

Pràctica 6

Introducció a la simulació en Octave/Matlab

Exercicis

1.-	<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> $E + S \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} ES \xrightarrow{k_2} E + P$ <ul style="list-style-type: none"> - Escriu en una funció les equacions diferencials de balanç per cada component. 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>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 clàssica. En ambdós casos 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 a velocitat màxima.</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? - La derivació de l'equació de Michaelis-Menten indica que: $K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} \quad ; \quad V_{\max} = k_2 \cdot E_0$ - Simula l'evolució de S i P fent servir ara la cinètica de Michaelis-Menten clàssica que li correspon.
2.-	<p>Un sistema metabòlic model esta format per les reaccions:</p> <p style="text-align: center;">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 $V_{mr1}=10$, $V_{mr2}=5$, $V_{mr3}=2.5$ ($\text{mmol}/(\text{l} \cdot \text{min})$).</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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. - 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. - Afegeix una entrada constant de A de $0.05 \text{ mmol}/(\text{l} \cdot \text{min})$ 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.

