Métodos numéricos en ingeniería

Proyecto: Reacciones enzimáticas in vitro

María Fernanda Gutiérrez Ornelas A01234243
Alfonso Iván Morales Valverde A01562011
Ana Sofia Miranda Jimenez A01631272
Anahi Esquivel Valenzuela A01235160
Sergio Eduardo Trejo Olivas A012422091

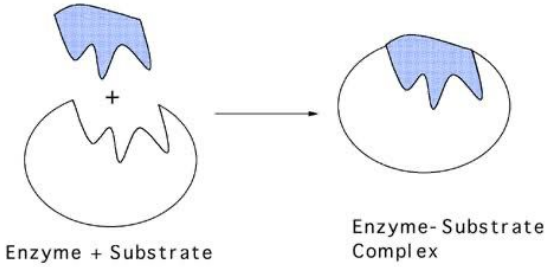
Introducción

La finalidad de este proyecto es poder dar solución al problema por los métodos vistos en clase: método de bisección, método de secante, y método de Newton-Raphson; por lo que, se pretende facilitar un programa que abarque el tema de actividad enzimática, la cual es la cantidad de enzima durante un tiempo determinado.

La actividad enzimática ayuda a poder expresar una cantidad de enzima durante un periódo de tiempo determinado, además indica la cantidad de sustrato transformado dentro del producto.

Las enzimas son proteínas especializadas capaces de acelerar la velocidad de una reacción química, promoviendo así la transformación de diferentes moléculas en productos específicos

Problema a resolver



Si bien, un procedimiento *in vitro* es lo más recomendado para probar la actividad enzimática en una reacción, no es lo más práctico estar desperdiciando tiempo y recursos con procedimientos no estandarizados del todo

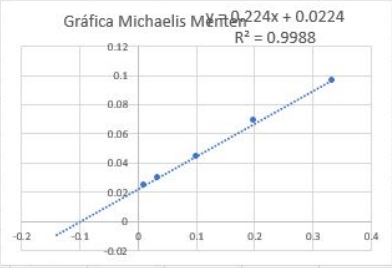
Se plantea el uso del programa desarrollado para conocer los puntos críticos (según el tiempo) de la acción enzimática previo a un procedimiento in vitro

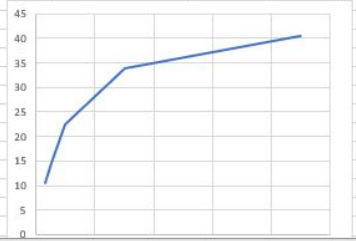
Al implementar este modelo se evita el uso innecesario de sustratos, enzimas y demás reactivos requeridos para la reacción, esto siempre y cuando se cuente con la bibliografía suficiente de la enzima a usar.

Solución: Método Secante

1	Vmax		1												
2	km		1												
3															
4		Metodo Secante													
5		Ejemplo 1						Toler:	0.00000010						
6			vm*x/km+x												
7	Graficar	s	v0												
8		x	f(x)	1/s	1/v			iter	Xi	X0	f(Xi)	f(X0)	X (i+1)	Error f(Xa)	
9		3	10.4	0.3333333	0.0961538			1	0.33333333	0.0111111	0.0970667	-1.579386	0.3147	-0.00059288	error
10		5	14.5	0.2	0.0689655			2	0.3147	0.3333333	0.0928876	-0.984467	0.3163	0.00005086	error
11		10	22.5	0.1	0.0444444			3	0.3163	0.3147	0.0932479	-1.018912	0.3162	-0.00000427	error
12		30	33.8	0.0333333	0.0295858			4	0.3162	0.3163	0.0932177	-1.015943	0.3162	0.00000036	error
13		90	40.5	0.0111111	0.0246914			5	0.3162	0.3162	0.0932202	-1.016192	0.3162	-0.00000003	raiz encontrada
14								6	0.3162	0.3162	0.09322	-1.016171	0.3162	0.00000000	raiz encontrada
15								7	0.3162	0.3162	0.09322	-1.016172	0.3162	0.00000000	raiz encontrada
16								8	0.3162	0.3162	0.09322	-1.016172	0.3162	0.0000000000	raiz encontrada

$$x_2 = x_0 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} f(x_0)$$





Command Window

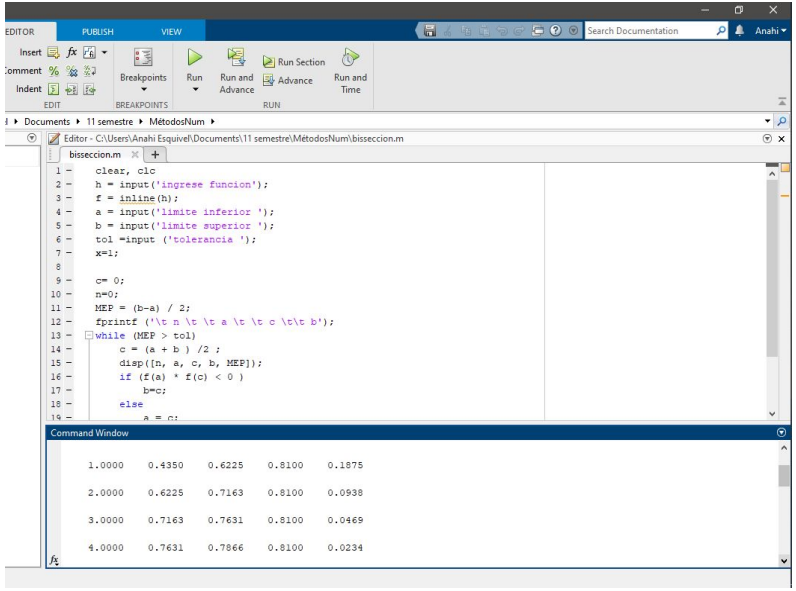
```
limite inferior =

0.011111

limite superior =

0.33333

tolerancia =

0.0000001

 n   x0      x1        x2          error
 0  0.0111  0.3333  0.0000  0.0000

 raiz =   0.000000

>>
```

Solución: Método Bisección

4											
5	Función	vm*x/km+x		xi	0.06						
6	vm:1	km:1		xu	0.81						
7	x	f(x)									
8	0.81	0.44751381		x	f(x)						
9	1.01	0.50248756		0.06	-0.06						
10	1.21	0.54751131		0.81	0.44751381						
11	1.41	0.58506224									
12	1.61	0.61685824		iteraciones	xi	xu	xr(xi+xu)/2	f(xi)	f(xr)	f(xi)f(xr)	
13	1.81	0.64412811		1	0.06	0.81	0.435	0.05660377	0.30313589	0.01715864	error
14	2.01	0.66777409		2	1	0.435	0.7175	0.5	0.41775837	0.20887918	error
15	2.21	0.68847352		3	0.7175	0.435	0.57625	0.41775837	0.36558287	0.1527253	error
16	2.41	0.70674487		4	0.57625	0.435	0.505625	0.36558287	0.33582399	0.1227715	error
17	2.61	0.72299169		5	0.57625	0.505625	0.5409375	0.36558287	0.35104441	0.12833582	error
18	2.81	0.73753281		6	0.5409375	0.505625	0.52328125	0.35104441	0.34352241	0.12059162	error
19	3.01	0.75062344		7	0.5409375	0.52328125	0.53210938	0.35104441	0.34730508	0.12191951	error
20	3.21	0.76247031		8	0.53210938	0.52328125	0.52769531	0.34730508	0.34541921	0.11996585	error

Hoja1

Listo



Solución: Método Newton Raphson

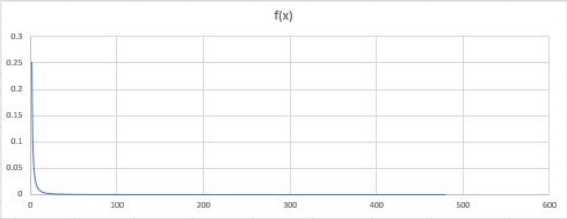
$$V0 = \frac{vmax[S]}{km+[S]} \quad \text{ecuación (1)}$$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

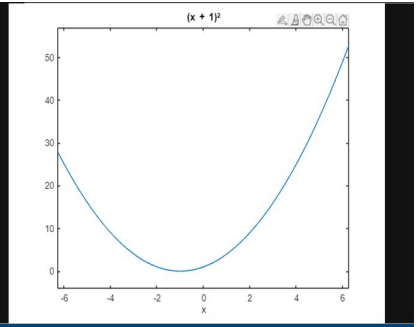
Vmax	1
km	1
E	0.0001

f(x)=(1*x)/(1+x)
f'(x)=(1/1+x)^2

graficar			n	Pn-1	f(Pn-1)	f'(Pn-1)	Pn	f(Pn)	E	Verificacion	Verifiacion 2
	x	f(x)	1	0.25	0.2	0.64	-0.0625	-0.0667	0.0001	Fracaso	fracaso
	1	0.25	2	0.1111	0.1	0.81	-0.0123	-0.0125	1.0001	Fracaso	Éxito
	2	0.1111111	3	0.0625	0.0588	0.8858	-0.0039	-0.0039	2.0001	Fracaso	Éxito
	3	0.0625	4	0.04	0.0385	0.9246	-0.0016	-0.0016	3.0001	Fracaso	Éxito
	4	0.04	5	0.0278	0.027	0.9467	-0.0008	-0.0008	4.0001	Fracaso	Éxito
	5	0.0277778	6	0.0204	0.02	0.9604	-0.0004	-0.0004	5.0001	Fracaso	Éxito
	6	0.0204082	7	0.0156	0.0154	0.9695	-0.0002	-0.0002	6.0001	Fracaso	Éxito
	7	0.015625	8	0.0123	0.0122	0.9758	-0.0002	-0.0002	7.0001	Fracaso	Éxito
	8	0.0123457	9	0.01	0.0099	0.9803	-0.0001	-0.0001	8.0001	Fracaso	Éxito
	9	0.01									
	10	0.0082645									
	11	0.0069444									
	12	0.0059172									
	13	0.005102									
	14	0.0044444									
	15	0.0039063									
	16	0.0034602									
	17	0.0030864									
	18	0.0027701									
	19	0.0025									
	20	0.0022676									
	21	0.0020661									
	22	0.0018904									
	23	0.0017361									
	24	0.0016									
	25	0.0014793									




```
clc;
clear;
f= input("digite la funcion","s");
sf =str2sym(f);
ezplot(sf);
tol=input("digite la tolerancia del metodo");
x0=input("digite el valor inicial del metodo");
v=symvar(sf);
f1 = diff(sf);
sw=0;
while sw==0
    x1 = x0 -(subs(sf,v,x0))/(subs(f1,v,x0));
    if abs (x0-x1)>tol
        x0=x1;
        sw=0;
    else
        sw=1;
    end
end
vpa(x1)
```



Command Window

```
(1/1+x)^2
digite la tolerancia del metodo

0.0001
digite el valor inicial del metodo

1


ans =


-0.99993896484375


>>
```

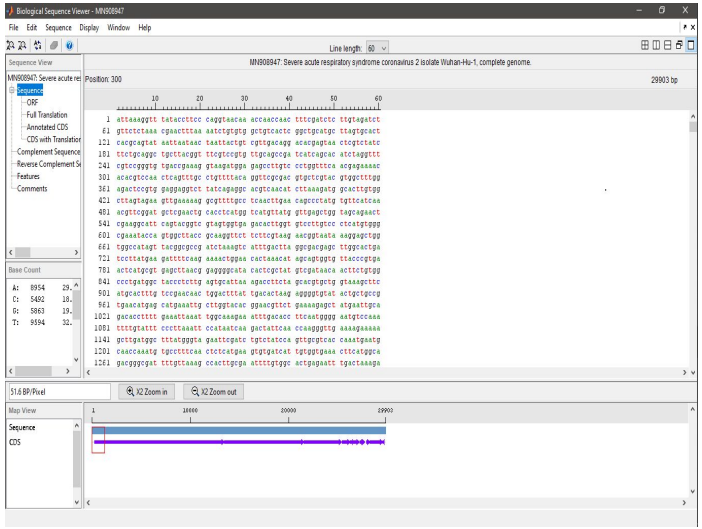
Conclusiones

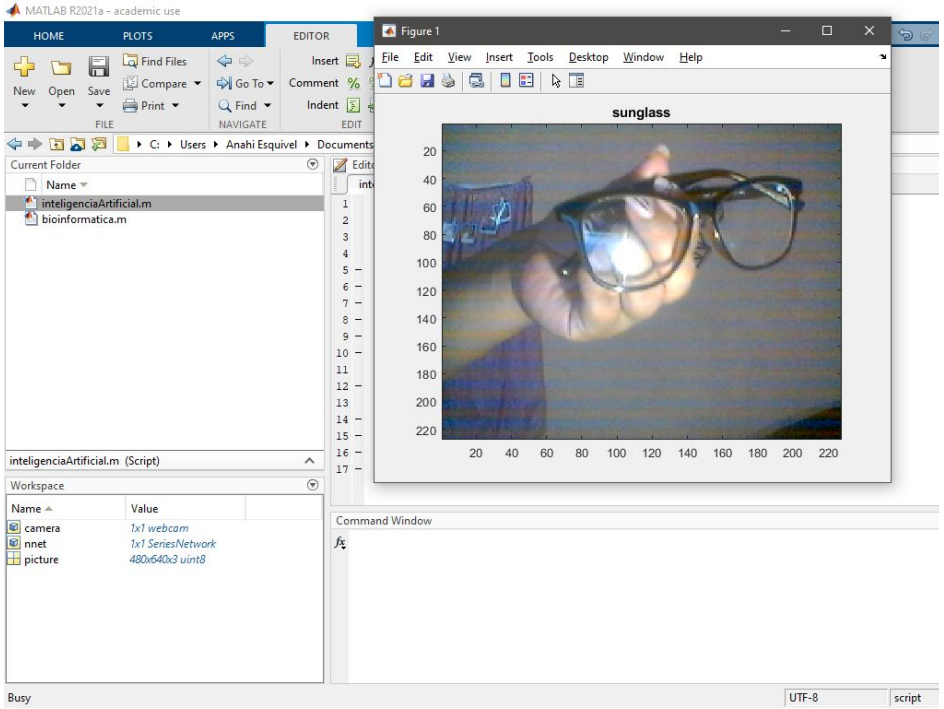
Por medio de velocidades de reacciones catalizadas por enzimas y por asistencia de las ecuaciones de Michaelis-Menten, es posible la hibridación teórica con el metodo de secante utilizando Matlab y excel.

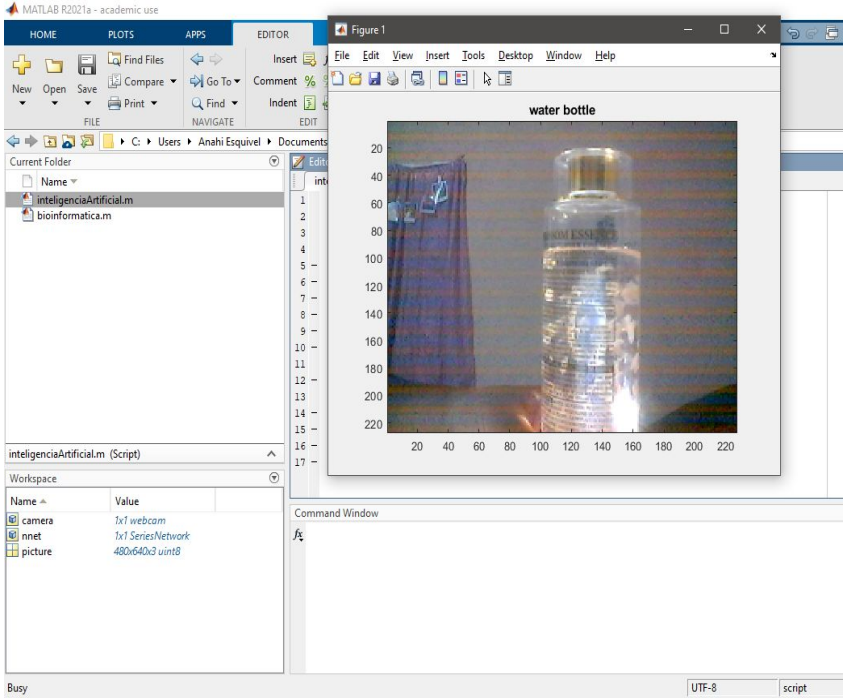
Se utilizó el método Newton-Raphson para complementar las simulaciones previas.

Se llevaron a cabo iteraciones para encontrar las respectivas raíces y de esta manera tener un mayor conocimiento de la reacción enzima sustrato simulada.

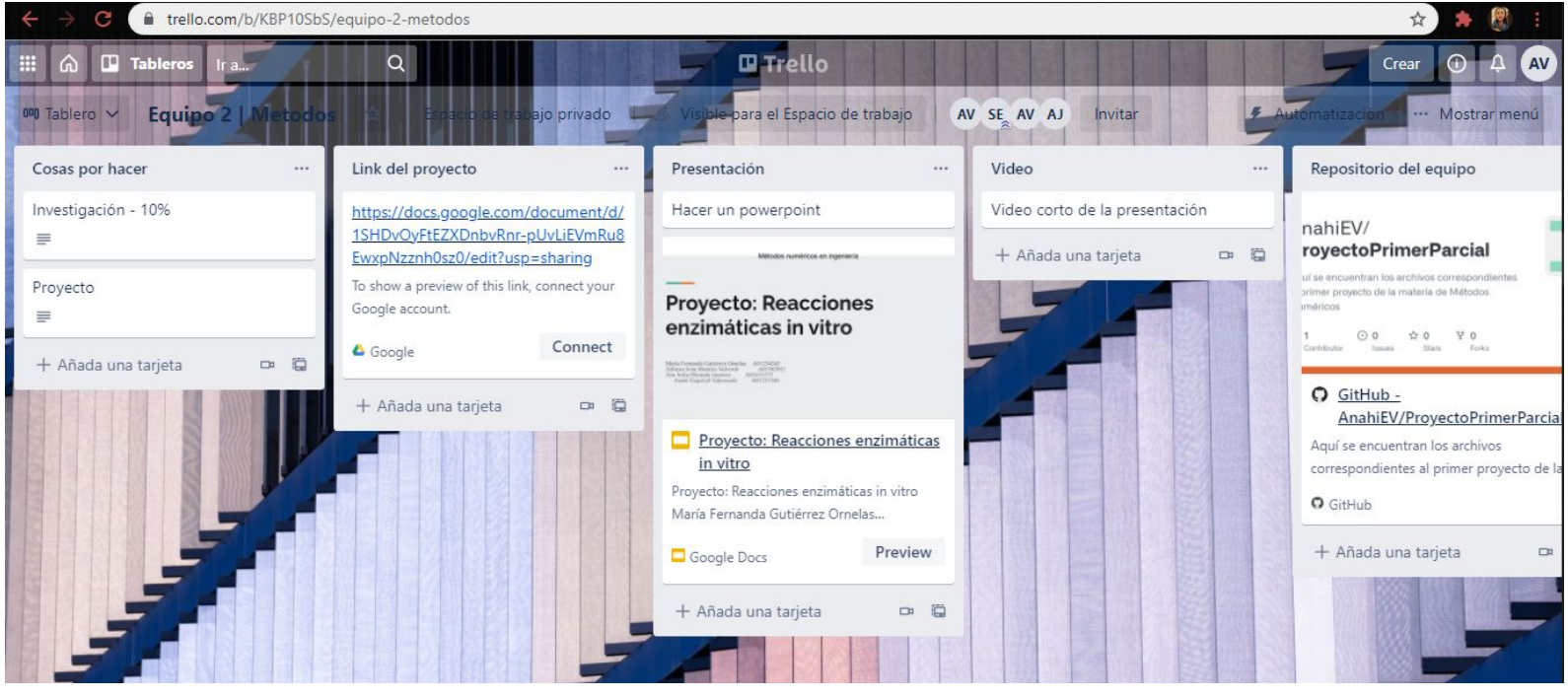
Investigación adicional: Bioinformática e Introducción a la Inteligencia Artificial

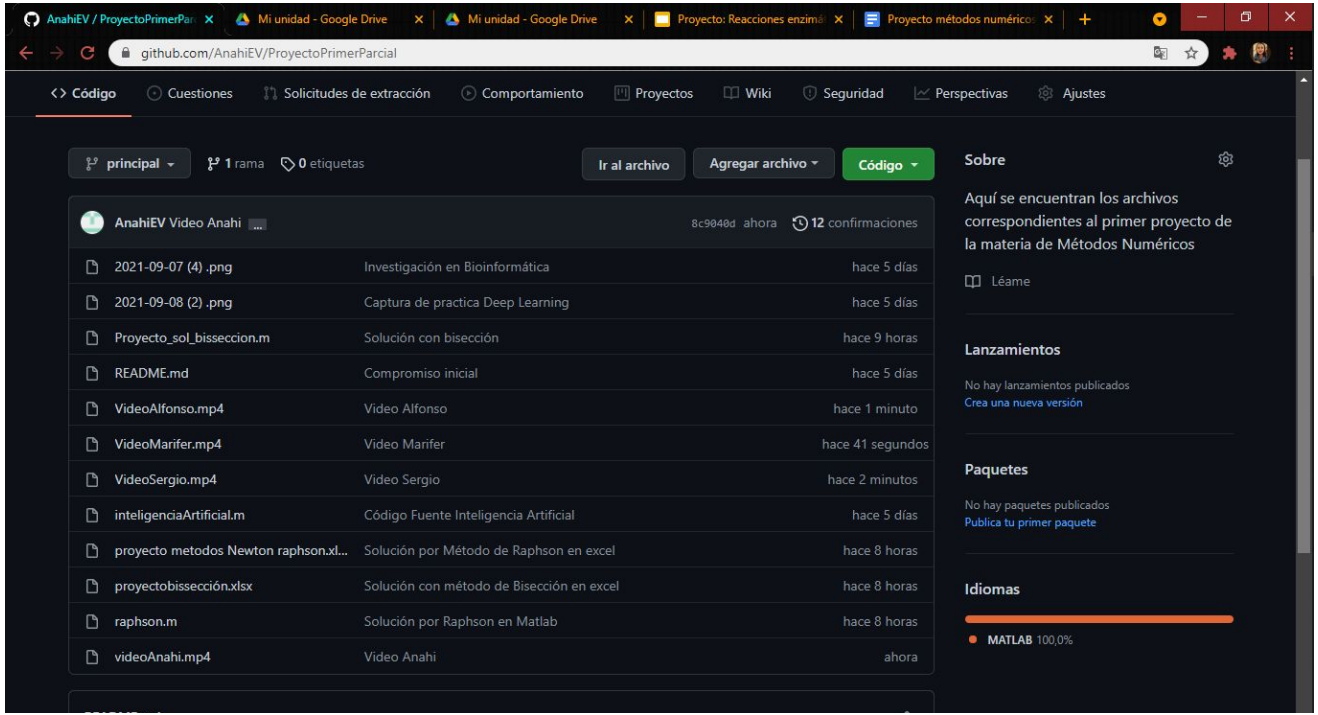



MATLAB R2021a - academic use
HOME
PLOTS
APPS
EDITOR
Figure 1
File Edit View Insert Tools Desktop Window Help
sunglass
Current Folder
inteligenciaArtificial.m
bioinformatica.m
inteligenciaArtificial.m (Script)
Workspace
camera 1x1 webcam
nnet 1x1 SeriesNetwork
picture 480x640x3 uint8
Command Window
Busy
UTF-8
script


MATLAB R2021a - academic use
HOME
PLOTS
APPS
EDITOR
Figure 1
File Edit View Insert Tools Desktop Window Help
water bottle
Current Folder
inteligenciaArtificial.m
bioinformatica.m
inteligenciaArtificial.m (Script)
Workspace
camera 1x1 webcam
nnet 1x1 SeriesNetwork
picture 480x640x3 uint8
Command Window
Busy
UTF-8
script

Trello: administrador de tareas



https://github.com/AnahiEV/ProyectoPrimerParcial

Repositorio