### Reaktionsnetzwerke

Jonas Pleyer

20. Mai 2022

### Table of Contents

- 1. Wiederholung
- 2. Reaktionsnetzwerke

### Table of Contents

- 1. Wiederholung
- 1.1 Aufgabe 1
- 2. Reaktionsnetzwerke

## Aufgabe 1

Schreibe ein Python-Script, um die folgenden Ordinary Differential Equations (ODEs) numerisch zu lösen:

$$\dot{A} = k_1 - k_2 A \tag{1}$$

$$\dot{A} = k_1 - k_2 A + k_3 A^2 - k_4 A^4 \tag{2}$$

$$\dot{A} = k_1 B - k_2 A \tag{3}$$

$$\dot{B} = k_2 A - k_1 A \tag{4}$$

Verwende dabei scipy zum lösen und matplotlib zum visualisieren from scipy.integrate import odeint import matplotlib.pyplot as plt

Welche Werte müssen wir für eine numerische Lösung vordefinieren?

Jonas Pleyer Reaktionsnetzwerke 20. Mai 2022 4/9

#### Table of Contents

- 1. Wiederholung
- 2. Reaktionsnetzwerke
- 2.1 Diagramm  $\rightarrow$  ODE
- 2.2 Beispiel Einfaches System
- 2.3 Beispiel Einfaches System
- 2.4 Aufgaben an der Tafel

5/9

### $Diagramm \rightarrow ODE$

Gegeben ist eine Reaktionsnetzwerk

$$A + A \rightarrow B$$

$$B + C \rightarrow \varnothing$$

- Wie kann man diese Reaktion als ODE ausdrücken?
- Was ist die Lösung der ODE?
- Was sind die charakteristiken der ODE?

Jonas Pleyer Reaktionsnetzwerke 20. Mai 2022 6/9

## Beispiel Einfaches System

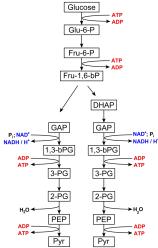


Abbildung: Glycolyse Reaktion (Wikipedia)

#### Reaktionsgleichungen

- Glucose + ATP  $\rightarrow$  Glu-6-P + ADP
- Glu-6-P  $\rightarrow$  Fru-6-P
- Fructose-6-P + ATP  $\rightarrow$  Fru-1,6-bP + ADP
- Fu-1,5-bP  $\rightarrow$  GAP + DHAP
- ...
- Das kann schnell kompliziert werden!

Jonas Pleyer Reaktionsnetzwerke 20. Mai 2022 7/9

## Beispiel Einfaches System

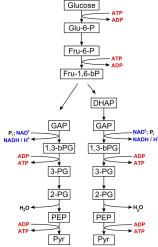


Abbildung: Glycolyse Reaktion (Wikipedia)

#### Reaktionsgleichungen

- Glucose + ATP  $\rightarrow$  Glu-6-P + ADP
- Glu-6-P  $\rightarrow$  Fru-6-P
- Fructose-6-P + ATP  $\rightarrow$  Fru-1,6-bP + ADP
- Fu-1,5-bP  $\rightarrow$  GAP + DHAP
- ...
- Das kann schnell kompliziert werden!

Jonas Pleyer Reaktionsnetzwerke 20. Mai 2022 8/9

# Aufgaben an der Tafel

Löst die Aufgaben an der Tafel

Jonas Pleyer Reaktionsnetzwerke 20. Mai 2022 9 /