

# Optimizing de novo molecule prediction with string-based representations from tandem mass spectrometry data

Wout Welvaert

Student number: 01903329

Promoter: Prof. Dr. Willem Waegeman

Supervisor: Gaetan De Waele

A dissertation submitted to Ghent University in partial fulfilment of the requirements for the degree of  
Master of Science in Bioinformatics: Engineering

Academic Year: 2024- 2025

De auteur en promotor geven de toelating deze scriptie voor consultatie beschikbaar te stellen en delen ervan te kopiëren voor persoonlijk gebruik. Elk ander gebruik valt onder de beperkingen van het auteursrecht, in het bijzonder met betrekking tot de verplichting uitdrukkelijk de bron te vermelden bij het aanhalen van resultaten uit deze scriptie.

The author and promoter give the permission to use this thesis for consultation and to copy parts of it for personal use. Every other use is subject to the copyright laws, more specifically the source must be extensively specified when using results from this thesis.

Gent, May 26, 2025

The promoter,  
Prof. Dr. Willem Waegeman

The author,  
Wout Welvaert