

BB. Modelagem e Simulação Cinética De Reações Enzimáticas Por *Michaelis–Menten* e *Ping-Pong Bi–Bi*: Implementação Computacional Em *Python*.

Juliana Dulcini Marques¹, Vítor Teixeira Mazziero¹, Daniele Gonçalves de Oliveira¹, Ariela Veloso de Paula¹ e Marcel Otavio Cerri¹

¹Departamento de Bioprocesso e Biotecnologia, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Araraquara, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho – UNESP

Introdução: Engenharia enzimática é fundamental para fornecer abordagens racionais e dirigidas por evolução para modificar propriedades catalíticas, seletividade e estabilidade de enzimas, viabilizando rotas industriais mais sustentáveis em comparação a processos químicos convencionais energeticamente intensivos. Para isto, utiliza-se a modelagem para delineamento de bioprocessos, pois expressa quantitativamente a eficácia catalítica por meio de parâmetros cinéticos, que são utilizados para selecionar variantes enzimáticas, dimensionar reatores e prever produtividade. **Objetivos:** Desenvolver um algoritmo de simulação e modelagem enzimática utilizando o mecanismo de cinética enzimática de *Michaelis-Menten* e *Ping-Pong Bi-Bi* na linguagem *Python*, à nível *Front-End* e *Back-End*. **Metodologia:** As simulações e ajustes de parâmetros cinéticos foram desenvolvidos integralmente na linguagem *Python*, versão 3.10 utilizando o *software Anaconda*. As bibliotecas utilizadas para suporte numérico e visualização de dados incluíram o *NumPy* para operações matriciais e vetoriais, *SciPy* para resolução de equações diferenciais e otimização evolutiva, *Pandas* para leitura e manipulação de arquivos tabulares (notadamente planilhas *Excel*), *Matplotlib* para geração de gráficos científicos e *scikit-learn* para cálculo de métricas estatísticas de ajuste. A interface gráfica foi construída sobre a plataforma *PyQt5*, que permitiu a integração de formulários dinâmicos com elementos de entrada, visualização de gráficos e exibição de parâmetros simulados e ajustados. **Resultados:** O *software* desenvolvido apresenta uma interface gráfica para simulações e modelagem de reações enzimáticas com mecanismos do tipo *Michaelis-Menten* e *Ping-Pong Bi-Bi*. A ferramenta permite ao usuário simular as concentrações de substratos e produtos ao longo do tempo, fornecendo visualizações gráficas como: velocidade de reação em função do substrato, linearização da velocidade utilizando *Lineweaver-Burk* e conversão de produto ao longo do tempo. Além disso, permite a escolha entre simulação a partir de parâmetros previamente definidos ou modelagem baseada em dados experimentais, por meio de algoritmos baseados em equações diferenciais ordinárias e modelos de otimização global. Dessa forma foram obtidos valores coerentes de parâmetros como V_{max} e K_m (modelo *Michaelis-Menten*) e K_{m-A} , K_{m-B} e K_{cat} aparente (modelo *Ping-Pong Bi-Bi*), permitindo previsões confiáveis sobre o comportamento do sistema a partir do cálculo de coeficiente de determinação (R^2) e erro quadrático médio (RMSE). **Conclusão:** O *software* atendeu aos requisitos para a construção dos algoritmos *Back-End* de simulação e modelagem, juntamente com estrutura *Front-End*. Além disso, as visualizações gráficas e a documentação de cada um dos modelos, mostraram-se ferramentas facilitadoras para o ensino e compreensão do comportamento de bioprocessos enzimáticos. Sendo assim, os algoritmos desenvolvidos, atingiram seu objetivo ao integrarem uma ferramenta de fácil uso, disponibilizada no repositório do *GitHub*, que pode ser utilizada para compreensão das melhores condições de operação e otimização dos processos enzimáticos.

Palavras-chave: Cinética enzimática, *Michaelis-Menten*, *Ping-Pong Bi-Bi*, *Python*, Simulação e Modelagem.