Task2 - Sistemas generalizados de interacciones

Redes Biológicas y Biología de Sistemas

Sandra Mingo Ramírez

Parte 1

```python
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:

- $NaCO_3 + CaCl_2 \leftrightarrow CaCO_3 + 2NaCl$

$NaCO_3 + CaCl_2 \rightarrow CaCO_3 + 2NaCl$

$CaCO_3 + 2NaCl \rightarrow NaCO_3 + CaCl_2$

$1X_1 + 1X_2 \rightarrow 1X_3 + 2X_4$

$1X_3 + 2X_4 \rightarrow 1X_1 + 1X_2$

$1X_1 + 1X_2 + 0X_3 + 0X_4 \rightarrow 0X_1 + 0X_2 + 1X_3 + 2X_4$

$0X_1 + 0X_2 + 1X_3 + 2X_4 \rightarrow 1X_1 + 1X_2 + 0X_3 + 0X_4$

$A_{11}X_1 + A_{12}X_2 + A_{13}X_3 + A_{14}X_4 \rightarrow B_{11}X_1 + B_{12}X_2 + B_{13}X_3 + B_{14}X_4$

$A_{21}X_1 + A_{22}X_2 + A_{23}X_3 + A_{24}X_4 \rightarrow B_{21}X_1 + B_{22}X_2 + B_{23}X_3 + B_{24}X_4$

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

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

- $N_2 + 3H_2 \leftrightarrow 2NH_3$

- $H_2 + I_2 \leftrightarrow 2IH$

```python
def calculate_transpose(A, B):
    ''' '''
    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.

```python
def calculate_transpose_order(A, B):
    ''' '''
    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):
    ''' '''
    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:

1. $X_1 \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} X_2$

Esto se divide en dos reacciones:

$X_1 \xrightarrow{k_1} X_2$

$X_2 \xrightarrow{k_2} X_1$

La formulación completa sería:

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

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

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, 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:

$dx_2/dt = k_1 x_1 - k_2 x_2$

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

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

2. $X_1 + X_2 \underset{k_4}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} 2X_1$

Esto se divide en dos reacciones:

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

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

La formulación completa sería:

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

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

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, 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:

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

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

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

3. $X_1 \xrightarrow{k_5} 2X_2 \xrightarrow{k_6} X_3$

Esto se divide en dos reacciones:

$X_1 \xrightarrow{k_5} 2X_2$

$2X_2 \xrightarrow{k_6} X_3$

La formulación completa sería:

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

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

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, 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