

Υπολογιστική ανακατασκευή υβριδικών μεμβρανών και εφαρμογή στη μοντελοποίηση βιοαντιδραστήρων

N. Μπαλή^{1,2}, E. Σκούρας^{1,3}, A. Πέτση¹, B. Μπουργανός¹

¹Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής (ΙΕΧΜΗ), Τδρμα Τεχνολογίας & Έρευνας (ΙΤΕ)

²Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών

³ΤΕΙ Δυτικής Ελλάδας, Τμήμα Μηχανολογίας

Λέξεις κλειδιά: Ανακατασκευή υβριδικών μεμβρανών, υδρόλυση της λακτόζης, βιοαντιδραστήρες

Περίληψη

Η υπολογιστική ανακατασκευή πορωδών μεμβρανών και η προσομοίωση των φαινομένων μεταφοράς και των φυσικοχημικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στο εσωτερικό τους είναι πολύτιμο εργαλείο για το σχεδιασμό νέων εφαρμογών ρόφησης ή διαχωρισμού μιγμάτων, όπως είναι η απομάκρυνση συστατικών με μεμβράνες βιοαντιδραστήρων. Διάφορες ενδιαφέρουσες τεχνικές έχουν αναπτυχθεί μέχρι σήμερα για την τρισδιάστατη ανακατασκευή πορωδών μέσων, είτε με σειριακή τομογραφία είτε με στοχαστικές τεχνικές, χρησιμοποιώντας μικρό αριθμό φυσικών τομών.

Η παρούσα μελέτη εστιάζει στην ανακατασκευή διστρωματικών υβριδικών μεμβρανών που εσωκλείουν ακινητοποιημένα ένζυμα. Οι μεμβράνες αυτού του τύπου, βρίσκουν πολλές εφαρμογές, όπως στην υδρόλυση της λακτόζης παρουσία ενζύμων β-γαλακτοσιδάσης στη βιομηχανία γάλακτος. Η ανακατασκευή συγκεκριμένων μεμβρανών έγινε με βάση εικόνες από SEM. Οι τεχνικές της ανακατασκευής που χρησιμοποιήθηκαν είναι η βαλλιστική μέθοδος εναπόθεσης σφαιρών και στοχαστικές μεθόδους Monte Carlo κλασικού τύπου και τύπου σκληρού πυρήνα. Κατόπιν σύγκρισης της αποτελεσματικότητας των μεθόδων επιλέχθηκε η Monte Carlo τύπου σκληρού πυρήνα, ως η πιο ακριβής μέθοδος εξ αυτών για την υπολογιστική αναπαράσταση της μεμβράνης που χρησιμοποιείται πειραματικά. Επίσης πραγματοποιήθηκε μοντελοποίηση των φαινομένων μεταφοράς και των χημικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα μέσα στις μεμβράνες και είναι υψίστης σημασίας για τη βελτιστοποίηση και τη βιομηχανική κατασκευή των μεμβρανών. Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία, στους ενζυμικούς αντιδραστήρες χρησιμοποιούνται μη

γραμμικές κινητικές για την περιγραφή της υδρόλυσης της λακτόζης, ως εκ τούτου στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η μη γραμμική κινητική, κατά Michaelis-Menten με ανταγωνιστικό προϊόν. Σε αυτή στη βάση επιλύθηκε το πρόβλημα της συναγωγής, της διάχυσης και της αντίδρασης μέσα στο σύστημα των μεμβρανών.

Όσον αφορά την αξιοπιστία με την οποία η ανακατασκευή προσομοιώνει την πραγματική μεμβράνη, οι ανακατασκευασμένες δομές συγκρίθηκαν ως προς τη διαπερατότητα με τις αντίστοιχες τιμές πειραματικής εργασίας, με τις οποίες συμφώνησαν με μεγάλη ακρίβεια. Εν συνεχεία πραγματοποιήθηκε παραμετρική ανάλυση του προβλήματος. Ενδιαφέροντα αποτελέσματα εξήχθησαν από τη μελέτη, όπως για την επίδραση της κινητικής, η οποία σύμφωνα με πειραματικές μελέτες επηρεάζεται από τη θερμοκρασία και το βαθμό οξύτητας του περιβάλλοντος και επιδρά στο ρυθμό υδρόλυσης της λακτόζης. Επίσης, η επιλογή του πορώδους κρίθηκε σημαντική μιας και η επίδραση της διαπερατότητας και της διαχυτότητας φάνηκε να επηρεάζουν σημαντικά τις επιδόσεις του βιοαντιδραστήρα.