PLEITEANTE:

HELIO FERNANDO R. FERRETO

EDGAR FERRARI DA DA CUNHA

PROJETO DE PESQUISA

Simulação do Processo de Produção dos Reagentes Liofilizados

EDITAL INTERNO

Radiofarmácia IPEN Nº 3/2016

Área de atuação no CR

Otimização dos processos de produção dos reagentes liofilizados

Simulação do Processo de Produção dos Reagentes Liofilizados

1 - Introdução

A secagem por congelação ou liofilização é um processo de desidratação, que é muitas vezes usado para preservar um alimento ou material perecível. Também é frequentemente utilizado como uma forma de remover a água do produto, tornando-os mais leve e mais fácil de transportar. O primeiro uso de liofilização como uma maneira de preservar alimentos remonta a 1200 A. D., quando as pessoas utilizando um precursor da técnica, para armazenar carnes e alimentos de suas colheitas. Por exemplo, usaram as altitudes elevadas e baixas pressões dos Andes como uma forma de remover a água lentamente em suas culturas congeladas, eficazmente liofilizar a comida é permitir que seja armazenado durante anos. Centenas de anos depois, o processo de congelamento de secagem foi usada novamente, desta vez para preservar a penicilina e até mesmo plasma sanguíneo para o transporte dos EUA para centros médicos europeus, durante a Segunda Guerra Mundial.

Hoje em dia, a liofilização é largamente reconhecida como uma técnica importante em muitas indústrias, na indústria farmacêutica para a preservação de antibióticos, na fabricação de semicondutores cerâmicos, e por iniciativas de preservação, tal como na restauração de documentos danificados pela água, além de ser um processo amplamente utilizado na indústria de alimentos, para preservá-los até 30 anos.

Liofilização utiliza uma técnica chamada de sublimação, em que um líquido congelado passa diretamente a partir de um estado congelado para o estado gasoso. Esta capacidade de um sólido para saltar a fase de líquido e passar diretamente para a fase gasosa pode ser explicada por um diagrama de fase, onde o estado de uma substância, sob diferentes condições de pressão e temperatura está descrito. Como se mostra no diagrama de fase, em pressões muito baixas e temperaturas, um sólido pode passar diretamente para a fase gasosa, sem passar através da fase líquida intermediário.

Liofilização consiste em duas etapas principais. No primeiro passo, uma substância sensível ao calor, tais como alimentos, plasma sanguíneo, ou antibiótico é congelada num frasco ou câmara. Em seguida, a pressão é

reduzida na câmara, e calor suficiente é adicionada lentamente para permitir que a substância congelada, geralmente água, sublime.

2 - Objetivo

O propósito da apresentação deste projeto é utilizar uma ferramenta computacional para simulação do processo de produção de reagentes liofilizados.

O objetivo deste projeto é apresentar, utilizando-se de um software de fluido dinâmica computacional (CFD), os fenômenos físico-químicos dos parâmetros do processo de liofilização. O desenvolvimento de um modelo que representa estes fenômenos poderá contribuir na diminuição de estudos experimentais, e por consequencia, um menor desperdício de recursos e tempo, procurando sempre atingir os requisitos de qualidade do produto.

3 - Simulação

A simulação de um modelo físico-químico apresenta uma metodologia moderna e diferente de trabalho, consegue contribuir como uma nova ferramenta que pode ser adotada para diversos campos de estudos, principalmente em pesquisas experimentais, e mesmo em procedimentos de estudos de unidades pilotos e industriais. Seu potencial financeiro é enorme, pois evita diversas perdas em experimentos desnecessários, e com isso uma redução elevada de tempo e custo quando comparado a um estudo tradicional.

Ao simular o processo de congelação-secagem, usa-se o método de malha, a fim de explicar as duas fases e o material de mudança de forma que ocorre à medida que o gelo sublima. Isso pode ser modelado de acordo com uma análise de calor e balanço de massa no limite sólido-gás usando a interface de geometria. O método de malha permite uma descrição muito detalhada dos fenômenos físicos na interface entre as duas fases.

Serão utilizados os recursos computacionais do Centro de Células a Combustível e Hidrogênio (a utilização dos recursos computacionais no CCCH está condicionada ao tempo disponível de máquina) e o software de fluido dinâmica computacional COMSOL. Para complementação deste programa, um módulo de Transferência de Calor (Heat Transfer) deverá ser adquirido devido aos fenômenos envolvidos nesta simulação. A simulação poderá avaliar o

efeito de cada variável para o processo em estudo, dentro de uma faixa operacional, podendo otimizar o processo.

Necessariamente, para validar a simulação, dados experimentais deverão ser fornecidos, checando seu resultado final, devendo estar de acordo com a simulação.

Adicionalmente, podem-se apresentar informações do processo para a artigos científicos, sem comprometimento do know how aprendido, evitando-se informações de parâmetros de processo. Ficando a cargo do entedimento entre as partes (CR e os representantes deste projeto) para disponibilizar estas, evitando informações que não possam serem disponibilizadas.

Os modelos matemáticos não são passíveis de patente, mas combinações da simulação com o processo poderá vir a ser um produto de inovação.

O orçamento para o projeto terá um custo inferior a R$ 29.500,00 situando-se na Faixa A do edital.

Equipamento / Licença	Quantidade	R$
Software COMSOL –módulo transferência calor/multifísico- assinatura 2 anos	1	16000,00
Impressora multifuncional HP	1	1500,00
XPS DELL 8700 i7 + Material de Apoio	1	12000,00

4 - Cronograma

No cronograma físico são apresentadas as metas a serem alcançadas para a realização descritas.

Cronograma Físico						
Tarefas	1(*)	2	3	4	5	6
1-Aprendizado/Planejamento de Simulação	X	X	X	X		
2-Realização de Simulação			X	X		
3-Otimização do Processo				X	X	
4-Relatórios de Atividades/Financeiros			X			X
5-Artigos/Patentes (se houver)			x			X

(*) cada período representa 4 meses de projeto

5 - Participantes

Coordenador: Helio Fernando Rodrigues Ferreto

Participante: José Antonio Seneda

Colaborador: Edgar Ferrari da Cunha

Auxiliares: Pessoal destinado pelo Centro de Radiofarmácia para realizar a fase experimental, de maneira a encaminhar os resultados necessários para simulação do processo.

6 - Considerações

O projeto trata-se de um aprendizado e estudo de simulação do processo de liofilização realizado por software, utilizando-se de computação matemática. Estimativas de recursos extras como: infraestrutura de apoio, permissões e autorizações especiais, obtenção de (dados experimentais para validação do modelo), ficarão à cargo do Centro de Radiofarmácia, sendo necessária a disponibilização de pessoal do próprio centro para realizá-los.

Deve-se esclarecer que a anuência do responsável, pelo local onde serão realizados os experimentos à validação da simulação, é necessariamente fornecido pelo próprio Centro de Radiofármacia, ao ser aprovado este projeto, pois os participantes dos estudos de simulação não têm como efetuar os experimentos.

Finalizando o desenvolvimento do modelo, o programa de simulação será apresentado aos responsáveis do Centro de Radiofarmácia para que, dependendo do interesse e de recursos financeiros, esse estudo possa ser transferido aos funcionários do Centro de Radiofarmácia, e se houver interesse disponibilizá-lo à comunidade de pesquisadores do IPEN, para que possam fazer novas simulações.

7 - Referências Bibliográficas:

COMSOL. Disponível em :< https://www.comsol.com/blogs/simulating-freeze-drying-process/> Acesso em: 04 de Out. 2016.