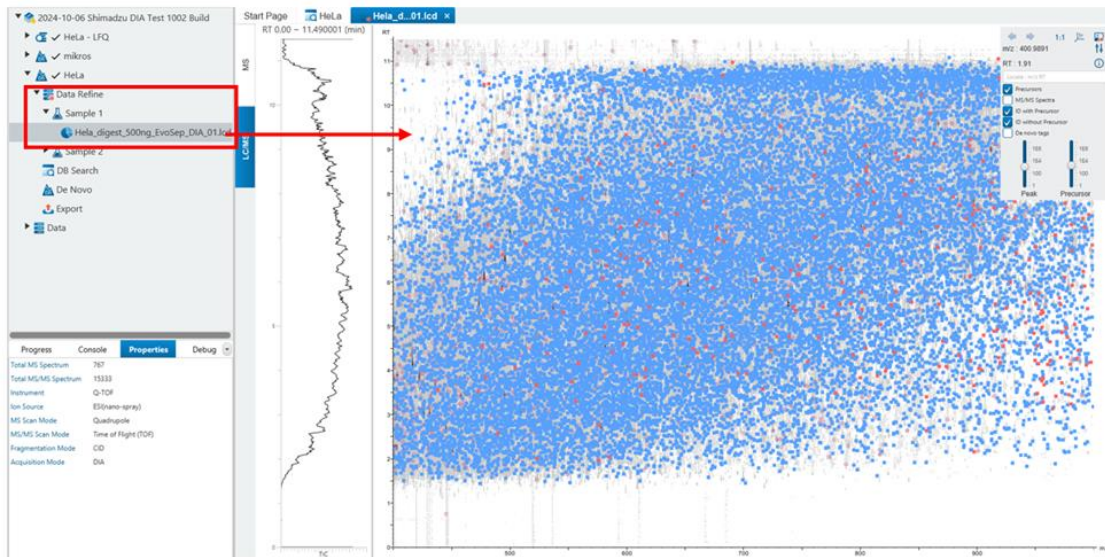
Choose "Show Spectrum in LCMS View" to see it's location on the LCMS map



LCMS snapshot at the fragment ion level.



LCMS は「Data Refine」からもアクセス出来ます。



#### ④ Hybrid-PRM/DIA ワークフロー機能が改善されました

Thermo 社の Hybrid-DIA テクノロジーは、ターゲットを絞ったアプローチと Discovery-driven アプローチを組み合わせているため、臨床プロテオミクスアプローチに最適です。

Hybrid-PRM/DIA は DIA を使用した臨床生体試料の discovery-driven デジタル化と組み合わせた PRM (Parallel reaction monitoring) のインテリジェントなトリガーにより、特定の分析セットの感度を向上できる新しい直感的なデータ取得戦略です。Heavy ラベルレファレンスペプチドは、PRM 及び内因性ペプチドのモニタリングのトリガーとして使用されます。

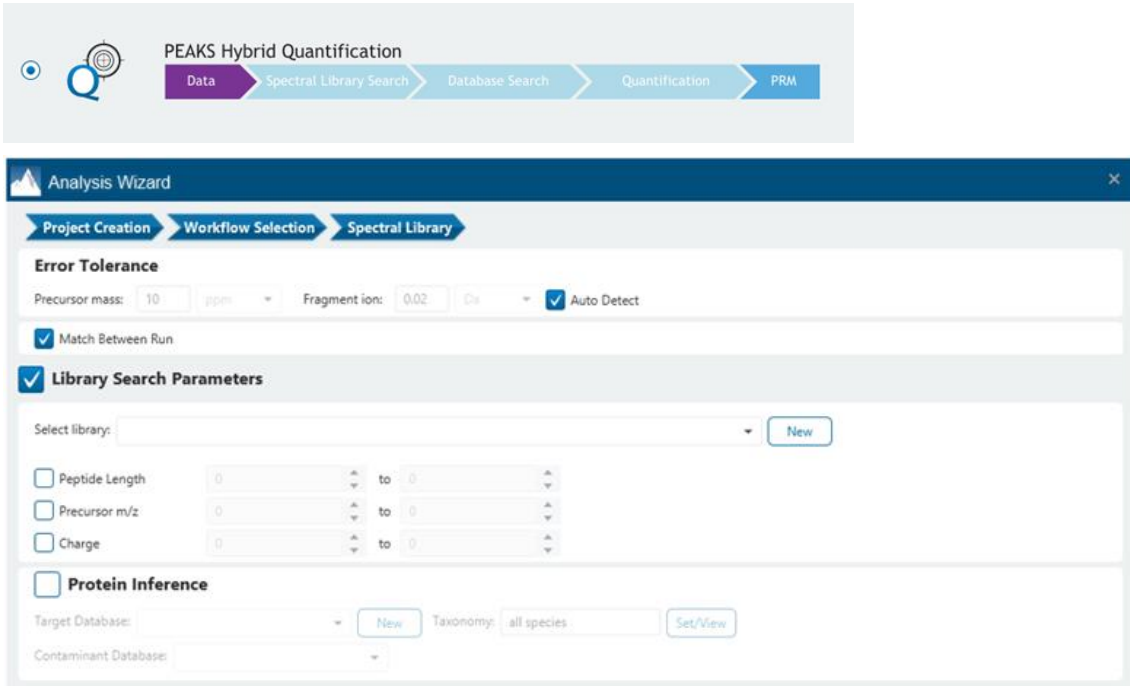
PEAKS12 では、DeepNovo Peptidome ワークフローに、Quantification (LFQ) 機能と QC 機 Acquisition 対応として、PRM と Hybrid-DIA が追加され、それぞれ専用のワークフローが導入されました。



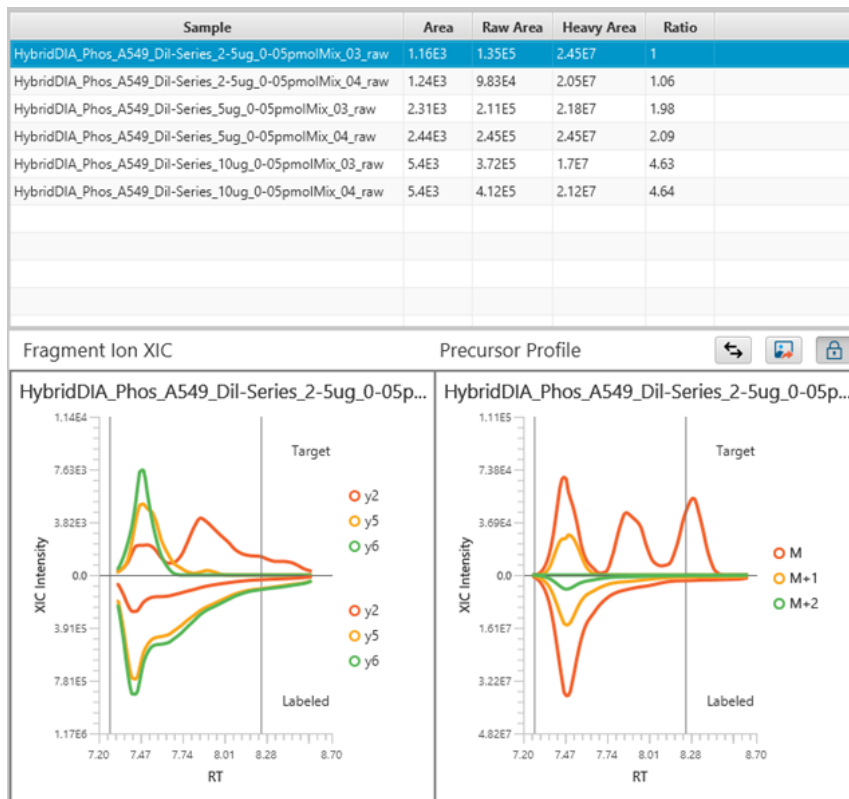
更に今回リリースされた 12.5 では以下のような改善を行いました。



- Hybrid ワークフローにおいて、Spectral Library 検索ステップが追加されました。



- 計算後の Result view において、Target と Labeled プロファイルのミラープロットを含むようになりました。



上のテーブルには、normalized, raw, heavy-labeled ペプチドの Area が表示されています。  
Fragment Ion XIC ミラープロットでは、上が Target、下が Labeled ペプチドを示しています。

#### ⑤ その他新機能

- データベースチェック機能

Configuration のデータベース設定の際、長さが 30,000 以上のタンパク質、無効な ID を持つタンパク質、重複するタンパク質を削除する機能が追加されました。

また 12.5 では uniprot などの公的データベースに関しては Validate は必須では無くなりました。

(独自データベースの登録時には Validation を実施してください)

- 読込フォーマットの対応追加

※Shimadzu フォーマット対応

島津社製 MS 装置から得られる .lcd ファイルについて、DIA データがサポートされるようになりました。また、lcd → mzML で保存したファイルの読込も可能になりました。

※Agilent フォーマット対応

Agilent 社製 MS 装置から得られる .d ファイルについて、DIA データがサポートされるようになりました。

対応データフォーマットの最新リストは以下サイトをご覧ください。

<https://www.bioinfor.com/formats/>

各機能の詳細につきましては英語 User-Guide をご覧ください。

お問い合わせ先：

インフォコム株式会社 ヘルスケアサービス部 ライフサイエンスグループ  
TEL : 03-6866-3860 メール : support-science@infocom.co.jp  
〒107-0052 東京都港区赤坂 9-7-2 ミッドタウン・イースト 10F