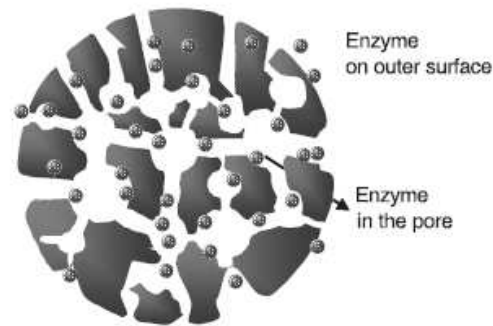




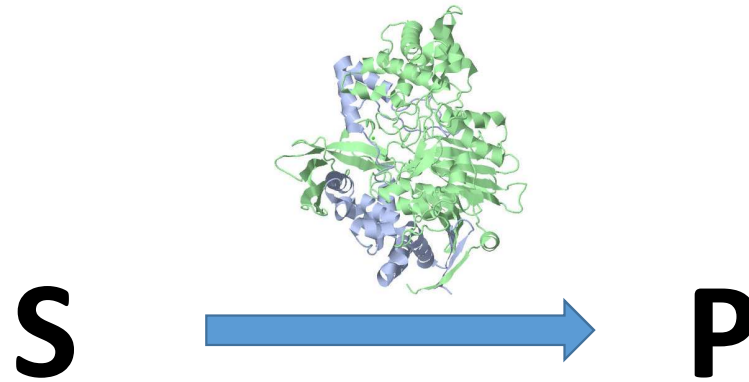
Determinación numérica de parámetros cinéticos de catalizadores de enzima inmovilizada



Pedro Valencia, Sebastián Flores

USM 2015

Catálisis enzimática



Ventajas:

- Alta velocidad de reacción.
- Elevada selectividad.

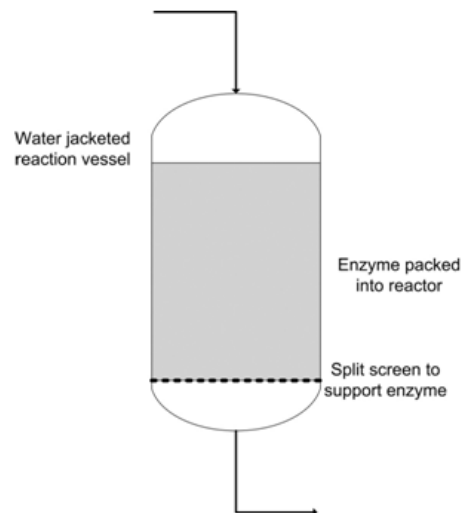
Desventajas:

- Alto costo.
- Termolábiles.

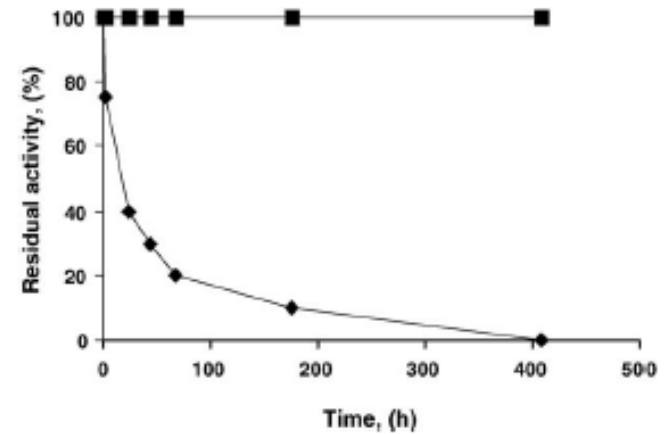
Inmovilización de enzimas

¿Por qué inmovilizar?

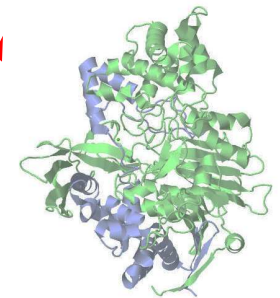
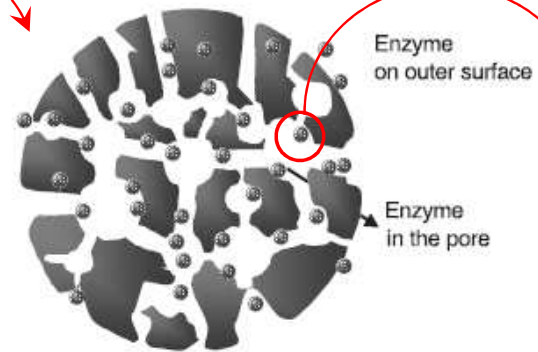
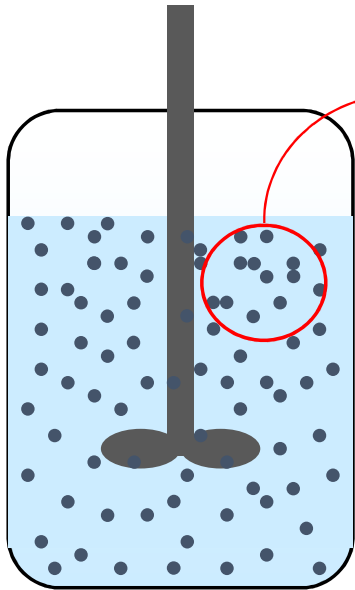
Reutilización



Estabilización



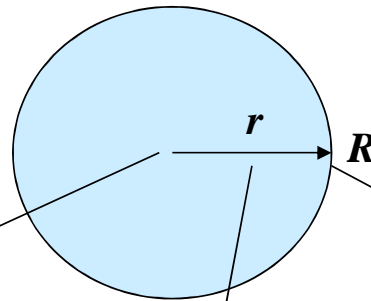
Catálisis enzimática heterogénea



Catálisis enzimática heterogénea

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_e \left(\frac{\partial^2 S}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial S}{\partial r} \right) - v_r$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial \tau} = \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial \beta}{\partial \rho} \right) - 9\Phi^2 \sigma$$



En $r = 0$

$$\left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$$

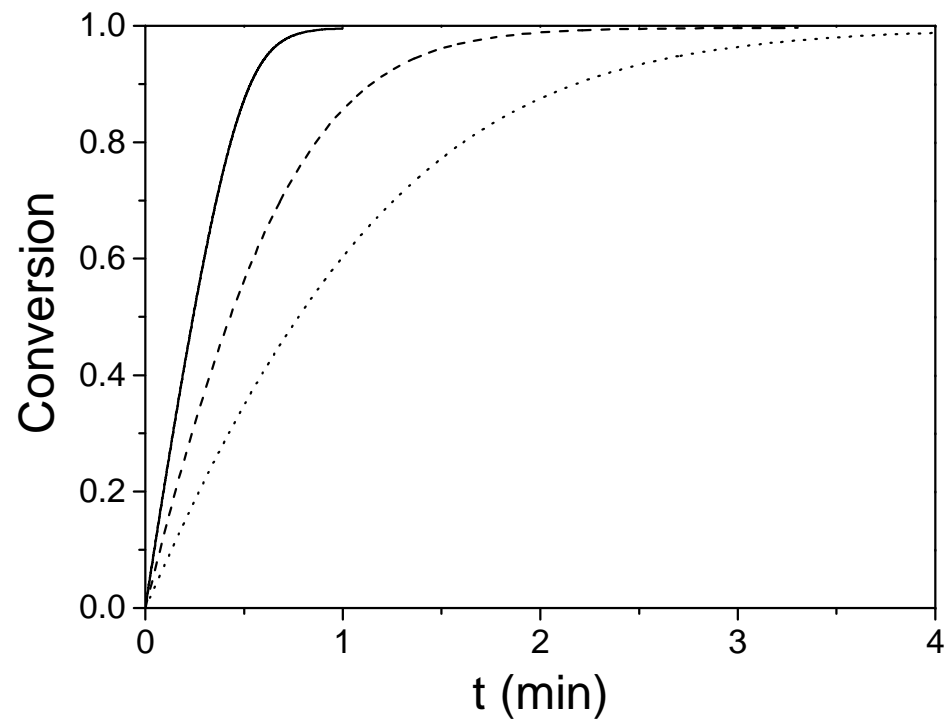
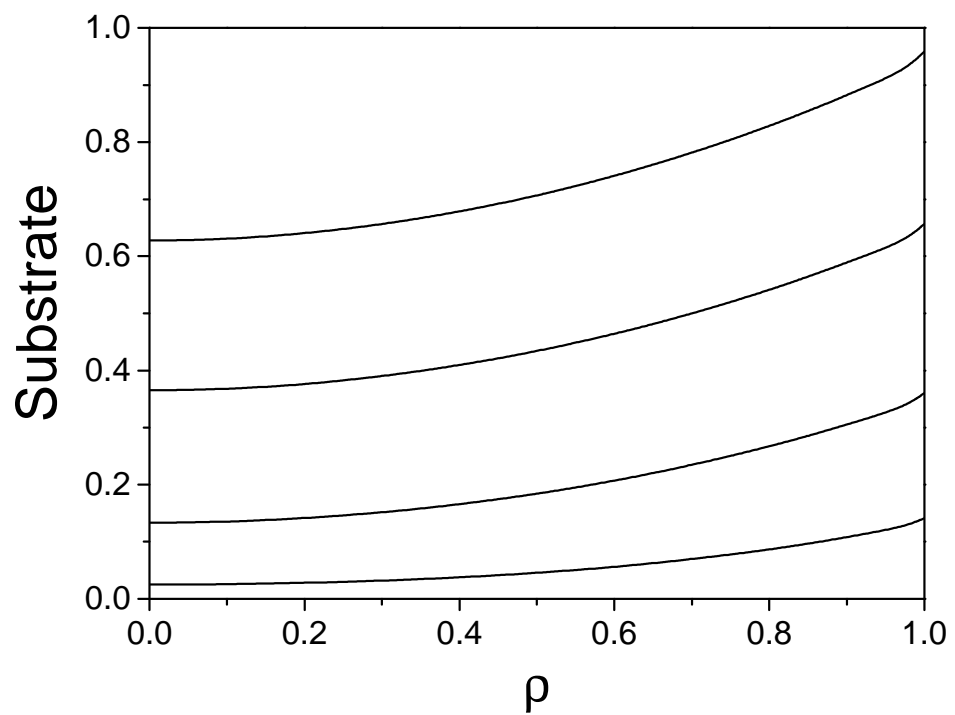
En $r \in [0, R]$

$$\frac{\partial C}{\partial t}(r, t) = f(\Phi)$$

En $r = R$

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = -\frac{3D_e V_c}{R V_b} \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=R}$$

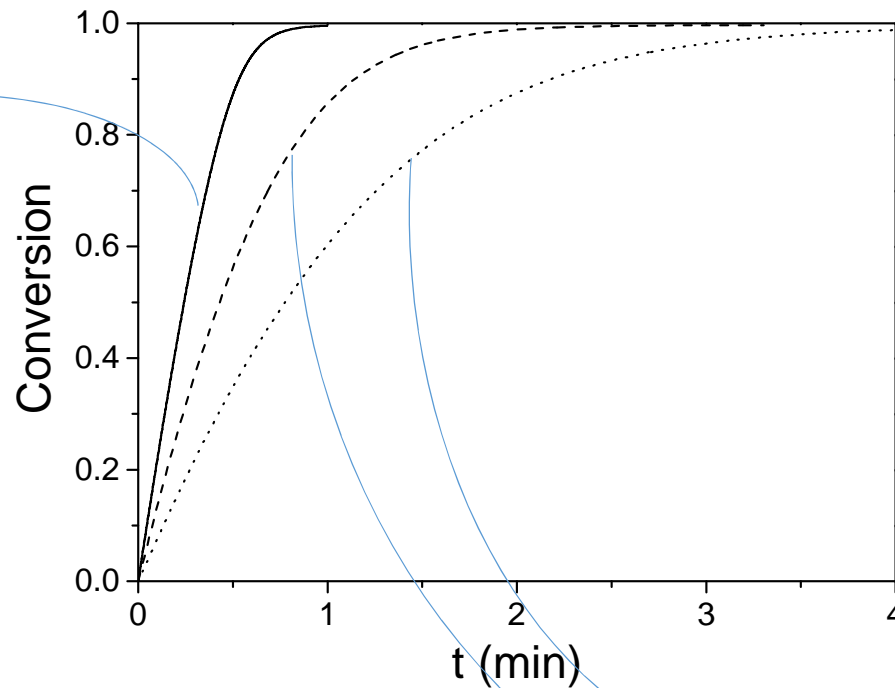
Catálisis enzimática heterogénea



Determinación parámetros cinéticos

Enzima soluble

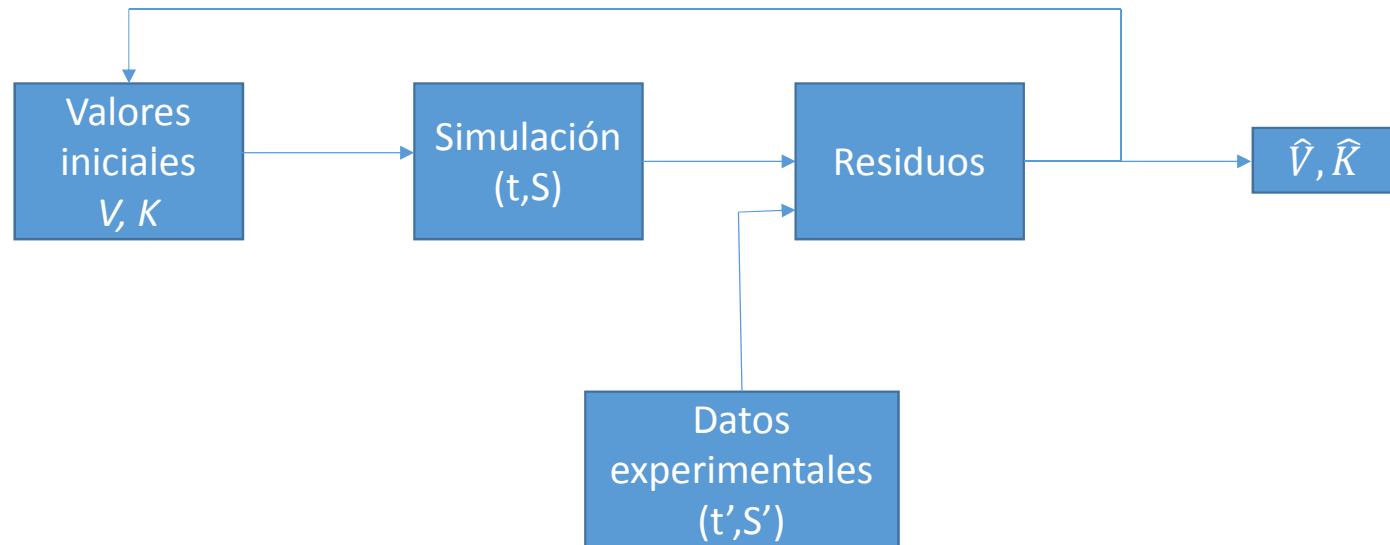
$$\frac{dS}{dt} = -\frac{V \cdot S}{K + S}$$



Enzima inmovilizada

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_e \left(\frac{\partial^2 S}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial S}{\partial r} \right) - \frac{V \cdot S}{K + S}$$

Determinación parámetros cinéticos



Determinación parámetros cinéticos

Objetivo

Desarrollar un algoritmo computacional para la determinación de parámetros cinéticos intrínsecos de enzimas inmovilizadas

Actividades

- 1. Implementar algoritmo de estimación de parámetros cinéticos.**
- 2. Estudiar la sensibilidad del sistema al error de estimación de los parámetros.**
- 3. Aplicar el algoritmo a datos experimentales.**