

Simulador para reactor tubular homogéneo de flujo pistón, en estado estacionario, con distintas cinéticas enzimáticas.

María Gómez*, Elisa Gómez, Marco A. Fiallos, Josefa Bastida, Fuensanta Máximo, María D. Murcia,
Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, Universidad de Murcia, Campus de Espinardo, 30100, Murcia, España
*maria.gomez@um.es



INTRODUCCIÓN

El uso de simuladores en el ámbito académico está cada vez más extendido, ya que pueden mejorar la enseñanza habitual y utilizarse como una herramienta que ayude a comprender y mejorar el aprendizaje [1]. Para realizar la simulación de un proceso químico pueden utilizarse simuladores comerciales, o bien formular las ecuaciones que describen dicho proceso, desarrollar el algoritmo de cálculo para resolverlas, y pasar ese algoritmo a un lenguaje de programación [2, 3]. En este trabajo se ha desarrollado un Simulador para reactores tubulares homogéneos de flujo pistón, en estado estacionario, donde tienen lugar reacciones catalizadas por enzimas con distintas cinéticas.

DESARROLLO TEÓRICO

En primer lugar, se han obtenido las ecuaciones de diseño del reactor para cada una de las cinéticas estudiadas (Tabla 1), y se han resuelto usando el método de cálculo numérico de Bisección, ya que no tienen solución analítica. El algoritmo de cálculo se ha codificado en el lenguaje Visual Basic para Aplicaciones (VBA), cuyo editor está incorporado en Microsoft Excel. Este software permite simular el comportamiento de reacciones enzimáticas con diferentes cinéticas, en un reactor tubular de flujo pistón en estado estacionario. Concretamente, las cinéticas estudiadas son: Michaelis-Menten sin inhibición, con inhibición por sustrato, y con inhibición competitiva, no competitiva y acompetitiva por producto.

FUNCIONAMIENTO DEL SIMULADOR

El simulador funciona como un laboratorio virtual de reactores donde se puede estudiar la influencia de la cantidad de enzima, la concentración inicial de sustrato, la constante de Michaelis y la constante de inhibición, en los casos en que esta exista, sobre la conversión obtenida en la corriente de salida del reactor tubular, a distintos valores del tiempo de residencia.

Está compuesto por 7 hojas de Excel. Los distintos objetos de VBA que se han utilizado, sobre todo botones de comando, etiquetas y cajas de texto, se han insertado sobre las Hojas de Excel, es decir, no se han usado Formularios. Los resultados se han escrito en celdas de Excel, facilitando así las representaciones gráficas de los mismos.

RESULTADOS

A continuación, se muestran algunos de los resultados que se pueden obtener con el simulador para las diferentes cinéticas. En cada una de ellas se estudia la influencia de una de las variables (Figuras 3 a 7). Finalmente, en la Figura 8, se comparan los resultados obtenidos de conversiones a la salida del reactor frente a los distintos tiempos de residencia, para las tres cinéticas con inhibición por producto (Competitiva, No Competitiva y Acompetitiva) con un valor de la constante de inhibición K_p de 0,1 mM y para la de Michaelis-Menten sin inhibición.

Tabla 1. Ecuaciones de diseño para las distintas cinéticas enzimáticas usadas en el simulador

CINÉTICA	ECUACIÓN DE DISEÑO
MICHAELIS-MENTEN SIN INHIBICIÓN	$\tau V_{max} = C_{SO} X_{Sf} - K_M \ln(1 - X_{Sf})$
M-M INHIBICIÓN POR SUSTRATO	$\tau V_{max} = C_{SO} X_{Sf} - K_M \ln(1 - X_{Sf}) + \frac{K_S C_{SO}^2}{2} (2X_{Sf} - X_{Sf}^2)$
M-M INHIBICIÓN COMPETITIVA POR PRODUCTO	$\tau V_{max} = C_{SO} X_{Sf} \left(1 - \frac{K_M}{K_P}\right) - K_M \ln(1 - X_{Sf}) \left[1 + \frac{C_{SO}}{K_P}\right]$
M-M INHIBICIÓN NO COMPETITIVA POR PRODUCTO	$\tau V_{max} = C_{SO} X_{Sf} \left(1 - \frac{K_M}{K_P}\right) - K_M \ln(1 - X_{Sf}) \left[1 + \frac{C_{SO}}{K_P}\right] + \frac{C_{SO}^2 X_{Sf}^2}{2K_P}$
M-M INHIBICIÓN ACOMPETITIVA POR PRODUCTO	$\tau V_{max} = C_{SO} X_{Sf} \left(1 - \frac{K_M}{K_P}\right) - K_M \ln(1 - X_{Sf}) + \frac{C_{SO}^2 X_{Sf}^2}{2K_P}$



Figura 1. Hoja 1 del Simulador: Portada.



Figura 2. Hoja 2 del Simulador: Selección de cinética a estudiar.

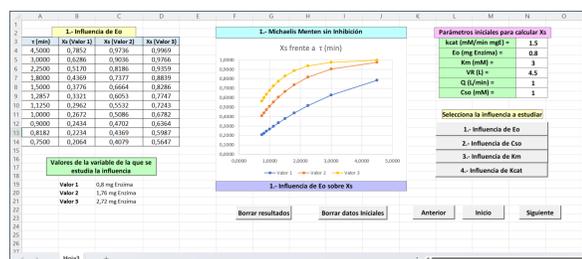


Figura 3. Hoja 3 del Simulador, Cinética de Michaelis-Menten sin Inhibición, influencia de la cantidad inicial de enzima sobre la conversión de salida del reactor.

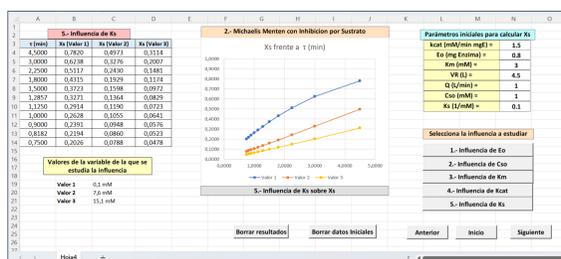


Figura 4. Hoja 4 del Simulador, Cinética de Michaelis-Menten con Inhibición por Sustrato, influencia de la constante de inhibición por sustrato sobre la conversión de salida del reactor.

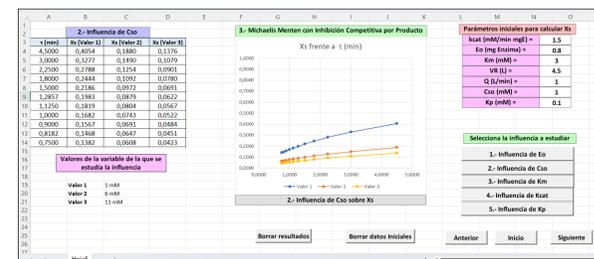


Figura 5. Hoja 5 del Simulador, Cinética de Michaelis-Menten con Inhibición Competitiva por Producto, influencia de la concentración de sustrato a la entrada sobre la conversión de salida del reactor.

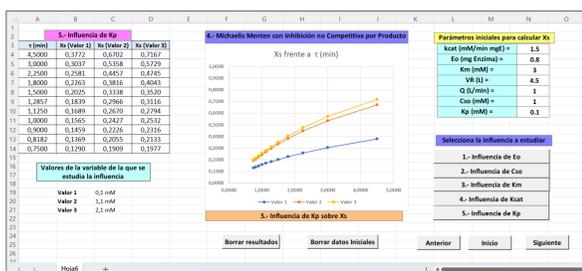


Figura 6. Hoja 6 del Simulador, Cinética de Michaelis-Menten con Inhibición no Competitiva por Producto, influencia de la constante de inhibición por producto sobre la conversión de salida del reactor.

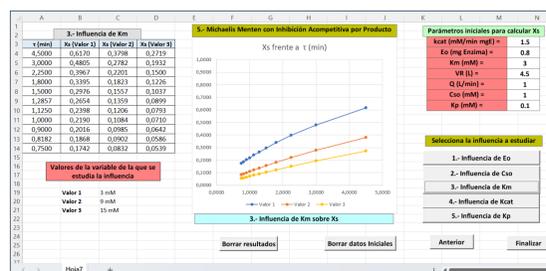


Figura 7. Hoja 7 del Simulador, Cinética de Michaelis-Menten con Inhibición Acompetitiva por Producto, influencia de la constante de Michaelis sobre la conversión de salida del reactor.

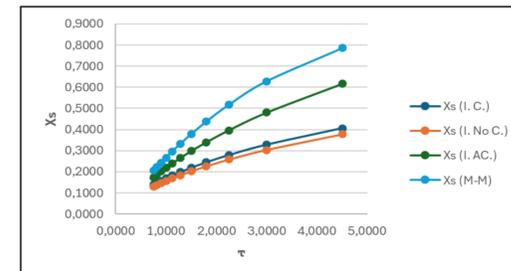


Figura 8. Comparación de los resultados de conversión frente a tiempo de residencia para cinéticas sin inhibición (M-M) y con inhibición por producto. C_{SO} = 1 mM; V_R = 4,5 L; Q = 1 L/min; E₀ = 0,8 mg enzima; K_{cat} = 1,5 mM/min mg enzima; K_M = 3 mM; K_P = 0,1 mM

REFERENCIAS

- [1] Molina R., Orcajo G., Segura Y., Moreno J., & Martínez F. (2021). KMS platform: A complete tool for modeling chemical and biochemical reactors. *Education for Chemical Engineers*, 34, 127–137. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2020.09.003>
- [2] Sánchez Zurano A., Fernández Sevilla J. M., Esteban García A. B., Pinna-Hernández M. G., & Casas López J. L. (2023). Virtual labs for the study of enzymatic stirred tank bioreactors. *Computer Applications in Engineering Education*, 31(3), 457–468. <https://doi.org/10.1002/cae.22510>
- [3] Briones L. & Escola J.M. (2019). Application of the Microsoft Excel solver tool in the solution of optimization problems of heat exchanger network systems. *Education for Chemical Engineers*, 26, 41–47. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2018.10.003>

