

# MassChroQ - Mass Chromatogram Quantification

Logiciel de quantification par spectrométrie de masse

Edlira Nano  
Plateforme d'Analyse Protéomique de Paris Sud-Ouest



Rencontres bioinformaticiens et statisticiens de l'INRA  
24 Mars 2011

# Plan

- 1 Problématique
  - Contexte
  - Besoins
  - Pourquoi développer MassChroQ ?
- 2 MassChroQ version 1.0
  - Historique
  - Fonctionnement de MassChroQ
  - Peptides et protéines identifiés
  - Détection et quantification
  - Groupes et alignement
  - masschroqML
- 3 Applications et développement
  - Applications
  - Développement
  - Pour conclure

## En protéomique :

- Besoin d'identifier et de quantifier les protéines et les peptides contenus dans les échantillons.
- Pour ceci on utilise la *spectrométrie de masse* (MS) : technique physique d'analyse permettant de mesurer le rapport masse sur charge des molécules d'un composé.
- Mais aussi la *chromatographie liquide* (LC) : technique chimique d'analyse permettant de séparer les molécules d'un composé.
- Ces deux techniques ont une utilité à la fois qualitative (identification de molécules) et quantitative (intensité de présence).
- L'utilisation de la MS en couple avec une phase préalable de LC (LC-MS) permet d'identifier et de quantifier finement les peptides et les protéines d'un composé.

## En protéomique :

- Besoin d'identifier et de quantifier les protéines et les peptides contenus dans les échantillons.
- Pour ceci on utilise la *spectrométrie de masse* (MS) : technique physique d'analyse permettant de mesurer le rapport masse sur charge des molécules d'un composé.
- Mais aussi la *chromatographie liquide* (LC) : technique chimique d'analyse permettant de séparer les molécules d'un composé.
- Ces deux techniques ont une utilité à la fois qualitative (identification de molécules) et quantitative (intensité de présence).
- L'utilisation de la MS en couple avec une phase préalable de LC (LC-MS) permet d'identifier et de quantifier finement les peptides et les protéines d'un composé.

## En protéomique :

- Besoin d'identifier et de quantifier les protéines et les peptides contenus dans les échantillons.
- Pour ceci on utilise la *spectrométrie de masse* (MS) : technique physique d'analyse permettant de mesurer le rapport masse sur charge des molécules d'un composé.
- Mais aussi la *chromatographie liquide* (LC) : technique chimique d'analyse permettant de séparer les molécules d'un composé.
- Ces deux techniques ont une utilité à la fois qualitative (identification de molécules) et quantitative (intensité de présence).
- L'utilisation de la MS en couple avec une phase préalable de LC (LC-MS) permet d'identifier et de quantifier finement les peptides et les protéines d'un composé.

## En protéomique :

- Besoin d'identifier et de quantifier les protéines et les peptides contenus dans les échantillons.
- Pour ceci on utilise la *spectrométrie de masse* (MS) : technique physique d'analyse permettant de mesurer le rapport masse sur charge des molécules d'un composé.
- Mais aussi la *chromatographie liquide* (LC) : technique chimique d'analyse permettant de séparer les molécules d'un composé.
- Ces deux techniques ont une utilité à la fois qualitative (identification de molécules) et quantitative (intensité de présence).
- L'utilisation de la MS en couple avec une phase préalable de LC (LC-MS) permet d'identifier et de quantifier finement les peptides et les protéines d'un composé.

## En protéomique :

- Besoin d'identifier et de quantifier les protéines et les peptides contenus dans les échantillons.
- Pour ceci on utilise la *spectrométrie de masse* (MS) : technique physique d'analyse permettant de mesurer le rapport masse sur charge des molécules d'un composé.
- Mais aussi la *chromatographie liquide* (LC) : technique chimique d'analyse permettant de séparer les molécules d'un composé.
- Ces deux techniques ont une utilité à la fois qualitative (identification de molécules) et quantitative (intensité de présence).
- L'utilisation de la MS en couple avec une phase préalable de LC (LC-MS) permet d'identifier et de quantifier finement les peptides et les protéines d'un composé.

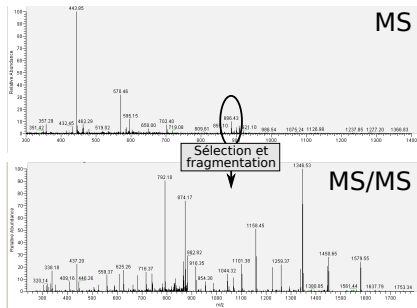
# LC-MS/MS

- MS : séparation des peptides en fonction de leur rapport masse/charge  $\Rightarrow$  **spectres de masse** (intensité en fonction de masse/charge).
- MS/MS : sélection de peptides au cours de la MS et fragmentation  $\Rightarrow$  permet leur identification.
- LC : séparation des peptides au cours du temps  $\Rightarrow$  chromatogrammes (intensité en fonction du temps).
- LC-MS/MS  $\Rightarrow$  spectres MS plus pour chaque peptide sélectionné en MS/MS des chromatogrammes.



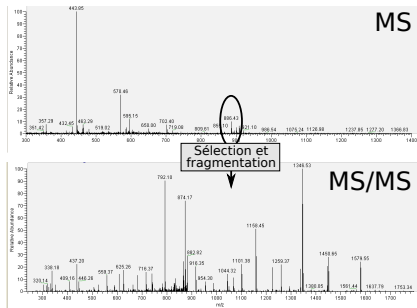
# LC-MS/MS

- MS : séparation des peptides en fonction de leur rapport masse/charge  $\Rightarrow$  **spectres de masse** (intensité en fonction de masse/charge).
- MS/MS : sélection de peptides au cours de la MS et fragmentation  $\Rightarrow$  permet leur identification.
- LC : séparation des peptides au cours du temps  $\Rightarrow$  chromatogrammes (intensité en fonction du temps).
- LC-MS/MS  $\Rightarrow$  spectres MS plus pour chaque peptide sélectionné en MS/MS des chromatogrammes.



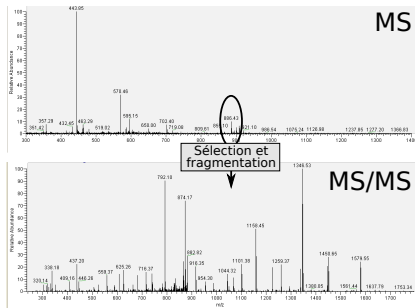
# LC-MS/MS

- MS : séparation des peptides en fonction de leur rapport masse/charge  $\Rightarrow$  **spectres de masse** (intensité en fonction de masse/charge).
- MS/MS : sélection de peptides au cours de la MS et fragmentation  $\Rightarrow$  permet leur identification.
- LC : séparation des peptides au cours du temps  $\Rightarrow$  chromatogrammes (intensité en fonction du temps).
- LC-MS/MS  $\Rightarrow$  spectres MS plus pour chaque peptide sélectionné en MS/MS des chromatogrammes.



# LC-MS/MS

- MS : séparation des peptides en fonction de leur rapport masse/charge  $\Rightarrow$  **spectres de masse** (intensité en fonction de masse/charge).
- MS/MS : sélection de peptides au cours de la MS et fragmentation  $\Rightarrow$  permet leur identification.
- LC : séparation des peptides au cours du temps  $\Rightarrow$  chromatogrammes (intensité en fonction du temps).
- LC-MS/MS  $\Rightarrow$  spectres MS plus pour chaque peptide sélectionné en MS/MS des chromatogrammes.



# Problématique

## But

Associer à nos peptides identifiés une valeur quantitative déterminée en MS.

## Contraintes

- Développement continu des méthodes de quantification par spectrométrie de masse.
- Augmentation significative de la quantité et de la complexité des données produites.
- Indispensable de disposer d'outils informatiques pour analyser automatiquement les données afin d'en permettre l'exploitation.

# Problématique

## But

Associer à nos peptides identifiés une valeur quantitative déterminée en MS.

## Contraintes

- Développement continu des méthodes de quantification par spectrométrie de masse.
- Augmentation significative de la quantité et de la complexité des données produites.
- Indispensable de disposer d'outils informatiques pour analyser automatiquement les données afin d'en permettre l'exploitation.

## Autres logiciels de quantification

De nombreux logiciels sont disponibles, mais présentent :

### des lacunes biologiques :

- Spécifiques au matériel utilisé : spectromètres de faible résolution (LR) ou de haute résolution (HR).
- Spécifiques au type de données quantifiées : avec ou sans marquage isotopique.
- Peu/pas de prise en compte du dispositif expérimental (par exemple pré-fractionnements).

### des lacunes informatiques :

- Peu/pas paramétrables.
- Dépendants de la plateforme informatique : du système d'exploitation, de l'interface graphique ou de formats de données fermés non transparents.
- Peu/pas intégrables dans des pipelines.

## Autres logiciels de quantification

De nombreux logiciels sont disponibles, mais présentent :

### des lacunes biologiques :

- Spécifiques au matériel utilisé : spectromètres de faible résolution (LR) ou de haute résolution (HR).
- Spécifiques au type de données quantifiées : avec ou sans marquage isotopique.
- Peu/pas de prise en compte du dispositif expérimental (par exemple pré-fractionnements).

### des lacunes informatiques :

- Peu/pas paramétrables.
- Dépendants de la plateforme informatique : du système d'exploitation, de l'interface graphique ou de formats de données fermés non transparents.
- Peu/pas intégrables dans des pipelines.

## Autres logiciels de quantification

De nombreux logiciels sont disponibles, mais présentent :

### des lacunes biologiques :

- Spécifiques au matériel utilisé : spectromètres de faible résolution (LR) ou de haute résolution (HR).
- Spécifiques au type de données quantifiées : avec ou sans marquage isotopique.
- Peu/pas de prise en compte du dispositif expérimental (par exemple pré-fractionnements).

### des lacunes informatiques :

- Peu/pas paramétrables.
- Dépendants de la plateforme informatique : du système d'exploitation, de l'interface graphique ou de formats de données fermés non transparents.
- Peu/pas intégrables dans des pipelines.



## Autres logiciels de quantification

De nombreux logiciels sont disponibles, mais présentent :

### des lacunes biologiques :

- Spécifiques au matériel utilisé : spectromètres de faible résolution (LR) ou de haute résolution (HR).
- Spécifiques au type de données quantifiées : avec ou sans marquage isotopique.
- Peu/pas de prise en compte du dispositif expérimental (par exemple pré-fractionnements).

### des lacunes informatiques :

- Peu/pas paramétrables.
- Dépendants de la plateforme informatique : du système d'exploitation, de l'interface graphique ou de formats de données fermés non transparents.
- Peu/pas intégrables dans des pipelines.

## Autres logiciels de quantification

De nombreux logiciels sont disponibles, mais présentent :

### des lacunes biologiques :

- Spécifiques au matériel utilisé : spectromètres de faible résolution (LR) ou de haute résolution (HR).
- Spécifiques au type de données quantifiées : avec ou sans marquage isotopique.
- Peu/pas de prise en compte du dispositif expérimental (par exemple pré-fractionnements).

### des lacunes informatiques :

- Peu/pas paramétrables.
- Dépendants de la plateforme informatique : du système d'exploitation, de l'interface graphique ou de formats de données fermés non transparents.
- Peu/pas intégrables dans des pipelines.

## Autres logiciels de quantification

De nombreux logiciels sont disponibles, mais présentent :

### des lacunes biologiques :

- Spécifiques au matériel utilisé : spectromètres de faible résolution (LR) ou de haute résolution (HR).
- Spécifiques au type de données quantifiées : avec ou sans marquage isotopique.
- Peu/pas de prise en compte du dispositif expérimental (par exemple pré-fractionnements).

### des lacunes informatiques :

- Peu/pas paramétrables.
- Dépendants de la plateforme informatique : du système d'exploitation, de l'interface graphique ou de formats de données fermés non transparents.
- Peu/pas intégrables dans des pipelines.

## Notre objectif

- Quantifier des données HR aussi bien que LR.
- Quantifier des données sans marquage aussi bien qu'avec marquage isotopique.
- Gérer de grandes quantités de données rapidement et automatiquement.
- Être aussi indépendants que possible des dispositifs expérimentaux tout en prenant en compte leurs spécificités.
- Paramétrabilité et traçabilité.

## Notre objectif

- Quantifier des données HR aussi bien que LR.
- Quantifier des données sans marquage aussi bien qu'avec marquage isotopique.
- Gérer de grandes quantités de données rapidement et automatiquement.
- Être aussi indépendants que possible des dispositifs expérimentaux tout en prenant en compte leurs spécificités.
- Paramétrabilité et traçabilité.

## Notre objectif

- Quantifier des données HR aussi bien que LR.
- Quantifier des données sans marquage aussi bien qu'avec marquage isotopique.
- Gérer de grandes quantités de données rapidement et automatiquement.
- Être aussi indépendants que possible des dispositifs expérimentaux tout en prenant en compte leurs spécificités.
- Paramétrabilité et traçabilité.

## Notre objectif

- Quantifier des données HR aussi bien que LR.
- Quantifier des données sans marquage aussi bien qu'avec marquage isotopique.
- Gérer de grandes quantités de données rapidement et automatiquement.
- Être aussi indépendants que possible des dispositifs expérimentaux tout en prenant en compte leurs spécificités.
- Paramétrabilité et traçabilité.

## Notre objectif

- Quantifier des données HR aussi bien que LR.
- Quantifier des données sans marquage aussi bien qu'avec marquage isotopique.
- Gérer de grandes quantités de données rapidement et automatiquement.
- Être aussi indépendants que possible des dispositifs expérimentaux tout en prenant en compte leurs spécificités.
- Paramétrabilité et traçabilité.



## Historique

2006

Premiers tests de quantification sans marquage. Extraction des valeurs quantitatives manuellement.

2007 - 2008

Échantillons plus complexes. Automatisation par des scripts Perl (B. Valot).

2009

Besoin de rapidité et d'ajout de fonctionnalités. Traduction des scripts Perl en C++ : QuantiMsCpp (O. Langella et B.Valot).

2010

QuantiMsCpp devient MassChroQ. Première version de release 1.0 prête. (O. Langella, B. Valot et E.Nano).

## Historique

2006

Premiers tests de quantification sans marquage. Extraction des valeurs quantitatives manuellement.

2007 - 2008

Échantillons plus complexes. Automatisation par des scripts Perl (B. Valot).

2009

Besoin de rapidité et d'ajout de fonctionnalités. Traduction des scripts Perl en C++ : QuantiMsCpp (O. Langella et B.Valot).

2010

QuantiMsCpp devient MassChroQ. Première version de release 1.0 prête. (O. Langella, B. Valot et E.Nano).

## Historique

2006

Premiers tests de quantification sans marquage. Extraction des valeurs quantitatives manuellement.

2007 - 2008

Échantillons plus complexes. Automatisation par des scripts Perl (B. Valot).

2009

Besoin de rapidité et d'ajout de fonctionnalités. Traduction des scripts Perl en C++ : QuantiMsCpp (O. Langella et B.Valot).

2010

QuantiMsCpp devient MassChroQ. Première version de release 1.0 prête. (O. Langella, B. Valot et E.Nano).

## Historique

2006

Premiers tests de quantification sans marquage. Extraction des valeurs quantitatives manuellement.

2007 - 2008

Échantillons plus complexes. Automatisation par des scripts Perl (B. Valot).

2009

Besoin de rapidité et d'ajout de fonctionnalités. Traduction des scripts Perl en C++ : QuantiMsCpp (O. Langella et B.Valot).

2010

QuantiMsCpp devient MassChroQ. Première version de release 1.0 prête. (O. Langella, B. Valot et E.Nano).

## Fonctionnalités de MassChroQ

- Parsing des échantillons LC-MS/MS sous formats ouverts standards : mzXML ou mzML.
- Définition des entités à quantifier : peptides identifiés, isotopes ou liste de masses.
- Alignement des échantillons LC-MS/MS semblables si nécessaire.
- Traitement du signal : filtrage du bruit de fond, du bruit de la ligne de base, élimination de spikes.
- Détection puis quantification des entités définies.
- Export des résultats sous divers formats ouverts (tsv, gnumeric, xml ou xhtmltable) prêts à être exploités statistiquement.

# Identification de peptides/protéines

- Les peptides présents dans les échantillons sont identifiés via des logiciels d'identification (X!Tandem, Mascot, ...).
- Les résultats d'identification sont automatiquement intégrables dans MassChroQ de deux façons :
  - directement en utilisant notre X!Tandem pipeline ;
  - à partir de fichiers tsv/csv (produits par la plupart des logiciels d'identification).

## Identification de peptides/protéines

- Les peptides présents dans les échantillons sont identifiés via des logiciels d'identification (X!Tandem, Mascot, ...).
- Les résultats d'identification sont automatiquement intégrables dans MassChroQ de deux façons :
  - directement en utilisant notre X!Tandem pipeline ;
  - à partir de fichiers tsv/csv (produits par la plupart des logiciels d'identification).

## Identification de peptides/protéines

- Les peptides présents dans les échantillons sont identifiés via des logiciels d'identification (X!Tandem, Mascot, ...).
- Les résultats d'identification sont automatiquement intégrables dans MassChroQ de deux façons :
  - directement en utilisant notre X!Tandem pipeline ;
  - à partir de fichiers tsv/csv (produits par la plupart des logiciels d'identification).



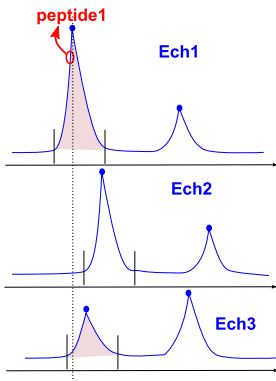
## Identification de peptides/protéines

- Les peptides présents dans les échantillons sont identifiés via des logiciels d'identification (X!Tandem, Mascot, ...).
- Les résultats d'identification sont automatiquement intégrables dans MassChroQ de deux façons :
  - directement en utilisant notre X!Tandem pipeline ;
  - à partir de fichiers tsv/csv (produits par la plupart des logiciels d'identification).

# Détection et quantification des pics sur les XICs

## eXtracted Ion Chromatogram (XIC)

- A partir des données MS, on extrait les intensités des  $m/z$  d'intérêt au cours du temps chromatographique.
- Filtrage des XICs.



- Détection des pics d'intensité.
- Calcul de l'aire sous les pics  $\Rightarrow$  valeur quantitative.
- La LC génère des décalages de temps de rétention : besoin d'alignement des runs LC-MS pour éviter les biais expérimentaux.

## Groupes de runs

L'utilisateur regroupe des runs LC-MS techniquement similaires pour pouvoir les traiter ensemble et de façon spécifique.

Ex : pré-fractionnement SDS PAGE des échantillons

Seuls les runs de la même bande doivent être alignés entre eux.

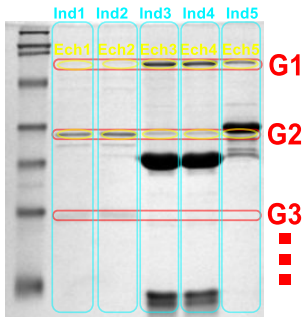
- On aligne ensemble les runs d'un même groupe.
- Accès à l'intensité d'un peptide même s'il n'a pas été identifié dans un run.
- Chaque groupe peut avoir des paramètres d'alignement différents.

## Groupes de runs

L'utilisateur regroupe des runs LC-MS techniquement similaires pour pouvoir les traiter ensemble et de façon spécifique.

### Ex : pré-fractionnement SDS PAGE des échantillons

Seuls les runs de la même bande doivent être alignés entre eux.



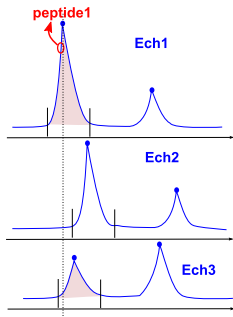
- On aligne ensemble les runs d'un même groupe.
- Accès à l'intensité d'un peptide même s'il n'a pas été identifié dans un run.
- Chaque groupe peut avoir des paramètres d'alignement différents.

## Groupes de runs

L'utilisateur regroupe des runs LC-MS techniquement similaires pour pouvoir les traiter ensemble et de façon spécifique.

### Ex : pré-fractionnement SDS PAGE des échantillons

Seuls les runs de la même bande doivent être alignés entre eux.



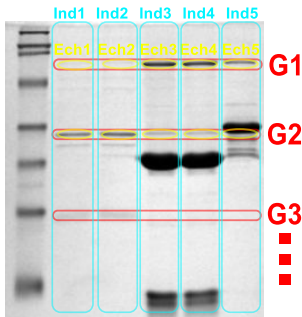
- On aligne ensemble les runs d'un même groupe.
- Accès à l'intensité d'un peptide même s'il n'a pas été identifié dans un run.
- Chaque groupe peut avoir des paramètres d'alignement différents.

## Groupes de runs

L'utilisateur regroupe des runs LC-MS techniquement similaires pour pouvoir les traiter ensemble et de façon spécifique.

### Ex : pré-fractionnement SDS PAGE des échantillons

Seuls les runs de la même bande doivent être alignés entre eux.



- On aligne ensemble les runs d'un même groupe.
- Accès à l'intensité d'un peptide même s'il n'a pas été identifié dans un run.
- Chaque groupe peut avoir des paramètres d'alignement différents.

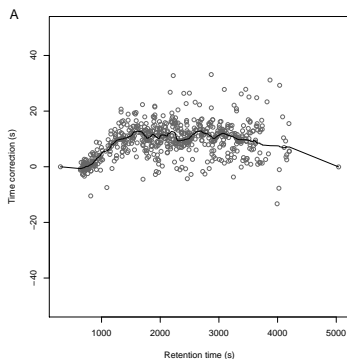
## Deux méthodes d'alignements :

**MS** Méthodes dérivées des analyses de gel 2D ou de **traces chromatographiques**

⇒ intégration du logiciel *open-source* **OBI-Warp**

**MS/MS** Méthodes utilisant les résultats d'identification

⇒ algorithme développé en interne



Exemple d'alignement

# masschroqML

## En entrée

Format XML du fichier d'entrée de MassChroQ. On y définit :

- toutes les instructions d'analyse souhaitées;
- les différents paramètres d'alignement et de détection des pics;
- les formats des résultats et les traces souhaitées.

## En sortie

- Les résultats contiennent une valeur quantitative associée à chaque peptide, dans chaque échantillon.
- Les formats résultats disponibles sont : tsv, gnumeric, et xhtmltable (pour exploitation directe) et masschroqML (pour intégration dans des bases de données telle que **PROTICdb**).



# masschroqML

## En entrée

Format XML du fichier d'entrée de MassChroQ. On y définit :

- toutes les instructions d'analyse souhaitées;
- les différents paramètres d'alignement et de détection des pics;
- les formats des résultats et les traces souhaitées.

## En sortie

- Les résultats contiennent une valeur quantitative associée à chaque peptide, dans chaque échantillon.
- Les formats résultats disponibles sont : tsv, gnumeric, et xhtmltable (pour exploitation directe) et masschroqML (pour intégration dans des bases de données telle que **PROTICdb**).

# Résultats

## Publication soumise

Analyse LC-MS/MS en HR et LR d'un protéome complexe avec injection croissante de protéine BSA (6 répétitions techniques HR et 6 LR). A montré :

- la reproductibilité de la quantification et de la détection (CV inférieurs à 1.4% en LR et à 1.3% en HR),
- des données quantitatives HR et LR très similaires,
- une amélioration significative des résultats quantitatifs apportée par l'alignement.

# Résultats

## Projet HeterosYeast : Mélisande Blein

- Traité :
  - Analyse de 17 souches de levure de *S. Cerevisiae* et *S. Uvarum* : étude protéomique de la fermentation chez les hybrides.
  - Total de 52 échantillons analysés en LC-MS/MS HR.
  - 250 Go de fichiers mzXML traités par MassChroQ.
  - Temps d'analyse MassChroQ : 30 minutes.
  - Peptides quantifiés :  $\simeq$  7000.
- À venir :
  - Analyse sur des hybrides de 12 souches.
  - 450 échantillons en LC-MS/MS HR.

# Résultats

## Projet Dromadaire : Ludovic Bonhomme

- Analyse de 40 injections d'une même lignée de maïs chacune pré-fractionnée en 10 par SCX-IMAC selon 10 régimes hydriques différents pour une étude de la cinétique de phosphorylation des protéines durant un laps de temps de quelques minutes.
- Marquage isotopique par diméthylation.
- Total de 400 échantillons analysés en LC-MS<sup>3</sup> LR.
- 450 Go de fichiers mzXML traités.
- Temps d'analyse MassChroQ :  $\simeq$  48h.
- Peptides phosphorylés quantifiés :  $\simeq$  4000.

# Implémentation

## Modularité

- MassChroQ est écrit en C++ et utilise la bibliothèque Qt
  - gestion fine de la mémoire, modularité et portabilité.
- C'est un logiciel indépendant en ligne de commande et aussi une librairie directement intégrable dans des pipelines protéomiques connues comme la TPP ou la TOPP.
- Conçu pour une intégration immédiate de nouvelles fonctionnalités ou de librairies externes :
  - intégration de la librairie externe d'alignement OBI-Warp et implémentation de l'algorithme interne d'alignement MS/MS.

# Implémentation

## Modularité

- MassChroQ est écrit en C++ et utilise la bibliothèque Qt
  - gestion fine de la mémoire, modularité et portabilité.
- C'est un logiciel indépendant en ligne de commande et aussi une librairie directement intégrable dans des pipelines protéomiques connues comme la TPP ou la TOPP.
- Conçu pour une intégration immédiate de nouvelles fonctionnalités ou de librairies externes :
  - intégration de la librairie externe d'alignement OBI-Warp et implémentation de l'algorithme interne d'alignement MS/MS.

# Implémentation

## Modularité

- MassChroQ est écrit en C++ et utilise la bibliothèque Qt
  - gestion fine de la mémoire, modularité et portabilité.
- C'est un logiciel indépendant en ligne de commande et aussi une librairie directement intégrable dans des pipelines protéomiques connues comme la TPP ou la TOPP.
- Conçu pour une intégration immédiate de nouvelles fonctionnalités ou de librairies externes :
  - intégration de la librairie externe d'alignement OBI-Warp et implémentation de l'algorithme interne d'alignement MS/MS.

# Implémentation

## Modularité

- MassChroQ est écrit en C++ et utilise la bibliothèque Qt
  - gestion fine de la mémoire, modularité et portabilité.
- C'est un logiciel indépendant en ligne de commande et aussi une librairie directement intégrable dans des pipelines protéomiques connues comme la TPP ou la TOPP.
- Conçu pour une intégration immédiate de nouvelles fonctionnalités ou de librairies externes :
  - intégration de la librairie externe d'alignement OBI-Warp et implémentation de l'algorithme interne d'alignement MS/MS.



# Implémentation

## Modularité

- MassChroQ est écrit en C++ et utilise la bibliothèque Qt
  - gestion fine de la mémoire, modularité et portabilité.
- C'est un logiciel indépendant en ligne de commande et aussi une librairie directement intégrable dans des pipelines protéomiques connues comme la TPP ou la TOPP.
- Conçu pour une intégration immédiate de nouvelles fonctionnalités ou de librairies externes :
  - intégration de la librairie externe d'alignement OBI-Warp et implémentation de l'algorithme interne d'alignement MS/MS.

# Implémentation

## Ouverture

- MassChroQ et son code source seront (très prochainement) diffusés sous licence libre GPL version 3.
- Il est disponible pour Windows et Linux.
- Il utilise et produit uniquement des données en formats ouverts standards.

## Transparence

- MassChroQ est entièrement paramétrable via un fichier d'entrée XML.
- Chaque étape de son traitement est entièrement traçable (alignement, XICs, filtrage, détection de pics).
- Une documentation complète, des exemples d'analyses courantes prêts à l'emploi, un dépôt subversion, une gestion de bugs et des forums utilisateur sont disponibles (SourceSup).

# Implémentation

## Ouverture

- MassChroQ et son code source seront (très prochainement) diffusés sous licence libre GPL version 3.
- Il est disponible pour Windows et Linux.
- Il utilise et produit uniquement des données en formats ouverts standards.

## Transparence

- MassChroQ est entièrement paramétrable via un fichier d'entrée XML.
- Chaque étape de son traitement est entièrement traçable (alignement, XICs, filtrage, détection de pics).
- Une documentation complète, des exemples d'analyses courantes prêts à l'emploi, un dépôt subversion, une gestion de bugs et des forums utilisateur sont disponibles (SourceSup).

# Futurs développements en 2011

- Gestion plus fine de la mémoire vive.
- Gestion des analyses SRM.
- Nouvelle version avec interface graphique complète.

## Remerciements

- Olivier Langella : conception et réalisation du logiciel, modularité, ouverture et direction de mes travaux.
- Benoît Valot : création et conception du logiciel, premier utilisateur, premier dénicheur de bugs, éternel exigeant de fonctionnalités.
- L'équipe PAPPISO : Michel Zivy notre directeur et redoutable concepteur d'algorithmes; Mélisande Blein et Ludovic Bonhomme les premiers et si indispensables cobayes de MassChroQ.
- SourceSup : service de gestion de projets du Comité Réseau des Universités, pour l'hébergement du dépôt subversion, du gestionnaire de bugs et des forums de MassChroQ ainsi que pour leur réactivité.

## Liens

### Page principale de MassChroQ

<http://pappso.inra.fr/bioinfo/masschroq/>

### Page du logiciel sur SourceSup

<http://sourcesup.cru.fr/projects/masschroq/>

### Auteurs de MassChroQ

O. Langella : [olivier.langella@moulon.inra.fr](mailto:olivier.langella@moulon.inra.fr)

B. Valot : [benoit.valot@moulon.inra.fr](mailto:benoit.valot@moulon.inra.fr)

E. Nano : [edlira.nano@moulon.inra.fr](mailto:edlira.nano@moulon.inra.fr)

M. Zivy : [michel.zivy@moulon.inra.fr](mailto:michel.zivy@moulon.inra.fr)

Ce document est distribué sous licence Creative Commons  
CC-BY-NC-ND 2.0 France.