

# Task2 - Sistemas generalizados de interacciones

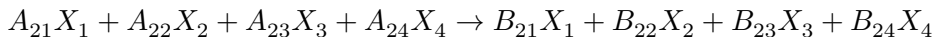
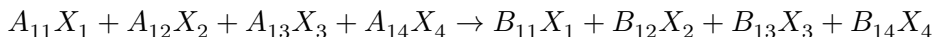
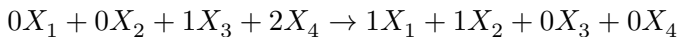
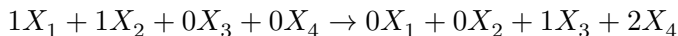
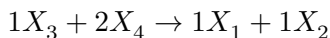
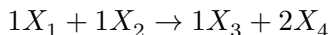
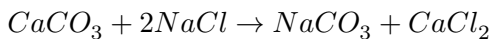
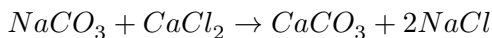
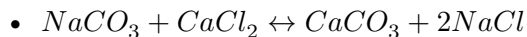
Redes Biológicas y Biología de Sistemas

Sandra Mingo Ramírez

## Parte 1

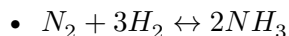
```
import numpy as np
```

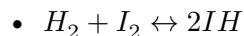
1. Escribe una función genérica `calculate_transpose` que tenga como input dos matrices A y B y devuelva el valor  $(B - A)^T$ . Esto se debe probar con las siguientes reacciones:



$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$





```
def calculate_transpose(A, B):
    '''Calculate transposition matrix of B-A'''
    transposition_matrix = np.transpose(B-A)

    return transposition_matrix

A = np.matrix('1 1 0 0; 0 0 1 2')
B = np.matrix('0 0 1 2; 1 1 0 0' )

print(calculate_transpose(A, B))
```

```
[[ -1  1]
 [ -1  1]
 [ 1 -1]
 [ 2 -2]]
```

2. Modifica la función anterior para que devuelva además el orden de la reacción.

```
def calculate_transpose_order(A, B):
    '''Calculate transposition matrix of B-A and the order of both reactions.'''
    transposition_matrix = np.transpose(B-A)

    reaction1 = np.sum(A[0])
    reaction2 = np.sum(B[0])
    return transposition_matrix, reaction1, reaction2

A = np.matrix('1 1 0 0; 0 0 1 2')
B = np.matrix('0 0 1 2; 1 1 0 0' )

print(f'The stoichiometric matrix is {calculate_transpose_order(A, B)[0]}')
print(f'The order of the reaction 1 is {calculate_transpose_order(A, B)[1]}')
print(f'The order of the reaction 2 is {calculate_transpose_order(A, B)[2]}')
```

```
The stoichiometric matrix is [[ -1  1]
 [ -1  1]
 [ 1 -1]
 [ 2 -2]]
The order of the reaction 1 is 2
The order of the reaction 2 is 3
```

3. Generaliza la función desarrollada anteriormente para proporcionar como salida la matriz  $(B - A)^T$ , el orden de cada reacción y las unidades de cada una de las constantes de velocidad. Prueba con las reacciones anteriores.

```
def calculate_stoichiometric_generic(A, B):
    '''Calculate transposition matrix of B-A, the order of both reactions
    and their units.'''
    transposition_matrix = np.transpose(B-A)

    reaction1 = np.sum(A[0])
    reaction2 = np.sum(B[0])

    units1 = 1 - reaction1
    units2 = 1 - reaction2

    return transposition_matrix, reaction1, units1, reaction2, units2

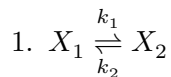
A = np.matrix('1 1 0 0; 0 0 1 2')
B = np.matrix('0 0 1 2; 1 1 0 0' )

print(f'The stoichiometric matrix is {calculate_stoichiometric_generic(A, B)[0]}')
print(f'The order of the reaction 1 is {calculate_stoichiometric_generic(A, B)[1]}')
print(f'The units of k1 are M^{calculate_stoichiometric_generic(A, B)[2]}/s')
print(f'The order of the reaction 2 is {calculate_stoichiometric_generic(A, B)[3]}')
print(f'The units of k2 are M^{calculate_stoichiometric_generic(A, B)[4]}/s')
```

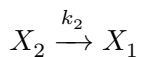
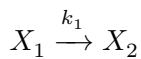
```
The stoichiometric matrix is [[-1  1]
 [-1 -1]
 [ 1 -1]
 [ 2 -2]]
The order of the reaction 1 is 2
The units of k1 are M^-1/s
The order of the reaction 2 is 3
The units of k2 are M^-2/s
```

## Parte 2

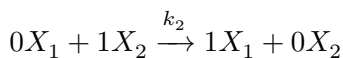
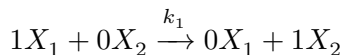
Encuentra el orden de las reacciones, las unidades de  $k$  y las ecuaciones diferenciales que gobiernan la dinámica del siguiente sistema:



Esto se divide en dos reacciones:



La formulación completa sería:



Obtenemos las matrices A y B:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Con esto podemos calcular  $(B - A)^T$ :

$$(B - A)^T = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$k = \begin{pmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{pmatrix}$$

$$X^A = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}$$

Aplicando la fórmula  $(B - A)^T \cdot k \cdot X^A$ , esto se resuelve de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_1 x_1 \\ k_2 x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 x_1 + k_2 x_2 \\ k_1 x_1 - k_2 x_2 \end{pmatrix}$$

De forma que:  $dx_1/dt = -k_1 x_1 + k_2 x_2$

$$dx_2/dt = k_1 x_1 - k_2 x_2$$

Y para comprobar las unidades:

$$dx_1/dt = -k_1 x_1 + k_2 x_2$$

$$dx_1/dt = \frac{Mol}{s}$$

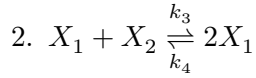
$$-k_1 x_1 + k_2 x_2 = \frac{1}{s} \cdot Mol + \frac{1}{s} \cdot Mol = \frac{Mol}{s}$$

Esto confirma que las unidades de la primera fórmula están bien. Para la segunda hacemos lo mismo:

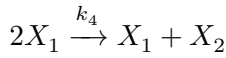
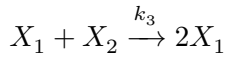
$$dx_2/dt = k_1x_1 - k_2x_2$$

$$dx_2/dt = \frac{Mol}{s}$$

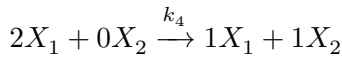
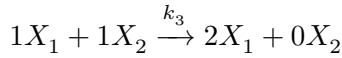
$$k_1x_1 - k_2x_2 = \frac{1}{s} \cdot Mol - \frac{1}{s} \cdot Mol = \frac{Mol}{s}$$



Esto se divide en dos reacciones:



La formulación completa sería:



Obtenemos las matrices A y B:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Con esto podemos calcular  $(B - A)^T$ :

$$(B - A)^T = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$k = \begin{pmatrix} k_3 & 0 \\ 0 & k_4 \end{pmatrix}$$

$$X^A = \begin{pmatrix} X_1X_2 \\ X_1^2 \end{pmatrix}$$

Aplicando la fórmula  $(B - A)^T \cdot k \cdot X^A$ , esto se resuelve de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_3x_1x_2 \\ k_4x_1^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_3x_1x_2 - k_4x_1^2 \\ -k_3x_1x_2 + k_4x_1^2 \end{pmatrix}$$

De forma que:  $dx_1/dt = k_3x_1x_2 - k_4x_1^2$

$$dx_2/dt = -k_3x_1x_2 + k_4x_1^2$$

Y para comprobar las unidades:

$$dx_1/dt = k_3x_1x_2 - k_4x_1^2$$

$$dx_1/dt = \frac{Mol}{s}$$

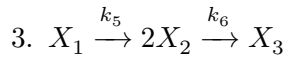
$$k_3x_1x_2 - k_4x_1^2 = \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol \cdot Mol + \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol \cdot Mol = \frac{Mol}{s}$$

Esto confirma que las unidades de la primera fórmula están bien. Para la segunda hacemos lo mismo:

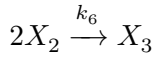
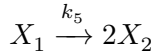
$$dx_2/dt = -k_3x_1x_2 + k_4x_1^2$$

$$dx_2/dt = \frac{Mol}{s}$$

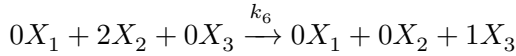
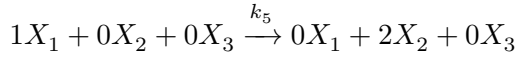
$$-k_3x_1x_2 + k_4x_1^2 = \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol \cdot Mol - \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol \cdot Mol = \frac{Mol}{s}$$



Esto se divide en dos reacciones:



La formulación completa sería:



Obtenemos las matrices A y B:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Con esto podemos calcular  $(B - A)^T$ :

$$(B - A)^T = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 2 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$k = \begin{pmatrix} k_5 & 0 \\ 0 & k_6 \end{pmatrix}$$

$$X^A = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2^2 \end{pmatrix}$$

Aplicando la fórmula  $(B - A)^T \cdot k \cdot X^A$ , esto se resuelve de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 2 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_5 X_1 \\ k_6 X_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_5 X_1 \\ 2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2 \\ k_6 X_2^2 \end{pmatrix}$$

De forma que:  $dX_1/dt = -k_5 X_1$

$$dX_2/dt = 2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2$$

$$dX_3/dt = k_6 X_2^2$$

Y para comprobar las unidades:

$$dX_1/dt = -k_5 X_1$$

$$dX_1/dt = \frac{Mol}{s}$$

$$-k_5 X_1 = \frac{1}{s} \cdot Mol = \frac{Mol}{s}$$

Esto confirma que las unidades de la primera fórmula están bien. Para la segunda hacemos lo mismo:

$$dX_2/dt = 2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2$$

$$dX_2/dt = \frac{Mol}{s}$$

$$2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2 = 2 \frac{1}{s} \cdot Mol - 2 \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol^2 = \frac{Mol}{s}$$

Y por último la tercera ecuación:

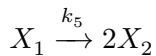
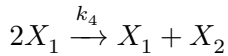
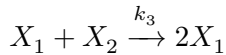
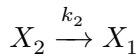
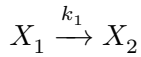
$$dX_3/dt = k_6 X_2^2$$

$$dX_3/dt = \frac{Mol}{s}$$

$$k_6 X_2^2 = \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol^2 = \frac{Mol}{s}$$

Y vemos que las tres están bien.

4. Extra: 1+2+3 Para este ejercicio, combinamos los tres anteriores. De esta forma, tenemos las siguientes reacciones:



$$2X_2 \xrightarrow{k_6} X_3$$

Las formulaciones completas serían:

$$1X_1 + 0X_2 \xrightarrow{k_1} 0X_1 + 1X_2$$

$$0X_1 + 1X_2 \xrightarrow{k_2} 1X_1 + 0X_2$$

$$1X_1 + 1X_2 \xrightarrow{k_3} 2X_1 + 0X_2$$

$$2X_1 + 0X_2 \xrightarrow{k_4} 1X_1 + 1X_2$$

$$1X_1 + 0X_2 + 0X_3 \xrightarrow{k_5} 0X_1 + 2X_2 + 0X_3$$

$$0X_1 + 2X_2 + 0X_3 \xrightarrow{k_6} 0X_1 + 0X_2 + 1X_3$$

Así, obtenemos las matrices A y B:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Con esto podemos calcular  $(B - A)^T$ :

$$(B - A)^T = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$k = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_6 \end{pmatrix}$$



$$X^A = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_1 X_2 \\ X_1^2 \\ X_1 \\ X_2^2 \end{pmatrix}$$

Aplicando la fórmula  $(B - A)^T \cdot k \cdot X^A$ , esto se resuelve de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_1 X_1 \\ k_2 X_2 \\ k_3 X_1 X_2 \\ k_4 X_1^2 \\ k_5 X_1 \\ k_6 X_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 X_1 + k_2 X_2 + k_3 X_1 X_2 - k_4 X_1^2 - k_5 X_1 \\ k_1 X_1 - k_2 X_2 - k_3 X_1 X_2 + k_4 X_1^2 + 2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2 \\ k_6 X_2^2 \end{pmatrix}$$

De forma que:  $dX_1/dt = -k_1 X_1 + k_2 X_2 + k_3 X_1 X_2 - k_4 X_1^2 - k_5 X_1$

$$dX_2/dt = k_1 X_1 - k_2 X_2 - k_3 X_1 X_2 + k_4 X_1^2 + 2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2$$

$$dX_3/dt = k_6 X_2^2$$

En cuanto a las unidades:

$$dX_1/dt = -k_1 X_1 + k_2 X_2 + k_3 X_1 X_2 - k_4 X_1^2 - k_5 X_1$$

$$dX_1/dt = \frac{Mol}{s}$$

$$-k_1 X_1 + k_2 X_2 + k_3 X_1 X_2 - k_4 X_1^2 - k_5 X_1 = -\frac{1}{s} \cdot Mol + \frac{1}{s} \cdot Mol + \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol \cdot Mol - \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol^2 - \frac{1}{s} \cdot Mol = \frac{Mol}{s}$$

Esto confirma que las unidades de la primera fórmula están bien. Para la segunda hacemos lo mismo:

$$dX_2/dt = k_1 X_1 - k_2 X_2 - k_3 X_1 X_2 + k_4 X_1^2 + 2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2$$

$$dX_2/dt = \frac{Mol}{s}$$

$$k_1 X_1 - k_2 X_2 - k_3 X_1 X_2 + k_4 X_1^2 + 2k_5 X_1 - 2k_6 X_2^2 = \frac{1}{s} \cdot Mol - \frac{1}{s} \cdot Mol - \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol \cdot Mol + \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol^2 + \frac{1}{s} \cdot Mol - \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol \cdot Mol = \frac{Mol}{s}$$

Y por último la tercera ecuación:

$$dX_3/dt = k_6 X_2^2$$

$$dX_3/dt = \frac{Mol}{s}$$

$$k_6 X_2^2 = \frac{1}{Mol \cdot s} \cdot Mol^2 = \frac{Mol}{s}$$