

Reaktionsnetzwerke II

Jonas Pleyer

27. Mai 2022

Table of Contents

- 1. Wiederholung
 - 1.1 Lösen von ODEs
 - 1.2 Zugehöriges Reaktionsnetzwerk

Lösen von ODEs

Die folgende ODE beschreibt Protein-Synthese mit Degradation.

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Hier sind α die Synthetisierungsrate und β die Degradationsrate.

Lösen von ODEs

Die folgende ODE beschreibt Protein-Synthese mit Degradation.

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Hier sind α die Synthetisierungsrate und β die Degradationsrate. Fragen:

- 1 Welche Einheiten haben α, β

Lösen von ODEs

Die folgende ODE beschreibt Protein-Synthese mit Degradation.

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Hier sind α die Synthetisierungsrate und β die Degradationsrate. Fragen:

- 1 Welche Einheiten haben α, β
- 2 Was erwarten wir für ein Verhalten? Warum?

Lösen von ODEs

Die folgende ODE beschreibt Protein-Synthese mit Degradation.

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Hier sind α die Synthetisierungsrate und β die Degradationsrate. Fragen:

- 1 Welche Einheiten haben α, β
- 2 Was erwarten wir für ein Verhalten? Warum?
- 3 Wie gehen die Anfangswerte ein?

Lösen von ODEs

Die folgende ODE beschreibt Protein-Synthese mit Degradation.

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Hier sind α die Synthetisierungsrate und β die Degradationsrate. Fragen:

- ❶ Welche Einheiten haben α, β
- ❷ Was erwarten wir für ein Verhalten? Warum?
- ❸ Wie gehen die Anfangswerte ein?
- ❹ Gibt es einen Gleichgewichtszustand? Ist er positiv?


```
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def f(x, t, a, b):
    return a - b*x

if __name__ == "__main__":
    tstart = 0.0
    tend = 10.0
    y0 = 0.0
    a = 0.1
    b = 10.0

    t = np.linspace(tstart, tend)
    results = odeint(f, y0, (a, b))

    plt.plot(t, results, label="Ergebnisse der gelösten ODE")
    plt.legend()
    plt.show()
```

Zugehöriges Reaktionsnetzwerk

Welche Reaktionen laufen in der eben gelösten ODE ab?

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Zugehöriges Reaktionsnetzwerk

Welche Reaktionen laufen in der eben gelösten ODE ab?

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Erstellung von neuem Protein



Zugehöriges Reaktionsnetzwerk

Welche Reaktionen laufen in der eben gelösten ODE ab?

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

Erstellung von neuem Protein



Degradation von Protein



Zugehöriges Reaktionsnetzwerk

Welche Reaktionen laufen in der eben gelösten ODE ab?

$$\dot{x} = f(x, t) = \alpha - \beta x$$

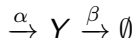
Erstellung von neuem Protein



Degradation von Protein



Insgesamt:

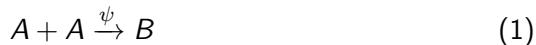


Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Wie viele Komponenten haben wir?

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Wie viele Komponenten haben wir?

\Rightarrow 3 Stück: A, B, C

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Wie viele Komponenten haben wir?
 \Rightarrow 3 Stück: A, B, C
- Betrachte zunächst Gleichung 2. Was passiert hier?

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Wie viele Komponenten haben wir?
 \Rightarrow 3 Stück: A, B, C
- Betrachte zunächst Gleichung 2. Was passiert hier?
 \Rightarrow B und C reagieren und werden vernichtet. Die Konzentration von B und C muss also kleiner werden.

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Wie viele Komponenten haben wir?
 \Rightarrow 3 Stück: A, B, C
- Betrachte zunächst Gleichung 2. Was passiert hier?
 \Rightarrow B und C reagieren und werden vernichtet. Die Konzentration von B und C muss also kleiner werden.
- Mit welcher Rate passiert das?

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Wie viele Komponenten haben wir?
 \Rightarrow 3 Stück: A, B, C
- Betrachte zunächst Gleichung 2. Was passiert hier?
 \Rightarrow B und C reagieren und werden vernichtet. Die Konzentration von B und C muss also kleiner werden.
- Mit welcher Rate passiert das?

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Wie viele Komponenten haben wir?
 \Rightarrow 3 Stück: A, B, C
- Betrachte zunächst Gleichung 2. Was passiert hier?
 \Rightarrow B und C reagieren und werden vernichtet. Die Konzentration von B und C muss also kleiner werden.
- Mit welcher Rate passiert das?

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (3)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (4)$$

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

- Betrachte jetzt noch Gleichung 1

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



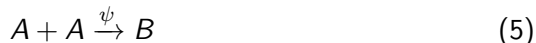
- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

- Betrachte jetzt noch Gleichung 1
2x Stoff A wird umgewandelt zu B

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

- Betrachte jetzt noch Gleichung 1
2x Stoff A wird umgewandelt zu B
- Wie lautet die Reaktionsgleichung?

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

- Betrachte jetzt noch Gleichung 1
2x Stoff A wird umgewandelt zu B
- Wie lautet die Reaktionsgleichung?

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

- Betrachte jetzt noch Gleichung 1
2x Stoff A wird umgewandelt zu B
- Wie lautet die Reaktionsgleichung?

$$\dot{A} = -2\psi A^2 \quad (9)$$

$$\dot{B} = +2\psi A^2 \quad (10)$$

- Wie kombiniere ich nun diese Gleichungen?

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

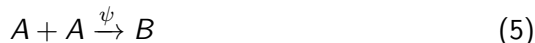
- Betrachte jetzt noch Gleichung 1
2x Stoff A wird umgewandelt zu B
- Wie lautet die Reaktionsgleichung?

$$\dot{A} = -2\psi A^2 \quad (9)$$

$$\dot{B} = +2\psi A^2 \quad (10)$$

- Wie kombiniere ich nun diese Gleichungen?
Einzelne Komponenten aufaddieren und dann alles zusammenschreiben

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

- Betrachte jetzt noch Gleichung 1
2x Stoff A wird umgewandelt zu B
- Wie lautet die Reaktionsgleichung?

$$\dot{A} = -2\psi A^2 \quad (9)$$

$$\dot{B} = +2\psi A^2 \quad (10)$$

- Wie kombiniere ich nun diese Gleichungen?
Einzelne Komponenten aufaddieren und dann alles zusammenschreiben

Wie lautet eine ODE zu einem gegebenen Reaktionsnetzwerk?



- Bisher haben wir:

$$\dot{B} = -\phi BC \quad (7)$$

$$\dot{C} = -\phi BC \quad (8)$$

- Betrachte jetzt noch Gleichung 1
2x Stoff A wird umgewandelt zu B
- Wie lautet die Reaktionsgleichung?

$$\dot{A} = -2\psi A^2 \quad (9)$$

$$\dot{B} = +2\psi A^2 \quad (10)$$

- Wie kombiniere ich nun diese Gleichungen?
Einzelne Komponenten aufaddieren und dann alles zusammenschreiben


```
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def f(y, t, k1, k2):
    return (-2*k1*y[0]**2, 2*k1*y[0]**2 - k2*y[1]*y[2], - k2*y[1]*y[2])
```



```
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def f(y, t, k1, k2):
    return (-2*k1*y[0]**2, 2*k1*y[0]**2 - k2*y[1]*y[2], - k2*y[1]*y[2])

if __name__ == "__main__":
    tstart = 0.0
    tend = 10.0
    y0 = (1.0, 0.0, 0.5)
    k1 = 0.3
    k2 = 0.5
    t = np.linspace(tstart, tend)
```

```
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def f(y, t, k1, k2):
    return (-2*k1*y[0]**2, 2*k1*y[0]**2 - k2*y[1]*y[2], - k2*y[1]*y[2])

if __name__ == "__main__":
    tstart = 0.0
    tend = 10.0
    y0 = (1.0, 0.0, 0.5)
    k1 = 0.3
    k2 = 0.5
    t = np.linspace(tstart, tend)

    results = odeint(f, y0, t, (k1, k2))
```

```
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def f(y, t, k1, k2):
    return (-2*k1*y[0]**2, 2*k1*y[0]**2 - k2*y[1]*y[2], - k2*y[1]*y[2])

if __name__ == "__main__":
    tstart = 0.0
    tend = 10.0
    y0 = (1.0, 0.0, 0.5)
    k1 = 0.3
    k2 = 0.5
    t = np.linspace(tstart, tend)

    results = odeint(f, y0, t, (k1, k2))

    for i in range(results.shape[1]):
        plt.plot(t, results[:,i], label="Komponente " + str(i))
    plt.legend()
    plt.show()
```