

УДК 577.112:004.021

МЕТОД ВОССТАНОВЛЕНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПЕПТИДОВ ИЗ МАСС СПЕКТРОВ**Э.С. Фомин***Институт цитологии и генетики СО РАН, Новосибирск, Россия*

Цель работы: Важную часть пептидома бактерий и грибов составляют нерибосомальные пептиды (НРП), представляющие собой класс вторичных метаболитов и имеющие экстремально широкую область биологической активности и фармакологических свойств. В подавляющем большинстве случаев (61%) НРП имеют циклическую структуру [1]. Из-за того, что их биосинтез происходит мультиферментным образом, идентификация их структуры классическими методами биоинформатики и геномики невозможна и выполняется только на основе масс спектрометрии. Математически проблема секвенирования циклических пептидов из масс спектров (МС) сводится к проблеме восстановления координат точек лежащих на окружности из множества расстояний между ними (так называемая “beltway” проблема, которая не разрешается в полиномиальное время). Таким образом, возможности *de novo* реконструирования структуры циклических НРП из МС в настоящее время ограничены, и разработка новых подходов для решения этой задачи актуальна.

Результаты: Мы предложили новый метод решения проблемы, основанный на совокупности интегральных преобразований, позволяющих удалять шум и избыточность из МС [2]. Показано, что наш подход успешно работает как для идеальных (не содержащих пропуски и ошибки) спектров, так и для спектров с большим уровнем шума. Предложенный подход эффективен и позволяет решать проблему в полиномиальное время $O(n^2)$, где n – полное количество линий в спектре.

Ключевые слова: масс-спектры, *de novo* секвенирование, циклические пептиды, алгоритмы

Литература

1. Caboche, S., M. Pupin, V. Leclère, A. Fontaine, P. Jacques, and G. Kucherov. Norine: a database of nonribosomal peptides. *Nucleic Acids Res.* 2008, 36: D326–D331.
2. Fomin E. A Simple Approach to the Reconstruction of a Set of Points from the Multiset of n^2 Pairwise Distances in n^2 Steps for the Sequencing Problem:
 - a. I. Theory. *JCB*, 2016, 23(9): 769-75;
 - b. II. Algorithm. *JCB*, 2016, 23(12): 934-942.
 - c. III. Noise Inputs for the Beltway Case. *JCB*, 2018, 25. DOI: 10.1089/cmb.2018.0078.