

## deltaProtein

Die Software deltaMasses von Detectorvision AG wird verwendet um Protein-Messdaten von Massenspektrometern auszuwerten. Dabei gelingt es deltaMasses die gemessenen Protein-Spektren so zu analysieren, dass die verschiedenen Varianten eines Protein-Typs gruppiert werden. Die Gruppen von Protein-Spektren welche alle sehr ähnlich sind, aber auch Modifikationen enthalten, werden peptideNets genannt. Dieser völlig neue Ansatz Massenspektrometrie-Daten als peptideNet zu analysieren, erlaubt die vernetzte Miteinbeziehung aller zur Verfügung stehender Identifikations-Daten. Da Protein Identifikations-Software oftmals nur die Standardvariante eines Proteins erkennt, bringt die Vernetzung ähnlicher Spektren die ungefähre Gestalt benachbarter Spektren und damit modifizierter Proteine zu Tage. Der Industriepartner ist mit deltaMasses sehr zufrieden, jedoch fehlt die Möglichkeit die Resultate von deltaMasses zu visualisieren und durch peptideNets zu analysieren.

In dieser Diplomarbeit wurde deshalb eine Visualisierungs-Software für die Daten von deltaMasses entwickelt. An die Namensgebung von deltaMasses angelehnt, wird die konzipierte Visualisierungs-Lösung deltaProtein genannt. Kernaufgabe ist es, die Vernetzung der Daten zu visualisieren. Dabei wurden drei Ansichten entworfen um die peptideNets darzustellen und drei weitere Ansichten, um die ausgewählten Details einzublenden. Die peptideNets verschiedener Experimente können nach bekannten wie unbekanntem Protein-Modifikationen gefiltert werden.

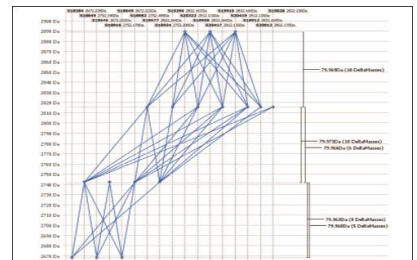
Die drei entwickelten Darstellungen von peptideNets erlauben ein unkompliziertes und direktes Browsing dieser relativ komplex verknüpften Informationen. Nebst einer Feder-Modell-Ansicht und einer radialen Baum-Ansicht, ist das so genannte NetSpectra Diagramm entworfen worden. Dieses NetSpectra Diagramm erlaubt auch grosse peptideNets übersichtlich darzustellen und zeigt auf einfache Weise auch bislang unbekannte Modifikationen in deren Kontext.

Durch die Kombination von deltaMasses und deltaProtein können die bisher unüberschaubaren Datenmengen von neuen, präzisen und schnellen Massenspektrometern, um einiges effizienter und effektiver analysiert werden.

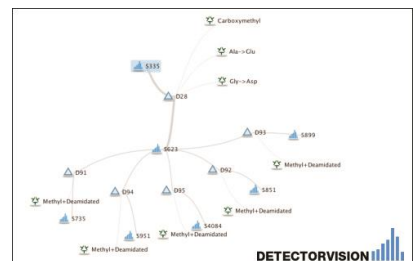


Diplomand  
Martin Schwaller

Dozent  
Andreas Meier



NetSpectra Diagram zeigt dreifach-phosphorylierte Peptide.



PeptideNet visualisiert durch deltaProtein.