Campus Universitário - Viçosa, MG - 36570-000 - Telefone (31)3899-2226 - fax: (31) 3899-2208 - E-mail: dta@ufv.br

TAL 797 – Seminário **Data 21/03/2018**

FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS AUXILIANDO NA TOMADA DE DECISÃO

Pós-graduando: Jamille Coelho Coimbra

Orientador: Luis Antonio Minim (Ciência e Tecnologia de Alimentos)

Novas ferramentas computacionais têm surgido a cada ano, a fim de compreender melhor os sistemas, otimizá-los e resolver problemas muito complexos. Totalmente aplicável à engenharia de alimentos, o uso de softwares, em âmbito acadêmico e empresarial, está associado à redução de custos e riscos de operação, previsão de cenários, análise de sensibilidade das variáveis "chave" do processo e aquisição de novos conhecimentos, os quais serão transformados em novos produtos, servicos e/ou processos produtivos. Dentro deste contexto, propôs-se uma aplicação de modelagem computacional, baseada na técnica de fluido dinâmica computacional (CFD), para simular a conversão de um substrato em um biorreator monolítico macroporoso. Foi estudado a transferência de massa e reação, catalisada por uma enzima imobilizada, o que permitiu descrever satisfatoriamente o processo fluidodinâmico e reacional. Com base nas equações da continuidade, da quantidade de movimento e da equação da conservação das espécies, considerando o escoamento no estado estacionário, regime laminar, uniforme, totalmente desenvolvido e incompressível foi construído o modelo matemático. De posse das condições de contorno e condições iniciais, analisou-se como a conversão foi afetada pela velocidade de escoamento e pelo coeficiente de dispersão axial, sendo determinado o comprimento do biorreator mais adequado para o processo. Concluiuse que as simulações em CFD foram efetivas no dimensionamento do equipamento, na caracterização do escoamento e da transferência de massa no meio macroporoso atingindo 70% de conversão em um curto período de tempo (15 min). A conversão não foi substancialmente alterada para diferentes valores do coeficiente de dispersão axial estudados e a altura do biorreator mais adequada foi de 0,100 m. Este estudo permitiu refletir que com a crescente competitividade, exigência dos clientes e avanços tecnológicos a necessidade de simulação computacional tem sido marcante, já que decisões rápidas, sistematizadas e que prevejam mudanças podem ser tomadas.

Referências bibliográficas:

FONTAN, R. C. I. Desenvolvimento e caracterização de trocador catiônico supermacroporoso para a purificação de macromoléculas. Tese (Doutorado), Ciência e Tecnologia de Alimentos, UFV, Viçosa, MG, Brasil. 2013.

GAVIRA M de O. 2003. Simulação Computacional como uma ferramenta de aquisição de conhecimento. Dissertação (Mestrado), Engenharia de Produção, UFSCAR. São Paulo, SP, Brasil.

HELLMERS, F., TAKORS, R., THUM, O. Robust enzyme immobilizates for industrial isomalt production. Molecular Catalysis. v. 445, p. 293-298, 2018.

JUNGBAUER, A.; HAHN, R. Polymethacrylate monoliths for preparative and industrial separation of biomolecular assemblies. *Journal of Chromatography A*, v.1184, p. 62-79. 2008.

MATTHEWS W.S., BROWNH.D., RILEY T., DALE O'BRIEN G. A comparative study: Kinetics of the enzyme l-asparaginase in several tissues of Cavia cobaya. *International Journal of Biochemistry*, v. 2, n. 10, p.473-476. 1971.

MÍNIM, L. A., 1994. Controle adaptativo de reatores tubulares de alta performance: aplicação para reatores enzimáticos. Tese (Doutorado), Engenharia Química, UNICAMP, São Paulo, SP, Brasil.

VOLOKITINA, M. V., KORZHIKOV-VLAKH, V. A., TENNIKOVA, T. B., KORZHIKOV-VLAKH, E. G. Macroporous monoliths for biodegradation study of polymer particles

considered as drug delivery systems. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, v. 145, p. 169-177, 2017.

ZABKA, M., MINCEVA, M. RODRIGUES A. E. A. E. Experimental and modeling study of adsorption in preparative monolithic silica column. *Chemical Engineering And Processing: Process Intensification.* v. 45, n. 2, p.150-160. 2006.

ZHANG, Y., HE, S., SIMPSON, B. K. Enzymes in food bioprocessing — novel food enzymes, applications, and related techniques. Current Opinion in Food Science. v. 19, p. 30-35, 2018.

Orientador