

Découverte de modifications chimiques portées par les protéines : identification rapide de jeux de spectres de masse sans filtre de masse

*Matthieu David*²

Les protéines remplissent de nombreuses fonctions indispensables au développement et à la survie des organismes. Leur étude est primordiale pour comprendre les mécanismes biologiques des cellules.

La technique la plus utilisée pour caractériser les protéines est la spectrométrie de masse en tandem, qui produit des dizaines de milliers de spectres expérimentaux par analyse.

Pour retrouver les protéines présentes dans le mélange analysé, les spectres obtenus sont comparés à une banque contenant des centaines de milliers de spectres modèles. Pour accélérer l'analyse, on limite souvent le nombre de comparaisons entre spectres, et dans ce cas, 50 à 75 % des spectres restent non identifiés.

Nous avons conçu une méthode d'analyse des spectres sans limitation, c'est-à-dire sans filtrage des spectres de la banque. Elle repose sur une structure de données originale, et s'accompagne d'algorithmes efficaces pouvant comparer rapidement toute paire de spectres. Le tout est intégré dans le logiciel SpecOMS, qui s'exécute en quelques minutes sur un ordinateur standard. SpecOMS est diffusé à la communauté. Il est également capable de mettre en évidence des phénomènes chimiques jusque-là peu connus.

2. Thèse soutenue le 24 octobre 2019, préparée au sein Laboratoire des sciences du numérique de Nantes et de l'INRA de Nantes sous la direction de Guillaume Fertin (LS2N, Université de Nantes) et Dominique Tessier (INRA Nantes). Document disponible à l'adresse <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-02505167>.