

# **PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNiques PER A LA CONTRACTACIÓ DEL MANTENIMENT I SUPORT DE LES LLICÈNCIES DE PROGRAMARIS PER L'ANÀLISI DE DADES PROTEÒMIC ESPECIALITZAT PER A LA PLATAFORMA D'ESPECTROMETRIA DE MASSES I PROTEÒMICA DE LA FUNDACIÓ INSTITUT DE RECERCA BIOMÈDICA (IRB BARCELONA).**

**NSPE-1125-173**

## **I.- INTRODUCCIÓ (INTRODUCTION)**

La Fundació Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona) és una fundació creada per la Generalitat de Catalunya, la Universitat de Barcelona (UB) i el Parc Científic de Barcelona (PCB), amb l'objectiu de contribuir a la millora de la qualitat de vida mitjançant l'aplicació dels avanços en l'àrea de ciència biomèdica bàsica i aplicada, i de promoure investigació multidisciplinària d'excel·lència a la frontera entre la biologia i la química, així com promoure la col·laboració entre entitats locals i centres d'investigació institucionals, promovent i coordinant investigació interdisciplinària en biomedicina. L'IRB Barcelona és un centre CERCA, reconegut per la Generalitat de Catalunya.

L'IRB Barcelona, d'acord amb els seus objectius, requereix del suport i manteniment del software d'anàlisi proteòmic especialitzat, denominat Spectronaut, amb el que compta l'IRB Barcelona), raó per la qual es duu a terme aquest contracte.

La plataforma d'espectrometria de masses i proteòmica té la necessitat de contractar els serveis de suport i manteniment de les llicències de programari corresponent al software Spectronaut, per a l'ús en l'anàlisi de dades proteòmiques d'alt rendiment obtingudes en espectròmetres de masses mitjançant noves tecnologies d'adquisició independent de dades (segles DIA, pel significat en anglès: "data-independent-acquisition"), que requereixen algorismes d'aprenentatge profund per entrenar els sistemes.

El software Spectronaut, així com qualsevol subministrament o servei directament relacionat amb aquest programari, de l'empresa Biognosys AG, no pot adquirir-se a través de cap altre proveïdor, donat que Biognosys AG és l'única empresa que posseeix els drets exclusius per llicenciar el software Spectronaut a Espanya, tal i com es certifica a la carta d'exclusivitat emesa el 18 de desembre de 2025, i degudament signat electrònicament.

És essencial per aquest tipus de programari, ja existent a l'IRB Barcelona, el suport i manteniment, per proporcionar un servei d'anàlisi de dades proteòmiques punter i eficient, capaç d'incorporar noves tecnologies d'adquisició de dades més ràpids i precisos i permeten una major cobertura del proteoma.

The Biomedical Research Institute Foundation (IRB Barcelona) is a foundation created by the Generalitat de Catalunya, the University of Barcelona (UB) and the Barcelona Science Park (PCB), which aims to contribute to the improvement of the quality of life through the application of advances in the field of basic and applied biomedical science, and to promote multidisciplinary research of excellence at the interface between biology and chemistry, as well as to foster collaboration between local entities and institutional research institutes,

promoting and coordinating interdisciplinary research in biomedicine. IRB Barcelona has status as a CERCA center, recognized by the Generalitat de Catalunya.

IRB Barcelona, in accordance with its objectives, requires the support and maintenance of the specialized proteomic analysis software called Spectronaut, which is available at IRB Barcelona, and that is why this contract is being carried out-, reason for carrying out this contract.

The Mass Spectrometry Platform has the need to contract the services of support for the Spectronaut software license for its use in high-throughput proteomics data analysis of data acquired on mass spectrometers using new DIA (data-independent acquisition) technologies, which require deep-learning algorithms to train the systems.

The Spectronaut software, and any supply or service directly related to said software, from the company Biognosys AG, cannot be acquired through any other supplier, as Biognosys AG is the only company that holds the exclusive rights to license Spectronaut Software within Spain, as certified in the exclusivity certificate, duly electronically signed and issued on 18th December 2025.

It is essential for this type of software, the support and maintenance, to provide a cutting-edge and efficient proteomics data analysis service, capable of incorporating new instrumental technologies that allow the implementation of faster and more precise data acquisition methods and enable greater proteome coverage.

## **II.- OBJECTE DE LA CONTRACTACIÓ (PROCUREMENT OBJECT)**

### **1. Objecte general (General object)**

L'objectiu d'aquest procediment és la contractació del servei de suport i manteniment del programari Spectronaut.

En aquest sentit, es requerirà:

- Actualització constant del programari
- Correcció d'errors i optimització del rendiment
- Suport tècnic en remot
- Assistència a l'usuari i resolució de problemes
- Accés a les actualitzacions de nous algoritmes i fluxos de treball

Específicament, tots els serveis, provisions i subministraments que siguin necessaris per a la completa i plena execució del contracte seran inclosos en les condicions detallades, a excepció que s'especifiqui el contrari en el present Plec.

The purpose of this procedure is the procurement of the support and maintenance services of the Spectronaut software.

In this regard, the following will be required:

- Continuous software updates
- Bug fixes and performance optimizations
- Remote technical support
- User assistance and troubleshooting
- Access to new algorithm updates and workflows

Specifically, all services, provisions and supplies that are necessary for the full and complete execution of the contract will be included in the detailed terms, unless otherwise specified in this technical specifications.

## **2. Calendari de durada del contracte (Contract duration schedule)**

El contracte del present procediment tindrà una duració inicial de tres (3) anys, a comptar des del dia següent a la formalització del contracte. No es preveu pròrroga.

The contract for this procedure will have an initial duration of three (3) years, effective from the day after the contract is formalised. No extension is foreseen.

## **III.- REQUISITS TÈCNICS DE LA CONTRACTACIÓ (TECHNICAL PROCUREMENT REQUIREMENTS)**

Contextualment, Spectronaut és una solució de programari especialitzat amb la capacitat de:

- Processar conjunts de dades proteòmiques d'adquisició independent de dades (DIA) a gran escala.
- Aplicar algoritmes d'aprenentatge automàtic i aprenentatge profund per la identificació de pèptids i proteïnes.
- Realització d'anàlisis quantitius robustos sense etiquetes.
- Gestió de la comparació estadística entre condicions experimentals.
- Garantir la reproductibilitat, la traçabilitat i el control de qualitat de les dades.

El programari Spectronaut es considera tècnicament indispensable per dur a terme aquestes tasques, donat que integra totes les funcionalitats requerides en una única plataforma, validada i adaptada per proteòmics d'adquisició independent de dades (DIA).

Així mateix, el programari ha de mantenir-se correctament i actualitzat per a poder assegurar un adequat processament, identificació, quantificació i, anàlisi estadístic de conjunts de dades proteòmiques d'alt rendiment, permetent d'aquesta manera, l'execució de projectes d'investigació avançada en proteòmica quantitativa. L'objecte del present contracte engloba el suport i manteniment del software, tal i com es detalla a continuació:

Les actualitzacions del software i el manteniment del mateix han de complir i permetre, com a mínim, les següents capacitats tècniques del programari:

### **1. Processament i alineació de dades**

- Extracció automatitzada de cromatogrames a partir de dades DIA
- Alineació del temps de retenció en múltiples execucions
- Detecció i correcció d'interferències
- Integració de senyals i sostracció de fons

- Normalització entre execucions per a cohorts de mostres grans

## 2. Identificació i validació

- Identificació de pèptids i proteïnes mitjançant algoritmes avançats d'aprenentatge automàtic.
- Identificació basada en biblioteques i sense biblioteques (tipus DirectDIA)
- Control de la taxa de descobriments falsos (FDR) en:
  - Nivell precursor
  - Nivell pèptid
  - Nivell de proteïnes
- Validació estadística basada en cimbells

## 3. Quantificació

- Quantificació sense etiquetes basada en MS2 d'alta precisió
- Interferència de proteïnes a partir de pèptids compartits
- Normalització entre sèries
- Control de valors quantitativs restants

## 4. Anàlisi estadístic

- Anàlisi d'abundància diferencial entre condicions experimentals
- Correcció de proves múltiples (per exemple, Benjamini-Hochberg)
- Eines d'anàlisi multivariant (PCA, agrupament)
- Opcions d'anàlisi d'evolució temporal i dosis-resposta

## 5. Anàlisi de modificacions postraduccionals (PTM)

- Anàlisi quantitativ de pèptids modificats, incloent-hi:
  - Fosforilació
  - Acetilació
  - Ubiquitinació
  - Altres modificacions variables
- Puntuació de la probabilitat de localització del lloc
- Anàlisi comparatiu de PTM en diferents condicions

Han de ser compatibles amb:

- Dades generades en espectròmetres de masses d'alta resolució compatibles amb DIA
- Formats RAW de proveïdors i formats oberts com mzML
- Formats de biblioteques espectrals comunament

Haurà de permetre l'exportació de resultats quantitativs i estadístics en formats estàndards compatibles amb eines bioinformàtiques posteriors (R, Python, Perseus, etc).

El software ha de permetre:

- El processament per lots de centenars o milers d'arxius sense processar
- L'anàlisi de cohorts a gran escala
- El funcionament d'alt rendiment en estacions de treball amb CPU multi-nucli
- Una gestió eficient de la memòria per grans conjunts de dades

El software ha de garantir:

- La traçabilitat de les dades i l'auditabilitat del projecte

- El control de l'accés de l'usuari
- La integritat de les dades durant el processament
- La reproductibilitat total del procés d'anàlisi

Spectronaut is a specialized software solution capable of:

- Processing large-scale DIA proteomics datasets
- Applying machine-learning and deep-learning algorithms for peptide and protein identification
- Performing robust label-free quantitative analysis
- Managing statistical comparison between experimental conditions
- Guaranteeing reproducibility, traceability, and data quality control

The software Spectronaut is considered technically indispensable for carrying out these tasks, as it integrates all the required functionalities into a single validated and widely adopted platform for DIA-based proteomics.

Therefore, the software must be properly maintained and kept up to date in order to ensure accurate processing, identification, quantification, and statistical analysis of high-throughput proteomics datasets, thereby enabling the execution of advanced research projects in quantitative proteomics. Thus, the object of the present procurement encompasses the support and maintenance of the software, as it detailed in the following:

The software updates and maintenance must meet and allow, at minimum, the following technical capabilities:

#### **1. Data Processing and Alignment**

- Automated chromatogram extraction from DIA data
- Retention time alignment across multiple runs
- Interference detection and correction
- Signal integration and background subtraction
- Cross-run normalization for large sample cohorts

#### **2. Identification and Validation**

- Peptide and protein identification using advanced machine-learning algorithms
- Library-based and library-free (DirectDIA-type) identification
- False Discovery Rate (FDR) control at:
  - Precursor level
  - Peptide level
  - Protein level
- Decoy-based statistical validation

#### **3. Quantification**

- High-precision MS2-based label-free quantification
- Protein inference from shared peptides
- Inter-run normalization
- Control of missing quantitative values

#### **4. Statistical Analysis**

- Differential abundance analysis between experimental conditions
- Multiple testing correction (e.g., Benjamini–Hochberg)
- Multivariate analysis tools (PCA, clustering)
- Time-course and dose–response analysis options

## 5. Post-Translational Modification (PTM) Analysis

- Quantitative analysis of modified peptides including:
  - Phosphorylation
  - Acetylation
  - Ubiquitination
  - Other variable modifications
- Site localization probability scoring
- Comparative PTM analysis across conditions

Compatibility with:

- Data generated on high-resolution DIA-capable mass spectrometers
- Vendor RAW formats and open formats such as mzML
- Spectral library formats commonly used in proteomics

It must allow export of quantitative and statistical results in standard formats compatible with downstream bioinformatics tools (R, Python, Perseus, etc.).

The software must allow:

- Batch processing of hundreds to thousands of raw files
- Large-scale cohort analysis
- High-performance operation on multi-core CPU workstations
- Efficient memory management for large datasets

The software must ensure:

- Data traceability and project auditability
- User access control
- Data integrity during processing
- Full reproducibility of the analysis pipeline

A Barcelona, en data de la signatura electrònica.

Dra. Marta Vilaseca  
Mass Spectrometry and Proteomics Core Facility  
**Fundació Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona)**