

## TEMA PARA MESTRADO – 2º SEMESTRE DE 2023

**ÁREA DE PESQUISA:** Simulação e Controle de Processos Bioquímicos

**DOCENTE ORIENTADOR:** Alice Medeiros de Lima

**TÍTULO DO TEMA:**

Avaliação técnico, econômica e ambiental de processos fotocatalíticos de conversão de metano em produtos químicos

**RESUMO**

A conversão de metano em químicos, como o metanol, é um processo de grande interesse por reduzir sua emissão e contribuição no efeito estufa. Dentre os vários processos em desenvolvimento buscando atender essa demanda de forma eficiente, temos os processos fotocatalíticos. As reações de oxidação foto-ativadas são desejáveis dos pontos de vista econômico e ambiental uma vez que a principal fonte de energia para essas reações é a luz solar, que apoia o desenvolvimento constante de novos catalisadores para estas aplicações. As estruturas semicondutoras são relatadas na literatura como os fotocatalisadores mais promissores para estas reações, incluindo a oxidação fotoativa de CH<sub>4</sub>, mas poucos são mostrados como adequados para a oxidação parcial ou seletiva visando, por exemplo, o metano ao metanol. A equipe experimental tem se dedicado a síntese de catalisadores nanoparticulados tais como TiO<sub>2</sub>, g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, ZnO, BiVO<sub>4</sub>, BiWO<sub>3</sub>, dentre outros utilizando diferentes métodos, e na condução dessas reações em escala de laboratório e piloto, buscando informações sobre condições limites, repetibilidade, reprodutibilidade e robustez dos catalisadores.

O objetivo deste trabalho é avaliar dos pontos de vista técnico, econômico e ambiental os processos fotocatalíticos, em desenvolvimento pela equipe experimental na conversão do metano, 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 processos fotocatalíticos. 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:

- Técnicas de modelagem e simulação de processos utilizando o simulador de processos da suíte aspenONE
- Técnicas de avaliação econômica com ferramentas da Engenharia Econômica
- Técnicas de avaliação ambiental, empregando a metodologia de Análise de Ciclo de Vida (LCA)
- Redação de artigos e relatórios científicos

*Obs.: Este trabalho faz parte do projeto temático FAPESP em andamento (2018/01258-5) e será desenvolvido em colaboração com a Embrapa Instrumentação.*

**PALAVRAS-CHAVE:** Processos fotocatalíticos, Metano, Engenharia de Sistemas em Processos, Avaliação econômica, Análise de Ciclo de Vida.

## TEMA PARA MESTRADO – 2º SEMESTRE DE 2023

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

**PROFESSOR: Antonio Carlos Luperni Horta**

**TÍTULO: Modelagem e otimização de bioprocesso em fotobiorreator.**

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:** Liquefação enzimática da biomassa pela aspersão de 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.

### **Referências**

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:** Modelagem e simulação da liquefação, sacarificação e fermentação do processo de produção de etanol de milho: estudos para otimização do processo.

**RESUMO**

Embora a cana-de-açúcar seja há anos a principal matéria-prima para a produção de etanol no Brasil, a utilização do milho para sua produção vem apresentando rápido crescimento, principalmente na região Centro-Oeste. O grão de milho é composto por quatro estruturas principais: pericarpo (casca), endosperma, gérmen e ponta. O endosperma representa 83% da massa seca do grão, sendo composto majoritariamente por amido (88%) organizado na forma de grânulos. O amido é um polissacarídeo formado por monômeros de D-glicose unidos por ligações  $\alpha$ -1,4-glicosídicas para formar o componente puramente linear, amilose, e, no caso do componente ramificado amilopectina, pode apresentar também ligações  $\alpha$ -1,6-glicosídicas. Para um grão de milho dentado típico, cerca de 23 a 25% do amido é composto por amilose e 75 a 77%, por amilopectina. O amido presente no milho pode ser quebrado em seus monômeros de glicose pela ação de enzimas. Uma vez liberada, a glicose pode ser fermentada para produzir etanol. Como a taxa de hidrólise do amido é geralmente baixa, este amido deve ser solubilizado para melhor atuação das enzimas, o que é realizado por meio de uma cocção rápida. A adição da enzima  $\alpha$ -amilase é importante para reduzir a viscosidade e converter as longas moléculas de amido em oligossacarídeos. Em seguida ocorre a liquefação, na qual a pasta solubilizada é alimentada a um tanque agitado operado (85 a 95 °C, pH 6,5). A enzima  $\alpha$ -amilase hidrolisa randomicamente as ligações  $\alpha$ -1,4-glicosídicas presentes no amido, produzindo dextrinas, maltose e maltotriose. A maltose é assimilada e fermentada pela levedura *Saccharomyces cerevisiae*. No entanto, a maltotriose e as dextrinas não, sendo necessário adicionar uma segunda enzima, a glucoamilase, para produzir a glicose (etapa de sacarificação, 60 °C, pH 4,5). E por fim, ocorre a fermentação da glicose (30 e 35 °C). Neste projeto, será realizada a modelagem matemática das etapas de liquefação, sacarificação e fermentação, empregando diferentes modelos cinéticos e dados da literatura. Uma vez ajustados os modelos, estes serão empregados em estudos de simulação e estudos de otimização. Como ferramentas computacionais propõe-se o uso do pacote computacional Scilab (versão 2023) e da planilha de cálculo.

**Palavras-chaves:** Modelagem e simulação; cinética; etanol; milho.

## TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2023

**ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos**

**PROFESSOR ORIENTADOR: Prof. Felipe Fernando Furlan**

**TÍTULO: Análise tecno-econômica e ambiental do processo de produção do ácido 3-hidroxiopropiônico por rota fermentativa**

### **RESUMO:**

O ácido 3-hidroxiopropiônico (3-HP) é um dos dez componentes listados pelo Departamento de Energia (DOE) dos EUA com mais promissores para serem produzidos a partir de biomassa. Sua produção industrial tem atraído grande atenção por ser considerado um bloco construtor. Por exemplo, o ácido acrílico, usado na produção de diversos polímeros, pode ser produzido a partir do 3-HP em apenas uma etapa reacional. Além disso, diversos outros produtos ou intermediários industriais podem ser produzidos a partir do 3-HP, como o 1,3-propanodiol, a acrilamida, o ácido malônico, o acrilato de metila, entre outros. Entretanto, ainda não existem estudos sobre a viabilidade técnico-econômica e o impacto ambiental da produção do 3-HP por rota bioquímica a partir de fontes renováveis. Nesse contexto, o presente projeto de mestrado tem por objetivo simular um processo de produção de ácido 3-hidroxiopropiônico a partir de dados experimentais disponíveis na literatura, avaliar sua viabilidade técnica e econômica, e calcular o impacto ambiental do produto, identificando gargalos operacionais e propondo soluções para eles.

**PALAVRAS-CHAVE: ácido 3-hidroxiopropiônico; Análise Tecno-econômica; Análise de ciclo de vida; Biorrefinarias**

**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. 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 uma célula a combustível biológica. 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 uma MFC usada no tratamento de água residual de refinaria de petróleo. A abordagem pode ser estendida a MFCs aplicadas ao tratamento de águas residuais de biorrefinarias de bioetanol/biodiesel. Utilizar-se-á o software Scilab (ou o Matlab) para a implementação do modelo, ajuste de seus parâmetros e solução das suas equações. O modelo poderá prever as tendências para a influência da densidade de corrente na tensão da célula, bem como a influência da concentração do(s) substrato(s) no desempenho da MFC.

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