



Partenaires

Laboratoire des Sciences du Numérique de Nantes (LS2N) dans le cadre du Programme Griote, financé par la région Pays de la Loire.

Thèse de Matthieu David, directeur de thèse Guillaume Fertin

Références biblio.

SpecOMS: A Full Open Modification Search Method Performing All-to-All Spectra Comparisons within Minutes

(2017) Journal of Proteome Research

David M, Fertin G, Rogniaux H, Tessier D

SpecTrees: an efficient without a priori data structure for MS/MS spectra identification

(2016) 16th Workshop on Algorithms in Bioinformatics

David M, Fertin G, Tessier D

CONTACTS

Dominique Tessier
dominique.tessier@inra.fr
Hélène Rogniaux
helene.rogniaux@inra.fr

Biopolymères, Interactions,
Assemblages (BIA)

SpecOMS : un logiciel pour mieux connaître l'univers des protéines

L'univers des protéines reste très largement méconnu : 99.8% des protéines décrites dans la banque de référence Uniprot sont prédites *in silico* – donc non strictement identifiées – à partir de l'information génomique disponible. La spectrométrie de masse en mode MS/MS est la technique majoritairement utilisée pour caractériser les protéines. La qualité des résultats dépend de la préparation des échantillons, de l'expertise analytique en spectrométrie de masse et de la capacité des logiciels à interpréter les dizaines de milliers de spectres générés. Cette étape d'interprétation est chronophage et le taux d'interprétation des spectres n'est que d'environ 25%. Ce faible taux est communément expliqué par la présence de modifications portées par les protéines et non connues *a priori*. Ces modifications peuvent correspondre à des modifications post-traductionnelles essentielles pour l'activité des protéines, ou encore résulter de variants pouvant expliquer certains phénotypes ou pathologies. L'élucidation des modifications, supposées présentes sur la quasi-totalité des protéines, constitue un enjeu scientifique majeur dans le domaine de la biologie et de la santé.

► RESULTATS

Le logiciel SpecOMS démontre que la précision de mesure de masse atteinte par les dernières générations de spectromètres de masse ouvre la voie à une nouvelle génération d'algorithmes d'interprétation. Grâce à une réorganisation de l'information spectrale au niveau de l'échantillon complet dans une structure de données adaptée et à des accès efficaces aux données, SpecOMS compare deux à deux les dizaines de milliers de spectres expérimentaux d'une analyse MS/MS à des centaines de milliers de spectres correspondant par exemple au protéome humain. Au niveau international, SpecOMS est actuellement le logiciel le plus rapide (quelques minutes sur un PC standard) et le moins gourmand en mémoire, ce qui rend son utilisation simple pour toutes les plateformes de spectrométrie de masse. La méthode fournit un profil des modifications portées par les protéines d'un échantillon et peut mettre en évidence des modifications non atteignables par les autres approches disponibles.

► PERSPECTIVES

SpecOMS répond à un ensemble d'attentes des scientifiques comme l'atteste sa diffusion rapide dans de nombreux laboratoires. Quelques difficultés restent à lever pour répondre totalement aux besoins de l'usage de la protéomique dans des contextes toujours plus complexes (méta-protéomique, foodomics).