

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Alice Medeiros de Lima

TÍTULO: Avaliação técnica, econômica e ambiental da geração de biogás a partir de resíduos sólidos urbanos da UFSCar

RESUMO

A geração de biogás a partir de resíduos sólidos urbanos representa uma frente inovadora na busca por fontes de energia sustentáveis. Este processo não apenas oferece uma abordagem ambientalmente amigável para a produção de energia, mas também aborda diretamente o desafio crescente da gestão eficiente dos resíduos urbanos. Contudo, essa promissora tecnologia enfrenta desafios significativos. A complexidade da composição dos resíduos, particularmente a fração orgânica, demanda técnicas de pré-tratamento sofisticadas para maximizar a eficiência na produção de biogás. Além disso, a viabilidade técnica da conversão de resíduos em biogás deve ser avaliada juntamente com considerações econômicas e ambientais. Este trabalho não apenas oferece uma perspectiva sobre a interseção entre tecnologia e sustentabilidade, mas também proporciona uma plataforma para o desenvolvimento de soluções diante dos desafios crescentes na gestão de resíduos e na transição para uma matriz energética mais verde. Os **objetivos deste trabalho** são: (i) avaliar dos pontos de vista técnico, econômico e ambiental a produção de biogás a partir dos resíduos sólidos urbanos gerados pela universidade proveniente de áreas verdes (manutenções e jardinagens), do RU do Campus São Carlos, com as ferramentas usuais da engenharia de sistemas em processos (PSE), e (ii) propor as condições que viabilizem o aproveitamento dos RSU dos pontos de vista econômico e ambiental.

Para a realização deste trabalho, buscamos um(a) candidato(a) com formação na área de Engenharia Química ou demais áreas relacionadas, com interesse em estudos envolvendo engenharia de sistemas em processos e processos de aproveitamento de resíduos para energia e economia circular. Conhecimentos de técnicas básicas de engenharia de sistemas são desejáveis, mas não há exigência de experiência prévia na área. Entre os conhecimentos que devem ser adquiridos ao longo do desenvolvimento do projeto, estão: (1) Técnicas de modelagem e simulação de processos utilizando o simulador de processos da suíte aspenONE; (2) Técnicas de avaliação econômica com ferramentas da Engenharia Econômica; (3) Técnicas de avaliação ambiental, empregando a metodologia de Análise de Ciclo de Vida (LCA), GREET Model; (4) Redação de artigos e relatórios científicos.

Obs.: Este trabalho faz parte do projeto Universal CNPQ ("Aproveitamento de Resíduos Sólidos Urbanos Orgânicos para Produção de Biogás e Integração com Energia Fotovoltaica: Impulsionando a Transição Energética Sustentável na UFSCar" - Chamada CNPq/MCTI N° 10/2023) e será desenvolvido em colaboração com o Departamento de Gestão de Resíduos/UFSCar e com a área de pesquisa de Controle Ambiental.

Palavras-chaves: Produção de Biogás; Resíduos Sólidos Urbanos; Engenharia de Sistemas em Processos; Avaliação econômica e ambiental

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Alice Medeiros de Lima

TÍTULO: Avaliação da viabilidade econômica e ambiental da produção de hidrogênio verde no Brasil

RESUMO

No contexto global de transição para fontes de energia mais limpas, o hidrogênio verde emerge como uma peça-chave no quebra-cabeça da descarbonização. Este projeto propõe uma investigação abrangente, abordando tanto a viabilidade econômica quanto os impactos ambientais associados à produção de hidrogênio verde no cenário brasileiro. Ao considerar a crescente demanda por soluções de energia sustentável e a posição estratégica do Brasil como um dos líderes na produção de energia renovável, é fundamental explorar as nuances críticas das diversas rotas de produção de hidrogênio, analisando como diferentes métodos podem influenciar não apenas a eficiência econômica, mas também os impactos ambientais. A avaliação sazonal e espacial das matérias-primas e a compensação dos GEE são pontos importantes na viabilidade e escalabilidade do hidrogênio verde como uma alternativa eficaz e sustentável. Os **objetivos deste trabalho** são: (i) avaliar do ponto de vista econômico e ambiental rotas de produção de hidrogênio verde, (ii) avaliar o impacto sazonal e espacial nas rotas de hidrogênio verde e sua compensação de GEE, e (iii) propor métricas e cenários que viabilizem a produção de hidrogênio verde no Brasil.

Para a realização deste trabalho, buscamos um(a) candidato(a) com formação na área de Engenharia Química ou demais áreas relacionadas, com interesse em estudos envolvendo engenharia de sistemas em processos, hidrogênio verde, sustentabilidade e economia circular. Conhecimentos de técnicas básicas de engenharia de sistemas são desejáveis, mas não há exigência de experiência prévia na área. O desenvolvimento deste projeto proporcionará a aquisição de habilidades específicas, incluindo: (1) Técnicas de modelagem e simulação de processos utilizando o simulador de processos da suíte aspenONE; (2) Avaliação econômica por meio de ferramentas da Engenharia Econômica; (3) Técnicas de avaliação de impacto ambiental, utilizando o GREET Model; (4) Redação de artigos e relatórios científicos, fortalecendo assim a capacidade do candidato de contribuir significativamente para a pesquisa e avanço nas soluções sustentáveis para a produção de hidrogênio verde.

Obs.: Este trabalho está relacionado com os projetos “Produção de hidrogênio verde para energia limpa e insumos sustentáveis” (CNPq/MCTI/FNDCT No 24/2022 - Apoio ao Sistema Brasileiro de Laboratórios de Hidrogênio - SisH2-MCTI), “Novel Chemical Catalytic and Photocatalytic Processes for the Direct Conversion of Methane and CO2 to Products”(temático FAPESP, 2018/01258-5) e será desenvolvido em colaboração com a Embrapa Instrumentação.

Palavras-chaves: Hidrogênio verde; Sustentabilidade; Engenharia de Sistemas em Processos; Avaliação econômica e ambiental

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Alice Medeiros de Lima

TÍTULO: Design racional da produção de melanina em *Corynebacterium glutamicum*: estudos *in silico*, avaliação técnica, econômica e ambiental

RESUMO

As melaninas, biopolímeros aromáticos produzidos por diversos organismos, apresentam propriedades de absorção de raios UV, raios X e raios γ , conferindo-lhes amplas aplicações biotecnológicas nas indústrias química, farmacêutica, cosmética e outras. Além de atuarem como semicondutores, essas moléculas demonstram atividade antioxidante e antiviral, ampliando seu potencial de aplicação. Atualmente, a extração da melanina a partir de plantas e animais ou sua produção por síntese química é onerosa e apresenta baixo rendimento. Nesse contexto, a produção biológica por microrganismos, como a bactéria *Corynebacterium glutamicum*, surge como uma possibilidade sustentável. Utilizada industrialmente na produção de aminoácidos, avaliaremos *in silico* a modificação genética dessa bactéria para sintetizar melanina a partir do aminoácido L-tirosina, processo inédito na literatura e que pode representar um avanço significativo.

Os **objetivos deste trabalho** são: (i) propor uma rota racional para produção da melanina em *C. glutamicum* utilizando para isso ferramentas da engenharia metabólica de sistemas (bioinformática), e (ii) para esta rota, verificar a viabilidade técnica, econômica e ambiental com as ferramentas usuais da engenharia de sistemas em processos (PSE).

Para a realização deste trabalho, buscamos um(a) candidato(a) com formação na área de Engenharia Química ou demais áreas relacionadas, com interesse em estudos envolvendo engenharia de sistemas em processos e engenharia metabólica de sistemas. Conhecimentos de técnicas básicas de engenharia de sistemas são desejáveis, mas não há exigência de experiência prévia na área. Entre os conhecimentos que devem ser adquiridos ao longo do desenvolvimento do projeto, estão: (1) Técnicas de simulação de modelos metabólicos no software Optflux e COBRA Toolbox, (2) Técnicas de modelagem e simulação de processos utilizando o simulador de processos da suíte aspenONE, (3) Técnicas de avaliação econômica com ferramentas da Engenharia Econômica, (4) Técnicas de avaliação ambiental, e (5) Redação de artigos e relatórios científicos.

Obs.: Esse projeto será executado em colaboração com área de pesquisa Engenharia Bioquímica.

Palavras-chaves: Engenharia metabólica *in silico*; Melanina; *Corynebacterium glutamicum*; engenharia de sistemas em processos.

ÁREA DE PESQUISA: AP5 - Simulação e Controle de Processos

PROFESSOR: Antonio Carlos Luperni Horta

TÍTULO: Controle de temperatura de fermentação alcoólica

RESUMO:

A produção de biocombustíveis tem ganhado destaque no cenário mundial em função dos problemas climáticos cada vez mais desastrosos para a vida no planeta. A produção brasileira de etanol é uma das opções viáveis para as energias renováveis, um exemplo para o mundo. Apesar de já estar bem estabelecida, a indústria nacional ainda enfrenta desafios em algumas etapas do processo de produção de etanol combustível, como no controle de temperatura da fermentação. A transformação da sacarose da cana de açúcar em etanol é feita por leveduras num processo fermentativo que envolve a liberação de calor. A eficiência do processo fermentativo depende do fortemente da temperatura, que para muitas leveduras deveria estar controlada entorno de 32°C. O Objetivo principal deste projeto é desenvolver um controlador de temperatura manipulando a vazão de água de resfriamento e a suplementação de meio fresco, a fim de maximizar a produção de etanol.

Competências a serem desenvolvidas durante o projeto:

Modelagem matemática; Controle de temperatura; Programação básica em Labview e C++.

PALAVRAS-CHAVE: Cultivo em biorreator; Controle; Otimização.

ÁREA DE PESQUISA: AP5 - Simulação e Controle de Processos

PROFESSOR: Antonio Carlos Luperni Horta

TÍTULO: Modelagem e otimização de bioprocesso em fotobiorreator.

RESUMO:

A produção de microalgas em fotobiorreator depende de diversos fatores importantes, sendo a intensidade luminosa um dos fatores mais impactantes. Elevada intensidade luminosa pode afetar negativamente o metabolismo celular, podendo inibir o crescimento e desta forma a produtividade e viabilidade do processo. Por outro lado, a baixa intensidade luminosa também pode ocasionar crescimento lento e conseqüente baixa produtividade, gerando um processo inviável economicamente. Neste contexto este projeto pretende desenvolver um modelo matemático para o crescimento de microalgas (*Scenedesmus obliquus*) em fotobiorreator considerando a concentração celular e a intensidade de luz como principais variáveis. Após validar o modelo, o mesmo será utilizado para otimizar as condições operacionais do processo. As condições otimizadas pelo algoritmo de otimização computacional serão validadas experimentalmente.

Competências a serem desenvolvidas durante o projeto:

Modelagem matemática; Cultivo de microalgas em fotobiorreator; Programação básica em Matlab.

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem matemática; Cultivo de microalgas em fotobiorreator; Programação básica em Matlab.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Antonio José Gonçalves da Cruz

TÍTULO: Análise técnica e econômica do resfriamento de fermentações alcoólicas extrativas com arraste por dióxido de carbono

RESUMO

A produção de etanol possui três fatores críticos inerentes ao processo: inibição pelo substrato, inibição pelo produto (etanol) e a liberação de energia na forma de calor. O primeiro fator pode ser contornado pela forma de operação do reator, manipulando a velocidade de adição do mosto (em operação semi-continua durante o enchimento do reator, batelada alimentada) ou empregando sistema composto por mais de uma dorna em estado estacionário em operação contínua. O segundo pode ser minimizado pela redução da temperatura da fermentação (maior resfriamento das dornas), às custas de um maior tempo de fermentação, pela remoção do etanol formado ao longo do cultivo por arraste empregando dióxido de carbono (processo de *stripping*) ou pelo uso leveduras etanol tolerantes. O último fator, relacionado à energia liberada na forma de calor ao longo do processo, tem impacto direto na produção de etanol. Sendo assim, a energia liberada precisa ser removida do meio de fermentação para manter a temperatura ótima para a levedura *Saccharomyces cerevisiae* (30 a 34 °C). Para realizar essa operação empregam-se trocadores de calor (a placas ou a serpentina) utilizando água como fluido refrigerante. Unidades industriais localizadas em regiões de clima quente encontram dificuldades operacionais para resfriar a água utilizada nos trocadores de calor nas torres de resfriamento. Estudos realizados por Silva et al. (2015), Almeida et al. (2021) e Campos et al. (2022) mostraram ser possível resfriar o processo em fermentações extrativas empregando CO₂. Neste tema de mestrado propõe-se usar modelo matematicamente do processo de fermentação extrativa empregando CO₂ em batelada alimentada para avaliar a viabilidade técnica e econômica do resfriamento e comparar com o processo convencional.

- 1) Almeida Letícia P., Silva Camila R., Martins Taise B., Pereira Rauber D., Esperança Mateus N., Cruz Antonio J.G., Badino Alberto C. (2021). Heat transfer evaluation for conventional and extractive ethanol fermentations: saving cooling water. **Journal of Cleaner Production**, v. 304, 127063.
- 2) Campos Brenda G., Veloso Ivan I.K., Ribeiro Marcelo P.A., Badino Alberto C., Cruz Antonio J. G. Thermal analysis of extractive fed-batch ethanol fermentation with CO₂ stripping: Modeling and simulation. **Chemical Engineering and Processing – Process Intensification**, v. 182, 109185.
- 3) Silva C.R., Esperança M.N., Cruz A.J.G., Moura L.F., Badino A.C. (2015). Stripping of ethanol with CO₂ in bubble columns: Effects of operating conditions and modelling. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 102, p. 150–160.

Palavras-chaves: Bioetanol; processo integrado de produção e separação; fermentação; arraste por dióxido de carbono; análise técnica-econômica; modelagem e simulação.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Antonio José Gonçalves da Cruz

TÍTULO: Liquefação enzimática (hidrólise) da biomassa em sistema gaseificado com dióxido de carbono em escala de bancada

RESUMO

Um dos principais gargalos na produção de etanol de segunda geração (E2G) está na etapa de hidrólise da biomassa. A utilização de cargas de sólidos elevadas (acima de 200 g/L) é crucial para a obtenção de licores açucarados e vinhos mais concentrados, minimizando assim os volumes dos reatores de hidrólise e fermentação e reduzindo os custos do processo. Contudo, à medida que se aumenta a concentração de sólidos na etapa de hidrólise, problemas relacionados à transferência de massa e energia levam a diminuição da eficiência de hidrólise (conversão da celulose aos oligômeros e a glicose) e ao aumento do consumo da energia necessária para homogeneização do meio reacional. Aumentar a quantidade de enzima, uma possível alternativa, onera o custo do processo. Dessa forma, a presente proposta de mestrado tem por objetivo avaliar a etapa de liquefação da biomassa (bagaço ou palha de cana-de-açúcar) em atmosfera isenta de oxigênio por meio da gaseificação do sistema com dióxido de carbono. Estudos relatam uma diminuição na desativação das enzimas celulolíticas quando se empregou o nitrogênio na liquefação da palha do milho (dos Santos et al., 2020). Outro aspecto positivo a ser avaliado está relacionado à redução no consumo de potência (Corrêa et al., 2016) devido à gaseificação do sistema. Os experimentos serão realizados em reator de bancada (5 litros de volume útil). A biomassa (bagaço ou palha de cana-de-açúcar) será submetida a pré-tratamento hidrotérmico em condições operacionais otimizadas no grupo de pesquisa. O uso do dióxido de carbono justifica-se pela redução de custos do processo, uma vez que ele é um subproduto da etapa de fermentação.

Corrêa, L.J.; Badino, A.C.; Cruz, A.J.G. Power consumption evaluation of different fed-batch strategies for enzymatic hydrolysis of sugarcane bagasse. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, v. 39, p. 825-833, 2016.

dos Santos, A.C.; Ximenes, E.; Thompson, D.N.; Ray, A.E.; Szeto, R.; Erk, K.; Dien, B.S.; Ladisch, M.R. Effect of using a nitrogen atmosphere on enzyme hydrolysis at high corn stover loadings in an agitated reactor. *Biotechnol Progress*. 2020; e3059.

Palavras-chaves: Liquefação da biomassa, hidrólise enzimática, consumo de potência, dióxido de carbono.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Antonio José Gonçalves da Cruz

TÍTULO: Produção de extratos enzimáticos por *Aspergillus niger* empregando biomassa lignocelulósica

RESUMO

A produção de enzimas celulolíticas chama atenção da comunidade científica e industrial tendo em vista a sua aplicação na hidrólise da biomassa lignocelulósica. Sua obtenção a um custo que viabilize o processo de hidrólise enzimática de biomassas lignocelulósicas é objeto de pesquisa há anos, em que vários aspectos de todas as etapas de produção são avaliados. O grau de ordenação da celulose requer que os microrganismos celulolíticos produzam uma complexa mistura de enzimas, as celulasas, para efetuar a quebra da celulose cristalina. Esse complexo de enzimas é necessário para a solubilização completa e efetiva da celulose e da hemicelulose, produzindo um efeito sinérgico no processo de hidrólise. Mesmo sendo uma alternativa de menor impacto ambiental, esta rota ainda requer o desenvolvimento de tecnologias que possam reduzir os custos de produção do coquetel enzimático, sendo este um fator decisivo para a viabilidade econômica do processo. A presente proposta tem como objetivo potencializar a produção de celulasas, usando a estratégia de cultivo circular ou circuito fechado, em que o extrato enzimático resultante de um cultivo será usado na liquefação da biomassa, bagaço e/ou palha de milho. No cultivo seguinte, a biomassa liquefeita por esse extrato será usada como indutor para produção enzimática e assim sucessivamente, até se observar a estabilização. Os extratos obtidos ao final do cultivo em circuito fechado serão usados para a liquefação das biomassas bagaço e palha de cana-de-açúcar em condições já estabelecidas na literatura e no grupo de pesquisa para hidrólise dessas biomassas. Pretende-se ao final do circuito fechado obter extratos multienzimáticos com altos índices de atividade enzimática e com uma composição direcionada ao substrato que se deseja utilizar. Os dados experimentais serão utilizados para modelagem e simulação do processo.

Palavras-chaves: Fermentação fúngica; enzimas; *Aspergillus niger*.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Felipe Fernando Furlan

TÍTULO: Análise técnico-econômica e ambiental da produção de antibióticos via rota enzimática

RESUMO

A emergência de bactérias resistentes a antibióticos tem se tornado uma crescente preocupação na área da saúde, e o uso desses medicamentos na pecuária desempenha um papel crucial nesse cenário. A aplicação regular de antibióticos no gado e em outros animais de produção, com o intuito de estimular o crescimento e prevenir doenças, pode desencadear o desenvolvimento de cepas bacterianas resistentes. Essa resistência pode ser transmitida às bactérias patogênicas em seres humanos, comprometendo a eficácia dos antibióticos utilizados na medicina humana. O relatório de 2018 da AMEG (Antimicrobial Advice ad hoc Expert Group) classificou os antibióticos usados na medicina veterinária conforme o risco que representam para os humanos. Entre os antibióticos ainda recomendados para uso inicial estão os da classe penicilânica, como amoxicilina e ampicilina. Nas últimas quatro décadas, o Brasil tornou-se um grande importador de ingredientes farmacêuticos ativos (IFAs), incluindo aqueles utilizados na produção de vacinas contra a COVID-19 e antibióticos. A pandemia de COVID-19 evidenciou a importância da produção nacional de IFAs como uma questão de soberania, destacando a dependência de países como China e Índia na produção desses insumos. Nesse contexto, esse projeto visa realizar o estudo, via simulação, da produção de ampicilina via rota enzimática, visto que esta tem possibilidade de apresentar reduzido impacto ambiental. Serão realizadas análises técnico-econômica e de ciclo de vida para verificar a viabilidade e o impacto de tal rota produtiva.

Palavras-chaves: antibióticos penicilânicos; Análise técnico-econômica; Análise de ciclo de vida

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Felipe Fernando Furlan

TÍTULO: Análise técnico-econômica e ambiental da produção de biolubrificantes modificados via rota enzimática

RESUMO

Lubrificantes são compostos orgânicos que reduzem a fricção entre duas superfícies em movimento. Por consequência, eles reduzem o aquecimento e o desgaste mecânico das partes. O mercado mundial de lubrificantes atingiu a marca de 164,8 bilhões de dólares em 2022 e espera-se um crescimento de 2,7% até 2027, atingindo 187,9 bilhões de dólares. Atualmente os lubrificantes são majoritariamente produzidos a partir do petróleo. Porém, estes apresentam algumas desvantagens. Uma delas é a alta toxicidade desses compostos, que aliada ao descarte incorreto de cerca de 40 a 55% de todo o lubrificante consumido, aumenta a necessidade da substituição destes por alternativas de menor impacto. Os biolubrificantes podem substituir os lubrificantes na grande maioria de suas aplicações, apresentando as seguintes vantagens: menor toxicidade, maior poder lubrificante, ponto de flash superior, menor volatilidade, maior índice de viscosidade, entre outras. Outra vantagem é o fato de que diversas matérias-primas renováveis podem se usadas para sua produção, como óleos vegetais, gorduras animais, óleos microbianos, e óleos residuais. Esses compostos podem ser produzidos por diversas reações químicas como esterificação, transesterificação e hidroesterificação usando diferentes tipos de catalisadores químicos ou enzimáticos e modificados através de reações de epoxidação e abertura do anel para melhorar suas propriedades. Entretanto, a viabilidade econômica e o impacto ambiental desses processos produtivos ainda não foi estudada. Nesse contexto, o presente projeto de mestrado tem por objetivo a análise técnico-econômica e de ciclo de vida de um processo para produção de biolubrificante a partir de resíduos das indústrias da produção de etanol e óleo de soja, sua simulação e análise tecno-econômica.

Palavras-chaves: Biolubrificantes; Análise técnico-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: Estudo computacional de microrreator de placas para a reforma a vapor do etanol

RESUMO

A produção de H_2 sem emissão de carbono é um desafio para provimento de soluções energéticas não poluentes. Setores industriais são consumidores massivos de H_2 , normalmente produzido pela reforma em altas temperaturas de CH_4 , majoritariamente oriundo de gás natural. A possibilidade de substituir o metano por hidrocarbonetos de fonte renovável, como o etanol, teria como vantagem a recuperação do CO_2 emitido durante o processo de produção da biomassa, neutralizando o ciclo. Porém, a disseminação do processo necessita de soluções compartimentalizáveis, de escalonamento simples e de alta eficiência energética, evitando os sistemas de reforma de grande porte. Na literatura, microrreatores de placas com microcanais vem sendo estudados para reformada a vapor de metanol. O Objetivo central da proposta é desenvolver um modelo de sistema de reação capaz de promover a reforma de uma mistura de etanol e água a H_2 , como mistura com CO ($CO + H_2$) ou com CO_2 (acoplando-se à reação de water shift no mesmo processo), utilizando dados cinéticos da reação de reforma do etanol obtidos pelo grupo de Catálise do DEQ. A partir do modelo desenvolvido, o aluno estudará de forma computacional os efeitos de geometria e condições reacionais em termos de conversão, perda de carga e troca térmica.

Palavras-chaves: reforma a vapor; produção e hidrogênio; modelagem; simulação

ÁREA DE PESQUISA: AP5 - Simulação e Controle de Processos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

TÍTULO: Purificação de galactooligossacarídeos (GOS) por cromatografia

RESUMO

Galactooligossacarídeos (GOS) são oligossacarídeos (pequenos polímeros de açúcares) formados pela condensação de moléculas de xilose e de moléculas de galactose, respectivamente. GOS são reconhecidos como prebióticos comerciais de alto valor econômico. Além disso, podem ser produzidos a partir de hidrólise/síntese enzimática utilizando-se de subprodutos e resíduos de indústrias nacionais. Os GOS podem ser produzidos a partir de lactose. A lactose é o principal componente (depois da água) do soro de queijo. O soro corresponde a 90% do volume do leite utilizado na produção de queijos e pode gerar alto impacto ambiental se descartado ou não tratado. Isso é um problema principalmente em pequenos laticínios que não conseguem desviar essa quantidade de soro para outros produtos lácteos. Os GOS podem ser sintetizados por condensação enzimática da lactose e sua produção pode melhorar o rendimento econômico dos produtores de queijo reduzindo impactos ambientais ocasionados pelo descarte do soro. Para que GOS possa ser utilizado na indústria de alimentos eles devem ser purificados dos meios onde são produzidos. Esse mestrado objetiva o estudo da purificação destes compostos utilizando colunas cromatográficas com diferentes sílicas funcionalizadas. O estudo compreende a obtenção do material a partir de reações enzimáticas, a caracterização dos componentes das sínteses/hidrólise, a triagem das partículas funcionalizadas. Ensaio em coluna cromatográfica indicará possíveis caminhos para eluição de componentes de modo a obter a pureza desejada. O processo poderá ser assistido com programa de simulação cromatográfica desenvolvido previamente pelo grupo de pesquisa.

Palavras-chaves: cromatografia; GOS; separação; síntese enzimática

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Junior

TÍTULO: Modelagem matemática e simulação computacional de células a combustível biológicas aplicadas ao tratamento de efluentes

RESUMO

Sistemas bioeletroquímicos, como células a combustível microbianas (MFCs), são dispositivos que exploram a capacidade de microrganismos exoeletrogênicos para transferir elétrons. Ao longo dos últimos anos, as MFCs têm recebido crescente interesse devido à abordagem sustentável para o tratamento de águas residuais, juntamente com o uso como sistemas alternativos para geração de energia. MFCs podem converter em corrente elétrica a energia química contida nos substratos orgânicos presentes em águas residuais. Recentemente, alguns estudos experimentais foram realizados usando efluentes de refinaria de petróleo em MFCs. As águas residuais de refinarias de petróleo são poluentes ambientais se o tratamento não for adequado. A abordagem vem sendo estendida em MFCs aplicadas ao tratamento de águas residuais de biorrefinarias de bioetanol/biodiesel. Um dos parâmetros mais importantes de uma MFC é a sua curva de polarização, que é usada para avaliar o desempenho com base na geração de energia elétrica. Uma curva de polarização representa a tensão em função da corrente. A MFC é um sistema relativamente complexo que envolve processos bioeletroquímicos, transferência de carga, massa e energia. Assim, tendo como base dados experimentais disponíveis na literatura (de tensão da célula versus densidade de corrente elétrica, principalmente), desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para células a combustível biológicas. Mais especificamente, pretende-se aplicar um modelo unidimensional simples de estado estacionário, considerando a transferência acoplada de calor, carga e massa, juntamente com as reações bioeletroquímicas que ocorrem em uma MFC, na previsão do desempenho de MFCs usadas no tratamento de águas residuais (de refinarias de petróleo, biorrefinarias de bioetanol e/ou biodiesel). Utilizar-se-ão os softwares Scilab e Matlab para a implementação dos modelos, ajuste de seus parâmetros e solução das suas equações. Os modelos poderão prever, dentre outras coisas, as tendências para a influência das densidades de corrente nas tensões das células, bem como a influência da concentração do(s) substrato(s) no desempenho das MFCs.

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