

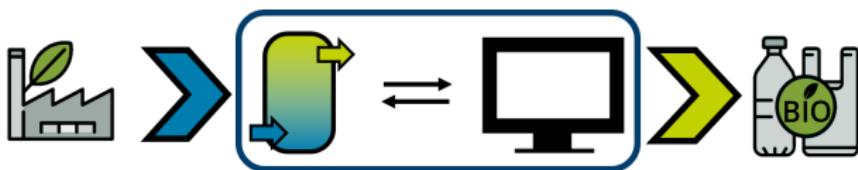
Enzym-Kaskaden-Analyse

Parameterbestimmung und Fehlerfortpflanzung

Antonia Berger

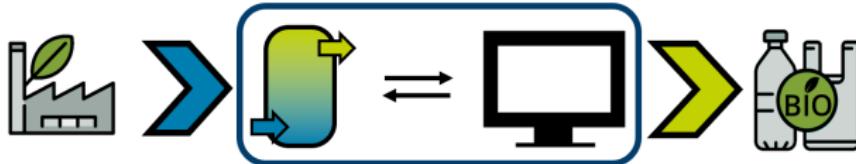
17. November 2025

"Was bisher geschah"



- Modellierung nicht linearer Austauschraten zwischen flüssig-flüssig Phasen
- Rechnen von Austauschraten und Reactionen im equilibrierten Zustand

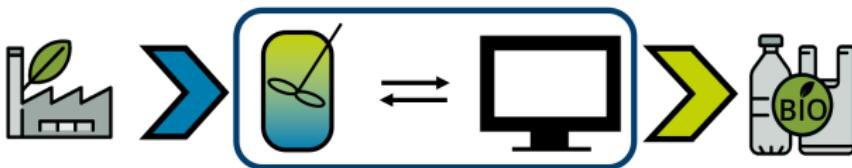
Überblick



Fokus Shift: Vom Downstream Prozess zum Upstream Prozess

- Enzymkinetik
- Parameterbestimmung
- Digitaler Zwilling von Bioreaktoren

Überblick

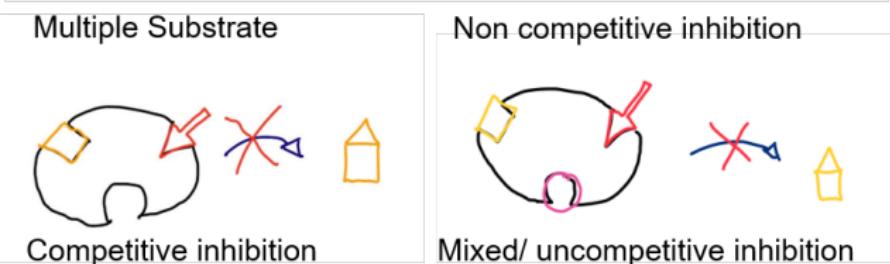
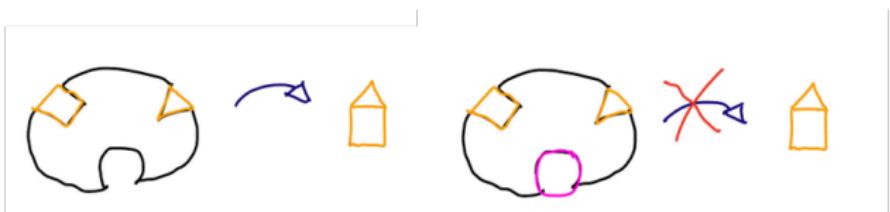


Fokus Shift: Vom Downstream Prozess zum Upstream Prozess

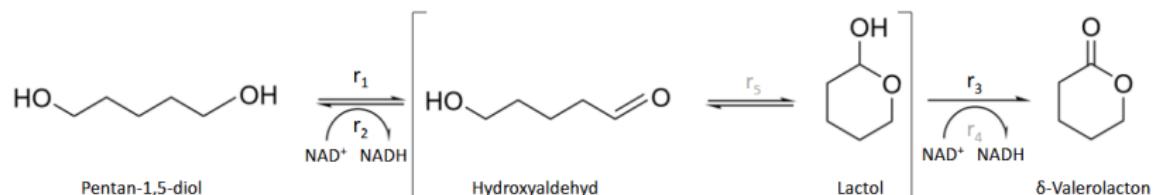
- Enzymkinetik
- Parameterbestimmung
- Digitaler Zwilling von Bioreaktoren

Modellierung der Enzymkinetik

- Multi Substrat Michaelis Menten Kinetik
- Jede Komponente kann als Substrat und Inhibitor wirken



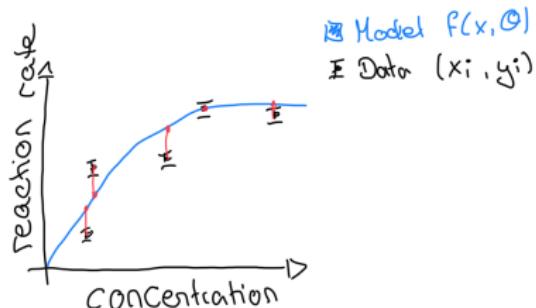
Parameterbestimmung



- Mit Julian zusammen
- Gegeben Daten von Enzymkinetik Experimenten
- Analyse von der Parameterbestimmung mit berücksichtigung Messfehlern

Frage: Wie gut sind meine Parameterbestimmungen unter Berücksichtigung von Messfehlern?

Parameterschätzung aus kinetischen Daten



Model $f(x, \theta)$
Data (x_i, y_i)

Anpassungsparameter

Annahme:

$$y_i - f(x_i, \theta) = \varepsilon_i \text{ mit } \varepsilon_i \sim N(0, \sigma_i^2).$$

Finde θ so dass

$$\min_{\theta} \sum_i ((f(x_i, \theta) - y_i)/\sigma_i)^2$$

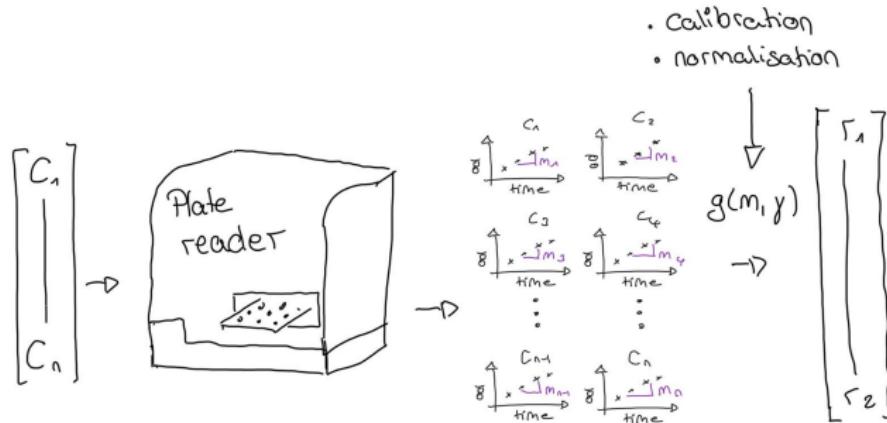
Problem 1

Zwei Substrat Model mit Daten der Einzelsubstrat Kinetik zu fitten -> Potentiell schrige Parameterschätzungen.

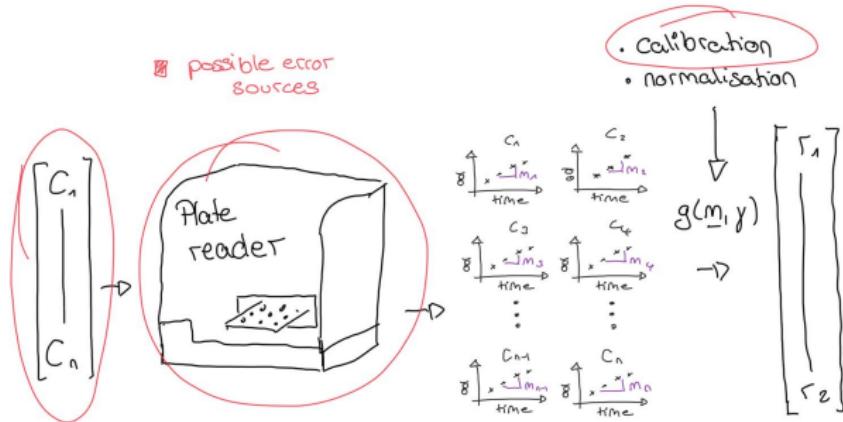
Problem 2

Der fehler $y_i - f(x_i, \theta)$ ist nicht der direkte Messfehler, da y_i in einem experimentellen Arbeitsablauf bestimmt wird.

Berechnung von Reaktionsraten aus Plattenleserdaten



Berechnung von Reaktionsraten aus Plattenleserdaten



Fehlerquellen

- Kalibrierungsfehler → Fehler bei der Berechnung von Reaktionsraten
- Pipettierfehler → Konzentrationsfehler
- Messfehler im Plattenleser → Fluoreszenzfehler

Ansatz

- Implementierung eines Parameterschätzskripts, das verschiedene Arten von Fehlerquellen berücksichtigt
- Verwendung von Monte-Carlo-Bootstrap zur Schätzung von Parameterverteilungen
- Vergleich verschiedener Fehlermodelle und deren Einfluss auf Parameterverteilungen

Ergebnisse Reaction 1 und 3

Ergebnisse Reaction 2

- Programmierbare Bioreaktor Plattform
- Ziel: Messen Modellieren Regeln mit MPC und MHE
- Just Starte: Mit Tobias Process aufsetzten
- Mit Jannis Messdaten in model integrieren