



XIV Congreso Nacional de Biología y Bioingeniería



BIOCONVERSIÓN DE CETONAS BICÍCLICAS A LACTONAS EN UN BIORREACTOR DE PARTICIÓN: ANÁLISIS ADIMENSIONAL DE UN MODELO MATEMÁTICO

Daniel Torres Martínez¹, Mariano Gutiérrez Rojas¹, Germán Aroca², Sergio Huerta Ochoa¹. ¹Universidad Autónoma Metropolitana Departamento de Biología, México D.F. CP 09340, daniel.torres@ucv.cl ¹Pontificia Universidad Católica de Valparaíso Facultad de Ingeniería General Cruz #34, Valparaíso Chile
Palabras clave: Análisis adimensional, modelamiento, biorreactores de partición.

Introducción. Se han reportado modelos de transferencia de masa-biocatálisis-recuperación capaces de predecir y describir la bioconversión de cetonas bicíclicas a lactonas por el biocatalizador *Escherichia coli* TOP10 pQR239 en presencia de líquido iónico (segunda fase líquida)[1]. Para el modelamiento matemático se consideraron tanto los fenómenos de transferencia de masa (sustrato, producto y oxígeno), la hidrodinámica del sistema y la cinética de bioconversión [1].

El objetivo de este trabajo fue normalizar todas las variables dependientes del modelo de bioconversión de cetonas bicíclicas a lactonas en un biorreactor de partición, esto también fue útil para deducir diferentes números adimensionales que permitan analizar los fenómenos que ocurren en el sistema.

Metodología. Una vez desarrolladas las ecuaciones del modelo matemático, se definió el tiempo característico (t_c) como la concentración inicial de sustrato en la fase acuosa (S_{ac0}) sobre la velocidad máxima de catálisis ($Y \frac{S}{P} \cdot X_0 \cdot V_{max}$) (Ec. 1). Empleando la teoría de la extracción líquido-líquido [2], se calcularon las concentraciones máximas de producto en el líquido iónico (P_{limax}) y en la fase acuosa (P_{acmax}) al término de la bioconversión, considerando que todo el sustrato se transforma en producto en base a los rendimientos estequiométricos.

$$t_c = \frac{S_{ac0}}{Y \frac{S}{P} \cdot X_0 \cdot V_{max}} \quad (1)$$

Sustituyendo en las ecuaciones del modelo dimensional [1] las relaciones adimensionales, se obtiene el sistema adimensionalizado.

Resultados. En el modelo adimensional aparecen diferentes números y cantidades adimensionales. Medina-Moreno (2006) definió el número de Biodisponibilidad (B_n) como el cociente de la tasa máxima de transporte por convección entre la tasa máxima de biorreacción, y su magnitud, es indicativo del mecanismo de control en el proceso de biotransformación de cetonas bicíclicas a lactonas en un biorreactor de partición. Así tenemos que, cuando el $B_n > 1$, el control es debido a la tasa de biorreacción (Ec. 2).

$$B_n = \frac{\mathfrak{R}_{transporte}}{\mathfrak{R}_{biorreaccion}} \quad (2)$$

En base a lo anterior se definieron números de biodisponibilidad para el sustrato (B_n^S), oxígeno ($B_n^{O_2}$) y producto (B_n^P) Tabla 1.

Tabla 1. Números de biodisponibilidad obtenidos mediante el análisis adimensional de un modelo de transferencia de masa-biocatálisis-recuperación.

Número adimensional	Expresión
Biodisponibilidad para Sustrato	$B_n^S = \frac{S_{ac0} \cdot k_{Ls} \cdot A_{gota}}{Y \frac{S}{P} \cdot X_0 \cdot V_{max}}$
Biodisponibilidad para producto	$B_n^P = \frac{P_{acmax} \cdot k_{LP} \cdot A_{gota}}{X_0 \cdot V_{max}}$
Biodisponibilidad para oxígeno	$B_n^{O_2} = \frac{k_L a \cdot C_{O_2}^*}{Y \frac{O_2}{P} \cdot X_0 \cdot V_{max}}$

Donde k_{Ls} es el coeficiente convectivo de sustrato, A_{gota} es el área interfacial de las gotas de líquido iónico por unidad de volumen, $Y \frac{S}{P}$ es el rendimiento estequiométrico de g de sustrato consumido por g de producto, X_0 es la concentración inicial de biocatalizador, V_{max} es la velocidad máxima de producción de lactonas, k_{LP} es el coeficiente convectivo de producto, $k_L a$ es el coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno y $C_{O_2}^*$ es la concentración de saturación de oxígeno.

Se calculó el número de biodisponibilidad para sustrato $B_n^S = 155$, es decir, el número de biodisponibilidad fue mucho mayor a 1.

Conclusiones. Se obtuvieron números adimensionales característicos de un biorreactor de partición que nos permiten comparar los diferentes mecanismos de transporte. El número de biodisponibilidad de sustrato obtenido para el sistema estudiado nos muestra que el proceso está limitado por la biorreacción.

Agradecimiento. CONACYT proyecto No. SEP-CONACYT-2007-800847, proyecto Alfa BIOPROAM. No. AML/190901/06/18414/II-05

- Bibliografía.**
- Torres-Martínez D. (2010). Biotransformación de cetonas bicíclicas empleando líquidos iónicos en un biorreactor de partición. Tesis de Doctorado. UAM-I. México D.F.
 - Tejeda M.A., Montesinos R.M., Guzmán R. (1995). Extracción. En: *Bioseparaciones*. Editorial Unison, México. 227-304.
 - Medina A. (2006). Estudio y Modelamiento matemático de la biodegradación de hidrocarburos en biorreactores heterogéneos. Tesis de Doctorado. UAM-I. México D.F.