

Disulfidické můstky hrají důležitou roli při skládání proteinů a mají velký vliv na jejich funkci. K určování polohy disulfidických můstků v proteinech se často používá tandemová hmotnostní spektrometrie v kombinaci s manuální nebo výpočetní interpretací výsledků. V této práci představujeme program Dibby, který má za cíl charakterizovat disulfidické můstky v proteinu. Dibby identifikuje proteinové fragmenty ve fragmentačních spektrech a s jejich pomocí určuje, kde v proteinu se disulfidické můstky nacházejí. Použitý identifikační algoritmus zvládá identifikovat i komplexní fragmenty s několika disulfidickými můstky, kterých si jiné metody často nevšimnou. Abychom při identifikaci fragmentů zmenšili vyhledávací prostor, využíváme metodu rozděl a panuj a metodu větví a mezí. Pomocí evaluace na naměřených i na uměle vygenerovaných datasetech jsme ověřili, že Dibby jen s minimálními manuálními zásahy správně rozpozná velkou část přítomných disulfidických můstků.