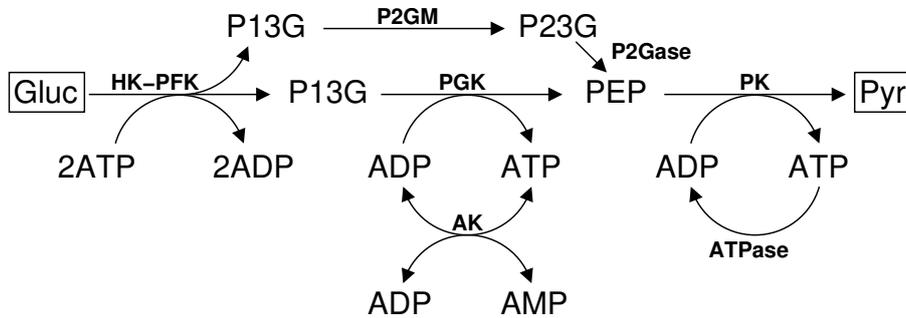


## Einfaches Glykolysemodell in Erythrozyten (1)



Die Abbildung stellt das Reaktionsschema eines vereinfachten Glykolyse-Modells in Erythrozyten dar. Dieses Modell soll mit möglichst einfachen Ratengleichungen beschrieben werden. Insbesondere werden alle Reaktionen außer dem HK-PFK System mittels Massenwirkungskinetik dargestellt. Für das HK-PFK System wird eine Massenwirkungskinetik mit einem weiteren Term versehen, der eine Substratinhibition beschreibt. Die gewählte Ratengleichung lautet

$$v_{\text{HK-PFK}} = \frac{k_{\text{HK-PFK}} \cdot \text{ATP}}{1 + \left(\frac{\text{ATP}}{K_{\text{I,ATP}}}\right)^{n_H}}. \quad (1)$$

Wir wählen zunächst die Parameter

$$k_{\text{HK-PFK}} = 3.2 \text{ h}^{-1}, \quad (2)$$

$$n_H = 4.0, \quad (3)$$

$$K_{\text{I,ATP}} = 1.0 \text{ mM}. \quad (4)$$

**Aufgabe 1:** Plotten Sie die Ratengleichung als Funktion der Substratkonzentration  $\text{ATP}$  im Intervall  $0 \leq \text{ATP} \leq 2.0 \text{ mM}$ . Schreiben Sie hierzu eine `python`-Funktion und benutzen Sie die Funktion `plot` des `python`-Paketes `matplotlib.pyplot`.

**Aufgabe 2:** Wiederholen Sie Aufgabe 1 mit den veränderten Parameterwerten  $k_{\text{HK-PFK}} = 2.29 \text{ h}^{-1}$  und  $n_H = 1.0$ . Plotten Sie beide Ratengleichungen in ein Diagramm und interpretieren Sie das Ergebnis.

**Aufgabe 3:** Berechnen Sie für beide Fälle die Elastizitäten in Abhängigkeit der Substratkonzentration ( $\text{ATP}$ ) und stellen Sie diese graphisch dar. Sie können die Elastizitäten entweder analytisch durch Ableitung von Gl. (1) oder numerisch aus den Ergebnissen der vorherigen Aufgaben berechnen.

Die Adenylatkinase ist ein sehr schnelles Enzym. Wir nehmen an, dass sich die entsprechende Reaktion  $\text{ATP} + \text{AMP} = 2 \text{ADP}$  im Gleichgewicht befindet. Das bedeutet, dass für die Konzentrationen gilt

$$\frac{(\text{ADP})^2}{\text{AMP} \cdot \text{ATP}} = q_{\text{AK}}, \quad (5)$$

wobei wir für die Gleichgewichtskonstante annehmen, dass  $q_{AK} = 2.0$ .

Ferner gilt in unserem System eine Erhaltungsbedingung. Die Summe aller Adenosinphosphate ist stets konstant. Man kann sich davon leicht anhand des Reaktionsschemas überzeugen. Ein formales mathematisches Argument wird in der Vorlesung gegeben. Die Erhaltungsbedingung lautet

$$AMP + ADP + ATP = A = \text{const.} \quad (6)$$

Wir setzen  $A = 1.5$  mM.

**Aufgabe 4:** Verwenden Sie die Gleichungen (5) und (6), um analytische Ausdrücke abzuleiten, die die Konzentrationen von ADP und AMP als Funktionen von ATP beschreiben. Sie müssen hierzu die beiden Gleichungen benutzen, um eine Variable (z. B.  $AMP$ ) zu eliminieren, die verbleibende Gleichung dann nach der übrigen Variable ( $ADP$ , falls  $AMP$  eliminiert wurde) auflösen. Das Ergebnis ist eine quadratische Gleichung.

**Aufgabe 5:** Definieren Sie entsprechende `python`-Funktionen und stellen Sie die Abhängigkeit der AMP und ADP-Konzentrationen von der ATP-Konzentration graphisch dar.