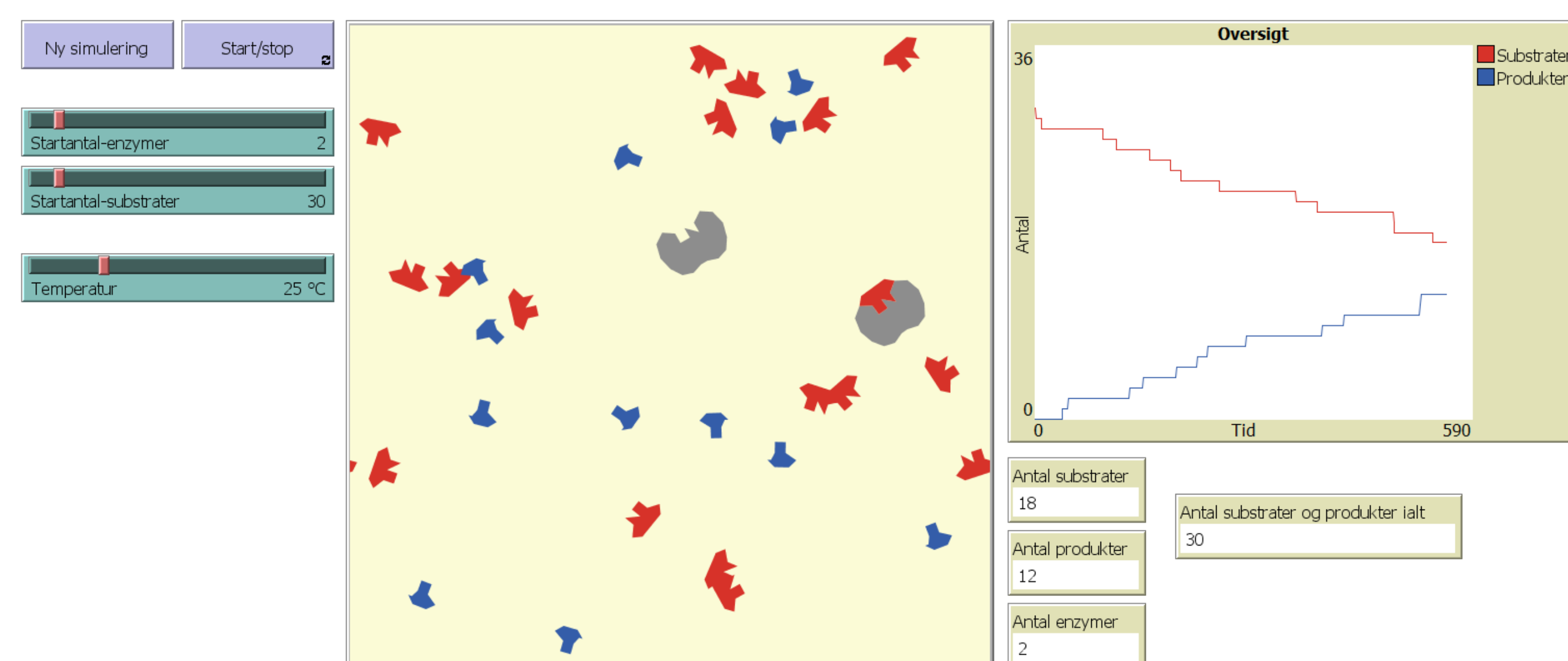


Introduktion

Modellen er tænkt som en introduktion til at forstå enzymers virkemåde (aktivt center, enzym-substratkompleks, etc.) og til at undersøge *hvordan* og *hvorfor* aktiviteten afhænger af forskellige faktorer som enzymkoncentration, substratkoncentration, temperatur og pH.



Resultaterne fra simuleringen sammenlignes med resultater fra laboratorieeksperimenter og feltundersøgelser, hvor de samme parametre varieres. Aktiviteterne blev anvendt i et NV-forløb med overskriften "Livets værksted".

Mål med aktiviteten

NV-faglige og biologi-faglige mål:

- At arbejde med begreberne variabelkontrol, kontrolforsøg, dobbeltbestemmelse, usikkerheder, og modeller.
- At forstå enzymers virkemåde og principperne bag en enzymkatalyseret kemisk reaktion.
- At kunne beskrive (makroskopisk) hvordan aktiviteten ændres, når substratkoncentration, enzymkoncentration, temperatur eller pH ændres samt forklare (på mikroskopisk niveau) hvorfor der sker denne ændring.

CT-faglige mål:

- At få mod på at læse, eksperimentere og "fuske" med computerkode og opleve, at det er tilladt og naturligt at fejle, inden man når i mål. At stifte bekendtskab med algoritmebegrebet.

- At få et indblik i hvad der gemmer sig i maskinrummet af en simulering og få en forståelse af, at en simulering aldrig er bedre end de modeller, den er blevet fodret med.
- At forstå at simuleringer spiller en stor og voksende rolle for vores samfund – både inden for naturvidenskab, men også indenfor fx klimapolitik og samfundsøkonomi.

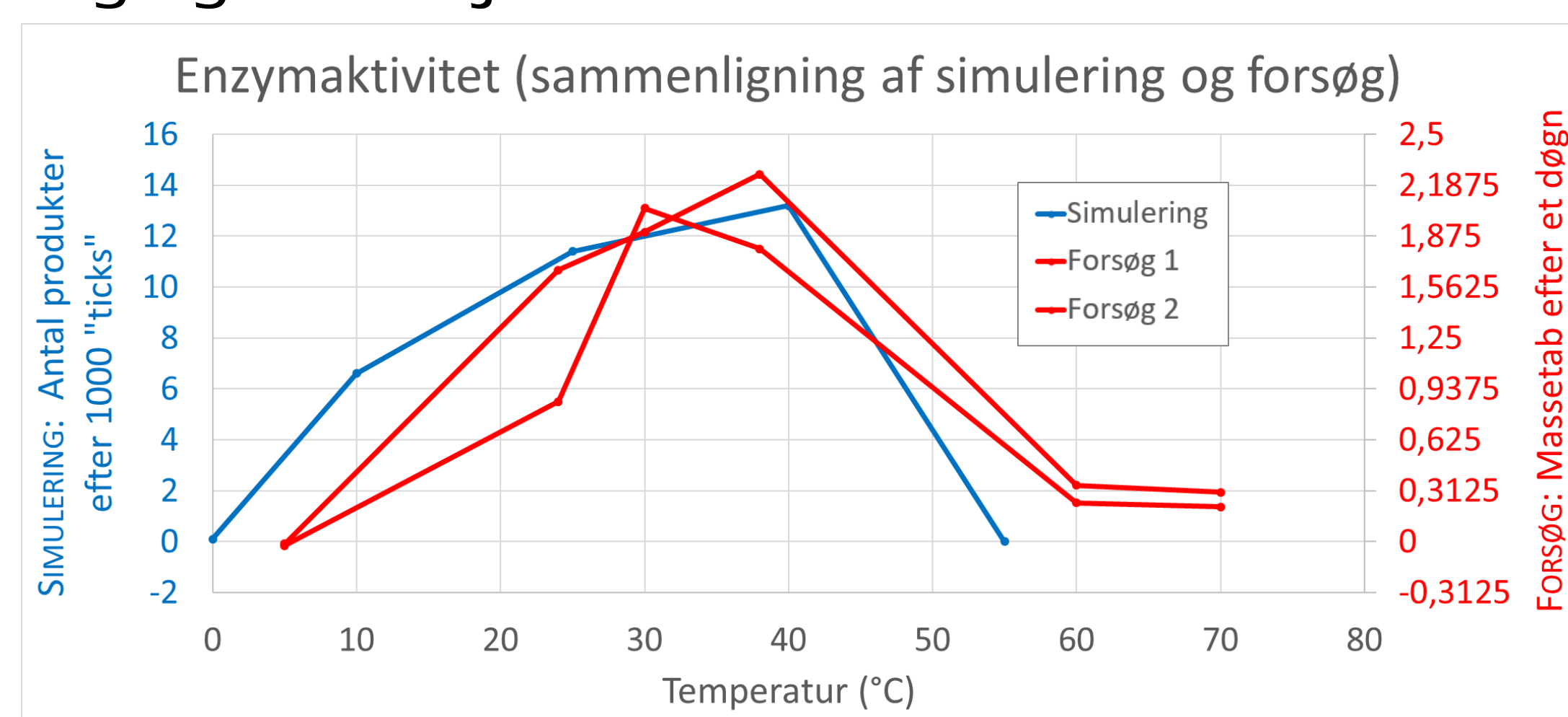
Beskrivelse af aktiviteten

Eleverne skal i par (efter introøvelser med algoritmer):

- Starte simuleringen og beskrive hvad der sker, herunder identificere hvilke molekyler, der er hhv. substrater, enzymer og produkter på baggrund af deres opførsel i simuleringen.
- Ændre på farverne af molekylerne, så de bliver nemmere at skelne fra hinanden.
- Udføre kvantitativ undersøgelse af enzymernes aktivitet under forskellige forhold:

Forsøg	1	2	3	4	5	6	7	8
Antal enzymer	0	1	2	1	1	1	1	1
Antal substrater	30	30	30	60	30	30	30	30
Temperatur (°C)	25	25	25	25	10	40	55	0
Antal produkter efter 1000 ticks								
Klassens gennemsnitsværdi								

- Forklare de observerede ændringer i enzymaktivitet ud fra molekylernes mikroskopiske opførsel.
- Sammenligne resultaterne med resultater fra laboratorie-forsøg og feltarbejde:



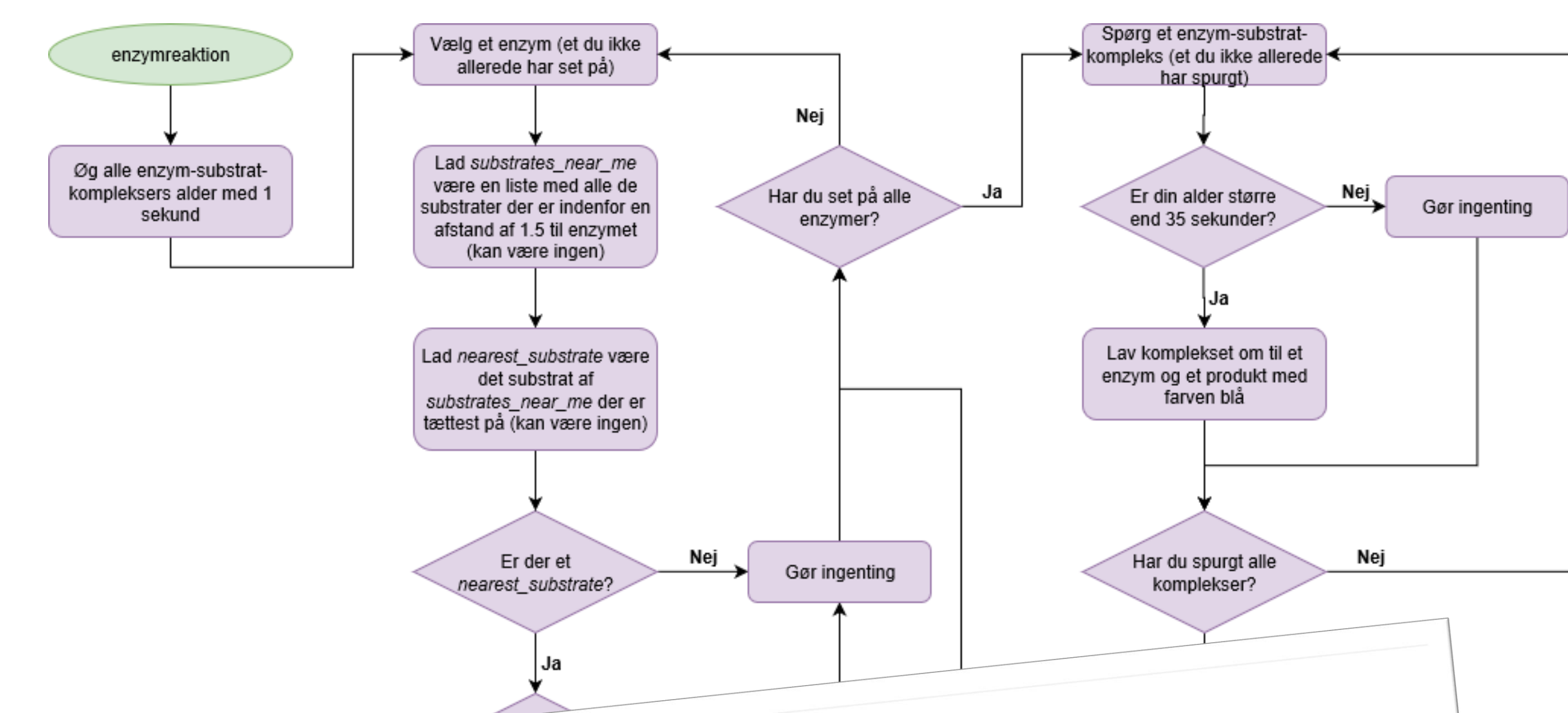
- Vurdere styrker og begrænsninger/mangler ved simuleringen i forhold til virkeligheden. Foreslå forbedringer.
- Implementere ændringer i computerkoden, så modellen tager højde for pH. Her arbejdes med modellen "i ord" og som "rutediagram".

Arbejdet med modellen/koden

Vi arbejdede med modellen og implementeringen af ændringer i modellen på tre niveauer:

- I. Modellen i ord
- II. Modellen som rutediagram
- III. Modellen skrevet med computerkode

Før eleverne fik lov at lave ændringer i selve NetLogo-koden skulle de først implementere ændringen i "Modellen i ord" og dernæst i "Modellen som rutediagram". Først derefter fik de lov at bevæge sig over i koden (der svarer 1:1 til rutediagrammet).



Modellen i ord:

Den mikroskopiske model for simuleringen er skrevet ind i computerkoden. Den består af et sæt af "regler" for, hvordan de enkelte molekyler (enzymer, substrater og produkter) opfører sig i forskellige situationer:

1. Enzymer og substrater bevæger sig tilfældigt rundt.
2. Jo højere temperaturen er, desto hurtigere bevæger de sig.
3. Kommer et enzym tæt på et substrat, danner de sammen et enzym-substratkompleks. Men kun hvis temperaturen er under 55 °C.
4. Efter 35 "ticks" bliver komplekset om til et produkt og et enzym.
5. Produkterne bevæger sig tilfældigt rundt ligesom substraterne og enzymerne.

Det er modellen anvendt i simuleringen.

Kreditering

NetLogo-modellen og undervisningsmaterialet er udviklet af [Jonas Ørbæk Hansen](#), Silkeborg Gymnasium, i forbindelse med deltagelse i udviklingsprojektet Computational Thinking i Matematik og Naturfag i skoleåret '18/'19. Projektet køres i samarbejde mellem Danske Science Gymnasier og Center for Computational Thinking & Design, Aarhus Universitet.