

MODELAGEM COMPUTACIONAL DE PARÂMETROS CINÉTICOS NA SÍNTESE ENZIMÁTICA DE MONOGLICERÍDEOS E DIGLICERÍDEOS PARA APLICAÇÃO EM MICROEMULSÕES

Saulo Marcel Leite Carvalho¹ (PIBIC/CNPq); César Almeida Rodrigues¹; Jefferson Cleriston Barros Santos¹; Juliana Lisboa Santana¹ (Orientadora)

juliana.lisantana90@souunit.com.br

¹Universidade Tiradentes/Aracaju/SE.

3.00.00.00-9- Engenharias; 3.06.00.00-6 Engenharia Química;

RESUMO

Introdução: A busca por processos mais sustentáveis e seletivos tem impulsionado o desenvolvimento de bioprocessos baseados em catálise enzimática para a produção de compostos de alto valor agregado. Entre esses monoglicerídeos (MGs) e diglicerídeos (DGs) se destacam por terem alto valor agregado com ampla aplicação nas indústrias alimentícia, farmacêutica e cosmética, atuando como emulsificantes, estabilizantes e modificadores de textura. A síntese enzimática desses compostos, utilizando lipases imobilizadas, representa alternativa sustentável às rotas químicas convencionais, operando em condições brandas e com maior seletividade. Na literatura, a transesterificação enzimática do óleo de coco catalisada pela lipase *Burkholderia cepacia* imobilizada em sílica, possibilita conversões superiores a 80%, gerando MGs e DGs como intermediários transitórios. Diante desse desempenho, torna-se essencial compreender os parâmetros cinéticos dessa reação são fundamentais para otimização de processos e favorecer a obtenção de microemulsões estáveis e sustentáveis. **Objetivo:** Investigar, por meio de modelagem matemática e análise computacional, os parâmetros cinéticos associados à formação de MGs e DGs a partir da transesterificação enzimática de óleos vegetais utilizando lipase imobilizada em sílica, com potencial de aplicação na produção de microemulsões sustentáveis. **Materiais e Métodos:** Os dados experimentais reportados por Santana et al. (2020) foram obtidos de reações de transesterificação em reator contínuo com lipase *Burkholderia cepacia* imobilizada em sílica, sob razão molar etanol:óleo 1:7 e temperatura de 40 °C, avaliadas nos tempos de 24, 48, 72 e 96 h. Aplicou-se regressão polinomial de 4ª ordem, restringindo as previsões ao intervalo 0–100 % de conversão para garantir coerência física nos resultados. As bibliotecas pandas, NumPy, scikit-learn, matplotlib e seaborn foram empregadas para manipulação de dados, modelagem e visualização. A validação estatística incluiu cálculo de R², RMSE e MAE, além de Análise de Variância (ANOVA), testes de Shapiro-Wilk e Levene para verificação dos pressupostos. Uma ferramenta interativa foi desenvolvida com ipywidgets para exploração dinâmica de cenários. **Resultados:** Os modelos ajustados apresentaram coeficientes de determinação elevados (R² > 0,95) para todos os compostos avaliados. A conversão de MGs atingiu 53,41% em 24 h, exibindo perfil de acúmulo característico de intermediários. Os DGs exibiram comportamento transitório, com pico intermediário seguido de consumo, enquanto os ésteres mostraram crescimento contínuo e acumulativo, típico de reações consecutivas do tipo TG → DG → MG → ésteres + glicerol. A ANOVA indicou ausência de diferenças significativas entre os resíduos dos modelos (p = 0,8507), confirmando a robustez do ajuste. Os testes de Shapiro-Wilk e Levene validaram, respectivamente, a normalidade e a homogeneidade de variâncias dos resíduos, reforçando a consistência estatística do modelo. **Conclusão:** A modelagem computacional em regressão polinomial demonstrou-se eficaz para descrever e prever a cinética de formação de MGs e DGs em reações de transesterificação catalisadas por lipase imobilizada em sílica. A integração entre análise de dados, validação estatística e ferramentas interativas constitui uma estratégia promissora para reduzir a dependência de experimentos extensos e apoiar o desenvolvimento de bioprocessos mais seletivos, eficientes e sustentáveis, com aplicabilidade direta na produção de emulsificantes e microemulsões.

PALAVRAS-CHAVE: biocatálise, lipase imobilizada, modelagem..

Agradecimentos: Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior [CAPES], Código Financeiro 001; Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico [CNPq]; e Fundação de Apoio à Pesquisa e à Inovação Tecnológica do Estado de Sergipe [FAPITEC/SE].

ABSTRACT

Introduction: The pursuit of more sustainable and selective processes has driven the development of bioprocesses based on enzymatic catalysis for the production of high-value compounds. Among these, monoglycerides (MGs) and diglycerides (DGs) stand out for their high added value and wide application in the food, pharmaceutical, and cosmetic industries, acting as emulsifiers, stabilizers, and texture modifiers. Enzymatic synthesis of these compounds using immobilized lipases represents a sustainable alternative to conventional chemical routes, operating under mild conditions with greater selectivity. In the literature, enzymatic transesterification of coconut oil catalyzed by *Burkholderia cepacia* lipase immobilized on silica enables conversions above 80%, generating MGs and DGs as transient intermediates. Given this performance, it becomes essential to understand the kinetic parameters of this reaction, which are fundamental for process optimization and favoring the production of stable and sustainable microemulsions. **Objective:** To investigate, through mathematical modeling and computational analysis, the kinetic parameters associated with the formation of MGs and DGs from enzymatic transesterification of vegetable oils using lipase immobilized on silica, with potential application in the production of sustainable microemulsions. **Materials and Methods:** Experimental data reported by Santana et al. (2020) were obtained from transesterification reactions in a continuous reactor with *Burkholderia cepacia* lipase immobilized on silica, under ethanol:oil molar ratio of 1:7 and temperature of 40 °C, evaluated at 24, 48, 72, and 96 h. Fourth-order polynomial regression was applied, restricting predictions to the 0–100% conversion range to ensure physical coherence in the results. The libraries pandas, NumPy, scikit-learn, matplotlib, and seaborn were employed for data manipulation, modeling, and visualization. Statistical validation included calculation of R^2 , RMSE, and MAE, as well as Analysis of Variance (ANOVA), Shapiro-Wilk and Levene tests for verification of assumptions. An interactive tool was developed with ipywidgets for dynamic scenario exploration. **Results:** The fitted models showed high determination coefficients ($R^2 > 0.95$) for all evaluated compounds. MG conversion reached 53.41% at 24 h, exhibiting characteristic accumulation profile of intermediates. DGs exhibited transient behavior, with intermediate peak followed by consumption, while esters showed continuous and cumulative growth, typical of consecutive reactions of the type $TG \rightarrow DG \rightarrow MG \rightarrow \text{esters} + \text{glycerol}$. ANOVA indicated absence of significant differences among model residuals ($p = 0.8507$), confirming the robustness of the fit. Shapiro-Wilk and Levene tests validated, respectively, the normality and homogeneity of variances of residuals, reinforcing the statistical consistency of the model. **Conclusion:** Computational modeling using polynomial regression proved effective for describing and predicting the formation kinetics of MGs and DGs in transesterification reactions catalyzed by lipase immobilized on silica. The integration of data analysis, statistical validation, and interactive tools constitutes a promising strategy to reduce dependence on extensive experiments and support the development of more selective, efficient, and sustainable bioprocesses, with direct applicability in the production of emulsifiers and microemulsions.

KEYWORDS: biocatalysis, immobilized lipase, modeling.

ACKNOWLEDGEMENTS: This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior [CAPES], Finance Code 001; Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico [CNPq]; and Fundação de Apoio à Pesquisa e à Inovação Tecnológica do Estado de Sergipe [FAPITEC/SE].