

MetaProteomicsAnalyzer – Wochentreffen – Protokoll vom 04.10.11

1. Daten (Robert)

→ Ein paar mehr Spektren werden gebraucht (auch mit schlechter Qualität). zum Testen des Ähnlichkeitsalgorithmus und eventuellem Vorfiltern der MGFs: *Robert*

2. Filtern der MGFs nach Qualität (alle)

→ Haben diskutiert, ob ein Vorfiltern der Spektren sinnvoll ist, Kriterien wären:

- Gesamtsignal (TIC – total ion current)
- Signal/Noise-Ratio
- Verteilungsfunktion o.ä.

→ *Robert* sucht dazu das PepNovo-Paper raus, dort wird ein Pre-Filtering gemacht

3. Scoring (alle)

→ Wollen wir Scoring einführen ? Welche Parameter sollen mit rein ?

→ *Alex* sucht nach Publikationen zu bereits vorhandenen Ansätzen

4. Auswerterechner/SQL-Server (Thilo)

→ Die Algorithmen zur Auswertung laufen teilweise nur unter Linux, deshalb wäre dafür ein Rechner mit diesem OS sinnvoll. Auch wäre ein SQL-Server unter Linux stabiler. Auswertung und DB wären auf einem Server.

→ *Thilo* kontaktiert die IT (Gerrit/Matthias) zum Aufsetzen eines solchen Rechners.

5. Anzeige des Spektrumvergleichs/der Spectral Library (Alex)

→ Es soll am Ende für den Benutzer 3 Anzeigen geben:

a) Experimentelle Spektren:

- ein Plot mit m/z, Intensität, Zoom-Funktion, Peak-Annotation
- eine Tabelle mit allen geladenen Spektren: Filename, Spectrumname, Precursor m/z, Charge, TIC, Maximum Intensity usw.

b) Vorhandene „Library“ Spektren:

- ein Plot mit m/z, Intensität, Zoom-Funktion, Peak-Annotation
- Tabelle mit Library Spektren: wie oben, dazu Protein-Annotationen etc.

c) Matching Spektren:

- Die beiden Spektren mit den gematchten Peaks entweder vertikal gespiegelt übereinander oder gut visualisiert in einem Plot
- Liste von Matches: Ähnlichkeit, Score (?), Peakanzahl, massdelta, Peptide