

ANALISI DI RETI METABOLICHE BASATA SU PROPRIETÀ DI CONNESSIONE

CANDIDATO Massimo Nocentini, massimo.nocentini@gmail.com

RELATORE Pierluigi Crescenzi, pierluigi.crescenzi@unifi.it

Il nostro elaborato tratta l'analisi di reti metaboliche e si collega a una variante del problema di enumerare tutti i sotto grafi aciclici di un grafo orientato, aggiungendo il vincolo che solo un determinato sottoinsieme \mathbb{B} di vertici possono avere il ruolo di sorgente o di pozzo nei DAG enumerati. Ogni DAG che soddisfa tale condizione è chiamato *storia* e si vuole "raccontare" tutte le possibili storie dato un grafo orientato e l'insieme \mathbb{B} . Modellando una rete metabolica con la struttura astratta grafo è possibile ricercare le storie in essa contenute: il nostro lavoro verifica se è possibile costruire l'insieme \mathbb{B} in modo automatico per condurre tale ricerca.

Per raggiungere il nostro obiettivo abbiamo dapprima costruito il grafo da studiare a partire dalla rete metabolica codificata con il linguaggio *SBML* e, successivamente, ne abbiamo analizzato la connettività, ricercando le sue componenti fortemente connesse. Una volta costruito il "meta grafo" che ha come vertici le componenti fortemente connesse e come archi gli archi che collegano metaboliti contenuti in componenti diverse (evitando duplicazioni), assegniamo un ruolo ad ogni componente c : se c è *sorgente* o *pozzo* allora possiamo inserire i vertici che la compongono nell'insieme \mathbb{B} .

Per automatizzare questo processo abbiamo prodotto una libreria, sviluppata con il linguaggio Java, nella quale vengono implementati gli algoritmi per la visita in profondità e per la ricerca delle componenti fortemente connesse. Questa libreria non è orientata ad essere utilizzata come un programma a se stante, bensì mira ad un utilizzo programmatico ed estendibile. Nella libreria è presente anche una maschera realizzata utilizzando il framework *SWING* per la renderizzazione di un particolare insieme di risultati, relativi alla composizione delle componenti fortemente connesse, utile per indagare la distribuzione dei ruoli ai metaboliti considerando un insieme di reti metaboliche.

Abbiamo applicato le nostre implementazioni a due insiemi di reti metaboliche, analizzando circa 170 modelli contenenti circa 12500 metaboliti, osservando che se ci limitiamo ad indagare una singola rete metabolica allora il nostro processo è in grado di costruire l'insieme \mathbb{B} , mentre se consideriamo un insieme di reti metaboliche la costruzione di \mathbb{B} è affetta da errori in quanto esistono metaboliti che "interpretano" un ruolo diverso in modelli diversi.