

# Exercise Sheet 3

June 12, 2015

## Exercise 1. *Homework*

4 P.

Schreibe ein Programm in MATLAB oder OCTAVE, das, basierend auf dem Algorithmus von Luis De Figueredo, die kürzesten EFMs berechnet.

Die Spezifikationen des Programms sind:

### INPUT:

- **Ein metabolisches Netzwerk:** Einen struct in einem `.mat`-Datei, welches `network` heißt, mit:
  - S:** die stöchiometrische Matrix
  - rev:** der Reversibilitäts-Vektor ( $rev(i) = 0$ : Reaktion  $i$  ist nicht reversibel,  $rev(i) = 1$ : Reaktion  $i$  ist reversibel)
  - rxns:** Namen der Reaktionen
  - lb:** untere Schranken
  - ub:** obere Schranken
  - description:** Name des Netzwerks
- **Die Iterationstiefe:** Die Anzahl der zu berechnenden EFMs.

### TASK:

Basierend auf dem Algorithmus von Luis De Figueredo et. al sollen iterativ die kürzesten EFMs berechnet werden. Sind weniger als die vorgegebene Anzahl an EFMs in dem Netzwerk vorhanden, soll die maximale Anzahl berechnet werden und ein Hinweis ausgegeben werden, dass es die gewünschte Anzahl an EFMs nicht gibt.

### OUTPUT:

Insgesamt sollen zwei `.mat`-Dateien gespeichert werden:

- **fluxes:** In dieser `.mat`-Datei werden die EFMs als Flussvektoren in den Spalten gespeichert: Für jede EFM einen Vektor, der so viele Einträge hat, wie es Reaktionen gibt. Die Einträge entsprechen den Reaktionsraten. Insgesamt soll eine Matrix gespeichert werden. Die Anzahl der Zeilen entspricht der

Anzahl der Reaktionen und die Anzahl der Spalten entspricht der Anzahl der berechneten EFMs.

**supports:** In der zweiten `.mat`-Datei werden nur die Reaktionen gespeichert, die Fluss tragen, und in welche Richtung sie dies tun: Für jede EFM gibt es einen Vektor, der so viele Einträge hat, wie es aktive Reaktionen in dieser EFM gibt. Die Einträge sind die Indizes der jeweiligen Reaktionen. Hat die Reaktion eine negative Reaktionsrate, so ist der Index mit einem Minuszeichen versehen. Insgesamt soll ein Cell-Array gespeichert werden. Der  $i$ -te Eintrag dieses Arrays ist die  $i$ -te EFM.

Send the program until Thursday, 18th, 11:00 p.m. to [Therese.Lorenz@fu-berlin.de](mailto:Therese.Lorenz@fu-berlin.de).