Institut für Informatik
Praktische Informatik und Bioinformatik
Prof. Dr. Ralf Zimmer
Dr. Robert Küffner
Caroline Friedel
Lukas Windhager

Wintersemester 2008/09

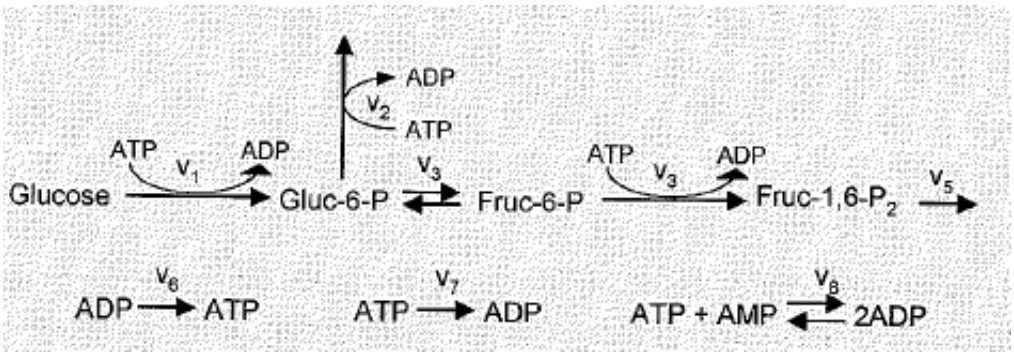
Übungen zur Systembiologie

Blatt 5

Abgabetermin: Dienstag, 02.12.2008, 10 Uhr (vor der Vorlesung)

Hinweis: Software finden Sie unter `/home/proj/SystemsBiology/software/`

1. Aufgabe (Stöchiometrische Matrix):



(a) Ergänzen Sie die oben dargestellten Auschnitt der Glycolyse um die Aldolase- und Isomerase-Reaktion.

(b) Erstellen Sie die stöchiometrische Matrix für den gesamten so entstandenen Pathway (von der Glukose bis zur Isomerase-Reaktion)

2. Aufgabe (Steady-State Analyse):

Sei S die stöchiometrische Matrix von Aufgabe 1. Berechnen Sie den Rang der Matrix und den Kernel $Null(S)$ sodass gilt:

$$Null(S) = \{x \in R^n \setminus 0 : Sx = 0\}. \tag{1}$$

3. Aufgabe (SBML):

(a) Schauen Sie sich die SBML Spezifikation (siehe http://sbml.org/Documents/) an.

(b) Stellen Sie den Ausschnitt der Glycolyse aus Aufgabe 1 als vollständiges SBML-Dokument dar (inklusive der Aldolase- und Isomerase-Reaktion).

(c) Benennen Sie die Reaktionen mit ihren EC Nummern und die Spezies mit ihren vollständigen Namen (sieh KEGG Datenbank; mit Ausnahme von Reaktionen *v2*, *v6-v8*).

(d) Importieren Sie ihr SBML Dokument in Copasi. So können Sie ihre Syntax testen.

(e) Definieren Sie dort die *rate laws* als *mass action*. Die Parameter müssen nicht eingestellt werden.

Geben Sie ihr resultierendes SBML Dokument ab.

4. Aufgabe (Metabolic Reconstruction Review):

Lesen Sie das Review von Feist und Palsson (2008) *The growing scope of applications of genome-scale metabolic reconstructions using Escherichia coli.*

Bearbeiten Sie die folgenden Fragen/Aufgabestellungen:

(a) Was ist *metabolic engineering* und wie werden GEMs in diesem Bereich eingesetzt?

(b) Wie können Modelle metabolischer Pfade/Netzwerke validiert werden?

(c) Erklären Sie, wie GEMs zu Phenotyp-Untersuchungen eingesetzt werden können.