

1 NAZWA

diffprot - wyszukiwanie białek różnicowych

2 SKŁADNIA

```
diffprot -1 {filename} -2 {filename} -o filename options...
diffprot -itraq {filename} {channel} -2 {channel} options...
diffprot -itraq -1 {filename/channel} -2 {filename/channel} options...
```

3 OPIS

Program Diffprot umożliwia analizę statystyczną danych ilościowych z eksperymentów proteomicznych prowadzonych bez znakowania izotopowego lub ze znakowaniem metodą iTRAQ. Narzędzie jest szczególnie dobrze przystosowane do analizy danych pochodzących z niewielkiej liczby próbek i wykazuje się dużą odpornością na błędy mogące wynikać z nieprawidłowej identyfikacją peptydów.

4 OPCJE

-help, -?

Wyświetla ekran pomocy i kończy działanie.

-1, -2 {filename}|{channel}|{filename/channel}

Zbiory list z programu Msparky lub kanały iTRAQ do porównania.

-itraq, -i {filename}

Pliki .dat lub .itraq z danymi z eksperymentu ze znakowaniem iTRAQ. Jeżeli nie zostanie podany żaden argument, przypisanie kanałów do grup można określić używając składni *plik/kanał* w opcjach -1 i -2.

-score, -s *n*

Próg Mascot score dla plików .dat (domyślnie: 42)

-norm, -n *method*

Metoda normalizacji. Dostępne metody:

none

lowess

median

Domyślnie **median** dla iTRAQ, **lowess** dla danych bez znakowania.

-max-*rand*, -B *n*

Maksymalna liczba generowanych losowych zbiorów peptydów. Domyślnie: 10^6

-output, -o *file*

Nazwa pliku do którego mają być zapisane wyniki.

-min-pep, -p *n*

Minimalna liczba peptydów przy której białko jest uwzględniane w analizie. Domyślnie: 2

-ref *name*

Próbka odniesienia przy normalizacji. Jeśli nie zostanie podana, jako poziom odniesienia zostanie użyta mediana intensywności ze wszystkich próbek.

-cluster-coverage *p*

Włącza klastrowanie białek. Białka o co najmniej *p* procentach wspólnych peptydów zostaną zgrupowane i będą traktowane jak jedno białko. Domyślnie: wyłączone.

-cluster, -c *n*

Włącza klastrowanie białek. Zgrupowane zostaną białka, które mają co najmniej *n* peptydów, które nie są wspólne. Domyślnie: wyłączone.

-template *name*

Szablon używany do formatowania wyników. Można tu podać nazwę pliku z szablonem lub nazwę jednego z wbudowanych szablonów. Domyślnie: **long** jeżeli wyniki są zapisywane do pliku .txt, **html** w pozostałych przypadkach.

Dostępne wbudowane szablony:

html

long

short

csv

allpep

-new-stat

Opcja ignorowana w celu zachowania kompatybilności ze starszymi wersjami.

-scatter, -pca, -jet

Tworzy scatterplot, wykres PCA lub jetplot. Format jest określany automatycznie na podstawie rozszerzenia pliku wynikowego.

-histogram *n*

Tworzy histogram log-ratio peptydów o *n* przedziałach. (domyślnie: 30)

-width *x*, -height *x*

Rozmiar wykresu, w pikselach dla grafiki rastrowej, w calach dla plików ps i pdf. Domyślnie: 1024x768 lub 11"x8"

-unique

Wyłącza z analizy peptydy, które nie są jednoznacznie przypisane do klastra białek.

-exclude *protein1 protein2 ...*

-include *protein1 protein2 ...*

-exclude @*file*

-include @*file*

Ignoruje podane białka lub analizuje tylko podane białka. Składnia @*file* umożliwia wczytanie listy białek z pliku tekstowego.

-desc *file*

Wczytuje opisy białek z pliku. Może to być plik .dat z Mascota albo lista białek wyeksportowana z programu MascotScan.

-new-pca

Dodaje klikalny wykres PCA do raportu html.

-min-value *n*, -max-value *n*

Minimalna i maksymalna wartość intensywności. Wartości spoza tego zakresu zostaną zamienione na **NA**.