

Taller #8. Física Computacional / FISI 2025  
Semestre 2013-II.

Profesor: Jaime E. Forero Romero

Noviembre 7, 2013

**Esta tarea debe resolverse por parejas (i.e. grupos de 2 personas) y la respuesta debe estar en un repositorio de github con un commit final antes del medio día del lunes 18 de noviembre del 2013.**

El objetivo es usar MCMC para encontrar los parámetros de un modelo físico que describe la evolución temporal de un sustrato fosforilado. Esto es parte de la tesis de pregrado **Modulation of the thermodynamic behavior in the membrane of *Bacillus subtilis* by the activity of the enzyme Desaturase  $\Delta$ -5** des de Juanita Lara.

Una parte clave en este trabajo requiere seguir la evolución temporal de un sustrato  $P$ . Esta evolución está descrita por la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\alpha(S_0 - P)}{K_{m1} + S_0 - P} - \frac{\beta P}{K_{m2} + P}, \quad (1)$$

donde  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $K_{m1}$ ,  $K_{m2}$  y  $S_0$  son constantes. Una descripción detallada de los fundamentos detrás de esta ecuación puede encontrarse en el repositorio en `homework/draft_juanita.pdf`.

Juanita midió en el laboratorio la evolución de  $P$  en función del tiempo. Estos datos se encuentran en el repositorio del curso en un archivo llamado `homework/dimer_observations.dat`.

El objetivo es encontrar el valor más probable de las constantes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $K_{m1}$ ,  $K_{m2}$  y  $S_0$ .

1. Escriba un programa en python que realice una exploración MCMC del espacio de parámetros relevante para el problema.
2. Prepare gráficas de contorno de la distribución de  $\chi^2$  en planos bidimensionales que sean las combinaciones de los parámetros. Ejemplo: contornos de la distribución de  $\chi^2$  en el plano  $\alpha$ - $\beta$ .
3. Prepare gráficas que comparen los datos observacionales con los resultados de la ecuación diferencial evaluada con los mejores parámetros encontrados por el código MCMC.

4. Evalúe el intervalo de incertidumbre para las constantes del modelo.

El programa debe poder ejecutarse y preparar las gráficas con un archivo Makefile.