

Pràctica 5

Introducció a la simulació en Octave/Matlab

Exercicis

1.-	<p>Redueix el següent sistema d'equacions a una equació en funció de x i resol l'equació resultant utilitzant la funció 'fzero'. Després determina al valor de y.</p> $\sqrt{5y + 25} = x$ $y = \sin(0.1x^2)$ <p>Utilitza la funció 'broyden' o 'fsolve' per resoldre simultàniament les equacions i compara posteriorment les solucions. Fes servir una aproximació inicial $x = 10$ per fzero i aproximacions inicials de $x = 10$ i $y = 10$ per al broyden i fsolve, amb una precisió de $1E-5$ en ambdós casos.</p> <p>Compara el número d'iteracions necessàries amb cada mètode.</p>
2.-	<p>Un RDTA es carrega inicialment amb una mescla equimolar de dos compostos A y B (concentració inicial de A i de B 2.5 Kmol/m^3). A aquest reactor es produeixen dues reaccions químiques, amb les següents estequiometries i constants termodinàmiques d'equilibri.</p> $A \leftrightarrow 2C \quad K_{eq1} = 3.5$ $B + C \leftrightarrow D \quad K_{eq2} = 1.4$ <p>Per tal d'obtenir les concentracions de les quatre espècies a l'equilibri, desenvolupa el sistema de dues equacions i dues incògnites i resol el sistema.</p> <p>Nota: Vigila que les concentracions obtingudes siguin possibles.</p>
3.-	<p>Les equacions de les cinètiques enzimàtiques, es deriven a partir de les equacions de balanç que resulten d'un mecanisme de reacció i de l'aplicació de simplificacions. El mecanisme de reacció proposat per Michaelis-Menten es representa amb les següents reaccions elementals:</p> $E + S \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} ES \xrightarrow{k_2} E + P$ <p>Escriu en una funció les equacions diferencials de balanç per cada component.</p> <p>Considera com a valors dels paràmetres $k_1: 20 \text{ l} \cdot \mu\text{mol}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$, $k_{-1}: 1 \text{ min}^{-1}$ $k_2: 10 \text{ min}^{-1}$. Fes una simulació per a un temps de 1.4 minuts amb valors inicials de $S_0: 10$ i $E_0: 1 \mu\text{mol}$.</p> <p>Per derivar l'equació clàssica de la cinètica de Michaelis-Menten es poden aplicar tant la suposició d'equilibri ràpid de la primera reacció com la suposició d'estar en estat estacionari assumida per Briggs-Haldane amb el que s'arriba a la mateixa equació. En ambdós cassos es suposa que la concentració de substrat lliure és igual a la del total de substrat no convertit. Equivalent a assumir que hi ha molt més substrat que enzim (per tant la diferència de concentracions entre substrat lliure i total no convertit és negligible) i implica també que els llocs actius de l'enzim estan sempre totalment ocupats.</p> <ul style="list-style-type: none"> - En base a la simulació feta, per a quin rang de concentracions de S i P o de la relació S/E creus que l'equació de Michaelis-Menten deixa de ser vàlida. - Si la segona reacció és irreversible, quina seria la primera conseqüència al considerar una xarxa d'enzims d'aquest tipus?

	<p>- La derivació de l'equació de Michaelis-Menten indica que:</p> $K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} \text{ i } V_{\max} = k_2 \cdot E_0$ <p>Simula l'evolució de S i P fent servir ara la cinètica de Michaelis-Menten que correspon.</p>
4.-	<p>Un sistema metabòlic model esta format per les reaccions:</p> <p>R1: A -> B R2: B -> C R3: B -> D</p> <p>Cada reacció es pot representar per una cinètica Michaelis-Menten, amb totes les $K_m=0.1\text{mmol/l}$ i les velocitats màximes iguals a $V_{mr1}=10$, $V_{mr2}=5$, $V_{mr3}=2.5$ (mmol/(l·min)).</p> <p>Crea la funció d'equacions diferencials de manera que la derivada (sortida de la funció) es calculi com una sola operació $S \cdot v$, on S sigui la matriu estequiomètrica i v el vector de velocitats de reacció.</p> <p>Simula l'evolució del sistema durant 1 minut partint d'una concentració inicial de A:1 (mmol/l) i zero les altres. Dibuixa el resultat i explica perquè s'obtenen aquestes concentracions finals.</p> <p>Afegeix una entrada constant de A de 0.05 mmol/(l·min) i dues sortides de C i D proporcionals a la concentració de cadascun d'aquests amb una constant de proporcionalitat de 0.1 min^{-1}). Repeteix la simulació per un temps de 3 minuts i dibuixa-la. Troba les concentracions a l'estat estacionari.</p>