

## 2. Übung zur Vorlesung “Algorithmische Massenspektrometrie”

Wintersemester 2020/2021

Sebastian Böcker, Kai Dührkop

Ausgabe: 11. November 2020, Abgabe: 17. November 2020

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. **Naiver Algorithmus:** Ein naiver Algorithmus, zum Interpretieren eines idealen MS/MS Spektrums, könnte für jeden Peak jeweils die Möglichkeiten, dass es ein Präfixpeak oder ein Suffixpeak ist, (z.B. rekursiv) ausprobieren. Mit *ideales Spektrum* ist ein Spektrum gemeint, das nur b- und y-Ionen sowie das intakte Peptid-Ion enthält (wir wissen allerdings nicht, welcher Peak ein b- oder y-Ion ist.)

(a) Schreiben Sie einen solchen naiven Algorithmus. Als Eingabe erhält der Algorithmus ein ideales Spektrum, als Ausgabe soll er alle Peptide zurückgeben, die dieses Spektrum erklären.

(b) Geben Sie die asymptotische Laufzeit ihres Algorithmus an.

(5 Punkte)

3. **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.

(6 Punkte)