

TD 3

Ce TD porte sur le théorème de déficience zéro.

## 1 Exemples simples

Q1. Pour chaque exemple, vérifiez si le théorème de déficience zéro s'applique. Si oui, explicitez les classes de compatibilités, et tracez les lorsqu'il n'y a que deux espèces en jeu.

$$-A \xrightarrow{k} \varnothing$$

$$-A \xrightarrow{k_1} B$$

$$-A \xrightarrow{k_1} \varnothing$$

$$-A \xrightarrow{k_1} B, B \xrightarrow{k_1} C, C \xrightarrow{k_1} A$$

$$-A \xrightarrow{k_1} B, 2B \xrightarrow{k_2} 2A$$

$$-A + A \xrightarrow{k_1} B$$

$$-A + B \xrightarrow{k_1} C$$

$$-P + P \xrightarrow{k_2} P_2, P + P_2 \xrightarrow{k_3} P_3, \dots, P + P_{n-1} \xrightarrow{k_n} P_n,$$

## 2 Vérification expérimentale

On considère la réduction enzymatique.

$$E + S \quad \xrightarrow{k_1} \quad C$$

$$C \quad \xrightarrow{k_2} \quad E + P$$

Q1. Le système vérifie-t-il les hypothèses du théorème de déficience zéro? Est-ce qu'il existe un unique équilibre pour chaque classe de compatibilité?

On considère la réaction

$$A + A \stackrel{k_1}{\rightleftharpoons} B$$

Q 2. Vérifiez expérimentalement le théorème de déficience zéro en traçant plusieurs courbes.

On considère le système de réaction suivant (création d'ARN par un gène, et dégradation d'un ARN).

$$\begin{array}{ccc} G & \xrightarrow{k_1} & G + M \\ M & \xrightarrow{k_2} & \varnothing \end{array}$$

 $\mathbf{Q}$  3. Le système vérifie-t-il les hypothèses du théorème de déficience zéro? En écrivant différemment le système de réactions, peut-on se ramener aux hypothèses du théorème de déficience zéro?

## Systèmes oscillants 3

## L'oregonator 3.1

Cet exercice est tiré de http://www.scholarpedia.org/article/Oregonator. Ce modèle est une version simplifiée du modèle du système de Belousov et Zhabotinsky, découvert en 1950 en URSS, qui présente des oscillations (http://en.wikipedia.org/wiki/Belousov-Zhabotinsky\_reaction).

$$ar{A} + Y \xrightarrow{k_1} X + ar{P}, \qquad X + Y \xrightarrow{k_2} 2ar{P}, \qquad ar{A} + X \xrightarrow{k_3} 2X + 2Z$$
 
$$2X \xrightarrow{k_4} ar{A} + ar{P}, \qquad ar{B} + Z \xrightarrow{k_c} 1/2fY$$

- Q1. Les espèces ayant une barre sont des espèces en très grande quantité. Transformer les équations chimiques pour que ces grandeurs restent constantes (en changeant les réactants et les produits).
- Q 2. Le système ainsi obtenu vérifie-t-il les hypothèses du théorème de déficience zéro?
- Q3. Vérifiez sur des graphiques que le modèle transformé peut présenter des oscillations. Pour cela, vous utiliserez :
  - $\begin{array}{lll} -- & f=2, k_1=1.28, k_2=2.4\times 10^6, k_3=33.6, k_4=2400, k_c=1\\ -- & A(0)=0.06, B(0)=0.02, P(0)=0.8 \end{array}$

  - $X(0) = 4.2 \times 10^{-4}, Y(0) = 8.4 \times 10^{-7}, Z(0) = 0.084672$

Afin d'obtenir des graphes plus convaincants, vous pouvez tracer le log de certaines concentrations pour mieux distinguer les courbes.