

Avaluable 3

Introducció a la simulació en CoPaSi

Exercicis

Recorda. Nom de fitxer: **nom_cognom_AV3.cps**

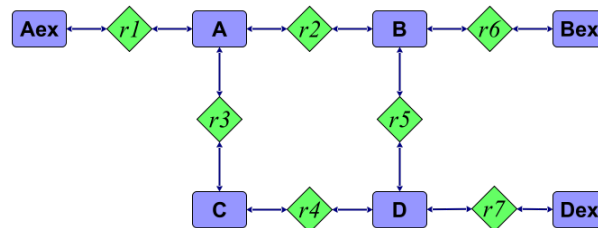
- 1) Un conjunt de reaccions metabòliques es poden descriure amb les següents reaccions:

R1: Aex = A ;
 R2: A = B ;
 R3: A = C ;
 R4: C = D ;
 R5: B = D ;
 R6: B = Bex;
 R7: D = Dex;

On Aex, Bex i Dex representen metabòlits externs o al límit del sistema a estudiar.

Totes les cinètiques son del tipus reversible equivalent a Michaelis-Menten i inclouen la constant d'equilibri com a paràmetre. Totes les unitats en escala mmol, litre, minut, amb: kms i kmp = 0.1. Vf=10. Les constants d'equilibri de cada reacció són: Keq1: 10 , Keq2: 15, Keq3: 4; Keq4: 6, Keq5: 1.6, Keq6:10, Keq7:10.

Valors inicials de tots els metabòlits :1.



- Crea el model del sistema fent servir l'eina COPASI. Introdueix les variables globals necessàries per calcular el desequilibri les ΔG de les reaccions a 24 °C (R: 0.008314 kJ/(mol·K)).
- Defineix tots els metabòlits amb el tipus de simulació 'reactions'. Executa la tasca corresponent i explica a quin tipus d'estat s'arribarà, **perquè és aquest per al CoPaSi i què ho confirma per un biotecnòleg?** (fitxer 1)
- Canvia el tipus de simulació dels metabòlits externs (Aex, Bex, Dex) a 'fixed'. Executa la tasca corresponent i explica a quin tipus d'estat s'arribarà, **perquè és aquest per al CoPaSi i què ho confirma per un biotecnòleg?** Quina relació hi ha entre la direcció del flux i la ΔG ?.
- Quants modes elementals hi ha?. N'hi ha algun que sigui possible matemàticament tal com està definit el sistema, però improbable o impossible bioquímicament? (fitxer 2)
- Posa les concentracions dels metabòlits obtinguts al final de la simulació de l'apartat 'c)' com a valors inicials de cada metabòlit. **Multipliqua per 10 la concentració de l'enzim de r6.** Fes una simulació de 2 minuts (100 punts) i representa en una gràfica l'evolució dels metabòlits A, B, C i D. (fitxer 3)
- Per al cas de l'apartat 'e)', com han canviat en % el flux i la ΔG de la reacció **r6** al augmentar l'enzim respecte del cas de l'apartat 'c)' i què ha passat respecte de l'equilibri. Torna a multiplicar per 10 la concentració del mateix enzim. Quin % de canvi de flux es dona ara. **Com ho explicaries?** (fitxer 4)