Esercitazione 3

3.1) Cinetica enzimatica: inibizione competitiva.

$$\mathrm{S} + \mathrm{E} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} \mathrm{C}_1 \overset{k_2}{\rightarrow} \mathrm{P} + \mathrm{E}$$

$$\mathrm{E} + \mathrm{I} \underset{k_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftarrows}} \mathrm{C}_2.$$

$$\begin{cases} \dfrac{ds}{dt} = -k_1 se + k_{-1}c_1, \\ \dfrac{di}{dt} = -k_3 ie + k_{-3}c_2, \\ \dfrac{dc_1}{dt} = k_1 se - (k_{-1} + k_2)c_1, \\ \dfrac{dc_2}{dt} = k_3 ie - k_{-3}c_2, \\ e + c_1 + c_2 = e_0, \\ s(0) = s_0, \quad i(0) = i_0, \quad c_1(0) = 0, \quad c_2(0) = 0. \end{cases}$$

- Simulare il sistema dinamico sull'intervallo $[0, 100]$ mediante la subroutine Matlab **ode15s**, dati i seguenti parametri: $s_0 = 5,\ i_0 = 2,\ e_0 = 1,\ k_{-1} = 50,\ k_1 = 102,\ k_2 = 1,\ k_{-3} = 50,\ k_3 = 26$. Settare le options di **ode15s** in modo da avere un'alta accuratezza, cioè

  ```
  options=odeset('RelTol',5.e-13 ,'AbsTol',1.e-13*ones(1,4),'InitialStep',1.e-5);
  ```

- Analizzare graficamente la velocità di formazione del composto $V(s) = k_2 c_1(s)$ per $s \in [0, 2]$.

- Si calcoli l'approssimazione quasi-stazionaria $(\tilde{s},\ \tilde{i},\ \tilde{c}_1,\ \tilde{c}_2)$ del sistema ponendo $dc_1/dt = 0$ e $dc_2/dt = 0$.

- Si valutino gli errori relativi dell'approssimazione quasi-stazionaria su tutto l'intervallo.

- Analizzare graficamente gli errori dell'approssimazione.

- Analizzare graficamente la velocità di formazione del composto nel caso dell'approssimazione quasi-stazionaria e confrontarlo con quella esatta.

3.2) Cinetica enzimatica: inibizione allosterica.

- Simulare il sistema dinamico dell'inibizione allosterica visto a lezione, risolvendo il sistema completo di 5 equazioni differenziali per le funzioni incognite $s(t), x(t), y(t), z(t), i(t)$ sull'intervallo $[0, 100]$ mediante la subroutine Matlab **ode15s**, con in dati iniziali:

$$s(0) = 5,\ x(0) = y(0) = z(0) = 0,\ i(0) = 2.$$

  Si considerino:

  - gli stessi parametri dell'inibizione competitiva

$$k_{-1} = 50,\ k_1 = 102,\ k_{-3} = 50,\ k_3 = 26,\ k_2 = 1,$$

  - la legge di conservazione $e = e_0 - x - y - z$, con $e_0 = 1$,

  - le stesse options sulle tolleranze e vincoli sul passo per avere alta precisione

  options=odeset('RelTol',5.e-13 ,'AbsTol',[1.e-13 1.e-13],'InitialStep',1.e-5,'MaxStep',5).

- Si producano:

  - un plot delle 5 soluzioni in funzione del tempo,

  - un plot della velocitá V in funzione di s e t (curva in 3D)

- Si calcoli l'approssimazione quasi-stazionaria ($\tilde{s},\ \tilde{c}_1,\ \tilde{c}_2,\ \tilde{c}_3,\ \tilde{i}$) del sistema ponendo

$$dc_1/dt = 0,\ dc_2/dt = 0,\ dc_3/dt = 0$$

  ed usando le funzioni Matlab di calcolo simbolico (in particolare le funzioni solve() e simplify()) dopo aver dichiarato le variabili syms.

  - Esprimere la velocitá della reazione allosterica in funzione di s ed i.

  - Confrontarla con la velocitá del sistema completo e dell'approssimazione all'equilibrio.