



توضیحات مربوط به هر فایل کد و خروجی نظیر آن ها در زیر آمده است :

### Init\_models.jl

این کد ابتدا مدل `ecoli_core` را دانلود میکند و با متد `standarModel` آن را لود میکند. سپس آن را همگن میکند (با تنظیم کران بالا و پایین هر واکنش و مقدار  $M=1000000$ ). در ادامه نیز واکنش هایی که در تمرین قبل بلاک به دست آمده بودند را از مدل حذف میکند و مدل به دست آمده را برمیگرداند.

### Q1\_1.jl

با استفاده از کد `init_models` مدل همگن شده و بدون واکنش های بلاک را در متغیر `m` لود میکند

با اجرای یک بار `FBA` ( با استفاده از متد آماده ی `COBREXA` : `flux_balance_analysis_dict`) مقدار `v_biomass_wildType` (واکنش `BIOMASS_Ecoli_core_w_GAM`) برابر با `۳۴۱۴۸,۴۲۹۵۶۳۹۴۲۵۸` به دست آمده بود که آن را ست میکنیم و  $f=0.01$  در نظر میگیریم.

به ازای تمام واکنش های مدل `m` ابتدا کران بالا و پایین آن واکنش را  $\bullet$  قرار میدهیم سپس `FBA` را اجرا میکنیم و `v biomass` را به دست می آوریم اگر این مقدار کمتر از  $v\_biomass * f$  باشد یعنی آن واکنش برای رشد سلول ضروری است بنابراین آن واکنش را چاپ میکنیم. نتایج این قسمت **۱۷ واکنش** زیر هستند :

"PGK"	"PGM"	"PIt2r"	"ACONTa"	"ACONTb"	"CS"	"RPI"	"ENO"
"EX_glc_D_e"	"EX_h_e"	"EX_nh4_e"	"EX_pi_e"	"GAPD"	"GLCpts"		
"GLNS"	"ICDHyr"	"NH4t"					

### Q1\_2.jl

در این کد مانند قسمت قبل مدل `m` را لود میکنیم و پارامتر ها را ست میکنیم. سپس به ازای تمام جفت واکنش های `I,j` که `nabz` برابر نباشد، طی دو حلقه ی تو در تو، اگر هیچ کدام از واکنش ها در لیست واکنش های `singl` نبودند و قبلا نیز بررسی نشده بودند، بررسی میکنیم اگر شار هر دو واکنش صفر شود چه تاثیری روی `v_biomass` خواهد گذاشت به این منظور پس از صفر کردن شار آن ها `FBA` را اجرا میکنیم و `v biomass` را به دست می آوریم اگر این مقدار کمتر از  $v\_biomass * f$  باشد یعنی وجود آن دو واکنش با هم به صورت `double` برای رشد سلول ضروری است.

نتایج حاصل از این قسمت (**۱۱۱ جفت واکنش**) در پایان این گزارش (بخش ضمیمه) آمده است.

## از.1\_2Q

آین کد جفت شدگی های کامل را پیدا میکند به این شکل که به ازای تمام جفت واکنش های  $I, j$  موجود در لیست reactions بررسی میکند که آیا  $v$  یکی از واکنش ها ضریب دیگری هست یا نه، اگر این موضوع برقرار بود درایه ی نظیر در ماتریس out برابر با ۱ در نظر گرفته خواهد شد. طبق این بخش کد واکنش هایی که جفت شدگی کامل دارند (۲ جفت واکنش) عبارت اند از :

ENO and PGM

GLCpts and EX\_glc\_\_D\_e

و طبیعتا تمام واکنش ها با خودشان.

## از.2\_2Q

این کد سایر انواع جفت شدگی را پیدا میکند. توابع یافتن واکنش های بلاک عینا مانند تکلیف قبلی است و در گزارش قبلی توضیح داده شده اند.

تابع find\_blocked با استفاده از توابع irreversable\_classic و reversable\_classic که در تمرین قبل پیاده شده اند، واکنش های بلاکی که در لیست reactions هستند را پیدا کرده و باز میگرداند.

کد به این صورت عمل میکند که به ازای هر جفت واکنش  $i, j$  از واکنش های لیست reactions با  $\bullet$  قرار دادن کران های واکنش  $i$  بررسی میکند آیا واکنش  $j$  بلاک شده است یا نه به این صورت که با استفاده از find\_blocked واکنش های بلاک شده در صورت حذف واکنش  $i$  را میابد و بررسی میکند آیا واکنش  $j$  در آن وجود دارد یا نه.

اگر واکنش با صفر شدن شار  $i$  شار  $j$  نیز صفر شود این یعنی در صورت وجود شار در واکنش  $j$  واکنش  $i$  هم شار خواهد داشت این یعنی جفت شدگی جهت دار از  $j$  به  $i$  پس درایه ی  $out[j, i] = 3$  یعنی جفت شدگی جهت دار مستقیم و  $out[I, j] = 4$  یعنی جفت شدگی جهت دار معکوس خواهند داشت.

حال اگر به نتیجه برسیم که از  $j$  به  $i$  جفت شدگی مستقیم داریم، درایه ی  $out[I, j]$  را هم چک میکنیم، اگر  $out[I, j] = 3$  باشد این یعنی از سمت  $I$  به  $j$  نیز جفت شدگی مستقیم داشتیم و از این نتیجه میشود که جفت شدگی جزیی داریم. و قرار میدهیم  $out[I, j] = out[j, i] = 2$ .

ماتریس زیر نتیجه ی نهایی آنالیز خواهد بود که در آن:

۳۵ جفت شدگی جهت دار مستقیم (۳۵ درایه=۳) و در نتیجه ۳۵ جفت شدگی جهت دار معکوس (۳۵ درایه=۴) داریم.

۸ جفت واکنش داریم که با هم جفت شدگی جزیی دارند. (۱۶ درایه برابر با مقدار ۲)

۲ جفت واکنش داریم که با هم جفت شدگی کامل دارند (۴ درایه غیرقطری برابر با ۱)

و طبیعتا هرواکنشی با خودش هم جفت شدگی کامل دارد.

1	3	2	3	3	3	3	3	4	2
4	1	4	2	2	3	2	3	4	4
2	3	1	3	3	3	3	3	4	2
4	2	4	1	2	3	2	3	4	4
4	2	4	2	1	3	1	3	4	4
4	4	4	4	4	1	4	1	4	4
4	2	4	2	1	3	1	3	4	4
4	4	4	4	4	1	4	1	4	4
3	3	3	3	3	3	3	3	1	3
2	3	2	3	3	3	3	3	4	1

### بررسی ضروری بودن واکنش ها به استدلال از روابط جفت شدگی:

گفتیم برای این که یک واکنش ضروری باشد یعنی باید در صورتی که شار آن واکنش  $\bullet$  شود شار بایومس هم  $\bullet$  شود. این یعنی از سمت بایومس به آن واکنش جفت شدگی جهت دار خواهیم داشت. یعنی در سطر نظیر بایومس، درایه های نظیر یک واکنش ضروری باید مقدار ۳ را داشته باشد.

با توجه به اینکه در لیست ۱۰ تایی reactions، واکنش biomass نهمین واکنش است سطر ۹ را بررسی میکنیم. درایه ی نظیر تمام واکنش ها (به جز خود بایومس) ۳ هست این یعنی همه ی واکنش های لیست reactions واکنش های ضروری هستند. این یافته با یافته ی حاصل از بخش ۱ هم مطابقت دارد چرا که تمام واکنش های فایل reactions در میان واکنش های ضروری پیدا شده در قسمت اول حضور دارند.

ضمیمه

خروجی کد Q1\_2

PFK and PGI : 0.0

PFK and PGL : 0.0

PFK and CO2t : 0.0

PFK and RPE : 0.0

PFK and CYTBD : 0.0

PFK and TALA : 0.0

PFK and TKT1 : 0.0

PFK and TKT2 : 0.0

PFK and EX\_co2\_e : 0.0

PFK and EX\_h2o\_e : 0.0

PFK and EX\_o2\_e : 0.0

PFK and G6PDH2r : 0.0

PFK and GND : 0.0

PFK and H2Ot : 0.0

PFK and NADH16 : 0.0

PFK and NADTRHD : 0.0

PFK and O2t : 0.0

PFL and EX\_h2o\_e : 0.0

PFL and H2Ot : 0.0

PFL and NADH16 : 0.0

PFL and PDH : 0.0

PGI and PGL : 0.0

PGI and RPE : 0.0

PGI and CYTBD : 0.0

PGI and TALA : 0.0

PGI and TKT1 : 0.0

PGI and TKT2 : 0.0

PGI and TPI : 0.0

PGI and EX\_o2\_e : 0.0

PGI and FBA : 0.0

PGI and G6PDH2r : 0.0

PGI and GND : 0.0

PGI and NADH16 : 0.0

PGI and NADTRHD : 0.0

PGI and O2t : 0.0

PGL and RPE : 0.0

PGL and TALA : 0.0

PGL and TKT1 : 0.0

PGL and TKT2 : 0.0

PGL and TPI : 0.0

PGL and FBA : 0.0

ACALD and EX\_h2o\_e : 0.0

ACALD and H2Ot : 0.0

ALCD2x and EX\_h2o\_e : 0.0

ALCD2x and H2Ot : 0.0

PPC and CO2t : 0.0

PPC and CYTBD : 0.0

PPC and SUCDi : 0.0

PPC and EX\_co2\_e : 0.0

PPC and EX\_o2\_e : 0.0

PPC and FUM : 0.0

PPC and ICL : 0.0

PPC and MALS : 0.0

PPC and MDH : 0.0

PPC and O2t : 0.0

CO2t and TPI : 0.0

CO2t and FBA : 0.0

RPE and TALA : 0.0

RPE and TKT1 : 0.0

RPE and TKT2 : 0.0

RPE and TPI : 0.0

RPE and FBA : 0.0

RPE and G6PDH2r : 0.0

RPE and GND : 0.0

CYTBD and TPI : 0.0

CYTBD and FBA : 0.0

ETOHt2r and EX\_h2o\_e : 0.0

ETOHt2r and H2Ot : 0.0

TALA and TKT2 : 0.0

TALA and TPI : 0.0

TALA and FBA : 0.0

TALA and G6PDH2r : 0.0

TALA and GND : 0.0

TKT1 and TKT2 : 0.0

TKT1 and TPI : 0.0

TKT1 and FBA : 0.0

TKT1 and G6PDH2r : 0.0

TKT1 and GND : 0.0

TKT2 and TPI : 0.0

TKT2 and FBA : 0.0

TKT2 and G6PDH2r : 0.0

TKT2 and GND : 0.0

TPI and EX\_co2\_e : 0.0

TPI and EX\_h2o\_e : 0.0

TPI and EX\_o2\_e : 0.0

TPI and G6PDH2r : 0.0

TPI and GND : 0.0

TPI and H2Ot : 0.0

TPI and NADH16 : 0.0

TPI and NADTRHD : 0.0

TPI and O2t : 0.0

EX\_co2\_e and FBA : 0.0

EX\_etoh\_e and EX\_h2o\_e : 0.0

EX\_etoh\_e and H2Ot : 0.0

EX\_for\_e and EX\_h2o\_e : 0.0

EX\_for\_e and H2Ot : 0.0

EX\_for\_e and NADH16 : 0.0

EX\_for\_e and PDH : 0.0

EX\_h2o\_e and FBA : 0.0

EX\_h2o\_e and FORt : 0.0

EX\_o2\_e and FBA : 0.0

FBA and G6PDH2r : 0.0

FBA and GND : 0.0

FBA and H2Ot : 0.0

FBA and NADH16 : 0.0

FBA and NADTRHD : 0.0

FBA and O2t : 0.0

FORt and H2Ot : 0.0

FORt and NADH16 : 0.0

FORt and PDH : 0.0

GLUDy and GLUSy : 0.0

count: 111