

1. Übung zur Vorlesung “Algorithmische Massenspektrometrie”

Wintersemester 2014/2015

Kai Dührkop

Ausgabe: 4. November 2014, Abgabe: 06. November 2014 in der Übung

1. **Ionisierung:** Ein Peptide Mass Fingerprint enthält zwei Peaks mit m/z -Werten 358 und 596. Ist es möglich, dass beide Peaks das selbe Peptid mit unterschiedlicher Ladung repräsentieren? Das Peptid ist durch Protonierung ionisiert. Falls ja, bestimmen Sie die Parent Mass dieses Peptids. Anmerkung: Durch Protonierung erhält das Peptid ein zusätzliches Proton mit der Nominalmasse 1 Da.

(3 Punkte)

2. **b-Ionen-MS/MS:** Angenommen, wir haben ein MS/MS-Spektrum das nur aus b-Ionen (sprich: Präfix-Strings) besteht und sämtliche b-Ionen des Peptids enthält. Schreiben Sie einen Algorithmus, der aus einem solchem Spektrum das Peptid sequenziert. Wie ist die Laufzeit ihres Algorithmus?

(3 Punkte)

3. **DP für MS/MS:** Gegeben sei ein MS/MS Spektrum eines unbekanntes Peptids

$$M = \{0, 2, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 15, 17\}$$

Alle Peaks in diesem Spektrum gehören entweder zu Präfixen oder Suffixen dieses Peptids. Weiterhin sind auch alle Präfix- und Suffix-Peaks im Spektrum enthalten. Es wird ein vereinfachtes Aminosäure Alphabet $\Sigma = \{a, b, c\}$ mit Massen $\mu(a) = 2$, $\mu(b) = 3$ und $\mu(c) = 4$ genutzt.

- (a) Zeichnen Sie den Spektrum-Graphen zu diesem MS/MS Spektrum
- (b) Nutzen Sie dynamische Programmierung um das Peptid zu sequenzieren. Schreiben Sie die dynamische Programmiertabelle auf und zeichnen Sie den Backtracking Pfad ein. Geben Sie die Peptid-Sequenz an.

(8 Punkte)