

Nombre:

SOLUCIONES

2.5	2.5	3	1.6	
-----	-----	---	-----	--

9.6

1. Se estudia el efecto de un inhibidor en una reacción enzimática. Para ello se mide en cada caso la velocidad de reacción, obteniéndose los siguientes datos (en mMol/min)

C:	con inhibidor	52	42	38	62	48	55	56	59	71	54	44	62	65
S:	sin inhibidor	104	96	100	105	75	86	108	68	52	106	84	99	91

- Representa los datos mediante un diagrama de tallos y hojas doble (a mano)
- Representa los datos mediante un diagrama boxplot doble (con máxima o a mano), indicando mediana, cuartiles y presencia de atípicos en cada caso
- Extrae de los dibujos conclusiones sobre el efecto del inhibidor: simetría, dispersión, sesgos, etc... ¿Es razonable concluir que el inhibidor ralentiza la reacción?
- Calcula en cada caso la media y desviación típica. Utiliza el coeficiente de variación para valorar si los datos están mucho o poco dispersos.
- Suponer que los datos con inhibidor se distribuyen como una normal $N(\mu, \sigma)$, con μ y σ desconocidos. Encuentra un intervalo de confianza para μ al 95%. ¿Hay evidencia suficiente para descartar que $\mu = 60$?

Nota: 2.5 puntos

Observación: se valorará la calidad del box-plot dibujado con Maxima (escala correcta, datos atípicos, etc...)

a)	con inhibidor	sin inhibidor	b) Con máxima
a) ✓	8	30	• Con inhibidor (box-plot 1)
b) ✓	4 8 2	40	mediana = 55
c) ✓	4 9 6 5 2	50 2	$Q_1 = 48, Q_3 = 62$
d) ✓	5 2 2	60 8	No hay atípicos
e) ✓	1	70 5	• Sin inhibidor (box-plot 2)
		80 6 4	mediana = 96
		90 6 9 1	$Q_1 = 84, Q_3 = 104$
		100 4 0 5 8 6	Datos atípicos = 52 ✓

c) En la reacción con inhibidor observamos que los datos son simétricos, y presentan poca dispersión. Los datos están centrados en torno a 50 y no presentan sesgos ni datos atípicos. En la reacción sin inhibidor los datos son menos simétricos y presentan un claro sesgo hacia la izquierda, además de un dato atípico (52). Los datos, más dispersos que en la otra reacción, se centran en torno a 100. Como los datos de la reacción sin inhibidor se encuentran mucho más desplazados hacia la derecha que los de la reacción sin inhibidor, los cuales se centran en torno a 50, podemos afirmar que el inhibidor ralentiza la reacción.

d) Con máxima (explicación en máxima)

• Con inhibidor	• Sin inhibidor
media = 54.462	media = 90.308
desv. = 9.221	desv. = 16.226
CV = 0.169	CV = 0.18

e) Con máxima (explicación en máxima)

[48.662, 60.261]

No hay evidencia suficiente para descartar $\mu = 60$.

2. Se quieren estimar los parámetros a y k en un modelo de Michaelis-Menten

$$Y = \frac{aS}{k+S},$$

donde S es la concentración de sustrato, Y la velocidad de reacción, y $a, k > 0$ son dos parámetros asociados a la enzima. En el laboratorio se han obtenido los siguientes datos

S (mM)	0.1	0.5	1.5	5	10	15	20	50
Y (mmol/min)	7.4	17.3	39	67	84.5	87.8	91	110

- Calcula la recta de regresión de $(S, S/Y)$, dibújala y describe la calidad del ajuste.
- Usando que $\frac{S}{Y} = \frac{k}{a} + \frac{S}{a}$, estima el valor de los parámetros a y k .
- Representa en una gráfica los datos originales (S, Y) y la curva de Michaelis-Menten con los valores a, k del apartado (ii). Describe si te parece un buen ajuste.
- Utiliza el método de mínimos cuadrados para dar otra estimación de a y k . Dibuja ambas curvas en un mismo gráfico y decide qué ajuste te parece mejor.
- ¿Qué valor de S pronosticarías si la velocidad es $Y = 90$?

Nota: 2'5 puntos

Observación: se valorará la calidad de las gráficas dibujadas con Maxima (escala correcta, etiquetas en los ejes, etc...)

i) cambio de variable: $\begin{cases} S = u \\ S/Y = v \end{cases}$ (con maxima (explicación en maxima))

ii) $\frac{S}{Y} = \frac{k}{a} + \frac{1}{a} S$ $\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{a} = B \rightarrow a = \frac{1}{B} = 114'444 \\ \frac{k}{a} = A \rightarrow k = A \cdot a = 13'246 \end{array} \right.$ (con maxima)

iii) (con maxima (explicación en maxima))

iv) (con maxima (explicación en maxima))

$a = 109'767$; $k = 3'027$

v) con maxima

$Y = 90 \rightarrow S = 13'784$

a) ✓

b) ✓

c) ✓

d) ✓

e) ✓

3. En un estudio teórico sobre valoración de ácidos aparece la siguiente función

$$f(x) := 7 + \log \left(10(x-5) + \sqrt{100(x-5)^2 + 1} \right),$$

que mide el pH de una disolución cuando se añaden x ml de base.

a) Dibuja la gráfica de $f(x)$ para $x \in [0, 20]$, y calcula los valores máximo y mínimo *global* en dicho intervalo

b) Determina los valores de x tales que el pH está entre 4 y 10. ¿Tiene f alguna asíntota horizontal?

c) Determina para qué pH y qué volumen x_0 se alcanza el punto de inflexión de f , y calcula la **velocidad** de crecimiento de f en x_0

d) Para cierto ácido diprótico se tiene la función

$$h(x) = \frac{2}{3}f(x+5) + \frac{1}{3}f(x-5).$$

3

Dibuja la gráficas de $h(x)$ y $h'(x)$. Determina aprox los máximos locales de $h'(x)$ en $[0, 20]$, y relacionalos con los puntos de inflexión de h , indicando los pHs correspondientes. ¿Tiene h algún otro punto de inflexión?

e) Calcula el área bajo la gráfica de $h'(x)$ cuando $0 \leq x \leq 20$.

Nota: 3 puntos

Observación: se valorará la calidad de las gráficas dibujadas con Maxima (escala correcta, etiquetas en los ejes, leyenda, etc...)

a) con maxima. $x_{\min} = 2.395$, $x_{\max} = 12.704$ 0'6

b) con maxima (explicación en maxima)
 $x \in [3.998, 6.002]$ 0'6

c) con maxima (explicación en maxima)
punto de inflexión en $x=5 \rightarrow \text{pH}=7$ 0'6
velocidad de f en $x=5 \rightarrow 10$

d) con maxima (explicación en maxima) 0'6

e) como $\int_0^{20} h'(x) dx = [h(x)]_0^{20} = h(20) - h(0)$ 0'6
Área = 7.527 u²

4. En una reacción química $A + B \rightarrow X$, los moles de producto $X(t)$ tras t segundos cumplen la ecuación

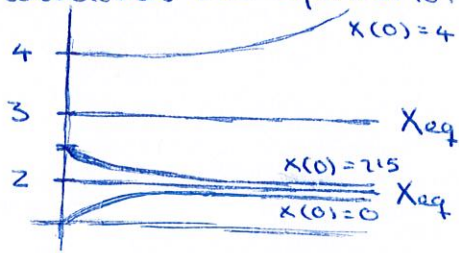
$$X'(t) = (2 - X)(3 - X).$$

- a) Sin resolver la ecuación, encuentra las soluciones de equilibrio, y esboza las gráficas de las soluciones en los casos $X(0) = 0$, $X(0) = 2.5$ y $X(0) = 4$.
- b) Resuelve la ecuación diferencial para $X(0) = 0$, dibuja su gráfica y determina cuándo será X mayor que 1.9 moles
- c) Resuelve la ecuación diferencial para $X(0) = 2.5$, dibuja su gráfica junto a la anterior y determina el valor de X en $t = 4$.

Nota: 2 puntos

a) con máxima

soluciones de equilibrio: $X_{eq} = 2$, $X_{eq} = 3$ OK ✓.



$X(0) = 0 \rightarrow \oplus$ creciente

$X(0) = 2.5 \rightarrow \ominus$ decreciente

$X(0) = 4 \rightarrow \oplus$ creciente

0.5

$X_{eq} = 2 \rightarrow$ equilibrio estable, $X_{eq} = 3 \rightarrow$ equilibrio inestable

b) con máxima

X será mayor que 1.9 mol a partir de $t = 1.9925$

c) con máxima (resultado en máxima).

b) Arrostra error... 0.6

c) Bien 0.5