

Übungen zur Systembiologie

Blatt 5

Abgabetermin: Freitag, 23.11.2018, 9 Uhr

Persönlich oder per Upload-Formular unter

www.bio.ifi.lmu.de/studium/ws2018/vlg_sysb/uebungsabgabe

1. Aufgabe (Elasticity Coefficients, Bonus-Aufgabe):

Gegeben Sei folgender Pathway:



Für beide Reaktionen gilt das Massenwirkungsgesetz.

- Bestimmen Sie die Werte für die Elasticity Coefficients $\varepsilon_S^{v_1}$ und $\varepsilon_S^{v_2}$ in Abhängigkeit von den kinetischen Konstanten und den Konzentrationen von S , P_0 und P_2 .
- Bestimmen Sie die Steady-State Konzentration von S und den Steady-State Flux J für die folgenden Parameter: $k_i = 2$, $k_{-i} = 1$, $P_0 = 10$, $P_2 = 4$.
- Bestimmen Sie die Werte von $\varepsilon_S^{v_1}$ und $\varepsilon_S^{v_2}$ für diesen Steady-State.
- Bestimmen Sie damit die Werte der Control Coefficients C_1^J , C_2^J , C_1^S und C_2^S .

2. Aufgabe (Elasticity Coefficients, Bonus-Aufgabe):

- Bestimmen Sie die allgemeine Formel für den Elasticity Coefficient ε_I^v für folgende Kinetik:

$$v = \frac{V_{max}S}{K_m(1 + \frac{I}{K_I}) + S} \quad (\text{Inhibition durch I}). \quad (1)$$

Bestimmen Sie das Vorzeichen von ε_I^v abhängig von der Konzentration von I? Was bedeutet dies?

- Bestimmen Sie die allgemeine Formel für den Elasticity Coefficient ε_S^v für folgende Kinetik:

$$v = \frac{V_{max}S}{K_m + S(1 + \frac{S}{K_I})} \quad (\text{Substrat-Inhibition durch S}). \quad (2)$$

Bestimmen Sie das Vorzeichen von ε_S^v abhängig von der Konzentration von S? Was bedeutet dies?

3. Aufgabe (Berechnung von Control Coefficients):

Implementieren Sie in einer Programmiersprache Ihrer Wahl ein Programm, das für einen linearen Pathway (siehe Folie 40 zu Metabolic Control Analysis) den Steady-State Flux und die Flux Control Coefficients für eine beliebige Anzahl r von Reaktionen, beliebige kinetische Konstanten und beliebige Konzentrationen von S_0 und S_r berechnet.

Aufruf: Programmaufruf <Eingabe-Datei>.

Die Eingabe-Datei ist dabei eine tab-separierte Datei, welche die Konzentrationen von S_0 und S_r enthält und eine weitere Zeile pro Reaktion i mit k_i und k_{i-1} (Beispiel-Datei für den Pathway auf Folie 43 liegt auf der Webseite). Ausgabe soll auf Standard-Out sein: Erste Zeile Steady-State Flux (als r -dimensionalen Vektor), zweite Zeile Control Coefficients.

Wenden Sie ihr Programm auf mindestens 10 unterschiedliche Kombinationen für die kinetischen Konstanten für das Beispiel auf Folie 43 an. Die kinetischen Konstanten für unterschiedliche Reaktionen sollen dabei auch unterschiedlich sein. Visualisieren Sie die Ergebnisse für Steady-State Fluxes und Control Coefficients auf geeignete Weise.

Geben Sie zusätzlich eine README Datei ab in der beschrieben ist, wie das Programm aufzurufen ist. Das Programm muss im CIP-Pool laufen.