

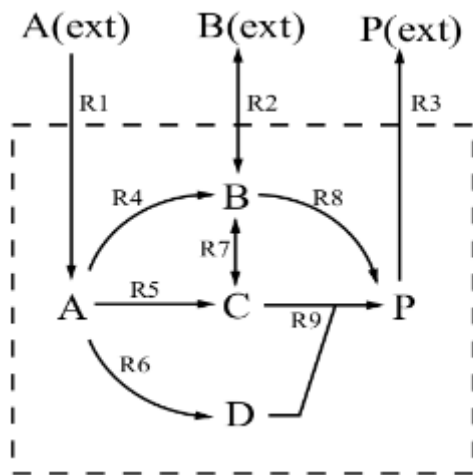
Hands-on Copasi EFM

Hands-on con Copasi

Sitio web: <https://copasi.org/>

Creando un primer modelo

1. Abrimos la herramienta COPASI.
2. Crear el modelo de ejemplo teniendo en cuenta las reacciones reversibles e irreversibles



3. Tenemos que añadir todos los metabolitos y luego indicar que los externos (Aex, Bex y Pex son fijos). Esta paso es clave porque sino los ponemos el espacio de flujos solo tendrá la una solución (la solución trivial $v = 0$). Los meabolitos externos represetan pues las fuentes y sumideros y están por tando fuera de la condición de contorno del sistema.

COPASI 4.42 (Build 284)

File Edit Tools Window Help

Concentrations

COPASI

- Model
 - Biochemical
 - Compartments [1]
 - Species [8]
 - A
 - Aex
 - B
 - Bex
 - C
 - D
 - P
 - Pex
 - Reactions [9]
 - R1
 - R2
 - R3
 - R4
 - R5
 - R6
 - R7
 - R8
 - R9

Search:

#	Name	Compartment	Type	Unit	Initial Conc [Un
1	A	compartment	reactions	mol/l	1
2	Aex	compartment	fixed	mol/l	1
3	B	compartment	reactions	mol/l	1
4	Bex	compartment	fixed	mol/l	1
5	P	compartment	reactions	mol/l	1
6	Pex	compartment	fixed	mol/l	1
7	C	compartment	reactions	mol/l	1
8	D	compartment	reactions	mol/l	1
	New Species	compartment	reactions	mol/l	1

4. Creamos las reacciones usando ">" para definir las irreversibles y "=" para las reversibles

COPASI 4.42 (Build 284)

File Edit Tools Window Help

Concentrations

COPASI

- Model
 - Biochemical
 - Compartments [1]
 - Species [8]
 - A
 - Aex
 - B
 - Bex
 - C
 - D
 - P
 - Pex
 - Reactions [9]
 - R1
 - R2
 - R3
 - R4
 - R5
 - R6
 - R7
 - R8
 - R9

Search:

#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mol/s]	N
1	R1	Aex -> A	Mass action (irreversible)	0	
2	R2	Bex = B	Mass action (reversible)	0	
3	R3	P -> Pex	Mass action (irreversible)	0	
4	R4	A -> B	Mass action (irreversible)	0	
5	R5	A -> C	Mass action (irreversible)	0	
6	R6	A -> D	Mass action (irreversible)	0	
7	R7	B -> C	Mass action (irreversible)	0	
8	R8	B -> P	Mass action (irreversible)	0	
9	R9	C + D -> P	Mass action (irreversible)	0	
	New Reaction				

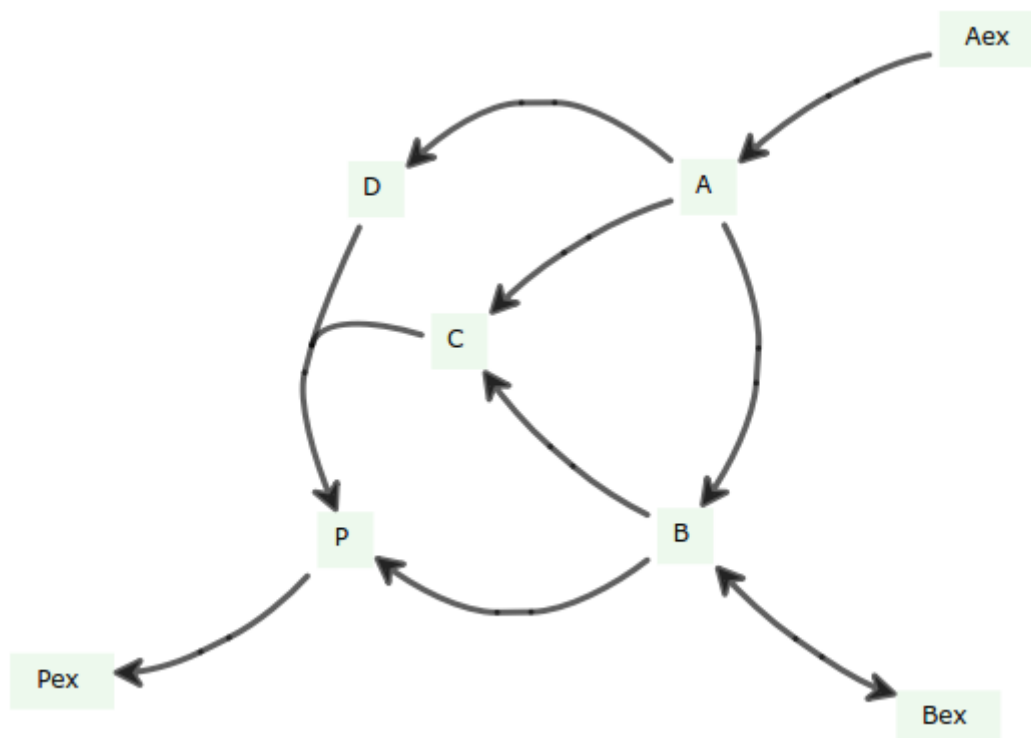
5. Podemos visualizar la matriz estequiométrica

"Model > Mathematical > Matrices"

	(R1)	(R2)	(R3)	(R4)	(R5)	(R6)	(R7)	(R8)	(R9)
A	1	0	0	-1	-1	-1	0	0	0
B	0	1	0	1	0	0	-1	-1	0
P	0	0	-1	0	0	0	0	1	1
C	0	0	0	0	1	0	1	0	-1
D	0	0	0	0	0	1	0	0	-1

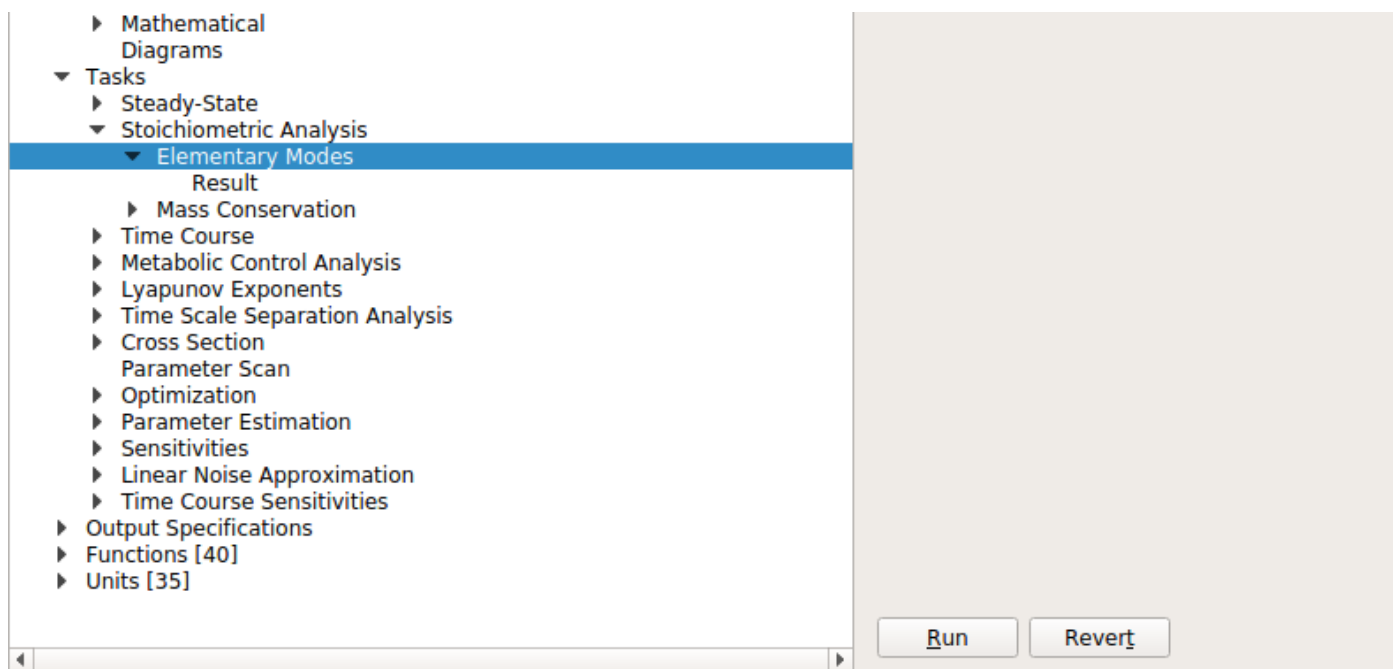
6. Podemos visualizar el modelo haciendo

"Model > Diagram"



Para calcular los modos de flujo elemental elegimos:

"Task > Stoichiometric Analysis > Elementary Modes" y le damos a Run



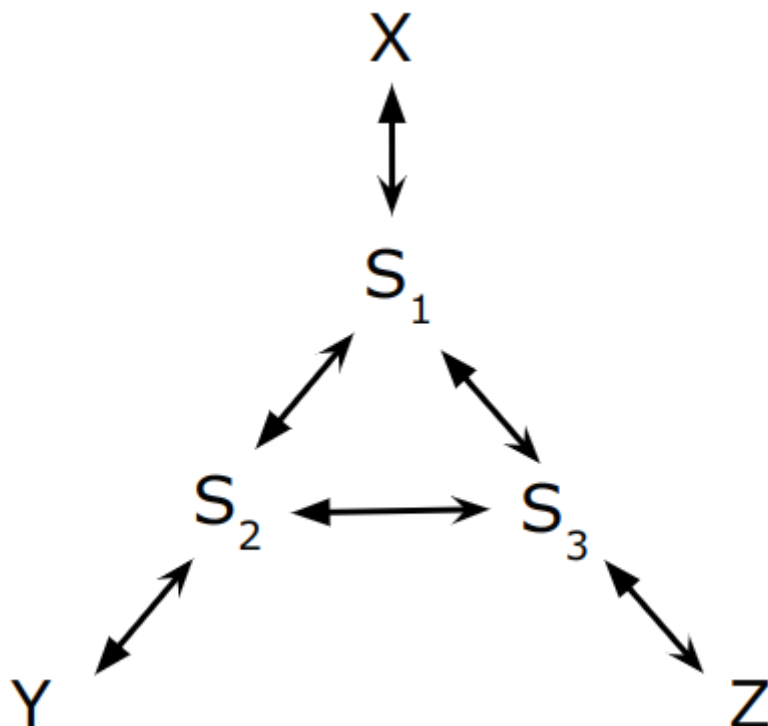
Ejercicio 1

Empleando el modelo creado

- 1.1. Calcular los modos de flujo elementa: ¿Cuántos hay?
- 1.2. Encontrar una intervención mínima de KO que impida las producciones P.
- 1.3. Encuentre una inconsistencia del balance de masa en el modelo.

Ejercicio 2

Crear el siguiente modelo:



2.1. Calcular los modos de flujo elemental. ¿Cuántos hay?

2.2. Identificar el modo que viola el segundo principio de la termodinámica.