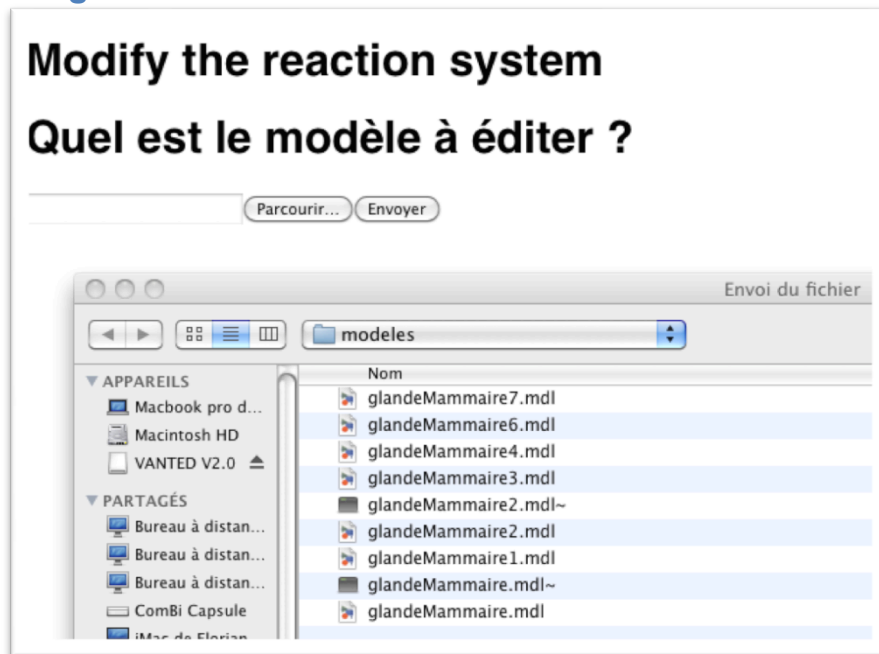


Utilisation de l'éditeur de modèle (tutoriel rapide)

Charger son modèle



Edition du modèle

Il y a deux parties **indépendantes** pour l'édition du modèle. La première partie consiste à éditer la stoechiométrie et les noms et identifiants de réactions. La seconde consiste à modifier l'ordre des réactions dans le modèle et des métabolites (en fait toutes les colonnes de la matrice stoechiométrique) et les noms des métabolites (ou donc des colonnes). Il est toutefois possible de faire les deux choses en même temps mais attention, les changements de noms de métabolites ne sont pas répercutés dans la première partie du traitement, il faudrait donc pour chaque changement de nom de métabolite en tenir compte dans l'écriture de la stoechiométrie, c'est fastidieux et inutile car beaucoup de choses sont automatiques en le faisant comme ça :

- modifier si besoin les noms de réaction et la stoechiométrie en utilisant les anciens noms de métabolites, enregistrer les modifications et les télécharger, puis rééditer le nouveau fichier pour changer les noms des métabolites **ou**
- faire le contraire : modifier les noms des métabolites, enregistrer les modifications et les télécharger, puis rééditer le nouveau fichier et éditer les stoechiométries avec les nouveaux noms (ils ont été mis à jour pour décrire la stoechiométrie...)

Modification du modèle (stoechiométrie et noms de réactions)

Pour cela, il faut choisir la réaction à éditer dans le menu déroulant. L'identifiant est un entier qui est censé être unique, le nom est n'importe quelle chaîne de caractères qui "décrit" la réaction. L'équation stoechiométrique doit respecter une syntaxe assez précise (cf l'exemple suivant qui me semble parlant). Quand toutes les informations liées à la réaction sont modifiées, il ne faut pas oublier de cliquer sur le bouton "modifier" pour les prendre en compte. Il ne faut oublier "d'enregistrer les modifications".

Modify the reaction system

R16:NADHm oxydation

Identifiant	16
Nom	NADHm oxydation
Equation	NADHm + 0.5 * O2 => 3 * ATP

Modifier

Enregistrer les modification

and/or Modify the reaction/metabolites order

Modification de l'ordre des réactions ou métabolites

Pour modifier l'ordre des réactions, il suffit de sélectionner une ou plusieurs (en utilisant les touches SHIFT ou CTRL) réactions et utiliser les boutons "up" ou "down" pour les faire monter ou descendre. Il ne faut oublier "d'enregistrer les modifications".

and/or Modify the reaction/metabolites order

R1 . GLC → G6P	eq.
R2 . glucose entry	type
R3 . G6P → GLC	type2
R4 . lactose synthesis	primer
R5 . G6P → G3P	Cn
R6 . G3P → PYR	réaction
R7 . G6P → GLC	ATP
R8 . G3P → G6P	NADHc
R9 . PYR → ACoAm	NADHm
R10 . OAA + ACoAm → αKG	FADH2
R11 . αKG → OAA	NADPH
R12 . serine catabolism	CO2
R13 . PYR → OAA	O2
R14 . OAA → PYR	NH3
R15 . OAA → G3P	OAA

up down up down edit

Changer le nom d'un métabolite

Il suffit de double cliquer sur le métabolite dont on souhaite changer le nom (ou le sélectionner et appuyer sur le bouton « edit »).