

TEMA PARA DOUTORADO – 2º SEMESTRE DE 2023

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica/Simulação e Controle de Processos

PROFESSOR: Antonio Carlos Luperni Horta
Coorientador:

TÍTULO: Desenvolvimento de sistemas de controle fuzzy para fotobiorreatores.

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: 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 celulases, 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 celulases, 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. Outra vertente desta proposta propõe prospectar a produção do ácido oxálico empregando hidrolizados enzimáticos provenientes de biomassa. O ácido oxálico é um subproduto da produção de ácido cítrico por *Aspergillus niger* em condições específicas de cultivo. A produção das celulases e do ácido oxálico contribui para a fixação do carbono da atmosfera em biomassa e posteriormente nos respectivos produtos finais. A parte experimental envolverá a realização de experimentos em frascos agitados (volumes da ordem de 50 a 250 mL). Os dados experimentais serão utilizados para modelagem e simulação do processo.

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

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Antonio José Gonçalves da Cruz

TÍTULO: Processo integrado 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 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). A estratégia tem se mostrado alternativa promissora 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 de um processo alternativo ao processo convencional nesse estudo. 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 impacto ambiental. No projeto propõe-se avaliar os impactos ambientais das tecnologias alternativas avaliadas a partir da metodologia de Avaliação do Ciclo de Vida (ACV). Todos os processos alternativos avaliados serão comparados com o processo convencional. Propõe-se que todos os modelos matemáticos a serem desenvolvidos na tese sejam implementados em planilha de cálculo.

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.

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: Etanol; *Stripping*; Avaliação Econômica; Avaliação Ambiental.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos

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: Simulação e Controle de Processos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

TÍTULO: Separação por cromatografia de xilo- e galacto-oligossacarídeos (XOS e GOS) obtidos via reações enzimáticas

RESUMO

Xilooligossacarídeos (XOS) e Galactooligossacarídeos (GOS) são oligossacarídeos (pequenos polímeros de açúcares) formados pela condensação de moléculas de xilose e de moléculas de galactose, respectivamente. Ambos oligossacarídeos 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 XOS podem ser produzidos a partir da hidrólise enzimática da hemicelulose contida no bagaço de cana-de-açúcar. Os avanços no processo de produção de etanol de segunda geração (etanol 2G) possibilitam a utilização da glicose proveniente da celulose contida no bagaço de cana para aumentar a produção de etanol. Já a fermentação de açúcares de 5 carbonos (como a xilose) presentes na hemicelulose não são normalmente fermentados por leveduras utilizadas em usinas de álcool e sua reutilização ainda é um desafio. Assim, a produção de XOS a partir dessa fração pode melhorar o rendimento econômico das plantas de etanol 2G. Já 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 XOS e GOS possam ser utilizados na indústria de alimentos eles devem ser purificados dos meios onde são produzidos. Esse doutorado 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, modelagem dos perfis de adsorção e simulação de colunas cromatográficas com o objetivo de maximizar a separação de cada produto de seu meio de produção. Ao candidato é esperado conhecimento em programação.

Palavras-chaves: cromatografia; GOS; XOS; modelagem; simulação

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 biológicas

RESUMO

As células a combustível podem ser categorizadas em células a combustível abióticas, nas quais os componentes da célula a combustível não compreendem qualquer material biológico, e células a combustível biológicas (bióticas), que compreendem organismos vivos ou material biológico. As células a combustível biológicas usam microrganismos ou enzimas como catalisadores. Em uma célula a combustível microbiana, as reações de oxidação são catalisadas por micróbios (in vivo). Alternativamente, quando o catalisador é uma enzima (sistema in vitro), a célula é chamada de célula a combustível enzimática. 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, como álcoois e açúcares, e operam em temperatura amena. Trabalhos que empregam enzimas como álcool e aldeído desidrogenases (associadas à metabolização de etanol), por exemplo, são apresentados na literatura. Todavia, 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 de massa, a fim de desenvolver ainda mais essa tecnologia (de modo a viabilizar suas aplicações práticas). Dentro deste contexto, este trabalho visa fazer um levantamento na literatura das abordagens de modelagem propostas para células a combustível biológicas, bem como das técnicas analíticas (como redes neurais artificiais e lógica fuzzy) e ferramentas computacionais avançadas (como dinâmica de fluidos computacional) usadas para descrever estes sistemas. Finalmente, tendo como base dados experimentais disponíveis na literatura (de potencial da célula versus densidade de corrente elétrica, principalmente), desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para uma célula a combustível biológica.

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