

Übungen zur Systembiologie

Blatt 3

Abgabetermin: *Freitag*, 09.11.2018, 9 Uhr

Persönlich oder per Upload-Formular unter

www.bio.ifi.lmu.de/studium/ws2018/vlg_sysb/uebungsabgabe

1. Aufgabe (Metabolic network reconstruction):

Beantworten Sie für alle genomweiten metabolischen Netzwerk-Modelle, die im Jahr 2011 erstellt wurden, folgende Fragen:

- Liegt das Modell im SBML-Format vor, wenn ja in welcher Version?
- Wurde die Massenbilanz bestimmt bzw. ausgeglichen?
- Wurde bestimmt, ob das Netzwerk die Biomasse-Komponenten erzeugen kann, wenn ja wie?
- Wurde die Reversibilität der Reaktionen bestimmt, wenn ja wie?

Geben Sie jeweils die entsprechende Publikation an.

2. Aufgabe (Metabolic network reconstruction, Bonus-Aufgabe):

Unter <http://sbrg.ucsd.edu/InSilicoOrganisms/OtherOrganisms> gibt es eine Aufstellung über alle genomweiten metabolischen Netzwerk-Modelle, die zu Vorhersagen verwendet werden können und bis Februar 2018 erstellt wurden.

- Erzeugen Sie mit Hilfe dieser Daten folgende Abbildungen aus der Publikation von Monk et al. (Nat Biotechnol. 2014, 32(5):447-52) neu, so dass diese die Daten bis Ende 2017 enthalten:
 - Fig. 1a. Zeigen Sie hier nur die cumulative GENREs, nicht die unique reactions.
 - Fig. 1c. Zeigen Sie dabei die Gesamtzahl aller Reaktionen für den jeweiligen Organismus, nicht nur die Reaktionen, die in den Modellen neu sind. Erstellen Sie die gleiche Abbildung auch jeweils für die Anzahl Gene bzw. Metabolite in dem Modell.

- (b) Bestimmen Sie alle Spezies für die es mehr als ein Modell gibt und visualisieren Sie für diese Spezies geeignet die Anzahl an Genen, Metaboliten und Reaktionen in jedem Modell.

Geben Sie alle erzeugten Abbildungen ab, sowie alle Programme die Sie für diesen Zweck implementiert oder verwendet haben.

3. Aufgabe (K-means, Bonus-Aufgabe):

Wenden Sie den K-means Algorithmus mit $k = 3$ auf folgende Datenpunkte an:

(2, 9), (2, 8), (3, 8), (2, 7), (3, 7), (4, 7), (1, 1), (3, 1), (0, 2), (2, 2), (3, 2), (1, 4), (5, 3), (7, 3), (7, 4), (8, 4), (6, 5), (8, 2)

Dabei seien die initialen Cluster wie folgt: 1, 1, 1, 3, 3, 3, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 2, 2, 2, 1, 1, 3

Falls Sie zur Lösung dieser Aufgabe ein Programm implementiert oder verwendet haben, geben Sie auch dieses ab.