



## MODELACIÓN DE LA HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA DE LA CELULOSA: INFLUENCIA DE LOS VALORES RELATIVOS DE LAS CONSTANTES DE VELOCIDAD

Niuka T. Tarrero Alfonso<sup>1</sup>, Ezequiel García Ruda<sup>1</sup>, Julio C. Dustet Mendoza<sup>1</sup>, Elena Izquierdo Kulich<sup>1</sup>, José L. Martínez Hernández<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fac. Ing. Química. CUJAE, Cuba, <sup>2</sup>Dpto. Biotecnología, Fac. de Ciencias Químicas, U.A. de C. Saltillo, coah. México  
[hernan70@terra.com.mx](mailto:hernan70@terra.com.mx)

*palabras claves: hidrólisis, celulosa, modelación,*

**Introducción:** En la actualidad, se requiere de investigaciones rentables y factibles económicamente, por tanto, es necesario utilizar herramientas como la modelación matemática que permitan disminuir el número de experimentos a realizar en una investigación novedosa o en el perfeccionamiento de un proceso establecido

El objetivo del trabajo es obtener, utilizando técnicas de modelación estocástica, un modelo matemático que refleje el comportamiento de la reacción de hidrólisis enzimática de la celulosa y analizar la influencia sobre esta de diferentes razones de constantes de velocidad y de las condiciones iniciales. El modelo permite fomentar y ejecutar investigaciones futuras sobre este mecanismo hidrolítico.

**Metodología:** Se obtiene un modelo matemático al solucionar la ecuación maestra particular del sistema utilizando el Método de desarrollo en  $\Omega$  con aproximación lineal al ruido. Se considera que las interacciones entre las partículas elementales involucradas en la reacción se efectúan según el mecanismo catalítico de la HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA DE LA CELULOSA reportado por Gan y colaboradores en el 2003 (1). El modelo se adimensiona, permitiendo un análisis general del sistema en estudio. Se realizan "experimentos simulados" donde se combinan diferentes razones de constantes de velocidad, realizando para ello un diseño de experimento de Arreglo Ortogonal (2), y diferentes condiciones iniciales de concentración de enzima, de sustrato, y de sustrato de calidades diferentes, obteniéndose el comportamiento cinético de las diferentes especies involucradas en la reacción. La simulación se realiza utilizando Matlab 6.5 y el análisis estadístico con el S-Plus 6.2.

**Resultado y discusión:** En todos los "experimentos simulados" se obtiene la mayor concentración adimensional del producto final de la hidrólisis ( $C^*_p$ ) en la corrida 17 (del diseño de experimento empleado). Esto permite realizar un análisis general sobre la influencia de los valores de las constantes cinéticas. Teniendo en cuenta las condiciones de la corrida 17, las pruebas de significación de los parámetros del diseño y el mecanismo de reacción utilizado, se obtiene que cambios en la cinética de las dos primeras reacciones del mecanismo pueden influir significativamente en la obtención del producto de la hidrólisis y que la primera reacción de forma inversa es menos probable que las reacciones de formación del complejo enzima-celulosa activa ( $E^*Sc$ ) y del producto final P. Siendo más probable que ocurra la reacción de formación del complejo Enzima-Producto (EP) que su descomposición. Las reacciones que involucran a la parte inerte son las menos favorecidas. Los resultados se corresponden con las relaciones numéricas

entre las constantes de velocidad  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ ,  $k_6$  y  $k_7$  reportados por Gan y colaboradores (1). Sin embargo, las razones entre las constantes  $k_3$  y  $k_1$  reportadas por Gan (1) son muy mayores comparadas con el máximo valor de esta razón en el diseño de experimento realizado en este trabajo. Se simula la reacción considerando las razones de los parámetros cinéticos de Gan y los empleados en el trabajo, sin encontrar diferencias significativas, verificando la validez del análisis realizado (Figura 1).

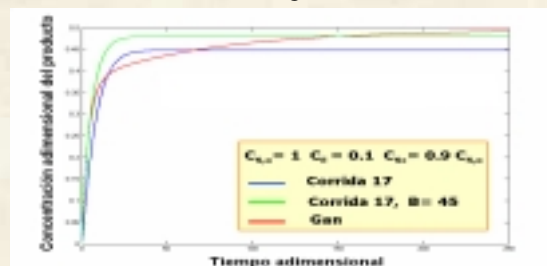


Figura 1. Comportamiento de la concentración del producto de la reacción frente a diferentes valores de razones de constante de velocidad.

Se hace este análisis con diferentes concentraciones de sustrato y el comportamiento fue similar. Además se evalúa la influencia de las condiciones iniciales de la reacción, obteniéndose resultados similares a la literatura (3).

**Conclusiones:** En el trabajo se evidencia como la solución de la ecuación maestra de Pauli para la reacción en estudio, es un modelo matemático que involucra a todas las especies del mecanismo. En el análisis de la influencia de los valores relativos de las constantes de velocidad se obtiene que la formación del producto se favorece cuando se cumple que  $k_2$  y  $k_6$  no sean mayores que  $k_1$ , así como que  $k_3$  no debe ser menor que  $k_1$ . Siendo las reacciones más favorecidas desde el punto de vista cinético la de formación del producto y las de formación del complejo enzima-celulosa activa y enzima-producto y las menos favorecidas, las de la parte inerte del sustrato. Existe una correspondencia cualitativa entre los resultados predichos por el modelo y los experimentales reportados en la literatura

**Agradecimientos:** A los compañeros del CIPRO por su colaboración.

### Bibliografía:

1. Gan Q., Allen S. J., Taylor G. (2003) Kinetic dynamics in heterogeneous enzymatic hydrolysis of cellulose: an overview, an experimental study and mathematical modeling. *Proc. Biochem.* (38):1003-1018
2. Romero R. y Zúñiga R. L. (1993) *Estadística*, ed. Servicio de Publicaciones UPV (SPUPV 93.687) España
3. Mansfield S.D., Mooney C, Sandler J.N. (1999) Substrate and enzyme characteristics that limit cellulose hydrolysis. *Biotechnol. Prog.* (15):804-16