

动力学作业

欧阳兴宇 516080910006

1.整理矩阵

分别对漆酶+底物体系(LAC_SUB)和漆酶+介体 TEMPO(一定程度提升漆酶活性)+底物体系(LAC_TEMPO_SUB), 两个体系各 3 组动力学平行实验数据进行矩阵整理, 将 D1,D2,D3 矩阵整理为 D 矩阵, 将 D4,D5,D6 矩阵整理为 D_T 矩阵。代码如下

```
filename1='F:\ComputationalBiochemistry\动力学作业\LAC_SUB_1.csv'  
D1=csvread(filename1)  
D1=D1(:,61:711)  
time=0:0.5:298.5
```

```
filename2='F:\ComputationalBiochemistry\动力学作业\LAC_SUB_2.csv'  
D2=csvread(filename2)  
D2=D2(:,61:711)  
time=0:0.5:298.5
```

```
filename3='F:\ComputationalBiochemistry\动力学作业\LAC_SUB_2.csv'  
D3=csvread(filename3)  
D3=D3(:,61:711)  
time=0:0.5:298.5  
  
D=[D1;D2;D3]
```

```
filename4='F:\ComputationalBiochemistry\动力学作业\LAC_SUB_TEMPO_1.csv'  
D4=csvread(filename4)  
D4=D4(:,61:711)  
time=0:0.5:298.5
```

```
filename5='F:\ComputationalBiochemistry\动力学作业\LAC_SUB_TEMPO_2.csv'  
D5=csvread(filename5)  
D5=D5(:,61:711)  
time=0:0.5:298.5
```

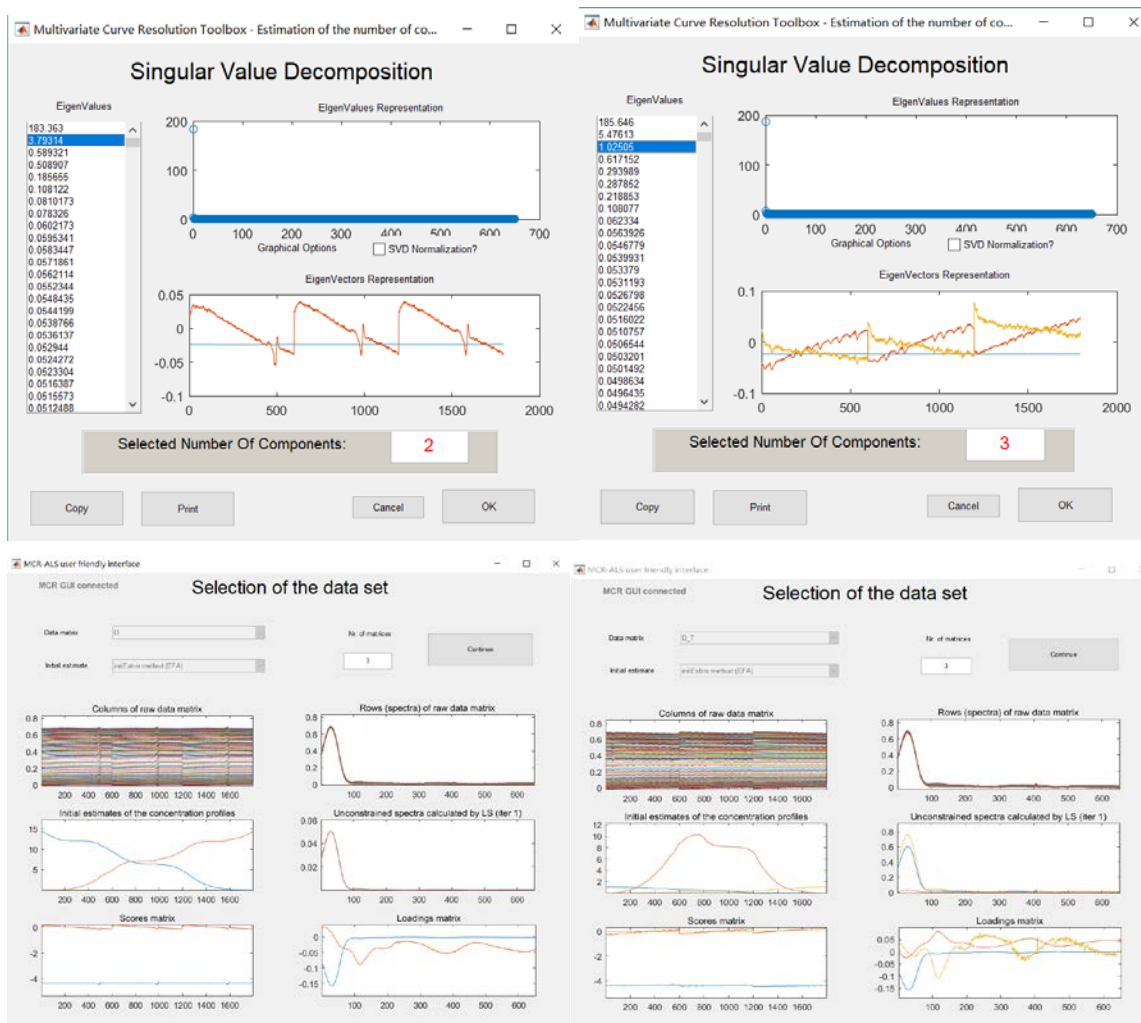
```
filename6='F:\ComputationalBiochemistry\动力学作业\LAC_SUB_TEMPO_3.csv'  
D6=csvread(filename6)  
D6=D6(:,61:711)  
time=0:0.5:298.5  
D_T=[D4;D5;D6]
```

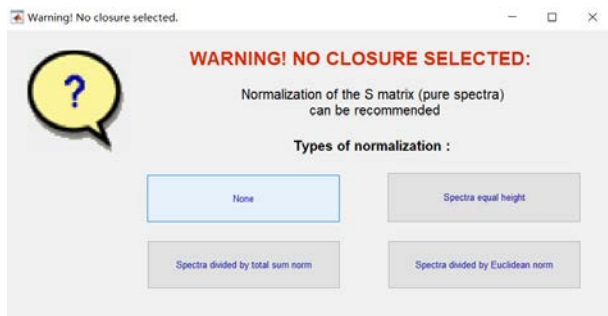
2.使用 MCR-ALS 工具分解矩阵

首先对所得到的时间分辨数据采用主成分分析判断体系的成分数。主成分分析按方差最大原则对测量数据阵中的变量进行线性组合, 通过对量测数据矩阵进行奇异值分解来获得其特征值, 根据特征值大小可以 评价主成分对化学信息总量的贡献程度, 从而确定主成分数。特征值明显大于其他的即主成分。

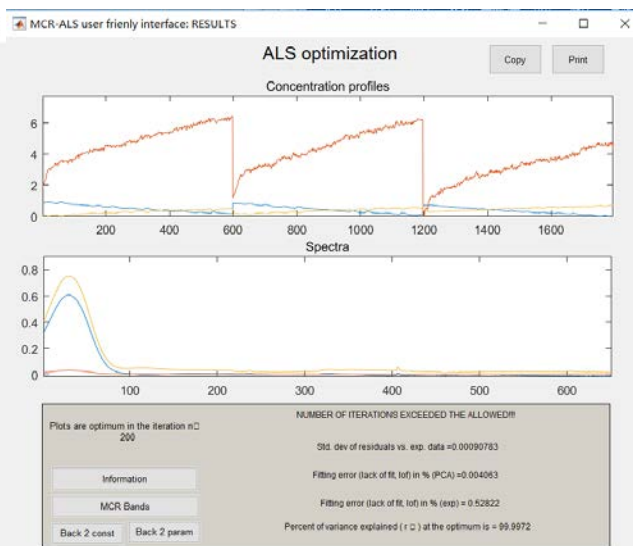
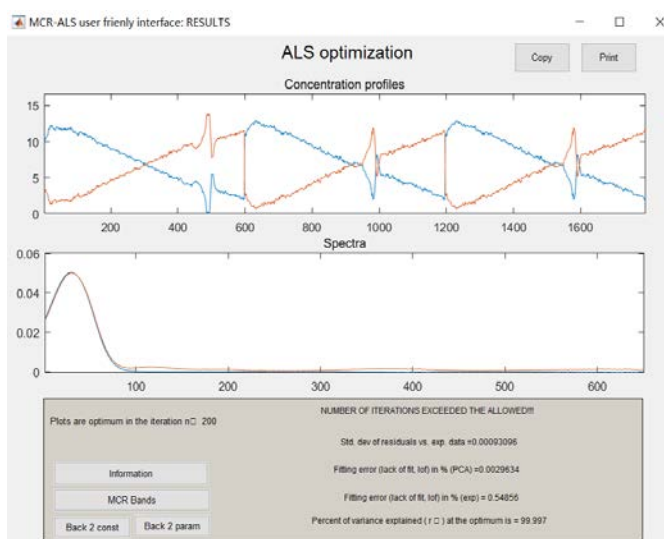
由 EFA 计算的组分浓度初始值 用于 ALS 迭代, ALS 在迭代优化过程中对浓度实行非负限制。

部分过程图片如下



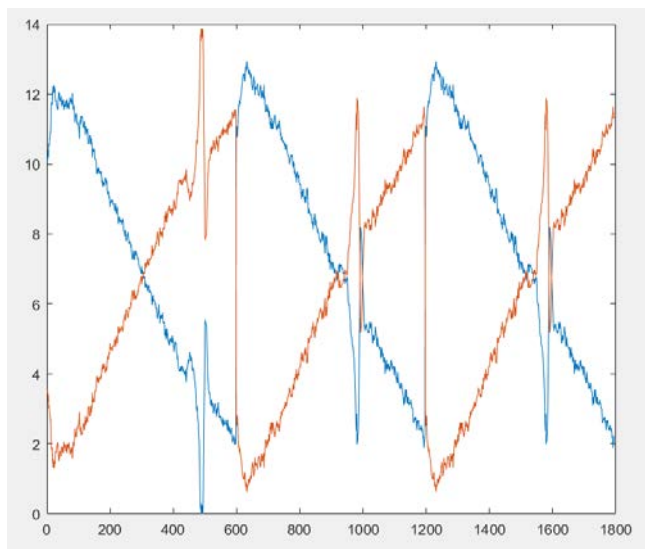


选择 types of normalization: None

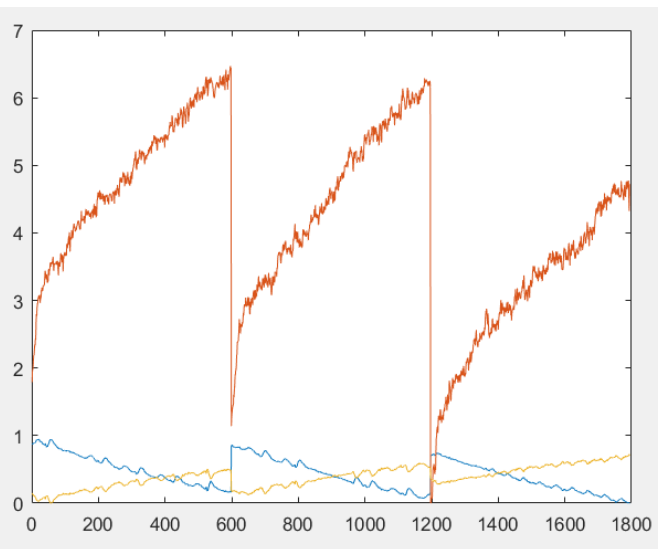


3.输出结果

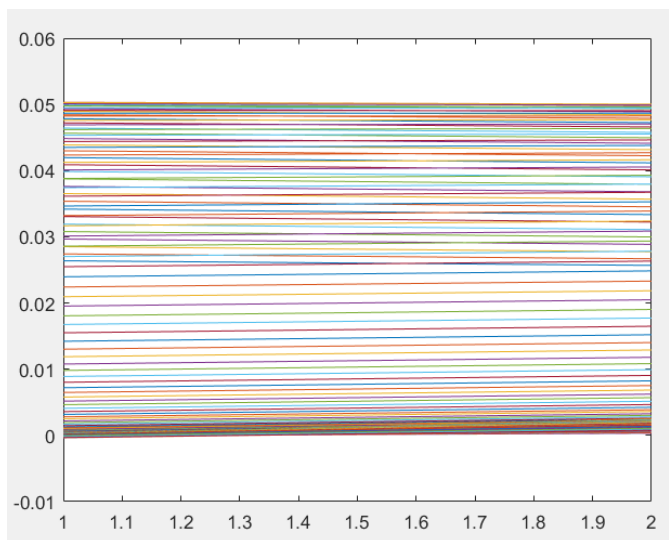
经过 MCR-ALS 处理，得到两个体系的浓度矩阵、光谱矩阵和残差矩阵。用 MATLAB 对这六个矩阵进行作图。从图中可以看到在反应过程中物质的浓度变化情况。反应开始很短时间，反应物浓度迅速减少，产物浓度逐渐增加。



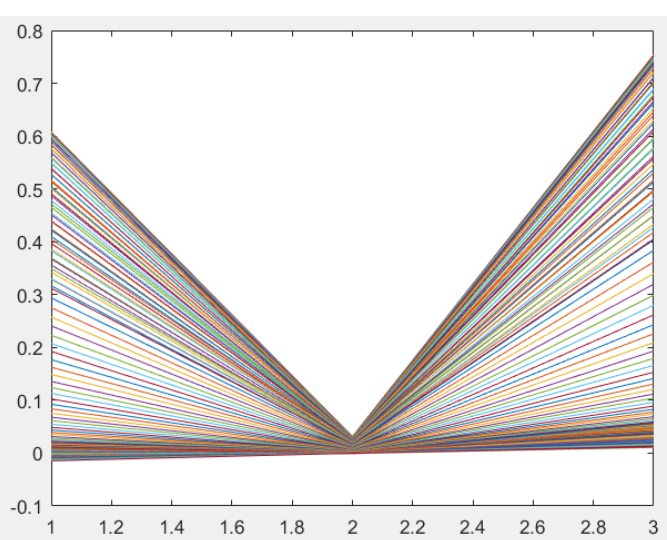
copt 作图 (LAC+SUB)



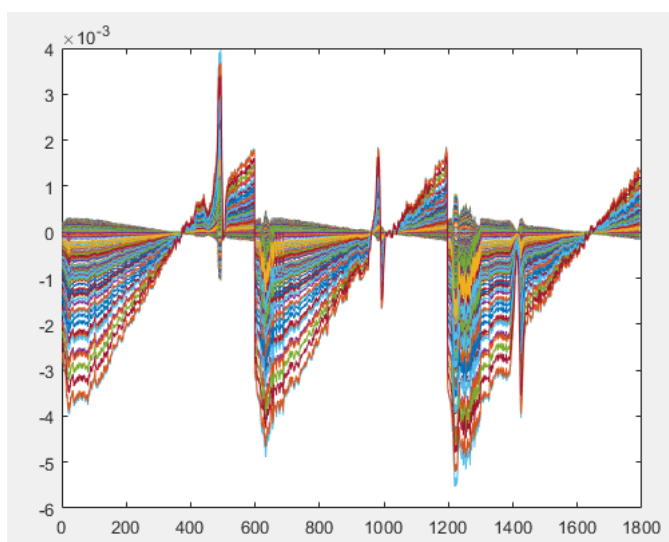
copt 作图 (LAC+SUB+TEMPO)



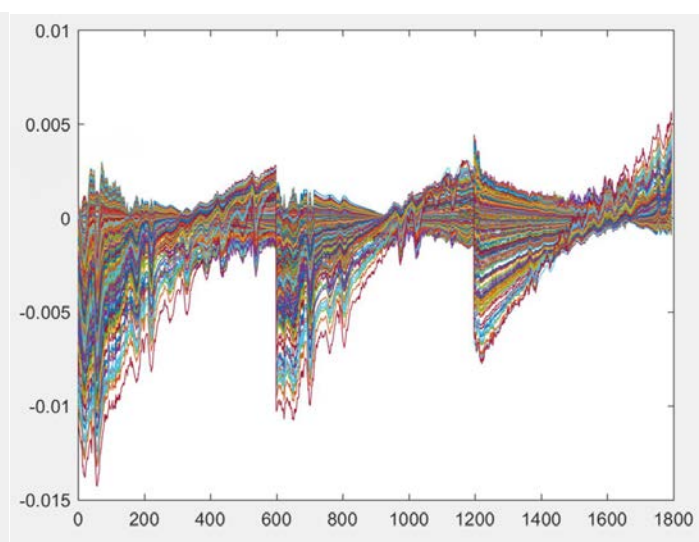
sopt 作图 (LAC+SUB)



sopt 作图 (LAC+SUB+TEMPO)



residuals 作图 (LAC+SUB)

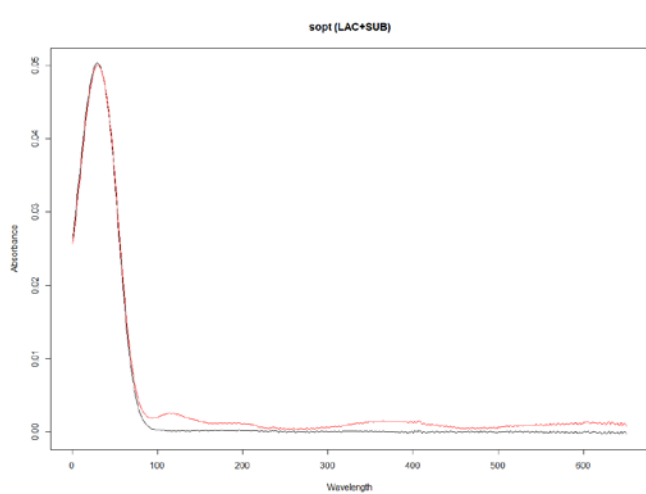


residuals 作图 (LAC+SUB+TEMPO)

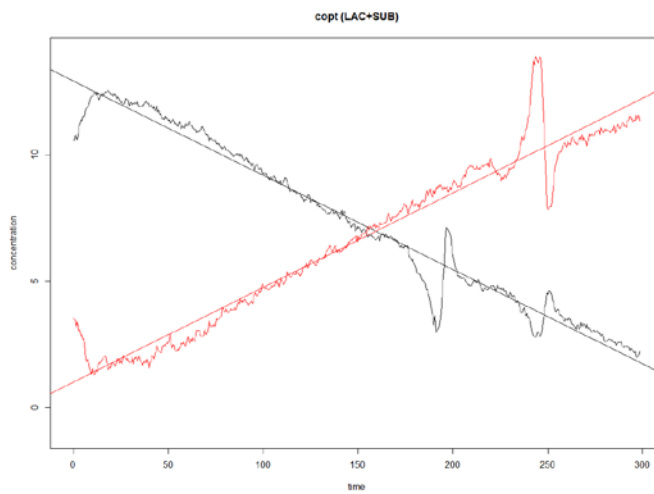
4.分析结果

为了进一步分析，用 R 作图

(1) LAC+SUB 体系



sopt 作图



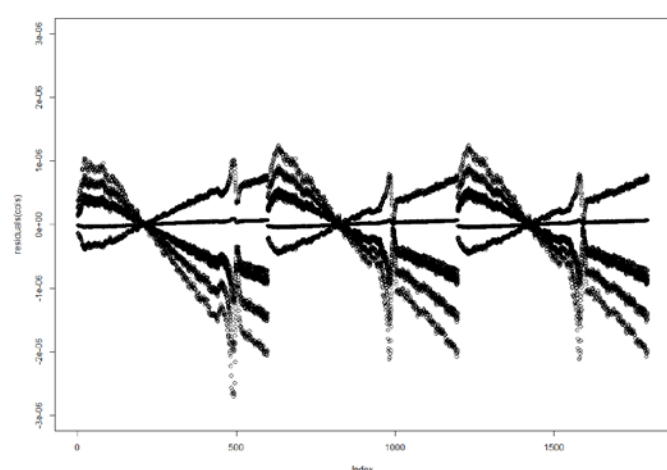
copt 作图

黑线表示底物，红色表示产物，随着反应的进行，底物浓度减少，产物浓度增加。

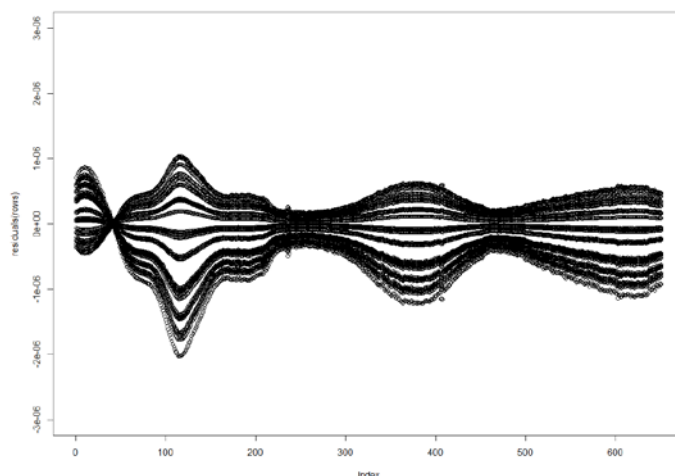
对底物拟合为 $y = -0.372x + 12.8989$

对产物拟合为 $y=0.03703+0.72597$

对残差列分析如下（每个 60 列（行）选取一行（行））



对残差矩阵列作图



对残差矩阵行作图

代码如下

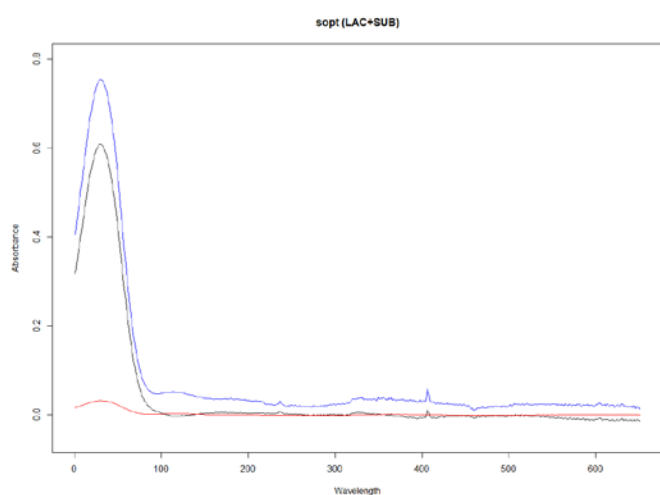
```
copt<-read.table("copt.txt")
sopt<-read.table("sopt.txt")
Residuals<-read.table("residuals.txt")

x1=seq(0,298.5,0.5)
y11=copt[1:598,1]
y12=copt[599:1196,1]
y13=copt[1197:1794,1]
y1=(y11+y12+y13)/3
y21=copt[1:598,2]
y22=copt[599:1196,2]
y23=copt[1197:1794,2]
y2=(y21+y22+y23)/3
x2=x1
fit1 <- lm(y1 ~ x1)
fit2 <- lm(y2 ~ x2)
plot(x1,y1,xlab="time", ylab="concentration",main="copt (LAC+SUB)",type="l",ylim=c(-1,14))
lines(x2,y2,col='red')
abline(fit1)
abline(fit2,col='red')

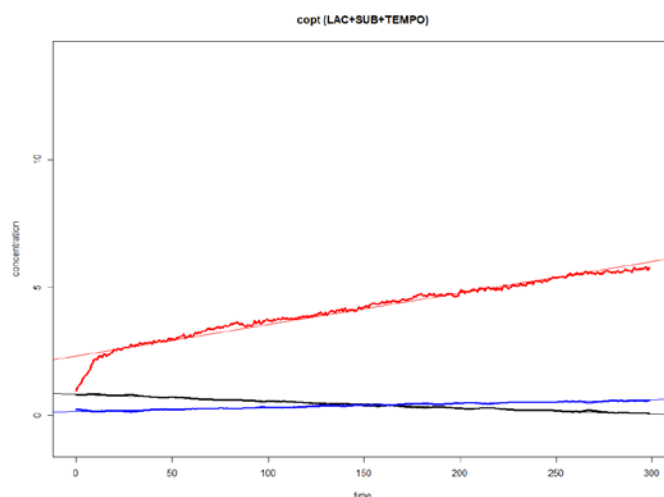
#residual analysis
plot(Residuals[,1],ylim=c(-0.000003,0.000003), ylab="residuals(cols)")
for(i in c(1:10)){
  points(Residuals[,i*20])
}

plot(t(Residuals)[,1],ylim=c(-0.000003,0.000003),ylab="residuals(rows)")
for(i in c(1:29)){
  points(t(Residuals)[,i*60])
}
```

(2) LAC+SUB+TEMPO 体系



sopt 作图



copt 作图

得到浓度变化拟合结果

black: $y = -0.002563x + 0.817699$

red: $y = 0.01225x + 2.32768$

blue: $y = 0.001468x + 0.166015$

代码如下

```
copt_t<-read.table("copt_t.txt")
sopt_t<-read.table("sopt_t.txt")

plot(t(sopt_t)[,1],type='l',ylim=c(-0.05,0.8),xlab="Wavelength", ylab="Absorbance",main="sopt (LAC+SUB)")
lines(t(sopt_t)[,2],col='red')
lines(t(sopt_t)[,3],col='blue')

x3=seq(0,298.5,0.5)
y31=copt_t[1:598,1]
y32=copt_t[599:1196,1]
y33=copt_t[1197:1794,1]
y3=(y31+y32+y33)/3
y41=copt_t[1:598,2]
y42=copt_t[599:1196,2]
y43=copt_t[1197:1794,2]
y4=(y41+y42+y43)/3
x4=x1
y51=copt_t[1:598,3]
y52=copt_t[599:1196,3]
y53=copt_t[1197:1794,3]
y5=(y51+y52+y53)/3
x5=x1

fit3 <- lm(y3 ~ x3)
fit4 <- lm(y4 ~ x4)
fit5 <- lm(y5 ~ x5)
```

```
plot(x3,y3,xlab ="time",lwd=3, ylab ="concentration",main="copt (LAC+SUB+TEMPO)",type="l",ylim=c(-1,14))  
lines(x4,y4,col='red',lwd=3)  
lines(x5,y5,col='blue',lwd=3)  
abline(fit3)  
abline(fit4,col='red')  
abline(fit5,col='blue')
```