

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos (AP5)**DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro****TÍTULO: Desenvolvimento de plataforma de monitoramento de bioprocessos baseados em métodos espectroscópicos utilizando modelos cinéticos e inteligência artificial**

Os modos de operação em batelada e batelada alimentada são amplamente utilizados em bioprocessos, pois biocatalisadores (células ou enzimas) se inativam com o tempo, exigindo substituição periódica e dificultando a operação contínua. Além disso, substratos podem inibir a atividade catalítica, tornando necessário um controle rigoroso da alimentação para maximizar seletividade e produtividade. Questões de escala, controle de qualidade e contaminação também favorecem processos descontínuos. Nesses sistemas, as variáveis de estado variam ao longo do tempo, permitindo o uso de técnicas de otimização dinâmica para determinar perfis ótimos de operação. Para isso, são necessários modelos matemáticos adequados: simples o suficiente para ajuste experimental, mas capazes de descrever o processo com precisão. No caso de enzimas imobilizadas, modelos pseudo-homogêneos são frequentemente empregados, incorporando efeitos difusivos nos parâmetros cinéticos aparentes — o que limita sua validade fora da faixa experimental de ajuste. Além disso, perturbações e erros de modelagem podem desviar o processo das trajetórias ideais previstas. O monitoramento em tempo real pode reduzir essas incertezas. Técnicas espectrométricas, como UV-Vis e NIR, vêm sendo amplamente empregadas na indústria para controle de qualidade e acompanhamento de processos. Técnicas quimiométricas clássicas de calibração multivariada podem ser combinadas com métodos de aprendizagem de máquina (inteligência artificial) para melhorar a inferência de estado e permitirem estimar composições em tempo real com boa precisão. Contudo, em processos descontínuos, a variação da composição pode alterar o caminho óptico e a intensidade do sinal, afetando a previsão e a relação sinal/ruído. Métodos de inferência de estados, como o Extended Kalman Filter (EKF) e o Moving Horizon Estimation (MHE), integram informações de modelos e medições espectrométricas, fornecendo estimativas mais robustas das variáveis de estado e dos parâmetros do processo. Essas técnicas permitem detectar variações cinéticas, como alterações na atividade enzimática ou na taxa de crescimento microbiano, causadas por mudanças de lote ou contaminação. Embora modelagem cinética, otimização dinâmica, espectroscopia, inferência de estados e controle de processo sejam amplamente estudados separadamente, raramente são integrados de forma completa e validada experimentalmente. Assim, este projeto propõe o desenvolvimento de uma plataforma integrada para monitoramento e controle de bioprocessos descontínuos, combinando espectroscopia UV-Vis e FT-NIR, quimiometria, inteligência artificial e métodos de inferência de estados. Link do grupo de pesquisa: <https://sites.google.com/ufscar.br/marceloribeiro>.

Palavras-chaves: espectroscopia; UV; NIR; inteligência artificial; estimador de estados