

گزارش تمرین یک درس زیست شناسی مصنوعی

امین سعیدی

بخش اول:

1.1

در ابتدا همانطور که خواسته شده مدل ها را دانلود کرده و اطلاعاتشان را به وسیله پکیج COBREXA استخراج میکنیم که در جدول زیر اطلاعات خواسته شده برای هر 5 مدل آورده شده است.

از آنجایی که هرکدام از خروجی های 4 ستون اول و 2 ستون آخر مقادیر زیادی دارند، خروجی های این قسمت برای هر مدل همراه با کد ارسال میگردد.

در این قسمت یک استراکت تعریف شده که اطلاعات مدل در آن ذخیره میشود تا در آینده باز از آن استفاده شود. این استراکت علاوه اطلاعات گفته شده در تمرین، خود مدل استخراجی توسط کبرکسا و همچنین دیکشنری واکنش های برگشت پذیر و برگشت ناپذیر را نیز ذخیره میکند. این مقادیر در تابع method_1_1 مقدار دهی میشوند.

	S	metabolites	reactions	Genes	m	n	lb	ub
e-coli-core					72	95		
iAB-RBC-283					342	469		
iNF517					650	754		
iNJ661					825	1025		
Recon3D					5835	10600		

1.2

در این بخش تابعی زده شده تا با گرفتن مدل بخش 1.1، واکنش های برگشت پذیر و برگشت ناپذیر آن مدل را مقدار دهی کند و در دیکشنری ها ذخیره کند. کلید این دیکشنری ها اندیس واکنش ها در لیست واکنش های مدل و ارزش های این دیکشنری ها نیز نام واکنش ها هستند. واکنش های برگشت پذیر و برگشت ناپذیر بر اساس حد پایین سرعت واکنششان مشخص شده اند.

در این بخش تابعی زده شده تا با گرفتن مدل بخش 1.1، همگن سازی را انجام دهد. همگن سازی نیز به این صورت است که برای واکنش های برگشت پذیر بخش قبلی کران بالا و پایین را به ترتیب M و $-M$ قرار میدهد و برای واکنش های برگشت ناپذیر حد بالا و پایین را به ترتیب M و 0 قرار میدهد.

بخش دوم:

2.1

در این بخش با استفاده از دو پکیج JuMP و GLPK سعی شده تا تابعی زده شود تا با گرفتن مدل بخش 1.1، واکنش های بلاک را با حل $n_i + 2 * n_r$ برنامه ریزی خطی بدست آورد. در این تابع و در هر دور حلقه ها، ابتدا یک solver ایجاد میشود که متغیر ها و محدودیت های آن متناسب با برگشت پذیر بودن و یا نبودن واکنش تعیین میشود و سپس مقدار شار واکنش ها محاسبه میشود و اگر این شار در تلورانسی مشخص بود، به دیکشنری واکنش های بلاک اضافه میشود. در این دیکشنری کلید ها اندیس واکنش ها و ارزش ها نام واکنش های بلاک شده هستند. در این بخش مانند تمام بخش های گذشته خروجی ها در نوت بوک آورده شده است و متأسفانه برای دو مدل نتایج دقیقی نمیدهد. البته بسیار سعی کردم تا به نتایج تست برسم، اما با این حال این اتفاق نیفتاد. نام و تعداد واکنش های بلاک بدست آمده در گزارش کار آمده است. همچنین تعداد واکنش های بلاک هر دسته از واکنش های برگشت پذیر و برگشت ناپذیر نیز مشخص شده است.

2.2

در این بخش نیز همچون بخش قبل با استفاده از دو پکیج JuMP و GLPK سعی شده تا تابعی زده شود تا با گرفتن مدل بخش 1.1، واکنش های بلاک برگشت ناپذیر را با حل یک برنامه ریزی خطی برای هر مدل بدست آورد. در این تابع ابتدا یک solver ایجاد میشود که متغیر ها و محدودیت های آن متناسب با مدل ریاضی داده شده در صورت سوال مقدار دهی میشوند و در نهایت تعداد واکنش های بلاک برگشت ناپذیر تعیین میشود. در این بخش مانند تمام بخش های گذشته خروجی ها در نوت بوک آورده شده است. نتایج این قسمت منطبق با نتایج واکنش های برگشت ناپذیر قسمت کلاسیک است، اما سرعت اجرای این قسمت به مراتب بسیار بیشتر از قسمت کلاسیک است.

بخش تست:

این بخش در فایل نوت بوک به نام CobraChecking_OR_PART3 به همراه کد ها قرار دارد و در این قسمت، خروجی ها با استفاده از کتابخانه کبری پایتون بررسی میشوند که نتایج کار در جدول زیر آورده شده است.

جدول نتایج:

	الگوریتم پایتون	رویکرد کلاسیک (برگشت ناپذیر)	رویکرد کلاسیک (برگشت پذیر)	تعداد کل واکنش های بلاک - کلاسیک	رویکرد مدرن (برگشت ناپذیر)
e-coli-core	8	8	0	8	8
iAB-RBC-283	16	2	14	16	2
iNF517	241	166	41	207	166
iNJ661	285	235	46	281	235
Recon3D	0	-	-	-	0