

Herramientas Bioinformáticas en el Laboratorio de Proteómica CSIC/UAB

Óscar Gallardo, Marina Gay, Montserrat Carrascal, Joaquín Abián

Laboratorio de Proteómica CSIC/UAB

ogallardo@proteored.org

Uno de los problemas aún sin resolver en proteómica es el análisis de los datos obtenidos, muchas veces almacenados en formatos propietarios, y/o con requisitos analíticos no estándares. Esto suele implicar la conversión de los datos de un formato a otro; la realización de cálculos específicos no implementados en los programas comerciales; el uso de diferentes buscadores, algunos de ellos con interfaces en línea de comandos poco amigables; la realización de tareas analíticas repetitivas no automatizadas; la integración de datos procedentes de diversas fuentes;....

En el LP-CSIC/UAB hemos desarrollado diversas aplicaciones bioinformáticas que permiten solventar algunos de los problemas más comunes que hemos encontrado en el análisis de datos proteómicos y fosfoproteómicos.

Aplicaciones como EasierMGF, Integrator y KimBlast son usadas diariamente en nuestro laboratorio para el análisis general de nuestros datos proteómicos. EasierMGF convierte los espectros contenidos en archivos RAW (formato propietario de Thermo Fisher Scientific) en archivos MGF (Mascot Generic Format), lo que posibilita trabajar con una gran variedad de herramientas que no aceptan el formato RAW pero sí el mucho más extendido MGF. La aplicación Integrator facilita y mejora la fiabilidad de la identificación de péptidos y proteínas al integrar los resultados de búsqueda obtenidos, a partir del mismo fichero MGF, utilizando 3 buscadores proteómicos diferentes (Sequest, OMSSA y Phenyx). KimBlast es una potente aplicación gráfica que permite tanto formatear e indexar bases de datos FASTA, como realizar búsquedas locales mediante Blast contra estas bases de datos; resultando de gran ayuda para el análisis semi-manual de los resultados obtenidos mediante buscadores *de novo* o en base de datos.

Todos estos programas son accesibles públicamente tanto a través de nuestra web (<http://proteomica.uab.cat>) como del repositorio de *software* alojado en GoogleCode (<http://lp-csic-uab.googlecode.com>), lo cual permite que cualquier investigador pueda utilizarlos libremente y además colaborar en su desarrollo.