

## Modelagem cinética da síntese de ésteres etílicos de ácidos graxos utilizando sólidos fermentados contendo lipases

Bruna Wiederkehr <sup>a</sup>, David Alexander Mitchell <sup>b</sup>, Luiz F. L. Luz Jr. <sup>a</sup>, Nadia Krieger <sup>c,\*</sup>

<sup>a</sup> Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Paraná, Cx. P. 19011, Curitiba, Brasil

<sup>b</sup> Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, Universidade Federal do Paraná, Cx. P. 19046, Curitiba, Brasil

<sup>c</sup> Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, Cx. P. 19081, Curitiba, Brasil

\* E-mail: nkrieger@ufpr.br



### INTRODUÇÃO

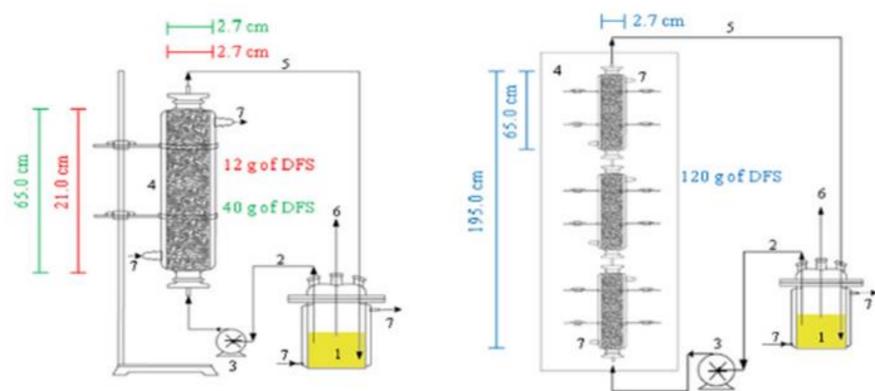
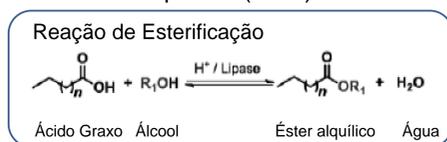
A utilização de sólidos fermentados apresenta potencial de reduzir custos industriais. Esta estratégia evita as etapas de processamento necessárias quando as lipases são produzidas por fermentação submersa: recuperação da lipase do caldo da fermentação e sua posterior imobilização no suporte adequado. Recentemente<sup>1,2</sup>, sólidos fermentados contendo lipases foram utilizados na síntese de ésteres etílicos de ácidos graxos em reator de leito fixo operando em modo batelada a 45 °C. A cinética de esterificação foi investigada e, após otimização do sistema operacional, foi possível obter 88 % de conversão em ésteres em 24 h de reação<sup>2</sup>. O modelo cinético representativo deste sistema precisa ser desenvolvido para o projeto do biorreator e estudos de viabilidade econômica.

### OBJETIVOS

Propor um modelo cinético representativo da síntese de ésteres etílicos de ácidos graxos (AGLs) utilizando sólidos fermentados contendo lipases (DFS).

### MATERIAIS E MÉTODOS

- Esquema do Reator Leito Fixo<sup>2</sup>



- Condições Experimentais

Nº do Experimento	Quantidade DFS (Base Seca)	Quantidade Material de Partida	Razão Mássica (DFS:AGLs)	Razão Molar (Etanol:AGLs)	Etapa
1	12 g	25 g etanol 100 g oleína	12% (m/m)	1,5:1	Estimação <sup>2</sup>
2	40 g	82 g etanol 333 g oleína	12% (m/m)	1,5:1	
3	40 g	82 g etanol 333 g oleína	12% (m/m)	1,5:1	
4	40 g	272 g etanol 333 g oleína	12% (m/m)	5:1	
5	40 g	544 g etanol 333 g oleína	12% (m/m)	10:1	
6	120 g	196 g etanol 400 g oleína	30% (m/m)	3:1	Validação <sup>1</sup>
7	0,61 g	4,223 g etanol 5,085 g AGBS*	12% (m/m)	5:1	
8	12 g	18 g etanol 100 g AGBS*	12% (m/m)	1:1	

\*AGBS – Ácido graxo obtido a partir da hidrólise subcrítica da borra ácida resíduo do refino de óleo de soja<sup>1</sup>

- Modelo Cinético Proposto / Mecanismo LHHW

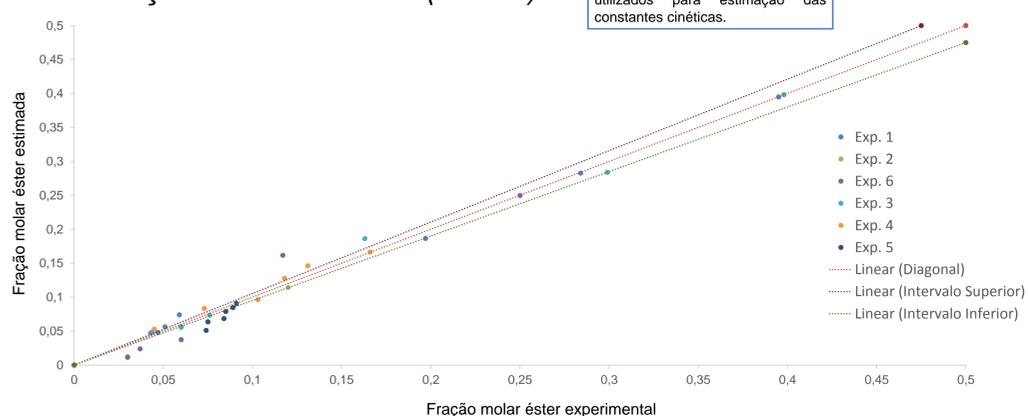
$$r_{\text{Ác.Ol.}} = \frac{-\exp(A_d) \cdot \exp\left(\frac{B_d}{T}\right) \cdot [\text{Ác. Ol.}] \cdot [\text{Et.}] + \exp(A_i) \cdot \exp\left(\frac{B_i}{T}\right) \cdot [\text{Ol. Et.}] \cdot [\text{Ág.}]}{(1 + \exp(A_1) \cdot [\text{Ác. Ol.}] + \exp(A_2) \cdot [\text{Et.}] + \exp(A_3) \cdot [\text{Ol. Et.}] + \exp(A_4) \cdot [\text{Ág.}])^2}$$

- Metodologia

Ferramenta de regressão de dados do simulador Aspen Plus.

### RESULTADOS E DISCUSSÕES

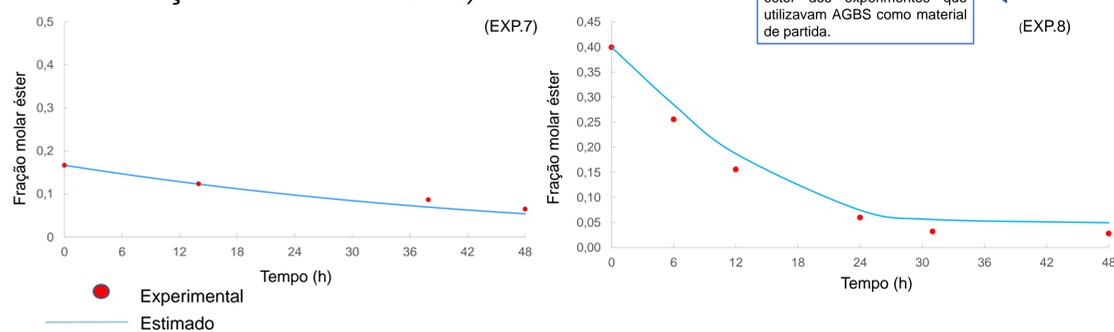
- Estimação de Parâmetros (Oleína)



- Modelo Cinético Ajustado / Mecanismo LHHW

$$r_{\text{Ác.Ol.}} = \frac{-2094,290 \cdot \exp\left(\frac{-2526,51}{T}\right) \cdot [\text{Ác. Ol.}] \cdot [\text{Et.}] + 893,476 \cdot \exp\left(\frac{-2986,10}{T}\right) \cdot [\text{Ol. Et.}] \cdot [\text{Ág.}]}{(1 + 0,101 \cdot [\text{Ác. Ol.}] + 914 \cdot [\text{Et.}] + 4,32 \cdot [\text{Ol. Et.}] + 25,2 \cdot [\text{Ág.}])^2}$$

- Validação do Modelo AGBS



### CONCLUSÃO

O modelo cinético proposto apresentou boa concordância com os dados experimentais. Este foi generalizado para prever (incluindo as incertezas) as conversões de éster de ácidos graxos sem a necessidade de re-estimar os parâmetros do modelo de acordo com o material de partida utilizado (oleína ou AGBS).

### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- D. Soares et al. / Biochemical Engineering Journal 81 (2013) 15–23
- G.S. Dias et al. / Chemical Engineering Journal 316 (2017) 341–349

