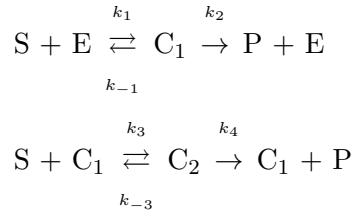


Esercitazione 2

Cinetica enzimatica: cooperatività.

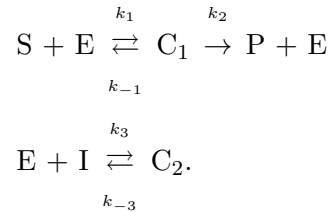


$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{ds}{dt} = -k_1 s e + k_{-1} c_1 - k_3 s c_1 + k_{-3} c_2, \\
 \frac{dc_1}{dt} = k_1 s e - (k_{-1} + k_2) c_1 - k_3 s c_1 + (k_4 + k_{-3}) c_2, \\
 \frac{dc_2}{dt} = k_3 s c_1 - (k_4 + k_{-3}) c_2, \\
 s(0) = s_0, \quad c_1(0) = 0, \quad c_2(0) = 0.
 \end{array} \right.$$

- Simulare il sistema dinamico sull'intervallo $[0, 100]$ mediante la subroutine Matlab **ode15s**, dati i seguenti parametri: $s_0 = 5$, $e_0 = 1$, $k_2 = 1$, $k_4 = 2$. Si considerino i seguenti casi:
 - positive cooperativity: $k_{-1} = 500$, $k_1 = 0.5010$, $k_{-3} = 500$, $k_3 = 502000$
 - independent binding sites: $k_{-1} = 50$, $k_1 = 102$, $k_{-3} = 50$, $k_3 = 26$
 - negative cooperativity: $k_{-1} = 500$, $k_1 = 1002$, $k_{-3} = 500$, $k_3 = 5.02$.
- Analizzare graficamente la velocità di formazione del composto $V(s) = k_2 c_1(s) + k_4 c_2(s)$ per $s \in [0, 2]$.
- Si calcoli l'approssimazione quasi-stazionaria $(\tilde{s}, \tilde{c}_1, \tilde{c}_2)$ 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 considerando come soluzione esatta l'approssimazione numerica fornita da **ode15s** con alta accuratezza richiesta definendo le variabile options ad esempio:


```
options=odeset('RelTol',5.e-13,'AbsTol',[1.e-13 1.e-13],'InitialStep',1.e-5,'MaxStep',5);
```
- Analizzare graficamente gli errori dell'approssimazione.

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.