

Projekt – Differentialekvationer och reaktionskinetik

Analys och Linjär Algebra, del B, K1/Kf1/Bt1

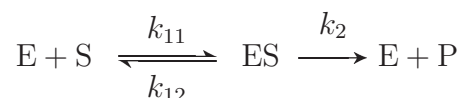
1 Inledning

Börja med att läsa ”Reaktionskinetik – Oxidation av NO till NO₂”, som du finner på studiohemsidan, med tillhörande program N02, N021ab och N02a. I dessa beskrivs och ges exempel på hur kemiska processer kan modelleras med system av ordinära differentialekvationer.

Projektredovisningen sker dels i studion, dels i form av en skriftlig rapport. Redovisningen i studion består i att man visar att man satt upp rätt differentialekvationer och att man löser dem korrekt i MATLAB. Rapporten, som skall följa riktlinjerna för rapportskrivning i kemikurserna, rättas av kemilärare. Både kemi- och matematiklärare kommer handleda.

2 Uppgift

Projektet handlar om enzymkatalys, specifikt hydrolys av en N-acylaminosyraester med enzymet Chymotrypsin. Enzymet E reagerar med substratet S för att bilda enzymkomplexet ES som i sin tur bildar slutprodukten P enligt



Ni skall beskriva reaktionerna med ett system av differentialekvationer. Därefter skall ni försöka rita upp en kvalitativ graf som visar hur ni tänker er att koncentrationerna ändras med tiden.

Sedan är det dags för den kvantitativa lösningen. Efter val av lämplig ODE-lösare i MATLAB, dvs. `ode45`, beräknas lösningen till differentialekvationerna och resultatet ritas upp.

Avslutningsvis undersöker ni om reaktionen har s.k. Michaelis-Menten-kinetik. Dvs. om den analytiska approximation som fås genom att anta att koncentrationen av enzymkomplex [ES] är konstant ($\frac{d[ES]}{dt} = 0$) duger för att beskriva bildandet av slutprodukten enligt

$$\frac{d[P]}{dt} = \frac{k_2[E]_t[S]}{K_M + [S]} \quad \text{där} \quad K_M = \frac{k_{12} + k_2}{k_{11}}$$

är den s.k. Michaelis-Menten-konstanten och $[E]_t = [E] + [ES]$ är den totala enzymkoncentrationen.

Den fullständiga formuleringen av uppgiften ”Enzymkatalys”¹ finner du på studiohemsidan.

¹Atkins och Jones uppl 4 sid 569-570 = uppl 5 sid 600-601, Dobson m.fl. sid 40-42 motsvaras av Alberts m.fl. sid 162

3 Redovisning

Arbeta i grupper om högst 4 personer. Fri gruppindelning.

För den vanliga studiohandledaren visar ni upp en skriptfil med tillhörande funktionsfiler för lösning av differentialekvationerna samt uppritning av lösningar.

Redovisa i en skriftlig rapport, högst 4 personer per rapport. Rapporten, som skall följa riktlinjerna för rapportskrivning i kemikurserna, rättas av kemilärare.

Följande gäller:

- Använd instruktioner för rapportskrivning från kemikursen.
- Undvik att referera till frågorna i projektuppgiften, utan skriv en sammanhängande redogörelse för frågeställningen och dess lösning.
- Det ingår i uppgiften att bedöma hur mycket detaljer som ska tas med, dvs. att bedöma om rapporten är begriplig för den tänkta läsaren. Som tänkt läsare tar vi en student på K/Kf/Bt som precis börjat i lp 2, dvs. både kinetik och modellering samt matematik och beräkningsteknik beskrivs kort och enkelt.

Rapporten skickas per epost, av en av gruppmedlemmarna, till ansvarig kemilärare, dvs. till Björn Åkerman. I projektrapporten och i brevet gäller:

- Namn, personnummer, program (K, Kf, Bt), skall anges på alla gruppmedlemmar
- I ämnesraden i brevet skall det stå Enzymkatalys
- Projektrapporten ska bestå av EN ENDA FIL i format .doc eller .pdf
- Filens namn ska vara lika med avsändarens efternamn_fornamn, t.ex. johansson_johan.doc eller johansson_johan.pdf

Sista inlämningsdag: 14 december, 2012.

4 Fortsättning

I nästa veckas studio-övningar ser vi lite mer på differentialekvationer. Kom ihåg att läsa på i förväg. Veckan därpå, dvs. sista veckan i läsperioden, använder vi till rester och slutredovisning.