

ÁREA DE PESQUISA: AP5 - Simulação e Controle de Processos

PROFESSOR: Antonio Carlos Luperni Horta

TÍTULO: Análise de Sustentabilidade e Otimização de fotobiorreatores iluminados artificialmente

RESUMO

This project is concerned with the optimization and control of microalgae cultivation, with a focus on sustainability. Both in the integrated biorefinery concept and for isolated production, the biotechnology sector has explored various sustainable production routes for autotrophic microorganisms. Considering the operation of photobioreactors as the main focus, the control of photosynthetically active irradiance and its qualitative and quantitative variation can condition the biosynthesis pathways of interest and determine various indicators such as efficiency, productivity and sustainability. In this sense, this project aims to create a computational and experimental framework for analyzing the viability and sustainability of photobioreactors, providing guidelines for the feasibility and implementation of these biotechnological systems. The case study for this project will be the production of the microalga *Scenedesmus*, which has high biomass productivity and large quantities of specific bioproducts. The execution of this project includes the following main steps: (i) building a hybrid mathematical model (combining fundamental equations and machine learning based models) describing the microalgal production as a function of each respective illuminated wavelength; (ii) formulating objective functions based on the feasibility and sustainability of the process to obtain dynamic profiles for optimal control. (iii) Optimize the process and validate it experimentally.

PALAVRAS-CHAVE: Otimização, Cultivo de microalgas, fotobiorreator, análise de viabilidade e sustentabilidade.

ÁREA DE PESQUISA: AP5 - Simulação e Controle de Processos

PROFESSOR: Antonio Carlos Luperni Horta

TÍTULO: Desenvolvimento de sistemas de controle fuzzy para fotobiorreatores.

RESUMO:

A produção de microalgas em fotobiorreator depende de diversos fatores importantes como temperatura, pH, dióxido de carbono e luz. As lógicas clássicas de controle apresentam limitações em relação aos bioprocessos pois dependem da dinâmica de cada microrganismo e também das fases pelas quais o processo passa. As lógicas clássicas de controle apresentam limitações que podem ser superadas utilizando novas lógicas como a nebulosa e a integração por IoT. Neste contexto este projeto pretende desenvolver um controlador fuzzy para ser testado em fotobiorreator de bancada, operando cultivos de *Scenedesmus obliquus*.

Competências a serem desenvolvidas durante o projeto:

Controle Fuzzy; Cultivo de microalgas em fotobiorreator; Programação básica de Arduino; Programação básica de Labview.

PALAVRAS-CHAVE: Teoria de controle Fuzzy; Cultivo de microalgas em fotobiorreator; Programação básica de Arduino; Programação básica de Labview.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Antonio José Gonçalves da Cruz

TÍTULO: Processos integrados de produção e recuperação de etanol: análise técnico-econômica e ambiental de diferentes alternativas

RESUMO

O processo de produção de etanol a partir da cana-de-açúcar via rota fermentativa ocorre por meio da conversão da sacarose a etanol pela levedura *Saccharomyces cerevisiae*. A produção pode ocorrer em dornas operadas no modo batelada alimentada (85% das usinas) ou no modo contínuo (15% das usinas). Uma fermentação típica ocorre em torno de 8 horas atingindo ao final do processo um teor médio de etanol nas dornas de 7 a 10% (v/v), pois as leveduras são inibidas pelo produto, sendo este o grande limitador para a produção do próprio etanol. A ação estressante do etanol na levedura pode ser potencializada pelo excesso de acidez e temperaturas inadequadas na fermentação. Neste contexto, o tema de doutorado tem como objetivo realizar uma avaliação técnico-econômica e ambiental de diferentes processos integrados de produção e recuperação que vem sendo estudados no grupo de pesquisa de Engenharia Bioquímica da UFSCar (Silva et al., 2015; Sonego et al., 2018; Almeida et al., 2021; Campos et al., 2022; Santos et al., 2022; Santos, 2022). As diferentes estratégias avaliadas têm se mostrado alternativas promissoras para superar a limitação da fermentação alcoólica, devido à toxicidade do etanol para as leveduras durante o processo fermentativo e, também, para a redução da temperatura do meio reacional. A avaliação econômica será realizada empregando metodologias clássicas (Peters et al., 2003), bem como serão levantados os custos fixos e operacionais dos processos alternativos avaliados ao processo convencional. É fundamental que a avaliação das tecnologias propostas leve em consideração não somente os aspectos técnicos e de viabilidade econômica, mas também os indicadores de impactos ambientais. Nesse tema de doutorado propõe-se avaliar os impactos ambientais das tecnologias alternativas a partir da metodologia de Avaliação do Ciclo de Vida (ACV), comparando-os com o processo convencional.

ALMEIDA, LP et al. Heat transfer evaluation for conventional and extractive ethanol fermentations: saving cooling water. **Journal of Cleaner Production**, v. 1, p. 127063, 2021.

CAMPOS, BG et al. Thermal analysis of extractive fed-batch ethanol fermentation with CO₂ stripping: modeling and simulation. **Chemical Engineering and Processing**, v. 1, p. 109185, 2022.

Peters, MS et al. Plant Design and Economics for Chemical Engineers. 5 ed. University of Colorado, Colorado, USA: McGraw-Hill Higher Education, 2003. 988 p.

SANTOS, MV et al. Real-Time Monitoring of Ethanol Fermentation Using Mid-Infrared Spectroscopy Analysis of the Gas Phase. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 1, p. 1, 2022.

Santos, M. V. Estudo do processo integrado de fermentação alcoólica extrativa com CO₂ com desidratação por adsorção e recuperação por absorção. UFSCar, 2022 (Tese de Doutorado).

SILVA, CR et al. Stripping of ethanol with CO₂ in bubble columns: effects of operating conditions and modeling. **Chemical Engineering Research & Design**, v. 102, p. 150-160, 2015.

SONEGO, JLS et al. Optimization of Fed-Batch Fermentation with in Situ Ethanol Removal by CO Stripping. **Energy & Fuels**, v. 32, p. 954-960, 2018.

Palavras-chaves: Processos integrados de produção e separação; Etanol; *Stripping*; Avaliação Econômica; Avaliação Ambiental.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Antonio José Gonçalves da Cruz

TÍTULO: Aplicação de Redes Neurais Artificiais na modelagem e simulação de processos integrados de produção e separação de etanol

RESUMO

Redes Neurais Artificiais (RNAs) são modelos matemáticos que se assemelham às estruturas neurais biológicas e têm capacidade computacional adquirida por meio de aprendizado e generalização. O aprendizado de uma RNA está normalmente associado à capacidade das mesmas adaptarem seus parâmetros como consequência da sua interação com o ambiente externo, por exemplo, com dados experimentais. Uma RNA é composta por uma série de unidades de processamento muito simples, ligadas entre si por uma rede de interconexão ponderada, podendo conter muitas camadas. Cada unidade de processamento é chamada de neurônio e a ligação de um neurônio a outro, sinapse. Em termos de estrutura, as redes neurais podem ser divididas em dois tipos: redes *feedforward* e redes recorrentes. Nas redes do tipo *feedforward* os neurônios geralmente são agrupados em camadas e o fluxo de informações de uma camada a outra é unidirecional, da entrada para a saída. As redes neurais podem ser “treinadas” por diferentes algoritmos de aprendizagem (incluindo algoritmos *deep learning*), por exemplo, empregando treinamento supervisionado e não-supervisionado. Os algoritmos supervisionados são normalmente mais usados em processos (bio)químicos, pois eles podem garantir uma resposta desejada. O exemplo mais expressivo que faz uso desta aprendizagem é o algoritmo *backpropagation* ou retropropagação. Nesse tema de doutorado, propõe-se avaliar a utilização das RNAs e os algoritmos de aprendizagem na modelagem e simulação de diferentes processos integrados de produção e recuperação de etanol que vem sendo estudados no grupo de pesquisa de Engenharia Bioquímica da UFSCar (Silva et al., 2015; Sonego et al., 2018; Almeida et al., 2021; Campos et al., 2022; Santos et al., 2022; Santos, 2022).

ALMEIDA, LP et al. Heat transfer evaluation for conventional and extractive ethanol fermentations: saving cooling water. *Journal of Cleaner Production*, v. 1, p. 127063, 2021.

CAMPOS, BG et al. Thermal analysis of extractive fed-batch ethanol fermentation with CO₂ stripping: modeling and simulation. *Chemical Engineering and Processing*, v. 1, p. 109185, 2022.

Peters, MS et al. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. 5 ed. University of Colorado, Colorado, USA: McGraw-Hill Higher Education, 2003. 988 p.

SANTOS, MV et al. Real-Time Monitoring of Ethanol Fermentation Using Mid-Infrared Spectroscopy Analysis of the Gas Phase. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 1, p. 1, 2022.

Santos, M. V. Estudo do processo integrado de fermentação alcoólica extrativa com CO₂ com desidratação por adsorção e recuperação por absorção. UFSCar, 2022 (Tese de Doutorado).

SILVA, CR et al. Stripping of ethanol with CO₂ in bubble columns: effects of operating conditions and modeling. *Chemical Engineering Research & Design*, v. 102, p. 150-160, 2015.

SONEGO, JLS et al. Optimization of Fed-Batch Fermentation with in Situ Ethanol Removal by CO Stripping. *Energy & Fuels*, v. 32, p. 954-960, 2018.

Palavras-chaves: Redes neurais artificiais; etanol; fermentação; processos integrados de produção e separação; modelagem e simulação.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Felipe Fernando Furlan

TÍTULO: Análise técnico-econômica e ambiental de processos fermentativos empregando E. coli como plataforma

RESUMO

Já é consenso que a redução mundial das emissões líquidas de gases do efeito estufa (GEE) é urgente. Para isso, deve-se buscar rotas e processos produtivos com baixa emissão de GEEs. Processos baseados em fermentações empregando microorganismos geneticamente modificados, como a E. coli, têm se mostrado alternativas interessantes para a produção sustentável de materiais substitutos dos atuais baseados em fontes fósseis. Entretanto, para que estes atinjam a maturidade e o desempenho necessários para sua adoção pela indústria, sua viabilidade técnica, econômica e ambiental deve ser considerada desde as etapas iniciais de pesquisa, guiando as direções escolhidas para futuros desenvolvimentos. Nesse sentido, o presente projeto de doutorado busca associar análises técnico-econômicas e de ciclo de vida com simulações detalhadas da operação de fermentações empregando E. coli para encontrar modificações genéticas e condições de operação ótimas. Para isso, serão empregadas técnicas de metamodelagem, análise do fluxo metabólico dinâmico e otimização dinâmica aos processos produtivos de diferentes moléculas alvo, como o ácido 3-hidroxi propiônico, a indigodina, entre outros.

Palavras-chaves: E. coli; Análise Tecno-econômica; Análise de ciclo de vida; Biorrefinarias

ÁREA DE PESQUISA: AP5 - Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

TÍTULO: Hidrólise enzimática de bagaço pré-tratado usando reator não convencional

RESUMO

A produção de etanol a partir da fermentação da cana de açúcar constitui um processo já firmemente estabelecido na indústria brasileira. É possível, no entanto, aumentar o rendimento do processo ao utilizar-se o próprio bagaço da cana como substrato para a fermentação (2ª geração). Para tal, o bagaço deve ser pré-tratado a fim de expor suas fibras, para que ele seja hidrolisado em sequência. A hidrólise é essencial para transformar o substrato lignocelulósico em carboidratos fermentescíveis. A hidrólise enzimática do bagaço é preferível em detrimento da hidrólise química, uma vez que é realizada em condições mais amenas, minimizando a presença de compostos inibidores da fermentação. O complexo enzimático, no entanto, apresenta elevado custo. No âmbito desse desafio, o projeto destaca-se ao incorporar um sistema não convencional de reatores com separação de fases. Essa abordagem inovadora visa otimizar o processo de produção de etanol, proporcionando maior eficiência e sustentabilidade. Este sistema permite uma flexibilidade operacional superior, possibilitando a otimização da hidrólise. A utilização dessa tecnologia representa um avanço significativo na produção de etanol de 2G, contribuindo para uma abordagem mais eficiente e ambientalmente sustentável. O foco principal do projeto recai na implementação de técnicas para a economia de enzimas, análise do consumo energético do processo e realização de novos ensaios experimentais. Aprofundar a compreensão desses fatores é crucial para otimizar o sistema reacional, buscando aprimorar a eficiência do processo em termos de produção, levando em consideração aspectos econômicos e energéticos. A condução de novos ensaios experimentais desempenhará um papel crucial na expansão da base de dados, proporcionando uma análise mais detalhada dos fatores que influenciam a eficiência do processo de fermentação. Este projeto visa uma abordagem específica para investigar estratégias que possam reduzir efetivamente os custos associados à enzima e otimizar o consumo energético, contribuindo para a evolução da produção de etanol de 2ª Geração.

Palavras-chaves: hidrólise enzimática; etanol 2G; reator não-convencional; bagaço de cana-de-açúcar; consumo energético

ÁREA DE PESQUISA: AP5 - Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

TÍTULO: Monitoramento da síntese enzimática de galactooligossacarídeo utilizando NIR-PLS-EKF a partir de planejamento experimental

RESUMO

Os Galactooligossacarídeos (GOS) são carboidratos não digeríveis utilizados como ingredientes de alimentos. São formados por até 7 unidades de galactose e uma glicose terminal. Como prebióticos, atuam como alimento para a microbiota intestinal, favorecendo o crescimento de bactérias benéficas. Além disso, os GOS também inibem a adesão de bactérias patogênicas no intestino. Devido à sua similaridade com oligossacarídeos de leite humano, os GOS atraem a atenção de pesquisadores globalmente. A produção de GOS pode ser feita de várias maneiras: por fermentação, por reações químicas e por reações enzimáticas. O principal processo de produção dos GOS é uma reação enzimática conhecida como transgalactosilação da lactose pela β -galactosidase. As enzimas glicosil hidrolases, como a β -galactosidase, catalisam tanto a hidrólise da lactose quanto a transgalactosilação para produzir GOS. Durante a conversão, a hidrólise da lactose compete com a atividade transferase, que gera uma mistura de dissacarídeos e oligossacarídeos baseados em galactose com diferentes estruturas. Isso faz com que a composição do reator varie substancialmente com o tempo. Portanto, para alcançar o máximo rendimento de GOS é necessário efetuar o monitoramento e controle adequado do reator, sabendo quando a concentração de GOS atinge seu máximo e permitindo que a reação seja parada antes que haja altas taxas de hidrólise. Para o monitoramento da síntese, podem ser utilizadas sondas espectrométricas na região do infravermelho (NIR) e ultravioleta visível (UV-vis) combinadas com métodos quimiométricos. Diversos métodos matemáticos são utilizados ao aplicar técnicas quimiométricas para extrair informações sobre sistemas químicos. O método mais utilizado é o PLS (Partial Least Squares). No entanto, devido ao grande ruído obtido nesses métodos de monitoramento, é possível combiná-los com um método de inferência de estados. Desse modo, é feita uma reconciliação dos dados e possibilita inferir não apenas dados medidos como dados não medidos. Por fim, para melhor uso dos dados de processo e melhor planejamento de experimentos, pode-se utilizar o delineamento experimental. O delineamento experimental representa um conjunto de ensaios estabelecido com critérios científicos e estatísticos, com o objetivo de determinar a influência de diversas variáveis nos resultados de um dado sistema ou processo. Com estas técnicas, é possível otimizar o entendimento de um processo.

Palavras-chaves: monitoramento; GOS; EKF; PLS; planejamento experimental

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Junior

TÍTULO: Modelagem e simulação de células a combustível microbianas

RESUMO

As células a combustível biológicas usam microrganismos ou enzimas como catalisadores. Em particular, em uma célula a combustível microbiana (do inglês, MFC) as reações de oxidação são catalisadas por micróbios (*in vivo*), sendo considerada uma fonte promissora de energia verde e uma tecnologia de tratamento de poluentes que integra a biodegradação de poluentes com a extração de energia. A operação de uma célula a combustível biológica se assemelha ao funcionamento da célula a combustível convencional: um combustível sofre oxidação, catalisada por enzima ou microrganismo, no ânodo. Esta reação libera elétrons que alcançam o cátodo através de um circuito externo. No cátodo, um oxidante (geralmente oxigênio) é reduzido. As células a combustível biológicas usualmente utilizam (no ânodo) substratos orgânicos e operam em temperatura amena. Recentemente, algumas abordagens para aumentar a produção endógena de biosurfactante foram desenvolvidas para melhorar a taxa de transferência de elétrons e a produção de energia em MFCs. Mais especificamente, por superexpressão de genes-chave responsáveis pela síntese de ramnolipídios, obteve-se superprodução de ramnolipídios de *Pseudomonas aeruginosa*, sendo que o aumento da produção de ramnolipídios pela superexpressão gênica promoveu significativamente a transferência extracelular de elétrons de *P. aeruginosa*, aumentando a fixação das bactérias no ânodo e o transporte de elétrons. Desta forma, o aumento endógeno da produção de biosurfactantes poderia ser uma abordagem promissora, dentre outras, para melhorar a produção de eletricidade em uma MFC. Neste contexto, pode-se dizer que ainda é necessário compreender melhor e/ou prever o comportamento de sistemas de células a combustível biológicas por meio de seus principais processos eletroquímicos, biológicos e de transferência, a fim de desenvolver ainda mais essa tecnologia. Assim, nesta proposta de trabalho, desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para células a combustível biológicas. Abordagens de modelagem diversas, propostas para células a combustível biológicas, incluindo modelagem bioeletroquímica fenomenológica, técnicas “analíticas” (como redes neurais artificiais e lógica fuzzy) e ferramentas computacionais avançadas (como dinâmica de fluidos computacional), poderão ser consideradas.

Palavras-chaves: célula a combustível biológica; modelagem matemática; processos eletroquímicos e biológicos