

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: 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

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 Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Junior

TÍTULO: Modelagem matemática e simulação computacional de sistemas eletroquímicos aplicados ao tratamento de efluentes

RESUMO

A contaminação por nitratos é encontrada extensivamente nas águas subterrâneas. O uso excessivo de fertilizantes nitrogenados e o lançamento de esgoto são as principais fontes de contaminação por nitratos. Por outro lado, a reação eletroquímica de redução de nitrato à amônia é uma rota promissora. Quando alimentada por eletricidade renovável, a eletrólise fornece um método sustentável para gerar amônia a partir de íons nitrato. A modelagem matemática pode ser usada para investigar características da(s) célula(s) e a dinâmica de fluidos durante reações de redução eletroquímica. Além disso, 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, desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para sistemas eletroquímicos aplicados ao tratamento de efluentes.

Palavras-chaves: Sistemas eletroquímicos; modelagem matemática; processos eletroquímicos e biológicos