## Лабораторная работа 4

Работа выполнялась на ПК 16Gb RAM, Apple M2 Pro, с предустановленной MacOS Sonoma 14.4.1.

Цель работы: знакомство с распознаванием пептидов по из масспектральному отпечатку при помощи программы Crux.

- 1. Бинарные файлы Crux (версия OS X) были загружены с официального сайта <a href="http://crux.ms">http://crux.ms</a>, версия 4.2.
- 2. Необходимые для распознавания данные (непосредственно файл результатов масс-спектрометрии и небольшая база данных белков) также были взяты с официального сайта и помещены в директорию data.
- 3. Индексирование входных данных было произведено командой

crux tide-index small-yeast.fasta yeast-index

- 4. Ожидалось, что в результате выполнения будут получены директории crux-output и yeast-index. Однако содержимое директории crux-output не совпало с указанным на сайте:
  - 1) tide-index.decoy.fasta множество найденных белков из входного множества
  - 2) tide-search.params.txt запись параметров, использованных при поиске
  - 3) tide-search.log.txt файл логирования

При выполнении команды tide-index не был создан файл tide-index.decoy.fasta.

5. Поиск и ранжирование пептидов, чьи ожидаемые массы близки к полученным в ходе масс-спектрометрии, были произведены командой

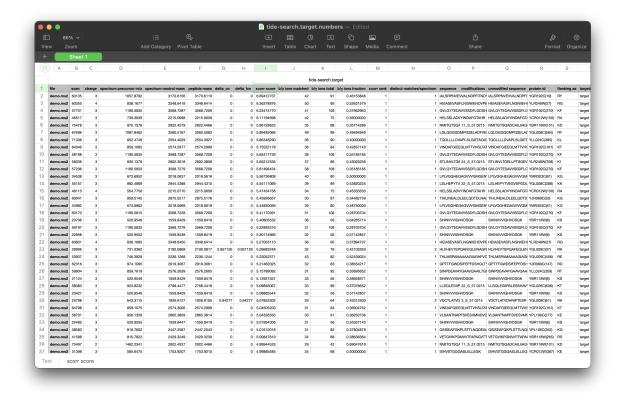
crux tide-search demo.ms2 yeast-index

6. В результате были получены файлы

Лабораторная работа 4

```
maria@Marias-MacBook-Pro lab4 % ls -l crux-output
total 2816
                              835 Apr 25 08:43 tide-index.log.txt
-rw-r--r--
           1 maria staff
                            89064 Apr 25 08:43 tide-index.params.txt
-rw-r--r--
           1 maria
                    staff
           1 maria staff 611328 Apr 25 08:49 tide-search.decoy.txt
                             1397 Apr 25 08:49 tide-search.log.txt
           1 maria
                    staff
-rw-r--r--
                             89064 Apr 25 08:49 tide-search.params.txt
           1 maria
                    staff
           1 maria staff 540547 Apr 25 08:49 tide-search.target.txt
```

7. Отсортировав файл tide-search.target.txt по убыванию XCorr, получили

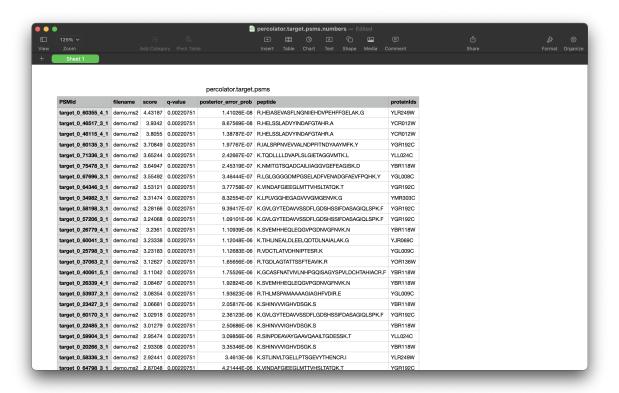


8. Пост-процессинг (поиск лучших результатов для каждого масс-спектра и фильтрация от шумов) был произведён командой

crux percolator --test-fdr 0.1 crux-output/tide-search.target

9. Отсортировав по убыванию score таблицу совпадений пептида с массспектрами, получили

Лабораторная работа 4 2



Лабораторная работа 4 3