

Resumen

La presente tesis doctoral, titulada "*Contribution to the modelling of the light field distribution within Synechocystis sp. PCC 6803 cultures and its influence on cellular photosynthesis processes*", engloba diversos trabajos cuyo objetivo es avanzar en la comprensión de la distribución lumínica en cultivos de cianobacterias y en los efectos de la luz sobre los mecanismos fotosintéticos de dichos microorganismos. Se trata, en definitiva, de otro paso hacia la integración de modelos matemáticos sobre la fotosíntesis a nivel celular y a escala de cultivo. En primer lugar, para comprender cómo se comporta un cultivo de bacterias fotosintéticas, es fundamental predecir la distribución del campo de luz a lo largo del perfil del biorreactor, tanto a nivel de intensidad total, como respecto a su distribución de flujo de fotones. La distribución de longitudes de onda presente en el medio es importante puesto que muchos procesos de la fotosíntesis están regulados por ciertas longitudes de onda y, por tanto, están modulados por la distribución espectral – el color – de la luz. En este sentido, si bien existen diversas metodologías que predicen la evolución espacial del campo de luz, dichas aproximaciones suelen consistir en cálculos que aportan una solución no analítica y con una carga computacional elevada. Por ello, poder disponer de una herramienta sencilla y a su vez escalable con otros modelos de procesos fotosintéticos, permitiría avanzar en el entendimiento de los mismos. Aprovechando las propiedades inherentes ópticas del cultivo, se desarrolló un modelo matemático basado en el concepto de campo auto-consistente. Este algoritmo, bautizado en la correspondiente publicación como *Auto-consistent Field Approximation Algorithm (AFA)*, proporciona una predicción del campo lumínico, incluyendo la evolución espectral del mismo a lo largo del camino óptico, para cultivos aclimatados a distintos valores de radiación. Dicha investigación se publicó en la revista *Algal Research* mediante el artículo titulado "*Light distribution and spectral composition within cultures of micro-algae: Quantitative modelling of the light field in photobioreactors*", en el que se valida el algoritmo con datos experimentales de dos cepas de estudio de la

cianobacteria *Synechocystis*. Si bien los resultados fueron satisfactorios, el empleo de la ley de Lambert-Beer con un valor constante de atenuación no permite modelizar la parte del campo de luz con menor intensidad, donde el coeficiente de atenuación deja de ser constante y el comportamiento se desvía del exponencial. Por ello, se decidió modelizar el campo de luz con una función que generaliza el caso exponencial mediante el uso de cálculo fraccionario. Se empleó una función de Mittag-Leffler que cumplía con los requisitos formales y ofrecía un ajuste de los datos mejor al obtenido mediante la ley de Lambert-Beer. Como un hallazgo notable, se determinó que el valor de dicho parámetro, que caracteriza la función de Mittag-Leffler, era el mismo para los datos empíricos de las dos cepas estudiadas. Este trabajo se publicó en la contribución llamada "*Estimation of the light field inside photosynthetic microorganism cultures through Mittag-Leffler functions at depleted light conditions*" en la revista *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*. Después se procedió a utilizar sendos trabajos de investigación para calcular el campo de luz en un cultivo de *Synechocystis* y relacionarlo con su productividad máxima. En concreto se ha estudiado, como indicador del rendimiento de la fotosíntesis, la producción de oxígeno y los mecanismos respiratorios asociados a distintas intensidades de luz. Esta investigación está en su fase final y se está ultimando la escritura del artículo para enviarlo a una revista científica próximamente. Dicho manuscrito se titula "*Experimental characterization of Synechocystis sp. PCC 6803 cultures productivity up on light conditions*". Finalmente, se está desarrollando una cuarta contribución titulada "*Individual pigment contribution to overall in vivo absorption in Synechocystis sp. PCC 6803 cells*". Esta investigación estudia la cantidad de luz absorbida por los cromóforos de *Synechocystis* en función del tipo de iluminación utilizada y calcula la concentración de pigmentos presentes en la célula. En resumen, la presenta tesis aporta herramientas de modelización al campo de la fotosíntesis con el objeto de avanzar en la integración de modelos matemáticos que relacionen aspectos ópticos con fenómenos biológicos y de esta manera apoyar iniciativas biotecnológicas en el campo del cultivo de cianobacterias.