

LAPORAN

PRAKTIKUM KOMPUTASI BIOMEDIS

Chapter 4 : System of Linier Equation: Gauss Elimination

Pelaksanaan Praktikum:

Hari: Senin

Tanggal: 3 September 2019

Jam ke: 9-10



Oleh:

Nama : M. Thoriqul Aziz E

NIM : 081711733002

Dosen Pembimbing : Endah Purwanti, S. Si, M. T.

LABORATORIUM KOMPUTER
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AIRLANGGA
SURABAYA

2019

A. TUJUAN

Mahasiswa dapat menyelesaikan sistem persamaan linier menggunakan Metode Eliminasi Gauss.

B. DASAR TEORI

Metode eliminasi gauss merupakan metode penentuan nilai akar sebuah persamaan dengan membentuk matriks interval segitiga atas dengan menerapkan aritmatika yang dimodifikasi. (Egi dkk, 2015)

Sistem algoritma dari metode ini adalah dengan membuat nol pada anggota matriks dibawah nilai diagonal utama dengan menggunakan algoritma eliminasi gauss interval, yaitu dengan mengalikan nilai entri yang sama dengan anggota matriks dibawahnya sedemikian sehingga kemudian bernilai nol terhadap diagonal utama. Dan kemudian algoritma tersebut berulang terus hingga pada matriks akhir hanya memiliki satu nilai yang kemudian mendefinisikan variabelnya.

Setelah pembuatan matriks segitiga atas, maka akan dilakukan eliminasi balik matriks, yaitu mencari nilai akar persamaan dari nilai matriks yang hanya bersisa satu yaitu anggota matriks diagonal utama paling akhir, sehingga nilai akar persamaan dari variable akhir persamaan diketahui. Kemudian mencari tahu variable selisih satu dibawahnya dengan nilai awalan variable yang diketahui. Proses berulang terus hingga semua nilai akar diketahui. Berikut adalah persamaan matematika yang digunakan:

Rumus membentuk segitiga atas matriks:

$m = \text{baris} ; n = \text{kolom} ; A = \text{matriks koefisien} ; B = \text{matriks hasil}$

$$A(i, j) = A(i, j) - \frac{A(i, eli)}{A(eli, eli)} \times A(eli, j) ; eli = 1 : m - 1 ; i = eli + 1 : m ; j = 1 : n ;$$

$$B(i, 1) = B(i, 1) - \frac{A(i, eli)}{A(eli, eli)} \times B(eli) ; eli = 1 : m - 1 ; i = eli + 1 : m ; j = 1 : n ;$$

Rumus melakukan eliminasi balik:

$$x(i) = \frac{b(i) - \sum_{j=i+1}^m A(i, j) \times x(j)}{A(i, i)} ; i = m - 1 : -1 : 1$$

C. TUGAS

Find the Solution for linier equation system in following problem!

Pharmacokinetic modelling for "animal-on-chip"

A material balance is performed for naphthalene epoxide(NO) generation, consumption, and transport in μ CCA device described in Figure 4.1; NO in an intermediate formed during the metabolism of naphthalene

Routes of generation of naphthalene epoxide:

1. Conversion of naphthalene into its epoxide.
2. Conversion of epoxide to naphthalene dihydrodiol;
3. Binding to GSH to form epoxide-GSH conjugates;
4. Rearrangement to naphthol.

The material balance diagram for naphthalene epoxide (NO) is shown in Figure 4.1. Since we are dealing with a multicomponent system, we use superscripts N, NO, and NOH for naphthalene, naphthalene epoxide, and naphthol, respectively, to differentiate between the concentration terms in various compartments.

A mass balance of NO is performed over two chambers- lung and liver. This yields two linier equations in the unknown C_{liver}^{NO} and C_{lung}^{NO} . Note that simplifications have been made to original equations (Quick and Shuler, 1999) by assuming that C_{liver}^{NO} and C_{lung}^{NO} are small in comparison to relevant constants in the equations.

Lung compartment:

$$R(Q_{liver}C_{liver}^{NO} + Q_{ot}C_{lung}^{NO}) + v_{max,P450-lung}V_{lung} - \frac{v_{max,P450-lung}C_{lung}^{NO}}{K_{m,EH-lung}}V_{lung} - V_{lung} \frac{v_{max,GST}C_{lung}^{NO}C_{lung}^{GSH}}{K1_{lung}+K2_{lung}C_{lung}^{GSH}} - k_{NOH} \exp(l_{NOH}TP_{lung})C_{lung}^{NO}V_{lung} - Q_{lung}C_{lung}^{NO} = 0 \text{ (Eq. 1)}$$

Liver compartment:

$$\begin{aligned}
& Q_{liver} C_{lung}^{NO} + v_{max,P450-lung} V_{liver} - \frac{v_{max,P450-liver} C_{liver}^{NO}}{K_{m,EH-liver}} V_{liver} \\
& - V_{liver} \frac{v_{max,GST} C_{liver}^{NO} C_{liver}^{GSH}}{K1_{liver} + K2_{liver} C_{liver}^{GSH}} \\
& - k_{NOH} \exp(l_{NOH} T P_{liver}) C_{liver}^{NO} V_{liver} - Q_{liver} C_{liver}^{NO} \\
& = 0 \text{ (Eq. 2)}
\end{aligned}$$

No balance assumptions

1. Binding of naphthalene epoxide to proteins is comparatively less important and can be neglected.
2. The concentration of GSH in cells is constant. It is assumed that GSH is resynthesized at the rate of consumption.
3. Production of the RS enantiomer of epoxide (compared to SR oxide) is dominant and hence reaction parameters pertaining to RS production only are used.
4. The total protein content in the cells to which the metabolites bind remains constant.

The parametric values and definitions are provided below. The modeling parameters correspond to naphthalene processing on mice.

Flowrates

Q_{lung} : flowrate through lung compartment = 2μl/min;

Q_{liver} : flowrate through liver compartment = 0.5μl/min;

Q_{ot} : flowrate through other tissues compartment = 1.5μl/min.

Compartment

V_{lung} : volume of lung compartment = 0.08μl;

V_{liver} : volume of liver compartment = 0.322μl.

Reaction Constants

1. Naphthalene → naphthalene epoxide

$v_{max,P450-lung}$: maximum reaction velocity for conversion of naphthalene into naphthalene epoxide by cytochrome P450 monooxygenases in lung cells = 8.75μM/min;

$v_{max,P450-liver}$: maximum reaction velocity for conversion of naphthalene into naphthalene epoxide by cytochrome P450 monooxygenases in liver cells = 118 $\mu\text{M}/\text{min}$.

2. Naphthalene epoxide \rightarrow naphthalene dihydrodiol

$v_{max,EH-lung}$: maximum reaction velocity for conversion of naphthalene epoxide to dihydrodiol by epoxide hydrolase in the lung = 26.5 $\mu\text{M}/\text{min}$;

$K_{m,EH-lung}$: Michaelis constant = 4 μM ;

$v_{max,EH-liver}$: maximum reaction velocity for conversion of naphthalene epoxide to dihydrodiol by epoxide hydrolase in the liver = 336 $\mu\text{M}/\text{min}$;

$K_{m,EH-liver}$: Michaelis constant = 21 μM ;

3. Naphthalene epoxide \rightarrow naphthol

k_{NOH} : rate constant for rearrangement of epoxide to naphthol = 4 $\mu\text{M}/\mu\text{M}$ of NO/min;

l_{NOH} : constant that relates naphthol formation rate to total protein content = -20.2 ml/g protein

4. Naphthalene epoxide \rightarrow epoxide-GSH conjugates

$v_{max,GST}$: maximum reaction velocity for binding of naphthalene epoxide to GSH catalyzed by GST (glutathione S-transferase) = 2750 $\mu\text{M}/\text{min}$;

$K1_{lung}$: constant in epoxide-GSH binding rate = 310000 μM^2 ;

$K2_{lung}$: constant in epoxide-GSH binding rate = 35 μM ;

$K1_{liver}$: constant in epoxide-GSH binding rate = 150 000 μM^2 ;

$K2_{liver}$: constant in epoxide-GSH binding rate = 35 μM

Protein Concentrations

TP_{lung} : total protein content in lung compartment = 92 mg/ml;

TP_{liver} : total protein content in liver compartment = 192 mg/ml;

C_{lung}^{GSH} : GSH concentrations in lung compartment = 1800 μM ;

C_{liver}^{GSH} : GSH concentrations in liver compartment = 7500 μM ;

R: fraction of the exiting stream that reenters the microcircuit.

Your goal is to vary the recycle fraction from 0.6 to 0.95 in increasing increments of 0.05 in order to study the effect of reduced excretion of toxicant on circulating concentration values of naphthalene and its primary metabolite naphthalene epoxide.

- Use the Gaussian Elimination Method to determine the naphthalene epoxide concentrations at the outlet of the lung and liver compartments of the animal on-a-chip for the range of R specified.
- Plot the concentration values of epoxide in the liver and lung chambers as a function of R.

D. PEMBAHASAN

- Permasalahan yaitu terdapat beberapa persamaan yang digunakan untuk menghitung naphthalene epoxide pada peredaran obat di paru paru dan hati. Kemudian dari persamaan tersebut, masukkan semua nilai yang diketahui dari soal sehingga nantinya terdapat 2 persamaan. Dari 2 persamaan tersebut, kemudian dibentuk dalam sebuah matriks koefisien dan juga matriks dari hasil. Dari matriks tersebut, kemudian dicari nilai akar akarnya menggunakan metode Eliminasi Gauss. Dalam algoritma program, akan dibentuk matriks segitiga dari matriks koefisien menggunakan perulangan dalam penentuan anggota matriks yang digunakan. Setelah itu matriks segitiga atas terbentuk, kemudian melakukan eliminasi balik pada matriks a dan matriks b hasil oprasi segitiga atas. Berikut adalah urutan dalam penentuan persamaan fungsi yang digunakan: Dari persamaan 1, susbtitusikan nilai nilainya menjadi:

$$R(0.5 \times C_{liver}^{NO} + 1.5 \times C_{lung}^{NO}) + 8.75 \times 0.08 - \frac{8.75 \times C_{lung}^{NO}}{4} \times 0.08 - 0.08 \times$$

$$\frac{2750 \times C_{lung}^{NO} \times 1800}{310000 + 35 \times 1800} - 0.175 \exp\left(\frac{-20.2 \times 92}{1000}\right) C_{lung}^{NO} \times 0.08 - 2 \times C_{lung}^{NO} = 0$$

$$asumsi C_{liver}^{NO} = x1 ; C_{lung}^{NO} = x2$$

$$0.5Rx1 + 1.5Rx2 + 0.7 - 0.175x2 - 1.061x2 - 2.157 \times 10^{-3}x2 - 2x2 = 0$$

$$0.5Rx1 + (1.5R - 3.238157)x2 = -0.7; (Eq.3)$$

Dari persamaan 2, substitusikan nilai nilainya menjadi:

$$0.5 \times C_{lung}^{NO} + 8.75 \times 0.322 - \frac{8.75 \times C_{liver}^{NO}}{21} \times 0.322 - 0.322 \frac{2750 C_{liver}^{NO} 7500}{150000 + 35 \times 7500} -$$

$$0.173 \exp\left(\frac{-20.2 \times 192}{1000}\right) C_{liver}^{NO} 0.322 - 0.5 C_{liver}^{NO} = 0$$

$$asumsi \ C_{liver}^{NO} = x1 ; \ C_{lung}^{NO} = x2$$

$$0.5x2 + 28175 - 0.13416x1 - 16.1x1 - 1.152 \times 10^{-3}x1 - 0.5x1 = 0$$

$$16.7353x1 - 0.5x2 = 2.8175; (Eq. 4)$$

Dari hasil persamaan tersebut maka akan dibentuk nilai matriks seperti dibawah ini:

$$\begin{bmatrix} 0.5R & 1.5R - 3.238157 \\ 16.7353 & -0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x1 \\ x2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.7 \\ 2.8175 \end{bmatrix}$$

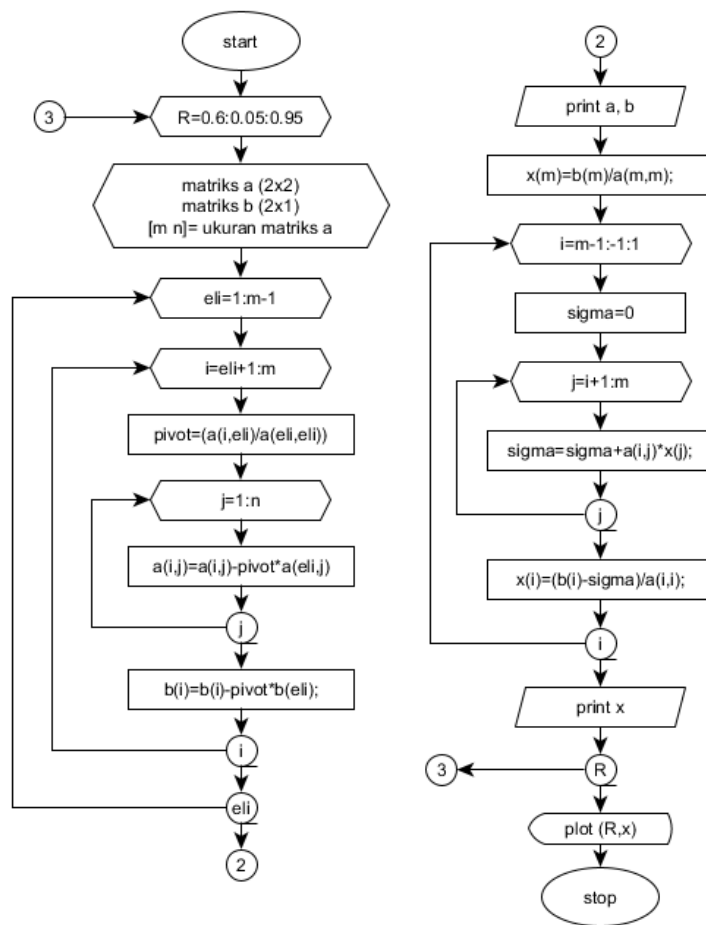
Dengan matriks a =

$$\begin{bmatrix} 0.5R & 1.5R - 3.238157 \\ 16.7353 & -0.5 \end{bmatrix}$$

Dan matriks b =

$$\begin{bmatrix} -0.7 \\ 2.8175 \end{bmatrix}$$

Dari matriks tersebut, maka dapat disusun dalam program untuk dilakukan perhitungan. Berikut adalah flowchart dari kasus tersebut dalam Metode Eliminasi Gauss:



Berikut kode program dalam IDE Octave 5.10:

```

1 clear
2 clc
3
4 for R=0.6:0.05:0.95
5     a=[ 0.5*R    1.5*R-3.238157;
6         16.7353 -0.5];
7     b=[-0.7;2.8175];
8     %%-----SEGITIGA ATAS-----
9     [m n]=size(a);
10    for eli=1:m-1
11        for i=eli+1:m
12            pivot=(a(i,eli)/a(eli,eli));
13            for j=1:n
14                a(i,j)=a(i,j)-pivot*a(eli,j);
15            endfor
16            b(i)=b(i)-pivot*b(eli);
17        endfor
18    endfor
19    a;
20    b;

```



```

19 a;
20 b;
21 %%-----SUBSTITUSI BALIK-----
22 x(2)=b(2)/a(2,2);
23 for i=1:1
24     sigma=0;
25     for j=2:2
26         sigma=sigma+a(i,j)*x(j);
27     endfor
28     x(i)=(b(i)-sigma)/a(i,i);
29 endfor
30 fprintf('x1= ');
31 disp(x(1))
32 endfor
33

```

Pada syntax:

```

for R=0.6:0.05:0.95
    a=[ 0.5*R    1.5*R-3.238157;
        16.7353 -0.5];
    b=[-0.7;2.8175];

```

Pada syntax `for R=0.6:0.05:0.95` menunjukkan bahwa nilai R akan terus di-update dari nilai 0.6 hingga 0.95 dengan kenaikan tiap iterasi 0.05. kemudian, a dan b merupakan inialisasi dari matriks a dan b yang diperoleh dari penyusunan koefisien dan hasil dari persamaan yang telah diselesaikan sebelumnya.

Pada syntax:

```
[m n]=size(a);
```

Menentukan ukuran dari matriks a yang kemudian akan dimasukan dalam variable m sebagai baris dan n sebagai kolom.

Pada syntax:

```
for eli=1:m-1
```

menunjukkan terjadi perulangan variable eli yaitu variable penentu untuk menentukan penggunaan anggota matriks. Dalam penggunaan metode Eliminasi Gauss, penggunaan variable ini sebagai penentu dalam penentuan nilai pivot

Pada syntax:

```
for i=eli+1:m
```

```
    pivot=(a(i,eli)/a(eli,eli));
```

menunjukkan perulangan untuk baris yang diberi variable i yang dimulai dari nilai eli sebelumnya ditambah dengan 1, hingga ke nilai m / besar baris matriks a. Kemudian didalamnya diberikan syntax $\text{pivot} = (a(i, \text{eli}) / a(\text{eli}, \text{eli}))$; sebagai penentu nilai pivot yang nantinya akan digunakan dalam perhitungan berikutnya. Dan nilai pivot ini akan tetap sama hingga perulangan i berakhir.

Pada syntax:

```
for j=1:n
```

```
    a(i,j)=a(i,j)-pivot*a(eli,j);
```

dari syntax tersebut menunjukkan perulangan untuk penentuan pergeseran baris j dari 1 hingga kolom dari matriks a berakhir. Dalam perulangan tersebut dilakukan aktivitas $a(i, j) = a(i, j) - \text{pivot} * a(\text{eli}, j)$; yaitu mengupdate nilai anggota matriks a dengan baris tetap i akan tetapi bergeser kolom dengan mengurangi nilai awal dari anggota matriks $a(i, j)$ dengan perkalian nilai pivot sebelumnya dengan anggota matriks $a(\text{eli}, \text{eli})$.

Pada syntax:

```
endfor
```

```
    b(i)=b(i)-pivot*b(eli);
```

setelah melakukan perulangan pada $\text{for } j=1:n$, maka program akan mulai menghitung nilai anggota matriks b pada baris yang sama dengan anggota matriks a sebelumnya dengan rumus yang sama $b(i) = b(i) - \text{pivot} * b(\text{eli})$;

pada syntax:

```
a
```

```
b
```

berfungsi untuk menunjukkan nilai anggota matriks a dan b hasil perhitungan Eliminasi Gauss sehingga membentuk matriks segitiga atas pada matriks a. Berikut adalah hasil yang ditampilkan pada *command window*:

a =		a =		Command Window	
0.30000	-2.33816	0.37500	-2.11316	a =	
0.00000	129.93253	0.00000	93.80484	0.45000	-1.88816
b =		b =		0.00000	69.71972
-0.70000		-0.70000		b =	
41.86653		34.05673		-0.70000	
a =		a =		28.85019	
0.32500	-2.26316	0.40000	-2.03816	a =	
0.00000	116.03727	0.00000	84.77292	0.47500	-1.81316
b =		b =		0.00000	63.38153
-0.70000		-0.70000		b =	
38.86276		32.10427		-0.70000	
a =		a =		27.48005	
0.35000	-2.18816	0.42500	-1.96316	>>	
0.00000	104.12704	0.00000	76.80358		
b =		b =			
-0.70000		-0.70000			
36.28810		30.38152			

Dari gambar tersebut diatas menunjukan lebih dari satu nilai matriks a dan b, akibat dari perulangan nilai R sebelumnya.

Pada syntax:

```
x(m) = b(m) / a(m, m);
```

menunjukan nilai variable x pada baris ke m yang merupakan hasil akar dari persamaan yang terbentuk. Dan juga sebagai nilai awal untuk masuk dalam perhitungan berikutnya.

Pada syntax:

```
for i=m-1:-1:1
    sigma=0;
```

menunjukan terjadi perulangan terbalik variable i dari batas atas m-1 menuju 1. Yang mana nilai i ini kemudian akan digunakan sebagai penentu keanggotaan matriks dalam perhitungan berikutnya. Variable *sigma=0* yaitu menunjukan awalan proses dari perulangan i. Variable sigma ini kemudian nantinya akan digunakan untuk menentukan nilai akar persamaan yang lain yang belum diketahui.

Pada syntax:

```
for j=i+1:m
    sigma=sigma+a(i, j)*x(j);
```

nilai perulangan j menunjukan penggunaan anggota matriks kolom j yang mana digunakan untuk menentukan perhitungan nilai sigma. Pada syntax *sigma=sigma+a(i, j)*x(j);* digunakan untuk mengupdate nilai sigma

sedemikian sehingga hanya ada satu nilai akar yang tidak diketahui pada perhitungan substitusi balik berikutnya.

Pada syntax

endfor

```
x(i)=(b(i)-sigma)/a(i,i);
```

setelah ditentukan nilai sigma dari perulangan variable j sebelumnya, kemudian nilai sigma akhir akan masuk kedalam perhitungan $x(i) = (b(i) - \text{sigma}) / a(i, i)$; sehingga diketahui nilai akar persamaan. Setelah itu, variable perulangan i akan mengulang lagi untuk menemukan nilai akar akar yang lain.

Pada syntax:

```
fprintf("\nketika n= ");
```

```
disp(R)
```

```
fprintf("x1= ");
```

```
disp(x(1))
```

```
fprintf("x2= ");
```

```
disp(x(2))
```

menunjukkan syntax untuk menampilkan semua nilai akar akar dari tiap iterasi/perulangan nilai R. Berikut yang ditampilkan pada *command window*:

```
Command Window

ketika n= 0.60000
x1= 0.17798
x2= 0.32222

ketika n= 0.65000
x1= 0.17836
x2= 0.33492

ketika n= 0.70000
x1= 0.17877
x2= 0.34850

ketika n= 0.75000
x1= 0.17920
x2= 0.36306

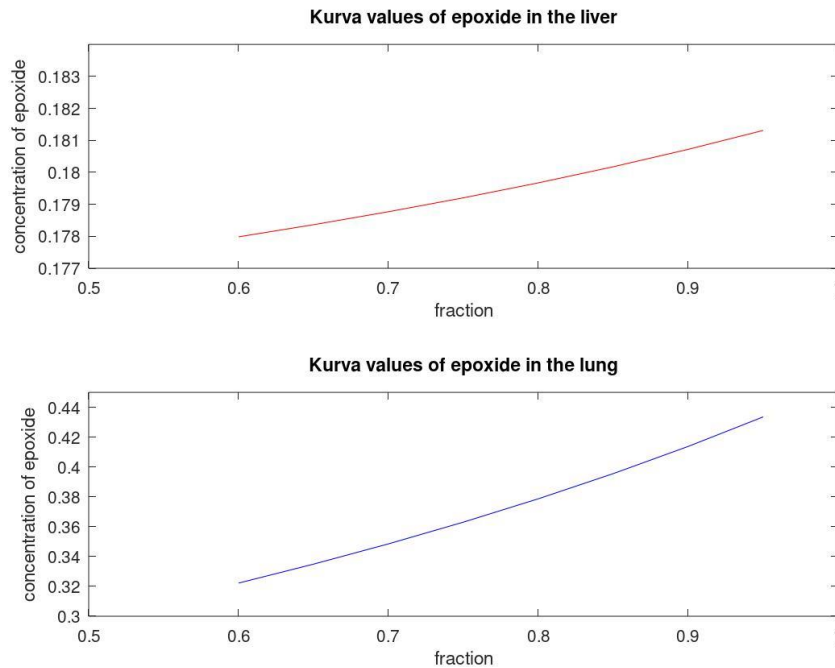
ketika n= 0.80000
x1= 0.17967
x2= 0.37871

ketika n= 0.85000
x1= 0.18018
x2= 0.39557

ketika n= 0.90000
x1= 0.18072
x2= 0.41380

ketika n= 0.95000
x1= 0.18131
x2= 0.43357
>>
```

2. Berikut adalah hasil kurva konsentrasi epoxide pada liver dan paru paru



E. KESIMPULAN

Hasil akar akar penyelesaian 2 persamaan menggunakan metode Eliminasi Gauss dalam sepanjang nilai R 0.6 hingga 0.95 dengan kenaikan 0.05 tiap iterasi adalah untuk $x_1=0.17798$; 0.17836;0.17877;0.17920;0.17967;0.18018;0.18072;0.18131; . dan $x_2=0.32222$;0.33492;0.34850;0.36306;0.37871;0.39557;0.41380;0.43357

F. DAFTAR PUSTAKA

Capra, Steven C and Canale.1991. “**Numerical Methods for Engineers with Personal Computers Applications**”. MacGraw-Hill Book Company.

Zulkarnain, Egi , Bayu Prihandono, Ilhamsyah.2015.” **Algoritma Eliminasi Gauss Interval dalam Mendapatkan Nilai Determinan Matriks Interval dan Mencari Solusi Sistem Persamaan Interval Linier**”. Buletin Ilmiah MathStat dan terapannya. Diakses pada 8 September 2019.

King M.R and Mody N.A .2010. “**Numerical and Statical Methods for Bioengineering**”.Cambridge University Press. New York.

Patel VA. 1994. “**Numerical Analysis**” .Saunders College Publishing

