Facultad de Ingeniería | Universidad de Buenos Aires

2do. Cuatrimestre | 2020

95.10 | Modelación numérica
75.12 | Análisis numérico I A
93.13 | Métodos matemáticos y numéricos

Trabajo Práctico #2

Balances de masa metabólicos en la ingeniería biomédica

Descripción del problema

En el campo de la ingeniería biomédica es esencial el desarrollo de cultivos celulares microbióticos, fundamentalmente en la ingeniería de tejidos, ya que establece los conocimientos básicos sobre el crecimiento y mantenimiento de células *ex vivo*. Para ello es necesario el uso de sustratos bioquímicos que proporcionen los elementos químicos necesarios para el crecimiento de los microorganismos.

La representación estequiométrica de la fórmula química típica del crecimiento aeróbico de un microorganismo viene dado por:

$$C_2H_6OP_5 + a\ HNO + b\ NH_3O \rightarrow c\ CHO_{20}P_2 + d\ CHN_8 + e\ HN_4P_7O_2$$

La proporción de moles de CO_2 producidos por mol de O_2 consumido se denomina cociente respiratorio (*respiratory quotient*, RQ), que se determina empíricamente y se considera un valor conocido.

Para determinar el crecimiento teórico de los microorganismos es necesario calcular los coeficientes estequiométricos de la ecuación: *a*, *b, c, d, e.*

Para ello podemos escribir los equilibrios entre masas para cada uno de los elementos individuales:

C (carbono):	2 = c + (*RQ*)a + d
H (hidrógeno):	6 + 3b + a = c + d + e
O (oxígeno):	1 + a + b = 20c + 2e
N (nitrógeno):	a + b = 8d + 4e
P (fósforo):	5 = 2c + 7e

Nos queda así un sistema de ecuaciones que podemos escribir de forma matricial Ax =b, con:

$$\begin{pmatrix} RQ & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 20 & 0 & 2 \\ -1 & -1 & 0 & 8 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -6 \\ 1 \\ 0 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Descripción de tareas

a) Codificar un algoritmo que resuelva un Sistema de Ecuaciones Lineales mediante el método de Eliminación Gaussiana. Resolver el problema con el método directo considerando que empíricamente se ha obtenido un cociente respiratorio de *RQ*=0.2.

b) Codificar un algoritmo que resuelva un Sistema de Ecuaciones Lineales mediante los métodos de Jacobi y Gauss Seidel. Resolver el problema con estos dos métodos indirectos considerando que empíricamente se ha obtenido un cociente respiratorio de *RQ*=0.2. Adoptar como solución inicial a=b=c=d=e=0 y trabajar con una tolerancia de 0.0001.

c) Codificar un algoritmo que resuelva un Sistema de Ecuaciones Lineales mediante el método de Sobrerrelajaciones Sucesivas (SOR). Resolver el problema con este método indirecto considerando que empíricamente se ha obtenido un cociente respiratorio de *RQ*=0.2. Adoptar como solución inicial a=b=c=d=e=0 y trabajar con una tolerancia de 0.0001. Probar cinco coeficientes de sobrerrelajación diferentes y adoptar como solución la que menor cantidad de iteraciones ofrece.

d) Considerando la solución del método directo Eliminación Gaussiana como exacta, calcular usando la norma vectorial infinito, el error de las aproximaciones de Jacobi, Gauss Seidel y SOR.

e) Utilizando el algoritmo de Eliminación Gaussiana, realizar un análisis de sensibilidad de la variable *RQ*. Probar los siguientes coeficientes: RQ=0.3, RQ=0.4, RQ=0.5, y RQ=0.6. Comparar resultados.

f) Realizar un análisis de convergencia de los métodos indirectos. Adoptar como solución inicial a=b=c=d=e=0, *RQ*=0.2, trabajar con una tolerancia de 0.000001 y considerar como solución exacta la obtenida con Eliminación Gaussiana. Graficar para cada método la relación error versus número de iteraciones (*para cada iteración de cada método evaluar el error*).