

Abstract

Proteomics is the study about the Proteome, the collectivity of all proteins. In recent years proteomics became one of the hottest areas in research. Driven by advances in technology in recent years, new and complex methods and protocols emerged. However, published experiments were nearly not or very hard reproducible. Therefore there is a urgent need for a standardised description.

The Institute for Genomics and Bioinformatics developed the Mass Spectrometry Analysis System (MASPECTRAS). MASPECTRAS is a web-based software platform for the management and analysis of proteomic LC-MS/MS data, which adopted and extended the relational database scheme of the Proteome Experimental Data Repository (PEDRo). It fulfils the MIAPE (Minimum Information About a Proteomic Experiment) standard of the Proteomics Standards Initiative (PSI), which is part of the Human Proteome Organisation (HUPO). To provide a complete description of the sample pre-processing, the existing application has been extended and adopted to the newest guidelines of MIAPE. The developed sample pre-processing part of system features an intuitive and flexible module for the administration of the data via a tree-structure. The flexible design permits splitting of probes as well as the arbitrary assembly of sample pre-processing steps. The sharing and dissemination of the data is easy due to the integrated features from the user management system of the institute and the export module. The developed web-application with database backend is based on Java, Java 2 Enterprise Beans, the struts technology, and an AndroMDA code generator

The developed extension of MASPECTRAS represents a useful tool which guarantees the integrity of LC-MS/MS sample pre-processing data and eases the administration and dissemination of proteomic mass spectrometry experiments.

Kurzfassung

Die Proteomik beschäftigt sich mit der Erforschung des Proteoms, der Gesamtheit der Proteine, und zählt zu den am stärksten vorangetriebenen Forschungsgebieten der vergangenen Jahre. Durch den technologischen Fortschritt entstanden neue immer komplexere experimentelle Methoden und Protokolle. Das führte dazu, dass publizierte Experimente kaum oder nur mit größter Anstrengung reproduzierbar sind. Daher wird der Ruf nach Standards für die sorgfältige Beschreibung von Proteomikexperimenten immer lauter.

Am Institut für Genomik und Bioinformatik wurde das MAss SPECTRo-metry Analysis System (MASPECTRAS) entwickelt. Es handelt sich hierbei um eine web basierte Softwareplattform die zum Management und der Analyse von liquid chromatography tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) gewonnen Daten dient. MASPECTRAS basiert auf dem relationalen Datenbankschema des Proteome Experimental Data Repository (PEDRo) und folgt den Richtlinien (Minimum Information About a Proteomic Experiment MIAPE) der von der Human Proteome Organisation (HUPO) ins Leben gerufenen Proteomics Standards Initiative (PSI). Damit eine lückenlose Beschreibung der Probenaufbereitungsdaten ermöglicht wird, wurde die bestehende Applikation im Rahmen dieser Arbeit erweitert und an die neuesten MIAPE Richtlinien im Bereich Probenaufbereitung angepasst. Die Erweiterung besteht durch ihre benutzerfreundliche und doch flexible Verwaltung der Daten über eine Baumstruktur, die sowohl das Splitten der Proben als auch die sequentielle Eingabe der einzelnen Aufbereitungsschritte in beliebiger Zusammenstellung ermöglicht. Durch die Integration des am Institut entwickelten Usermanagementsystems und die integrierte Exportfunktion erfolgt eine einfache und kontrollierte Verbreitung der Experimente. Die Entwicklung der Web-Applikation mit Datenbank Backend erfolgte mit Java, Java 2 Enterprise Beans, Struts und einen AndroMDA Codegenerator.

Die entwickelte Applikationserweiterung von MASPECTRAS stellt ein nützliches Hilfsmittel dar, welches die Konsistenz der LC-MS/MS Probenaufbereitungsdaten garantiert, und die Verwaltung und Verbreitung vereinfacht.