

Badanie widm metabolitów z grupy lipidów i ich pochodnych na podstawie wyników opublikowanych w bazie danych HMDB

Autor: Jakub Kierejsza

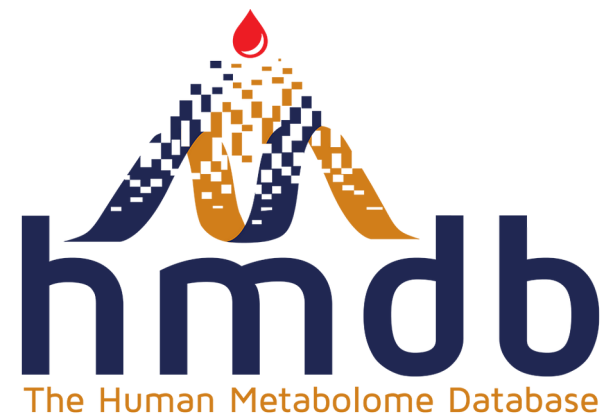
Promotor: prof. dr hab. inż. Jan Mulawka

Plan prezentacji:

- 1) Motywacja i cele pracy
- 2) Aplikacja
- 3) Badania
- 4) Metodologia
- 5) Wyniki
- 6) Wnioski
- 7) Dalszy rozwój

Motywacja

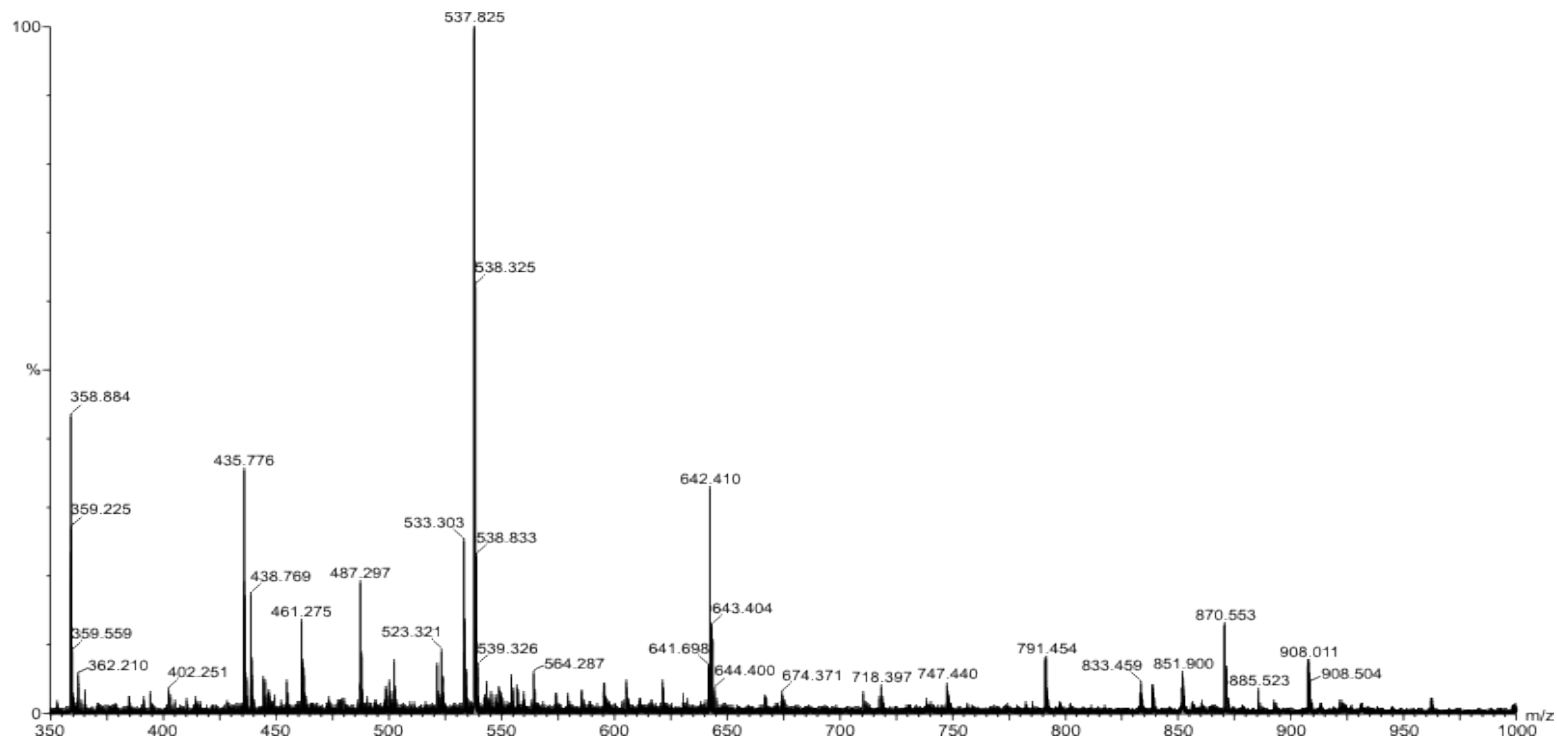
- Pośrednie przyczynienie się do ratowania życia
- Usprawnienie procesu badawczego
- Obniżenie kosztów badań
- HMDB



Logo bazy HMDB

Źródło obrazka [1]

Widma



Źródło obrazka [2]

HMDB

Zalety:

- Nieodpłatna
- Otwarta
- Szczegółowa
- Wyłącznie ludzkie metabolity

Wady:

- Niejednolite widma
- Duża liczba niepełnych widm
- Różne aparatury pomiarowe

Cele pracy

- Stworzenie aplikacji ułatwiającej wyznaczanie parametrów rejestracji metabolitów
- Zbadanie zależności pomiędzy utraconymi cząsteczkami obojętnymi

Aplikacja

Narzędzia:

- MongoDB
- Django
- Nginx

Cechy:

- Wyspecjalizowana
- Dostępna z każdego urządzenia z internetem
- Prosta w obsłudze
- Łatwa w utrzymaniu

MRM table generator for ESI-MS/MS

Metabolite search

Search

cysteine

Search

Advanced search

(R)C(R)S-S-Propylcysteine sulfoxide
(S)C(S)S-S-Methylcysteine sulfoxide
(gamma-Glutamyl-gamma-glutamyl)-S-methylcysteine
3-Mercaptolactate-cysteine disulfide
4'-Phosphopantothienoylcysteine
Acetylcysteine
Ajocysteine
Alanyl-Cysteine
Arginyl-Cysteine
Asparaginy-Cysteine
Aspartyl-Cysteine
Captopril-cysteine disulfide
Cysteine-S-sulfate
Cysteineglutathione disulfide
Cysteinyl-Cysteine
D-Cysteine
D-Pantothenoyl-L-cysteine
Farnesylcysteine
Gamma-Glutamyl-Se-methylselenocysteine
Geranylgeranylcysteine
Glutaminylcysteine
Glutamylcysteine
Glycyl-Cysteine
Histidiny-Cysteine
Homocysteine

Registration parameters table

Minimal intensity

20

D-Cysteine HMDB

Monoisotopic molecular weight: 121.019749643

Ionization mode: positive

Voltage	Q1	Q2/3	Intensity
10	122.019749643	76.02209519	32.5984967
10	122.019749643	122.0275745	25.32321241
20	122.019749643	76.02209519	41.24619422
40	122.019749643	42.03437413	27.11474875
40	122.019749643	58.9955461	21.91043386

Ionization mode: negative

Voltage	Q1	Q2/3	Intensity
10	120.019749643	120.0119244	53.94033807
10	120.019749643	86.02420337	23.14764475
20	120.019749643	86.02420337	29.23136202
20	120.019749643	120.0119244	28.98198599
40	120.019749643	32.97989603	44.40073374

Ionization mode: na

Voltage	Q1	Q2/3	Intensity
10	120.019749643	76	100
10	120.019749643	87	36.447
10	120.019749643	105	35.659
10	120.019749643	122	28.86
25	120.019749643	50	100

Badania

- Widma o jonizacji pozytywnej i energii kolizji równej 10, 20 lub 40 eV
- Metabolity z grupy lipidów i ich pochodnych
- Obliczenie potencjalnych utraconych cząsteczek obojętnych
- Zliczenie wystąpień
- Metoda asocjacyjna

Metoda asocjacyjna

Wskaźniki:

- Wsparcie

$$supp(A) = \frac{|t \in D; A \subseteq t|}{|D|} \quad supp(A \Rightarrow B) = \frac{supp(A \cup B)}{|D|}$$

- Zaufanie

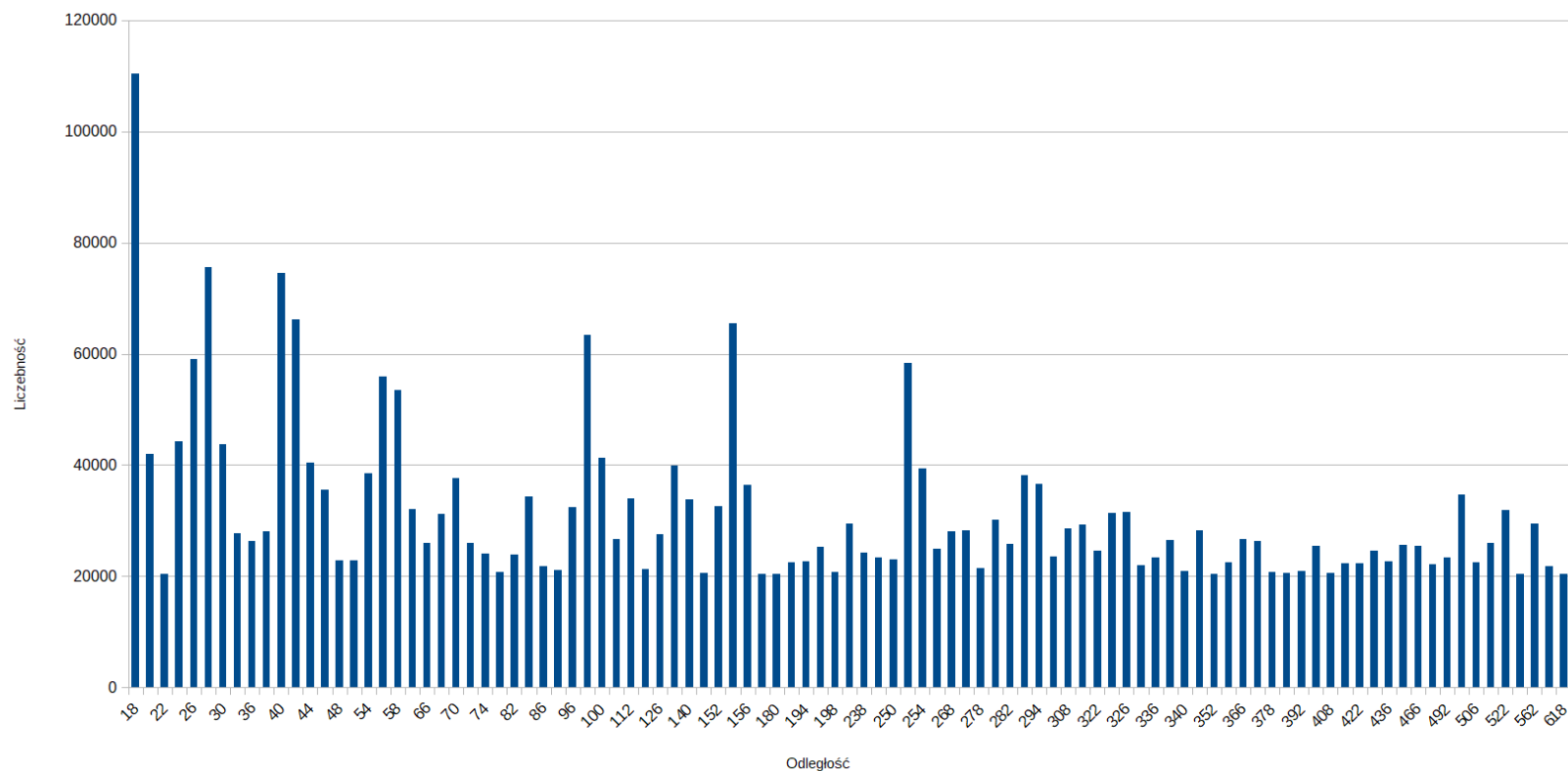
$$conf(A \Rightarrow B) = \frac{supp(A \cup B)}{supp(A)}$$

- Przyrost

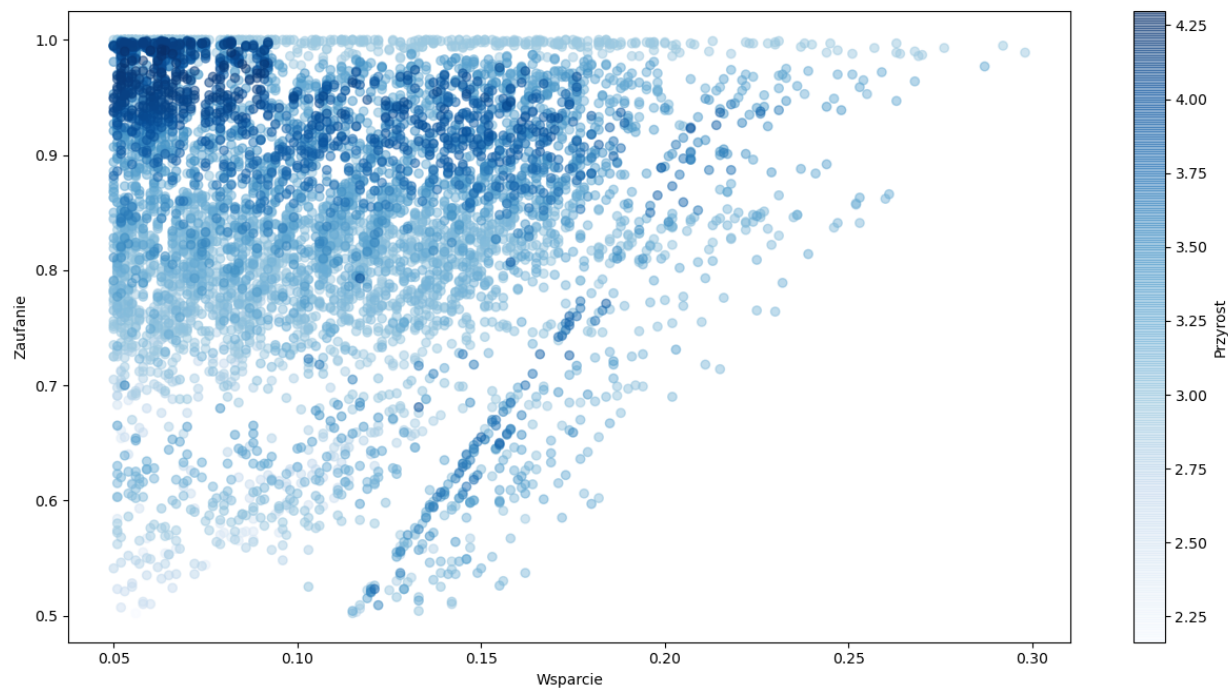
$$lift(A \Rightarrow B) = \frac{supp(A \cup B)}{supp(A) * supp(B)}$$

Wyniki

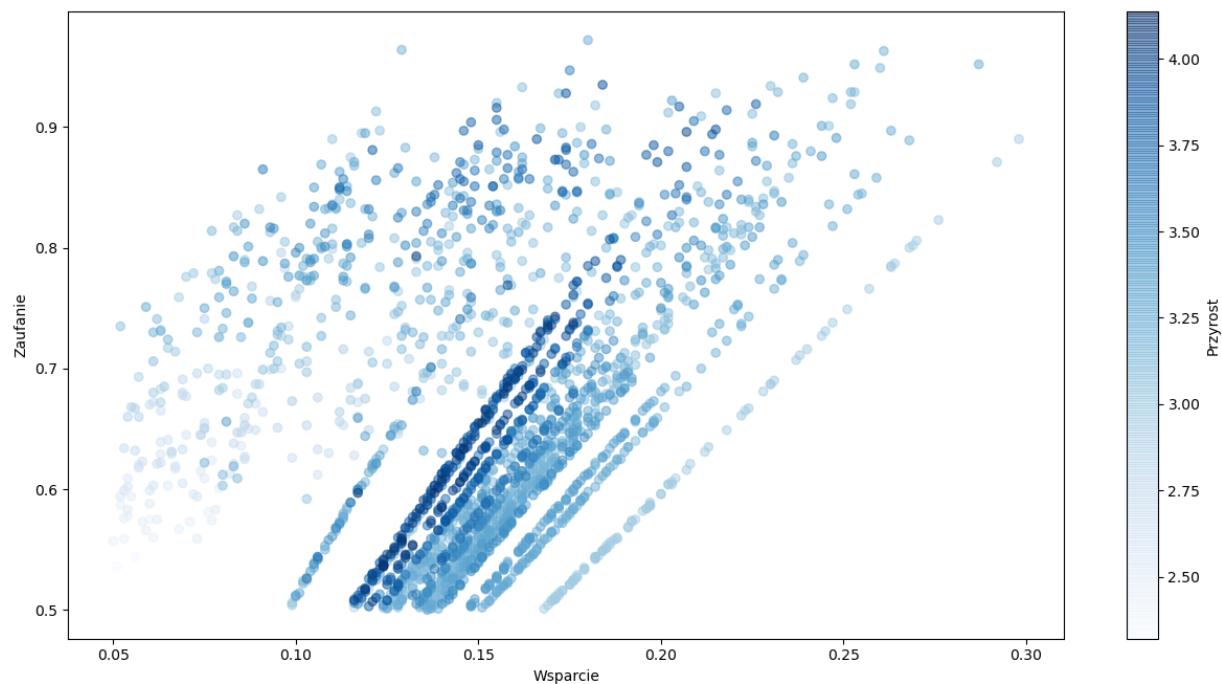
- Wykresy liczebności dla metabolitów z grupy lipidów i ich pochodnych
- Wykresy punktowe reguł asocjacyjnych



Liczebność utraconych cząsteczek obojętnych dla widm z grupy lipidów i ich pochodnych o pozytywnej jonizacji i energii kolizji 10 eV.



Reguły asocjacyjne dla utraconych cząsteczek obojętnych w kierunku od większej cząsteczki do mniejszej z grupy lipidów i ich pochodnych w trybie jonizacji pozytywnej i energii kolizji 10 eV.



Reguły asocjacyjne dla utraconych cząsteczek obojętnych w kierunku od mniejszej cząsteczki do większej z grupy lipidów i ich pochodnych w trybie jonizacji pozytywnej i energii kolizji 10 eV.

Wnioski

Aplikacja:

- Przyspieszenie procesu wyznaczania parametrów rejestracji nawet o 90%
- Jedyne takie publicznie dostępne narzędzie

Badania:

- Zaproponowana metoda umożliwia wykrycie nowych zależności pomiędzy związkami
- Lepsze wyniki dla widm o niskiej energii kolizji
- Nie jest wystarczająca by jednoznacznie określić cząsteczki

Dalszy rozwój

Aplikacja:

- Dodanie nowych modułów
- Polepszenie interfejsu graficznego
- Wykorzystanie dodatkowych baz danych (np. Metlin)

Badania:

- Przedstawiona metoda jest tylko początkiem całego procesu badawczego
- Wykorzystanie zaproponowanego algorytmu na innych grupach związków
- Stworzenie przyjaznego użytkownikowi narzędzia pozwalającego na przeprowadzenie zaprezentowanego rozwiązania

Źródła

- [1] <https://hmdb.ca/>
- [2] <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:WidmoMS.gif>

Dziękuję za uwagę.