

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΠΛΗΘΥΣΜΙΑΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΤΗΣ ΕΝΖΥΜΙΚΗΣ ΥΔΡΟΛΥΣΗΣ ΦΥΤΙΚΗΣ ΒΙΟΜΑΖΑΣ ΣΕ ΒΙΟΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΕΣ ΣΥΝΕΧΟΥΣ ΚΑΙ ΗΜΙΣΥΝΕΧΟΥΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ

Β.Μαργαριτόπουλος¹, Χ.Χατζηδούκας^{1,2,*}

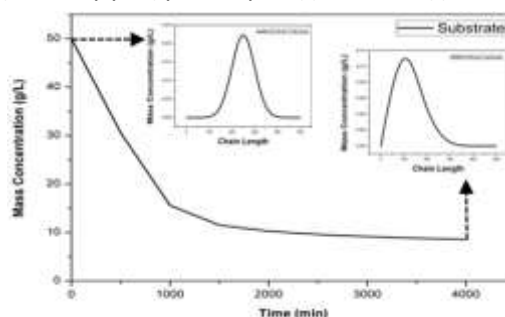
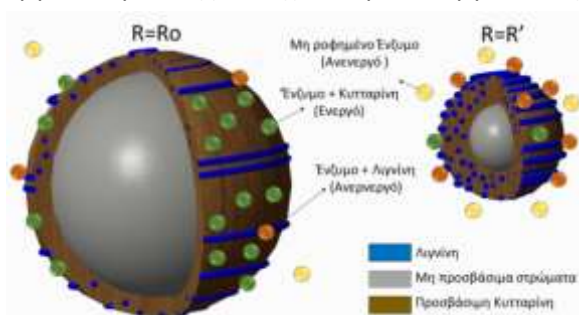
¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

²Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών και Ενεργειακών Πόρων, ΙΔΕΠ/ΕΚΕΤΑ

(*chatzido@auth.gr),

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ενζυμική υδρόλυση του κυτταρινικού κλάσματος φυτικής βιομάζας προς σάκχαρα αποτελεί βασική προϋπόθεση αξιοποίησής της για παραγωγή βιοαιθανόλης και προϊόντων υψηλής αξίας και συντελείται με ένα κοκτέιλ υδρολυτικών ενζύμων (ένδο- και έξω-κυτταρινάση και β-γλυκοσιδάση). Η μαθηματική μοντελοποίηση αυτής της διεργασίας συμβάλει σημαντικά στην κατανόηση των μηχανισμών που τη διέπουν και δημιουργούν προϋποθέσεις αριστοποίησης και εφαρμογής της στην αιφόρο βιομηχανική παραγωγή μεγάλου εύρους προϊόντων. Η παρούσα μελέτη στοχεύει στην ανάπτυξη ενός μηχανιστικού μοντέλου που εμβαθύνει σε φαινόμενα μικρο-κλίμακας και λαμβάνει υπόψη επιπλέον χαρακτηριστικά της βιομάζας όπως το μέγεθος των σωματιδίων, η περιεκτικότητα σε λιγνίνη και η κατανομή μεγέθους αλυσίδων της κυτταρίνης, διευρύνοντας έτσι την ικανότητά πρόβλεψης για διαφορετικά είδη βιομάζας και περιορίζοντας την υπερ-παραμετροποίηση του μοντέλου. Με την υποστήριξη προηγούμενης έρευνας^[1,2] υιοθετείται η χρήση πληθυσμιακών εξισώσεων για την περιγραφή της διακριτής δράσης του κάθε ενζύμου σε ένα μη-ομογενές υπόστρωμα κυτταρίνης. Δίνεται έμφαση στη μεταβαλλόμενη προσβασιμότητα των ενζύμων στην κυτταρίνη θεωρώντας μία σταδιακή-στρωματική έκθεση των αλυσίδων κυτταρίνης στα ένζυμα που την περιβάλλουν μαζί με έναν μηχανισμό σύνδεσης των ενζύμων στις αλυσίδες αυτές. Επιπλέον γίνεται χρήση ισόθερμων τύπου Langmuir για την περιγραφή της ρόφησης των ενζύμων τόσο στην επιφανειακή κυτταρίνη των σωματιδίων όσο και στη λιγνίνη, λαμβάνοντας υπόψη την ετερογένεια της αντίδρασης. Για την ανάπτυξη και την επίλυση του μαθηματικού μοντέλου χρησιμοποιείται το λογισμικό gPROMS® (PSE Ltd). Τα αποτελέσματα καταδεικνύουν το διακριτό ρόλο και τη σημασία του κάθε ενζύμου στην υδρόλυση. Επίσης, αναδεικνύεται η σημασία των ενδογενών χαρακτηριστικών της βιομάζας όπως είναι το μέγεθος σωματιδίων και η κατανομή μεγέθους αλυσίδας της κυτταρίνης, σε κρίσιμα χαρακτηριστικά της υδρόλυσης όπως είναι ο ρυθμός υδρόλυσης και ο βαθμός συνέργειας μεταξύ των ενζύμων. Με βάση τον μηχανισμό που προτείνεται, κατά την υδρόλυση, νέα στρώματα σωματιδίων, τα οποία περιλαμβάνουν μη αποδομημένες αλυσίδες κυτταρίνης και λιγνίνη, εκτίθενται προοδευτικά στα ένζυμα. Με την πρόοδο της υδρόλυσης η ακτίνα των σωματιδίων μειώνεται και λιγότερα ένζυμα ροφώνται. Ταυτόχρονα, το κλάσμα μάζας της λιγνίνης αυξάνεται, προκαλώντας μείωση των ενεργών ενζύμων και επομένως μείωση του ρυθμού υδρόλυσης. Τέλος, η δυνατότητα του μοντέλου να προβλέπει μείωση της απόδοσης της διεργασίας με αύξηση της συγκέντρωσης υποστρώματος^[3], το καθιστά ισχυρό εργαλείο μελέτης και σχεδιασμού διεργασιών ημισυνεχούς λειτουργίας βελτιωμένης απόδοσης.



Σχήμα 1: Απεικόνιση της ενζυμικής υδρόλυσης ενός σωματιδίου. **Σχήμα 2:** Χρονική μεταβολή της συγκέντρωσης υποστρώματος.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Griggs, A., Stickel, J. and Lischeske, J. (2011). *Biotechnol. Bioeng.* 109(3), pp.665-675.
- [2] Hosseini, S. and Shah, N. (2011). *Biomass and Bioenergy*, 35(9), pp.3841-3848.
- [3] Kristensen, J., Felby, C. and Jørgensen, H. (2009). *Biotechnol Biofuels*, 2(1), p.11.