

УДК 517.928

ДЕКОМПОЗИЦИЯ МОДЕЛИ КИНЕТИКИ СУИЦИДНОГО СУБСТРАТА

© Сметанников М.А., Соболев В.А.

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация*

e-mail: ssmetannikoff@gmail.ru

В данной работе рассмотрена модель ферментативной кинетики с анализом так называемого кооперативного явления, субстрат в котором известен как субстрат «смертника» или суицидный субстрат, наименование объясняется за счет связи фермента с активным ферментом как субстрата, в которой фермент превращает связанный с ним в ингибитор, который необратимо инактивирует фермент. Таким образом, фермент «совершает самоубийство».

Субстраты смертников имеют высокую важность, потому что они обеспечивают способ нацеливания специфического фермента на инактивацию. Они особенно полезны при введении лекарственных средств, поскольку они не вредны в их общей форме и только обозначенный фермент может превратить их в соответствующую ингибирующую форму. Например, субстраты смертников были исследованы для применения при лечении депрессии, эпилепсии и некоторых опухолей.

Исходная математическая модель представляет собой систему, состоящую из трех обыкновенных дифференциальных уравнений с параметрами:

$$\begin{aligned}\frac{ds(t)}{dt} &= -s((\varepsilon p + 1) - \varepsilon p \zeta - (\varepsilon p + 1)\zeta - (\varepsilon p + 1)e_i) + \frac{\rho}{1 + \rho} \zeta, \\ \frac{de_i(t)}{dt} &= \omega \zeta, \\ \varepsilon \frac{d\zeta(t)}{dt} &= s((\varepsilon p + 1) - \varepsilon p \zeta - (\varepsilon p + 1)\zeta - (\varepsilon p + 1)e_i) + \zeta, \\ \varepsilon \frac{d\zeta(t)}{dt} &= \frac{\varepsilon p}{(1 + \varepsilon p)(1 + \rho)} \zeta - \psi \zeta.\end{aligned}$$

Здесь S соответствует численности субстратов, e_i – инактивированных энзимов, ζ и ζ – промежуточные звенья между субстратами и энзимами, ε – малый параметр, остальные переменные являются константами.

В данной курсовой работе рассмотрена математическая модель задачи динамики суицидного субстрата. Математическая модель представлена в безразмерной форме обыкновенными дифференциальными уравнениями с малым параметром при части производных и начальными условиями. Построено интегральное многообразие системы, понижена размерность задачи, произведено сравнение численных решений исходной задачи и задачи пониженной размерности при разных значениях малого параметра. Сравнение решений выполнено графически [1–3].

Библиографический список

1. Соболев В.А., Щепаккина Е.А. Редукция моделей и критические явления в макрокинетике. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 320 с.
2. Воропаева Н.В., Соболев В.А. Геометрическая декомпозиция сингулярно возмущенных систем. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. 256 с.
3. Murray J.D. Mathematical Biology I. An Introduction Springer. New York, 2001. 551 p.