

## 2. Übung zur Vorlesung “Algorithmische Massenspektrometrie”

Wintersemester 2014/2015

Kai Dührkop

Ausgabe: 13. November 2014, Abgabe: 17. November 2014 in der Übung

1. **DP für  $b$ -Ionen-MS/MS:** Angenommen, wir haben ein MS/MS-Spektrum  $\{m_1, \dots, m_k\}$  gegeben,  $m_1 \leq \dots \leq m_k$  und  $m_i \in N$  für alle  $i = 1, \dots, k$ , von dem wir wissen, dass er ausschließlich aus Präfixmassen und “noise peaks” (Rauschen) besteht. Die Massen in unserer Alphabet sind ganzzahlig. In diesem Zusammenhang sagen wir für einen Lösungsstring  $s$ , dass er eine Eingabemasse  $m$  *erklärt*, falls  $s$  einen Präfix mit Masse  $m$  hat. Beschreibe einen Algorithmus, der einen Lösungsstring findet, welcher die Anzahl der erklärten Massen maximiert. Der Algorithmus sollte Laufzeit  $O(k|\Sigma|)$  haben. Hinweis: Verwende eindimensionales Dynamisches Programmieren.

(3 Punkte)

2. **DP mit linearem Speicher:** Modifizieren sie den Peptid-Sequenzierungsalgorithmus für ideale Daten (keine fehlenden Peaks, Spektrum vollständig, jeder Peak ist entweder Präfix oder Suffix Peak), so dass der Algorithmus nur noch linearen Speicher braucht (aber weiterhin quadratische Laufzeit hat).

(8 Punkte)

3. **Noisy MS/MS:** Gegeben sei das Alphabet  $\Sigma = \{a, b, c\}$  mit  $\mu(a) = 2, \mu(b) = 3, \mu(c) = 7$  und ein MS/MS-Spektrum

$$\{2, 7, 8, 9, 14, 16, 17, 22, 24\},$$

mit der Parent Masse 24, von dem wir wissen, dass in dem einige Peaks fehlen können und einige Peaks Rauschen sind. Finde einen String, der die maximalen Anzahl von Peaks (wie in der Vorlesung besprochen) erklärt.

(8 Punkte)