Von der Mathematischen Biologie zur Systembiologie
(Vorlesung Prof. Dr. J. Timmer)

Aufgabenzettel Nr. 7

Aufgabe 11 (Übung): Enzymdynamik

Implementieren Sie die Enzymdynamik

$$S + E \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} C \xrightarrow{k_2} P + E.$$

i.) In voller Schönheit des *Massenwirkungsgesetzes*:

$$\dot{s} = k_{-1} \cdot c - k_1 s \cdot e \tag{1}$$
$$\dot{e} = (k_{-1} + k_2) \cdot c - k_1 \cdot s \cdot e \tag{2}$$
$$\dot{c} = k_1 \cdot s \cdot e - (k_{-1} + k_2) \cdot c \tag{3}$$
$$\dot{p} = k_2 \cdot c, \tag{4}$$

ii.) ... in der *Gleichgewichtsapproximation*:

$$\dot{s} = -\dot{p} = -\frac{k_2 \mathrm{e}_T \cdot s}{\frac{k_{-1}}{k_1} + s} \tag{5}$$
$$c = \frac{\mathrm{e}_T \cdot s}{\frac{k_{-1}}{k_1} + s}. \tag{6}$$

Dabei ist e_T die Enzymtotalkonzentration.

iii.) ... und in der *Quasi-Steady-State Approximation*

$$\dot{s} = -\dot{p} = -\frac{k_2 \mathrm{e}_T \cdot s}{\frac{k_{-1}}{k_1} + s} \tag{7}$$
$$c = \frac{\mathrm{e}_T \cdot s}{K_m + s} \quad \text{mit} \quad K_m = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} \tag{8}$$

- Simulieren Sie die drei obigen Dynamiken für die Parameter $k_1 = 0,1$ $k_{-1} = 0,1$ und $k_2 = 0,1$, sowie den Anfangskonzentrationen $e(0) = 10$, $c(0) = 0$ und $s(0) = 10, 20, ..., 100$. Beachten Sie, daß nur die Gleichungen (5) und (7) für s integriert werden müssen. Aus dem Ergebnis ergibt sich jeweils c algebraisch aus (6) und (8).
- Beachten Sie insbesondere die Anfangsphase der Massenwirkungsgesetz-Dynamik.
- Erstelle Sie die Phasenraumdarstellung (s, c) aller Simulationen.
- Was lernt man aus den vorherigen Teilen über schnelles und langsames Verhalten und Näherungen im allgemeinen?