

# Análisis bioinformático de datos de espectrometría de masas para estudios proteómicos.

## Análisis de datos de Espectrometría de Masas.

El análisis de datos de un experimento de RNA-Seq comienza con la inspección

### Dependencias.

Las siguientes versiones de los paquetes .

1. **Trans Proteomic Pipeline** Para instalación en linux compilar el código fuente desde el repositorio del proyecto Sashimi:  
<https://sourceforge.net/projects/sashimi/>
2. **python-numpy, python-matplotlib**

### Conversion de *raw data* a formato mzML.

- Desplazar el mouse sobre la sección de Analysis Pipeline (Tandem) y seleccionar la opción mzML/mzXML.
- Especificar el tipo de instrumento utilizado.
- Agregar los archivos a covertir desde el botón Add Files.
- Especificar las opciones de conversión.
- Click en el botón Convert to mzML.

### Identificación de péptidos con X!Tandem.

- Acceder a la interfaz de búsqueda de X!Tandem dando click en el botón Database Search.
- Agregar los archivos de entrada mediante el botón Specify mzXML Input Files
- Definir los parámetros de búsqueda para la base de datos mediante el botón Specify Tandem Parameters File
- Seleccionar la base de datos que se usará para la búsqueda.
- Ejecutar la búsqueda mediante el botón Run Tandem Search.

### Identificación de espectros con SpectraST.

- Desde la página de inicio, cambiar el pipeline al tipo SpectraST.
- Seleccionar e instalar las librerías apropiadas de espectros desde PeptideAtlas.
- Cargar los archivos mzML para ser analizados.

### Validación estadística de los espectros identificados.

- Desde la pagina principal, dar click en la página Analyze Peptides.
- Cargar los archivos .pep.xml
- Ejecutar la validación mediante el botón Run XInteract

### Visualización de espectros validados.

- Desde la pagina principal, dar click en la página Analyze Peptides.
- Cargar los archivos .pep.xml
- Click en el botón Pep3D para generar las gráficas resultantes, una por cada archivo mzML.

### Validación de los resultados de peptide Prophet.

- Acceder a la interfaz de iProphet.
- Cargar los archivos de péptidos .pep.xml
- Ejecutar el análisis mediante el botón InterProphet

### Cuantificación de niveles de expresión péptidos.

- Acceder a la interfaz de xinteract.
- Cargar el archivo ipro.pep.xml
- En las opciones de ASAPRatio, cambiar residuos marcados de K a R.
- Ajustar la relacion m/z para incluir picos mayores a 0.05
- Ejecutar con el botón Run XInteract

- Acceder a la interfaz de ProteinProphet.
- Cargar el archivo ipro.pep.xml
- Opcionalmente cargar archivo de resultados de iProphet y/o archivo de expresión de péptidos a partir de los resultados de ASAPRatio.
- Click en el botón Run ProteinProphet para comenzar el análisis.

## Recursos

Seattle Proteome Center- Proteomic Tools

<http://tools.proteomecenter.org/software.php>

Deutsch, E.W., Mendoza, L., Shteynberg, D., Farrah, T., Lam, H., Tasman, N., Sun, Z., Nilsson, E., Pratt, B., Prazen, B., Eng, J.K., Martin, D.B., Nesvizhskii, A.I. and Aebersold, R. (2010), A guided tour of the TransProteomic Pipeline.

Proteomics, 10: 1150-1159. doi:10.1002/pmic.200900375

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/pmic.200900375>

Robinson MD, McCarthy DJ, Smyth GK (2010). edgeR: a Bioconductor package for differential expression analysis of digital gene expression data. Bioinformatics, 26(1), 139-140.

doi: 10.1093/bioinforma-

tics/btp616.<https://academic.oup.com/bioinformatics/article/26/1/139/>

Deutsch, E.W., Mendoza, L., Shteynberg, D., Slagel, J., Sun, Z. and Moritz, R.L. (2015), TransProteomic Pipeline, a standardized data processing pipeline for largescale reproducible proteomics informatics. Prot. Clin. Appl., 9: 745-754. doi:10.1002/prca.201400164

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/prca.201400164>

Keller A., Shteynberg D. (2011) Software Pipeline and Data Analysis for MS/MS Proteomics: The Trans-Proteomic Pipeline. In: Wu C., Chen C. (eds) Bioinformatics for Comparative Proteomics. Methods in Molecular Biology (Methods and Protocols), vol 694. Humana Press

---

José Manuel S, <http://github.com/JOMS/>