

TEMAS DE MESTRADO

AP-5: SIMULAÇÃO E CONTROLE DE PROCESSOS QUÍMICOS

EDITAL Nº 05/2022 – INGRESSO NO 1º SEMESTRE DE 2023

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

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Bioquímicos

PROFESSORA: Alice Medeiros de Lima

TÍTULO DO TEMA:

Design racional da produção de Indigoidina em *E. coli*: estudos *in silico*, avaliação técnico, econômica e ambiental

RESUMO

Há na natureza uma diversidade de moléculas que apresentam funções específicas. Alguns compostos tem propriedades benéficas significativas para a saúde, como atividades antimicrobianas, anticancerígenas e anticolesterol. Muitos produtos naturais promissores foram desenvolvidos em terapêutica para diferentes doenças, tais como vancomicina (antibacteriana), paclitaxel (anticancerígeno), artemisinina (antimalária) e lovastatina (anticolesterol). Além desses compostos terapêuticos, alguns outros compostos de ocorrência natural tem propriedades úteis que podem encontrar usos na indústria, tais como os pigmentos naturais. O mercado global de corantes e pigmentos tem um valor estimado de US\$36,4 bilhões em 2021 e espera-se uma taxa de crescimento de 5,2% de 2022 até 2030. Espera-se que o aumento da demanda de várias indústrias de aplicação, tais como têxteis, tintas e revestimentos, construção civil e plásticos, impulsiona o crescimento do mercado. Associada a esse crescimento, tem-se também o aumento da demanda por corantes e pigmentos orgânicos. A mudança global em direção a produtos ecologicamente corretos, juntamente com a aceleração dos gastos dos consumidores, é o principal fator impulsionador do mercado de corantes orgânicos nos próximos anos. Dentre os vários corantes naturais, tem-se a indigoidina, produto foco desse projeto, um produto natural bacteriano de cor azul brilhante semelhante ao corante industrial índigo. Estudos recentes demonstraram que este pigmento azul tem atividade antimicrobiana e antioxidante. Além disso, é reportado o uso da indigoidina como semicondutor orgânico, abrindo caminho para uma ampla gama de aplicações em orgânicos e bioeletrônicos, tais como transistores eletroquímicos e de efeito de campo, células solares orgânicas, e biossensores.

O objetivo deste trabalho é propor uma rota racional para produção da indigoidina em *E. coli*, utilizando para isso ferramentas da engenharia metabólica de sistemas (bioinformática). Para esta rota, pretende-se também verificar a viabilidade técnica, econômica e ambiental 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 engenharia metabólica de sistemas. 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 simulação de modelos metabólicos no software Optflux e COBRA Toolbox
- 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.: Esse tema faz parte do projeto Universal CNPq (Desenvolvimento de uma plataforma sustentável para a produção de derivados do glutamato) em andamento.

PALAVRAS-CHAVE: Indigoidina, Engenharia de Sistemas em Processos, Engenharia Metabólica de Sistemas, Simulação de Processos, Avaliação econômica, Análise de Ciclo de Vida.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Bioquímicos

PROFESSORA: 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 CH₄, 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 TiO₂, g-C₃N₄, ZnO, BiVO₄, BiWO₃, 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, Simulação de Processos, Avaliação econômica, Análise de Ciclo de Vida.

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: Pré-tratamento de biomassa lignocelulósica com vistas a obtenção de fração líquida rica em xilooligômeros ou xilose

RESUMO

O termo biomassa lignocelulósica é utilizado para se referir à matéria prima renovável e de origem vegetal proveniente de diferentes atividades agrícolas e florestais. Em sua composição estão presentes, majoritariamente, três componentes: celulose (30-50 %), hemicelulose (15-35 %) e lignina (10-25 %). A celulose é um polissacarídeo constituído por cadeias de monômeros de glicose, unidos entre si por ligações glicosídicas do tipo β (1-4). As hemiceluloses, denominadas de heteropolissacarídeo, são formadas pela combinação de diversos tipos monossacarídeos, dentre eles, pentoses (D-xilose, L-arabinose) e hexoses (D-glicose, D-galactose, D-manose), acompanhados de algumas ramificações de ácidos D-glucurônico e 4-O-metilglucurônico. A lignina é formada, principalmente, pela polimerização radicalar de três unidades diferentes de fenil-propano: álcool p-cumarílico, álcool coniferílico e álcool sinapílico. Diferentes pré-tratamentos vem sendo estudados com o objetivo de separar as três principais frações da biomassa. Estes podem ser classificados em quatro grupos: pré-tratamento físico (moagem, extrusão, p.ex.), físico-químico (explosão a vapor, hidrotérmico, explosão com amônia, p.ex.), químico (alcalino, ácidos, organosolve, AFEX, líquidos iônicos, p.ex.) ou biológico. O objetivo desta pesquisa de mestrado será avaliar diferentes condições operacionais do pré-tratamento hidrotérmico (temperatura, tempo, carga de sólidos, etc). Avaliar-se-á também o emprego de xilanases, com vistas a obter na fração líquida alta concentração de xilooligômeros (XOS) e/ou xilose. Os XOS são constituídos por duas ou mais unidades de xilose. Dessa forma, a fração sólida remanescente (rica em celulose e lignina) poderá ser empregada em outros estudos com a finalidade de recuperar a celulose. Os experimentos serão realizados em reator PARR (5 litros de volume útil) empregando bagaço ou palha de cana-de-açúcar como biomassa. As hidrólises enzimáticas serão realizadas em frascos agitados em shaker com controle de agitação e temperatura empregando complexo enzimático rico em xilanases. Buscar-se-á também otimizar as condições enzimáticas de operação.

Palavras-chaves: Pré-tratamento; biomassa lignocelulósica; xilose; xilooligômeros.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

PROFESSOR ORIENTADOR: Prof. Roberto de Campos Giordano
PROFESSOR COORIENTADORr: 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