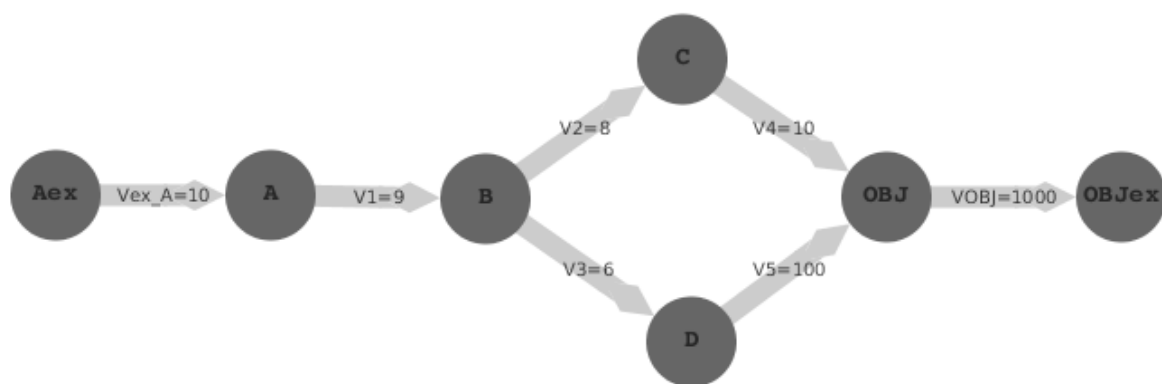


## Rapport de TP Modélisation du réseau métabolique

Ludovic.Cottret@toulouse.inra.fr

### 1. Modèle jouet 1



b)

	RA_e						
	x	R1	R2	R3	R4	R5	ROBJ
Aex	-1						
A	1	-1					
B		1	-1	-1			
C			1		-1		
D				1		-1	
OBJ					1	1	-1
OBJex							1

c)

$$A \rightarrow dA/dt = V_{ex\_A} - V_1 = 0$$

$$B \rightarrow dB/dt = V_1 - (V_2 + V_3) = 0$$

$$C \rightarrow dC/dt = V_2 - V_4 = 0$$

$$D \rightarrow dD/dt = V_3 - V_5 = 0$$

$$OBJ \rightarrow dOBJ/dt = V_4 + V_5 - V_{OBJ} = 0$$

**d)**

Maximize

VOBJ

Subject to

$$C1 : Vex\_A - V1 = 0$$

$$C2 : V1 - (V2 + V3) = 0$$

$$C3 : V2 - V4 = 0$$

$$C4 : V3 - V5 = 0$$

$$C5 : V4 + V5 - VOBJ = 0$$

Bounds

$$Vex\_A \leq 10$$

$$V1 \leq 9$$

$$V2 \leq 8$$

$$V3 \leq 6$$

$$V4 \leq 10$$

$$V5 \leq 100$$

$$VOBJ \leq 1000$$

**e)**

$$Vex\_A - V1 = 0 \rightarrow V1 \text{ max} = 9 \text{ donc } Vex\_A \text{ max} = 9$$

$$V1 - (V2 + V3) = 0 \rightarrow V2 + V3 = 9, \text{ plusieurs possibilités, je choisis } V2 = 8 \text{ et } V3 = 1$$

$$V2 - V4 = 0 \rightarrow V4 = 8$$

$$V3 - V5 = 0 \rightarrow V5 = 1$$

$$V4 + V5 - VOBJ = 0 \rightarrow \mathbf{VOBJ = 9}$$

f)

$V_5=0$

$$V_3 - V_5 = 0 \rightarrow V_3 = 0$$

$$V_1 - (V_2 + V_3) = 0 \rightarrow V_1 = V_2 = 8$$

$$V_2 - V_4 = 0 \rightarrow V_4 = 8$$

$$V4+V5 -V_{OBJ}=0 \rightarrow V_{OBJ}=8$$

## 2. Modèle jouet 2

**b)**

[illegible]

**c)**

$$dA/dt = VA_{ex} - V1 = 0$$

$$dB/dt = 2V1 - (V2 + V6 + V14) = 0$$

$$dC/dt = 2V2 - (2V3 + V10) = 0$$

$$dD/dt = 2V2 + V10 - (V7 + V11) = 0$$

$$dE/dt = 2V11 - (V3 + V12) = 0$$

$$dF/dt = V9 - VF_{ex} = 0$$

$$dG/dt = VG_{ex} - 2V11 = 0$$

$$dH/dt = V12 - V2 = 0$$

$$dI/dt = VI_{ex} - V12 = 0$$

$$dJ/dt = V3 + V4 + V14 - 3V5 = 0$$

$$dK/dt = VK_{ex} - V4 = 0$$

$$dL/dt = 2V5 - V8 - VI_{ex} = 0$$

$$dM/dt = V7 - VM_{ex} = 0$$

$$dN/dt = V13 - 4V8 = 0$$

$$dO/dt = VO_{ex} - V13 = 0$$

$$dP/dt = VP_{ex} - V13 = 0$$

$$dQ/dt = V6 - VQ_{ex} = 0$$

**d)**

M1 ne vérifie pas l'état d'équilibre.

Transformations pour atteindre l'équilibre :

$$R1=1$$

$$R6=2$$

$$R11=4$$

$$R9=8$$

$$R13=4$$

$$R8=1$$

M2 ne vérifie pas l'état d'équilibre.

Transformations pour atteindre l'équilibre :

$$R1=1$$

$$R6=2$$

$$R7=4$$

$$R13=8$$

$$R8=2$$

M3 est à l'équilibre

M4 ne vérifie pas l'état d'équilibre.

Transformations pour atteindre l'équilibre :

$$R1=1$$

$$R6=2$$

$$R7=3$$

$$R11=1$$

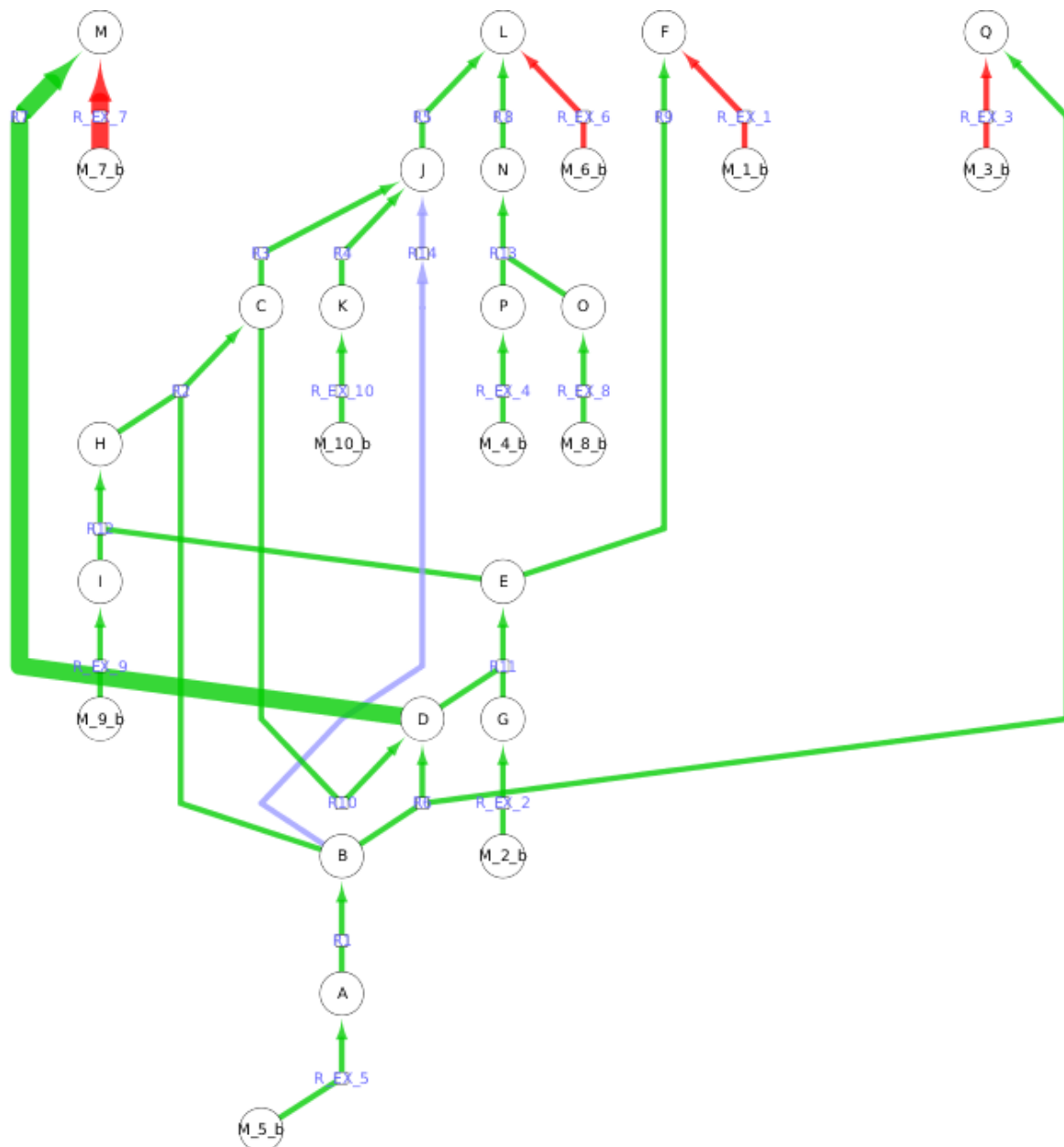
$$R9=1$$

R12=1  
R4=3  
R5=1  
R13=4  
R8=1

f)

La valeur maximale de R7 est 5

g)



Les réactions dont la valeur de flux est la plus contrainte :

R7 avec minflux=5 et maxflux=5

R8 avec minflux=0 et maxflux=2,5

La réaction qui est réversible dans ces conditions :

R14 avec minflux=-5 et maxflux=10

## **2. Modèle métabolique d'Escherichia coli**

**b)**

Il y a 22 réactions d'échange permettant d'entrer dans le système (Exchange\_in dans le tableau)

**c)**

Il y a 991 réactions qui ne peuvent porter aucun flux.

**d)**

Le réseau contient 118 métabolites "impasses"

**e)**

Réaction qui correspond à la production de biomasse :

R\_Ec\_biomass\_iAF1260\_core\_59p81M

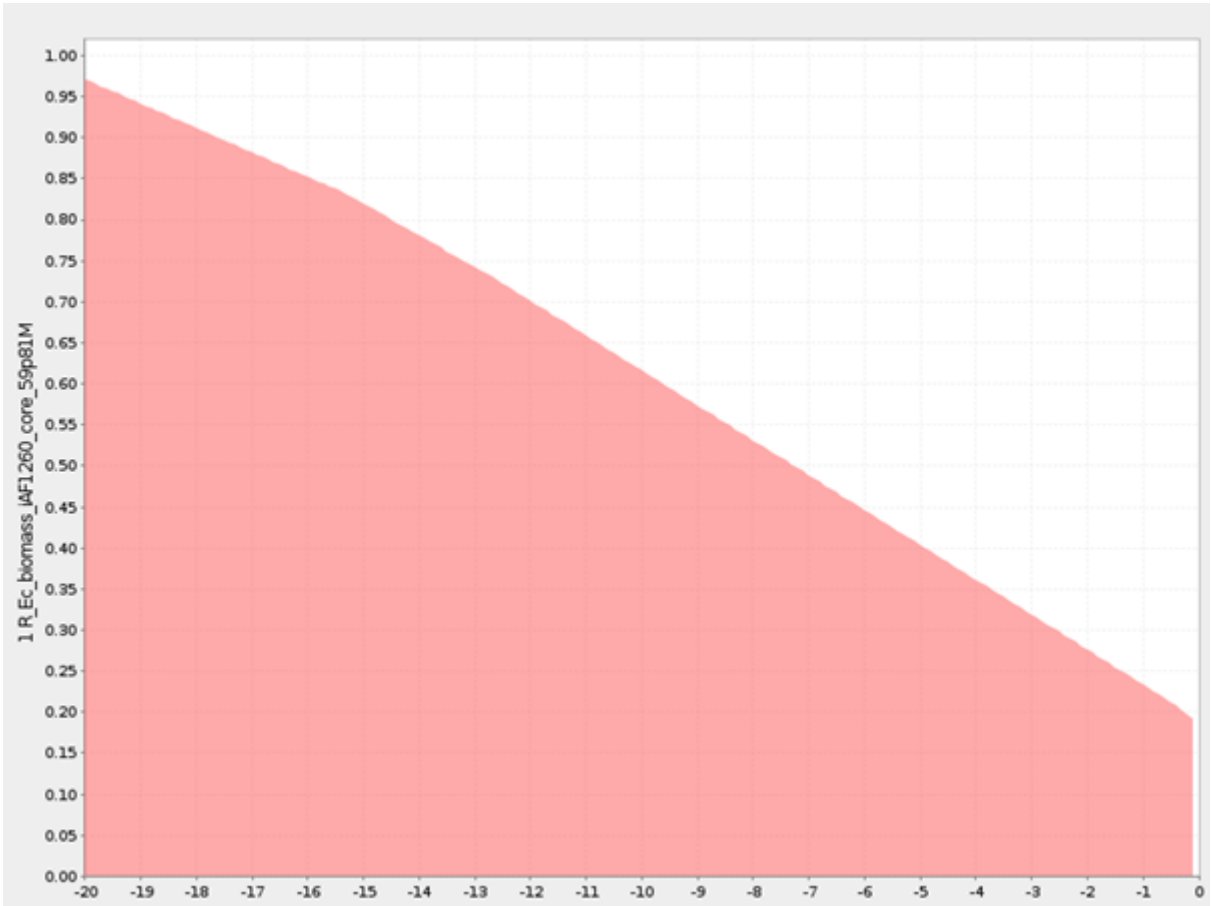
Valeur optimale de la fonction objective: 0.917246

**f)**

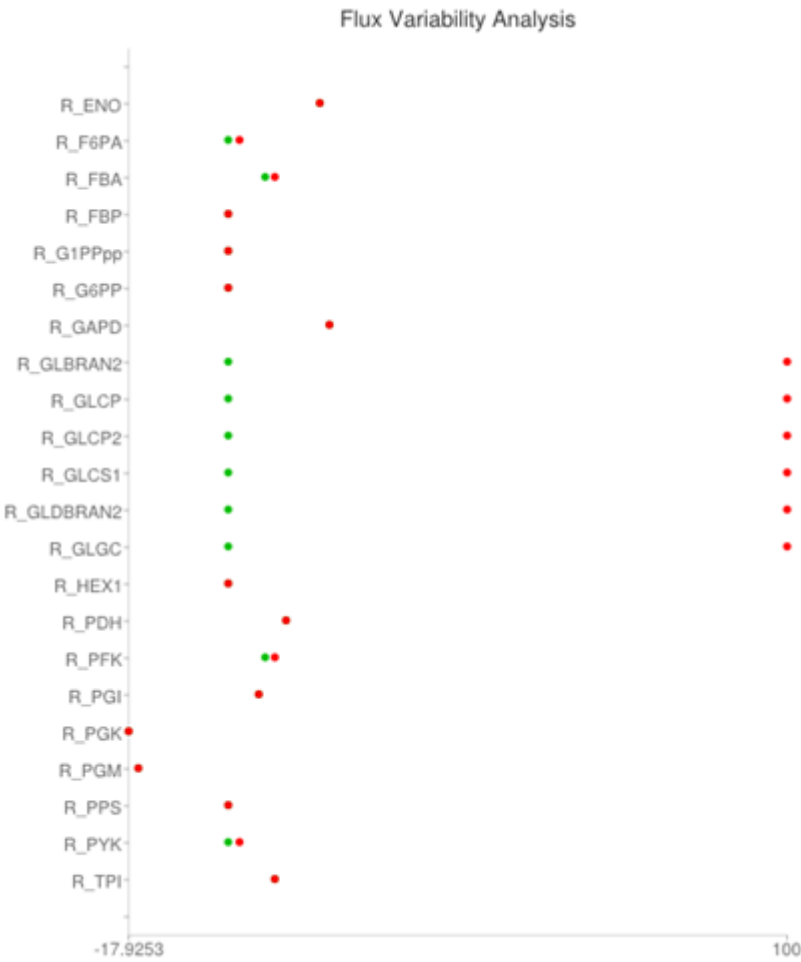
Fonction objective=0 → pas de biomasse produite.

La souche n'est pas capable de pousser sans oxygène.

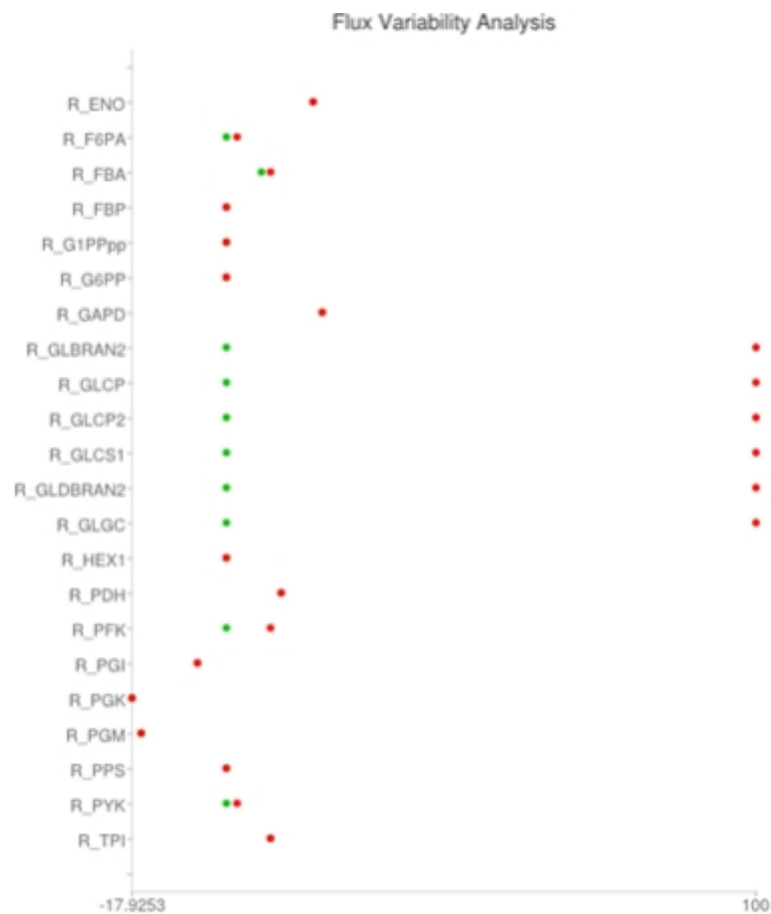
g)



h)



i)



ii)

Réactions activées en utilisant du fructose à la place du glucose :

R\_phosphoenolpyruvate\_synthase

R\_hexokinase\_\_D\_glucoseATP\_\_

R\_glucose\_6\_phosphate\_phosphatase

R\_fructose\_bisphosphatase

R\_6\_phosphogluconate\_dehydratase

R\_2\_dehydro\_3\_deoxy\_phosphogluconate\_aldolase

Réactions désactivées :

Aucune (à part bien sûr la réaction d'échange de glucose)



Réactions dont la valeur de flux devient contrainte :

Aucune, toutes les réactions qui étaient contraintes dans la condition 1 (substrat=glucose) ne le sont plus dans la condition 2 (substrat=fructose).