

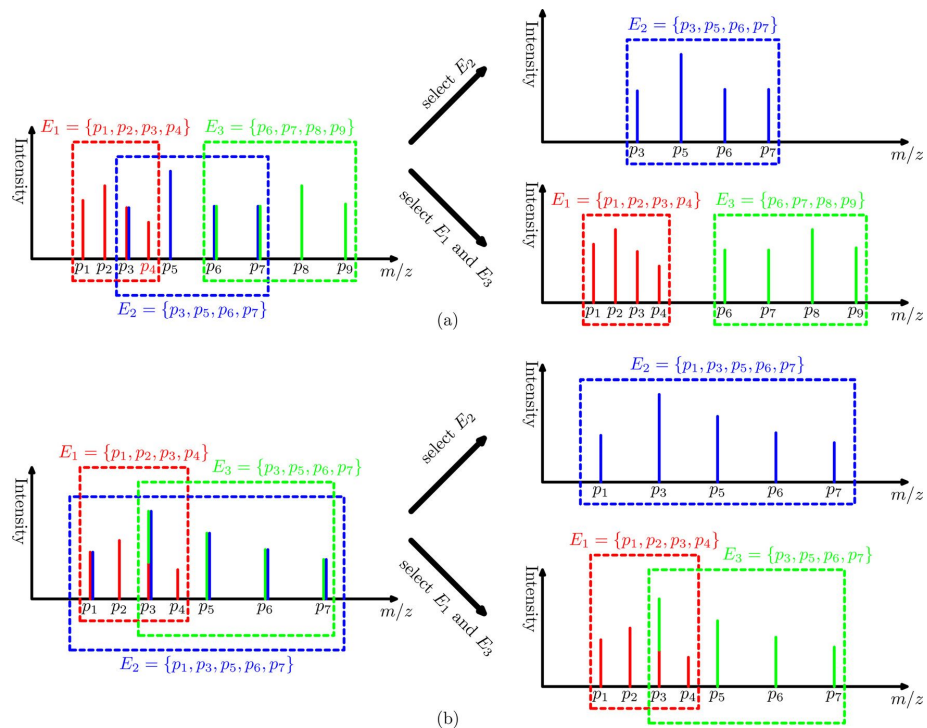
Деконволюция масс-спектров, снятых с высоким разрешением по технологии bottom-up, при помощи программных инструментов, разработанных для случая top-down

Студент: Андрей Гусев

Научный руководитель: Кира Вяткина

Деконволюция в масс-спектрометрии

- Масс-спектрометр находит для каждого фрагмента молекулы отношение массы к заряду.
- Фрагментам соответствуют пики на графике.
- Один и тот же фрагмент в разных экземплярах молекулы может иметь разный изотопный состав.
- Необходимо выделить наборы пиков, соответствующие конкретному фрагменту с разным изотопным составом.



Деконволюция в bottom-up масс-спектрометрии

- При bottom-up масс-спектрометрии молекула предварительно разбивается на фрагменты.
- Более высокие пики соответствуют меньшему числу редких изотопов.
- Применяются инструменты, предназначенные для случая top-down.
- Требуется деконволюция с помощью ПО для top-down.
- Использование top-down для случая bottom-up порождает ошибки.

Задача

Требовалось собрать данные о результатах работы программ для top-down деконволюции MS-Deconv и Thermo Xtract в bottom-up экспериментах и выяснить, в каких случаях происходят ошибки.

Решение

- Для сбора данных была написана программа на Visual C++.
- Программа брала данные из файлов с выводом MS-Deconv и Thermo Xtract и искала в них закономерности:
 - фрагменты без массы или пиков
 - сходства и различия в обработке разными программами
 - доли правильно и неправильно обработанных фрагментов
- Репозиторий: <https://github.com/ASGusev/nir>

Итоги

- Выявлены следующие закономерности:
 - Результаты работы программ различаются довольно сильно.
 - MS-Decomp не находит массы для некоторых фрагментов.
 - Thermo Xtract часто ошибается в 3-5 раз. Вероятно, неправильно определяется заряд иона.
- Получен опыт написания читаемого и относительно объёмного кода.
- Сравнение поведения программ не завершено.