要求：将已存在的Vimms项目变成web app（Django），用户可以输入数据，然后运行它以观察从不同数据采集参数获得的输出。也就是后台用vimms跑出来mzML文件，用户得到文件即可，不用展示页面了。

功能：用户上传 .zip文件，格式是mzML

（从mzML创建色谱图和片段文件；从现有的mzML文件创建数据。提取目标区域ROI，生成一组随机化学品（（见文件-demo1-data）扫描后选择控制器，然后将模拟结果编为）新的simulated mzML文件

设计: 风格简约，白色深灰。不需要特效 简单风格。

标题ViMMs web app

主要五个页面，一个主页面(如图)，主页面就是有导航栏的主页。剩下四个页面副标题是

Simple MS1 / 文件夹-example-01.vimms- /02. MS1 Simulations.ipynb

vimms-controller-fullscan.py SimpleMs1Controller

DIA/ 文件夹-demo-02.methods-03 DIA vimms-controller-dia.py

multiple sample页面中可以上传多个文件（唯一）/ 文件夹- example-01.vimms- 03. Multiple Samples Example.ipynb

vimms-controller-fullscan.py SimpleMs1Controller

TOP-N的页面在上传文件的旁边可以选择两种方法。

1.Top-N （文件夹-example-01.vimms-topN,文件夹-demo-02.methods-02Top-N）

2. Varying N in Top-N （文件夹-example-01.vimms-Varying N in Top-N

vimms-controller-TopN.py TopNController

demo-01 data里有例子；

首先就是上传 格式文件，

1.从mzML创建色谱图和片段文件

from vimms.DataGenerator import get\_data\_source, get\_spectral\_feature\_database

from vimms.Common import \*

在2.从mzML文件创建数据，加载现有的色谱图和碎片文件，

from vimms.Common import \*

from vimms.FeatureExtraction import extract\_roi；也就是提取roi

3.创建化学对象，from vimms.DataGenerator import extract\_hmdb\_metabolite

from vimms.Common import \*

from vimms.Chemicals import ChemicalCreator。这里hmdb相当于一个database

到这里都是一样的，后面开始就是调用不同方法了

每个页面有title，简单描述。可以上传文件，运行，得到输出。下载新生成的mzML文件。每个方法采用不同的控制器（controller中）

虚拟代谢组学质谱仪（ViMMS），这是一种用于代谢组学的模块化LC-MS / MS仿真器，可对计算机中的MS2采集过程进行实时扫描级控制。 ViMMS通过创建一组化学对象来工作，每个化学对象都有自己的色谱图，RT和强度，碎裂谱以及生成特定加合物的倾向。可以从已知代谢物的列表（例从人类代谢组数据库HMDB [13]）或实验.mzML文件中提取的色谱峰中创建。提供了执行不同碎片策略的多种控制器，包括标准的Top-N策略以及仅MS1的仿真，因为它们也构成LC-MS / MS实验的一部分。使用适当的控制器，用户可以对不同的策略进行基准测试和测试，并以mzML格式获得仿真结果（还可以保存整个仿真器状态，以供日后检查）。

ViMMS的工作原理是首先创建代表样品中可能代谢物的化学对象（第2.2.2节）。这些对象包含信息，这些信息定义了当通过虚拟质谱仪（图1中的黄色框）扫描时每种化学物质的显示方式。为了获得填充化学物的信息，我们从实验数据中创建了一个光谱特征数据库，我们可以从中进行采样（第2.2.3节）。还从实验文件中提取了表示可能会形成色谱峰的质量痕迹组的目标区域（ROI），并将其分配给化学物质（第2.2.4节）。与其他模拟器不同，例如[5–9]，化学对象也可以与片段光谱相关联，这些片段本身可以从光谱数据库中提取或使用计算机碎片预测方法生成（第2.2.5节）。在ViMMS中进行计算机扫描模拟（图1中的黄色框）的过程如下。虚拟质谱仪将化学对象列表作为输入，并在适当的RT处生成MS1和MS2扫描（第2.2.6节）所提出的框架被设计为完全模块化的，从而可以测试各种情况和不同的碎片策略。最后，使用psims库[16]可以将模拟结果编写为mzML文件，以便在其他工具中进行进一步分析。

图片包含 游戏机

描述已自动生成

ViMMS的整体示意图。

（A）合成样品工作流程：ViMMS中的化学对象可以通过从光谱特征数据库中采样化合物配方，mz，RT和强度值来创建 （B）现有的样品工作流程：或者，可以通过从单个mzML文件中提取目标区域并将其转换为化学对象来创建化学对象。 （C）黄框：在计算机模拟扫描期间，在虚拟质谱仪中处理化学对象。 控制器根据在控制器中实现的碎片化策略在质谱仪上执行参数更新。 模拟结果可以写为mzML文件。

我认为重要的代码部分

Common

Environment

MassSpec 光谱扫描得到的峰值对象、存储scan信息，存储用于指示质谱图如 何生成扫描的参数

SpectralUtils 数据提取方法，Extract ROI from an mzML file and turn them into UnknownChemical objects

FeatureExtraction 提取file\_names中列出的所有mzML文件的ROI，并将其转换为化学对象

Chemical 应该不需要class knownChemical方法

Roi 与chemical common chromatograms有关，

MzmlWriter 模拟结果可以写出为mzML文件 。

DataGenerator

TopNExperiment 运行topN策略实验的

Chromatogram mzML文件创建色谱图

BOMAS 没搞清楚 （PeakingPicking）

Controller – base from vimms.Common import INITIAL\_SCAN\_ID

topN Top-N DDA控制器 TOP-N

fullscan 也就是MS1扫描 Single Simple（MS1）

data-independent acquisition数据独立获取 (DIA)

misc multiple samples 的full-scan MS1扫描 multiple sample

roi Regions of interest (ROIs) 不用的

tree 应该也不用

关于测试的代码看看test里的