

# 7. Übung zur Vorlesung “Algorithmische Massenspektrometrie”

Wintersemester 2014/2015

Sebastian Böcker, Kai Dührkop

Ausgabe: 11. Dezember 2014, Abgabe: 18. Dezember 2014

## 1. Strings-Zufallsgenerator:

Vom vierten Übungszettel wissen wir, dass die Anzahl von Strings mit Masse  $m$  und beliebiger Länge durch die Rekurrenz

$$D[m] = \sum_{\sigma \in \Sigma, \mu(\sigma) \leq m} D[m - \mu(\sigma)]$$

mit  $D[0] = 1$  berechnet werden kann. Beschreiben Sie einen Algorithmus, der mit Hilfe der berechneten DP-Tabelle zufällig einen String mit gegebener Masse  $M \in \mathbb{N}$  in Zeit  $O(M/a_1)$  zieht.

Hinweis: Berücksichtigen Sie in ihrem Algorithmus, dass jeder String mit gleicher Wahrscheinlichkeit gezogen werden sollte.

(5 Punkte)

## 2. Strings-Zufallsgenerator mit unterschiedlich wahrscheinlichen Buchstaben:

Modifizieren Sie den Algorithmus aus Aufgabe 1 für den Fall, dass die Buchstaben  $\sigma \in \Sigma$  nicht gleichwahrscheinlich sind, sondern wir für jeden Buchstaben  $\sigma$  eine Wahrscheinlichkeit  $p(\sigma)$ ,  $\sum_{\sigma \in \Sigma} p(\sigma) = 1$  gegeben haben.

Hinweis: Am einfachsten erreichen Sie dies, wenn sie die Rekurrenz der DP ändern.

(5 Punkte)

## 3. Peptid Spektrum Simulation:

Schreiben sie (in Pseudocode) ein Programm, welches für ein gegebenes Peptid ein MS/MS Spektrum (nur Massen, keine Intensitäten) simuliert.

(5 Punkte)