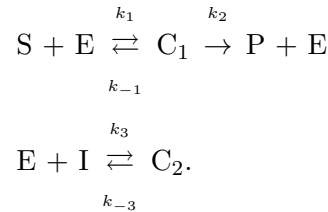


## Esercitazione 3

### 3.1) Cinetica enzimatica: inibizione competitiva.



$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{ds}{dt} = -k_1 s e + k_{-1} c_1, \\ \frac{di}{dt} = -k_3 i e + k_{-3} c_2, \\ \frac{dc_1}{dt} = k_1 s e - (k_{-1} + k_2) c_1, \\ \frac{dc_2}{dt} = k_3 i e - k_{-3} c_2, \\ e + c_1 + c_2 = e_0, \\ s(0) = s_0, \quad i(0) = i_0, \quad c_1(0) = 0, \quad c_2(0) = 0. \end{array} \right.$$

- 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:

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

Si considerino:

- gli stessi parametri dell'inibizione competitiva

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

- 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 velocità  $V$  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

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

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

- Esprimere la velocità della reazione allosterica in funzione di  $s$  ed  $i$ .
- Confrontarla con la velocità del sistema completo e dell'approssimazione all'equilibrio.