

GUSTAVO MOREIRA E SILVA

**ESTUDO CINÉTICO DA HIDRÓLISE DA LACTOSE PELA BETA-
GALACTOSIDASE UTILIZANDO REDES NEURAS ARTIFICIAIS**

Monografia apresentada ao Departamento de
Química da Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências para a conclusão do
Curso de Bacharelado em Química.

Orientador: Emilio Borges

**VIÇOSA – MINAS GERAIS
2022**

Dedico este trabalho às minhas amadas, mãe e avó.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, à minha mãe e avó que sempre batalharam para proporcionar o melhor para seus filhos e netos. E que não diferente, apoiaram-me financeira e emocionalmente nos altos e baixos dessa caminhada.

Agradeço a todos meus amigos, tanto aqueles que conheci no percorrer da graduação, André, Guilherme, Isabela, Maria Fernanda, Nikolas, Rafael, Ricardo “Raj”, Thalles e Victor; quanto meus amigos de longa data, Gabriel Tavares, Felipe, Indalecio, Leonardo, João Pedro, Karen, Mateus “Meba”, Rafael Machado, Tiago “Guiu”, Vinicius, Wallace e Wesley, pelo carinho e suporte que me proporcionaram para escrever esse trabalho.

Agradeço a minha namorada, Anelise, pelo amor e carinho em todos momentos e por sempre acreditar, às vezes até mais do que eu, em minha pessoa.

Agradeço aos professores da Universidade Federal de Viçosa, em especial à Monique, professora do Departamento de Tecnologia em Alimentos, pela oportunidade de me desenvolver profissionalmente, e para os professores do Departamento de Química, Astrea, Angel, Deyse, Daniele, Elson, Emilio, Maria Eliana e Reinaldo, pelos ensinamentos e apoio durante minha graduação.

Agradeço à Universidade Federal de Viçosa e ao município de Viçosa pelos projetos de extensão e cultura e principalmente, pela oportunidade de poder estudar em uma instituição de ensino superior gratuito e de qualidade.

“Seu lar ficou para trás agora. O mundo está à sua frente.”
O Hobbit

RESUMO

MOREIRA E SILVA, Gustavo, monografia de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, dezembro, 2022. **Estudo cinético da hidrólise da lactose pela beta-galactosidase utilizando redes neurais artificiais.** Orientador: Emilio Borges.

A intolerância à lactose é um problema recorrente na sociedade brasileira; estima-se que a cada dez pessoas sete sejam intolerantes. Uma alternativa para esse problema é a utilização da beta-galactosidase como um catalisador para a hidrólise da lactose. A ação dessa enzima é descrita pelo mecanismo de Michaelis-Menten, considerado o modelo reacional mais apropriado para esse sistema. Desta forma, determinou-se, utilizando um algoritmo baseado em redes neurais artificiais do tipo Hopfield, as constantes de velocidade para cada etapa do mecanismo enzimático a partir de valores experimentais de concentrações para a lactose sendo hidrolisada pela enzima beta-galactosidase, obtidos da literatura. Esse tipo de problema, obtenção de parâmetros inacessíveis por medidas diretas (constantes de velocidade cinética) a partir de dados experimentais (concentrações) é chamado de problema inverso e requer métodos numéricos específicos, como as redes neurais artificiais utilizadas aqui para sua resolução. Finalmente, a partir da obtenção das constantes de velocidade foram encontradas as concentrações ao longo do tempo de todas espécies presentes na reação; lactose, galactose e o complexo intermediário alfa-galactosil-beta-galactosidase. Além disso, foram encontradas as variações das energias de Gibbs de ativação para cada etapa do mecanismo. A rede neural utilizada para a obtenção dos parâmetros cinéticos nesse problema se mostrou eficiente, obtendo constantes que reproduzem muito bem os dados experimentais para o mecanismo completo. O erro médio quando se comparam as concentrações experimentais com as teóricas não superou 1% o que mostra a validade da metodologia para o estudo cinético do sistema estudado.

Palavras-chaves: beta-galactosidase; lactose; problema inverso; redes neurais artificiais;

ABSTRACT

MOREIRA E SILVA, Gustavo, Undergraduate Final Paper Submitted to the Department of Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Bachelor in Chemistry, Federal University of Viçosa, december, 2022. **Kinetic study of lactose hydrolysis by beta-galactosidase using artificial neural networks.** Advisor: Emilio Borges.

Lactose intolerance is a recurring problem in Brazilian society; it is estimated that seven out of every ten people are lactose intolerant. An alternative to this problem is the use of beta-galactosidase as a catalyst for lactose hydrolysis. The action of this enzyme is described by the Michaelis-Menten mechanism, considered to be the most appropriate reaction model for this system. Thus, it was determined, using an algorithm based on Hopfield-type artificial neural networks, the speed constants for each step of the enzyme mechanism from experimental values of concentrations for lactose being hydrolyzed by the beta-galactosidase enzyme, obtained from the literature. This type of problem, obtaining parameters inaccessible by direct measurements (kinetic speed constants) from experimental data (concentrations) is called inverse problem and requires specific numerical methods, such as the artificial neural networks used here to solve it. Finally, from obtaining the velocity constants the concentrations over time of all species present in the reaction were found; lactose, galactose and the intermediate complex alpha-galactosyl-beta-galactosidase. In addition, the variations of the activation Gibbs energies for each step of the mechanism were found. The neural network used to obtain the kinetic parameters in this problem proved to be efficient, obtaining constants that reproduce very well the experimental data for the complete mechanism. The average error when comparing the experimental concentrations with the theoretical ones did not exceed 1%, which shows the validity of the methodology for the kinetic study of the system studied.

Keywords: beta-galactosidase; lactose; inverse problem; artificial neural networks;