

MODELACIÓN MATEMÁTICA DE LA PRODUCCIÓN DE FOS MEDIANTE ESTIMACIÓN PARAMÉTRICA CON MCMC

Alma Larios¹, Pilar Escalante¹, Roberto Sáenz², Vrani Ibarra¹, García Victoria¹

¹ Laboratorio de Agrobiotecnología, Universidad de Colima, Coquimatlán, Colima, CP.28629

² Facultad de Ciencias, Universidad de Colima, Colima, Colima, CP.28045

Alma.Jetzay.Larios.Pulido@gmail.com

Palabras clave: Fructooligosacáridos, modelo matemático, hidrólisis

Introducción. Los fructooligosacáridos (FOS) son azúcares de gran interés en la industria de los alimentos funcionales por su capacidad prebiótica. Su síntesis es catalizada por la enzima fructosiltransferasa, donde el sustrato de partida, la sacarosa (GF), es sometida a una serie de reacciones para producir kestosa (GF₂), nistosa (GF₃) y fructosilnistora (GF₄) (1). Industrialmente, la implementación del proceso depende de un modelo que describa cómo son llevadas a cabo las reacciones. Los actuales modelos de síntesis obedecen al mecanismo: $2GF_n \rightarrow GF_{n+1} + GF_{n-1}$ incluyendo la hidrólisis de nistora: $GF_3 \rightarrow GF_2 + F$. Experimentalmente, los parámetros son determinados con una serie de ensayos individuales, requiriendo ajuste posterior al solo considerar interacciones aisladas de la enzima con un solo sustrato (2). Una alternativa para la estimación paramétrica es el método de Monte Carlo vía Cadenas de Markov (MCMC), un algoritmo no determinista que permite ajustar el modelo a los datos experimentales y obtener densidades de probabilidad para los valores de cada parámetro.

En éste trabajo se propone un modelo para la producción de FOS que incluye la hidrólisis de sacarosa ($GF \rightarrow G + F$). El modelo es ajustado a datos experimentales usando MCMC.

Metodología. La reacción consistió en sacarosa al 60%(p/v) con 32U/mL de extracto enzimático proveniente de la fermentación de *Aspergillus aculeatus*, en un volumen total de 250mL. Se tomaron alícuotas de 1mL en un periodo de tiempo de 24hr. El procesamiento del extracto, condiciones de síntesis y el tratamiento de muestras se describe en (3).

Resultados. La producción de fructosa observada que no es descrita dentro del modelo existente, se atribuyó a la hidrólisis de sacarosa por factores como la temperatura o la existencia de una enzima contaminante en el extracto. La modificación al modelo propuesto en (2) se muestra en las ecuaciones:
Glucosa:

$$\frac{dG}{dt} = \frac{180}{2 * 342} \frac{V_{ms} * GF}{GF \left(1 + \frac{GF}{K_{ss}}\right) + K_{ms} \left(1 + \frac{G}{K_{gs}}\right)} + \frac{180 V_{mh} * GF}{342 K_{mh} + GF}$$

Fructosa:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{180}{666} \frac{V_{mnh} * GF_3}{GF_3 \left(1 + \frac{GF_3}{K_{sn}}\right) + K_{mnh}} + \frac{180 V_{mh} * GF}{342 K_{mh} + GF}$$

Sacarosa:

$$\frac{dGF}{dt} = \frac{-V_{ms} * GF}{GF \left(1 + \frac{GF}{K_{ss}}\right) + K_{ms} \left(1 + \frac{G}{K_{gs}}\right)} + \frac{342}{2 * 504} \frac{V_{mk} * GF_2}{GF_2 + K_{mk} \left(1 + \frac{G}{K_{gk}}\right)} - \frac{V_{mh} * GF}{K_{mh} + GF}$$

La figura 1 muestra que la inclusión de hidrólisis de sacarosa mejora significativamente el ajuste del modelo para la producción de fructosa, sin afectar la descripción adecuada de la concentración de los demás azúcares presentes en la síntesis. En la figura 2 se muestra que las distribuciones obtenidas de los parámetros son consistentes con las estimaciones dadas en (2) exceptuando las modificaciones del modelo y V_{mnh} (velocidad de hidrólisis de nistora).

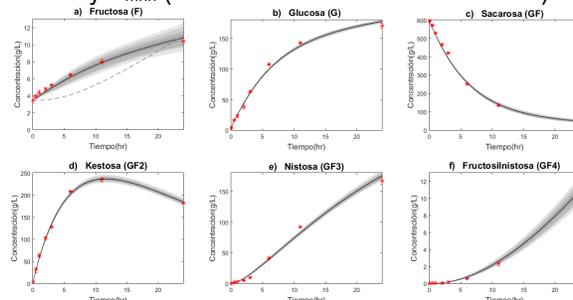


Fig. 1. a) Comparación entre el ajuste del modelo original (---) y el modificado (—) para fructosa. a)-f) Ajuste del modelo modificado (—), con bandas de confianza y datos experimentales (*).

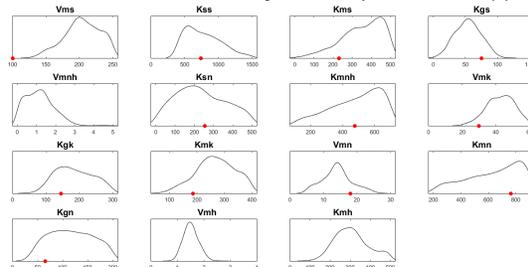


Fig. 2. Comparación de las distribuciones obtenidas de los parámetros del modelo modificado y las estimaciones en (2) (●).

Conclusiones. El modelo propuesto describe de manera adecuada la concentración de azúcares durante la síntesis de FOS con eficiencia, incluyendo la fructosa, lo cual no se logra sin la modificación propuesta.

Agradecimientos. Al CONACyT por la beca de maestría 806803 y el proyecto financiado a Problemas Nacionales 2017 con número 5772.

Bibliografía.

1. P. Sangeetha, M. Ramesh, S. Prapulla. (2005). *Trends Food Sci Technol.* 16:442-457.
2. M. Alvarado, F. Maugeri. (2011). *Catal. Sci. Technol.* 1:1043-1050.
3. Virgen-O. José. (2015). Producción, monitoreo y análisis molecular de enzimas productoras de fructooligosacáridos. Universidad de Colima.

