

Notities vergadering met klant, 21-2-'06, 15:00 tot 16:15.

- Het GUI-ontwerp opgesteld door Marnix wordt enthousiast ontvangen
- Het concept van workspaces wordt ook goed ontvangen
- Ivm workspaces en opslaan van presets, wordt door Jan opgemerkt dat het handig is om “verder te gaan waar je ophield”
- Op de vraag van of het handig is meerdere MS/MS spectra weer te geven in het venster linksonder, wordt als antwoord gegeven dat dit alleen wenselijk is als het dezelfde piek in het spectrum betreft, in verschillende samples.
- Zoomfuncties zoals voorgesteld door Marnix zijn goed.
- Punten met MS/MS data (dwz, punten aanwezig in de pepXML) in het grote scherm, zowel als in de dwarsdoorsneden, dienen gemarkeerd te worden.
- De views voorgesteld door Roeland worden in eerste instantie als ok ontvangen, maar later wordt opgemerkt dat checkboxes handiger werken, vooral daar er in eerste instantie wordt gewerkt met vergelijkingen van twee samples. Een view-functie zou eventueel pas waarde hebben bij het vergelijken van grotere aantallen samples, en is dus wellicht een functie die we later als extra kunnen toevoegen.
- Geautomatiseerde patroonherkenning is een graag geziene optie. Vooralsnog moeten we in ieder geval ervoor zorgen dat het programma modulair genoeg wordt om zulke functies later toe te voegen.
- Op de vraag welke standaardalgoritmes we kunnen verwachten, is het antwoord dat er alleen voor basale dingen als m/z – berekening uit mzXML kant-en-klare algoritmes bestaan. Wat deze algoritmes zijn en hoe we ze gebruiken is nu nog van later zorg, een belangrijk punt is wel dat analyse-algoritmes door onszelf moeten worden bedacht.
- Het komt naar voren dat herhaling van eenzelfde experiment niet hetzelfde $t, m/z$ diagram oplevert. Er treden niet-lineaire verschuivingen op van het 'plaatje'. Het is dus erg wenselijk dat er een algoritme is die twee samples met elkaar te alignen, of 'warpen', zodat dezelfde pieken uit andere samples elkaar toch overlappen. Pas dan kan de gebruiker kijken naar eventuele verschillen tussen de samples.
- Op waarvan we de ratio moeten berekenen (oppervlakte, inhoud) wordt inhoud als antwoord gegeven. In plaats van een redelijk precieze integratie, zou er ook gedacht kunnen worden aan de minder nauwkeurige methode van optelling en herschaling van grijswaarden in het plaatje.
- Op de vraag wat er moet gebeuren als de gebruiker klikt op een piek waar veel andere pieken zitten, is het antwoord dat we dan de hoogste piek moeten kiezen. Als er meerdere goede matches zijn voor een piek in het pepXML-bestand, altijd de beste score kiezen. Als waarden heel dicht bij elkaar liggen (van best scorende), kan er eventueel gedacht worden aan een waarschuwingsbericht, maar dit is een extraatje.

- Protocollen moeten ook door gebruikers aan te passen zijn
- Annotations zijn vooralsnog overbodig.
- Nogmaals wordt het belang benadrukt dat het interessant is om te weten welke pieken er in een bepaalde sample wel zijn, en welke niet. Deze verschillen kunnen terecht komen in een tabel, welk geexporteerd kunnen worden naar Excel. Het exporteren naar excel lijkt erg wenselijk te zijn. Ook zal het handig zijn de pepXML'en van die pieken apart op te kunnen slaan in een ander pepXML bestand, maar excel heeft de prioriteit volgens mij.
- Modulairiteit moet ver genoeg zijn doorgevoerd om filters makkelijk toe te kunnen voegen (nogmaals benadrukt)
- Het is ook heel handig een optie/algortme te hebben dat detecteert van welke pieken er geen data is in het pepXML bestand.
- Interactie met een FASTA-database is vooralsnog niet nodig. Als extraatje is het wel leuk, de gebruiker kan bv klikken op een knopje "ik wil alles weten van dit eiwit"
- In het pepXML wordt het (uitbreidend) opslaan gevraagd van zowel de inhoud in A, de inhoud in B (van verschillende samples als ik het goed begrepen heb), alsmede de ratio. Dus alledrie de waarden. Bij weergave op het scherm werden ook gemiddeldes en standaarddeviaties genoemd. Ik bedenk net dat gemiddeldes en standaarddeviaties berekenen pas echt interessant worden bij meerdere samples (meer dan 2). Misschien is het goed een soort "batch-mode" in te bouwen die zo snel mogelijk een (groot) aantal samples met elkaar aligned en daarvan gemiddeldes, standaarddeviaties, en ratio's berekent. Iets om de volgende ontmoeting voor te leggen?
- Uitvergroten MS/MS scherm is handig
- Joris merkt het bestaan op van plotXML, maar hier hoeven we niet verder naar te kijken, vooralsnog.
- mzXML gaat binnenkort (paar maanden) van versie 2 over naar 3. Gelieve rekening mee te houden bij het parser-ontwikkelen, voor zover mogelijk.
- Bij overlap van meerdere samples, waar elke sample zijn eigen kleur heeft: bij pieken op de zelfde plek moet de kleur gemengd worden, en niet opeens zwart worden zoals in bv Msight. Bij 4+ samples is dat niet mooi, maar dan zijn kleuren zowieso niet al te nuttig.
- Bij kwantitatieve analyse schijnt uitvoer in tabellen (en vandaaruit naar Excel) weer wenselijk te zijn.
- Een manier om automatisch kleuren toe te kennen is het totale kleurbereik op te delen tussen het aantal samples die getekend moeten worden.
- De zijkant moet een lijn blijven, met markeringen van de punten waarover pepXML data beschikbaar is.