

# Reaktionsnetzwerke

Jonas Pleyer

20. Mai 2022

# 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:

$$\dot{A} = k_1 - k_2 A \quad (1)$$

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

$$\dot{A} = k_1 B - k_2 A \quad (3)$$

$$\dot{B} = k_2 A - k_1 A \quad (4)$$

Verwende dabei scipy zum lösen und matplotlib zum visualisieren

# Aufgabe 1

Schreibe ein Python-Script, um die folgenden ODEs numerisch zu lösen:

$$\dot{A} = k_1 - k_2 A \quad (1)$$

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

$$\dot{A} = k_1 B - k_2 A \quad (3)$$

$$\dot{B} = k_2 A - k_1 A \quad (4)$$

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?

# Table of Contents

## 1. Wiederholung

## 2. Reaktionsnetzwerke

### 2.1 Diagramm $\rightarrow$ ODE

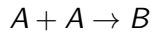
### 2.2 Beispiel Einfaches System

### 2.3 Beispiel Einfaches System

### 2.4 Aufgaben an der Tafel

# Diagramm $\rightarrow$ ODE

- Gegeben ist eine Reaktionsnetzwerk



# Diagramm $\rightarrow$ ODE

- Gegeben ist eine Reaktionsnetzwerk



- Wie kann man diese Reaktion als ODE ausdrücken?

# Diagramm $\rightarrow$ ODE

- Gegeben ist eine Reaktionsnetzwerk



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



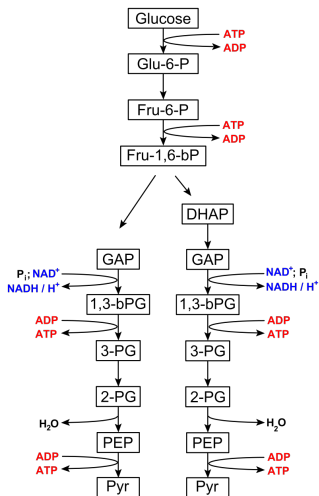
# Diagramm $\rightarrow$ ODE

- Gegeben ist eine Reaktionsnetzwerk



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

# Beispiel Einfaches System



## Reaktionsgleichungen

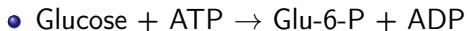
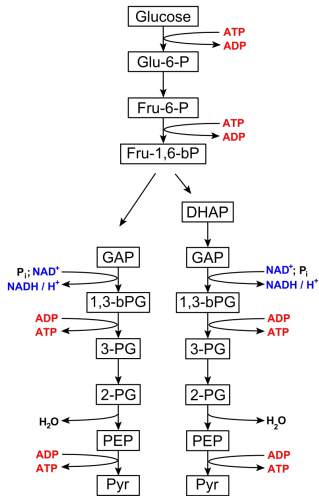


Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

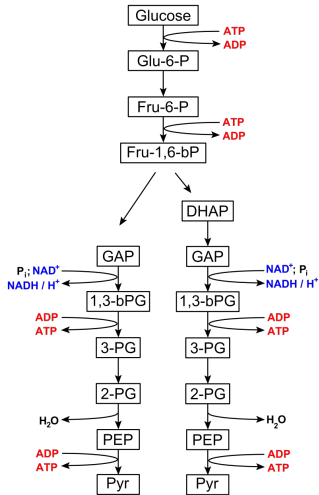


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

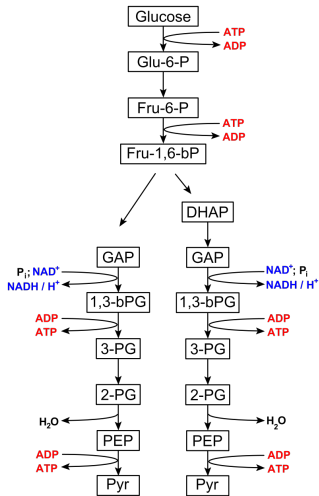


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$
- $\text{Fructose-6-P} + \text{ATP} \rightarrow \text{Fru-1,6-bP} + \text{ADP}$

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

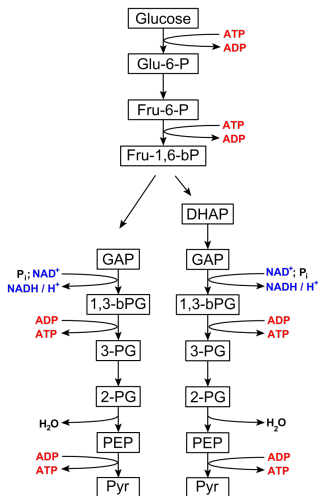


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$
- $\text{Fructose-6-P} + \text{ATP} \rightarrow \text{Fru-1,6-bP} + \text{ADP}$
- $\text{Fu-1,5-bP} \rightarrow \text{GAP} + \text{DHAP}$

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

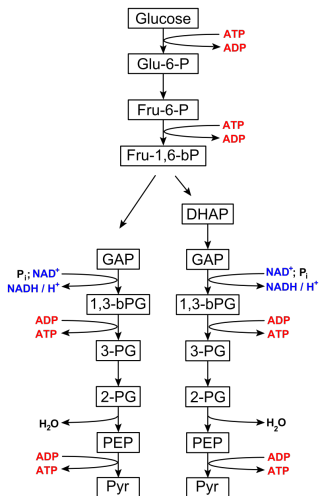


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$
- $\text{Fructose-6-P} + \text{ATP} \rightarrow \text{Fru-1,6-bP} + \text{ADP}$
- $\text{Fu-1,5-bP} \rightarrow \text{GAP} + \text{DHAP}$
- ...

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

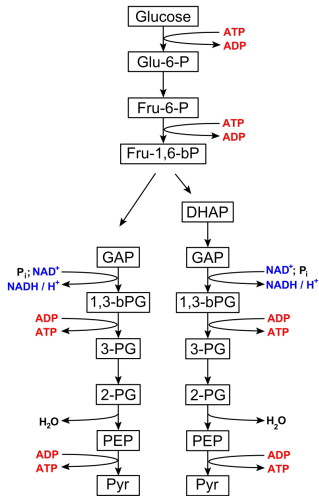


## Reaktionsgleichungen

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

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System



## Reaktionsgleichungen

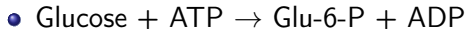
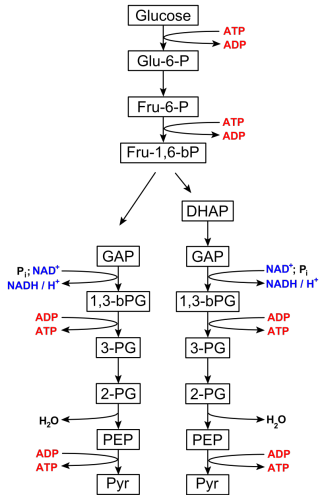


Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)



# Beispiel Einfaches System

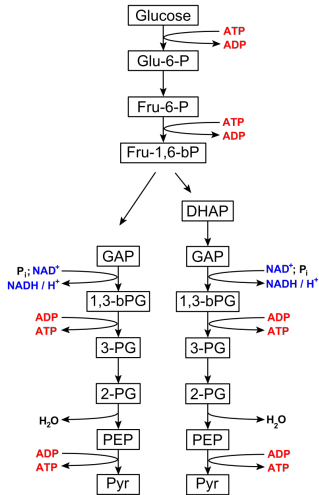


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

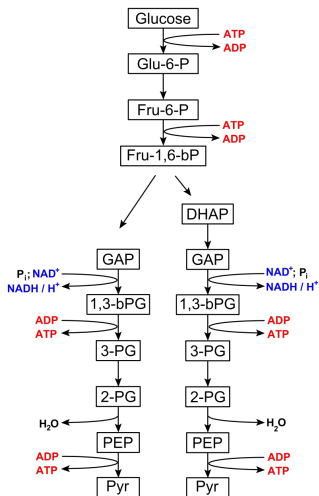


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$
- $\text{Fructose-6-P} + \text{ATP} \rightarrow \text{Fru-1,6-bP} + \text{ADP}$

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

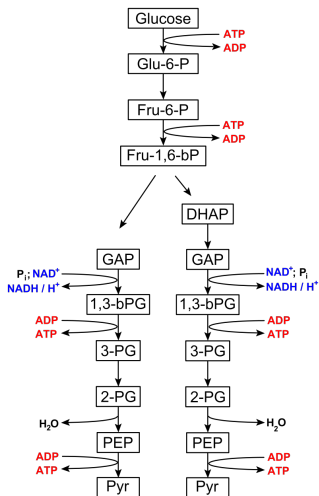


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$
- $\text{Fructose-6-P} + \text{ATP} \rightarrow \text{Fru-1,6-bP} + \text{ADP}$
- $\text{Fu-1,5-bP} \rightarrow \text{GAP} + \text{DHAP}$

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System

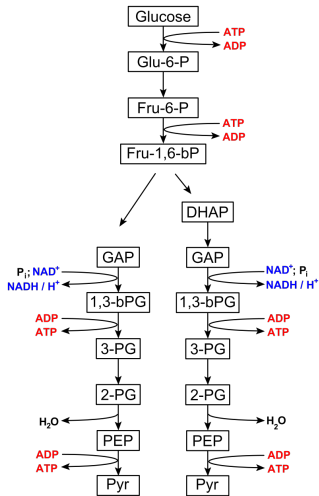


## Reaktionsgleichungen

- $\text{Glucose} + \text{ATP} \rightarrow \text{Glu-6-P} + \text{ADP}$
- $\text{Glu-6-P} \rightarrow \text{Fru-6-P}$
- $\text{Fructose-6-P} + \text{ATP} \rightarrow \text{Fru-1,6-bP} + \text{ADP}$
- $\text{Fu-1,5-bP} \rightarrow \text{GAP} + \text{DHAP}$
- ...

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Beispiel Einfaches System



## Reaktionsgleichungen

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

Abbildung: Glycolyse Reaktion  
(Wikipedia)

# Aufgaben an der Tafel

Löst die Aufgaben an der Tafel