

Feature-based Molecular Networking (FBMN)

Español

Workshop - Sesión 2

FBMN en GNPS y visualización en Cytoscape

Sesión 1 - [ZOOM-Workshop_FBMN_Parte1_SPANISH](#)

Sesión 2 - [ZOOM-Workshop_FBMN_Parte2_SPANISH](#)

La idea del workshop es que los participantes se familiaricen con el workflow FBMN en la plataforma GNPS y visualización en Cytoscape. Para ello se hará uso de datos públicos depositados en el repositorio MassIVE.

Audiencia

Éste taller está dirigido a investigadores trabajando en áreas relacionadas a la química de productos naturales y afines con experiencia en espectrometría de masas e interés en aplicar FBMN en sus proyectos de investigación. Los participantes trabajarán con datos propios o tendrán acceso a datos públicos en formato mzXML/mzML para crear redes moleculares haciendo uso del workflow FBMN en GNPS.

Requisitos

1. Zoom Video Conferencing Software
2. Cuenta en GNPS (<https://gnps.ucsd.edu/ProteoSAFe/static/gnps-splash.jsp>)
3. Instalar Cytoscape (<https://cytoscape.org/>)
4. Archivos en .mgf y .csv obtenidos en la sesión 1 del workshop o los puedes descargar de aquí [[MSV000085444](#)], en caso que no hayas podido participar de la sesión 1.
5. Resultados del análisis de FBMN en GNPS:
<https://gnps.ucsd.edu/ProteoSAFe/status.jsp?task=d5ae0d47d1d04df1b0d5a1fc65cb749e>

Objetivos

1. Familiarizarse con el workflow de Feature-based Molecular Networking
2. Familiarizarse con el workflow de FBMN en GNPS
3. Lanzar análisis de FBMN en GNPS (**MSV000085444**)
4. Importar FBMN en Cytoscape
5. Explorar resultados en Cytoscape

Link de Zoom

<https://ucsd.zoom.us/j/96177087082?pwd=SVINR2lvdkdBdVpwQTVsUkVmbEdEUT09>

Por favor, usa nombre completo al entrar en la sesión

Clave de acceso: FBMN

Agenda

Jueves, Julio 9, 2020, @ 9-11:00 AM (Pacific Time)
[11:00 AM - 1:00 PM (GMT-5); 6:00 - 8:00 PM (GMT+2)]

9:00 AM - 9:30 AM

1. Tutorial paso-a-paso para lanzar análisis de FBMN en GNPS

9:30 AM - 10:00 AM

2. Presentación de FBMN con otras herramientas de pre-procesamiento

10:00 AM - 10:30 AM

3. Tutorial paso-a-paso para explorar resultados en Cytoscape

10:30 AM - 11:00 AM

4. Preguntas y discusión

Equipo

Mauricio Caraballo

Daniel Petras

Mingxun Wang

Presentación usada en el taller [Diapositivas en Inglés]

Puedes acceder a las diapositivas mediante el siguiente link:

https://drive.google.com/file/d/1rGMUGsjAsONyly8Fo6o6vuWUhV_2iqhf/view?usp=sharing

Link a la documentación en GNPS

<https://ccms-ucsd.github.io/GNPSDocumentation/featurebasedmolecularnetworking/>

Literatura recomendada

Classical molecular networking: [Reproducible molecular networking of untargeted mass spectrometry data using GNPS](#)

Feature-based molecular networking: [Feature-based Molecular Networking in the GNPS Analysis Environment](#)

ReDU (metadata): [Repository-scale Co- and Re-analysis of Tandem Mass Spectrometry Data](#)

Metal-binding compounds: [Native Electrospray-based Metabolomics Enables the Detection of Metal-binding Compounds](#)

Etiqueta en Zoom

Todos los participantes tendrán el micrófono en silencio al ingresar al taller. Si te gustaría realizar una pregunta, por favor envía mensaje por el chat a Mauricio, Mabel o a Daniel. Nosotros habilitaremos el micrófono de los participantes que deseen discutir o realizar preguntas. Si crees que el taller está a una velocidad que no te permite tener el mismo ritmo, puedes seleccionar en las opciones de Zoom.