

**Table 1.** Reactions and rate constants used in the stochastic model of the *lac* circuit.

Reaction	Param	Stochastic Rate	Units	Source <sup>a</sup>	Pub. <i>in vitro</i> Rate		
<b>Lac operon regulation</b>							
$R_2 + O \rightarrow R_2O$	$k_{ron}$	2.43e+06	$M^{-1}s^{-1}$	M	4.0-20.0e+08 <sup>b</sup>		
$IR_2 + O \rightarrow IR_2O$	$k_{iron}$	1.21e+06	$M^{-1}s^{-1}$	M	–		
$I_2R_2 + O \rightarrow I_2R_2O$	$k_{I2ron}$	2.43e+04	$M^{-1}s^{-1}$	M	–		
$R_2O \rightarrow R_2 + O$	$k_{roff}$	6.30e-04	$s^{-1}$	S	1.4-2.3e-02 <sup>b</sup>		
$IR_2O \rightarrow IR_2 + O$	$k_{iroff}$	6.30e-04	$s^{-1}$	S	–		
$I_2R_2O \rightarrow I_2R_2 + O$	$k_{I2roff}$	3.15e-01	$s^{-1}$	M	–		
<b>Transcription, translation, and degradation</b>							
$O \rightarrow O + mY$	$k_{tr}$	1.26e-01	$s^{-1}$	M	–		
$mY \rightarrow mY + Y$	$k_{in}$	4.44e-02	$s^{-1}$	S	–		
$mY \rightarrow \emptyset$	$k_{degm}$	1.11e-02	$s^{-1}$	S	–		
$Y \rightarrow \emptyset$	$k_{degp}$	2.10e-04	$s^{-1}$	M	–		
<b>Inducer-repressor interact.</b>							
		TMG	IPTG				
$I + R_2 \rightarrow IR_2$	$k_{ion}$	2.27e+04	9.71e+04	$M^{-1}s^{-1}$	M	K	9.2-9.8e+04 <sup>c</sup>
$I + IR_2 \rightarrow I_2R_2$	$k_{I2on}$	1.14e+04	4.85e+04	$M^{-1}s^{-1}$	M	K	4.6-4.9e+04 <sup>c</sup>
$I + R_2O \rightarrow IR_2O$	$k_{ioPON}$	6.67e+02	2.24e+04	$M^{-1}s^{-1}$	M	K	2.0-2.3e+04 <sup>c</sup>
$I + IR_2O \rightarrow I_2R_2O$	$k_{I2oPON}$	3.33e+02	1.12e+04	$M^{-1}s^{-1}$	M	K	1.0-1.2e+04 <sup>c</sup>
$IR_2 \rightarrow I + R_2$	$k_{ioff}$	2.00e-01		$s^{-1}$	K		2.0e-01 <sup>c</sup>
$I_2R_2 \rightarrow I + IR_2$	$k_{I2off}$	4.00e-01		$s^{-1}$	K		4.0e-01 <sup>c</sup>
$IR_2O \rightarrow I + R_2O$	$k_{ioPOff}$	1.00e+00		$s^{-1}$	K		0.5-1.0e+00 <sup>c</sup>
$I_2R_2O \rightarrow I + IR_2O$	$k_{I2oPOff}$	2.00e+00		$s^{-1}$	K		1.0-2.0e+00 <sup>c</sup>
<b>Inducer transport</b>							
$I_{ex} \rightarrow I$	$k_{id}$	2.33e-03	$s^{-1}$	K			2.3e-03-1.4e-01 <sup>d</sup>
$I \rightarrow I_{ex}$	$k_{id}$	2.33e-03	$s^{-1}$	K			2.3e-03-1.4e-01 <sup>d</sup>
$Y + I_{ex} \rightarrow YI$	$k_{yion}$	3.03e+04	$M^{-1}s^{-1}$	K			–
$YI \rightarrow Y + I_{ex}$	$k_{yioff}$	1.20e-01	$s^{-1}$	K			–
$YI \rightarrow Y + I$	$k_{it}$	1.20e+01	$s^{-1}$	K			1.2e+01 <sup>e</sup>

<sup>a</sup>S = *in vivo* single molecule experiment, K = *in vitro* (kinetic) experiment, M = model parameter fit to single-molecule distributions.

<sup>b</sup>[92],

<sup>c</sup>[74,75],

<sup>d</sup>[69,93],

<sup>e</sup>[70].

doi:10.1371/journal.pcbi.1002010.t001