

Автоматизация сравнительного метаболомного анализа

Мельников А. Д.

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Метаболомика – постоянно растущая экспериментальная область для изучения патогенеза различных болезней, основанная на анализе низкомолекулярных соединений – метаболитов. Выделяют два основных подхода: прицельный подход и метаболомное профилирование. Прицельный подход сфокусирован на изучение малой группы известных специфичных метаболитов, которые обычно имеют схожие функции или вовлечены в один и тот же процесс. Профилирование же подразумевает под собой анализ максимально большого количества метаболитов. В результате охватывается почти полная метаболомная система. Однако профилирование влечет за собой и трудности, связанные с корректной обработкой полученной информации и правильным выявлением зависимостей между изучаемыми образцами.

Целью данной работы являлось создание метода, позволяющего сравнивать метаболомный состав двух прилегающих тканей. В качестве образцов использовались ткани глаза человека: водянистая влага и хрусталик. Исследование низкомолекулярной фракции тканей глаза проведено с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ВЭЖХ-МС). В результате каждого ВЭЖХ-МС эксперимента получали трехмерный массив данных: по одной оси откладывалось время удерживания на хроматографической колонке, по другой отношение массы к заряду, по третьей интенсивность сигнала. Благодаря высокой чувствительности масс-спектрометра в данной работе обнаружено порядка нескольких тысяч ВЭЖХ-МС сигналов.

С использованием программного обеспечения с открытым кодом *R software* разработан метод обработки данных, позволяющий сравнивать метаболомный состав двух тканей. С помощью разработанного метода проведено полуколичественное сравнение концентраций большого числа метаболитов в обеих тканях и показана применимость профилирования при изучении метаболомного состава различных тканей. При сравнительном метаболомном анализе водянистой влаги и хрусталика обнаружены различия в концентрациях для некоторых классов метаболитов.

Научный руководитель – канд. физ. – мат. наук Яньшолле В. В.