

2. Übung zur Vorlesung “Algorithmische Massenspektrometrie”

Wintersemester 2016/2017

Sebastian Böcker, Martin Hoffmann

Ausgabe: 01. November 2018, Abgabe: 08. November 2018 in der Vorlesung

1. **Ionen-Spektrum:** Angenommen wir wüssten, dass in einem MS/MS Spektrum nur b-Ionen (Präfixmassen) vorkommen. Die Interpretation des Spektrums wäre dann viel einfacher.
 - (a) Schreiben Sie einen Algorithmus, der ein solches Spektrum interpretiert. Als Eingabe erhält der Algorithmus eine Liste von Präfixmassen $m_1 \dots m_k$, wobei $m_k = P$ die Parent Mass des Peptids ist. Als Ausgabe soll der Algorithmus die Peptid Sequenz zurückgeben.
 - (b) Geben Sie die asymptotische Laufzeit ihres Algorithmus an.

(5 Punkte)

2. **Spektrum-Graph:** Sei $\Sigma = \{a, b, c, d\}$ ein gewichtetes Alphabet mit einer Gewichtung $\mu : \Sigma \rightarrow \mathbb{N}$ mit $\mu(a) = 2$, $\mu(b) = 3$, $\mu(c) = 7$, und $\mu(d) = 12$.
 - (a) Schreiben Sie das ideale Massenspektrum des Strings *abbacad* auf
 - (b) Skizzieren sie den Spektrumgraphen zu diesem Massenspektrum. Heben Sie den Präfix- und Suffixpfad, der den String *abbacad* ergibt, mit unterschiedlichen Farben hervor.
 - (c) Gibt es noch andere Strings die dasselbe ideale Spektrum erzeugen? Nennen Sie ein Beispiel.

(7 Punkte)