

Übungsblatt 4

Jena, 14. November 2010

Aufgabe 1: Simulation eines SBML-Modells

(3 Punkte)

Was beschreibt das Modell BIOMD0000000006 (<http://www.ebi.ac.uk/biomodels-main/BIOMD0000000006>) aus der BioModels Database? Welches zeitliche Verhalten wird simuliert und wie ist der Verlauf der Konzentrationen der einzelnen Spezies?

Aufgabe 2: Analyse eines SBML-Modells

(7 Punkte)

In der Wiki befindet sich das SBML-Modell `ecoli-core.xml` das den zentralen Metabolismus von *Escherichia coli* modelliert. Außerdem findet sich im Wiki eine Java-Bibliothek, `sbml2.jar` mit der SBML-Modelle eingelese werden können. Die `jar`-Datei kann entweder in Eclipse über einen Rechtsklick auf das entsprechende Projekt und dann "Properties/Java Build Path/Libraries/Add external jars" oder über die Kommandozeile beim kompilieren und ausführen durch die Zusatzoption `-classpath=./pfad/zu/sbml2.jar` eingebunden werden. Außerdem befindet sich im Wiki ein Grundgerüst für eine Java-Klasse die um Funktionalitäten erweitert werden soll mit denen man das Modell analysieren kann. In der Klassen-Datei befinden sich schon einige Funktionen die beispielhaft die Arbeit mit `sbml2.jar` demonstrieren.

1. Schreibe eine Funktion `getReversibility()` die einen `boolean`-array zurückgibt in dem für jede Reaktion angegeben ist, ob diese reversibel ist oder nicht. Schreibe zusätzlich eine ähnliche Funktion `getExternalSpecies()` die für jeden Metaboliten angibt ob er gepuffert ist (Hinweis: `Species.isBoundaryCondition()`). Wie viele Reaktionen in dem Modell sind irreversibel, wie viele Spezies sind gepuffert?
2. Schreibe eine Funktion `getStoichiometricMatrix()`, die die stöchiometrische Matrix des Modells als `double [][]` erzeugt. Wie viele Nicht-Null-Einträge hat die Stöchiometrische Matrix des Modells? Hinweis: Über die Funktion `getReactant()` und `getProduct()` der Klasse `Reaction` erhält man eine Liste der Edukte und Produkte einer Reaktion. Diese Liste beinhaltet Objekte vom Typ `SpeciesReference` die auch die Stöchiometrie der Spezies in der Reaktion angibt.
3. Schreibe eine Funktion `printReaction(int index)`, die eine textuelle Repräsentation der Reaktion mit dem entsprechenden Index ausgibt (in der in der Vorlesung üblichen Notation). Die Ausgabe sollte neben Edukten, Produkten und deren Stöchiometrien auch die ID und den Index der Reaktion beinhalten. Gebe beispielhaft die Reaktion mit dem Index 0 aus.

Abgabe (schriftlich) bis Mo, den 21.11.2011 (14:15).

Weisheit des Tages

Gott sprach: "Es werde Licht!" und Chuck Norris antwortete: "Sag Bitte!" – Genesis 1, 3