

TEMAS DE DOUTORADO

AP-5: SIMULAÇÃO E CONTROLE DE PROCESSOS QUÍMICOS

EDITAL Nº 04/2022 – INGRESSO NO 1º SEMESTRE DE 2023

OBSERVAÇÃO: PARA CONTACTAR O DOCENTE, ACESSE <https://www.ppgeq.ufscar.br/pt-br/docentes>

TEMA PARA DOUTORADO – 1º 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 nebuloso para ser testado em fotobiorreator de bancada, operando cultivos de *Scenedesmus obliquus*.

Competências a serem desenvolvidas durante o projeto:

Teoria de 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 e ácido oxálico 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. Outra vertente desta proposta propõe estudar 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 celulasas 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: Felipe Fernando Furlan

TÍTULO: Avaliação do impacto econômico e ambiental de diferentes estratégias de fermentação alcoólica

RESUMO

Já é consenso que a redução mundial das emissões líquidas de gases do efeito estufa (GEE) é urgente. O setor de transportes rodoviários, dominado pelos combustíveis líquidos (gasolina e diesel) foi responsável por 11,9% de toda a emissão mundial de GEE em 2016. O etanol produzido a partir da fermentação alcoólica do caldo e do melaço da cana-de-açúcar se apresenta como uma opção de grande interesse para substituir a gasolina. Além de ser produzido a partir de uma matéria-prima renovável, este biocombustível apresenta um índice de intensidade de carbono entre 20 e 30 $\text{gCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}$, o que significa uma redução de mais de 60% quando comparado ao combustível fóssil de referência, a gasolina. Com o início do programa Renovabio, as indústrias produtoras de etanol ganharam um incentivo econômico para aumentar a eficiência energética de seus processos, buscando reduzir ainda mais o impacto específico de seus produtos. Dentre as opções existentes para alcançar esse objetivo estão as melhorias na etapa de fermentação alcoólica, buscando aumentar o rendimento e a produtividade do biorreator. Além disso, estuda-se operar com concentrações maiores de açúcares na alimentação, buscando reduzir o consumo de vapor na etapa de recuperação e purificação do etanol. Todas essas estratégias são essenciais para reduzir ainda mais o impacto do produto. Porém, a viabilidade econômica e o impacto ambiental dessas opções deve ser avaliada do ponto de vista macro, ou seja, considerando o processo industrial completo, visto que este é um sistema bastante integrado. Nesse contexto, o objetivo do presente trabalho é estudar o impacto do uso de diferentes estratégias de operação da fermentação alcoólica, incluindo a microaeração e a fermentação extrativa para aumentar o rendimento e a produtividade desta etapa. Essas estratégias serão avaliadas através de simulações do processo completo a fim de verificar as melhores condições, do ponto de vista econômico e ambiental. Estas, por sua vez, serão validadas experimentalmente.

Palavras-chaves: Análise técnico-econômica; Análise de ciclo de vida; Fermentação extrativa; Análise de balanço de fluxos

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 e que tenha certa experiência em laboratório.

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: Contribuições ao estudo do uso do glicerol em células a combustível

RESUMO

Células a combustível se apresentam como opções de dispositivos de conversão de energia limpos e silenciosos. Em particular, a célula a combustível de membrana trocadora de prótons (do inglês, PEMFC) é atualmente um dos mais promissores destes dispositivos. Embora uma PEMFC abiótica trabalhando com hidrogênio no ânodo e oxigênio no cátodo apresente boa eficiência, o hidrogênio pode não ser a melhor escolha como combustível. O uso de combustíveis líquidos tais como etanol, metanol e polióis, por outro lado, pode ser vantajoso. Novas tecnologias de células a combustível estão em desenvolvimento, as quais podem ser convenientes para o uso de tais compostos como combustível. Glicerol é menos tóxico do que o metanol, e sua oxidação direta em uma célula a combustível abiótica pode não só conduzir à produção de energia elétrica, mas também à formação de produtos de alto valor agregado. Além disso, estudos experimentais recentes descrevem a aplicação de glicerol em tecnologias baseadas em células a combustível bióticas que podem contribuir para a transformação da indústria de biodiesel. Em particular, a degradação do glicerol com a produção de eletricidade por uma cultura pura de bactérias foi demonstrada. Dentro deste contexto, a modelagem matemática é uma ferramenta importante para o estudo e desenvolvimento de células a combustível. Assim, este trabalho visa a dar continuidade a estudos já desenvolvidos no LaDABio-UFSCar por meio de modelos fenomenológicos a respeito da oxidação do glicerol em células a combustível abióticas a glicerol direto (podendo incluir o uso de ferramentas computacionais avançadas, como dinâmica de fluidos computacional) e, também, desenvolver um trabalho inicial de modelagem matemática para uma célula a combustível biológica com metabolização de glicerol. Os modelos serão ajustados a dados experimentais para determinação de seus parâmetros. Tais dados experimentais poderão ser obtidos da literatura e/ou nos laboratórios de Grupos de Pesquisa parceiros especializados na execução de ensaios experimentais. Os ajustes dos parâmetros serão feitos pela minimização da soma dos erros ao quadrado (SSE), entre densidade de corrente real e experimental da célula a combustível.

Palavras-chaves: Modelagem matemática; células a combustível; glicerol

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