

EVALUACIÓN COMPUTACIONAL DE LOS EFECTOS DE MEZCLADO IMPERFECTO EN EL DESEMPEÑO DE UNA REACCIÓN ENZIMÁTICA

Alvarez, Mario Moisés, Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey
Centro de Biotecnología, Avenida Eugenio Garza Sada 2501 sur, Monterrey N.L. México, C.P. 64849
Fax: 818-328-4131, mario.alvarez@itesm.mx.

Palabras clave: mezclado, bioreactor, reacción enzimática

Introducción. La importancia de un mezclado apropiado para el adecuado desempeño de un sistema biológico ha sido demostrada experimentalmente en variedad de escenarios, v.gr. (1). Sin embargo, el efecto relativo de imperfecciones en macro-mezclado y micro-mezclado es difícil de estudiar en sistemas experimentales. Más aún, se ha postulado que para reacciones suficientemente lentas con respecto al tiempo de mezclado de un sistema, las no idealidades del mezclado no deberían afectar significativamente el rendimiento y/o selectividad del proceso biológico. En este trabajo se presentan resultados computacionales que permiten valorar los efectos de heterogeneidades en el mezclado en el desempeño de una reacción enzimática típica. El objetivo central de este trabajo es demostrar computacionalmente, que aún en condiciones donde el macro-mezclado no es un problema y el micro-mezclado es relativamente rápido, existe un efecto negativo del mezclado no ideal en selectividad, velocidad observable y rendimiento de reacciones bioquímicas.

Metodología. Los fenómenos de mezclado (con componentes convectivo y difusivo) y reacción bioquímica, han sido modelados en un sistema simple. En un dominio unitario cuadrado, se ha ejercido un mapa caótico periódico (flujo sinusoidal (2)) que emula un flujo convectivo. Dependiendo del valor del parámetro de frecuencia de iteración de este mapa (periodo T), el flujo sinusoidal puede originar condiciones de flujo caótico altamente generalizadas (condiciones de mezclado ideal) o situaciones con amplias regiones regulares (con zonas “muertas” al flujo). Sobre tres diferentes flujos con diferente grado de caos, se ha modelado el desempeño iteración por iteración, de una reacción enzimática típica que sigue una cinética Michaelis-Menten. El sistema de flujo se dividió en una matriz de 256x256 celdas, en donde los valores de concentración de sustrato, concentración de producto, relación de velocidad/velocidad máxima, y conversión fueron obtenidos localmente. Los perfiles de conversión con respecto a tiempo para casos con diferentes grados de no idealidad en el mezclado, fueron comparados contra perfiles calculados bajo la suposición de mezclado instantáneo y perfecto.

Resultados y discusión. La figura 1 muestra resultados de un experimento computacional representativo. Para el caso ilustrado, el flujo presenta regiones de bajo flujo de mediano tamaño en cada uno de sus cuatro cuadrantes (zonas en rojo en 1b). Los valores de las constantes m_{max} y K_s para la reacción enzimática corresponden a valores realistas. El

sustrato fue inyectado, en la condición inicial, en el punto central del dominio de flujo. Obsérvese: (a) la alta heterogeneidad en las concentraciones de producto, y (b) que en las zonas de bajo flujo el sistema presenta muy baja concentración de sustrato en tiempos iniciales, pero más alta concentración con respecto al promedio a tiempos largos.

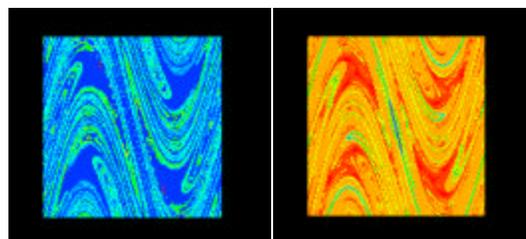


Fig. 1. Distribución espacial de producto en el dominio de flujo después de (a) 5 y, (b) 50 iteraciones del flujo caótico. La escala de colores, proporcional a la concentración de producto, corre desde concentraciones bajas en azul, a concentraciones altas en rojo.

La comparación entre las curvas de conversión contra tiempo para los casos de mezclado ideal y mezclado no ideal demuestra un importante efecto de imperfecciones de mezclado en el avance y rendimiento de la reacción enzimática.

Conclusiones. Las no idealidades en el proceso de macro-mezclado y micro-mezclado tienen un impacto significativo en la velocidad y rendimiento final de procesos enzimáticos, aún en situaciones donde el tiempo de mezclado es comparativamente corto con respecto a los tiempos de reacción.

Agradecimiento. Agradecemos el financiamiento interno de la División de Graduados en Ingeniería y del Departamento de Ingeniería Química del ITESM.

Bibliografía.

1. Jian Li, Z., Shukla, V., Wenger, K.S., Fordyce, A.P., Petersen, A.G., and Marten, M.R. (2002). Effects of Increased Impeller Power in a Production-Scale *Aspergillus oryzae*. *Fermentation. Biotechnology Progress*. 18: 437-444.
2. Alvarez, M. M.; Muzzio, F.J.; Cerbelli, S.; Adrover, A.; y Giona, M. (1998). Self-Similar Spatiotemporal Structure of Inter-material Boundaries in Chaotic Flows. *Physical Review Letters*. 81 (16): 3395-3399.

