

**Universidad de Puerto Rico**  
**Departamento de Matemáticas**  
**Humacao, Puerto Rico 00791**

Programa BRIDGES

Modelaje Matemático

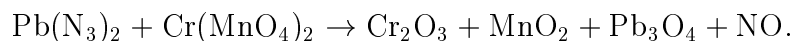
Dr. Pablo Negrón

## Laboratorio III: Reacciones Químicas

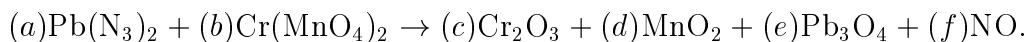
En este laboratorio vamos a estudiar dos aplicaciones importantes de modelos matemáticos a problemas en química. En particular veremos como técnicas de la rama de la matemática conocida como el *álgebra lineal* nos permite resolver problemas de balanceo de ecuaciones, y veremos una aplicación de las *ecuaciones diferenciales* para modelar reacciones de enzima y sustrato.

### Balanceo de Ecuaciones

Considere la siguiente reacción química (sin balancear):



Queremos hallar enteros  $a, b, c, d, e$  y  $f$ , los cuales representan el número de moléculas de los diferentes compuestos envueltos en la reacción, tal que en la reacción:



el número de átomos de cada elemento en la izquierda sea igual al de la derecha. Haciendo esto obtenemos el siguiente *sistema de ecuaciones lineales*:

$$\begin{array}{ll} a = 3e & \text{átomos de Pb,} \\ 6a = f & \text{átomos de N,} \\ b = 2c & \text{átomos de Cr,} \\ 2b = d & \text{átomos de Mn,} \\ 8b = 3c + 2d + 4e + f & \text{átomos de O.} \end{array}$$

Este sistema lo podemos escribir como el *sistema homogéneo*:

$$\left\{ \begin{array}{l} a - 3e = 0, \\ 6a - f = 0, \\ b - 2c = 0, \\ 2b - d = 0, \\ 8b - 3c - 2d - 4e - f = 0. \end{array} \right.$$

Note que hay seis desconocidas y solo cinco ecuaciones (*sistema sub-determinado*). Este sistema lo podemos representar en forma esquemática con la siguiente *matriz aumentada*:

$$\left[ \begin{array}{cccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & -3 & -2 & -4 & -1 & 0 \end{array} \right]$$

La primera columna de esta matriz contiene los coeficientes de la variable  $a$  en cada ecuación, la segunda columna los de la  $b$ , etc.. Esta matriz la podemos especificar en MATLAB mediante la instrucción:

```
A=[1,0,0,0,-3,0,0;6,0,0,0,0,-1,0;0,1,-2,0,0,0,0;
    0,2,0,-1,0,0,0;0,8,-3,-2,-4,-1,0];
```

Antes de resolver el sistema, le pedimos a MATLAB que realice todas las operaciones con fracciones, i.e., que no redondee. Esto lo logramos con la instrucción:

```
format rational
```

Podemos ahora resolver el sistema con la instrucción:

```
rref(A)
```

lo cual produce los siguientes resultados:

$$\left[ \begin{array}{cccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{6} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -\frac{22}{45} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -\frac{11}{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -\frac{44}{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -\frac{1}{18} & 0 \end{array} \right]$$

(Nota: ¡El resultado no se ve de esta forma en la pantalla de la computadora!) De aquí podemos leer ahora las soluciones:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{6}f, & b &= \frac{22}{45}f, & c &= \frac{11}{45}f, \\ d &= \frac{44}{45}f, & e &= \frac{1}{18}f, & f &= f, \end{aligned} \tag{1}$$

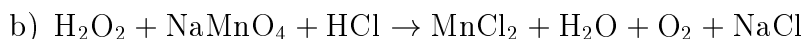
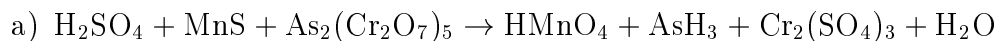
donde la  $f$  puede ser cualquier número. Para que  $a, b, c, d, e, f$  sean enteros, debemos seleccionar a  $f$  como un entero divisible por 6, 18, y 45, y debe ser el menor con esa propiedad, esto es, el *mínimo común múltiplo* de estos tres números. La función `lcm` de MATLAB calcula el mínimo común múltiplo de DOS números. Usando una propiedad del mínimo común múltiplo tenemos que el de 6, 18, y 45 lo podemos calcular en MATLAB mediante:

1cm(1cm(6,18),45)

lo que nos da como resultado 90. Así que sustituyendo  $f = 90$  en (1) obtenemos que:

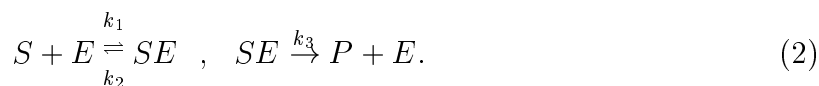
$$a = 15 \quad , \quad b = 44 \quad , \quad c = 22 \quad , \quad d = 88 \quad , \quad e = 5.$$

**Ejercicio 0.1.** Balancee las siguientes reacciones químicas:



## Reacciones de Enzima–Sustrato

En los seres vivos constantemente ocurren reacciones bioquímicas que envuelven proteínas llamadas *enzimas* las cuales funcionan de forma efectiva como agentes catalíticos. Las enzimas reaccionan en forma selectiva con compuestos específicos llamados *sustratos*. Por ejemplo, la hemoglobina en las células rojas de la sangre es una enzima y el oxígeno, con el cual se combina, es el sustrato. Las enzimas son importantes para regular procesos biológicos, como por ejemplo activando ó inhibiendo una reacción. La reacción más básica para una enzima fue propuesta por Michaelis y Menten (1913) y envuelve un sustrato  $S$  reaccionando con una enzima  $E$  y formando un complejo  $SE$  que a su vez se convierte en un producto  $P$  y la enzima. Esta reacción se representa esquemáticamente por:



Las constantes  $k_1, k_2, k_3$  son las tasas o razones de las reacciones asociadas (miden la rapidez con que ocurre la reacción). Las dos reacciones combinadas se pueden visualizar como un proceso para convertir el sustrato  $S$ , por medio de la enzima catalítica  $E$ , al producto  $P$ . Denotamos las concentraciones de los reactantes en (2) por:

$$s = [S] \quad , \quad e = [E] \quad , \quad c = [SE] \quad , \quad p = [P],$$

donde los corchetes denotan concentración del reactante en cuestión. La razón a que ocurre una reacción es proporcional al producto de las concentraciones de los reactantes (*Ley de Acción de Masas*). Si denotamos por  $ds/dt$  la razón a la que cambia la concentración de  $S$ , etc., entonces de (2) tenemos las siguientes *ecuaciones diferenciales* para las concentraciones de los reactantes en (2):

$$\begin{aligned} \frac{ds}{dt} &= -k_1es + k_2c & , & \quad \frac{de}{dt} = -k_1es + (k_2 + k_3)c, \\ \frac{dc}{dt} &= k_1es - (k_2 + k_3)c & , & \quad \frac{dp}{dt} = k_3c. \end{aligned} \quad (3)$$

A estas ecuaciones se le añaden las *condiciones iniciales* que especifican las concentraciones de los reactantes al comenzar la reacción:

$$s(0) = s_0 \quad , \quad e(0) = e_0 \quad , \quad c(0) = 0 \quad , \quad p(0) = 0. \quad (4)$$

Este sistema, para distintos valores de los parámetros  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ ,  $s_0$ , y  $e_0$ , lo podemos resolver con la función `ode45` de MATLAB. El programa `enzy_subst` es una interface que creamos para esto. Este programa lo invocamos mediante:

```
enzy_subst(k1,k2,k3,s0,e0,tf)
```

donde `k1`, `k2`, `k3` son los valores de  $k_1, k_2, k_3$ ; `s0`, `e0` son los valores de  $s_0, e_0$ ; y `tf` es el tiempo total que correrá la reacción. Por ejemplo la corrida:

```
enzy_subst(0.1,0.1,0.1,10,10,50)
```

produce los resultados que se muestran en la Figura (1).

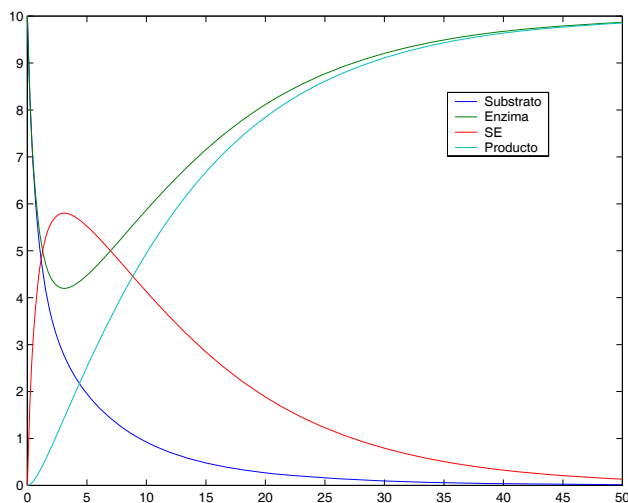


Figura 1: Un ejemplo de una simulación usando el modelo Michaelis–Menten de enzima–sustrato.

**Ejercicio 0.2.** Experimente con el programa `enzy_subst` los efectos de los distintos parámetros del modelo Michaelis–Menten. Esto es, explore los efectos de las diferentes constantes de reacción ( $k_1, k_2, k_3$ ) y las concentraciones iniciales de sustrato y enzima.

## Referencias

- [1] Agnew, J. L. and Knapp, R. C., , Linear Algebra with Applications, Brooks/Cole Publishing Co., California, 1989.

- [2] Murray, J. D., *Mathematical Biology*, Second Edition, Springer Verlag, New York, 1993.