

Modelagem e simulação do processo de adsorção de inulinase por cromatografia de troca iônica em coluna de leito expandido

Caroline Costa Moraes

Marcio A. Mazutti

Maria Izabel Rodrigues

Francisco Maugeri Filho

Susana Juliano Kalil

As enzimas apresentam diversas propriedades que as tornam interessantes para uso como biocatalisadores. Entre elas, o fato de poderem atuar em condições brandas e de uma maneira estéreo-seletiva. Nesse contexto encontram-se as inulinases que podem ser utilizadas em processos de hidrolises da inulina e na síntese de oligossacarídeos. Na produção de enzimas através de processos biotecnológicos, após a fermentação, dependendo da aplicação, são necessárias operações de purificação que devem ser incluídas no custo final do produto. Para minimizar estes custos é importante a escolha de métodos de separação e purificação adequados, e dentre estes o uso de cromatografia de troca iônica em leito expandido é interessante uma vez que utiliza caldo não clarificados, eliminando as etapas de clarificação e centrifugação, purificando e concentrando o produto de interesse. Para estudar processos de separação e purificação por adsorção é necessário que se conheça inicialmente o comportamento cinético dos processos de adsorção. O processo de modelagem e simulação pode oferecer informações importantes a respeito da faixa de valores em que se devem estudar as variáveis a serem otimizadas. Neste estudo, um modelo matemático para coluna de leito expandido foi desenvolvido para predizer as curvas de ruptura da adsorção de extrato bruto não clarificado de inulinase de *Kluyveromyces marxianus* em resina de troca iônica Streamline SP. Os dados experimentais são provenientes de trabalhos prévios. Os parâmetros cinéticos e de transferência de massa foram estimados através de um algoritmo heurístico, o PSO (Particle Swarm Optimization). Para a resolução do modelo foram adotadas as seguintes hipóteses: a concentração de enzima no poro do adsorvente está em equilíbrio com a concentração adsorvida na superfície. Esta adsorção é representada pelo modelo de Langmuir; o perfil hidrodinâmico da fase líquida pode ser descrito pelo modelo da dispersão axial; a distribuição do tamanho de partícula foi considerado o mesmo ao longo da altura do leito, as propriedades reológicas do extrato bruto foi considerada a mesma em todos os experimentos, independente da concentração do extrato. A equação diferencial parcial foi resolvida numericamente utilizando o método

de discretização de Crank-Nicholson, resultando em equações lineares, que foram resolvidas utilizando o algoritmo DLSLRG FORTRAN IMSL. A estimativa dos parâmetros q_{\max} (capacidade máxima de adsorção), k_1 (constante de adsorção), k_2 (constante de dessorção), k_f (coeficiente de transferência de massa), D_l (coeficiente de dispersão axial) e ϵ (porosidade) foi feita para cada grau de expansão, usando três curvas experimentais com os graus de expansão (GE) 2, 2,5 e 3, na concentração inicial de inulinase de 65,6 U/mL. Para validação do modelo, foi utilizada uma curva com grau de expansão 2,5 feita na concentração de inulinase de 114,4 U/mL. Verificado a aplicabilidade do modelo, otimizou-se o processo utilizando um delineamento composto central rotacional, avaliando-se altura de leito e concentração de extrato enzimático, simulando as curvas nessas condições e avaliando sobre a eficiência de processo (10%) e de coluna (90%). As máximas eficiências foram observadas quando utilizadas maiores concentrações de inulinase, e altura de leito entre 20 e 30 cm. O grau de expansão de 3 vezes foi considerado o melhor, uma vez que a produtividade é consideravelmente superior nesse GE.

Agradecimentos: CNPq , Capes.