

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

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

**TÍTULO: Triagem sistemática de moléculas para absorção de Etanol arrastado por CO<sub>2</sub> em fermentação extrativa**

**RESUMO**

A fermentação extrativa é uma técnica que permite a retirada do etanol do meio fermentativo durante a fermentação. Isso permite a operação da mesma com maiores concentrações de açúcares e reduz o tempo de fermentação ao reduzir a inibição das leveduras pelo etanol. Após o arraste do etanol pelo CO<sub>2</sub>, este deve ser recuperado de forma eficiente, separando-o do CO<sub>2</sub> e da água que também é arrastada. Nesse sentido, este projeto visa a triagem sistemática de moléculas para a absorção seletiva de etanol em um sistema de fermentação extrativa, utilizando CO<sub>2</sub> como gás de arraste. O objetivo é identificar uma molécula que absorva o etanol, separando-o da água e do CO<sub>2</sub>, e que possa ser facilmente separada do etanol por destilação simples. Tal seleção será realizada empregando técnicas de design molecular auxiliado por computador (*Computer-Aided Molecular Design - CAMD*), que envolve as seguintes etapas: tradução das necessidades do produto (molécula absorvente) em especificações de propriedades; identificação das propriedades alvo e seus valores desejáveis, além de restrições estruturais para as moléculas candidatas; emprego do CAMD para gerar e testar moléculas candidatas, com base em um conjunto de blocos de construção (grupos funcionais) e regras de combinação; análise das moléculas selecionadas pelo software, verificando sua viabilidade e desempenho; avaliação técnica, econômica e ambiental dos melhores candidatos empregando simuladores de processos. As principais propriedades que serão consideradas na seleção das moléculas candidatas serão: ponto de ebulição; solubilidade do etanol na molécula candidata; imiscibilidade, ou baixa miscibilidade, com a água; baixa toxicidade e impacto ambiental; não formação de azeótropo com o etanol. Todas as propriedades serão calculadas empregando métodos preditivos baseados em contribuição de grupos. Isso irá gerar um problema de otimização do tipo MI(N)LP que será modelado e resolvido em Python empregando o pacote Pyomo. Espera-se obter moléculas candidatas que atendam às restrições impostas. A análise técnico-econômica-ambiental irá fornecer subsídios para escolher entre as opções encontradas na etapa anterior de modo a reduzir os custos e possíveis impactos ambientais da etapa.

**Palavras-chaves:** Fermentação extrativa; design molecular auxiliado por computador; Otimização