

Отзыв научного руководителя  
о выпускной квалификационной работе  
Ярцева Дмитрия Сергеевича

**«Разработка метода деконволюции тандемных масс-спектров с  
фрагментацией методом ультрафиолетовой фотодиссоциации»**

На сегодняшний день масс-спектрометрия высокого разрешения представляет собой наиболее широко используемый метод анализа белков и пептидов. Деконволюция тандемных масс-спектров высокого разрешения, снятых с белковых молекул целиком (по технологии top-down) является необходимым шагом при их обработке; в то же время, она редко применяется при обработке таких масс-спектров, снятых с пептидов (по технологии bottom-up). Однако недавние исследования показали, что использование деконволюции и в этом случае позволяет существенно повысить надежность интерпретации масс-спектров – в частности, при *de novo* секвенировании белков и пептидов.

Деконволюция масс-спектров сводится к выделению изотопных кластеров с последующей заменой каждого из них на моноизотопный пик с нейтральной массой. При этом распределение пиков между кластерами представляет собой сложную задачу, для успешного решения которой должны быть предложены оценочные функции, позволяющие отличить надежные варианты от ненадежных с учетом особенностей исследуемых масс-спектров.

Целью работы Д.С. Ярцева был анализ возможностей адаптации метода деконволюции MS-Decolv, изначально разработанного для обработки top-down масс-спектров, к случаю bottom-up данных высокого разрешения. Ярцевым были выявлены особенности оценочной функции MS-Decolv, не согласующиеся со структурными особенностями bottom-up масс-спектров, что позволило добиться улучшения качества обработки bottom-up данных за счет ее корректировки. Далее им были предложены еще три оценочные функции, и выполнен их сравнительный анализ, что позволило выбрать из них наиболее эффективную (так называемый *U'-score*).

Исследование выполнено Ярцевым самостоятельно. Результаты, полученные в ходе работы, свидетельствуют о высоком уровне математической подготовки ее автора, а также об уверенном его владении навыками разработки программного обеспечения.

Считаю, что выпускная квалификационная работа Д.С. Ярцева заслуживает оценки **“отлично”**.

Научный руководитель  
к.ф.-м.н., зав. каф. биоинформатики и математической биологии  
СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова



К.В. Вяткина

9 июня 2021 г.