

Guia rápido EnzyView

1 – Tela inicial

The screenshot shows the EnzyView software interface. The window has a title bar with the EnzyView logo and standard window controls. The main area is dark blue with white text and input fields. Five areas are highlighted with red dashed boxes and numbers:

- 1**: "Modo de operação" (Operation mode) dropdown menu.
- 2**: "Estequiometria" (Stoichiometry) section with the equation $aS_1 + bS_2 \rightarrow cP_1 + dP_2$ and input fields for coefficients a, b, c, and d.
- 3**: "Concentrações de entrada" (Input concentrations) section with input fields for $[S_1]_0$, $[S_2]_0$, $[P_1]_0$, and $[P_2]_0$ in mol/L.
- 4**: "Cinética" (Kinetics) section with the Michaelis-Menten equation $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{max} \cdot S}{K_m + S}$, input fields for V_{max} and K_m , a dropdown for "Cinética de inibição" (Inhibition kinetics) set to "Nenhum" (None), and a checkbox for "Desativação enzimática" (Enzyme deactivation).
- 5**: "Gráfico" (Graph) section with a "Slider" control, a "Variável" dropdown set to "Nenhum", and input fields for "Min", "Max", and "Passo" (Step).

A "Calcular" (Calculate) button is located at the bottom of the interface.

Áreas da tela inicial:

- Área 1 – Modo de operação: nesse campo escolhe-se o modo de operação (Batelada, CSTR ou CSRTs em série).
- Área 2 – Estequiometria: nesse campo deve ser informada a estequiometria da reação catalisada, sendo possível escolher uma reação composta por até dois substratos e dois produtos.
- Área 3 – Concentrações de entrada: são os inputs de concentrações de entrada no reator.
- Área 4 – Cinética: nesse campo escolhe-se os valores dos parâmetros cinéticos v_{max} e K_m do modelo de Michaelis-Menten, o tipo de cinética de inibição e se existe ou não desativação enzimática (esse último pode apenas ser escolhido caso o modo de operação seja em batelada).
- Área 5 – Gráfico: nesse campo o usuário pode fazer a opção de utilizar o *slider* (funcionalidade explicada posteriormente) e, por fim, iniciar a simulação ao clicar em “Calcular”.

2 – Realizando uma simulação

2.1 – Escolher o modo de operação

Modo de operação

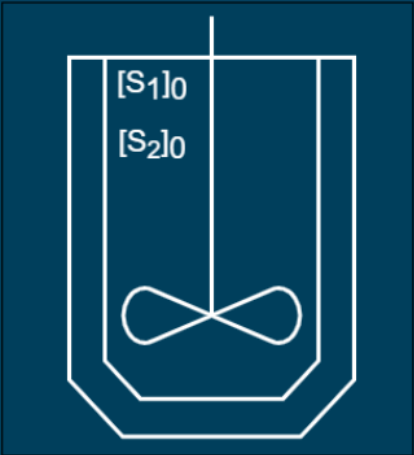
- Batelada
- CSTR
- CSTRs em série

Parâmetros necessários para cada modo de operação:

- Batelada - Conversão máxima

Modo de operação

Conversão máxima %



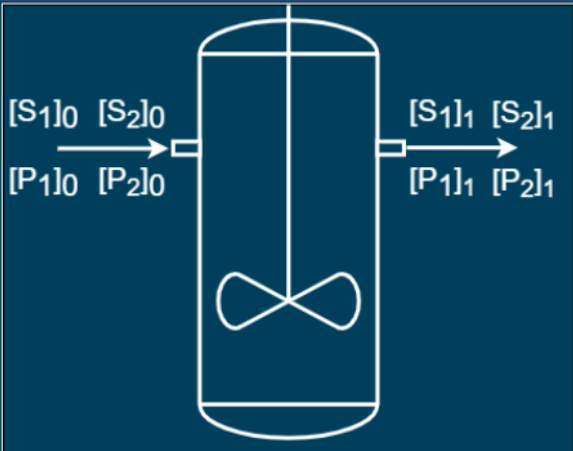
The diagram shows a vertical cylindrical vessel with a central stirrer. Inside the vessel, the initial concentrations of two species are labeled as $[S_1]_0$ and $[S_2]_0$.

- CSTR – Volume do reator e vazão

Modo de operação

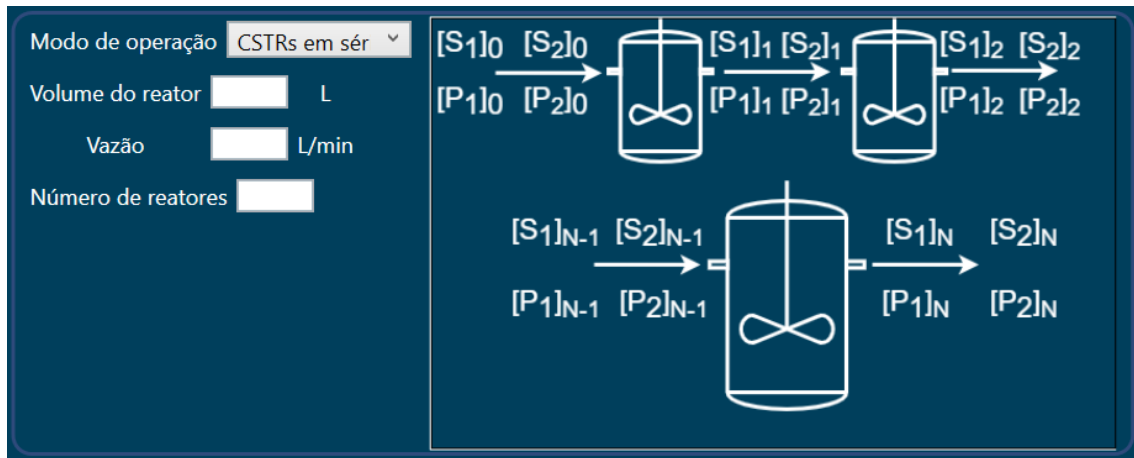
Volume do reator L

Vazão L/min



The diagram shows a vertical cylindrical vessel with a central stirrer. On the left, an inlet stream is labeled with concentrations $[S_1]_0$, $[S_2]_0$, $[P_1]_0$, and $[P_2]_0$. On the right, an outlet stream is labeled with concentrations $[S_1]_1$, $[S_2]_1$, $[P_1]_1$, and $[P_2]_1$.

- CSTRs em série – volume dos reatores (o volume de todos os reatores é o mesmo), vazão e número de reatores.



2.2 – Definir estequiometria

Estequiometria

$$aS_1 + bS_2 \rightarrow cP_1 + dP_2$$

a: c:

b: d:

2.3 – Definir concentrações de entrada

Concentrações de entrada

[S1]₀: mol/L [P1]₀: mol/L

[S2]₀: mol/L [P2]₀: mol/L

2.4 – Definir modelo cinético:

Cinética

$$\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$$

V_{max} Mol/(L*min)

K_m Mol/L

Cinética de inibição Nenhum

Desativação Nenhum

Slider Nenhu

↓

Nenhum

Competitiva

Não competitiva

Acompetitiva

Parcialmente competitiva

Parcialmente não competitiva

Substrato

Passo

Parâmetros necessários para cada modelo de inibição

- Sem inibição – V_{\max} e K_m

Cinética

$$\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$$

V_{\max} Mol/(L*min) K_m Mol/L

Cinética de inibição

Desativação enzimática ☐

- Inibição competitiva - V_{\max} , K_m , I e K_i

| Cinética | Inibição competitiva |
|--|--|
| $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$ | $K_{m_app} = K_m * (1 + \frac{I}{K_i})$ |
| V_{\max} <input type="text" value="1"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text" value="0"/> Mol/L | K_m <input type="text"/> Mol/L |
| Cinética de inibição <input type="text" value="Competitiva"/> | I <input type="text"/> Mol/L |
| Desativação enzimática <input type="checkbox"/> | K_i <input type="text"/> Mol/L |

- Inibição não competitiva - V_{\max} , K_m , I e K_i

| Cinética | Inibição não competitiva |
|--|--|
| $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$ | $V_{\max_app} = \frac{V_{\max}}{1 + (I / K_i)}$ |
| V_{\max} <input type="text" value="1"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text" value="0"/> Mol/L | V_{\max} <input type="text"/> Mol/(L*min) |
| Cinética de inibição <input type="text" value="Não competit"/> | I <input type="text"/> Mol/L |
| Desativação enzimática <input type="checkbox"/> | K_i <input type="text"/> Mol/L |

- Inibição acompetitiva - V_{\max} , K_m , I e K_i

| Cinética | Inibição acompetitiva |
|--|---|
| $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$ | $V_{\max_app} = \frac{V_{\max}}{1 + (I / K_i)} \quad K_{m_app} = \frac{K_m}{1 + (I / K_i)}$ |
| V_{\max} <input type="text" value="1"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text" value="0"/> Mol/L | V_{\max} <input type="text"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text"/> Mol/L |
| Cinética de inibição <input type="text" value="Acompetitiva"/> | I <input type="text"/> Mol/L K_i <input type="text"/> Mol/L |
| Desativação enzimática <input type="checkbox"/> | |

- Inibição parcialmente competitiva - V_{\max} , K_m , I , K_i e K_{IS}

| Cinética | Inibição parcialmente competitiva |
|--|--|
| $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$ | $K_{m_app} = K_m * \frac{(1 + I / K_i)}{(1 + I / K_{is})}$ |
| V_{\max} <input type="text" value="1"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text" value="0"/> Mol/L | K_m <input type="text"/> Mol/L K_i <input type="text"/> Mol/L |
| Cinética de inibição <input type="text" value="Parcialmente"/> | I <input type="text"/> Mol/L K_{is} <input type="text"/> Mol/L |
| Desativação enzimática <input type="checkbox"/> | |

- Inibição parcialmente não competitiva - V_{\max} , K_m , I , K_i , k e E_0


| Cinética | Inibição parcialmente não competitiva |
|--|--|
| $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$ | $V_{\max_app} = \frac{V_{\max} + (k * E_0 * I / K_i)}{(1 + I / K_i)}$ |
| V_{\max} <input type="text" value="1"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text" value="0"/> Mol/L | V_{\max} <input type="text"/> Mol/(L*min) I <input type="text"/> Mol/L |
| Cinética de inibição <input type="text" value="Parcialmente"/> | k <input type="text"/> K_i <input type="text"/> Mol/L |
| Desativação enzimática <input type="checkbox"/> | E_0 <input type="text"/> |

- Inibição pelo substrato - V_{\max} , K_m e K_{SI}

| Cinética | Inibição pelo Substrato |
|--|--|
| $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$ | $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S + (S^2 / K_{SI})}$ |
| V_{\max} <input type="text" value="1"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text" value="0"/> Mol/L | K_m <input type="text"/> Mol/L |
| Cinética de inibição <input type="text" value="Substrato"/> | K_{SI} <input type="text"/> Mol/L |
| Desativação enzimática <input type="checkbox"/> | V_{\max} <input type="text"/> Mol/L |

O modelo pode ter desativação enzimática (apenas no modo de operação em batelada), quando ativa é necessário fornecer $V_{\max 0}$ e K_d

| Cinética | Desativação enzimática |
|--|---|
| $\frac{dS}{dt} = \frac{-V_{\max} * S}{K_m + S}$ | $V_{\max} = V_{\max 0} * \exp(-K_d * t)$ |
| V_{\max} <input type="text" value="1"/> Mol/(L*min) K_m <input type="text" value="0"/> Mol/L | $V_{\max 0}$ <input type="text"/> Mol/(L*min) |
| Cinética de inibição <input type="text" value="Nenhum"/> | K_d <input type="text"/> 1/s |
| Desativação enzimática <input checked="" type="checkbox"/> | |

| Gráfico | | | | | | | | |
|--|----------------------|----------------------|----------------------|-------|--|----------------------|----------------------|----------------------|
| <table border="1"> <thead> <tr> <th>Variável</th> <th>Min</th> <th>Max</th> <th>Passo</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Slider <input type="text" value="Nenhum"/></td> <td><input type="text"/></td> <td><input type="text"/></td> <td><input type="text"/></td> </tr> </tbody> </table> | Variável | Min | Max | Passo | Slider <input type="text" value="Nenhum"/> | <input type="text"/> | <input type="text"/> | <input type="text"/> |
| Variável | Min | Max | Passo | | | | | |
| Slider <input type="text" value="Nenhum"/> | <input type="text"/> | <input type="text"/> | <input type="text"/> | | | | | |
| <input type="text" value="0"/>  | | | | | | | | |
| <input type="button" value="Calcular"/> | | | | | | | | |

2.5 – Definir uma variável para o slider (opcional), seu valor mínimo, máximo e o passo

The screenshot shows a software interface with a dark blue background. A dropdown menu is open, displaying a list of variables: Nenhum, [S1]0, [S2]0, [P1]0, [P2]0, Vmax, Km, I, Ki, Ksi, K, E0, Kd, and Ksi. The 'Nenhum' option is highlighted. In the background, there are several input fields and labels: 'cP₁ + dP₂' with a value of 1, 'd' with a value of 0, 'Km' with a value of 0 and unit 'Mol/L', and a 'Slider' control with a value of 0. A 'Calcular' button is visible at the bottom.

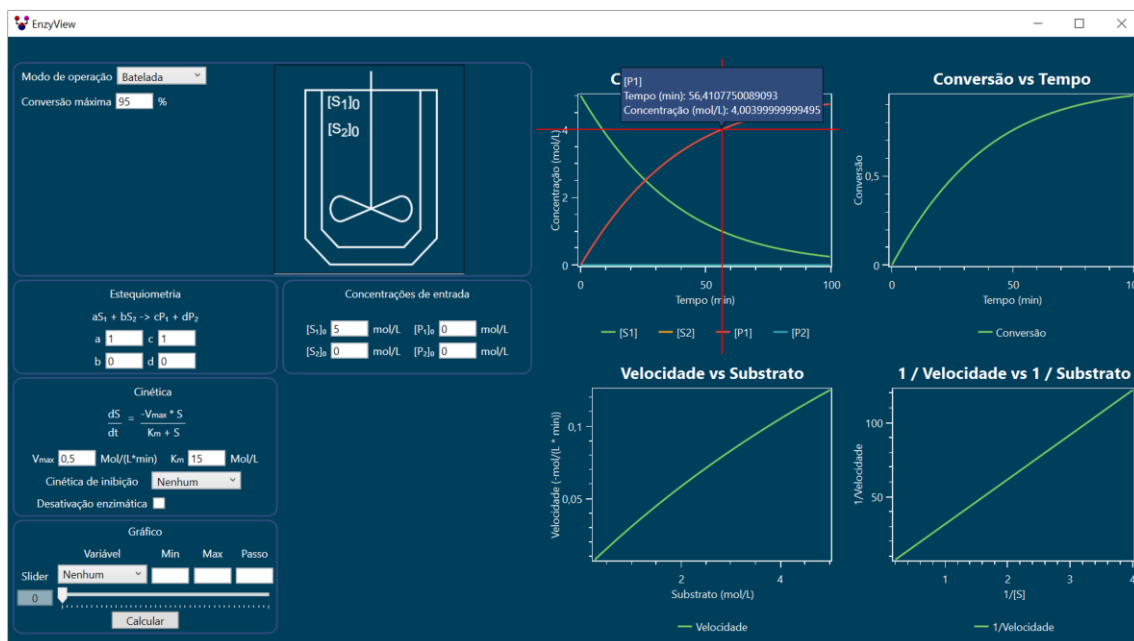
2.6 - Clicar em “Calcular”

The screenshot shows the same software interface as before, but the dropdown menu is now closed. The 'Nenhum' option is still selected. The 'Calcular' button is highlighted, indicating it has been clicked. The slider value remains at 0.

3 – Funções dos gráficos

- Mover a posição da visualização: Clicar com o botão direito e mover o mouse.
- Zoom: Girar o botão de rolagem do mouse.
- Zoom por retângulo: Clicar com a roda do mouse e arrastar para determinar o retângulo de zoom.
- Resetar a visualização: Clicar botão “Home” do teclado
- Copiar o gráfico: Clicar botão “Ctrl + C”. Nesse caso, é possível colar o gráfico como imagem em outros programas como o Word.
- Tracker: clicar com botão esquerdo do mouse.

O Tracker é uma forma de visualizar o valor de um ponto do gráfico, ao clicar com o botão esquerdo do mouse sobre uma das curvas existentes, uma caixa aparece com as informações sobre o ponto



4 – Uso do slider

Caso uma variável tenha sido selecionada para o slider, para alterar o seu valor basta clicar e arrastar o ponteiro.

Gráfico

| | Variável | Min | Max | Passo |
|--------|----------|-----|-----|-------|
| Slider | Km | 5 | 30 | 5 |

5

Calcular

Gráfico

| | Variável | Min | Max | Passo |
|--------|----------|-----|-----|-------|
| Slider | Km | 5 | 30 | 5 |

10

Calcular

Gráfico

| | Variável | Min | Max | Passo |
|--------|----------|-----|-----|-------|
| Slider | Km | 5 | 30 | 5 |

15

Calcular