



UFRRJ

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL
DO RIO DE JANEIRO

PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO - PROPPG

**DESAFIOS E
PERSPECTIVAS**

**DA POLÍTICA
CIENTÍFICA NO
BRASIL**

**VII
RAIC
2019**

REUNIÃO ANUAL DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

23 a 27 SET

INSCRIÇÕES

<http://eventos.ufrrj.br/raic/>

**RESUMOS
XXIX JIC
VII SEPTI**

VOL. III

Apoio:





UFRRJ

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL
DO RIO DE JANEIRO

PROPPG

UFRRJ



Reitor

RICARDO LUIZ LOURO BERBARA

Vice-Reitor

LUIZ CARLOS DE OLIVEIRA LIMA

PRÓ-REITOR DE PESQUISA E PÓS GRADUAÇÃO

ALEXANDRE FORTES

PRÓ-REITORA ADJUNTA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

LÚCIA HELENA CUNHA DOS ANJOS

Coordenação Geral

Glauco Favilla Bauerfeldt

Juliana Lobo Paes

Marisa Fernandes Mendes

Ricardo Cordeiro Corrêa

Coordenadores de Área

Ciências Agrárias

Irene da Silva Coelho
Isabele da Costa Angelo
Murilo Machado de Barros

Ciências Biológicas e Ciências da Saúde

Jaqueline Rocha Borges dos Santos
David do Carmo Malvar

Ciências Exatas e da Terra e Engenharias

Madelon Rodrigues Sá Braz
Orlando dos Santos Pereira

Ciências Humanas, Ciências Sociais Aplicada e Letras, Linguísticas e Artes

Naara Luna
Biancca Scarpeline de Castro
Edméa Oliveira dos Santos
Flora Daemon

Multidisciplinar

Juliana Lobo Paes
Marisa Fernandes Mendes

Instituto Multidisciplinar

Andreia da Gomes da Cruz
Aline de Carvalho Moura
Edileuza Dias de Queiroz

Instituto Três Rios

Michaele Alvim Milward de Azevedo

ANAIS

VII Reunião Anual de Iniciação Científica
RAIC 2019 - UFRRJ

“Desafios e Perspectiva da Política Científica no
Brasil”

ISSN: 1809-1342

Comitê Editorial

JULIANA LOBO PAES

MARISA FERNANDES MENDES

RICARDO CORDEIRO CORRÊA

GLAUCO FAVILLA BAUERFELDT

BEATRIZ COSTALONGA VARGAS

CAMILA FERREIRA MATOS

CANDIDO BARRETO DE NOVAIS

CHRISTIANE SILVA SOUZA

CRISTIANE FIGUEIRA DA SILVA

DAYANNE ARAÚJO DE MELLO

ELAINE CESAR DO CARMO ASSUMPÇÃO DE SOUZA

GILSONLEY LOPES DOS SANTOS

JONNYS PAZ CASTRO

JÚLIO CÉSAR RIBEIRO

RENATA NAZARÉ VILAS BOAS

ROSIMAR DE SOUZA GOULART

SANDRA SANTANA DE LIMA

TALITA DE SANTANA MATOS

Sumário

I	Volume I	9
1	Ciências Agrárias	11
II	Volume II	337
2	Ciências Biológicas	339
3	Ciências da Saúde	395

III Volume III	423
4 Engenharias	425
5 Ciências Exatas e da Terra	485
IV Volume IV	583
6 Ciências Humanas	585
7 Linguística, Letras e Artes	733
V Volume V	761
8 Ciências Sociais Aplicadas	763
9 Multidisciplinar	847



VOLUME III

Engenharias



POTENCIAL ENERGÉTICO DO BIOGÁS ORIUNDO DE LODO DE ESGOTO E ÁGUA MINERAL

Beatriz Costalonga Vargas¹, Ariane da Silva Bergossi²; Priscilla Tojado dos Santos²; Bernardo Marchon de Souza Antunes³ & Juliana Lobo Paes⁴

1. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Engenharia Agrícola e Ambiental IT/UFRRJ; 2. Engenheira Agrícola e Ambiental; 3. Discente do Curso de Engenharia Agrícola e Ambiental IT/UFRRJ; 4. Professora do DE/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

Nº do protocolo: Não se aplica

RESUMO

As Estações de Tratamento de Esgoto (ETE's) são compostas de por câmaras seletoras iniciais, nas quais geram lodos de esgoto. Esse material, considerado como um passivo ambiental, passa pelo processo de secagem para ser encaminhado a aterros sanitários. No entanto, devido sua grande carga de matéria orgânica e microbiana já estabilizada pode ser considerado um material em potencial para ser utilizado em biodigestores anaeróbicos visando à produção de biogás (Queiroz et al., 2018). Dessa forma objetiva-se verificar o potencial energético do lodo de esgoto associado à adição de água mineral. O experimento foi conduzido no Laboratório de Eletrificação Rural e Energias Alternativas no Departamento de Engenharia da UFRRJ. Utilizaram-se protótipos de biodigestores de bancada no modelo indiano com capacidade de 1,7 kg, com sistema de abastecimento em batelada. O biodigestor utilizado foi composto por campânula flutuante como gasômetro, câmara de biodigestão anaeróbica e manômetro. Os biodigestores foram abastecidos com substrato contendo lodo de esgoto e água mineral (LE:A) com 100:0, 75:25, 50:50 e 25:75, realizando seus respectivos ensaios em duplicata. O volume de biogás produzido foi definido pelo produto do deslocamento vertical do gasômetro e sua área da seção transversal interna durante nove semanas. A coleta dos dados foi realizada três vezes por semana, tendo como produção semanal de biogás seu somatório semanal. A conversão energética foi calculada levando-se em consideração a relação com maior produção acumulada por quantidade de afluente adicionado (potencial produção de biogás), quantidade de lodo de esgoto produzido por ano (150.000 toneladas ao ano) em uma ETE e equivalência de um metro cúbico de gás com lenha, diesel, gasolina, etanol, gás e eletricidade (Pedroza et al., 2010; Barrera, 1993). A maior produção acumulada de biogás foi com a proporção de 100:0 LE:A, sendo de 0,0048 m³ apenas na primeira semana. A conversão energética foi calculada levando-se em consideração que a relação 100:0 LE:A apresentou maior potencial de produção de biogás por quantidade de afluente adicionado. Diante dos cálculos realizados, obteve-se após seis semanas de biodigestão anaeróbica, a produção de biogás equivalente a 51.076,64 L de gasolina, 48243,68 L de querosene, 46.077,30 L de óleo diesel, 37,83 m³ de GLP, 127,98 toneladas de lenha e 118,98 MWh.

Palavras-chave: Biodigestão anaeróbica; Biodigestor; Estações de Tratamento de Esgoto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Barrera, P. **Biodigestores - Energia, Fertilidade e Saneamento para Zona Rural**. São Paulo: Ícone, 1993.
- Pedroza, M. M., Vieira, G. E. G., Sousa, J. F., Pickler, A. C., Leal, E. R. M., Milhomen, C.C. **Produção e Tratamento de Lodo de Esgoto** – Uma Revisão, Revista Liberato, vol. 11, p. 89-XX, 2010.
- Queiroz, C. K., Paes, J. L., Fernandes, P. L. B. **Caracterização da produção de biogás a partir da biodigestão de lodo de esgoto**. In: VII Congresso Brasileiro de Energia Solar, 2018, Gramado. Anais: CBENS, 2018. v. VII. p. 1-10.

POTENCIAL ENERGÉTICO DO BIOGÁS ORIUNDO DA CODIGESTÃO ANAERÓBICA DE BLEND LENHOSO HIDROLISADO E LODO DE ESGOTO**Guilherme Araujo Rocha¹; Beatriz Costalonga Vargas¹; Marximilian Alves de Oliveira Merlo¹ & Juliana Lobo Paes²**

1. Discente do Curso de Engenharia Agrícola e Ambiental IT/UFRRJ; 2. Professora do IT/DE/UFRRJ

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Os impactos ambientais gerados pelo setor madeireiro necessitam de pesquisas para serem neutralizados, minimizando a degradação dos recursos naturais. Uma solução para a utilização deste material atribui-se as rotas tecnológicas. Dentre as existentes, cita-se a codigestão anaeróbia, pois há a possibilidade de potencializar a produção de biogás, devido utilização de dois ou mais codigestantes no biodigestor. A lignina é um composto presente no material lenhoso, por este motivo esses produtos apresentam muita fibrosidade. Esta é uma característica negativa para que possa ser utilizado na codigestão anaeróbica na produção de biogás. Visando minimizar este fator, tratamentos termoquímicos e sacarificações enzimáticas devem ser realizados, tais como a hidrólise. Esse procedimento separa a lignina da celulose e hemicelulose, tornando-os disponíveis para a codigestão anaeróbica (Sun & Cheng, 2005). O lodo de esgoto gerado em Estações de Tratamento de Esgoto possui elevada carga orgânica em sua composição, sendo considerado um excelente codigestante. Objetivou-se avaliar a equivalência da geração de biogás pela codigestão anaeróbica de blend de material lenhoso hidrolisado e lodo de esgoto com fontes energéticas convencionais. Para a produção de biogás foram utilizados biodigestores de bancada modelo indiano, em sistema de abastecimento por batelada. O biodigestor utilizado foi composto por gasômetro, câmara de biodigestão anaeróbica e manômetro. Os biodigestores foram abastecidos com 0,0017 Ton de afluente contendo blend de material lenhoso hidrolisado (H) e lodo de esgoto (LE). Adotou-se as relações de 100:0, 75:25, 50:50 e 25:75 H:LE, realizando seus respectivos ensaios em duplicata. O volume de biogás, em m³, produzido foi definido pelo produto do deslocamento vertical do gasômetro e sua área da seção transversal interna durante 13 semanas. A coleta dos dados foi realizada uma vez por semana, tendo como produção acumulada de biogás o somatório semanal. Calculou-se o potencial energético (m³ Ton⁻¹) com a relação 75:25 H:LE que apresentou maior produção acumulada de biogás (0,0021 m³) e a quantidade de afluente adicionado no biodigestor (0,0017 Ton). Adotando-se como referência a geração média anual de lodo de esgoto em ETE de 150.000 Ton (Pedroza, 2010) foi calculado a quantidade de biogás (m³) anualmente. Considerando que um metro cúbico de biogás equivale a 0,553 L de óleo diesel, 0,454 L de gás de cozinha (GLP), 1,536 kg de lenha e 1,428 kWh de eletricidade (Barrera, 1993) e a quantidade de biogás anual fez-se a conversão energética. Para a relação de 75:25 H:LE, anualmente seriam necessários 112.500 Ton do blend de material lenhoso hidrolisado e 37.500 Ton de lodo de esgoto totalizando 150.000 Ton de afluente. O potencial energético para a relação de 75:25 H:LE foi de 1,22 m³ Ton⁻¹, enquanto a quantidade de biogás gerado de 183.376 m³ para 150.000 Ton de afluente anuais. Ao converter a quantidade de biogás gerado em termos de óleo diesel, GLP, lenha e eletricidade obteve-se 101.407 L, 83.253 L, 281.666 kg e 261.861 kWh, respectivamente. Conclui-se que o processo de codigestão anaeróbica entre material lenhoso hidrolisado e lodo de esgoto apresenta viabilidade para suprir a demanda energética das fontes convencionais.

Palavras-chave: biodigestor, rota tecnológica, conversão energética.**Referências Bibliográficas**

- BARRERA, P. Biodigestores - Energia, Fertilidade e Saneamento para Zona Rural. São Paulo: Ícone, 1993.
- PEDROZA, M.M., VIEIRA, G. E. G., SOUSA, J.F., PICKLER, A.C., LEAL, E.R.M., MILHOMEN, C.C. Produção e Tratamento de Lodo de Esgoto – Uma Revisão. Revista Liberato, n.16, v.11, p.89-XX, 2010.
- SUN, Y.; CHENG, J.J. Dilute acid pretreatment of ryegrass and bermuda grass for ethanol production. Bioresource Technology, v.96, p. 1599-1606, 2005.

ESTUDO DAS PROPRIEDADES DE MICROESFERAS DE ALGINATO DE SÓDIO COM PVA E ÓLEO ESSENCIAL DE LARANJA PARA A CICATRIZAÇÃO DE FERIDAS NA PELE
Láís da Costa Saboia¹; Isis Siqueira Fernandes² & Renata Nunes Oliveira³

1. Aluno de Iniciação Científica Voluntária, Discente do curso de Engenharia de Materiais, DEQ/UFRRJ;
2. Aluno de Iniciação Científica Voluntária, Discente do curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ;
3. Professor adjunto do curso de Engenharia de Materiais, DEQ/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

RESUMO

A American Burn Association declarou que entre 2008 e 2017, ocorreram em torno de 212.000 atendimentos a pacientes que relataram problemas com queimaduras, dentre os quais, 23% possuíam entre 1 e 15 anos. Além de um número alto de casos envolvendo essas feridas, o tratamento de queimaduras possui um alto custo, é doloroso para o paciente e pode ser um potencial gatilho para o desenvolvimento de ansiedade e depressão [1]. Com o propósito de promover um possível tratamento eficaz e acessível a todos, nesse trabalho são utilizados materiais que têm afinidade com sistemas biológicos, como o Poli(álcool vinílico) - PVA, [2] que possui propriedades, tais como, alta sensibilidade a ambientes fisiológicos, natureza hidrofílica e flexibilidade adequada para sua utilização em aplicações biomédicas. Além do PVA, o Alginato de Sódio também possui características peculiares para este fim, pois possui barreira antibacteriana e longa estabilidade. Nesse estudo, empregou-se óleo essencial de laranja, devido aos efeitos anti-inflamatório, antioxidante e antisséptico e pela alta retenção desse óleo após a secagem [3]. Diante disso, foi estudada a utilização do óleo essencial de laranja incorporado em uma matriz contendo microesferas de Alginato de Sódio e PVA e suas propriedades no processo de cicatrização. Foram utilizados para o preparo do filme de PVA: 5g de PVA dissolvidos em 80 mL de água destilada, mantido em agitação à temperatura de 90 °C, 5 mL de óleo essencial de laranja dissolvidos em 15 mL de álcool etílico foram mantidos em geladeira para posterior incorporação controlada na solução de PVA. Separadamente, 0,1 g de Alginato de Sódio foi dissolvido em 10mL de água destilada e, lentamente, foi injetado 1mL de óleo essencial de laranja na solução, com posterior gotejamento em 200 mL de solução CaCl₂ 0,15 mol/L para a formação das microesferas. Após esses procedimentos, ambas as soluções resultantes foram misturadas e levadas para três ciclos de congelamento e secagem por 24 horas a 25 °C. As amostras foram analisadas no microscópio estereoscópico, observadas com ampliações de 100 vezes e no FTIR (Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier), que é uma técnica de caracterização muito utilizada em polímeros, baseada no espectro infravermelho de absorção ou emissão de um determinado componente. A partir da análise dos resultados com o auxílio da literatura comparativa, na amostra que contém alginato, foram encontradas bandas características de ligações existentes na estrutura do PVA, as quais foram deslocadas ou tiveram suas intensidades alteradas quando comparadas ao filme de PVA apenas com óleo de laranja, o que supõe-se que ocorreu devido à interação entre o alginato, PVA e óleo de laranja, explicitando que houve a mistura física e química entre os componentes e a incorporação do óleo às matrizes. Ademais, a verificação das amostras através do microscópio, confirmou a encapsulação deste óleo nas microesferas e absorção do mesmo no PVA.

Palavras-chave: engenharia tecidual, PVA, microesferas, óleo de laranja, Alginato

Referências Bibliográficas

- SANTOS, A.M.N.; MOREIRA, A.P.D.; CARVALHO, C.W.P.; LUCHESE, R.; RIBEIRO, E.; MCGUINNESS, G.B.; MENDES, M.F.; OLIVEIRA, R.N. Physically crosslinked gels of PVA with natural polymers as matrices for Manuka Honey release in wound-care applications. MDPI, p. 1-2, 2019.
ELBADAWY, A. K.; EL-REFAUE S. K.; XIN C.; A review on polymeric hydrogel membranes for wound dressing applications: PVA-based hydrogel dressings. Journal of Advanced Research, Cairo University, p.218, 2017.
13 Amazing Benefits of Orange Essential oil. Organic Facts, 2019. Disponível em <https://www.organicfacts.net/health-benefits/essential-oils/orange-essential-oil.html>. Acesso em: 5 ago. 2019

Modelagem e simulação da produção de biomassa de *Herbaspirillum seropedicae* em biorreator contínuo utilizando o software livre EMSO

Giovane Massena Petruccelli¹; Luiz Augusto da Cruz Meleiro² & Maurício Mancini³

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Professor do DEQ/UFRRJ; 3. Professor do DEQ/UFRRJ - Orientador.

Grande área: Engenharias

RESUMO

A pesquisa objetivou o uso do software livre EMSO (*Environment for Modelling, Simulation and Optimisation*) para o desenvolvimento de programas simuladores, visando a simulação da cinética de produção da bactéria *Herbaspirillum seropedicae* em biorreatores contínuos. Esta plataforma tem se mostrado de grande utilidade para pesquisas na área da engenharia uma vez que está disponível gratuitamente e apresenta ferramentas relevantes para a modelagem de processos dinâmicos e não dinâmicos. O microrganismo alvo do presente trabalho é considerado como diazotrófico, fixador de nitrogênio, além de uma rizobactéria promotora de crescimento de plantas (RPCP), sendo assim, um potencial inoculante para o mercado agrícola. Os parâmetros cinéticos dos modelos utilizados neste trabalho foram obtidos a partir de resultados experimentais oriundos de trabalhos disponíveis na literatura, originados do mesmo grupo e projetos desta pesquisa. Em uma etapa anterior deste projeto, foram obtidos os parâmetros cinéticos, levando em conta o crescimento de *Herbaspirillum seropedicae* em três meios de cultura distintos, quais sejam: (1) Meio DYGS convencional, com glicerol como fonte de carbono; (2) Meio DYGS modificado, com apenas extrato de levedura, K₂HPO₄, MgSO₄.7H₂O e glicerol; e (3) Meio DYGS modificado, com a mesma composição do meio 2 e suplementação de extrato de levedura e glicerol, para suprir as limitações da redução de componentes do meio. Foi verificado, em trabalhos anteriores, que o modelo de Contois & Fujimoto apresentou os melhores resultados para a descrição da cinética de crescimento de *Herbaspirillum seropedicae*, sendo assim, o mesmo modelo e parâmetros estimados foram implementados nos programas simuladores utilizados nesta pesquisa. Após a implementação dos programas simuladores na plataforma EMSO, foram feitas simulações da operação do biorreator contínuo, operando com os três meios de cultura anteriormente considerados. Com base nos resultados obtidos, via simulação do processo contínuo, observou-se que o meio (1), após o período de 100 horas, apresentou uma concentração final de células de 4,63 g/L; o meio (2), uma concentração final de células de 8,10 g/L; e o meio (3), uma concentração final de células de 2,98 g/L. Os resultados acima sugerem que o aumento quantitativo da composição dos componentes do meio gera limitações ao crescimento do microrganismo, o que deverá ser verificado experimentalmente em etapas futuras. Com base nos resultados obtidos foi possível concluir que o meio (2) proporcionou uma maior produção de biomassa e é o mais indicado, nestas condições. Além disso, foi possível observar que o software EMSO facilitou o desenvolvimento do trabalho e a análise dos resultados, portanto, pode ser considerado uma plataforma recomendada para este tipo de estudo.

Palavras-chave: software EMSO; simulação; modelos cinéticos, bioprocessos, *Herbaspirillum seropedicae*

Referências Bibliográficas

- SCHEIDT, W. Estratégia de cultivo para produção de biomassa e promotores de crescimento por *Herbaspirillum seropedicae* BR-11417. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro/UFRRJ, 2015.
- SOARES, R.P.; Manual do Software EMSO, 135 p.; 2007.

GELIFICAÇÃO IÔNICA SEGUIDA DE RECOBRIMENTO: AVALIAÇÃO DA VIABILIDADE DE LEVEDURAS ENCAPSULADAS**Suellen Prince Pires Monteiro¹; Matheus Augusto Silva Santos² & Mariana Teixeira da Costa Machado³**

1. Discente do Curso de Engenharia de Alimentos, DTA/IT/UFRRJ; 2. Mestre do Curso de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos, DTA/IT/UFRRJ; 3. Professor do DTA/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A gelificação iônica externa é uma técnica que permite o aprisionamento de micro-organismos em polímeros, aumentando a resistência das células microbianas em condições ambientais adversas e tornando-os capazes de tolerar o ambiente ácido do estômago e ter sua liberação apenas no colón, onde podem agir como probióticos (LEONG et al., 2016). A fim de aumentar ainda mais a proteção, um revestimento desta partícula pode ser empregado para fechamento dos poros de sua superfície, utilizando, por exemplo, quitosana (ANSARI et al., 2017). Assim, o objetivo deste trabalho foi desenvolver, caracterizar e avaliar a viabilidade de partículas carreadoras de *S. boulardii*, obtidas através do método de gelificação iônica externa, seguida de recobrimento. Foram produzidas partículas de alginato e alginato-quitosana, secas a 40 °C, e caracterizadas quanto a umidade, higroscopicidade, atividade de água e morfologia, e ainda, buscou-se identificar a diferença entre as duas formulações em relação ao aumento da viabilidade durante o armazenamento a diferentes temperaturas (-18°C, 7°C e 30 °C), construção de isotermas de sorção e a simulação gastrointestinal *in vitro*. Não houve perda de micro-organismos durante o procedimento de recobrimento da partícula de alginato por quitosana. Durante a secagem, observou-se uma maior sobrevivência da levedura nas partículas alginato-quitosana, quando comparada a partícula sem recobrimento. Além disso, as partículas de alginato-quitosana apresentaram valores inferiores de umidade, atividade de água e a absorção de água. Entretanto, em relação a morfologia das partículas, não foram observadas diferença entre os tratamentos. Os resultados de estabilidade indicaram uma melhor manutenção da viabilidade quando as partículas são armazenadas em temperaturas reduzidas, e, de maneira geral, houve uma maior sobrevivência da cepa *S. boulardii* nas partículas formadas de alginato-quitosana, em todas as temperaturas de armazenamento, evidenciando uma maior proteção. O maior declínio foi observado na temperatura de estocagem de 30 °C, na qual as partículas alginato-quitosana apresentaram redução de 1,05 ciclos logaritmos, e as partículas alginato de 2,21 ciclos logaritmos. A partícula de alginato-quitosana também apresentou a menor higroscopicidade em todas as umidades relativas armazenadas, indicando novamente uma tendência de maior estabilidade no armazenamento.

Palavras-chave: levedura, probiótico, estabilidade, isotermas de sorção.

Referências Bibliográficas

- LEONG, J.-Y.; LAM, W.-H.; HO, K.-W.; VOO, W.-P.; LEE, M. F.-X.; LIM, H.-P.; LIM, S.-L.; TEY, B.-T.; PONCELET, D.; CHAN, E.-S. Advances in fabricating spherical alginate hydrogels with controlled particle designs by ionotropic gelation as encapsulation systems. **Particuology**, v. 24, p. 44-60, 2016. ISSN 1674-2001.
- ANSARI, F.; POURJAFAR, H.; JODAT, V.; SAHEBI, J.; ATAEI, A. Effect of Eudragit S100 nanoparticles and alginate chitosan encapsulation on the viability of *Lactobacillus acidophilus* and *Lactobacillus rhamnosus*. **AMB Express**, v. 7, n. 1, p. 144, 2017. ISSN 2191-0855.

CARACTERIZAÇÃO DE COMPÓSITO À BASE DE RESINA EPÓXI REFORÇADO COM RESÍDUOS DE GRANITO**Rafael Martins Santos¹; Antonio Renato Bigansolli² & Belmira Benedita de Lima Kühn²**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRJ; 2. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

RESUMO

O Brasil é um dos países com influência mundial no setor de rochas ornamentais. No ano de 2018, o Brasil exportou essa matéria prima para mais de 120 países, sendo Estados Unidos, China e Itália os maiores consumidores, o que ratifica uma grande importância na economia nacional. Os tratamentos feitos nesses materiais, sobre tudo no granito, geram na maioria das vezes grandes quantidades de rejeitos que, descartados erroneamente, causam impactos ambientais. Nesse sentido, o reaproveitamento desse material como elemento de carga em compósitos tem sido muito estudado e surtido muitos efeitos positivos no que tange ganho de propriedades físicas. Os produtos caracterizados como compósitos possuem uma classificação como materiais de alta tecnologia em virtude da gama de especificidades que podem adquirir. Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi cominuir, caracterizar resíduos de granitos e em seguida preparar e caracterizar compósitos com matriz epoxídica. A cominuição foi realizada através de um moinho de bolas seguida por moagem em moinho de alta energia a uma rotação de 450 rpm durante 16 minutos. O pó obtido foi segregado, em três amostras, utilizando-se um agitador mecânico e peneiras de 270 mesh e 325 mesh e caracterizado por difração a laser e Espectroscopia no Infravermelho com Transformada de Fourier (FTIR). Em seguida, foram preparados corpos de prova com 3% de carga de granito em matriz de resina epóxi, os quais foram submetidos ao teste de Impacto Izod e caracterizados via Análise Termogravimétrica (TGA). Os resultados de difração à laser das amostras do pó de granito apresentaram uma distribuição bimodal, ilustrando duas populações de partículas para cada amostra obtida, e através dos espectros de absorção obtidos por FTIR foram verificadas bandas espectrais referentes à biotita, ao quartzo e aos feldspatos. Obteve-se um valor médio para os três tipos de compósitos confeccionados de 0,1725 J de energia absorvida na fratura e uma temperatura de degradação dos compósitos próxima de 350 °C em atmosfera de nitrogênio. Assim, as análises mecânicas e térmicas não mostraram uma diferença significativa na resistência ao impacto e na temperatura de degradação dos compósitos devido às diferentes granulometrias do elemento de carga.

Palavras-chave: compósitos, granito-epóxi, FTIR.

Referências Bibliográficas

- ABIROCHAS - Associação Brasileira da Indústria de Rochas Ornamentais, 2018.
PIRATELLI-FILHO, A.; LEVY-NETO, F. Behavior of granite-epoxy composite beams subjected to mechanical vibrations. *Materials Research*, v. 13, n. 4, p.497-503, 2010.
COSTA, M. L.; REZENDE, M. C.; PARDINI, L. C. Métodos de estudo da cinética de cura de resinas epóxi. *Polímeros*, v. 9, n. 2, p.37-44, 1999.

ANÁLISE DO GRAU DE INTUMESCIMENTO DO HIDROGEL DE PVA INCORPORADO COM ÓLEO DE MELALEUCA ALTERNIFOLIA**Isabella Cipriano Cortez¹, Rommel Sauerbronn da Cunha², Ana Paula Duarte Moreira³, Renata Nunes Oliveira⁴**

1. Discente do curso de Engenharia de Materiais, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Engenheiro, Bioleucx, SP/Brasil; 3. Pesquisadora do PEMM/COPPE/UFRJ; 4 Professora do PPGEQ/DEQ/IT/UFRRJ

RESUMO

Para um eficiente tratamento de lesões cutâneas faz-se necessário o uso de curativos que mantenham uma alta umidade no local e um ambiente cicatrizante. Devido a sua biocompatibilidade, hidrofiliçidade, flexibilidade, resistência e característica adesiva, hidrogéis de Poliálcool vinílico (PVA), têm sido muito utilizados como base em curativos (CALÓ; KHUTORYANSKIY, 2015). A incorporação de um óleo essencial no hidrogel de PVA permite aperfeiçoar algumas propriedades, visando melhor ação cicatrizante. Além disso, o óleo essencial auxilia na hidratação da pele ressecada e proporciona o crescimento de novos tecidos em lugares afetados. O óleo essencial Melaleuca alternifolia possui comprovada ação antimicrobiana contra bactérias e fungos alteradores e/ou patogênicos, alguns vírus e microrganismos resistentes a antibióticos (RIEDL, 1997). O presente trabalho tem como objetivo caracterizar individualmente os hidrogéis de PVA carregados com óleo essencial de Melaleuca alternifolia, através da análise do grau de intumescimento. Foram preparados filmes poliméricos a partir de solução aquosa 10% Poliálcool vinílico (PVA), sendo incorporados 5% do óleo essencial Melaleuca Alternifolia (Bioleucx®). As amostras foram submetidas ao processo de criogelificação e secagem. O teste de intumescimento foi realizado em triplicata utilizando 30 mL de soro fisiológico e amostra de 1 cm². Em seguida, utilizou-se 30 mL de soro fisiológico em cada recipiente de vidro, totalizando seis recipientes. Acompanhou-se a variação de massa das amostras durante os períodos de 1, 2, 3, 4, 24, 48, 72 e 96 horas. Após a secagem, as amostras foram pesadas para cálculo de perda de massa e grau de intumescimento. A presença de óleo alterou a capacidade de intumescimento dos filmes, em que amostras com óleo intumesceram mais em soro fisiológico do que as de PVA puro. Após 24h do tempo de imersão, as amostras quase não apresentaram diferenças em relação à massa. O hidrogel de PVA puro apresenta maior fração gel (100%) e uma perda de massa nula, já o hidrogel PVA-óleo apresenta uma fração gel de 82% com uma perda de massa de 18%. Segundo MILLER-CHOU *et al.*, 2003, o teste de intumescimento analisa o inchamento do filme polimérico, onde o fluido insere-se entre as cadeias poliméricas até atingir o equilíbrio e não há rompimento das ligações cruzadas presentes. Por esse motivo, a amostra PVA-óleo apresenta maior perda de massa, uma vez que o óleo é liberado para o fluido.

Palavras-chave: PVA; hidrogel, Melaleuca alternifolia; intumescimento

Referências Bibliográficas

- CALÓ, E.; KHUTORYANSKIY, V. V. **Biomedical applications of hydrogels: A review of patents and commercial products.** European Polymer Journal. S.l., p. 252-267. abr. 2015.
- MILLER-CHOU, B. A. e J. L. KOENIG. **A review of polymer dissolution.** Prog. Polym. Sci., v.28, p.1223–1270. 2003.
- RIEDL, R.W. **Practical methods for using tea tree oil.** Agro- Food Industry Hi-Tech, Ballina, set/oct, p. 34-36, 1997.

**USO DO ARDUINO PARA CONSTRUÇÃO DE UM SISTEMA DE MEDIÇÃO DE TEMPERATURA:
ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR POR CONDUÇÃO****Leon de Souza Costa¹; Nathalia Pessigatt Alvarenga¹; Thainá Dalfior Salvador¹; Lara Carvalho Reis¹ & Paulo Jansen de Oliveira²**

1. Bolsista PET-EQ – Discente do curso de Engenharia Química; 2. Tutor PET-EQ - Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A maioria dos processos presentes nas plantas químicas das indústrias envolve algum processo de transferência de calor. A eficiência dos processos de transferência de calor é de fundamental importância para garantir a qualidade do produto a um custo reduzido. Para isso, cada vez mais, novas tecnologias são utilizadas para medições de temperaturas. Na universidade, devido ao espaço reduzido, nem sempre dispomos dos equipamentos em escalas industriais e por isso, torna-se muito importante buscar alternativas que permitam o discente estudar, medir ou simular as trocas térmicas envolvidas nos processos químicos industriais. Nesse contexto, os discentes do PET-EQ propuseram o uso do Arduino como uma plataforma para medição de temperatura e investigação dos processos de troca de calor por condução. O Arduino é uma placa de circuito eletrônico de baixo custo, flexível e que permite ao usuário desenvolver projetos de acordo com a sua necessidade. Nesse contexto, o Arduino foi utilizado com sensores para medição da temperatura de uma barra de aço. O propósito desse desenvolvimento foi à realização de uma aula prática de transferência de calor por condução para turma de graduação em Engenharia Química da UFRRJ. Para realização do experimento, primeiramente os discentes do PET-EQ estudaram e montaram o sistema eletrônico, juntamente com os sensores de temperatura. A segunda etapa consistiu na calibração dos sensores e para isso, foi realizado um experimento para medição da temperatura de um banho térmico com controle de temperatura. Foram realizados experimentos com medições nas seguintes temperaturas do banho: 30°C, 40°C, 50°C, 60°C e 70°C. Foram aferidas as temperaturas, os desvios e o tempo de resposta de 4 sensores. Com esses dados construiu-se uma curva de calibração para os sensores para corrigir as temperaturas aferidas nos experimentos. A terceira etapa desse trabalho consistiu na montagem da unidade experimental de troca de calor. Foi usada uma barra de aço de 40 cm com furos espaçados a 5 cm onde foram introduzidos os sensores de temperatura. A barra de aço foi submetida a uma diferença de temperatura, nos seus extremos de 80 °C e 10 °C, mantidas constantes com banho de óleo aquecido e resfriamento com etileno glicol. Foram avaliadas as temperaturas em cada posição ao longo da barra e mostrado que, mantendo-se a temperatura dos extremos constante, a temperatura ao longo da barra varia com a posição, mas não varia com o tempo, caracterizando uma transferência de calor por condução no regime permanente. Os resultados experimentais foram confrontados com os resultados obtidos através dos modelos teóricos e os desvios observados foram de 15%. Esse resultado foi atribuído a perda de calor da barra de aço para meio ambiente. A partir desses resultados foi possível discutir os conceitos de transferência de calor por condução.

Palavras-chave: transferência de calor; energia; trocador.

Referências Bibliográficas

INCROPERA, D, F.; WITT, P.D.. Fundamentos da transferência de calor e massa, 5ª Edição, Editora LTC. 2014.

ESTUDO DA DINÂMICA DE UM REATOR QUÍMICO DE MISTURA (CSTR): UMA EXPERIÊNCIA DIDÁTICA PARA OS DISCENTES DO CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA
Cybele Christine Cardoso de Moraes Barbosa¹; Lara Carvalho Reis¹; Pedro Henrique Velasco Brito¹; Julia Sampaio e Silva Viana¹ & Paulo Jansen de Oliveira²

1. Bolsista PET-EQ – Discente do curso de Engenharia Química; 2. Tutor PET-EQ - Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

O reator é considerado um dos equipamentos mais importantes da indústria química, pois determina a quantidade de produto produzido pela empresa. Por isso, é importante que o engenheiro químico domine os fundamentos necessários para projetar um reator químico. Um dos principais modelos de reator utilizados é o de mistura, também conhecido como reator CSTR. Esse reator é utilizado preferencialmente para reações homogêneas e em fase líquida. Num reator de mistura perfeitamente agitado, espera-se que os reagentes estejam distribuídos homogeneamente de forma que a concentração de todas as espécies dentro do reator seja espacialmente uniforme. Nesse caso, estima-se que a concentração dentro do reator seja igual à concentração na saída. No entanto, num sistema de mistura não ideal, os elementos de fluido percorrem caminhos distintos dentro do reator, afetando a dispersão e o tempo de residência dos reagentes. Além disso, outros fatores como a presença de zonas de estagnação, by pass e refluxo podem contribuir também para o desvio da idealidade. A não idealidade pode ser investigada pela análise da distribuição do tempo de residência (DTR) do reator. Para investigar e discutir a DTR do reator CSTR, os discentes do PET-EQ montaram um reator de 4 litros com controle de agitação; foi usado azul de metileno como traçador, introduzindo uma perturbação do tipo degrau positivo. O esquema experimental foi concebido com duas alimentações de concentração de azul de metileno conhecidas, uma diluída e outra concentrada conectadas ao reator. O reator contendo água foi inicialmente alimentado com a solução diluída até concentração de ficar constante 0,027 mg/L, nessa faixa foram realizada 5 coletas das soluções na saída do reator. Transcorrido 100s de experimento, a alimentação diluída foi fechada e a alimentação concentrada foi admitida no reator, simultaneamente. A partir desse instante foram coletadas 21 amostras, em intervalos de 5 segundos, na saída do reator. As soluções foram analisadas num espectrofotômetro para obtenção dos comprimentos de ondas das respectivas soluções. Foi possível determinar a concentração de azul de metileno das soluções, usando uma curva de calibração construída a partir de soluções de azul de metileno de concentração previamente padronizada. A concentração de marcador à saída do sistema, $C(t)$ foi utilizada para obter a função acumulativa $F(t)$ de acordo com Fogler (2015). Com esse experimento montado e executado pelos discentes do PET para os discentes de graduação em Engenharia Química foi possível discutir o escoamento dentro de um reator CSTR, bem como discutir as considerações feitas para o modelo de mistura ideal.

Palavras-chave: dispersão; reator; mistura.

Referências Bibliográficas

- FOGLER, S. H.. Elementos da Engenharia das Reações Químicas. 4ª Edição, Editora LTC. 2015.
FROMENT, G. F.; BISCHOFF, K. B.. Chemical Reactor Analysis and Design, J. Wiley, 1990.
LEVENSPIEL, O.. Engenharia das Reações Químicas, Edgard Blücher, 2005.

ESTUDO DA DINÂMICA DE UM REATOR QUÍMICO: UMA EXPERIÊNCIA DIDÁTICA PARA OS DISCENTES DO CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA**Mariana Bottaro Moraes¹; Thaina Dalfior Salvador¹; Nathalia Pessigatt Alvarenga¹; Isabelle Silva do Nascimento¹ & Paulo Jansen de Oliveira²**

1. Bolsista PET-EQ – Discente do curso de Engenharia Química; 2. Tutor PET-EQ - Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

O estudo da engenharia das reações químicas constitui um dos capítulos mais importantes do curso Engenharia Química. O reator é considerado o coração de uma unidade industrial e para que esse seja bem projetado, se faz necessária uma boa compreensão dos fundamentos teóricos, como também o desenvolvimento de habilidades práticas relacionadas à operação dos reatores. Todos os semestres, o grupo PET- Engenharia Química da UFRRJ organiza a diversas atividades didáticas para o curso de graduação. Nos últimos anos, após pesquisas realizadas junto aos discentes, identificamos que as atividades que permitem a discussão dos conceitos teóricos abordados em sala de aula em conjunto com atividades práticas de laboratórios mostram-se bastante eficientes para consolidação e integração dos conteúdos ministrados nas disciplinas. Nesse contexto foi projetado e realizado um experimento para determinar e discutir a distribuição do tempo de residência de um reator tubular (PFR), aspectos sobre o modelo ideal e não ideal, sua operação industrial e os conteúdos pedagógicos da disciplina do curso cálculo de reatores. Para alcançar os objetivos foi montado um reator tubular de vidro com o propósito de facilitar a visualização o escoamento do fluido dentro do reator. O experimento foi realizado utilizando água e azul de metileno como traçador físico, não reativo, para análise da distribuição do tempo de resistência (DTR) do reator. Para o estudo da DTR, o azul de metileno foi alimentado no reator PFR utilizando uma seringa, aplicando um pulso de 5 segundos, técnica de estímulo e resposta. Após a injeção de todo azul de metileno (traçador) dentro do reator, foram coletadas 10 amostras em intervalos de tempo de 5 segundos, na saída do reator. Considerando que o reator é de vidro, os discentes puderam observar o escoamento do azul de metileno dentro do reator. As soluções foram coletadas e analisadas pelos discentes, usando espectrofotômetro para obtenção dos comprimentos de ondas das respectivas soluções. Usando os valores de comprimento de onda, os discentes determinaram a concentração de azul de metileno das respectivas soluções através de uma curva de calibração feita a partir de soluções de azul de metileno de concentração conhecida, previamente preparada. De posse desses resultados, foi construído um gráfico mostrando a concentração de azul de metileno da saída do reator em função do tempo. Num modelo não ideal, elementos de volume do traçador percorrerão todo reator PFR em tempos diferentes, fato esse que pode ser constatado através da variação da concentração do traçador na saída do reator. A DTR é usualmente representada pela fração do traçador na corrente de saída do reator com o tempo $E(t).dt$. A partir desses resultados foi possível discutir com a classe as percepções associadas aos modelos de mistura perfeita e escoamento empistonado confrontando-os com os modelos de escoamento não ideal.

Palavras-chave: Ensino-pesquisa; aprendizagem; reatores.

Referências Bibliográficas

- FOGLER, S. H. Elementos da Engenharia das Reações Químicas. 4^ª Edição, Editora LTC. 2015.
FROMENT, G. F.; BISCHOFF, K. B. Chemical Reactor Analysis and Design, J. Wiley, 1990.
LEVENSPIEL, O. Engenharia das Reações Químicas, Edgard Blücher, 2005

**ESTUDO DA PERDA DE CARGA NO ESCOAMENTO DE FLUIDO NÃO NEWTONIANO EM
COILED TUBING**

Bárbara Cavalcante Leal¹; Beatriz Rosas de Oliveira²; Eduardo Cunha Hora Paraíso³; Luís Américo Calçada⁴; Cláudia Miriam Scheid⁴

1. Bolsista de Iniciação Científica CNPq, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Mestranda PPGEQ, DEQ/IT/UFRRJ; 3. Pesquisador do Laboratório de escoamento de Fluidos Giulio Massarani; 4. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

O *coiled tubing* consiste em um tubo contínuo e flexível enrolado em um carretel podendo formar diversas camadas. O sistema pode ser feito de diferentes materiais e tem diversas aplicações de uso, como por exemplo, o fechamento e abandono de poços de petróleo. Neste processo, o *coiled tubing* é desenrolado em direção ao poço por onde são bombeados fluidos newtonianos, como água, e não newtonianos, como a pasta de cimento. É de vital importância prever as condições de processo para se obter a perda de carga e a pressão de bombeio adequada para escoamento do fluido que pode ser influenciada pela geometria do sistema, pelas propriedades do fluido e pelas condições de bombeamento. O objetivo deste trabalho é avaliar experimentalmente a perda de carga no escoamento de fluido não newtoniano em *coiled tubing* para diferentes vazões e, então, propor um modelo que ajuste os dados experimentais. Uma solução de goma xantana na concentração de 2 lb/bbl foi utilizada nos testes experimentais por ter um comportamento reológico semelhante à pasta de cimento antes da cura, caracterizado como pseudoplástico e descrito pelo modelo de *Power-law*. A unidade piloto utilizada é composta por um tubo de cobre enrolado em uma bobina tendo 380 metros de comprimento dividido em 8 camadas. Transdutores de pressão foram instalados em cada camada para aferir os dados de pressão ao longo do tempo e do espaço. Os experimentos foram realizados em triplicata bombeando-se água e goma xantana em dez vazões diferentes com aferição dos dados de pressão nas entradas e saídas das camadas. Percebeu-se que ao induzir o aumento da vazão no sistema e, conseqüentemente da taxa de cisalhamento, houve um aumento significativo da perda de carga. Ao se comparar a perda de carga obtida para água e goma xantana, em geral, o fluido não newtoniano apresentou maiores valores de perda de carga. Entretanto nas maiores vazões, o aumento da taxa gerou uma diminuição da resistência ao fluxo da goma xantana gerando menores perdas de carga em relação a água em uma mesma vazão. A metodologia de cálculo proposta considera a perda de carga total como a soma de perda de carga em cada camada e, a partir dos dados experimentais, um modelo de ajuste para o cálculo do fator de atrito foi proposto baseado na correlação de Mishra e Gupta (1979). Os dados experimentais foram simulados com um desvio relativo médio de 2,36%. Logo, a metodologia de cálculo da perda de carga em *coiled tubing* pode ser utilizada não apenas para simular os dados obtidos em laboratório, mas também dados de campo de bombeamento em *coiled tubing*.

Palavras-chave: Coiled tubing; perda de carga; fluido não-Newtoniano

Referências Bibliográficas

- FOX, Robert W.; MCDONALD, Alan T. Introduction to Fluid Mechanics, John Wiley & Sons. Inc., New York, 1994.
- MCCANN, R. C. et al. Frictional pressure loss during turbulent flow in coiled tubing. In: SPE Gulf Coast Section/ICoTA North American Coiled Tubing Roundtable. Society of Petroleum Engineers, 1996.
- MISHRA, P.; GUPTA, S. N. Momentum transfer in curved pipes.2. Non-Newtonian fluids. Industrial & Engineering Chemistry Process Design.

CLASSIFICAÇÃO SUPERVISIONADA DE IMAGENS LANDSAT DA REGIÃO OESTE DO ESTADO DA BAHIA UTILIZANDO O CLASSIFICADOR DE BHATTACHARYA**Sthefane Dias Alves¹; Felipe de Oliveira Lima² & Leandro Andrei Beser de Deus³ & Alessandra Carreiro Baptista⁴**

1. Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica. IT/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica; 3. Professor do DGF/IG/UERJ; 4. Professora do DE/IT/UFRRJ;

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O oeste do estado da Bahia é responsável por parte significativa da agricultura do Estado, sendo uma das principais fontes de renda para a população, concentrando a maior parte do Produto Interno Bruto (PIB) agropecuário da Bahia (IBGE, 2016), sendo as culturas mais relevantes produzidas a soja, milho e algodão. Avaliar o uso e cobertura do solo é imprescindível para analisar os impactos causados por mudanças gradativas, especialmente quando essas mudanças ocorrem de maneira desenfreada. Com o crescimento da agropecuária na região, viu-se a importância do acompanhamento da mesma. As imagens obtidas a partir do sensoriamento remoto são excelentes fontes de dados para a produção de mapas de uso e cobertura do solo. Para a produção desses mapas utilizou-se a classificação de imagens supervisionadas por regiões a partir de segmentação, que consiste na extração de informações reconhecendo padrões e objetos análogos. A principal vantagem de trabalhar com classificação por regiões é que as informações fornecidas com essa técnica são de natureza espacial, ou seja, não podem ser extraídas individualmente de pixels, levando em consideração todo o contexto espacial, por isso o classificador utilizado foi o *Bhattacharya* e este foi aplicado sobre o resultado da segmentação. As classes utilizadas no processo de classificação das imagens foram: água, floresta, agricultura e solo exposto. O *SPRING*, *software* utilizado, possui uma técnica de segmentação de imagens, com três funções principais: segmentação, treinamento e classificação. Foram utilizados dois cenários, o primeiro da década de 90 e o segundo da década de 2000. Foi possível identificar como resultado da classificação a crescente mudança do uso e ocupação do solo, onde no cenário da década de 90 a vegetação nativa era predominante na região de estudo e na década de 2000 o cenário mudou drasticamente, sendo a maior parte do uso e ocupação do solo destinado à agricultura, ocasionando uma perda de mais de 7.000 km² de vegetação para atividades agropecuárias. Neste contexto, pode-se afirmar o impacto ambiental negativo causado pelas atividades agropecuárias na região e a importância de estudos para recuperação das áreas degradadas, além de subsidiar o planejamento ambiental e territorial, para que o crescimento da agricultura não seja desordenado.

Palavras-chave: Sensoriamento remoto, agricultura, segmentação

Referências Bibliográficas

IBGE. PIB dos Municípios: Agropecuária representa mais da metade da atividade econômica em 1.135 municípios. Rio de Janeiro, 2016.

MICROPARTÍCULAS DE ALGINATO DE CÁLCIO CARREGADAS COM CALÊNDULA (*Calendula officinalis* L.) PARA TRATAMENTO DE FERIDAS**Natália Alves Conceição¹; Juliana Dumard Carracena Candido²; Ana Paula Duarte Moreira³ & Renata Nunes Oliveira⁴**

1. Discente do curso de Engenharia de Materiais, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Bolsista Capes, Discente do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química; 3. Pesquisadora do PEMM/COPPE/UFRRJ; 4. Professora do DEQ/IT/UFRRJ

Grande área: Engenharia

RESUMO

A Calêndula (*Calendula officinalis* L.) é uma planta originária de países da Europa central, sendo cultivada em diversas partes do mundo, incluindo o Brasil. A planta apresenta características anti-inflamatória, antitumoral, antioxidante, cicatrizante, etc. Essas características estão ligadas à sua composição química, por possuir flavanoides e triterpenos em especial os monoésteres de faradiol, sendo então usada amplamente no tratamento de feridas. O Alginato é um polímero de ocorrência natural, sendo um biopolímero bastante utilizado na área de carregamento de fármacos, na biomedicina e na engenharia por ter biocompatibilidade, baixa toxicidade e custo baixo de produção. Por possuir capacidade de gelificar em presença de cátions divalentes, ele vem sendo amplamente utilizado como carreador de fármacos, seja por via oral ou intravenosa. O objetivo desse trabalho é produzir e caracterizar micropartículas de alginato de cálcio carregadas com extrato de calêndula (*Calendula officinalis* L.) para potencial uso em tratamento de feridas cutâneas. As micropartículas foram produzidas através da técnica de extrusão. Uma solução de alginato de sódio 1% m/v foi preparada (dissolução de 0,1 g de alginato de sódio diluída em 9 mL de água deionizada) sendo acrescentado 1mL de extrato de calêndula, após essa dissolução. A solução é gotejada em solução reticulante de cloreto de cálcio (CaCl_2 , 0,015 mol/L), sob agitação magnética. Após 2 minutos com auxílio de uma peneira, as micropartículas foram retiradas do banho reticulante e lavadas com água deionizada e secas em estufas por cerca de 24 horas. As micropartículas foram caracterizadas através da técnica de FTIR (Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de Fourier) e MEV (Microscopia Eletrônica de Varredura). Os resultados obtidos mostraram que houve um deslocamento das bandas de alginato (1413 e 1378 cm^{-1} correspondentes ao carboxilato) e do extrato de calêndula (1647 cm^{-1} correspondente a amida I, 1230 cm^{-1} a grupos éter e 1049 cm^{-1} a flavonoides), devido à interação dos dois componentes. Já os resultados obtidos através do MEV mostraram que as micropartículas são irregulares, apresentando um tamanho médio de $10 \mu\text{m}$. Assim sendo, verificou-se uma interação entre o alginato e o extrato de calêndula (*Calendula officinalis* L.) nas micropartículas produzidas com tamanho médio de $10 \mu\text{m}$. As próximas etapas do trabalho incluem o teste de liberação de fármaco e ensaios microbiológicos.

Palavras-chave: Hidrogel; phaeophyceae; gelificar; malmequer; biopolímero.

Referências Bibliográficas

- CITADINI-ZANETTE, V.; NEGRELLE, R. R. B.; BORBA, E. T. *Calendula officinalis* L. (Asteraceae): Aspectos botânicos, ecológicos e usos. *Visão Acadêmica*, Curitiba, v. 13, n.1, p. 6-23, 2012.
- LEE, K. Y.; MOONEY, D. J. Alginate: Properties and biomedical applications. *Progress in Polymer Science*, v. 37, n. 1, p. 106-126, 2012.
- IOANA-RALUCA BUNGHEZ, RODICA-MARIANA ION. Complex spectral characterization of active principles from marigold (*Calendula officinalis*). *Journal of Science and Arts*, v. 1, n. 14, p. 59-64, 2011.

ADSORÇÃO E DESSORÇÃO DE COMPOSTOS FENÓLICOS UTILIZANDO RESINAS MACROPOROSAS A PARTIR DA CASCA DO CAFÉ

Leticia Figueiredo De Araujo¹; Jessica Batista Da Costa²; Dyana Aparecida Ribeiro Damasio³; José Lucena Barbosa Júnior⁴

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Mestre em Engenharia de Alimentos DTA/UFRRJ; 3. Discente do Curso de Engenharia Química DEQ/UFRRJ; 4. Professor do DTA/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

O café é uma das bebidas mais consumidas no mundo e o Brasil é o maior produtor. Apesar de sua grandiosidade, o processamento do café apresenta dificuldades com seu resíduo gerado, o qual representa 20% de sua produção e possui substâncias biotivas importantes, como os compostos fenólicos. Logo, alternativas para obtenção dessas substâncias de forma econômica e sustentável é de grande interesse. Nesse contexto, o uso das resinas macroporosas tem se mostrado uma alternativa. Apesar do enorme potencial deste processo, nenhum trabalho utilizando resinas macroporosas na separação de compostos fenólicos de cascas do café está disponível na literatura. Sendo assim, este trabalho teve por objetivo avaliar a adsorção e dessorção desses compostos em diferentes tipos de resinas macroporosas. Foram avaliadas a adsorção e dessorção de compostos fenólicos provenientes do extrato de cascas de café da variedade *Coffea canephora* em seis diferentes tipos de resinas macroporosas (XAD 7HP, XAD 16, XAD 4, XAD 1180N, XAD 2 e DAX 8) em diferentes pH's (3,0; 5,0; 9,0 e 11,0). Para a utilização da resina, é feito um pré-tratamento com a utilização de álcool, HCl, NaOH e água destilada. A seguir, foram realizados os ensaios de adsorção, foram testadas seis resinas a 25 mL do extrato no shaker em diferentes pH's por 24h em 30°C. Em seguida, para os ensaios de dessorção, as resinas foram adicionadas a 25 mL de etanol no shaker a 50°C. Os ensaios de adsorção e dessorção apresentaram os melhores percentuais de recuperação de fenólicos para a XAD 7HP, pois apresenta uma grande área de superfície e alta polaridade, demonstrando afinidade com os ácidos fenólicos e a XAD 16, devido à sua área de superfície. Foram aplicados os modelos de isotermas de Langmuir, Freundlich e Henry, onde o que melhor se ajustou aos dados experimentais obtidos para a resina XAD 7HP foi o Langmuir e para a resina XAD 16 foi o de Freundlich. Também foram calculados os parâmetros termo dinâmicos. Os dados experimentais das cinéticas de adsorção em diferentes temperaturas foram submetidos aos modelos de pseudo - primeira e segunda ordens, a fim de descobrir o tempo de equilíbrio de adsorção, e o que melhor se ajustou aos dados de ambas as resinas foi o de pseudo segunda ordem. Quanto a cinética de adsorção, a XAD 7HP atingiu o equilíbrio em 180 min, entretanto, durante os 10min iniciais foi observado uma rápida adsorção. Já a XAD 16, a capacidade de adsorção aumentou de forma gradual até atingir 240 min. Os perfis de fenólicos dos extratos purificados (após a dessorção) foram avaliados por análise de CLAE e houve alteração desses perfis em função do tipo de resina utilizada. Por fim, no extrato, foi obtido um perfil de fenólicos majoritariamente de ácidos clorogênico e cafeico e derivados do ácido clorogênico, a XAD 7HP recuperou cerca de 90% das substâncias citadas, entretanto, a XAD 16 foi mais seletiva para os derivados de ácido clorogênico. O processo de separação utilizando as resinas se mostrou eficiente.

Palavras-chave: *Coffea canephora*; Resinas Macroporosas; Adsorção.

Referências Bibliográficas

- ZHONG, J. L. et al. A simple and efficient method for enrichment of cocoa polyphenols from cocoa bean husks with macroporous resins following a scale-up separation. **Journal of Food Engineering**, v. 243, p. 82–88, 2019.
- ROSTAGNO, M. A. et al. **Phenolic Compounds in Coffee Compared to Other Beverages**. [s.l.] Elsevier Inc., 2014.

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DE PASTA DE CIMENTO EM *COILED TUBING* PARA PREVISÃO DA PERDA DE CARGA E DO GRADIENTE DE TEMPERATURA

**Leonidas Pereira Filho¹; Beatriz Rosas de Oliveira²; Eduardo Cunha Hora Paraiso³;
Claudia Miriam Scheid⁴, Luís Américo Calçada⁴**

1. Bolsista PIBIC / Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ / Aluno (a) de Iniciação Científica, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Aluno (a) de Mestrado em Engenharia Química, PPGEQ/IT/UFRRJ; 3. Pesquisador do Laboratório de escoamento de Fluido Giulio Massarani (LEF), DEQ/IT/UFRRJ; 4. Professor (a) do DEQ/IT/UFRRJ

RESUMO

Todo poço construído um dia será fechado e abandonado. Devido à má operação de fechamento, com o passar do tempo, criaram-se regulamentos mais rigorosos, levando a um desenvolvimento e aprimoramento nos processos de perfuração e fechamento dos poços. O processo de fechamento pode ser realizado utilizando tampões de cimento ou mecânicos. O objetivo é impedir a migração de fluido para a superfície do terreno ou fundo do mar, dependendo do terreno, evitando a contaminação de aquíferos. O processo de abandono e fechamento de poços não traz nenhum retorno financeiro, fazendo com que as empresas busquem soluções que possam minimizar os custos sem prejuízos à segurança e eficiência do projeto. Utiliza-se então o sistema de *coiled tubing* que consiste em um tubo longo, flexível e contínuo enrolado em uma bobina (flexitubos). A utilização deste sistema elimina a necessidade de outros equipamentos de perfuração como os *drill pipes*, podendo ser utilizado em outros processos. Contudo, apesar da eficiência dos flexitubos, durante o escoamento dos fluidos ocorre uma perda de carga significativa e variações de temperatura – calor recebido devido ao atrito com a parede do tubo durante o escoamento e calor cedido por troca térmica com o ambiente – que provocam alterações nas propriedades físico-químicas e no tempo de cura da pasta de cimento. Diante disso torna-se essencial o mapeamento das variações de perda de carga e temperatura. O objetivo deste trabalho foi simular perfis dinâmicos de perda de carga e temperatura no escoamento de fluidos em *coiled tubing*. A fim de validar a modelagem proposta, dados de campo de bombeamento de água e pasta de cimento foram utilizados. O processo foi modelado com base em balanços de energia, para o fluido e para o tubo, e as equações foram implementadas em linguagem FORTRAN, no Laboratório de Escoamento de Fluidos Giulio Massarani (LEF). As equações diferenciais que descrevem e interrelacionam as trocas térmicas entre fluido, metal e ambiente foram resolvidas discretizando o espaço através de volumes finitos e integrando no tempo utilizando o pacote DASSL (Fortran). A partir de dados de entrada no programa (vazão, tempo de bombeamento, geometria do tubo e propriedades dos fluidos), são gerados perfis de pressão e temperatura ao longo do espaço (comprimento do tubo) e do tempo. Foi projetada uma unidade experimental que simula o processo de escoamento da pasta, para estimar os coeficientes de troca térmica e a correlação de fator de atrito. Os dados experimentais obtidos em laboratório e os obtidos em uma plataforma de perfuração *offshore* foram utilizados a fim de validar a eficácia do modelo. O erro médio relativo obtido na obtenção de perfis de pressão e temperatura foi menor que 7%.

Palavras-chave: transferência de calor; modelagem; *coiled tubing*.

AVALIAÇÃO DA TROCA TÉRMICA NO ISOLAMENTO DE FLUIDO NEWTONIANO EM COILED TUBING**Lorena Rodrigues Justino¹; Beatriz Rosas Oliveira²; Eduardo Cunha Hora Paraíso³; Luís Américo Calçada⁴ & Cláudia Miriam Scheid⁴**

1. Aluna de Iniciação Científica, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Mestranda PPGEQ, DEQ/IT/UFRRJ; 3. Engenheiro Químico no Laboratório de Escoamento de Fluidos, UFRRJ; 4. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Sabe-se que na indústria de petróleo, todo poço construído um dia será abandonado seja para evitar um dano ambiental ou quando sua exploração não é mais economicamente viável. Utilizado em diversas aplicações na área do petróleo, o sistema *coiled tubing* é composto por uma bobina e um tubo de aço enrolado longo e flexível, onde parte do tubo fica enrolado em um carretel, enquanto a outra parte é direcionada ao poço. Neste tubo, bombeia-se água, pasta de cimento e fluido de deslocamento, que são fluidos fundamentais para o abandono do poço. Este é feito por meio de tampões de cimento em diversas profundidades, em que a pasta de cimento é bombeada através da parte enrolada do sistema, na qual há troca de calor entre o fluido e o ambiente. Torna-se de suma importância o estudo da troca térmica de fluidos em um sistema *coiled tubing*, principalmente no escoamento de pastas de cimento. Dessa forma será possível evitar que a mesma cure antes do tempo previsto. Neste trabalho, buscou-se construir uma unidade piloto que fosse correspondente ao caso real. Utilizou-se uma bobina com tubo de cobre enrolado que possui 380 m de comprimento dividido em 8 camadas onde em cada camada há medições de temperatura e pressão. Visto isso, o objetivo deste trabalho é propor um balanço de energia que busque prever essa troca térmica entre a energia recebida na forma de calor por conta do atrito e convecção interna forçada e a trocada com o ambiente. O modelo proposto foi construído a partir das seguintes considerações: na primeira e na oitava camada, considerou-se o ganho da taxa de calor por atrito e por convecção interna, bem como a perda da taxa de calor por convecção natural e radiação; e a partir da segunda até a sétima camada, desprezou-se a taxa de calor perdida por convecção natural e radiação, pois nessa região não há troca de calor com o ambiente. A fim de validar a modelagem proposta, fez-se um planejamento experimental em três níveis de temperatura e vazão em regime turbulento, sendo que no ponto central foram realizadas duplicatas. A água foi bombeada na unidade experimental e a temperatura ao longo das diferentes camadas do sistema *coiled tubing* foi acompanhada ao longo do tempo por meio de termopares. Os resultados obtidos através do modelo construído se ajustaram aos dados experimentais, gerando erros menores que 1%, podendo simular não apenas os dados obtidos em laboratório, mas também dados de campo de bombeamento de água em *coiled tubing*.

Palavras-chave: Flexitubos, transferência de calor e cimentação.

Referências Bibliográficas

- PEREIRA, C. E. G. Estudo da Perda de Carga no Escoamento de Fluidos Newtonianos em *Coiled Tubing*. 2018. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) Instituto de Tecnologia, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.
- BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S.; INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa, 7 ed., Rio de Janeiro: LTC, Cap. 9, p. 386, 389, 390, 2014.
- CHURCHILL, S. W.; CHU, H. H. S. Int. J. Heat Mass Transfer, 18, p. 1049 e 1323, 1975.

DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE ATIVIDADE EM DILUIÇÃO INFINITA DE SISTEMAS TERNÁRIOS ÁLCOOL/ÁGUA/SAL INORGÂNICO UTILIZANDO A MICROEXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA (SPME)**André N. Pereira¹, Rayane M. Assis, Gerson L. V. Coelho, Filipe A. Furtado**

1. Bolsista de Iniciação Científica, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias**RESUMO**

O conhecimento das propriedades termodinâmicas de equilíbrio de fases é fundamental para compreender a interação entre soluto-solvente a nível molecular e de processos termodinâmicos. Tais propriedades são fundamentais no projeto de equipamentos que utilizam processos de separação e purificação como base. Além disso, estes procedimentos costumam ser etapas de elevado custo em plantas industriais. Entretanto, dados experimentais de diversas misturas ainda não estão disponíveis na literatura. Um dos fatores que contribuem para esse cenário é a limitação das técnicas tradicionais quando aplicadas a sistemas mais complexos (e.g. sistemas com mais de dois componentes, multifásicos). Logo, é necessário desenvolver técnicas alternativas mais simples experimentalmente, com menor custo e aplicável a diversos sistemas para determinação de propriedades termodinâmicas, objetivando atender às necessidades da indústria. Dentre as diversas técnicas analíticas, experimentos envolvendo a microextração em fase sólida (SPME – “Solid Phase Microextraction”) são rápidos, relativamente baratos e de fácil implementação, tendo sido amplamente aplicada para o estudo do equilíbrio líquido-vapor de misturas. Neste trabalho, a técnica de SPME foi utilizada para determinar o coeficiente de atividade em diluição infinita (γ_i^∞) de sistemas ternários álcool/água/sal inorgânico nas temperaturas de 25, 45 e 60°C e pressão de 1 atm. Os alcoóis utilizados foram etanol, 1-propanol e 1-butanol. Os sais inorgânicos utilizados foram Carbonato de Sódio (Na_2CO_3), Sulfato de Sódio (Na_2SO_4) e Nitrato de Sódio (NaNO_3) em concentrações de 0,528, 1,368 e 2,121 molal. Os resultados de coeficiente de atividade foram avaliados para identificar o sal que promove a maior separação da mistura etanol-água. O efeito de “salting out” (aumento da disponibilidade de um dado componente na fase vapor devido à adição de um eletrólito à mistura) foi observado com menor intensidade para o NaNO_3 e com maior intensidade para o Na_2SO_4 e Na_2CO_3 . Dentre os sais que promoveram maior efeito de “salting out”, o Na_2SO_4 foi o que apresentou a maior influência no fator de separação. Isso é observado através dos maiores valores de coeficiente de atividade em diluição infinita, determinados experimentalmente, para os alcoóis utilizados neste estudo. Isto pode ser explicado pela maior interação entre o ânion sulfato (SO_4^{2-}) e água do que o para o ânion carbonato (CO_3^{2-}) e água. Os resultados de coeficiente de atividade em diluição infinita obtidos utilizando a SPME foram comparados quantitativamente com dados existentes na literatura, indicando que a técnica de SPME é um método alternativo válido para determinação de coeficientes de atividades em diluição infinita.

Palavras-chave: Cromatografia a gás, coeficiente de partição, efeito salting out, eletrólitos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- F. A. FURTADO, G. L. V. COELHO. *Determination of infinite dilution activity coefficients using HS-SPME/GC/FID for hydrocarbons in furfural at temperatures of (298.15, 308.15, and 318.15) K*, J. Chem. Thermodyn. 49 (2012), 119-127.
- A.M. Elias, F.A. Furtado, G.L.V. Coelho, *Determination of infinite dilution activity coefficient in ethanol-water-salt systems using SPME-GC-FID*, Quim. Nova 37 (2014), 1177-1181.
- SANTOS, B. R.; ELIAS, A. M.; COELHO, G. L. V., *Use of HS-SPME for analysis of the influence of salt concentration and temperature on the activity coefficient at infinity dilution of ethanol-water-salt systems*, Fluid Phase Equilibria, 429, 21-26, 2016.

OBTENÇÃO DE ZEÓLITA Y MESOPOROSA ATRAVÉS DE TRATAMENTOS PÓS-SÍNTESE DE DESSILICAÇÃOEvilin Lima Heiderick dos Santos¹ & Lindoval Domiciano Fernandes²

1. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Professor do DEQ/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Este trabalho objetivou o preparo de uma amostra de NaY a partir de procedimentos da literatura e seu tratamento com hidróxido de sódio ou hidróxido de tetrametilamônio, variando as concentrações, na presença ou ausência de brometo de cetiltrimetilamônio para a obtenção de mesoporos através da dessilicação. Estas foram submetidas à troca iônica com cloreto de amônio e foram calcinadas para a conversão da forma ácida. As amostras HY foram caracterizadas por difração de raios X e em outra etapa foram realizadas as avaliações catalíticas através da reação de craqueamento de n-heptano, em que os principais produtos obtidos são propano e iso-butano. As amostras sintetizadas inicialmente apresentaram fases contaminantes e em alguns casos houve a formação de zeólitas PHI, dessa forma, utilizou-se uma amostra de NaY comercial como partida para a dessilicação e sequencia dos demais experimentos. De posse dos resultados experimentais, observou-se através da avaliação catalítica que a utilização da base NaOH em concentrações 0,02 M não provocou a dessilicação, uma vez que a amostra sem surfactante não reagiu e na presença do surfactante atingiu conversão máxima de apenas 1,54%. Para concentrações 0,1 M da mesma base, as conversões máximas foram 1,53% e 1,69% para amostras na ausência e presença de surfactante, respectivamente. Concentrações maiores que 0,05 M dessa base podem levar a alta degradação da zeólita de acordo com SHUTKINA *et al*, o que explica as baixas conversões. Já a utilização da base TMAOH em concentrações 0,25 M levou a conversões também baixas, 1,34% sem CTABr e 1,62% com CTABr. Ao passo que a uma concentração de 0,5 M as conversões foram maiores 2,79% e 6,32%, demonstrando que quanto maior a concentração da solução de TMAOH, maior o volume de mesoporos formados e maior a conversão nos produtos desejados. Além disso, os melhores resultados apresentados para este último experimento podem ser explicados primeiramente pelo uso da base TMAOH, que é mais macia e atua seletivamente na estrutura da zeólita para formar mesoporos, ao invés de degradar totalmente seus cristais, e segundo pela ação conjunta do surfactante que evita a ação profunda da base e promove a formação de poros com tamanhos definidos. Devido às amostras terem apresentado baixas conversões de maneira geral, pode-se concluir que mesmo após a troca iônica houve a permanência de íons Na⁺, interferindo na ativação dos sítios ácidos.

Palavras-chave: zeólitas mesoporosas; dessilicação; tratamento alcalino; troca iônica; difração de raios X; avaliação catalítica.

Referências Bibliográficas

- EGEBLAD, K. *et al*. Templating mesoporous zeolites. Chem. Mater., v. 20, n. 3, p. 946–966, 2008.
GROEN, J. C. *et al*. Alkaline-mediated mesoporous mordenite zeolites for acid-catalyzed conversions. J. Catal., v. 251, p. 21–27, 2007.
SHUTKINA, O. V.; KNYAZEVA, E. E.; IVANOVA, I. I. Preparation and Physicochemical and Catalytic Properties of Micro Mesoporous Catalysts Based on Faujasite. v. 56, n. 2, p.158–165, 2016.

**INFLUÊNCIA DO TAMANHO DE AGREGADOS DE ROCHAS ORNAMENTAIS NAS
PROPRIEDADES TECNOLÓGICAS DE PRODUTOS CIMENTÍCIOS**
Evander Leal Pereira¹ & Simone Pereira Taguchi Borges²

1. Aluno PICV, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Com a escassez dos recursos naturais disponíveis para o homem, repensar e otimizar o gerenciamento de matéria prima é um dos maiores desafios no futuro para as engenharias. Os produtos cimentícios surgem como potenciais alternativas para utilização do resíduo industrial, além de possibilitar a confecção de novos produtos que possam vir a favorecer economicamente o mercado da construção civil e correlatos. Este trabalho tem como objetivo estudar a possibilidade de se utilizar resíduos de rochas ornamentais (granito e mármore) como agregado graúdo em pisos intertravados. Foi avaliado a influência do tamanho e morfologia dos agregados obtidos pela britagem de cacos de resíduos rochosos em três frações de tamanho, nas propriedades físicas de corpos de prova de concreto, composto da proporção de 1: 1,2: 3 de cimento: areia: agregado graúdo, respectivamente. Estes pós foram misturados com água (relação água-cimento 0,5) e derramados em moldes de formato cilíndrico de dimensões $\varnothing 5 \times 10$ cm, conforme solicitado pela NBR 7215. Em seguida, os moldes foram vibrados com a finalidade de eliminar os espaços vazios nas amostras. Conforme a norma NBR 9778, os pisos intertravados precisam alcançar no mínimo 35 MPa de resistência à compressão e absorção de água por imersão inferior à 6,2% após 28 dias de cura, totalmente submersos em água em recipiente fechado. As amostras foram caracterizadas por técnicas microscópicas óptica (MO), por difração de raios X (DRX), ensaios de compressão e absorção de água após moldagem e cura. Os resultados obtidos após os ensaios mostraram que há, de fato, influência do tamanho e morfologia dos resíduos sólidos de rochas ornamentais nas propriedades tecnológicas das placas cimentícias quando são utilizadas como agregado graúdo. Embora os corpos de prova com tamanho médio de agregados tenham mostrado os valores mais altos para resistência à compressão entre os três tipos de agregados utilizados para este trabalho, estes não foram satisfatórios para a absorção de água. Os valores de resistência à compressão, em MPa, foram $5,75 \pm 0,71$, $6,24 \pm 2,98$ e $4,65 \pm 1,70$ para as amostras pequena, média e grande, respectivamente. Para absorção de água por imersão, as amostras, em mesma sequência, forneceram os valores de $6,10\% \pm 0,0363\%$, $6,43\% \pm 0,127\%$ e $6,16\% \pm 0,159\%$. Segundo os resultados obtidos, os cacos de resíduos de mármore e granito não podem ser utilizados como agregado graúdo na fabricação de pisos intertravados.

Palavras-chave: Desenvolvimento sustentável; rochas ornamentais; agregados; tamanho; morfologia; concreto.

Referências Bibliográficas

- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. Cimento Portland – Determinação da resistência à compressão – NBR 7215, Rio de Janeiro, 1995.
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. Argamassa e concreto endurecidos - Determinação da absorção de água por imersão - Índice de vazios e massa específica – NBR 9778, Rio de Janeiro, 2009.
- OLIVEIRA, H. M. In: FALCÃO BAUER, L. A. Materiais de Construção Volume 1. 5ª ed. LTC editora, Rio de Janeiro, 2000.

USO DE UM APLICATIVO DE VISÃO COMPUTACIONAL PARA ANÁLISE DE IMAGENS DE PROCESSOS DINÂMICOS

André Christiano Claro Miguel¹, Caroline Dias Grossi², Luís Américo Calçada³, Cláudia Miriam Scheid³ e Luiz Augusto da Cruz Meleiro³

¹Bolsista de Iniciação Científica PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; ²Bolsista CAPES, Mestranda do PPGEQ/UFRRJ, ³Professores do DEQ/IT/UFRRJ

Grande área: Engenharias

RESUMO

O trabalho trata da aplicação da visão computacional na análise de um processo dinâmico constituído de um silo de alimentação contínua de sólidos, uma câmera para filmagem e um *software* para processamento de imagens. O sistema de alimentação contínua de sólidos foi montado e grãos de milho foram escoados através da calha do silo vibratório por meio da variação da intensidade de agitação utilizando-se um potenciômetro. A filmagem do escoamento teve foco centralizado na calha por onde os grãos escoavam. As imagens adquiridas foram processadas pelo aplicativo desenvolvido, escrito em MATLAB, com o qual foi possível verificar a capacidade do programa de visão computacional proposto de estimar a taxa de grãos escoando em função da potência de agitação. O algoritmo do programa consiste em carregar os vídeos do escoamento de grãos pela calha do alimentador e determinar o número de *frames* correspondente ao tempo de cada filme. Conhecido o tempo de filmagem e o número de *frames* do vídeo, foi determinado, por meio da análise visual das imagens, o número real de grãos que escoava na calha por segundo (NRG/s). Após a contagem dos *frames*, o programa executa uma série de funções para aplicar filtros de contraste, nitidez e brilho, minimizando o reflexo da imagem do grão na calha de metal para evitar a contagem equivocada de grãos. Na sequência, a imagem é binarizada e são traçadas as regiões limites de interesse, as características estatísticas são calculadas e, com essas informações, o aplicativo foi capaz de identificar e realizar a contagem do número de grãos por *frame* e, assim, estimar quantos grãos passavam por segundo na calha (NEG/s). Para o experimento com 40% de potência aplicada ao alimentador, o erro médio entre o número real de grãos e o número estimado de grãos pelo aplicativo foi de 17,5%. Os erros verificados na contabilização foram causados pelo reflexo dos grãos na calha ou à sua aglomeração durante o escoamento. De acordo com os resultados apresentados, o *software* de visão computacional foi capaz de estimar a taxa de escoamento de grãos com erro médio aceitável e, apesar das falhas apresentadas nessa versão inicial, o *software* tem potencial para fornecer resultados mais precisos e, em tese, pode ser empregado na análise dinâmica de qualquer tipo de sólido detectável por imagem de vídeo.

Palavras-chave: Inteligência artificial; Machine learning; Redes neurais convolucionais.

Referências Bibliográficas

- BACKES, A.R.; SÁ Jr, J.J.M. Introdução à Visão Computacional Usando MATLAB. Alta Books Editora, Rio de Janeiro, 2016.
BISHOP, C. M. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer New York, 2016
FORSYTH, D. A. and PONCE, J., *Computer Vision. A Modern Approach*, Prentice Hall, 2003.

USO DE UM APLICATIVO DE VISÃO COMPUTACIONAL PARA ANÁLISE DE IMAGENS DE PROCESSOS DINÂMICOS

André Christiano Claro Miguel¹, Caroline Dias Grossi², Luís Américo Calçada³,
Cláudia Miriam Scheid³ e Luiz Augusto da Cruz Meleiro³

¹Bolsista de Iniciação Científica PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ;

²Bolsista CAPES, Mestranda do PPGEQ/UFRRJ, ³Professores do DEQ/IT/UFRRJ

Grande área: Engenharias

RESUMO

O trabalho trata da aplicação da visão computacional na análise de um processo dinâmico constituído de um silo de alimentação contínua de sólidos, uma câmera para filmagem e um *software* para processamento de imagens. O sistema de alimentação contínua de sólidos foi montado e grãos de milho foram escoados através da calha do silo vibratório por meio da variação da intensidade de agitação utilizando-se um potenciômetro. A filmagem do escoamento teve foco centralizado na calha por onde os grãos escoavam. As imagens adquiridas foram processadas pelo aplicativo desenvolvido, escrito em MATLAB, com o qual foi possível verificar a capacidade do programa de visão computacional proposto de estimar a taxa de grãos escoando em função da potência de agitação. O algoritmo do programa consiste em carregar os vídeos do escoamento de grãos pela calha do alimentador e determinar o número de *frames* correspondente ao tempo de cada filme. Conhecido o tempo de filmagem e o número de *frames* do vídeo, foi determinado, por meio da análise visual das imagens, o número real de grãos que escoava na calha por segundo (NRG/s). Após a contagem dos *frames*, o programa executa uma série de funções para aplicar filtros de contraste, nitidez e brilho, minimizando o reflexo da imagem do grão na calha de metal para evitar a contagem equivocada de grãos. Na sequência, a imagem é binarizada e são traçadas as regiões limites de interesse, as características estatísticas são calculadas e, com essas informações, o aplicativo foi capaz de identificar e realizar a contagem do número de grãos por *frame* e, assim, estimar quantos grãos passavam por segundo na calha (NEG/s). Para o experimento com 40% de potência aplicada ao alimentador, o erro médio entre o número real de grãos e o número estimado de grãos pelo aplicativo foi de 17,5%. Os erros verificados na contabilização foram causados pelo reflexo dos grãos na calha ou à sua aglomeração durante o escoamento. De acordo com os resultados apresentados, o *software* de visão computacional foi capaz de estimar a taxa de escoamento de grãos com erro médio aceitável e, apesar das falhas apresentadas nessa versão inicial, o *software* tem potencial para fornecer resultados mais precisos e, em tese, pode ser empregado na análise dinâmica de qualquer tipo de sólido detectável por imagem de vídeo.

Palavras-chave: Inteligência artificial; Machine learning; Redes neurais convolucionais.

Referências Bibliográficas

BACKES, A.R.; SÁ Jr, J.J.M. **Introdução à Visão Computacional Usando MATLAB**. Alta Books Editora, Rio de Janeiro, 2016.

BISHOP, C. M. **Pattern Recognition and Machine Learning**. Springer New York, 2016.

FORSYTH, D. A.; PONCE, J., **Computer Vision. A Modern Approach**, Prentice Hall, 2003.

VIDRO SODA-CAL: CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X E AVALIAÇÃO DO TEMPO DE MOAGEM**Jônatas de Oliveira Sousa¹; Belmira Benedita de Lima-Khun² & Antonio Renato Bigansolli²**

1. Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professor do Departamento de Engenharia Química, IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

O vidro e suas propriedades têm sido estudado nas últimas décadas e alguns países já empregam o uso do vidro como carga em concreto. Pesquisadores Australianos atualmente já desenvolvem projetos baseados na aplicação do vidro moído em concretos para construção civil já sinalizando a importância do vidro e seus benefícios como carga de reforço. A reciclagem de resíduo, envolve análise química e microestrutural, além da caracterização física do material. A viabilidade do uso de resíduo leva em consideração possibilidades de risco ambiental gerado em seu uso, incluindo os impactos ambientais advindo do novo produto e seus benefícios aos usuários. Um dos fatores mais importantes na aplicação do vidro como carga é o seu grau cristalinidade, seu teor de sílica e a sua granulometria. O tamanho de partícula mostrou-se necessário e de grande importância para a aplicação e eficiência dos materiais. A análise do tamanho de partícula bem como o conhecimento da Distribuição granulométrica é fundamental para os processos que utilizam sistemas de materiais particulados. O objetivo deste trabalho foi analisar o efeito do tempo de moagem na distribuição granulométrica do vidro soda-cal por meio de Difração a laser e Difração de Raios-X. Garrafas de cerveja comumente usadas nas indústrias de bebida de cor âmbar foram utilizadas nesse experimento. Inicialmente as garrafas foram fragmentadas manualmente para tomar dimensões proporcionais ao moinho de alta energia. Após a fragmentação manual uma separação granulométrica foi feita utilizando um agitador de peneiras e um conjunto de peneiras com os tamanhos de 9#, 10#, 32#, 48#, 60#, 80# e 150#. Foram separadas 3 amostras denominadas A1, A3 e A6 composta por 50 g de amostra cada com tamanhos de partícula entre 1,7 e 2,0 mm (retidos na peneira de 10#). Cada amostra foi levada ao moinho de alta energia por um tempo sendo 10, 30 e 60 minutos os tempos respectivos das amostras A1, A3 e A6 e velocidade de rotação de 400 rpm para todas as amostras. A análise dos difratogramas das amostras indica uma modificação na linha de base que caracteriza a fase amorfa e a ausência de fase cristalina muito comum em materiais com fase vítrea. Na análise da distribuição granulométrica das amostras feitas por difração a laser, A1 resultou em 87% das partículas com tamanhos que variam entre 1µm e 30µm, uma redução significativa em comparação com seu tamanho inicial. Além disso, a amostra apresentou um diâmetro de Sauter de 3,494 µm. A amostra A3 teve 84% das partículas com tamanhos entre 1µm e 30µm, contudo 13% do total de amostra tinham tamanhos menores que 1µm (na amostra A1 esse valor era de apenas 4%). O diâmetro de Sauter da amostra A3 foi de 2,984 µm. A amostra A6 apresentou resultados bem diferentes das amostras anteriores. 20% das amostras ficaram acima de 30 µm com presença inédita de partículas maiores que 100 µm. Acreditamos que isso aconteceu devido à influência do coeficiente de atrito de partículas médias geradas no processamento do vidro. O diâmetro de Sauter da amostra A6 foi de 3,135 µm.

Palavras chave: Tecnologia do pó, Moinho de alta energia, Vidro, Difração a laser.

Referências Bibliográficas

- CRENTSIL, K. S; BROWN, T., TAYLOR, A. Recycled glass as sand replacement in premix concrete, Ed. Eco- Recycled Australia and CSIRO, 2001.
MEHTA, P. K; MONTEIRO, P. J. M. Concreto: microestrutura, propriedades e materiais. 3. ed. São Paulo: Ibracon (Instituto Brasileiro do Concreto). 2008.
JILLAVENKATESA, A; DAPKUNAS S. J; LUM L. H; GOETZEL, G. C. *Particle Size Characterization*, NIST Recommended Practice guide - Special Publication 960-1, Washington, 2001

CARACTERIZAÇÃO POR ANÁLISE DE FTIR E ESTUDO DO EFEITO DA VELOCIDADE DE ROTAÇÃO NA MOAGEM DO VIDRO SODA-CAL**Jônatas de Oliveira Sousa¹; Belmira Benedita de Lima-Khun² & Antonio Renato Bigansolli²**

1. Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professor do Departamento de Engenharia Química, IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

O Brasil é um dos maiores produtores de vidro da América Latina, sendo que 45% da matéria prima das indústrias são substituídas por cacos oriundos de coleta seletiva e de refugos nas fábricas. Os cacos provenientes de coleta seletiva são constituídos de lâmpadas, potes de alimentos, garrafas e outros tipos. Apesar dessa iniciativa de substituição por cacos na produção do vidro, o índice de reciclagem ainda é baixo (2% do lixo gerado são compostos por vidro). O vidro tem um tempo de decomposição estimado em um milhão de anos sendo assim essencial o estudo e desenvolvimento de diversas maneiras de reintroduzir esse material no processo produtivo. Paiva (2009) afirma que os problemas em torno da destinação dos vidros acumulados, seria sua aplicação como carga ou aditivo em concretos, enfatizando que a composição do vidro baseada em sílica melhoraria as propriedades mecânicas e a durabilidade da argamassa. Nas aplicações do vidro as chamadas *milled glass* (vidro moído em escala micrométrica ou nanométrica) tem se destacado. Na área odontológica, novas formulações do vidro aprimoram os índices de radiopacidade e refração que são usados no estudo de novos compósitos com resinas curáveis com radiação ultravioleta. Esses materiais agregam propriedades funcionais como durabilidade, desempenho e estética. O objetivo deste trabalho foi avaliar o efeito de diferentes velocidades de rotação do moinho de alta energia na distribuição granulométrica do vidro soda-cal por meio de Difração a laser e FTIR. Garrafas de cervejas utilizadas no dia a dia indústria de 600 mL de cor âmbar foram usadas nessa pesquisa. AS garrafas foram fragmentadas de forma manual para seleção das amostras utilizadas nesse experimento. Após a fragmentação manual o material passou por um processo de peneiramento utilizando um agitador de peneiras e um conjunto de peneiras com os tamanhos de 9#, 10#, 32#, 48#, 60#, 80# e 150#. Foram separadas 5 amostras denominadas C1, C2, C3, C4 e C5 composta por 50 g de material previamente peneirado com tamanhos de partícula entre 1,7 e 2,0 mm (retidos na peneira de 10#). Cada amostra foi processada com velocidades de rotação diferente (C1, C2, C3, C4 e C5 nas rotações de 100, 200, 300, 400 e 500 rpm respectivamente) por 10 minutos. O processamento do vidro a 100 rpm se mostrou ineficaz para os propósitos dessa pesquisa, pois aproximadamente 93% do material analisado permaneceu com diâmetro superior a 1,7 mm. Nas demais rotações obteve-se uma redução significativa. A amostra C2 apresentou uma distribuição bimodal assimétrica crescente enquanto que C3, C4 e C5 apresentaram a formação de distribuição granulométrica de composição trimodal assimétrica crescente. Acreditamos que isso acontece devido à influência do coeficiente de atrito de partículas médias geradas no processamento do vidro. Houve uma variação significativa no Diâmetro de Sauter ($d_{msauter}$) que em 200rpm correspondia a 18,286 μm enquanto que em 500 rpm reduziu para 3,059 μm . Os resultados obtidos nas análises por FTIR apresentam picos característicos dos vidros comuns como traços de SiO_4 tetraédrico, Picos de ligações SiO_4 de grupos tetraédricos, Superfície do tetraedro SiO_4 e água livre referente a umidade da amostra.

Palavras chave: Moinho de Alta Energia, Vidro, Distribuição granulométrica

Referências Bibliográficas

LÓPEZ, D. A. R.; AZEVEDO, C. A. P. Avaliação da utilização de vidro cominuído como material agregado ao concreto. ULBRA. Canoas, 2003.
ALVES, O. L.; GIMENEZ, I. F.; MAZILI, I. O. "Vidros". *Química Nova na Escola*, Edição especial. 2001.
MENDES, T. M. Influência do coeficiente de atrito entre os agregados e da viscosidade da matriz no comportamento reológico de suspensões concentradas heterogêneas. Dissertação, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo. SP, 2008.

ANÁLISE DA CORROSÃO DA PALHA DE AÇO QUANDO SUBMETIDA A DIFERENTES CONDIÇÕES DE NÉVOA SALINA EM UMA CÂMARA DE BAIXO CUSTO PARA FINS DIDÁTICOS

Thainá Dalfior Salvador¹, Julia Sampaio e Silva Viana¹, Paulo Jansen de Oliveira² & Fabíola Oliveira da Cunha³

1. Bolsista do Grupo PET Engenharia Química, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Tutor do Grupo PET Engenharia Química, Professor do DEQ/IT/UFRRJ; 3. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A construção de uma câmara de névoa salina permite avaliar em ambiente controlado o efeito da pulverização de solução de cloreto de sódio sobre amostras metálicas e assim fornecer dados para desenvolver materiais mais resistentes a condições adversas como, por exemplo, de nevoeiro ou brisa marítima. O objetivo do presente trabalho foi desenvolver uma metodologia adequada para uso de câmara de névoa salina de baixo custo com reprodutibilidade experimental para fins didáticos. Para tal, foi construída uma câmara com materiais de fácil acesso, simulando uma versão econômica desenvolvida a partir de adaptações ao estabelecido pelos padrões nacionais (ABNT NBR 8094-83) e internacionais (ASTM B117-11). Os ensaios utilizaram solução salina de concentração mássica 5% p/v atomizada por nebulizador infantil modelo NEBPLUS 1 G. TECH sobre amostras de palha de aço dos diferentes tamanhos disponíveis no mercado dispostas em posições uniformes dentro da câmara. O aparato foi construído utilizando uma Caixa Organizadora Multiuso Transparente com dimensões aproximadas de 28 x 35 x 49 cm (29 L) devidamente vedada com mangueira de silicone e com tubos e conexões de PVC responsáveis pela alimentação e dispersão da névoa no ponto central da caixa a uma altura adequada para que a distribuição fosse homogênea, regular e acima dos corpos de prova. O acompanhamento da umidade e da temperatura no interior da caixa foi possível utilizando um termo higrômetro digital. Para avaliar o funcionamento do equipamento, foi analisado o tempo de exposição e o volume em uma inserção intermitente, porém, continuada de névoa salina. Foi observada temperatura média de 25 °C, umidade relativa compreendida entre 80 e 99% e não houve formação de precipitado. No primeiro teste, as amostras foram submetidas a aspersão de 45 mL de solução atomizada em um intervalo de 7 dias, posteriormente, fez-se a secagem em estufa por 24 h a 105 °C para remover qualquer líquido que porventura estivesse depositado na superfície dos corpos de prova. No segundo teste, dobrou-se o volume aspergido e o tempo de exposição foi de 21 dias, mantendo a mesma técnica de secagem e condições operacionais. No primeiro teste, obtivemos o acréscimo médio de 5% em relação à massa inicial e no segundo teste, o aumento foi de aproximadamente 10%. A variação entre a massa inicial e a final comprova os efeitos oxidativos, ou seja, a formação de óxido de ferro (ferrugem) sobre a amostra, demonstrando a viabilidade de utilização da câmara de névoa salina desenvolvida no procedimento e permitindo assim o uso em análises e práticas didáticas.

Palavras-chave: Névoa Salina; Corrosão; Experimento Didático.

Referências Bibliográficas

- GENTIL, V. **Corrosão**. 3ª. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.
ABNT NBR 8094-83. **Material metálico revestido e não revestido - Corrosão por exposição à névoa salina - Método de ensaio**. Associação Brasileira de Normas Técnicas. [S.I.], p. 1-3. 1983.
ASTM B117-11, **Standard practice for operating salt spray (fog) apparatus**. American Society for Testing and Materials. [S.I.], p. 1-12. 2011.

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA INCERTEZA DE PARÂMETROS REOLÓGICOS E ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DE PARÂMETROS NA MODELAGEM DE ESCOAMENTO EM FRATURAS

Felipe Vieira Martins¹; Gabriel Machado de Paula Andrade²; Josiane da Silva Cordeiro Coelho³; Luis Américo Calçada⁴

1. Bolsista CNPq, Discente do curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Bolsista Capes, Discente do curso de mestrado em Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 3. Professora Doutora do Departamento de matemática/ICE/UFRRJ; 4. Professor Doutor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias.

RESUMO

Durante a perfuração de poços de petróleo, a perda de circulação pode custar milhões de reais e ainda pode levar a danos irreversíveis à formação. Nestes casos é necessário minimizar a perda de circulação, e isso geralmente é feito pela adição de aditivos (LCM's) ao fluido de perfuração. Esses aditivos mudam as propriedades reológicas do fluido e sua distribuição de tamanho de partícula, conferindo a ele a ação selante da fratura. É necessário que haja modelos matemáticos capazes de descrever tal fenômeno, a fim de mitigar a perda de circulação. Neste trabalho foram avaliadas as incertezas dos parâmetros reológicos do fluido de perfuração na modelagem de escoamento em fraturas. Foi avaliada a precisão de um modelo matemático considerando-se a incerteza dos parâmetros reológicos do fluido, da concentração de LCM(s), e da abertura da fratura no cálculo da vazão em fraturas. O modelo utilizado foi estabelecido por meio de uma correlação entre os parâmetros reológicos do fluido, o diâmetro que caracteriza a fratura e a vazão da perda. Na avaliação da sensibilidade dos parâmetros estudados foi utilizado o método de Monte Carlo. As avaliações basearam-se na inferência bayesiana, onde os parâmetros são tidos como variáveis aleatórias e possuem uma distribuição de probabilidade associada (distribuição *a priori*). Para os parâmetros reológicos foram propostas distribuições *a priori* com base nos dados reológicos de 23 fluidos preparados em laboratório. Para o diâmetro da fratura foi proposta uma distribuição *a priori* com base na unidade experimental de escoamento de fluidos em fraturas presente no laboratório. A partir das distribuições *a priori* propostas, foram realizadas "n" amostragens de valores, os quais foram utilizados para executar o modelo "n" vezes. Esse método incorpora a incerteza dos parâmetros de entrada na saída do modelo, podendo definir sua precisão pelo cálculo do erro quadrático médio (EQM). Realizou-se a análise de sensibilidade através do cálculo do coeficiente de correlação com os dados gerados nas execuções do modelo. Os resultados obtidos do EQM foram de 6,75E-3, 1,45E-2, 3,85E-2 e 3,67E-1 para valores experimentais de quadro fluidos. Os resultados do coeficiente de correlação foram de - 0,24 para a tensão inicial do fluido, -0,39 para o índice de consistência, -0,26 para o índice de comportamento, e 0,23 para a abertura da fratura. Pelos resultados obtidos concluiu-se que o modelo é capaz de prever com significativa precisão os valores de vazão no escoamento em fraturas. Segundo os resultados do coeficiente de correlação, conclui-se que o aumento dos parâmetros reológicos minimiza a vazão do fluido em fraturas, e o oposto ocorre para a abertura da fratura. O parâmetro que apresentou maior influência na perda de circulação foi o índice de consistência do fluido.

Palavras chave: Fluido de perfuração, perda de circulação, Monte Carlo.

Referências Bibliográficas

- Moacyr Nogueira. Estudo experimental e de modelagem do escoamento em fraturas para fluidos Newtonianos e não-Newtonianos. 2018. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - **Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro**, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Luis Américo Calçada.
- GODOI, Felipe Augusto Paes de. Estudo da perda de carga e do escoamento de suspensões de materiais utilizados no combate à perda de circulação em fraturas. 2017. 107 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química, Tecnologia Química). **Instituto de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro**, Seropédica, RJ, 2017.
- O'Hagan A., Bayesian analysis of computer code outputs: A tutorial. ELSEVIER, p. 1,2,6,7, 2006.

CONSTRUÇÃO DE CÂMARA DE NÉVOA SALINA DE BAIXO CUSTO PARA AVALIAÇÃO DE CORROSÃO ACELERADA PARA FINS DIDÁTICOS

Julia Sampaio e Silva Viana¹, Thainá Dalfior Salvador¹, Paulo Jansen de Oliveira² & Fabíola Oliveira da Cunha³

1. Bolsista do Grupo PET Engenharia Química, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Tutor do Grupo PET Engenharia Química, Professor do DEQ/IT/UFRRJ; 3. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A corrosão pode ser definida como a deterioração de um material, geralmente metálico, por ação química ou eletroquímica do meio ambiente, aliada ou não a esforços mecânicos (Gentil, 2002). A câmara de névoa salina fornece um ambiente corrosivo controlado que é utilizado para produzir informações relativas à resistência de amostras de metais quando expostas a condições ambientais específicas. O mercado fornece inúmeros equipamentos de névoa salina sofisticados que reproduzem diferentes condições climáticas, no entanto tendem a ser pouco aplicáveis para fins didáticos devido ao alto custo. A construção da câmara de névoa salina com a utilização de materiais de baixo custo e de fácil acesso tem como objetivo avaliar a corrosão em materiais metálicos em um ambiente análogo as condições atmosféricas em ambientes marítimos e/ou de corrosão acelerada, a fim de posteriormente, serem aplicados aos discentes da disciplina de corrosão e a comunidade científica. O aparato experimental foi montado com adaptações das normas ABNT NBR 8094-83 e ASTM B117-11. Foi utilizado uma Caixa Organizadora Transparente de 29 L (28 x 35 x 49 cm) vedada com mangueira de silicone. A alimentação passou por segmentos de tubos de PVC de 3/4" conectados por Joelho de 90° alimentado pela maior lateral de modo que a saída ficou localizada no ponto central da caixa a uma altura onde a dispersão da névoa salina fosse homogênea, uniforme e lançada acima dos corpos de prova. Um nebulizador infantil (NEBPLUS 1 G. TECH) foi responsável pela atomização da solução de cloreto de sódio 5% p/v e um termo-higrômetro digital foi usado para monitorar a temperatura e umidade no interior da câmara. Após testes preliminares, obtivemos 5 mL de solução salina alimentada por 15 minutos de funcionamento do nebulizador (tempo onde não houve o superaquecimento do nebulizador), temperatura média de 25 °C e umidade relativa entre 80 e 99%. Posteriormente, foi realizado um ensaio utilizando palhas de aço de diferentes tamanhos, visto que possuem maior área superficial potencializando a corrosão, suspensas em um aparato de plástico em diferentes pontos equidistantes uma da outra e de modo a receberem a mesma quantidade de névoa sem interferência das paredes da câmara. As quatro amostras (Bombril e Bombril Eco) foram submetidas as condições de névoa, na qual duas vezes ao dia foram atomizadas 5 mL de solução salina por 7 dias. Ao término da exposição, as amostras foram secas em estufa à 105 °C durante 24 horas e pesadas. Ao final do ensaio foi quantificado um aumento de massa na faixa de 5,39% a 5,84% com visível corrosão da palha de aço observado pela formação de ferrugem avermelhada (óxido de ferro). Tais resultados demonstram que a câmara foi eficiente e manteve as condições adequadas para a avaliação da corrosão acelerada das amostras, e a metodologia adotada foi adequada para a obtenção de resultados satisfatórios. Sendo assim, pode ser utilizada em outros ensaios de névoa salina avaliando diferentes tempos de exposição, quantidade de névoa salina, corpos de prova, revestimentos, bem como ser utilizada como uma ferramenta para fins didáticos.

Palavras-chave: Corrosão acelerada; Névoa Salina; ABNT NBR 8094-83.

Referências Bibliográficas

ABNT NBR 8094-83. **Material metálico revestido e não revestido - Corrosão por exposição à névoa salina - Método de ensaio.** Associação Brasileira de Normas Técnicas. [S.l.], p. 1-3. 1983.
ASTM B117-11, N. **Standard practice for operating salt spray (fog) apparatus.** American Society for Testing and Materials. [S.l.], p. 1-12. 2011.
GENTIL, V. **Corrosão.** 3ª. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.

PRODUÇÃO DE COMPÓSITOS DE PLA COM CAROÇO DE ABACATE E CASCA DE ABÓBORA**Julio Filipe Coelho Milesi¹, Fábio Silveira Reis², Edla Maria Bezerra³, Renata Nunes Oliveira⁴**

1. Discente do curso de Engenharia de Materiais, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Discente do curso de Engenharia de Materiais, DEQ/IT/UFRRJ; 3. Pesquisadora da EMBRAPA, Barra de Guaratiba, RJ; 4. Professora do PPGEQ/DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharia de Materiais

RESUMO

Com a acentuada evolução dos produtos industrializados e da tecnologia no que tange a conservação de alimentos, as embalagens têm figurado como uma das principais preocupações ambientais atualmente. Uma vez que o consumo desenfreado faz com que mais resíduos sejam gerados, a demanda por alternativas que visem reduzir o volume de resíduos na natureza vem crescendo. O Poli (ácido láctico) – PLA é um polímero que vem sendo utilizado em embalagens, pois é biodegradável e facilmente moldável. Apesar de suas características, ele sozinho, não é suficiente para atender e substituir os polímeros que são utilizados atualmente nas embalagens, pois o tempo de prateleira e a sua resistência mecânica são inferiores às comerciais. Para tanto é preciso adicionar algum componente que complemente e adicione as propriedades deficientes no PLA, aumentando a sua resistência mecânica, tempo de prateleira e até aumentando a sua biodegradabilidade. Por esse motivo foram incorporadas duas cargas distintas: o caroço de abacate e a casca de abóbora, ambas particuladas, com o objetivo de produzir um filme compósito a fim de substituir as embalagens comerciais existentes. Não se tem hoje um descarte útil para o caroço de abacate. Assim, é possível aproveitar os componentes presentes no caroço, como os óleos que podem atuar como compatibilizantes, e dar uma destinação mais nobre a esse material uma vez que reduz o seu volume como descarte. Na casca de abóbora está presente o amido que é um polissacarídeo vegetal, constituído por várias unidades de glicose. Sendo um dos biopolímeros mais abundantes, é renovável, biodegradável e biocompatível. Os compósitos foram produzidos dissolvendo-se o PLA (10 g) em clorofórmio (64 mL) e acrescentando a carga particulada (5 g) por 2 horas. Uma vez produzidos os filmes, os dois compósitos foram analisados por MEV (Microscopia Eletrônica de Varredura), e o que se pôde observar é que a interação e compatibilização do PLA com o caroço de abacate foi superior ao da casca de abóbora. A casca de abóbora ficou segregada do PLA em fases distintas; além de ter alguns vazios presentes no polímero, devido muito provavelmente, a evaporação do solvente. Enquanto que, o caroço de abacate foi integrado em todo o PLA de modo a se verificar uma única fase, com alguns poucos vazios. Na caracterização por FTIR (Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de Fourier) observaram-se as principais bandas do PLA e não foi possível observar as bandas características do abacate nem da abóbora presente nos compósitos produzidos. Conclui-se, portanto que o abacate possui resultados promissores, podendo-se prosseguir para as próximas etapas de análises referentes às embalagens comerciais, e assim obter uma embalagem que seja ambientalmente amigável, podendo substituir as embalagens atuais. Quanto ao compósito de abóbora, um fator provável para a incompatibilidade é o amido, uma vez que ele é hidrofílico e o PLA hidrofóbico, uma alternativa para contornar esse problema seria remover o amido da casca de abóbora ou adicionar um agente compatibilizante junto com a carga, para promover a compatibilidade.

Palavras-chave: PLA; compósito; abacate; abóbora.

Referências Bibliográficas

- ARJMANDI, R. et al. **Characterization of Poly(lactic acid/microcrystalline cellulose/montmorillonite hybrid composites**, The Malaysian Journal of Analytical Sciences, 18, 3 (2014): 642-650.
- MULLER, J.; MARTINEZ, C.; CHIRALT, A. **Combination of Poly (lactic) Acid and Starch for Biodegradable Food Packaging**. Materials (Basel). 2017 Aug 15; 10(8).
- DEBIAGIL, F.; IVANO L.; NASCIMENTO, P. **Embalagens biodegradáveis de amido reforçadas com fibras lignocelulósicas provenientes de resíduos agroindustriais** - Universidade Estadual de Londrina – UEL. Departamento de Bioquímica e Biotecnologia. V.1, n. 2 (2012).

AVALIAÇÃO CATALÍTICA DE SILICOALUMINOFOSFATOS E METALOALUMINOFOSFATOS EM REAÇÕES DE CONVERSÃO DE METANOL A OLEFINAS LEVES**Estella Aguiar Cirilo¹ & Lindoval Domiciano Fernandes²**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

RESUMO

Olefinas leves são moléculas quimicamente reativas possibilitando, assim, inúmeras reações que produzem uma grande variedade de produtos químicos. São, portanto, matérias-primas de vasta aplicação na indústria química, sendo eteno e propeno os principais produtos consumidos mundialmente. A descoberta das peneiras moleculares de silicoaluminofosfatos (SAPO) apresentou um grande avanço na área de catálise devido suas propriedades adsorventes, catalíticas e de troca iônica. Dentre os vários tipos de peneiras SAPO, destacam-se as SAPO-34, de estrutura similar à chabazita (tipo CHA) e as SAPO-18, de estrutura tipo AEI com semelhanças estruturais às SAPO-34. Além disso, a introdução de espécies metálicas em peneiras SAPO permite a introdução de várias funções catalíticas e a produção de sólidos ácidos de força variável. Estas peneiras, portanto, têm sido de grande interesse para a produção de materiais com acidez controlada que podem ser usados como catalisadores em várias reações. Uma das perspectivas mais notáveis destas peneiras é seu excelente desempenho na conversão catalítica de metanol a olefinas leves, reação nomeada de MTO. Neste contexto, este trabalho objetivou a avaliação catalítica de silicoaluminofosfatos e metaloaluminofosfatos apresentando estruturas tipo CHA e AEI com o intuito de estudar o desempenho catalítico das amostras na reação MTO. As amostras avaliadas neste estudo foram sintetizadas e caracterizadas por COSTA (2015) e SÁ (2014) tendo em vista a dificuldade de sintetizá-las, a indisponibilidade de reagentes e falta de tempo hábil para o reparo de equipamentos de extrema importância para a caracterização das amostras. Previamente à avaliação catalítica, os catalisadores passaram por um pré-tratamento sob corrente de N₂ para eliminação de contaminantes. Em seguida, os testes catalíticos foram realizados em um reator de quartzo e a análise dos produtos da reação foi efetuada por cromatografia gasosa. Após, avaliou-se o desempenho dos catalisadores a partir da conversão e atividade do metanol nas reações MTO. A partir dos resultados, constatou-se que o método de avaliação catalítica empregado foi apropriado para avaliar o desempenho das peneiras moleculares. Além disso, verificou-se que os resultados de conversão e atividade obtidos variaram com as características das amostras, razão de silício/alumínio e a incorporação do metal nas estruturas. Em relação às características das peneiras moleculares, entende-se que, em geral, o desempenho catalítico foi favorecido pelo aumento da acidez, maior formação de material cristalino e maior área superficial. Os catalisadores, em especial as SAPOs-18, obtiveram maior desempenho com o aumento da razão silício/alumínio. Além disso, a incorporação do metal manganês nas estruturas das SAPOs-34 aumentou a performance catalítica em termos de conversão inicial e atividade catalítica. Ao fim, verifica-se, que os catalisadores SAPOs-18 promovem menor formação de coque e com isso, menores taxas de desativação e tempos de vida mais prolongados na reação MTO.

Palavras-chave: Catálise, peneiras moleculares, SAPO, MeAPSO, metanol, olefinas leves.

Referências Bibliográficas

- COSTA, L. K. **Estudo da acidez de peneiras moleculares silicoaluminofostatos (SAPO-34) e metal- silicoaluminofosfato (MEAPSO-34)**. Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. Seropédica, Rio de Janeiro, Brasil, 2015.
- DUBOIS, D. R., *et al.* **Conversion of methanol to olefins over cobalt-, manganese- and nickel-incorporated SAPO-34 molecular sieves**. Fuel Processing Technology n. 83, pg. 203–218, 2003.
- SÁ, G. R. **Estudo da acidez de silico-alumino-fosfatos**. Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. Seropédica, Rio de Janeiro, Brasil, 2014.

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL E MODELAGEM DA FILTRAÇÃO UTILIZANDO FLUIDOS DE PERFURAÇÃO NÃO-NEWTONIANOS

Lucas David Rissi de Andrade¹, Rodrigo Fernando de Oliveira Borges², Bruno Francisco Oeschler³, Luiz Américo Calçada⁴, Cláudia Miriam Scheid⁵

1. Bolsista PETROBRAS, discente do curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Bolsista PETROBRAS, mestrando do curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Doutor em Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 4. Professor do Departamento de Engenharia Química, IT UFRRJ; 5. Professora do Departamento de Engenharia Química, IT/UFRRJ

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Na técnica de perfuração *overbalance* ocorre um gradiente de pressão entre a região anular e o reservatório, resultando na perda de fluido para a formação. Nesse processo, a formação rochosa porosa atua como meio filtrante, retendo em sua superfície as partículas em suspensão com diâmetro maior que o diâmetro dos poros da rocha. As partículas retidas formam uma fina camada de reboco que reduz a taxa de invasão dos fluidos de perfuração. Essa camada de reboco cresce continuamente até atingir uma espessura de equilíbrio e é denominada torta de filtração. Dessa forma, a taxa de perda de circulação dos fluidos de perfuração se torna função das propriedades da torta formada, como porosidade e permeabilidade. Nesse cenário, o monitoramento e a capacidade de predição das propriedades da torta se mostram de fundamental importância. Este trabalho tem como objetivo avaliar a dinâmica do processo de filtração estática com formação de torta, a partir de dados experimentais de filtração utilizando fluidos de perfuração base água em diferentes faixas de pressão de operação. O comportamento reológico do fluido foi avaliado a partir da determinação da curva de escoamento e posterior estimativa dos parâmetros reológicos do modelo *Power-Law*. Para os ensaios experimentais de filtração, uma célula de filtração HTHP (*High Temperature High Pressure*) da OFITE foi utilizada e papel de filtro (diâmetro de abertura 2,7 – 5,0 μm) como meio filtrante. Foi avaliado o efeito do diferencial de pressão no volume de filtrado, na resistência do meio filtrante e nas propriedades da torta de filtração formada. Para o ajuste dos dados experimentais de filtração, foi proposto um modelo matemático baseado na teoria simplificada da filtração, considerando o comportamento não-Newtoniano dos fluidos na equação constitutiva para a força resistiva. Os resultados experimentais confirmam o efeito significativo da pressão no volume de filtrado acumulado e, por consequência, na taxa de filtração. Adicionalmente, demonstram a tendência de redução da porosidade média da torta e o aumento de sua espessura com o aumento da pressão. A permeabilidade da torta apresenta valor máximo para os níveis de menor pressão seguida por uma redução no parâmetro quando combinado com o aumento da pressão. Observa-se o aumento da resistência do meio filtrante com o aumento da pressão, uma vez que há o aumento da taxa de carregamento das partículas com diâmetro menor que o de retenção do papel de filtro.

Palavras Chave: Fluidos de perfuração; Filtração estática; Permeabilidade.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CASTRO, L. M. N. C.; MASSARANI, G., Filtração de suspensão sólido-fluido não-Newtoniano. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE/UFRRJ/Programa de Engenharia Química, 1981.
- DA SILVA, B. R. A., Avaliação da Filtração de Fluidos de Perfuração não Newtonianos Utilizando a Teoria Simplificada da Filtração. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, UFRRJ, Dezembro, 2017.
- FERRAZ, A. S. F. S., Efeito da distribuição granulométrica de partículas sólidas e de polímeros aniônicos na formação da torta de filtração e no volume de filtrado. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, UFRRJ, Agosto, 2014. swarm optimization, Chemical Engineering Science, v.63, p. 1542-1552, 2007.

PROCESSAMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE PLACAS CIMENTÍCIAS OBTIDAS COM DIFERENTES PROPORÇÕES DE PÓ FINO DE RESÍDUO DE ROCHAS ORNAMENTAIS**Heshiley Cristhiane Correia da Silva¹; Simone Pereira Taguchi Borges²**

1. Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professora do DEQ/IT/UFRRJ;

Grande Área: Engenharias**RESUMO**

O setor da construção civil provoca grandes impactos ambientais devido ao seu elevado volume de consumo de matérias primas, sendo responsável por 40% a 75% da matéria produzida (AGOPYAN, 2013). A inserção de resíduos de rochas ornamentais na construção civil como substituinte parcial de matéria prima é uma ótima alternativa para diminuição do impacto ambiental e redução da quantidade de recursos naturais retirados do meio ambiente. Isto proporciona funcionalidade ao resíduo de forma a torná-lo matéria prima alternativa de menor custo, contribuindo para um desenvolvimento sustentável. O presente trabalho tem como intuito avaliar algumas propriedades de peças de concretos para pavimentação intertravada, fabricados a partir da substituição dos agregados finos normalmente utilizados (areia), por resíduo proveniente dos cortes de mármore e granito. As peças foram produzidas a partir de um traço pré-estabelecido 1:1,2:3, representando respectivamente os volumes de cimento, agregado miúdo e brita. A proporção de agregado miúdo variou de 0, 50 e 100% de resíduo de rocha ornamental e areia, sendo denominado de C0, C50 e C100 respectivamente. Para confecção dos blocos intertravados, foi realizada uma mistura manual das matérias primas secas e posteriormente adicionado água para formação da massa cimentícia. O resíduo foi caracterizado quanto as fases cristalinas (por DRX), microestrutura (por MO), e massa específica (por picnometria). Foram produzidas peças cilíndricas de Ø50x100mm, conforme os padrões da norma NBR 5739 (1994). O desenforme aconteceu em 24 h, seguido de cura em água saturada de carbonato de cálcio por 28 dias, para que ocorresse as reações de hidratação do cimento e, conseqüentemente, as peças adquirissem resistência mecânica. As peças produzidas foram avaliadas quanto massa específica aparente e absorção de água segundo a NBR 9781 (2013). Os traços C0, C50 e C100 apresentaram absorção de água de 5,75, 7,86 e 9,60%, respectivamente, e densidade aparente de 0,56, 0,53 e 0,50 g/cm³, respectivamente. A absorção de água está diretamente relacionada com a porosidade da peça. A NBR 9781 (2013) indica uma absorção de água menor ou igual a 6% para pisos intertravados, e desta forma a utilização de 50 ou 100% de resíduo como agregado fino não atenderam a referida norma. Observou-se que quanto maior a quantidade de resíduo de rochas ornamentais maior o índice de absorção de água, em relação ao concreto de referência com areia natural. Os resíduos de rochas ornamentais são pós muito finos, com maior área específica que a areia, o que ocasiona um aumento na relação água/cimento das misturas, podendo aumentar a porosidade das peças durante a cura. Mais estudos são necessários para avaliar se com quantidades menores que 50% de resíduo as amostras poderiam atender a referida norma para pisos intertravados.

Palavras-chave: Resíduo; rocha ornamental; concreto.**Referências Bibliográficas**

- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR: 9781 Peças de concreto para pavimentação - Especificação e métodos de ensaio, 2013.
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR: 5739 Concreto - Ensaio de compressão de corpos-de-prova cilíndricos, 1994.
- AGOPYAN, V. Construção Civil consome até 75% da matéria-prima do planeta. In: Globo Ciência. 2013. Disponível em:< <http://redeglobo.globo.com/globociencia/noticia/2013/07/construcao-civil-consome-ate-75-da-materia-prima-do-planeta.html>> Acesso em 9 de junho de 2019.

ESTUDO EXPERIMENTAL DA ESTABILIDADE DA FASE Zr_3Si NO SISTEMA Zr-SiLaryssa de Jesus Ramos¹; Luiz Antônio Borges Júnior²

1. Bolsista PIVIC, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Ligas de zircônio e silício (Zr_xSi_y) têm pontos de fusão elevados (por exemplo, $ZrSi$ e Zr_3Si_2 fundem a 2203 ° C e 2215 ° C, respectivamente). Quando exposta ao ar em alta temperatura, forma uma camada de passivação de óxido (SiO_2 e $ZrSiO_4$), com excelente resistência à oxidação, sugerindo assim que compostos formados pela liga de zircônio e silício possam ser bons candidatos a revestimento para aplicações de alta temperatura. O sistema Zr-Si foi avaliado por Okamoto, que propôs o diagrama apresentando as seguintes fases: $\alpha-Zr_{SS}$, $\beta-Zr_{SS}$, Zr_3Si , Zr_2Si , Zr_5Si_3 , Zr_3Si_2 , $\alpha-Zr_5Si_4$, $\beta-Zr_5Si_4$, $\alpha-ZrSi$, $\beta-ZrSi$, $ZrSi_2$ e Si, além da fase líquida L. A fase Zr_3Si é apresentada por linhas tracejadas, indicando dúvidas quanto a sua formação e qual tipo de reação ocorre a aproximadamente 863°C. A fase Zr_3Si não foi encontrada por alguns autores, Okamoto justificou essa ausência devida à estabilização da fase Zr_5Si_3 causada pela presença de pequenas quantidades de impurezas no Zr. A investigação de fases metaestáveis nos sistema Zr-Si mostrou a presença de uma fase amorfa, que foi formada na faixa de composição de 15-25 %at. Si por solidificação rápida. Em tratamentos térmicos a 600°C a fase amorfa cristalizou-se inicialmente numa mistura de duas fases: uma foi a fase Zr_3Si com estrutura tI32 e a outra foi $\beta-Zr_{SS}$. Prosseguindo o tratamento, a fase $\beta-Zr_{SS}$ transformou-se em $\alpha-Zr_{SS}$, porém a fase Zr_3Si tI32 não se transformou na estrutura tP32, em tratamentos até 30 minutos; e tratamento por longos períodos ou temperaturas mais altas ainda não haviam sido tentados. Dessa forma o trabalho experimental desenvolvido neste projeto compreendeu as seguintes etapas: (i) Preparação das ligas Zr-Si via fusão a arco: As amostras foram fundidas em um forno a arco com cadinho de cobre eletrolítico refrigerado a água, sob atmosfera de argônio. Cada liga foi submetida a pelo menos 5 etapas de fusão para garantir a homogeneidade composicional. As matérias-primas utilizadas foram Zr em forma de chapa (min. 99,7%) e Si em pedaços (min. 99,998%), todos de alta pureza. As ligas preparadas seguiram as seguintes composições: $Zr_{91,2\%}Si_{8,8\%}$, $Zr_{80\%}Si_{20\%}$, $Zr_{75\%}Si_{25\%}$ e $Zr_{70\%}Si_{30\%}$; (ii) Tratamento térmico: Após a etapa de produção em forno a arco as ligas foram tratadas termicamente a 800°C por 500 horas e a 900°C por 300 horas. As amostras foram encapsuladas em quartzo sob atmosfera de argônio e tratadas em forno resistivo tubular. Os tratamentos foram finalizados com resfriamento abrupto das amostras em água com temperatura próxima a 0°C; (iii) Caracterização das ligas: As amostras fundidas e as tratadas termicamente foram analisadas através da microscopia óptica, microscopia eletrônica de varredura (MEV/EDS) e difração de raios X (XRD), de forma a identificar as fases presentes nas ligas.

Palavras-chave: Diagrama de fases; Liga Zircônio Silício; Zr_3Si

Referências Bibliográficas

M. Steinbrück, Prototypical experiments relating to air oxidation of Zircaloy-4 at high temperatures, J.Nucl. Mater. 392 (2009) 531–544, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.04.018>.

OKAMOTO, H. The Si-Zr (silicon-zirconium) system. Bulletin of Alloy Phase Diagrams, v. 11, p. 513– 19, 1990.

INOUE, A.; TAKAHASHI, Y.; SURYANARAYANA, C.; MASUMOTO, T. Thermal stability and crystallization behavior of amorphous Zr-M-Si (M = IV - VII group transition metals) alloys. Journal of Materials Science, v. 17, p. 3253–62, 1982.

USO DE CONTROLADORES NEURONAIS APLICADOS À PERFURAÇÃO DE POÇOS DE PETRÓLEO

Raíssa Gybson de Carvalho Fonseca¹; Clarissa Fernanda da Silva Macedo Costa²; Vanessa de Jesus da Silva Ribeiro³ & Márcia Peixoto Vega⁴

1. Bolsista de Iniciação Científica Petrobrás, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Mestre em Engenharia Química, EQ/PPG/DEQ/IT/UFRRJ; 4. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A perfuração de poços de petróleo é uma operação altamente complexa, custosa e uma grande área a ser explorada pela pesquisa a fim de aprimorá-la. Esse processo envolve diversos fenômenos que influenciam diretamente na pressão anular de fundo. Dentre eles, destacam-se os de conexão de tubos (distúrbio de vazão) e mudança de *set point*. Tais fenômenos, causam flutuações de pressão que podem danificar o poço, e nos casos mais extremos, podem causar danos ambientais, financeiros e humanos. A coluna de perfuração é composta por vários segmentos de tubos e à medida que se perfura o poço, novos segmentos são adicionados por meio da conexão de tubos. Neste procedimento, as bombas são desligadas e o bombeio de fluido é interrompido, assim o BHP (*bottom hole pressure*) reduz como resposta à redução do ECD (*Equivalent circulating density*). O processo de parada e retomada das bombas afeta severamente o perfil de pressão, fazendo com que haja flutuações de pressão que excedem os limites da janela operacional. Sabendo que se trata de um processo de alta complexidade, torna-se extremamente importante o controle da pressão anular de fundo dentro da janela operacional, compreendida entre a pressão de poros e de fratura, visando assim uma maior segurança no processo de perfuração como um todo. As redes neuronais artificiais são modelos computacionais inspirados no sistema nervoso central humano, sendo utilizadas na estimação ou aproximação de funções que dependem de múltiplas entradas. As redes neuronais adquirem conhecimento a partir da aprendizagem de seu ambiente, armazenando as informações adquiridas através dos pesos sinápticos. A unidade experimental utilizada neste trabalho para retratar o processo de perfuração foi desenvolvida em parceria com a Petrobras, no Laboratório de Escoamento de Fluidos Giulio Massarani (LEF), localizado na Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRRJ). Diante disso, neste trabalho serão implementados controladores baseados em redes neuronais para regular em linha o processo de perfuração para os fenômenos de conexão de tubos e mudança de *set point*, utilizando como variável manipulada o índice de abertura da válvula *choke*. A implementação de controladores neuronais se torna atrativa devido à habilidade que esses controladores têm em lidar com sistemas não-lineares e inerentemente transientes, como é o caso do processo de perfuração. Neste presente trabalho, foram utilizados dois tipos de controladores neuronais: o direto que utiliza o modelo inverso da planta, estimando diretamente o valor da variável manipulada com o objetivo de obter a saída desejada, agindo diretamente como um controlador; e o indireto que emprega dados de entrada e saída para representar a dinâmica do sistema. Foi desenvolvida uma rede neuronal recursiva com retroalimentação da variável de saída, empregando dados atuais e passados de monitoramento de forma a permitir o aprendizado da dinâmica do processo. As validações do controle serão realizadas em unidade experimental que simula o processo de perfuração de poços de petróleo. Os controladores desenvolvidos mostraram-se eficientes em controlar a pressão anular de fundo.

Palavras chave: Petróleo; controlador; redes neuronais; conexão de tubos.

Referências Bibliográficas

- FAUSETT, L. V.; **Fundamentals of Neuronal Networks: Architectures, Algorithms and Applications**, 1^a ed., Prentice – Hall, 1994.
HAYKIN, S.; **Neuronal networks and learning machines**, 3^a ed., Prentice – Hall, 2009.
SCHNITMAN, Leizer. **Controladores preditivos baseados em redes neurais artificiais**. 1998. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) – Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade Federal da Bahia, Bahia.

**ESTUDO DA PERFURAÇÃO DE POÇOS DE PETRÓLEO UTILIZANDO A TÉCNICA
PRESSURIZED MUD CAP DRILLING: SIMULAÇÃO E EXPERIMENTOS****Lucas Machado de Araujo¹; Lisandra Barboza Romualdo²; Gabrielle Fontella de Moraes
Oliveira³; Mateus Azevedo Dalbone de Carvalho⁴; Márcia Peixoto Vega⁵**

1. Bolsista *PIBIC*, Discente do Curso de Engenharia Química, *DEQ/UFRRJ*; 2. Mestranda em Engenharia Química *DEQ/UFRRJ*; 3. Mestranda em Engenharia Química *DEQ/UFRRJ*; 4. Mestre em Engenharia Química; 5. Professora do *DEQ/UFRRJ*.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A fase mais custosa da exploração de petróleo é, geralmente, a perfuração (Vega et al., 2017). Esta etapa exige uma operação extremamente robusta e complexa para tornar o processo economicamente viável. Por isso, tecnologias precisam ser desenvolvidas constantemente para proporcionar avanços na área, principalmente com a crescente necessidade de se obter petróleo a partir de formações rochosas cada vez mais complexas e desafiadoras (Helgeland, 2014). Comparada com os métodos convencionais, a técnica *Pressurized Mud Cap Drilling* tem se mostrado eficiente na perfuração de poços altamente fraturados, visto que esta apresenta um controle preciso em cenários com extremas perdas de circulação e *kicks*, reduzindo os riscos ao se trabalhar nestas formações. O *PMCD* pode ser definido como um controle da pressão anular de fundo (região entre a broca e a formação rochosa), enquanto há influxos de fluidos entre o reservatório e o poço que está sendo perfurado. Esta técnica se dá por meio da injeção de um fluido viscoso (*Light Annular Mud – LAM*) na região anular e um fluido de sacrifício na coluna de perfuração, sem retorno a superfície. Após a detecção do *kick* de gás, com o poço fechado, inicia-se a operação de *Bullheading*, que consiste em bombear um fluido em contracorrente ao vazamento para forçar o retorno do gás invasor ao reservatório, controlando assim a pressão e, possibilitando a perfuração de poços anteriormente inviáveis. A modelagem foi baseada no estudo realizado por Ghauri (2014), o modelo utilizado foi o *DFM (Drift Flux Model)*, que consiste em um modelo bifásico constituído pela combinação das equações de conservação do momento da mistura e pelas equações de conservação de massa do líquido e do gás. Os resultados obtidos foram validados através de uma unidade experimental construída no Laboratório de Escoamento de Fluidos Giulio Massarani (LEF) do Departamento de Engenharia Química (DEQ), no Instituto de Tecnologia (IT), da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ). Durante toda a operação, foi utilizado água como fluido de perfuração e a injeção de gás foi implementada utilizando ar comprimido. O modelo apresentou alta eficiência, descrevendo todas as etapas do processo, sendo válido para situações de fluxo bifásico durante a perfuração, em que não há solubilização do gás invasor no fluido de perfuração.

Palavras-chave: *PMCD; kick; choke; bullheading.*

Referências Bibliográficas

GHAURI, A. A. (2014). *Use of the AUSMV scheme for simulation of gas migration, bullheading and Pressurized Mud Cap Drilling*, **Master's dissertation**.

HELGELAND, L. R. (2014). *Drilling of Deep-set Carbonates Using Pressurized Mud Cap Drilling*, **Master's dissertation**.

VEGA, M. P., MANCINI, M. C., SCHEID, C. M., CALÇADA, L. A., MARTINS, A. L. "Fundamentos de Controle Aplicados à Hidráulica de Perfuração" – **ENAHPE**, 2007.

AVALIAÇÃO DO EFEITO DO TEMPO DE SEDIMENTAÇÃO PRÉVIA DE ADENSANTES EM FLUIDOS NÃO-NEWTONIANOS SOBRE O VOLUME DE FILTRADO**Aline Mendes Pedra¹; Cláudia Miriam Scheid² & Luís Américo Calçada²**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias
Nº do protocolo: PIT 1334-2019

RESUMO

Durante a perfuração de poços de petróleo, utiliza-se fluido de perfuração, com características não-Newtonianas, com objetivo de resfriar a broca de perfuração, manter os cascalhos em suspensão e auxiliar na sustentação das paredes do poço, entre outros. Esse fluido permanece na região anular do poço mesmo após o término da perfuração. Do processo de perfuração do poço até o início da produção podem se passar meses ou até anos, sendo assim, o material adensante do fluido de perfuração sedimenta no fundo da região anular e o poço entra em equilíbrio térmico com a região geológica. Ao iniciar a produção, o petróleo sai do reservatório a altas temperaturas, e acaba ocasionando o aquecimento do fluido de perfuração confinado, o que provoca a expansão do fluido, gerando aumento da pressão na região anular, fenômeno conhecido como *Annular Pressure Build-up* (APB). Para que a estrutura do poço não seja prejudicada, são realizados métodos de mitigação, como o método da sapata aberta, que consiste em deixar uma parte do fluido em contato direto com a formação rochosa. Assim, quando ocorre esse aumento de pressão, a rocha sofre fraturas por onde o fluido confinado escoava aliviando a pressão. A sapata aberta é feita normalmente no fundo da região anular já que é nela que se encontra a maior temperatura e a maior pressão hidrostática, porém também é nela que se encontra o sedimento do fluido de perfuração. Por isso, é importante entender o efeito desse sedimento no escoamento do fluido para formação rochosa, processo semelhante a uma filtração. O estudo em questão, foi realizado com dois fluidos a base de água, com viscosificante goma xantana (0,5 lb/bbl), biocida gluteraldeído (0,5 lb/bbl) e adensante (15% v/v). Os adensantes utilizados foram barita e carbonato de cálcio. As análises reológicas foram realizadas no fluido base e resultaram na classificação do fluido. O mesmo foi colocado em uma célula de filtração *High Temperatures – High Pressures* (HTHP), onde ocorreu a sedimentação e posterior filtração, com intervalos de 1, 5 e 10 dias para cada fluido estudado. O comportamento dos dois fluidos foi similar, mas quantitativamente diferentes devido às propriedades físicas dos adensantes, tendo a barita os maiores volumes de filtrado. A filtração com sedimentação prévia de 5 dias resultou ser mais favorável ao alívio da pressão devido a presença de corredores de viscosidade reduzida. A filtração com sedimentação prévia de 10 dias obteve menores volumes de filtrado quando comparado às de 5 dias devido ao desmoronamento desses corredores. Sendo assim, conclui-se que a sedimentação auxilia no escoamento do fluido enquanto os corredores de viscosidade reduzida estão abertos.

Palavras-chaves: fluido de perfuração; fluido não-Newtoniano; sedimentação; filtração

Referências Bibliográficas

- JOSEPH, D. D.; LIU, Y. J. **Orientation of long bodies falling in a viscoelastic liquid.** Journal of Rheology, 1993.
- SILVA, B. P. **Estudo do efeito da sedimentação prévia na filtração de fluidos não-Newtonianos.** 2018. 73 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Departamento de Tecnologia, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, 2018.
- YIM, S. **A Theoretical and Experimental Study on Cake Filtration with Sedimentation.** Korean J Chem. Eng., 1999.

EFEITO DO SISTEMA DE ARMAZENAMENTO DE AMOSTRAS NAS ESTIMATIVAS DE FLUXOS DE GASES DE EFEITO ESTUFA**Isabelly Ferreira Rijo Ferraz¹; Bruno José Rodrigues Alves²**

1. Bolsista PIBIC, Discente de Engenharia Química IT/UFRRJ; 2. Docente do CPGCS/IA/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias**RESUMO**

Um grande foco tem sido dado para o desenvolvimento de uma economia global, baseada práticas que permitam mitigar as emissões de gases do efeito estufa (GEE). A pesquisa com GEE enfrenta desafios metodológicos desde o campo até o laboratório, fazendo com que a padronização de equipamentos e procedimentos seja a melhor estratégia para reduzir as incertezas em relação aos dados obtidos. Um método muito comum utilizado para medição dos fluxos de GEE do solo é o que utiliza câmaras estáticas, cujas amostras de ar coletadas são armazenadas em frascos até que seja possível realizar a análise por cromatografia. O tempo de armazenamento das amostras pode implicar em modificações nas concentrações dos gases e introduzir erros nos cálculos de fluxo do solo para a atmosfera, sendo o objetivo de investigação deste trabalho. Para este estudo, foram utilizados frascos de cromatografia fechados com lacre de alumínio e septo de borracha de cloro-butil, sistema muito utilizado para pesquisas com GEE. Misturas-padrão de N₂O e CH₄, dois dos principais GEE, foram utilizadas como referência. Quatro amostras dos padrões de 500, 1000, 2500 e 5000 ppb de N₂O, e de 5, 10, 25 e 50 ppm de CH₄, foram armazenadas por períodos de 1, 38 e 69 dias no ambiente do laboratório, simulando situação real. Em relação a concentração de CH₄, não ocorreu perda significativa com o processo de armazenamento. Por outro lado, verificou-se redução significativa da concentração de N₂O após 38 dias de armazenamento, sendo o padrão de maior concentração (5000 ppb), aquele no qual a diluição foi mais facilmente percebida, alcançando aproximadamente 8% em relação às condições iniciais. Após 69 dias, a redução foi de 16%. Um estudo anterior, realizado somente com a maior concentração do padrão de N₂O mostrou a mesma diluição, indicando a possibilidade de se aplicar um fator de correção em função do tempo de armazenamento. Assim, como a mudança de concentração dos padrões com o tempo de armazenamento foi observada somente para o N₂O, é possível que o problema não seja hermeticidade do sistema, mas a uma maior reatividade deste gás com o material usado no sistema de armazenamento, como a borracha do septo (Lange et.al, 2008). Como conclusão, recomenda-se que as amostras sejam analisadas dentro de no máximo 1 mês após obtenção no campo, mas que diante da impossibilidade de uma análise rápida, que seja aplicado um fator de correção da concentração do gás a ser determinado para cada sistema de armazenamento utilizado.

Palavras chaves: N₂O, Metano, Cromatografia**Referências Bibliográficas**

LANGE, S.F.; ALLAIRE, S.E.; VAN BOCHOVE, E. Transfer of CO₂, N₂O and CH₄ to butyl rubber (polyisobutylene) septa during storage. *Journal of Environmental Monitoring*, v.10, pp. 775-777, 2008.

ESTUDO DO EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR E LÍQUIDO-LÍQUIDO DA MISTURA ISOPROPANOL-ÁGUA-SAL**Igor Barreto Julião¹; Pedro Peixoto do Amaral de Souza²; Marisa Fernandes Mendes³**

1. Bolsista PIBIC/CNPq, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Mestre em Engenharia Química, PPGEQ; 3. Docente do Departamento de Engenharia Química, IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

O isopropanol é largamente utilizado em processos industriais, como solvente de processos, agente de limpeza e secagem de equipamentos eletrônicos e mecânicos, devido à sua produção com baixo teor de água, insumo químico, entre outros. Há diversos métodos de produção industrial do álcool, sendo a maioria referentes à formação do isopropanol a partir de acetona, proveniente de outras vias reacionais, propileno ou acetato de isopropila, todos com rendimento maior que 90%. Muitas vezes é necessária a purificação para a obtenção de uma fração mais pura de isopropanol. Porém, o processo de destilação do álcool não ocorre por destilação simples, visto que o mesmo forma um azeótropo com a água. Para isso, seria necessária a utilização de técnicas alternativas, como a destilação extrativa ou a extração líquido-líquido. O processo de destilação extrativa baseia-se na adição de um terceiro componente, que interfere no equilíbrio líquido-vapor (ELV) do sistema, permitindo a separação completa de um dos componentes. A extração líquido-líquido (ELL), a partir de um sistema aquoso bifásico, é baseada no efeito salting-out promovido pela adição de sais no sistema. Portanto, o objetivo desse trabalho é o estudo do ELV e ELL do sistema isopropanol-água, medindo dados experimentais à pressão atmosférica, verificando a influência da adição dos sais acetato de sódio e de potássio para o ELV, e os sais nitrato, acetato e sulfato de sódio para o ELL. Para tal, os dados experimentais para o ELV, medidos em triplicata, foram obtidos em um ebuliômetro de vidro do tipo Othmer (300 mL de volume), com dois condensadores e feito de vidro borossilicato. As amostras das fases líquida e vapor foram analisadas em um densímetro digital, com o auxílio de uma curva de calibração, previamente realizada com base no sistema binário isopropanol-água. As concentrações das soluções de isopropanol-água variaram de 0,1 a 0,99, com as frações mássicas de sal de 5% e 10%. Os experimentos do ELL, assim como descrito em Souza (2019), foram realizados utilizando o método de titulação turbidimétrica para a obtenção das curvas bimodais, e o método gravimétrico para as linhas de amarração. Para o ELV, foi constatado que, para ambos os sais, houve um deslocamento do azeótropo e o enriquecimento da fase vapor em isopropanol, sendo que o acetato de sódio apresentou os melhores resultados, atingindo frações de vapor superiores a 0,90. Para o ELL, os pontos binodais obtidos experimentalmente foram bem ajustados pelos modelos propostos por Mistry et al. (1996) e Merchuk et al. (1998), e, assim como para os resultados para a determinação das linhas de amarração, se mostraram semelhantes aos encontrados na literatura. Os sistemas com sulfato apresentaram duas fases muito aquosas, enquanto que os sistemas com nitrato e acetato originaram uma fase superior rica em álcool e uma fase inferior rica em sal e álcool, demonstrando assim, que o sulfato de sódio não é um bom candidato para esse processo de separação.

Palavras-chave: Glicerol; azeótropo; destilação extrativa; extração líquido-líquido; equilíbrio de fases.

Referências Bibliográficas

- SOUZA, P. P. A. Estudo do equilíbrio líquido-líquido de sistemas ternários 2-propanol-sal-água: experimental e modelagem. **Dissertação** (Mestrado em Engenharia Química, Área de concentração em Processos Químicos). Instituto de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ. 2019.
- SOUZA, C. S. Equilíbrio líquido-vapor do sistema ternário etanol + água + 1-etil-3-metilimidazólio cloreto: experimental e modelagem termodinâmica. 85f. **Dissertação** (Mestrado em Engenharia Química, Área de concentração em Processos Químicos). Instituto de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ. 2016.
- SOUZA, W. L. R., SILVA, C. S., MELEIRO, L. A. C., MENDES, M. F., Vapor-liquid equilibrium of the (water + ethanol + glycerol) system: experimental and modelling data at normal pressure. **Journal of Chemical Thermodynamics**, 67, pp. 106-111. 2013.

ESTUDO DA APLICAÇÃO DO AÇO INOXIDÁVEL EM SUPORTES DE PAINÉIS SOLARES SOB O EFEITO DA CORROSÃO ATMOSFÉRICA

Thais de Oliveira Sousa¹; Alessandra de Almeida Ferreira²; Felipe Martins Vieira³; Tessie Gouvêa da Cruz⁴ & Mariana Teixeira da Costa Machado⁵

1. Discente do curso de Engenharia de Alimentos, DTA/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Engenharia de Materiais, DEQ/UFRRJ; 3. Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ 4. Professora do DEQ/UFRRJ 5. Professora do DTA/UFRRJ.

Grande Área: Engenharia

RESUMO

O crescente engajamento das pessoas e da indústria em relação ao uso consciente dos recursos naturais tem proporcionado grande desenvolvimento tecnológico e crescimento do mercado de energia sustentável. A energia solar é destaque neste setor. O conjunto de painéis solares é constituído, além das células fotovoltaicas, por seus respectivos suportes, os quais podem ser feitos por diferentes materiais, dentre eles, alumínio e aços inoxidáveis. Um suporte de painel solar instalado na região litorânea, por exemplo, pode apresentar corrosividade severa. Isso ocorre, devido às condições da atmosfera marinha por conta da presença de cloretos, ciclos térmicos, ventos, poluentes atmosféricos, chuvas, além de fenômenos como a neblina e o orvalho. Assim, é necessária uma escolha adequada do material para essas estruturas. Exige-se que ele garanta uma resistência mecânica, corrosiva, oxidativa e sobretudo possua uma aparência atraente e que assegure a eficácia na geração e conservação da energia solar fotovoltaica. O presente trabalho vislumbra maior vida útil e menor período de manutenção dos suportes devido a corrosão atmosférica. Sendo assim, ele tem como objetivo comparar a resistência à corrosão de alguns aços inoxidáveis e do alumínio. Isto com o intuito de instigar a aplicação dos aços inoxidáveis em suportes de painéis solares. Nesse propósito, imergiram-se amostras de aços inoxidáveis e alumínio em soluções contendo ácido sulfúrico, efetuando-se uma corrosão acelerada, para avaliar a severidade da corrosão ocorrida após 11 dias. Esse ácido está presente na chuva ácida, formada através da reação de dióxido de enxofre com o vapor de água do ar e precipita como componente dessa chuva. Logo, é provável que os suportes de painéis solares estejam em contato com esse ácido. Avaliou-se a taxa de corrosão a partir do cálculo da perda de milésimos de polegada por ano (MPY), o qual permite classificar a viabilidade do uso do material. O experimento consistiu em imergir, em duplicata, as amostras de cada material em tubos de ensaio com diferentes soluções ácidas sendo elas de 1,5 % v/v, 5,0 % v/v e 10,0 % v/v. Empregou-se o teste de corrosão acelerada em 6 amostras de 4 aços inoxidáveis (304, 304L, 316L e 444), cedidos pela empresa Aperam South America, bem como 6 amostras de alumínio. Após o experimento não houve, dentre as amostras submersas nas soluções ácidas de 1,5 % v/v, elevadas corrosões visualmente perceptíveis para os aços testados. Entretanto, observou-se pequeno desgaste na superfície do alumínio. No geral, notou-se maior corrosão nos aços para a solução de 10,0 % v/v e um comportamento intermediário para a solução de 5,0 % v/v. Os resultados obtidos mostram a superioridade do aço inox na resistência à corrosão frente ao alumínio, podendo ser devido à formação da camada passiva. Sendo assim, quando os suportes solares são sujeitos a severas condições corrosivas pode ser mais interessante (em termos de custo e manutenção) o uso de aços inoxidáveis na confecção de seus suportes.

Palavras-chave: Inox; placas solares; alumínio; desgaste.

Referências Bibliográficas

- DINIZ, Á.; MONNERAT, C. S.; GUEDES, F. N. Estudo do efeito corrosivo dos aços inox AISI 304 e microligado Hardox 600 em meios salinos e ácido. Revista Eletrônica Engenharia de Interesse Social, Minas Gerais, v. 01, n. 1, p. 1-9, 2016.
- PANNONI, F. D. Princípios da proteção de estruturas metálicas em situação de corrosão e incêndio. Manual Corrosão. Gerdau. 6 ed. 2015. p. 21-24.
- PINHO, J. T.; GALDINO, M. A. Manual de Engenharia para Sistemas Fotovoltaicos. 2. ed. rev. e aum. Rio de Janeiro: Ed. do CEPAL - CRESESB, 2014

ESTUDO DE FILMES DE PCL CARREGADOS COM ATORVASTATINA PARA APLICAÇÃO EM REGENERAÇÃO TECIDUAL**Yasmin dos Anjos Garcia¹, Matheus Santos Cunha², Debora Baptista Pereira³, Hellen Regina Oliveira de Almeida⁴, Roberta Helena Mendonça⁵**

1. Aluna de graduação, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Aluno de graduação, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, DEQ/UFRRJ; 3. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 4. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 5. Professora do PPGEQ/DEQ/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A cartilagem articular pode sofrer muitas alterações devido a causas inflamatórias, trauma ou envelhecimento. Essas complicações levam à diminuição da celularidade e posterior degradação da matriz extracelular (ECM) da cartilagem, que é conhecida por sua incapacidade de se regenerar. Portanto, quando se trata de doenças degenerativas, tratamentos sintéticos estão sempre precisando de melhorias¹. Os biomateriais são parte crucial na regeneração da cartilagem e são necessários para o suporte de tecidos e células¹. Uma ampla gama de biomateriais tem sido explorada para uso em engenharia de tecidos de cartilagem, dentre elas polímeros sintéticos como a Policaprolactona (PCL). Devido a sua biocompatibilidade e à biodegradabilidade é extensivamente estudado para liberação controlada de medicamentos e aplicações em engenharia de tecidos. A sua compatibilidade com uma grande variedade de fármacos permite a distribuição uniforme através da matriz de formulação e a sua degradação a longo prazo facilita a liberação em até vários meses². A versatilidade do PCL deve-se ao fato de permitir modificações de suas propriedades físicas, químicas e mecânicas por co-polimerização ou mistura com outros polímeros eficientemente como polímeros naturais e polímeros sintéticos. Por não ser tóxico por natureza e ser compatível com vários tecidos do corpo tais como epidérmico, muscular, ósseo e cartilaginoso, torna-se um material ideal para aplicação em engenharia de tecidos. A atorvastatina é uma estatina sintética e é amplamente comercializada como uma droga que reduz os níveis de colesterol (LDL). Além disso, têm uma série de efeitos benéficos que independem das suas propriedades modificadoras sobre o metabolismo lipídico, os chamados efeitos pleiotrópicos, incluindo o anabolismo ósseo e ações vasodilatadoras, antitrombóticas, antioxidantes e anti-inflamatórias³. No presente trabalho filmes de PCL carregados com Atorvastatina foram produzidos utilizando método *casting* em diferentes concentrações de Atorvastatina (0,04, 0,08, 0,12 e 0,16g) e caracterizados quanto a morfologia, utilizando espectrometria de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), microscopia eletrônica de varredura (MEV) e difração de raio x (DRX). Observou-se que o fármaco foi incorporado de forma positiva nos filmes em todas as concentrações, apresentando picos característicos tanto no FTIR quanto no DRX. Contudo, foi visto que houve melhor visibilidade da superfície dos filmes com menores concentrações de Atorvastatina durante o MEV.

Palavras-chave: Cartilagem; regeneração tecidual; biomateriais.

Referências Bibliográficas

- Sefat, F.; Raja, T. I.; Zafar, M. F.; Khurshid, Z.; Najeeb, S.; Zohaib, S.; Ahmadi, E. D.; Rahmati, M.; Mozafari, M. Chapter 3 - Nanoengineered Biomaterials for Regenerative Medicine. **Micro and Nano Technologies**, p. 39-71, 2019.
- Dash, T. K.; Konki, V. B. Poly-ε-caprolactone based formulations for drug delivery and tissue engineering: a review. **Journal of Controlled Release**, n. 158, p. 15–33, 2012.
- Zhang, Y.; Bradley, A. D.; Wang, D.; Reinhardt, R. A. Statins, bone metabolism and treatment of bone catabolic diseases. **Pharmacol Res**, n. 88, p. 53-61, 2014.

PREPARO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES BIODEGRADÁVEIS COMO SISTEMA DE LIBERAÇÃO CONTROLADA DE MEDICAMENTOS PARA O TRATAMENTO DA ESQUIZOFRENIA

Yasmin dos Anjos Garcia¹, Matheus Santos Cunha², Hellen Regina Oliveira de Almeida³, Debora Baptista Pereira⁴, Roberta Helena Mendonça⁵

1. Aluna de graduação, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Aluno de graduação, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, DEQ/UFRRJ; 3. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 4. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 5. Professora do PPGEQ/DEQ/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A esquizofrenia, uma síndrome clínica crônica complexa, é condicionada à patologia do funcionamento mental e expressa a noção moderna de insanidade e loucura humana. Mesmo com a melhora significativa dos sintomas da esquizofrenia com a administração de antipsicóticos, a ocorrência de efeitos colaterais associados a essas drogas e a necessidade de tratamento contínuo são fatores importantes de não-adesão medicamentosa nos pacientes. A olanzapina, em 1982, desenvolveu-se como uma alternativa segura ao tratamento quando comparada com as existentes, isso foi possível devido à diminuição dos efeitos colaterais causados nos pacientes¹. Desta forma, há possibilidade de formulações com custo reduzido, maior adesão do paciente ao tratamento e acesso a medicamentos para o cuidado mental. De modo a prevenir o efeito de primeira passagem e obter um aumento na biodisponibilidade da olanzapina em concentrações mais baixas, é necessário desenvolver novos sistemas de liberação controlada para este tipo de fármaco. Uma boa alternativa é o desenvolvimento da via de administração do fármaco via implante (subcutâneo) para, em alguns casos, aumentar a biodisponibilidade do fármaco ativo em até 4-10 vezes². Os sistemas farmacêuticos subcutâneos ou subdérmicos de implantáveis consistem no depósito de fármacos no tecido subcutâneo do paciente por intermédio de pequena cirurgia, utilizando como matriz polímeros ou silicone. Entre os polímeros biodegradáveis, o poli (ácido lático) (PLA), tem se destacado e é intensivamente investigado para aplicações biomédicas, devido sua característica bioreabsorvível, boa adesão celular, leva de 6 meses a 2 anos para se degradar quando exposto ao meio biológico, apresenta propriedade hidrofóbica que possibilita a aderência de materiais biológicos como microrganismos, enzimas, células e proteínas à sua superfície. Algumas aplicações de destaque são na engenharia de tecidos, em implantes dentários e ortopédicos, na hemodiálise e em sistemas de liberação controlada de medicamentos³. O trabalho visa a produção de filmes utilizando o PLA, através do método *solvent casting*, com a variação das concentrações de fármaco Olanzapina. Em sequência, realizou-se a caracterização morfológica, através de espectroscopia de infravermelho (FTIR), microscopia eletrônica de varredura (MEV) e difração de raio x (DRX). Nas formas de análises para a liberação do fármaco destaca-se a boa aderência do fármaco ao PLA. Vale ressaltar que resultados satisfatórios foram obtidos utilizando concentrações de 1:0,7g (PLA;OLA) de fármaco incorporados ao polímero.

Palavras-chave: Esquizofrenia; polímeros; subcutâneo.

Referências Bibliográficas

RAFAEL, C. et al. Protocolo Clínico e Diretrizes Terapêuticas: Esquizofrenia. **Comissão Nacional de Incorporação de Tecnologias no SUS - CONITEC**, p. 321–362, 2013.
GOODMAN; GILMAN. **As Bases Farmacológicas da Terapêutica**. 10. ed. [s.l.] Mc Graw Hill, 2005.
ADAMUS, A. et al. Degradation of nerve guidance channels based on a poly(l-lactic acid) poly(trimethylene carbonate) biomaterial. **Polymer Degradation and Stability**, v. 97, n. 4, p. 532–540, 2012.

DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE ATIVIDADE EM DILUIÇÃO INFINITA DE SISTEMAS TERNÁRIOS ÁLCOOL/ÁGUA/SAL INORGÂNICO UTILIZANDO A MICROEXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA (SPME)**André N. Pereira¹, Rayane M. Assis, Filipe A. Furtado, Gerson L. V. Coelho**

1. Bolsista de Iniciação Científica, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias**RESUMO**

O conhecimento das propriedades termodinâmicas de equilíbrio de fases é fundamental para compreender a interação entre soluto-solvente a nível molecular e de processos termodinâmicos. Tais propriedades são fundamentais no projeto de equipamentos que utilizam processos de separação e purificação como base. Além disso, estes procedimentos costumam ser etapas de elevado custo em plantas industriais. Entretanto, dados experimentais de diversas misturas ainda não estão disponíveis na literatura. Um dos fatores que contribuem para esse cenário é a limitação das técnicas tradicionais quando aplicadas a sistemas mais complexos (e.g. sistemas com mais de dois componentes, multifásicos). Logo, é necessário desenvolver técnicas alternativas mais simples experimentalmente, com menor custo e aplicável a diversos sistemas para determinação de propriedades termodinâmicas, objetivando atender às necessidades da indústria. Dentre as diversas técnicas analíticas, experimentos envolvendo a microextração em fase sólida (SPME – “Solid Phase Microextraction”) são rápidos, relativamente baratos e de fácil implementação, tendo sido amplamente aplicada para o estudo do equilíbrio líquido-vapor de misturas. Neste trabalho, a técnica de SPME foi utilizada para determinar o coeficiente de atividade em diluição infinita (γ_i^∞) de sistemas ternários álcool/água/sal inorgânico nas temperaturas de 25, 45 e 60°C e pressão de 1 atm. Os alcoóis utilizados foram etanol, 1-propanol e 1-butanol. Os sais inorgânicos utilizados foram Carbonato de Sódio (Na_2CO_3), Sulfato de Sódio (Na_2SO_4) e Nitrato de Sódio (NaNO_3) em concentrações de 0,528, 1,368 e 2,121 molal. Os resultados de coeficiente de atividade foram avaliados para identificar o sal que promove a maior separação da mistura etanol-água. O efeito de “salting out” (aumento da disponibilidade de um dado componente na fase vapor devido à adição de um eletrólito à mistura) foi observado com menor intensidade para o NaNO_3 e com maior intensidade para o Na_2SO_4 e Na_2CO_3 . Dentre os sais que promoveram maior efeito de “salting out”, o Na_2SO_4 foi o que apresentou a maior influência no fator de separação. Isso é observado através dos maiores valores de coeficiente de atividade em diluição infinita, determinados experimentalmente, para os alcoóis utilizados neste estudo. Isto pode ser explicado pela maior interação entre o ânion sulfato (SO_4^{2-}) e água do que o para o ânion carbonato (CO_3^{2-}) e água. Os resultados de coeficiente de atividade em diluição infinita obtidos utilizando a SPME foram comparados quantitativamente com dados existentes na literatura, indicando que a técnica de SPME é um método alternativo válido para determinação de coeficientes de atividades em diluição infinita.

Palavras-chave: Cromatografia a gás, coeficiente de partição, efeito salting out, eletrólitos.**Referências Bibliográficas**

- F. A. FURTADO, G. L. V. COELHO. *Determination of infinite dilution activity coefficients using HS-SPME/GC/FID for hydrocarbons in furfural at temperatures of (298.15, 308.15, and 318.15) K*, J. Chem. Thermodyn. 49 (2012), 119-127.
- A.M. Elias, F.A. Furtado, G.L.V. Coelho, *Determination of infinite dilution activity coefficient in ethanol-water-salt systems using SPME-GC-FID*, Quim. Nova 37 (2014), 1177-1181.
- SANTOS, B. R.; ELIAS, A. M.; COELHO, G. L. V., *Use of HS-SPME for analysis of the influence of salt concentration and temperature on the activity coefficient at infinity dilution of ethanol-water-salt systems*, Fluid Phase Equilibria, 429, 21-26, 2016.

MONTAGEM E AVALIAÇÃO DE UNIDADE LABORATORIAL PARA DETERMINAÇÃO DA SOLUBILIDADE DE COMPOSTOS ORGÂNICOS SÓLIDOS EM DIÓXIDO DE CARBONO SUPERCRÍTICO**Ian Pimenta Tuler¹, Rayane Miranda Assis², Gerson Luiz Vieira Coelho³, Filipe Arantes Furtado³**

1. Bolsista de Iniciação Científica, 2. Aluno do PPGEQ/DEQ/UFRRJ, 3. Professor do DEQ/IT/UFRRJ

Grande Área: Engenharias**RESUMO**

As últimas décadas demandam uma busca pela substituição de solventes orgânicos no processo de extração por alternativas mais economicamente viáveis e que causem menor impacto ambiental. A extração com fluidos supercríticos se faz uma área de grande interesse para atender este interesse da indústria. Uma substância pura pode ser observada em três fases distintas (sólido, gás e líquido) que são determinadas por suas variáveis de estado (e.g. o par pressão e temperatura). É possível obter fases distintas fazendo-se alterações nas variáveis de estado através da manipulação das coordenadas de pressão e temperatura. Entretanto, existe um ponto acima do qual essa distinção não é observada com nitidez. Este ponto é conhecido como ponto crítico, e suas referências no diagrama P-T são pressão crítica (P_c) e temperatura crítica (T_c). No estado supercrítico e, a depender dos valores de temperatura e pressão, tais fluidos apresentam massa específica comparável ao de um líquido e coeficientes de difusão comparáveis aos de um gás. Essas características conferem aos fluidos supercríticos um alto poder de solvência e penetração em matrizes de diversas naturezas (e.g. sementes, matrizes de plantas), fazendo-os bons solventes para processos de extração em alta pressão. A utilização de fluidos supercríticos como solventes também oferece benefícios em determinadas reações para produção de fármacos e polímeros, entregando produtos com propriedades uniformes e com alta pureza. O fluido em estado supercrítico mais utilizado é o dióxido de carbono. Isso se dá devido a sua abundância, ter baixa toxicidade, ser um gás em condição ambiente e ter baixos valores de pressão e temperatura críticas. Este trabalho tem por objetivo construir uma unidade experimental que opera em fluxo contínuo para determinação da solubilidade de compostos orgânicos sólidos em fluidos supercríticos. Dados de solubilidade em alta pressão são de demasiada importância para o projeto de equipamentos que realizem a extração de compostos de alto valor agregado de matrizes naturais bem como para o projeto de equipamentos de diminuição de tamanho de partícula (e.g. o processo RESS – “Rapid Expansion of Supercritical Systems”). Partículas micronizadas (tamanho de partícula da ordem do micrômetro) de um composto bioativo aumentam sua biodisponibilidade. Foram realizados diversos ensaios utilizando a unidade construída para determinação da solubilidade do ácido benzoico em dióxido de carbono supercrítico. Entretanto observou-se a precipitação de sólidos no interior do aparato e na saída deste, causando erros entre 40% e 60% no valor da solubilidade, além do entupimento das linhas. Fez-se a adoção de técnicas de controle de temperatura na linha e na válvula de descompressão, visando contornar o problema da precipitação de sólidos, dificuldade já apresentada também por outros autores na literatura. Apesar do contínuo problema com a precipitação, foi possível a observação de ensaios experimentais com êxito, evidenciando o potencial do aparato. A validação da unidade experimental foi realizada pela comparação da solubilidade do ácido benzoico em dióxido de carbono supercrítico com dados presentes na literatura.

Palavras chaves: ácido benzoico, solubilidade, extração, precipitação, processos de separação.**Referências Bibliográficas**

- KAWASE, K. Y. F.; LUCHESE, R. H.; COELHO, G. L. V. Micronized benzoic acid decreases the concentration necessary to preserve acidic beverages against Alicyclobacillus. **Journal of Applied Microbiology**, v. 115, n. 2, p. 466-474, 2013.
- GUPTA, Ram B.; SHIM, Jae-Jin. Solubility in supercritical carbon dioxide. **CRC press**, 2006, 2-16;
- KURNIK, Ronald T.; HOLLA, Samuel J.; REID, Robert C. Solubility of solids in supercritical carbon dioxide and ethylene. **Journal of Chemical and Engineering Data**, v. 26, n. 1, p. 47-51, 1981.

UTILIZAÇÃO DE RESÍDUO DE ROCHA ORNAMENTAL E DE DEMOLIÇÃO CIVIL COMO AGREGADO PARA A CONFECÇÃO DE PISOS SEXTAVADOS**Gabriel Mororó Lima do Cabo¹; Simone Pereira Taguchi Borges²**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professora Associada do DEQ/IT/UFRRJ

Grande Área: Engenharia

RESUMO

Rochas ornamentais são rochas polidas com finalidade decorativa, como exemplos tem-se o granito, quartzo e mármore. O setor de rochas ornamentais brasileiro tem apresentado rendimento significativo nas exportações, apesar das quedas nos últimos anos. Assim como a construção civil, a extração e o polimento das rochas ornamentais geram uma grande quantidade de resíduo sólido. Como destacado por Motta e Fernandes (2003), os resíduos de construção e demolição (RCD) equivalem de 54% a 70% dos resíduos sólidos urbanos gerados em cidades como Rio de Janeiro e Belo Horizonte, gerando entre 0,4 e 0,76 t/hab./ano (ABIROCHAS, 2010). Com base nisto, encontrar formas de reutilizar esses materiais pode ser uma alternativa para minimizar os efeitos da poluição gerada por resíduos sólidos. Desta forma, este trabalho tem por objetivo comparar o desempenho de pisos sextavados produzidos com a substituição da brita (agregado graúdo normalmente utilizada em concretos) por resíduos de mármore, granito e RCD. Com base na ABNT NBR 9781, foram preparados 27 corpos de prova de formato cilíndrico com altura de 100mm e diâmetro de 50mm. Tais corpos foram confeccionados pela substituição da brita utilizada como agregado no concreto pelos resíduos de mármore, granito e RCD de forma a obter 3 grupos de 9 amostras. Para atingir uma resistência característica à compressão (f_{pk}) de 35 MPa e valor médio de absorção de água menor ou igual à 6%, o traço do concreto foi preparado com 1:1,2:3 de cimento Portland, areia seca e agregado, respectivamente. Após a definição do traço, a relação água cimento foi determinada com a utilização do gráfico de Abrams e pela observação do estado do concreto durante a mistura. Desta forma, a relação água cimento para o mármore foi de 0,5, assim como para o granito, e 0,6 para o RCD. Após sua confecção em moldes de PVC, os corpos de prova foram submetidos aos ensaios de compressão e absorção de água a partir de 28 dias de cura, em solução saturada com carbonato de cálcio (CaCO₃). As amostras apresentaram resistência à compressão abaixo do valor mínimo especificado pela norma, 16,88±4,62 MPa para o mármore, 13,60±2,40 MPa para o granito e 15,45±3,05 MPa para o RCD. A absorção de água apresentada foi acima da estipulada pela norma, 7,12±0,23% para o mármore, 7,20±0,14% para o granito e 12,73±0,19% para o RCD. Vários fatores foram observados durante o processo que podem ser atribuídos a esses resultados, como: agitação não eficiente durante a moldagem gerando porosidade nas amostras; a utilização de CaCO₃ ao invés do hidróxido de cálcio (CaOH) na cura pode ter ocasionado a carbonatação; e utilização de molde não adequado pode ter ocasionado inclinações nas superfícies dos corpos de prova que afetaram os ensaios de compressão.

Palavras-chave: Rochas ornamentais, RCD, resíduo sólido

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABNT – Associação Brasileira de Normas Técnicas. NBR 9781 – **Peças de concreto para pavimentação - Especificação e métodos de ensaio**. Rio de Janeiro. Fevereiro, 2013.
- MARÇAL, Rubens L. S. B. **Fabricação de vidros especiais a partir de resíduos da indústria de rochas ornamentais**. Disponível em: http://www.ime.eb.mil.br/arquivos/teses/se4/mec2011/Dissert_RuMar.pdf (capturado em 09 ago. 2019).
- OLIVEIRA, Edielton G. de; MENDES, Oscar. **Gerenciamento de resíduos da construção civil e demolição: estudo de caso da resolução 307 do conama**. Disponível em: <https://mac.arq.br/wp-content/uploads/2016/03/estudo-de-caso-construtora-consciente.pdf> (capturado em 02 ago. 2019).

ANÁLISE DA CAPACIDADE ADSORVENTE DO GENGIBRE (*Zingiber officinale roscoe*) NO TRATAMENTO DE EFLUENTES TÊXTEIS**Arthur Felix Mataveli de Andrade¹; Ana Carolina da Silva² & Marisa Fernandes Mendes³**

1. Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Discente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharia

RESUMO

A indústria têxtil enfrenta um grande problema na esfera de conservação ambiental, sendo este a liberação de corantes em ecossistemas aquáticos através de seus efluentes. A presença dos corantes reduz a penetração da luz solar no ambiente aquático, ocasionando, conseqüentemente, uma diminuição na capacidade fotossintética dos organismos que ali habitam. Entre os métodos de tratamento de efluentes da indústria têxtil para remoção de corantes, a adsorção tem ocupado uma posição de destaque, uma vez que possibilita o reaproveitamento de resíduos agrícolas de baixo valor agregado. Frente a isso, surge a oportunidade de aliar esta técnica para o aproveitamento de resíduos de gengibre, promovendo um destino adequado para os rizomas considerados inapropriados para a comercialização *in natura* e os resíduos provenientes das indústrias de produção de óleo essencial e de oleoresina. Em vista disso, este trabalho visou estudar a capacidade adsorvente da torta de gengibre frente ao corante alaranjado de metila. Para a realização deste estudo, os rizomas do gengibre foram devidamente lavados e prensados. A torta obtida foi seca, moída e, posteriormente, peneirada para a obtenção de duas diferentes granulometrias: amostra 1 (42-80 mesh) e amostra 2 (270 mesh). Foram utilizados 25 mL de solução de corante com concentração de 100 ppm em contato com 0,150 g de adsorvente, sob diferentes tempos operacionais (0-360 min). Com base nos resultados obtidos, verifica-se que as amostras apresentaram percentuais de remoção com diferença significativa após 90 min. Contudo, o maior percentual de remoção (44,52%) foi obtido para o adsorvente de menor granulometria (amostra 2), em 360 min de adsorção, mas o mesmo comportamento não foi observado para a maior granulometria, cujo percentual de remoção foi de apenas 8,47%. Após a realização do estudo com as granulometrias *in natura* e a constatação do baixo percentual de remoção da amostra 1, decidiu-se calcinar este material para avaliar se houve alteração em sua capacidade adsorvente. O percentual de remoção obtido após esse processo, considerando-se 360 min de contato, foi de 79,42%, sendo possível observar uma melhora no percentual de remoção da amostra 1. Pode-se concluir que a granulometria e o processo de tratamento do adsorvente são um dos fatores que afetam a eficiência do processo.

Palavras-chaves: Gengibre, adsorção, alaranjado de metila.

Referências Bibliográficas

- Magalhães, M. T.; Koketsu, M.; Gonçalves, S. M.; Duarte, F. R.; Godoy, R. L. O.; Lopes, D. Gengibre (*Zingiber officinale Roscoe*) brasileiro: aspectos gerais, óleo essencial e oleoresina. Parte 1 – Aspectos gerais, óleo essencial. *Ciência e Tecnologia dos Alimentos*, 17 (1997), 64-69.
- Singh, N. B.; Nagpal, G.; Agrawal, S.; Rachna. Water purification by using Adsorbents: A Review. *Environmental Technology & Innovation*, 11 (2018), 187–240.
- Ahmad, R.; Kumar, R. Adsorption studies of hazardous malachite green onto treated ginger waste. *Journal of Environmental Management*, 91 (2010), 1032–1038.

ESTUDO DO PROCESSO DE ADSORÇÃO DE CORANTE EM CARVÃO ATIVADO PROVENIENTE DE REJEITO AGRÍCOLA**Matheus Santos Parente Carneiro¹; Eliana Zaroni Megale²; Francisco Eduardo Aragão Catunda Júnior³ & Marisa Fernandes Mendes⁴**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Bolsista CAPES, Discente da Pós-Graduação em Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Professor do Centro de Ciências Exatas, Naturais e Tecnológica, UEMASUL; 4. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Os corantes são amplamente utilizados em indústrias têxteis, de couro e papel, fazendo com que o seu tratamento seja de fundamental importância, pois tais efluentes podem causar altos impactos ambientais, devido à dificuldade na realização da fotossíntese pelo impedimento da passagem da luz solar (Coronilla *et al.*, 2015). Além dos fatores ambientais, o tratamento inadequado pode ocasionar danos à saúde humana, irritações na pele, dores de cabeça e alergias (ZHAI *et al.*, 2014). Tendo em vista esses fatores, faz-se necessária a remoção do corante em meios aquosos, tendo a adsorção como um dos principais processos para esta finalidade, devido ao baixo custo de operação e alta eficiência. O carvão ativado mineral é comumente utilizado, porém seu alto custo acaba sendo um desafio, e rejeitos agrícolas são estudados e analisados como adsorventes substitutos para o carvão, como uma forma de substituição. A seringueira (*Hevea Brasiliensis*), nativa da floresta amazônica, tem grande importância comercial devido à produção do látex, que é o principal componente na fabricação da borracha. Porém, a casca da semente da seringueira é considerada um rejeito agrícola, sendo então descartada. Diante disso, o objetivo desse trabalho foi analisar o processo de adsorção do corante alaranjado de metila, em carvão ativado, tratado com ácido nítrico, da casca da semente da seringueira. Os experimentos foram realizados em batelada para que os efeitos da variação da temperatura do processo, concentração inicial da solução e do tempo de contato fossem analisados. Para isso, foram utilizadas cinco concentrações diferentes (25 mg/L, 50 mg/L, 75 mg/L, 100 mg/L e 150 mg/L) e três temperaturas distintas (25 °C, 35 °C e 45 °C), sendo os experimentos realizados em triplicata. O comportamento do equilíbrio foi avaliado pelas isotermas de Freundlich e Langmuir, para as três diferentes temperaturas. Os resultados obtidos indicaram que a maior porcentagem de remoção foi obtida usando a concentração inicial de 25 mg/L à 45 °C. O modelo de Freundlich foi o que melhor se ajustou aos dados experimentais, indicando que o processo de adsorção ocorre com a formação de multicamadas sobre o adsorvente.

Palavras-chave: adsorção, alaranjado de metila, isoterma, seringueira.

Referências Bibliográficas

- Coronilla, I. G.; Barrera, L. M.; Urbina, E. C.; **Kinetic, isotherm and thermodynamic studies of amaranth dye biosorption from aqueous solution onto water hyacinth leaves.** *Journal of Environmental Management*, 152 (2015), 99-108.
- ZHAI, L.; BAI, Z.; ZHU, Y.; WANG, B.; LUO, W.; **Fabrication of chitosan microspheres for efficient adsorption of methyl orange.** *Chinese Journal of Chemical Engineering*, v. 26, p. 657-666, 2018.

APLICAÇÃO DO PROCESSAMENTO E ANÁLISE DE IMAGENS NA AVALIAÇÃO DA DISPERSÃO DAS CARGAS EM COMPÓSITOS DE RESINA EPÓXI**Natália de Macedo do Lago¹; Belmira Benedita de Lima Kühn² & Tessie Gouvêa da Cruz Lopes³**

1. Discente de Iniciação Científica do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professor (a) do IT/DEQ/UFRRJ; 3. Professor (a) do IT/DEQ/UFRRJ.

Grande Área: Engenharia de Materiais

RESUMO

Entre os compósitos com reforço de granito estão os fabricados com matriz de resina epóxi, obtidos com grandes quantidades de granito (na forma de partículas de tamanho reduzido) também chamado epoxi-granito. Suas principais propriedades são: fáceis moldagem de peças com geometrias complexas e alta capacidade de amortecimento de vibrações, apresentando elevado módulo de elasticidade e resistência mecânica, o que possibilita sua aplicação em diferentes contextos tecnológicos. O tamanho e a distribuição das partículas e sua pureza, assim como a viscosidade da resina polimérica afetam grandemente a homogeneidade estrutural dos compósitos, sendo difícil a mistura de partículas em uma resina polimérica viscosa. As aglomerações das partículas podem resultar na queda do limite de resistência dos compósitos. Dessa forma, faz-se necessária a caracterização da dispersão dos particulados no compósito final. Neste contexto, o objetivo geral desse trabalho de iniciação científica será avaliar a dispersão das cargas em compósitos obtidos a partir da incorporação de granito na resina epóxi. As amostras foram caracterizadas por microscopia óptica e, a partir das imagens capturadas, foram analisadas a distribuição de partículas (cargas) na matriz de resina epóxi utilizando processamento de imagens combinada a metodologia estatística. Todas as imagens obtidas foram processadas e analisadas utilizando o software público ImageJ, que pode ser obtido com o download no site <http://rsb.info.nih.gov/ij>. Foi analisado um conjunto de amostras contendo quantidades (percentuais) diferentes de partículas de granito (carga) na matriz de resina epoxi. Para cada amostra de determinado percentual foi estudada a distribuição da carga na matriz ao longo de todo corpo de prova. Para isso cada corpo de prova foi cortado em pedaços de comprimento predeterminado e cada um deles analisados em relação a parâmetros de distribuição na matriz. Os parâmetros medidos a partir do processamento das imagens permitiram observar uma tendência a decantação das partículas de granito (carga) na matriz de epóxi. Foram estudadas as espessuras das camadas de decantação das partículas de granito (carga) e sua homogeneidade de distribuição espacial ao longo da peça. Os resultados obtidos serão analisados e associados ao processo de fabricação dos compósitos com o objetivo de adequar o processamento de obtenção aos padrões de qualidade exigidos na aplicação do produto final.

Palavras-chaves: Compósitos, Resina Epóxi, Granito, Análise de Imagens.

Referências Bibliográficas

- ATKINSON, G. AND SHI, G., **Characterization Of Inclusions In Clean Steels: A Review Including The Statistics of Extremes Methods**. - Progress In Materials Science 48 (2003) 457-520.
- CRUZ, T. G., Tese de Doutorado Feg-Unesp, **Monitoramento Por Microscopia Óptica E Processamento Digital De Imagens Do Processo De Conformação Cerâmica Por Consolidação Com Amidos Comerciais**, 2007.
- PIRATELLI-FILHO, A.; LEVY-NETO, F., Behavior of Granite - **Epoxy Composite Beams Subjected to Mechanical Vibrations**. *Materials Research*, Vol. 13(4), pp497-503,2010.

AVALIAÇÃO DO CO₂ SUPERCRÍTICO NA EXTRAÇÃO DE ÓLEO DA FOLHA DA *Terminalia catappa* Linn**Gabriela Machado Chemp¹; Lizeth Vanessa Amado Jurado²; Marisa Fernandes Mendes³**

1. Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Mestranda PPGEQ/UFRRJ; 3. Professora titular DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Terminalia catappa Linn, popularmente conhecida como amendoeira, é uma árvore originária da Índia e bem adaptada às condições de clima e solos do Brasil. Embora seja bem difundida em território brasileiro, estudos sobre a referida espécie ainda são bem escassos na literatura. Análises apontam que extratos de suas folhas possuem atividades biológicas importantes tais como antioxidante, anticancerígena, antifúngica, antimicrobiana, anti-inflamatória e antidiabética. Isso provém da composição de suas folhas, que são ricas em flavonóides, taninos, saponinas e fitoesteróis. Desse modo, podem ser consideradas uma biomassa de bastante interesse para a extração de componentes bioativos presentes. A extração com solventes orgânicos e a destilação por arraste a vapor são métodos frequentemente utilizados para a obtenção dos extratos. Em contrapartida, ocorre atualmente o aumento da utilização do processo de extração com fluido supercrítico, isso deve-se às suas vantagens frente aos métodos convencionais, como alto poder de seletividade, é relativamente rápido comparado a outros processos, elimina a etapa de separação solvente extrato e não utiliza solventes orgânicos danosos ao meio ambiente, sendo mais limpo, do ponto de vista ambiental. Dentre os fluidos utilizados, destaca-se o dióxido de carbono supercrítico, isso decorre da sua capacidade de dissolver ou incorporar a maioria das moléculas orgânicas. Além disso, apresenta baixa toxicidade, é um gás inerte, está facilmente disponível e possui uma remoção mais simples, portanto é um solvente ideal para a extração de produtos naturais. Frente a isso, o objetivo desse estudo foi avaliar o comportamento do dióxido de carbono supercrítico na extração do óleo essencial das folhas da *Terminalia catappa* Linn, com variação de temperatura entre 40 °C e 80 °C e pressão de 200 bar a 500 bar. Inicialmente, as folhas utilizadas no processo foram previamente lavadas com água destilada, secas em uma estufa e moídas. Utilizou-se aproximadamente 4,5 g de folhas, as quais foram adicionadas ao extrator, mantendo-o nas condições de temperatura e pressão estabelecidas. Foram coletadas amostras a cada 30 min, até atingir a saturação do processo de extração. No final do processo, conseguiu-se observar que dependendo da pressão e da temperatura analisada, a composição final do óleo variou. Como no ponto de maior eficiência, sendo de 0,93%, a 46°C e 456 bar, apresentando uma alta composição de clorofila, quando comparado com o ponto de menor eficiência de 0,24%, na condição de 350 bar e 80°C. No ponto de menor eficiência obteve-se um óleo límpido e de cor amarelada e o de maior eficiência apresentou um óleo com uma tonalidade verde acentuada. Portanto, pode-se observar que dependendo das condições operacionais trabalhadas, o processo de extração com fluido supercrítico é eficaz no processo de extração do óleo essencial da folha de amendoeira.

Palavras-chave: *Terminalia catappa* Linn; extração; fluido supercrítico.

Referências Bibliográficas

- DIAS, B. Abordagem fitoquímica e farmacológica das folhas de *Terminalia Catappa* L. Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira. Semana Universitária, 2018.
- PETERSEN, H. S. Projeto de engenharia do processo de extração supercrítica de cafeína a partir da erva mate. Porto Alegre: Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul. Dissertação (Mestrado), 2017.
- SANTOS, D. C. Extração com dióxido de carbono supercrítico e estudo da composição dos extratos de sementes de Pitanga. Pirassununga: Universidade de São Paulo. Dissertação (Mestrado), 2012.

Avaliação da eficiência da extração do óleo essencial de gengibre (*Zingiber officinale* Roscoe) usando diferentes solventes

Larissa De Souza Amaro¹; Ana Carolina da Silva²; Marisa Fernandes Mendes³; Renata Nunes Oliveira⁴

1. Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Discente do Programa de Mestrado em Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Professora do DEQ/IT/UFRRJ; 4. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

O gengibre (*Zingiber officinale*) é uma planta pertencente à família *Zingiberaceae*. Atualmente, a produção de gengibre no Brasil é pequena em comparação às outras culturas, equivalendo a 20 t/ha. Contudo, o cultivo é destinado principalmente à exportação na forma *in natura* devido à qualidade dos rizomas reconhecida internacionalmente. Dentre os principais componentes, destacam-se os gingeróis e shogaóis, sendo o 6-gingerol o majoritário. Aos gingeróis são atribuídas propriedades analgésicas, antipiréticas, atividades anti-hepatotóxica, antinauseante e anti-inflamatórias, sendo estas propriedades exploradas na medicina popular. Além dos rizomas, o gengibre pode ser encontrado sob a forma de seus derivados como o óleo essencial e oleoresina. O mercado de óleos essenciais está em crescente desenvolvimento, já que estes produtos de alto valor agregado são amplamente empregados nas indústrias de fármacos, cosméticos e alimentícia, sendo o Brasil um dos maiores produtores mundiais de óleo essencial. Os óleos essenciais apresentam em sua composição compostos aromáticos voláteis e são extraídos a partir de diferentes métodos, tais como a hidrodestilação, arraste a vapor, a extração por solventes orgânicos e a extração com fluido supercrítico. A extração com solventes orgânicos (Soxhlet) baseia-se na afinidade com o material e diversos fatores influenciam nesse processo, afetando diretamente na composição do óleo essencial obtido e no rendimento. Devido a isso, o presente trabalho objetivou avaliar a influência das seguintes variáveis do processo: condição de armazenamento (liofilizado, *in natura*, seco) e tipo de solvente (álcool etílico e hexano) na extração do óleo essencial de gengibre. Os experimentos foram conduzidos fazendo-se uso de 3 g de gengibre picado sob diferentes condições e 150 mL de solvente, sendo mantidos por 5 h na temperatura de ebulição do solvente. O óleo foi concentrado no rotaevaporador a 40°C, sendo posteriormente utilizado para os cálculos do rendimento mássico. Os resultados obtidos comprovaram que a extração com etanol apresentou os melhores rendimentos mássico, sendo de 17% com o gengibre liofilizado, 14,8% com o gengibre seco e 3,6% para o gengibre *in natura*. Entretanto, para a extração com hexano, foram obtidos baixos rendimentos, sendo de 1,9% para o gengibre liofilizado, 2,1% para o gengibre seco e 0,5% para o gengibre *in natura*. Portanto, este estudo possibilitou comprovar a influência do tipo de solvente empregado na extração, uma vez que a grande diferença entre os rendimentos está associada à polaridade dos solventes. Devido a remoção da água presente nos gengibres seco e liofilizado, os mesmos apresentam alto teor de óleo extraído.

Palavras-chave: Soxhlet; óleo essencial; gengibre.

Referências Bibliográficas

SILVEIRA, Jeniffer Cristina; BUSATO, Nathália Viégas; COSTA, Andréa Oliveira Souza da; JUNIOR, Esly Ferreira da Costa. **LEVANTAMENTO E ANÁLISE DE MÉTODOS DE EXTRAÇÃO DE ÓLEOS ESSENCIAIS. ENCICLOPÉDIA BIOSFERA**, Goiânia, 30 nov. 2012.
SHUKLA, Abhishek; NAIK, S.N.; GOUD, Vaibhav V.; DAS, Chandan. **Supercritical CO2 extraction and online fractionation of dry ginger for production of high-quality volatile oil and gingerols enriched oleoresin**. *Industrial Crops & Products*, [S. l.], 3 jan. 2019.
LORENZETTI, Emi Rainildes. **Cultivo de Gengibre**. UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ, MARINGÁ, 2006.

PROCESSAMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE PLACAS CIMENTÍCIAS OBTIDAS COM DIFERENTES PROPORÇÕES DE PÓ FINO DE RESÍDUO DE ROCHAS ORNAMENTAIS**Heshiley Cristhiane Correia da Silva¹; Simone Pereira Taguchi Borges²**

1. Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professora do DEQ/IT/UFRRJ;

Grande Área: Engenharias**RESUMO**

O setor da construção civil provoca grandes impactos ambientais devido ao seu elevado volume de consumo de matérias primas, sendo responsável por 40% a 75% da matéria produzida (AGOPYAN, 2013). A inserção de resíduos de rochas ornamentais na construção civil como substituinte parcial de matéria prima é uma ótima alternativa para diminuição do impacto ambiental e redução da quantidade de recursos naturais retirados do meio ambiente. Isto proporciona funcionalidade ao resíduo de forma a torná-lo matéria prima alternativa de menor custo, contribuindo para um desenvolvimento sustentável do planeta. O presente trabalho tem como intuito avaliar algumas propriedades de peças de concretos para pavimentação intertravada, fabricados a partir da substituição dos agregados finos normalmente utilizados (areia), por resíduo proveniente dos cortes de mármore e granito. As peças foram produzidas a partir de um traço pré-estabelecido 1:1,2:3, representando respectivamente os volumes de cimento, agregado miúdo e brita. A proporção de agregado miúdo variou de 0, 50 e 100% de resíduo de rocha ornamental e areia, sendo denominado de C0, C50 e C100 respectivamente. Para confecção dos blocos intertravados, foi realizada uma mistura manual das matérias primas secas e posteriormente adicionado água para formação da massa cimentícia. O resíduo foi caracterizado quanto as fases cristalinas (por DRX), microestrutura (por MO), e massa específica (por picnometria). Foram produzidas peças cilíndricas de Ø50x100mm, conforme os padrões da norma NBR 5739 (1994). O desmoldo aconteceu em 24 h, seguido de cura em água saturada de carbonato de cálcio por 28 dias, para que ocorresse as reações de hidratação do cimento e, conseqüentemente, as peças adquirissem resistência mecânica. As peças produzidas foram avaliadas quanto massa específica aparente e absorção de água segundo a NBR 9781 (2013). Os traços C0, C50 e C100 apresentaram absorção de água de 5,75, 7,86 e 9,60%, respectivamente, e densidade aparente de 0,56, 0,53 e 0,50 g/cm³, respectivamente. A absorção de água está diretamente relacionada com a porosidade da peça. A NBR 9781 (2013) indica uma absorção de água menor ou igual a 6% para pisos intertravados, e desta forma a utilização de 50 ou 100% de resíduo como agregado fino não atenderam a referida norma. Observou-se que quanto maior a quantidade de resíduo de rochas ornamentais maior o índice de absorção de água, em relação ao concreto de referência com areia natural. Os resíduos de rochas ornamentais são pós muito finos, com maior área específica que a areia, o que ocasiona um aumento na relação água/cimento das misturas, podendo aumentar a porosidade das peças durante a cura. Mais estudos são necessários para avaliar se com quantidades menores que 50% de resíduo as amostras poderiam atender a referida norma para pisos intertravados.

Palavras-chave: Resíduo; pavimentação; concreto.**Referências Bibliográficas**

- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR: 9781 Peças de concreto para pavimentação - Especificação e métodos de ensaio, 2013.
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR: 5739 Concreto - Ensaio de compressão de corpos-de-prova cilíndricos, 1994.
- AGOPYAN, V. Construção Civil consome até 75% da matéria-prima do planeta. In: Globo Ciência. 2013. Disponível em: < <http://redeglobo.globo.com/globociencia/noticia/2013/07/construcao-civil-consome-ate-75-da-materia-prima-do-planeta.html> > Acesso em 9 de junho de 2019.

MÉTODO ALTERNATIVO PARA TRATAMENTO DE ÁGUA BRUTA: ESTUDO DA UTILIZAÇÃO DE SEMENTES *Moringa oleífera* COMO COAGULANTE NATURAL

Camila Nunes Araújo¹; Hannah Virginia Alves Prado Martins²; Hélio Fernandes Machado Junior³

1. Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 3. Professor DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharia Química

RESUMO

A água é uma fonte natural classificada como renovável, finita e aleatória, sendo essencial para a vida humana. No entanto, algumas regiões do Brasil confrontam problemas sérios de escassez deste recurso natural, causado por diferentes motivos, como por exemplo, os custos com tratamento da água, impedindo assim seu consumo. Para a redução de custos, destaca-se o tratamento realizado com o uso de coagulante natural, peça fundamental na operação de recuperação e tratamento de água. Dentre as opções de coagulante tem-se a *Moringa oleífera*, planta com potencial para uso como agente orgânico na remoção da turbidez da água. Diante do exposto, o objetivo do trabalho foi avaliar a eficiência de sementes de *M. oleífera* em remover a turbidez de águas com diferentes níveis de materiais em suspensão. Utilizou-se água com 7, 20, 60, 100, 200, 300, 400, 500 e 600 UNT inicial. O extrato removido da semente de *Moringa oleífera* foi preparado utilizando semente sem casca, processadas em um pilão de cerâmica, nas concentrações de 20, 40, 50, 60, 80 e 100 mg/L, visando um procedimento simplificado e prático. Os tempos de sedimentação foram baseados em dados já existentes na literatura. Todos os tratamentos foram realizados em duplicata e as médias foram descritas em gráficos. Os resultados mostraram que o uso do extrato de sementes foi mais eficiente na remoção de partículas da água que apresenta alta turbidez, havendo remoção de mais de 95% desse parâmetro nas amostras testadas. Além disso, verificou-se uma relação direta entre eficiência de remoção de turbidez com o nível de turbidez inicial, visto que as amostras de fluido contendo a semente com valores de turbidez menores de 60 UNT não apresentaram resultados satisfatórios. A semente provou ser uma alternativa viável, em determinadas condições no tratamento preliminar de água bruta, além de ser uma opção realizável economicamente, visto que sua preparação é simples e sua árvore cresce em regiões desde as subtropicais secas e úmidas, até tropicais secas e florestas úmidas, sendo também uma espécie tolerante a seca, o que a torna apta para o clima brasileiro.

Palavras-chave: clarificação da água, turbidez, Moringaceae, coagulante orgânico.

Referências Bibliográficas

- BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Um recurso cada vez mais ameaçado. Disponível em: <http://www.mma.gov.br/estruturas/sedr_proecotur/_publicacao/140_publicacao09062009025910.pdf> Acesso em 14 de abril de 2019.
- DUKE, J. A. Moringaceae: horseradish-tree, drumstick-tree, sohnja, moringa, murunga-kai, mulungay. In: BENGE, M. D. (Ed.) **Moringa a multipurpose tree that purifies water**. Boston, Science and Technology for Environment and Natural Resources, p.19-28,1987.
- SILVA, M. E. R.; AQUINO, M. D.; SANTOS, A. B. Pós-tratamento de efluentes provenientes de reatores anaeróbios tratando esgotos sanitários por coagulantes naturais e não- naturais. **Revista Tecnologia**, v. 28, n. 2, p. 178-190, 2007.

ESTUDO EXPERIMENTAL DA ESTABILIDADE DA FASE Zr_3Si NO SISTEMA Zr-SiLaryssa de Jesus Ramos¹; Luiz Antônio Borges Júnior²

1. Bolsista PIVIC, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Ligas de zircônio e silício (Zr_xSi_y) têm pontos de fusão elevados (por exemplo, $ZrSi$ e Zr_3Si_2 fundem a 2203 ° C e 2215 ° C, respectivamente). Quando exposta ao ar em alta temperatura, forma uma camada de passivação de óxido (SiO_2 e $ZrSiO_4$), com excelente resistência à oxidação, sugerindo assim que compostos formados pela liga de zircônio e silício possam ser bons candidatos a revestimento para aplicações de alta temperatura. O sistema Zr-Si foi avaliado por Okamoto, que propôs o diagrama apresentando as seguintes fases: α -Zr_{SS}, β -Zr_{SS}, Zr_3Si , Zr_2Si , Zr_5Si_3 , Zr_3Si_2 , α -Zr₅Si₄, β -Zr₅Si₄, α -ZrSi, β -ZrSi, $ZrSi_2$ e Si, além da fase líquida L. A fase Zr_3Si é apresentada por linhas tracejadas, indicando dúvidas quanto a sua formação e qual tipo de reação ocorre a aproximadamente 863°C. A fase Zr_3Si não foi encontrada por alguns autores, Okamoto justificou essa ausência devida à estabilização da fase Zr_5Si_3 causada pela presença de pequenas quantidades de impurezas no Zr. A investigação de fases metaestáveis nos sistema Zr-Si mostrou a presença de uma fase amorfa, que foi formada na faixa de composição de 15-25 %at. Si por solidificação rápida. Em tratamentos térmicos a 600°C a fase amorfa cristalizou-se inicialmente numa mistura de duas fases: uma foi a fase Zr_3Si com estrutura tI32 e a outra foi β -Zr_{SS}. Prosseguindo o tratamento, a fase β -Zr_{SS} transformou-se em α -Zr_{SS}, porém a fase Zr_3Si tI32 não se transformou na estrutura tP32, em tratamentos até 30 minutos; e tratamento por longos períodos ou temperaturas mais altas ainda não haviam sido tentados. Dessa forma o trabalho experimental desenvolvido neste projeto compreendeu as seguintes etapas: (i) Preparação das ligas Zr-Si via fusão a arco: As amostras foram fundidas em um forno a arco com cadinho de cobre eletrolítico refrigerado a água, sob atmosfera de argônio. Cada liga foi submetida a pelo menos 5 etapas de fusão para garantir a homogeneidade composicional. As matérias-primas utilizadas foram Zr em forma de chapa (min. 99,7%) e Si em pedaços (min. 99,998%), todos de alta pureza. As ligas preparadas seguiram as seguintes composições: $Zr_{91,2\%}Si_{8,8\%}$, $Zr_{80\%}Si_{20\%}$; $Zr_{75\%}Si_{25\%}$ e $Zr_{70\%}Si_{30\%}$; (ii) Tratamento térmico: Após a etapa de produção em forno a arco as ligas foram tratadas termicamente a 800°C por 500 horas e a 900°C por 300 horas. As amostras foram encapsuladas em quartzo sob atmosfera de argônio e tratadas em forno resistivo tubular. Os tratamentos foram finalizados com resfriamento abrupto das amostras em água com temperatura próxima a 0°C; (iii) Caracterização das ligas: As amostras fundidas e as tratadas termicamente foram analisadas através da microscopia óptica, microscopia eletrônica de varredura (MEV/EDS) e difração de raios X (XRD), de forma a identificar as fases presentes nas ligas.

Palavras-chave: Diagrama de fases; Liga Zircônio Silício; Zr_3Si .

Referências Bibliográficas

- M. Steinbrück, Prototypical experiments relating to air oxidation of Zircaloy-4 at high temperatures, J. Nucl. Mater. 392 (2009) 531–544, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.04.018>.
- OKAMOTO, H. The Si-Zr (silicon-zirconium) system. Bulletin of Alloy Phase Diagrams, v. 11, p. 513– 19, 1990.
- INOUE, A.; TAKAHASHI, Y.; SURYANARAYANA, C.; MASUMOTO, T. Thermal stability and crystallization behavior of amorphous Zr-M-Si (M = IV - VII group transition metals) alloys. Journal of Materials Science, v. 17, p. 3253–62, 1982.

ESTUDO DE FILMES DE PCL CARREGADOS COM ATORVASTATINA PARA APLICAÇÃO EM REGENERAÇÃO TECIDUAL**Yasmin dos Anjos Garcia¹, Matheus Santos Cunha², Debora Baptista Pereira³, Hellen Regina Oliveira de Almeida⁴, Roberta Helena Mendonça⁵**

1. Aluna de graduação, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Aluno de graduação, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, DEQ/UFRRJ; 3. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 4. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 5. Professora do PPGEQ/DEQ/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A cartilagem articular pode sofrer muitas alterações devido a causas inflamatórias, trauma ou envelhecimento. Essas complicações levam à diminuição da celularidade e posterior degradação da matriz extracelular (ECM) da cartilagem, que é conhecida por sua incapacidade de se regenerar. Portanto, quando se trata de doenças degenerativas, tratamentos sintéticos estão sempre precisando de melhorias¹. Os biomateriais são parte crucial na regeneração da cartilagem e são necessários para o suporte de tecidos e células¹. Uma ampla gama de biomateriais tem sido explorada para uso em engenharia de tecidos de cartilagem, dentre elas polímeros sintéticos como a Policaprolactona (PCL). Devido a sua biocompatibilidade e à biodegradabilidade é extensivamente estudado para liberação controlada de medicamentos e aplicações em engenharia de tecidos. A sua compatibilidade com uma grande variedade de fármacos permite a distribuição uniforme através da matriz de formulação e a sua degradação a longo prazo facilita a liberação em até vários meses². A versatilidade do PCL deve-se ao fato de permitir modificações de suas propriedades físicas, químicas e mecânicas por co-polimerização ou mistura com outros polímeros eficientemente como polímeros naturais e polímeros sintéticos. Por não ser tóxico por natureza e ser compatível com vários tecidos do corpo tais como epidérmico, muscular, ósseo e cartilaginoso, torna-se um material ideal para aplicação em engenharia de tecidos. A atorvastatina é uma estatina sintética e é amplamente comercializada como uma droga que reduz os níveis de colesterol (LDL). Além disso, têm uma série de efeitos benéficos que independem das suas propriedades modificadoras sobre o metabolismo lipídico, os chamados efeitos pleiotrópicos, incluindo o anabolismo ósseo e ações vasodilatadoras, antitrombóticas, antioxidantes e anti-inflamatórias³. No presente trabalho filmes de PCL carregados com Atorvastatina foram produzidos utilizando método *casting* em diferentes concentrações de Atorvastatina (0,04, 0,08, 0,12 e 0,16g) e caracterizados quanto a morfologia, utilizando espectrometria de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), microscopia eletrônica de varredura (MEV) e difração de raio x (DRX). Observou-se que o fármaco foi incorporado de forma positiva nos filmes em todas as concentrações, apresentando picos característicos tanto no FTIR quanto no DRX. Contudo, foi visto que houve melhor visibilidade da superfície dos filmes com menores concentrações de Atorvastatina durante o MEV.

Palavras-chave: Cartilagem; regeneração tecidual; biomateriais.

Referências Bibliográficas

- Sefat, F.; Raja, T. I.; Zafar, M. F.; Khurshid, Z.; Najeeb, S.; Zohaib, S.; Ahmadi, E. D.; Rahmati, M.; Mozafari, M. Chapter 3 - Nanoengineered Biomaterials for Regenerative Medicine. **Micro and Nano Technologies**, p. 39-71, 2019.
- Dash, T. K.; Konki, V. B. Poly-ε-caprolactone based formulations for drug delivery and tissue engineering: a review. **Journal of Controlled Release**, n. 158, p. 15–33, 2012.
- Zhang, Y.; Bradley, A. D.; Wang, D.; Reinhardt, R. A. Statins, bone metabolism and treatment of bone catabolic diseases. **Pharmacol Res**, n. 88, p. 53-61, 2014.

PREPARO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES BIODEGRADÁVEIS COMO SISTEMA DE LIBERAÇÃO CONTROLADA DE MEDICAMENTOS PARA O TRATAMENTO DA ESQUIZOFRENIA

Yasmin dos Anjos Garcia¹, Matheus Santos Cunha², Hellen Regina Oliveira de Almeida³,
Debora Baptista Pereira⁴, Roberta Helena Mendonça⁵

1. Aluna de graduação, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2. Aluno de graduação, Discente do Curso de Engenharia de Materiais, DEQ/UFRRJ; 3. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 4. Bolsista de Mestrado CAPES, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 5. Professora do PPGEQ/DEQ/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

A esquizofrenia, uma síndrome clínica crônica complexa, é condicionada à patologia do funcionamento mental e expressa a noção moderna de insanidade e loucura humana. Mesmo com a melhora significativa dos sintomas da esquizofrenia com a administração de antipsicóticos, a ocorrência de efeitos colaterais associados a essas drogas e a necessidade de tratamento contínuo são fatores importantes de não-adesão medicamentosa nos pacientes. A olanzapina, em 1982, desenvolveu-se como uma alternativa segura ao tratamento quando comparada com as existentes, isso foi possível devido à diminuição dos efeitos colaterais causados nos pacientes¹. Desta forma, há possibilidade de formulações com custo reduzido, maior adesão do paciente ao tratamento e acesso a medicamentos para o cuidado mental. De modo a prevenir o efeito de primeira passagem e obter um aumento na biodisponibilidade da olanzapina em concentrações mais baixas, é necessário desenvolver novos sistemas de liberação controlada para este tipo de fármaco. Uma boa alternativa é o desenvolvimento da via de administração do fármaco via implante (subcutâneo) para, em alguns casos, aumentar a biodisponibilidade do fármaco ativo em até 4-10 vezes². Os sistemas farmacêuticos subcutâneos ou subdérmicos de implantáveis consistem no depósito de fármacos no tecido subcutâneo do paciente por intermédio de pequena cirurgia, utilizando como matriz polímeros ou silicone. Entre os polímeros biodegradáveis, o poli (ácido láctico) (PLA), tem se destacado e é intensivamente investigado para aplicações biomédicas, devido sua característica bioreabsorvível, boa adesão celular, leva de 6 meses a 2 anos para se degradar quando exposto ao meio biológico, apresenta propriedade hidrofóbica que possibilita a aderência de materiais biológicos como microrganismos, enzimas, células e proteínas à sua superfície. Algumas aplicações de destaque são na engenharia de tecidos, em implantes dentários e ortopédicos, na hemodiálise e em sistemas de liberação controlada de medicamentos³. O trabalho visa a produção de filmes utilizando o PLA, através do método *solvent casting*, com a variação das concentrações de fármaco Olanzapina. Em sequência, realizou-se a caracterização morfológica, através de espectroscopia de infravermelho (FTIR), microscopia eletrônica de varredura (MEV) e difração de raio x (DRX). Nas formas de análises para a liberação do fármaco destaca-se a boa aderência do fármaco ao PLA. Vale ressaltar que resultados satisfatórios foram obtidos utilizando concentrações de 1:0,7g (PLA;OLA) de fármaco incorporados ao polímero.

Palavras-chave: Esquizofrenia; polímeros; subcutâneo.

Referências Bibliográficas

RAFAEL, C. et al. Protocolo Clínico e Diretrizes Terapêuticas: Esquizofrenia. **Comissão Nacional de Incorporação de Tecnologias no SUS - CONITEC**, p. 321–362, 2013.
GOODMAN; GILMAN. **As Bases Farmacológicas da Terapêutica**. 10. ed. [s.l.] Mc Graw Hill, 2005.
ADAMUS, A. et al. Degradation of nerve guidance channels based on a poly(l-lactic acid) poly(trimethylene carbonate) biomaterial. **Polymer Degradation and Stability**, v. 97, n. 4, p. 532–540, 2012.

ANÁLISE COMPARATIVA DO EFEITO DOS ACELERADORES TMTD, TBZTD E ZBEC NA VULCANIZAÇÃO DO ELASTÔMERO ISOBUTILENO-ISOPRENO**Matheus Santos Cunha¹; Vinícius Guedes Gobbi²; Talita Goulart da Silva³; Tiago dos Santos Mendonça⁴ & Roberta Helena Mendonça⁵**

1. Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Mestre em Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Discente do Curso de Pós-graduação em Engenharia Química, IT/UFRRJ; 4. Discente do Curso de Pós-graduação em Física, UERJ; 5. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

RESUMO

Elastômeros são materiais poliméricos que apresentam grande deformação elástica sob baixa tensão, retornando quase instantaneamente à condição inicial sem perda significativa de forma e dimensões, em um processo reversível (MANO & MENDES, 1999). Entre os elastômeros, atenção foi dada à borracha de isopropileno-isopreno (IIR) devido a características como alta resistência ao ozônio, baixa permeabilidade ao ar, boa resistência ao envelhecimento e resistência às intempéries quando comparada a outras para produção de câmaras de ar. O IIR apresenta uma cinética de vulcanização mais lenta quando comparada a outros elastômeros relacionado a baixa densidade de ligações insaturadas. Os elastômeros submetidos ao processo de vulcanização com enxofre apresentam alterações físicas, mecânicas e químicas devido à modificação de seu estado plástico ao estado elástico resultante da formação de ligações cruzadas entre as cadeias poliméricas. Além da vulcanização, a cinética pode ser alterada pelo uso de aceleradores destinados a melhorar a eficiência da reticulação que ocorre durante a vulcanização (BARBOSA, 2017). Frequentemente, as formulações de borracha contêm um acelerador binário para melhorar algumas características, como o tempo de segurança, características de vulcanização e propriedades mecânicas finais do material. Um dos problemas relacionados ao uso de aceleradores consiste na liberação de Nitrosamina, substâncias consideradas carcinogênicas por um grande número de organizações internacionais e autoridades reguladoras. Durante o processo de vulcanização são formadas, principalmente, as nitrosaminas N-nitrosodimetilamina, N-nitrosodietilamina e N-nitroso-morfolina. Os aceleradores são os principais causadores do surgimento das nitrosaminas, como o dissulfeto de tetrametil-tiuram (TMTD), que contém em sua estrutura molecular grupos de aminas secundárias. Alguns aceleradores apresentam o comportamento cinético semelhante ao TMTD como o dissulfeto de tetrabenzil-tiuram (TBzTD) e o dibenzilditiocarbamato de zinco (ZBEC) e, de acordo com a literatura, não liberam nitrosaminas nocivas ao meio ambiente. O objetivo do presente trabalho foi a comparação de compostos apresentando o elastômero IIR, através de uma formulação padrão utilizada para confecção de câmaras de ar, e a produção de compostos utilizando os aceleradores TBzTD e ZBEC, assim como o composto padrão utilizando TMTD. Para tal, foi proposto um planejamento experimental para a produção desses compostos. Através da caracterização reológica notou-se que os aceleradores TBzTD e ZBEC não apresentam o mesmo comportamento cinético, principalmente quando analisados os valores de torque máximo (MH) durante a vulcanização no elastômero IIR. Os dados experimentais de MH obtidos foram correlacionados pelo método dos mínimos quadrados (RNL-MMQ) e pela técnica de interpolação TPSIM (*Thin Plate Spline Interpolation Method*) permitindo-se avaliar o efeito dos aceleradores TBzTD e ZBEC nos compostos produzidos. Através da comparação entre as superfícies de resposta de ambos os métodos, foi possível perceber que alguns pontos distinguem o comportamento dos respectivos modelos aos dados experimentais utilizados. De acordo com os resultados do teste-T e ANOVA, foi observado um efeito positivo na adição dos aceleradores TBzTD e ZBEC nos valores do parâmetro MH.

Palavras-chave: TPSIM; Isopropileno-isopreno; vulcanização.

Referências Bibliográficas

MANO, E. B.; MENDES, L. C. **Introdução a Polímeros**. 2ª. ed. São Paulo: Edgard Blucher LTDA, 1999. BARBOSA, R. **Desenvolvimento de novos compostos de borracha natural a partir da desvulcanização em extrusora com rosca dupla**. São Carlos: UFSCar, 2017.

ANÁLISE COMPARATIVA DO EFEITO DOS ACELERADORES TMTD, TBzTD E ZBEC NAS PROPRIEDADES REOLÓGICAS E FÍSICO-MECÂNICAS DO ELASTÔMERO ISOBUTILENO-ISOPRENO**Matheus Santos Cunha¹; Vinícius Guedes Gobbi²; Talita Goulart da Silva³; Tiago dos Santos Mendonça⁴ & Roberta Helena Mendonça⁵**

1. Discente do Curso de Engenharia de Materiais, IT/UFRRJ; 2. Mestre em Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Discente do Curso de Pós-graduação em Engenharia Química, IT/UFRRJ; 4. Discente do Curso de Pós-graduação em Física, UERJ; 5. Professora do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

RESUMO

Elastômeros são polímeros que, em temperatura ambiente, podem deformar-se no mínimo duas vezes o seu comprimento inicial, retornando ao comprimento original rapidamente uma vez retirado o esforço. Tal comportamento deve-se às características borrachosas como a presença de cadeias flexíveis em sua estrutura, consequência das fracas forças intermoleculares secundárias como a força dipolo-induzido, força dipolo-dipolo ou ligação de hidrogênio (CANEVAROLO, 2006). Entre os elastômeros, a borracha de isopropileno-isopreno (IIR) apresenta características como alta resistência ao ozônio, baixa permeabilidade ao ar, boa resistência ao envelhecimento e resistência às intempéries, propriedades interessantes para a produção de câmaras de ar. O IIR apresenta uma cinética de vulcanização mais lenta devido à baixa densidade de ligações insaturadas. Os elastômeros submetidos ao processo de vulcanização com enxofre apresentam alterações mecânicas, físicas e químicas devido à modificação de seu estado plástico ao estado elástico (TAHERI & GEZAZ, 2018). Tais alterações são avaliadas através de caracterizações reológicas e físico-mecânicas, por ensaios reométricos (MDR e RPA), Viscosidade Mooney e Scorch time, assim como Dureza Shore A. Durante o processo de vulcanização são formadas, principalmente, as nitrosaminas N-nitrosodimetilamina, N-nitrosodietilamina e N-nitroso-morfina, substâncias consideradas carcinogênicas por organizações internacionais e autoridades reguladoras. Os aceleradores são os principais causadores do surgimento das nitrosaminas, como o dissulfeto de tetrametil-tiuram (TMTD), que contém em sua estrutura molecular grupos de aminas secundárias. Alguns aceleradores apresentam o comportamento cinético semelhante ao TMTD como o dissulfeto de tetrabenzil-tiuram (TBzTD) e o dibenzilditiocarbamato de zinco (ZBEC) e, de acordo com a literatura, não liberam nitrosaminas nocivas ao meio ambiente. O presente trabalho teve como objetivo a análise comparativa dos aceleradores TBzTD e ZBEC, em separado, com o acelerador TMTD, através da avaliação de medidas reológicas e físico-mecânicas. Através do teste-T para médias e da ferramenta ANOVA, foram comparados os efeitos causados pela variação dos aceleradores supracitados em valores de torque máximo (MH) e, através do gráfico comparativo, foram observadas tendências associadas à variação da quantidade de aceleradores nas medidas físico-mecânicas. Além disso, a fim de compreender de forma mais específica a permuta entre esses aceleradores, foram realizadas medidas físico-mecânicas para observação das propriedades finais dos compostos, ou seja, após o processo de vulcanização. Após a comparação dos dados obtidos entre o composto padrão e as composições propostas foi possível observar que, em termos de propriedades físico-mecânicas, nenhuma composição usando os aceleradores TBzTD e ZBEC reproduziu satisfatoriamente o comportamento do acelerador TMTD em borracha butílica.

Palavras-chave: Reologia; Isopropileno-isopreno; vulcanização.

Referências Bibliográficas

- CANEVAROLO, S. V. **Ciência dos polímeros**. 2^a. ed. São Paulo: Artliber, 2006.
TAHERI, M.; GEZAZ, S. M. Curing Characterization of EPDM Rubber Compounds using RPA: Effects of Cure Conditions. In: **Progress Petrochem Sci**. New York: Crimson Publishing, 2018.

ESTUDO DA DETERMINAÇÃO DA UMIDADE DE *SINTER FEED* EM MEDIDOR DE INFRAVERMELHO, COMO TÉCNICA ALTERNATIVA À PROPOSTA NA NORMA NBR ISO 3087:2011

Luan Gabriel Fonseca dos Santos¹ & Maurício Cordeiro Mancini²

1. Aluno de Iniciação Científica Voluntária, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Professor do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

RESUMO

No presente trabalho foi realizado um estudo comparativo entre as metodologias de determinação de umidade de *sinter feed* em estufa convencional, conforme estabelecido na norma NBR ISO 3087:2011, e aquela realizada em um analisador de umidade por infravermelho da marca Gehaka, modelo IV 2000. Nos experimentos, realizados em quadruplicada, as amostras de *sinter feed*, fornecido pela *Ferrous Resources* do Brasil, foram submetidas à secagem na estufa convencional a 105 °C, por 48 horas e no analisador por infravermelho em temperatura de 140 °C. Os resultados obtidos foram tabulados e comparados entre si, para as amostras de lotes correspondentes. Verificou-se, pelo teste de *Tukey*, que não há diferença significativa entre os valores médios da umidade do *sinter feed* obtidos pelo método convencional e pelo método alternativo, utilizando o analisador de umidade por infravermelho. Também foi possível verificar, por meio da análise de variância, que não há diferenças significativas entre os dois tipos de metodologia. Em ambas as análises estatísticas, o nível de confiança foi de 95 %. Considerando que o tempo de análise pelo método convencional é de, no mínimo, seis horas e que o tempo médio de análise de uma amostra no analisador de infravermelho é de apenas dez minutos, a técnica alternativa mostra-se promissora para a determinação da umidade em carregamentos de *sinter feed*, antes do seu embarque para exportação, o que pode significar mais agilidade, com a mesma precisão do método convencional.

Palavras-chave: Secagem por Infravermelho, Sinter feed, Transferência de Massa.

Referências Bibliográficas

- AGUIAR, V. A. F.; Estudo da cinética de secagem e avaliação de metodologias para a determinação da umidade de *sinter feed* em analisador de umidade por infravermelho e em estufa. Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Química em **2018**.
- CUNHA, C. C. R. F. D. Determinação dos teores de água em amostras de minério de ferro, manganês e de oxihidróxidos de ferro sintéticos. Dissertação (Mestrado em Química) - UFOP. Ouro Preto, p. 92. **2016**.
- DNPM. Sumário Mineral. Departamento Nacional de Produção Mineral. Brasília, p. 141. **2016**.

TRATAMENTO DE EFLUENTES DE CAVAS DE MINERAÇÃO DE AREIA – LEVANTAMENTO DOS AREAIS DE SEROPÉDICA E CONSTRUÇÃO DE CURVAS DE CALIBRAÇÃO DE SULFATO E DE ALUMÍNIO**Pedro Henrique Chaves de Souza Araújo¹; Rui de Góes Casqueira²; Fabíola Oliveira da Cunha³**

1. Bolsista PIBIC, discente do curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Docente do DEQ/IT/UFRRJ; 3. Docente do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Segundo a Secretaria de Geologia, Mineração e Transformação Mineral (SGM), o Brasil produziu, em 2008, 280 Mt de areia para a construção civil, onde 70% da extração ocorria em leitos de rios. No Rio de Janeiro, 80% da extração de areia era feita por dragagem em cavas inundadas no denominado Polígono de Piranema, que abrange os municípios de Itaguaí e Seropédica. Essa técnica consiste basicamente no decapeamento da área para remover a vegetação e a camada superficial do solo e a posterior extração do material arenoso até atingir o nível freático. Neste momento, temos a denominada areia bruta que, dependendo do produto final desejado, passa por etapa de beneficiamento. A reutilização dos espaços pós-encerramento das atividades mineradoras de areia, com a formação das lagoas, torna-se um entrave ao setor areeiro e aos órgãos de meio ambiente, tendo em vista as características destas reservas e o modo como é explorado. As lagoas situadas em Seropédica tem uma água de coloração azul devido às altas concentrações de sulfato e alumínio, tornando-as impróprias ao consumo humano e ao uso recreativo de contato primário. Em 2014, as primeiras ações mitigatórias foram realizadas pelo Instituto Estadual do Ambiente (INEA), através do Programa ROAS (Retomada do Ordenamento dos Arais de Itaguaí e Seropédica), porém, verificou-se na literatura que não há uma técnica aplicável à região, que seja satisfatória do ponto de vista da reabilitação das lagoas inundadas pelo jazidamento de areia. Em âmbito nacional, existe o Cadastro Nacional de Usuários de Recursos Hídricos (CNAHR) que foi criado para conter os registros dos usuários de recursos hídricos (superficiais e subterrâneos) que captam água, lançam efluentes ou realizam demais interferências diretas em corpos hídricos (rio ou curso d'água, reservatório, açude, barragem, poço, nascente etc.). A Agência Nacional de Águas (ANA) é a responsável por manter o CNAHR e armazenar as informações dos usuários. O objetivo do presente trabalho foi o de realizar um levantamento acerca dos areais localizados no Município de Seropédica e de confeccionar as curvas de calibração de sulfato e alumínio para, posteriormente, desenvolver o projeto de tratamento de efluentes a base de alumínio e sulfato oriundos de cava de mineração de areia por precipitação química associada à técnica de flotação. Utilizando na busca somente as palavras "AREAL" ou "AREIA" na Razão Social, foram encontrados 59 areais cadastrados como usuários no Cadastro Geral de Empreendimentos da Região Hidrográfica II Guandu em 2013. Entretanto, para a mesma Região Hidrográfica, somente 27 empreendimentos encontravam-se cadastrados como Pontos de Interferência – Captações – pelo Comitê Guandu em novembro de 2018 no Município de Seropédica, um número reduzido de areais cadastrados. Como as quantificações de alumínio e de sulfato serão necessárias para o desenvolvimento do projeto, foram construídas as curvas de calibração do sulfato na faixa de 10 a 700 mg/L por Turbidimetria conforme o Guia de Coleta e Preservação de Água da CETESB (1992) e do alumínio na faixa de 0,5 a 20 mg/L por Espectrofotometria conforme técnica utilizada por Andrade, Souza e Piovezan (2016).

Palavras-chaves: Precipitação química, flotação, remoção de alumínio, remoção de sulfato.

Referências Bibliográficas

- CETESB. **Guia de Coleta e Preservação de Água**. Determinação de Sulfato em Águas – Método Turbidimétrico – CETESB; Nov/1992.
- ANDRADE, E.; SOUZA, N.; PIOVEZAN, M. **Determinação de alumínio presente em água de lodo residual do tratamento de água do município de Lages**. Instituto Federal de Santa Catarina, 2016.

TRATAMENTO DE EFLUENTES DE CAVAS DE MINERAÇÃO DE AREIA – LEVANTAMENTO DOS AREAIS DE SEROPÉDICA E CONSTRUÇÃO DE CURVAS DE CALIBRAÇÃO DE SULFATO E DE ALUMÍNIO**Pedro Henrique Chaves de Souza Araújo¹; Rui de Góes Casqueira²; Fabíola Oliveira da Cunha³**

1. Bolsista PIBIC, discente do curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 2. Docente do DEQ/IT/UFRRJ; 3. Docente do DEQ/IT/UFRRJ.

Grande Área: Engenharias

RESUMO

Segundo a Secretaria de Geologia, Mineração e Transformação Mineral (SGM), o Brasil produziu, em 2008, 280 Mt de areia para a construção civil, onde 70% da extração ocorria em leitos de rios. No Rio de Janeiro, 80% da extração de areia era feita por dragagem em cavas inundadas no denominado Polígono de Piranema, que abrange os municípios de Itaguaí e Seropédica. Essa técnica consiste basicamente no decapeamento da área para remover a vegetação e a camada superficial do solo e a posterior extração do material arenoso até atingir o nível freático. Neste momento, temos a denominada areia bruta que, dependendo do produto final desejado, passa por etapa de beneficiamento. A reutilização dos espaços pós-encerramento das atividades mineradoras de areia, com a formação das lagoas, torna-se um entrave ao setor areeiro e aos órgãos de meio ambiente, tendo em vista as características destas reservas e o modo como é explorado. As lagoas situadas em Seropédica tem uma água de coloração azul devido às altas concentrações de sulfato e alumínio, tornando-as impróprias ao consumo humano e ao uso recreativo de contato primário. Em 2014, as primeiras ações mitigatórias foram realizadas pelo Instituto Estadual do Ambiente (INEA), através do Programa ROAS (Retomada do Ordenamento dos Arais de Itaguaí e Seropédica), porém, verificou-se na literatura que não há uma técnica aplicável à região, que seja satisfatória do ponto de vista da reabilitação das lagoas inundadas pelo jazidamento de areia. Em âmbito nacional, existe o Cadastro Nacional de Usuários de Recursos Hídricos (CNARH) que foi criado para conter os registros dos usuários de recursos hídricos (superficiais e subterrâneos) que captam água, lançam efluentes ou realizam demais interferências diretas em corpos hídricos (rio ou curso d'água, reservatório, açude, barragem, poço, nascente etc.). A Agência Nacional de Águas (ANA) é a responsável por manter o CNARH e armazenar as informações dos usuários. O objetivo do presente trabalho foi o de realizar um levantamento acerca dos areais localizados no Município de Seropédica e de confeccionar as curvas de calibração de sulfato e alumínio para, posteriormente, desenvolver o projeto de tratamento de efluentes a base de alumínio e sulfato oriundos de cava de mineração de areia por precipitação química associada à técnica de flotação. Utilizando na busca somente as palavras "AREAL" ou "AREIA" na Razão Social, foram encontrados 59 areais cadastrados como usuários no Cadastro Geral de Empreendimentos da Região Hidrográfica II Guandu em 2013. Entretanto, para a mesma Região Hidrográfica, somente 27 empreendimentos encontravam-se cadastrados como Pontos de Interferência – Captações – pelo Comitê Guandu em novembro de 2018 no Município de Seropédica, um número reduzido de areais cadastrados. Como as quantificações de alumínio e de sulfato serão necessárias para o desenvolvimento do projeto, foram construídas as curvas de calibração do sulfato na faixa de 10 a 700 mg/L por Turbidimetria conforme o Guia de Coleta e Preservação de Água da CETESB (1992) e do alumínio na faixa de 0,5 a 20 mg/L por Espectrofotometria conforme técnica utilizada por Andrade, Souza e Piovezan (2016).

Palavras-chaves: Precipitação química, flotação, remoção de alumínio, remoção de sulfato.

Referências Bibliográficas

- CETESB. **Guia de Coleta e Preservação de Água**. Determinação de Sulfato em Águas – Método Turbidimétrico – CETESB; Nov/1992.
- ANDRADE, E.; SOUZA, N.; PIOVEZAN, M. **Determinação de alumínio presente em água de lodo residual do tratamento de água do município de Lages**. Instituto Federal de Santa Catarina, 2016.

**PRODUÇÃO DE ÓLEO ESSENCIAL DE CAPIM CITRONELA (*Cymbopogon nardus* L. Rendle),
CULTIVADO EM SOLO ARGILOSO UTILIZADO PARA DISPOSIÇÃO FINAL DE ÁGUA
RESIDUÁRIA DE BOVINOCULTURA DE LEITE**

**Vitor Duque Estrada do Nascimento¹; Fabiana da Costa Barros²; Deivide de Brito Freitas³;
Pedro Eduardo Diniz da Cunha⁴; Leonardo Duarte Batista da Silva⁵**

1. Bolsista do PIBIC, Discente do curso de Agronomia, IA/UFRRJ; 2. Mestranda do programa de Pós-graduação em Engenharia de Biosistemas; 3. Bolsista do PIBIC, Discente do curso de Agronomia, IA/UFRRJ; 4. Discente do curso de Agronomia, IA/UFRRJ; 5. Professor adjunto do Departamento de Engenharia, Instituto de Tecnologia IT/UFRRJ.

Grande área: Engenharias

RESUMO

No que tange ao cenário agropecuário, segundo a Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA), o país ocupa o quarto lugar em produção de leite mundial. No entanto, a correta disposição da água residuária de bovinocultura (ARB) utilizada nos sistemas de confinamento tem se tornado um grande desafio, tendo em vista a alta carga orgânica que o efluente possui, além de patógenos e metais pesados, provenientes do tipo de alimentação utilizada (Dias, 2017). Diante do exposto, o presente estudo teve como objetivo avaliar a produtividade da massa de óleo essencial de citronela, quando esta, é submetida a diferentes concentrações de ARB. As atividades experimentais de campo foram conduzidas em estufa no Centro Estadual de Pesquisa em Agricultura Orgânica (PESAGRO-RIO), localizada no município de Seropédica, estado do Rio de Janeiro. Foram utilizados vasos de 18L preenchidos com brita nº zero, uma manta geotêxtil e completado com solo argiloso retirado da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. As mudas de citronela foram transplantadas para os vasos e fertirrigadas por meio de medidor graduado. O delineamento experimental foi inteiramente casualizado, com 5 tratamentos (0%, 50%, 100%, 200%, 400% de N) e 10 repetições cada, totalizando 50 vasos úteis e mais 48, usados como bordadura. Após a planta atingir a altura ideal de corte, realizou-se a amostragem das folhas para posterior análise de extração de óleo, por meio do método de Soxhlet. A metodologia consiste em utilizar a planta seca, disposta em cartucho de celulose e coloca-los em contato com um meio extrator, nesse caso, o hexano. Ao final da extração, observou-se que os teores de óleo responderam linearmente à medida que a ARB aumentava, com exceção do tratamento de 0% de N.

Palavras-chave: biofertilizante, fertirrigação, extração de óleo

Referências Bibliográficas

Dias, M. B. Manejo Profissional da Pastagem: Fundamento para uma Pecuária Empresarial. Embrapa, 431(1983-0513), 1–29, 2017.

Ciências Exatas e da Terra



UMA CONJECTURA SOBRE A DISTÂNCIA ENTRE VÉRTICES QUE COLIDEM EM REPRESENTAÇÕES BARICÊNTRICAS DE REDES 3-PERÍODICAS: UMA DESIGUALDADE DE MÉDIAS

Geovane Matheus Lemes Andrade¹ & Montauban Moreira de Oliveira Júnior²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática, DEMAT/UFRRJ; 2. Professor do DEMAT/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Este trabalho estuda propriedades de grafos infinitos simples (sem laços ou arestas múltiplas), 3-conexos, localmente finitos (cada vértice possui grau finito) e periódicos. Essencialmente, é o que se define como redes periódicas. A razão que leva ao estudo de tais grafos infinitos é a modelagem de estruturas cristalinas, objeto de pesquisa da Cristalografia. Os vértices e as arestas de um grafo representam os átomos e as interações químicas entre os mesmos, respectivamente. A periodicidade reduz muito a complexidade do grafo infinito, pois ao invés de haver uma quantidade infinita de informações, há uma quantidade finita que se repete periodicamente. O grafo em si é uma entidade abstrata. A princípio as arestas não possuem comprimento, e não há como se medir os ângulos entre as mesmas. No entanto, se os vértices e as arestas forem substituídos respectivamente por pontos e segmentos de reta mergulhados no espaço Euclideano, as simetrias do mergulho do grafo podem ser utilizadas como ferramentas adicionais. O mergulho de um grafo no espaço Euclideano é definido como uma representação do grafo. Na verdade, será procurada uma representação definida como representação baricêntrica, onde cada vértice está no baricentro (centro de gravidade) dos seus primeiros vértices vizinhos. Ela é de fato uma configuração de máxima simetria. Eventualmente, quando se busca a representação baricêntrica da rede periódica pode ocorrer colisão de vértices, ou seja, a sobreposição de dois ou mais vértices. Saber se uma rede apresenta colisões de vértices em sua representação baricêntrica é um problema muito importante para a Cristalografia. Redes que admitem tal fenômeno ainda não são muito conhecidas. Uma sequência de três artigos, culminando com *Non-crystallographic nets: characterization – first steps toward a classification* publicado em 2014 trata de várias classes de tais redes, iniciando este trabalho. É evidente que este estudo ainda precisa ser mais desenvolvido, principalmente com respeito às propriedades topológicas e algébricas de tais redes, que permitem análises mais teóricas e resultados mais gerais. Neste trabalho, o foco foi a análise de uma promissora conjectura que relacionaria três características topológicas das redes 3-periódicas que não possuem nenhuma correlação explícita. Considerando uma rede periódica, U e V vértices que colidem em sua representação baricêntrica e α o coeficiente principal da Equação Baricêntrica, o objetivo foi verificar se $d = \lfloor c/\alpha \rfloor$, onde d é a distância entre U e V , c é o comprimento do relator da rede e $\lfloor x \rfloor$ é a função piso de x . A demonstração foi parcialmente realizada através do estudo dos coeficientes da projeção dos caminhos entre os vértices no Espaço Cociclo do Grafo Quociente (com resultados de Teoria Algébrica de Grafos), e foi exposta na RAIC 2018. No entanto, o outro sentido da desigualdade, fundamental para a demonstração completa, mostrou-se falso. Um contraexemplo foi desenvolvido para isso, através da classe dos grafos articulados cíclicos.

Palavras-chave: Redes Periódicas; Colisões de Vértices; Representações Baricêntricas.

Referências Bibliográficas

- DE OLIVEIRA JR, M.M., EON, J-G **Non-crystallographic nets: characterization – first steps toward a classification**, Acta Crystallographica A, v. 70, pp.217-228, 2014.
DE OLIVEIRA JR, M.M., DA SILVA, E. R., ANDRADE, G. M. L., EON, J-G **Vertex collisions in 3-periodic nets of genus 4**, Acta Crystallographica A, v. 74, pp.600-607, 2018.
GODSIL, C., ROYLE, G. **Algebraic Graph Theory** 1ed New York, Springer, 2001.

DETERMINAÇÃO DE ANTIMÔNIO POR FLUORESCÊNCIA DE RAIOS- X POR DISPERSÃO DE COMPRIMENTO DE ONDA PARA ANÁLISE FORENSE DE PROJÉTEIS DE FUZIL**Andressa da Silva Antunes¹; Victor Gabriel de Paula Saide²; Mathieu Tubino³; Gustavo Shimamoto⁴ & Jose Geraldo Rocha Junior⁵**

1. Discente do Curso de Química IQ/UFRRJ; 2. Discente de doutorado IQ/UFRRJ; 3. Professor do IQ/UNICAMP; 4. Discente de doutorado IQ/UNICAMP; 5. Professor do IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A procedência de projéteis encontrados em cenas de crime é comumente identificada por comparação balística. No entanto, devido à alta energia cinética, os projéteis de fuzil podem ser deformados, impossibilitando tal comparação¹. A composição química do projétil, neste caso, pode ser empregada para esta finalidade. O *Federal Bureau of Investigation* (FBI) realizou um estudo sobre a análise composicional das ligas de chumbo (CABL) e destacaram sete elementos, que se analisados em conjunto, são responsáveis pela associação de projéteis de diferentes marcas e tipos sendo: As, Sb, Sn, Cu, Bi, Ag, e Cd². Entretanto a técnica utilizada é a de espectrometria de emissão atômica com plasma acoplado (ICP-OES) que além de ser destrutiva possui um alto custo operacional. Dentre os elementos citados, o antimônio geralmente é inserido na liga de chumbo em concentrações mais altas para conferir dureza na liga, tornando este elemento um elemento padrão nas ligas de fundição de projéteis, por isso, é um elemento de extrema importância para CABL. Neste trabalho foi realizada a determinação do teor de antimônio no núcleo de projéteis de fuzil por fluorescência de raios-X por dispersão de comprimento de onda (WDXRF), como técnica alternativa, para a discriminação de projéteis de diferentes procedências. Para tal, 14 amostras de núcleo de projéteis de fuzil calibre 7.62 foram utilizadas sendo: 2 amostras da Companhia Brasileira de Cartuchos (CBC ano 2016); 2 da CBC (ano de 2010); 4 da *Israel Military Industries* (IMI); 4 da *Federal Cartridge* (FC); e 2 amostras do *Fray Luis Beltrán* (FLB), totalizando 5 grupos. As amostras foram removidas do cartucho segundo procedimento descrito por Dufosse e Tournon³ e divididas em três fragmentos metálicos (a,b e c) que, posteriormente, foram compactados no formato de discos de 1 cm de diâmetro e lavados com HNO₃ 1% v/v, em banho ultrassônico. As análises foram realizadas em espectrômetro WDXRF (Shimadzu, modelo XRF-1800; Kyoto, Japão) com mapeamento de 250 µm feito com raios-X de alta ordem equipado com ânodo de ródio, e *software* em ambiente com Windows XP. O teor de antimônio foi determinado pelo método dos parâmetros fundamentais. A análise de variância (ANOVA) indicou diferença significativa entre os grupos de projéteis com nível de confiança de 99%, com base no teor médio de Sb. Através do teste de Tukey foi determinado que pelo menos 3 grupos (CBC 2016, FC e IMI) poderiam ser discriminados. O teste de Tukey também foi realizado sem a presença do grupo CBC do ano de 2016, pois o diferiu nitidamente dos demais grupos quanto ao teor de Sb. Com isso, os 4 grupos remanescentes passaram a ser discriminados com o teor de antimônio com nível de confiança de 99%. Esse trabalho demonstra que a técnica de WDXRF, sendo uma técnica de baixo custo e não destrutiva em relação as utilizadas na literatura, seria suficiente para discriminar certos grupos de projéteis de diferentes fabricantes, apenas pelo teor de antimônio, auxiliando o trabalho da perícia policial.

Palavras-chave: Tukey, CABL, WDXRF, ANOVA

Referências Bibliográficas

- SEDDA A.F.; ROSSI G. Bullets fragments identification by comparison of their chemical composition obtained using instrumental neutron activation analysis. **Forensic Science International**. v.206, p.e5–e7, 2011.
- COMMITTEE ON SCIENTIFIC ASSESSMENT OF BULLET LEAD ELEMENTAL COMPOSITION COMPARISON. Forensic Analysis: Weighing Bullet Lead Evidence. **National Academy of Sciences**, Washington, DC, 2004.
- DUFOSSE T.; TOURNON P. Comparison of bullet alloys by chemical analysis: use of ICP–MS method. **Forensic Science International**. v.91, p.197–206, 1998.

Uma análise experimental sobre a t -admissibilidade em grafos**Daniel Juventude Moreira¹ & Fernanda Couto²**

1. Bolsista FAPERJ, Discente do Curso de Ciência da Computação, UFRRJ; 2. Professora do DDC/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O problema da t -admissibilidade consiste em decidir se um grafo G admite uma árvore geradora T na qual a máxima distância entre dois vértices adjacentes em G é no máximo t . O menor t para o qual G seja t -admissível é $\sigma T(G)$, chamado de índice de extensão de G . Sob a perspectiva do problema de otimização, visamos determinar uma árvore geradora que minimize a máxima distância entre dois vértices adjacentes em G . Determinar se $\sigma G \leq t$ para $t \geq 4$ é um problema NP-completo, para $t = 2$ é um problema polinomial e para $t = 3$ é um problema em aberto. Desenvolvemos e implementamos um algoritmo de força bruta sequencial, um de computação paralela, e duas heurísticas gulosas de tempo polinomial. Comparamos essas implementações em grafos aleatórios *Erdős-Rényi* e além disso, determinamos uma classe onde uma das heurísticas determina o índice de extensão corretamente.

Palavras-chave: Índice de extensão; t -admissibilidade; Árvore geradora.

Referências Bibliográficas

- CAI, L. e CORNEIL, D. (1995). Tree spanners. *SIAM J. Discrete Math.*, 8(3):359–387.
COUTO, F. V. D. e CUNHA, L. F. I. (2018). Tree t -spanners of a graph: Minimizing maximum distances efficiently. In *Lecture Notes in Computer Science*, p. 46–61. Springer.
CUNHA, L. F. I., KOWADA, L. A. B., de A. HAUSEN, R., e de FIGUEIREDO, C. M. H (2013). Advancing the transposition distance and diameter through lonely permutations. *SIAM J. Discrete Math.*, 27 (4):1682–1709.

POTENCIAL ANTIMICROBIANO DE EXTRATOS ALCOÓLICOS DE DIFERENTES PRÓPOLIS
Rafael Ferreira dos Santos¹; Lucas de Oliveira Pires²; Edlene Ribeiro Prudêncio² & Rosane
Nora Castro³

1. Bolsista PIBIC/CNPq, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Doutorando PPGQ/UFRRJ;
3. Professora Titular do DQO-IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

A própolis é uma substância resinosa coletada por abelhas de diferentes exsudatos vegetais e tem sido utilizada na medicina tradicional desde a antiguidade devido ao seu largo espectro de atividade biológica, como antioxidante, anti-inflamatório, antimicrobiano, antiviral, antifúngico (VARGAS et al, 2004). O objetivo deste trabalho foi avaliar a ação antimicrobiana de dez extratos alcoólicos de própolis marrom (*Apis mellifera*) e seis extratos de geoprópolis (*Melipona quadrifasciata anthioides*- Mandaçaia e *Melipona rufiventris*- Uruçu-Amarela), frente à inibição do crescimento de *Staphylococcus aureus* no teste de difusão em Ágar. Os extratos de própolis marrom foram obtidos por maceração dinâmica a partir de 2,00g da amostra pulverizada com 50 ml de etanol P.A. à T.A por 48h (EEP1 – EEP10), enquanto os extratos de geoprópolis foram obtidos a partir de 3,00g de material pulverizado em 150 ml de etanol com extrator Soxhlet por 6 horas (EEGP-M1 a EEGP-M3; EEGP-U1 a EEGP-U3) (SALGUEIRO & CASTRO, 2016). De acordo com os resultados obtidos na análise, todos os extratos de própolis testados foram efetivos em promover inibição da *S. aureus* no teste de difusão em Agar. O percentual de inibição foi semelhante entre as amostras, com exceção do extrato EEGP-U1, que apresentou o maior percentual de inibição (70,9%) quando comparado a média de 40% dos demais extratos. Estes resultados sugerem o uso de extratos de própolis como uma alternativa interessante no controle de microrganismos. Diferenças no processo de extração podem estar extraindo distintas substâncias e, conseqüentemente, levando aos diferentes halos de inibição, ainda que utilizando a mesma metodologia de avaliação antimicrobiana.

Palavras-chave: Geoprópolis, Atividade Antimicrobiana, *Staphylococcus aureus*.

Referências Bibliográficas

- VARGAS, A. C.; LOGUERCIO, A. P.; WITT, N. M.; COSTA, M. M.; SILVA, M. S.; VIANA, L. R. Atividade antimicrobiana "in vitro" de extrato alcóolico de própolis. *Ciência Rural*, Santa Maria, v.34, n.1, p.159-163, jan-fev, 2004.
- SALGUEIRO, F. B. & CASTRO, R. N. Comparação entre a composição química e capacidade antioxidante de diferentes extratos de própolis verde. *Química Nova*, 39, 1192-1199, 2016.

EMPREGO DE MATRIZ POLIMÉRICA ENRIQUECIDA COM EXTRATOS DE *Talinum triangulare* (PORTULACACEAE) NO PROCESSO DE RECICLAGEM DE PAPEL TERMOSENSÍVEL**Fernanda de Moraes Pereira da Silva¹; Luan Rodrigues Dutra²; Marcia Cristina Campos de Oliveira³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IQ/UFRRJ; 3. Professora do DQO/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A sociedade moderna anseia por inovações tecnológicas que mudem o seu dia a dia, portanto a busca por novas tecnologias vem crescendo exponencialmente. Neste âmbito papéis reciclados com maior aplicabilidade comercial podem proporcionar benefícios econômicos e bem-estar para população, pois menos árvores serão derrubadas. Com o intuito de colaborar com o crescimento da reciclagem de papel, este trabalho teve como objetivo a confecção de uma matriz polimérica acrílica enriquecida com extratos obtidos da espécie *Talinum triangulare*, para usa-la no processo de reciclagem de papéis termo sensível. Em trabalho recente Amorim e colaboradores fizeram o estudo fitoquímico da *T. triangulare* determinando diversos metabólitos desse vegetal, como por exemplo, as feoftinas. As feoftinas absorvem radiação na região do visível a 400, 550 e 700nm, tal fato mostra que extratos ricos em feoftinas podem apresentar atividade fotocatalítica. A síntese do polimetacrilato de metila (PMAM) é um processo exotérmico em fase aquosa na qual foram utilizados como monômeros o metacrilato de metila e o ácido acrílico e tendo como tensoativo não iônico o lauril éter sulfato de sódio. Neste meio, são adicionados como catalisadores sulfato ferroso, persulfato de amônio e hidrossulfito de sódio. Para a obtenção do PMAM com extratos de *T. triangulare*, foi adicionado no início do processo da polimerização, citada acima, uma pré-emulsão formada entre a amostra vegetal, surfactante e os catalisadores da polimerização de PMAM. Na análise por espectroscopia de infravermelho (I.V) observa-se que há semelhança entre os polímeros obtidos mantendo-se as bandas características do PMAM puro. Bandas localizadas em 1143,65 cm⁻¹ e 1239,12 cm⁻¹ correspondem a vibração dos grupos C-O-C presentes em grupos funcionais referentes a ésteres. A banda em 1366,66 cm⁻¹ refere-se à vibração do grupo metil alfa à carbonila. A banda em 1723,2 cm⁻¹ mostra a presença do grupo carboxila presente no ácido acrílico, enquanto a banda presente em 1434,87 cm⁻¹ refere-se às vibrações das ligações C-H do grupo metoxila em grupamento éster. Como os espectros obtidos por I.V não apresentou diferença significativa entre os polímeros, foi então utilizada a técnica de reflectância difusa na tentativa de se obter informações que confirmem a presença do extrato hidroalcoólico e da fração rica em feoftinas obtidos das folhas de *T. triangulare* no polímero acrílico. Esta técnica foi fundamental para demonstrar a diferença na composição do PMAM sem a presença do material obtido de *T. triangulare* e com a presença da fração rica em feoftinas. O PMAM puro e enriquecido com extrato hidroalcoólico bruto de *T. triangulare* apresentaram a 300 nm máximos de absorvância igual a 0.4, já o PMAM com a fração rica em feoftinas sofreram efeito hipercrômico tendo máximos de absorvância igual a 0.6 (com 0,02% de amostra vegetal) e 0.8 (com 0.04% de amostra vegetal) a 300 nm. Estes resultados confirmam que os polímeros com a fração rica em feoftinas possuem maior absorção de fótons podendo funcionar como bloqueadores de luz. Sendo assim, extratos de *T. triangulare* ricos nesta classe de composto, pode ser uma boa alternativa para a redução dos processos de fotodegradação em papéis termossensíveis.

Palavras-chave: Fotodegradação; polimetacrilato, feoftina

Referências Bibliográficas

AMORIM, A. P. O.; CARVALHO-JR, A. R.; LOPES, N. P.; CASTRO, R. N. Oliveira, M. C. C.; CARVALHO, M. G. Chemical compounds isolated from *Talinum triangulare* (Portulacaceae). *Food Chemistry* 160, 204-208 2014.

ESTUDO DE ESQUEMAS DISCRETOS E HÍBRIDOS NA SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE GRAETZ**Marlon Mesquita Lopes Cabreira¹; Mariane de Almeida Silva² & Renan de Souza Teixeira³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Matemática, ICE/UFRRJ; 2. Bolsista do Programa de Pós-Graduação em Ensino de Matemática (PEMAT), Instituto de Matemática, UFRJ; 3. Professor do DEMAT/ICE/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Inúmeros fenômenos naturais e de interesse científicos são caracterizados pela troca de calor em suas configurações. Processos de convecção natural na atmosfera, trocadores de calor em micro-processadores e resfriamento de turbinas em ambientes industriais são alguns exemplos estudados em diversas áreas científicas. O estudo do comportamento do perfil de temperatura de um fluido em dutos circulares é comumente conhecido como problema de Graetz. Entretanto, suas equações de governo possuem termos não-lineares acarretando alguns desafios na predição de sua solução. O avanço da tecnologia computacional possibilitou o desenvolvimento de inúmeros estudos da solução de Equações Diferenciais Parciais (EDP) não-lineares através de esquemas discretos, assim como, o Método das Diferenças Finitas (MDF). Entretanto, tais técnicas estão constantemente suscetíveis a instabilidades numéricas e propagação de erros. Além disso, suas soluções são sempre globais, uma vez que as aproximações numéricas demandam a geração de malha. Por outro lado, esquemas híbridos numérico-analíticos foram desenvolvidos para resolver EDP's com a presença de termos não-lineares. A Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) é uma abordagem numérico-analítica baseada na Técnica de Transformada Integral Clássica (CITT). O processo de transformação integral generalizada para um problema de condução de calor linear com propriedades espaciais variáveis fornece um sistema infinito de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's) desacoplados que pode ser resolvido analiticamente. Entretanto, a presença de não-linearidades, acopla o sistema infinito de EDO's que deve ser resolvido numericamente através do truncamento da expansão originando a formulação híbrida. O presente trabalho consiste no estudo e comparação do MDF e GITT na solução do modelo adimensional para problema de convecção forçada entre placas paralelas com escoamento laminar incompressíveis hidrodinamicamente desenvolvido e termicamente em desenvolvimento, ou seja, o problema de Graetz. A partir dos estudos do MDF e GITT, constata que os resultados são praticamente iguais, fato que confirma a eficácia do método de MDF usado na solução do problema.

Palavras chave: Problema de Graetz; Métodos de diferenças finitas; Técnica de Integral Generalizada

Referências Bibliográficas

ANDERSON, D.A.; TANNEHILL, J. C. & Pletcher, R. H.. Computational fluid mechanics and heat transfer. Taylor & Francis, 1997.
CHALHUB, D.J.N.M., SPHAIER, L.A. & ALVES, L.S.B. Integral transform solution for thermally developing slip-flow within isothermal parallel plates. Computational Thermal Sciences: An International Journal, 8(2), 2016.

AVALIAÇÃO DA CAPACIDADE ANTIOXIDANTE E DA COMPOSIÇÃO DE SUBSTÂNCIAS FENÓLICAS DE DIFERENTES EXTRATOS DE PRÓPOLIS MARROM**Roberta Peixoto da Mota¹; Juliana Paes Leme de Mello Souza² & Rosane Nora Castro³**

1. Bolsista PIBIC/CNPq, Discente do Curso de Farmácia ICBS/UFRRJ; 2. Doutoranda IQ/UFRRJ. 3. Professora Titular do DQO/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A própolis é um produto resinoso coletado por abelhas melíferas de diferentes exsudatos vegetais, em diversas áreas geográficas, útil na manutenção e segurança da colmeia. Várias substâncias químicas têm sido identificadas na própolis, sendo os flavonoides e os ácidos fenólicos considerados as principais substâncias biologicamente ativas pela expressiva capacidade antioxidante¹. Este trabalho tem como objetivo avaliar o uso de dois solventes (etanol e metanol) e duas técnicas de extração (agitação magnética e banho de ultrassom) no preparo de extratos de dez amostras de própolis marrom, oriundas do município de Japira – Paraná. Determinar os teores de fenólicos (TP), flavonoides totais (TF) e da capacidade antioxidante pelos métodos de sequestro de radicais livres (DPPH e ABTS) e através da capacidade redutora do íon ferro (FRAP) dos extratos. Os extratos de própolis foram preparados à 4% (p/v) utilizando etanol ou metanol através de dois diferentes métodos: agitação magnética (AM) com 50 mL de solvente a temperatura ambiente por 48h; extração em banho de ultrassom (US) com 50 mL de solvente a temperatura ambiente por 2h. Após cada etapa de extração, as soluções foram filtradas e concentradas à pressão reduzida, resultando nos extratos denominados: extrato etanólico de própolis por agitação (EEP-AM), extrato etanólico de própolis por agitação com ultrassom (EEP-US), extrato metanólico de própolis por agitação (EMP-AM) e extrato metanólico de própolis por agitação com ultrassom (EMP-US). O teor de fenólicos totais foi em média de 4,56 mgEAG 100mg⁻¹ para os EEP-AM, 5,71 mgEAG 100mg⁻¹ para os EEP-US, 8,14 mgEAG 100mg⁻¹ para os EMP-AM e 8,78 mgEAG 100mg⁻¹ para os EMP-US. O teor de flavonoides totais foi em média de 5,10 mgEQ 100mg⁻¹ para os EEP-AM, 5,86 mgEQ 100mg⁻¹ para os EEP-US, 8,03 mgEQ 100mg⁻¹ para os EMP-AM e 4,81 mgEQ 100mg⁻¹ para os EMP-US. Os valores de DPPH (CE50) variaram em média de 40,69 µg mL⁻¹ para os EEP-AM, 54,44 µg mL⁻¹ para os EEP-US, 17,50 µg mL⁻¹ para os EMP-AM e 34,72 µg mL⁻¹ para os EMP-US. Os valores de ABTS variaram em média de 91,68 mmolTE 100mg⁻¹ para os EEP-AM, 107,44 mmolTE 100mg⁻¹ para os EEP-US, 134,90 mmolTE 100mg⁻¹ para os EMP-AM e 115,71 mmolTE 100mg⁻¹ para os EMP-US. Os valores de FRAP variaram em média de 264,98 mmol Fe(II) 100mg⁻¹ para os EEP-AM, 295,18 mmol Fe(II) 100mg⁻¹ para os EEP-US, 328,99 mmol Fe(II) 100mg⁻¹ para os EMP-AM e 325,50 mmol Fe(II) 100mg⁻¹ para os EMP-US. Os extratos avaliados apresentaram bons teores de substâncias fenólicas e moderada capacidade antioxidante pelos métodos empregados, sendo os extratos metanólicos os que apresentaram os melhores resultados. As metodologias empregadas permitiram avaliar a eficácia do método de extração, demonstrando principalmente, a influência do metanol para extração de substâncias fenólicas. Assim, os resultados desse estudo demonstraram que a concentração de substâncias fenólicas e flavonoides reflete diretamente o método e o tipo de solvente utilizado no preparo do extrato de própolis.

Palavras-chave: Extrato de própolis, polifenóis e atividade antirradicalar

Referências Bibliográficas

ALVES, E.; KUBOTA, E.H. Conteúdo de fenólicos, flavonoides totais e atividade antioxidante de amostras de própolis comerciais. Rev. Ciênc. Farm. Básica Aplicada, 34 (1), 37-41, 2013.

SALGUEIRO, F. B. CASTRO, R. N. Comparação entre a composição química e capacidade antioxidante de diferentes extratos de própolis verde. Quim. Nova, 39 (10), 1192-1199, 2016.

QUANTIFICAÇÃO DOS PARÂMETROS QUE CARACTERIZAM A CURVA DE RETENÇÃO DA ÁGUA NO SOLO USANDO OS ALGORITMOS GENÉTICOS**Fabrcio Magalhães Coutinho¹, Rosane Ferreira de Oliveira², Marcos Bacis Ceddia³, Wilian Jeronimo dos Santos⁴.**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática Aplicada; 2. Professora do DEMAT/ICE/UFRRJ; 3. Professor do DCS/IC/UFRRJ; 4. Professor do DEMAT/ICE/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas

RESUMO

A água é um elemento fundamental na natureza e, no solo, é a principal responsável pelo transporte tanto de nutrientes como também de poluentes. Dessa forma, saber quantificá-la tem sido de extrema importância para os modelos de desenvolvimento das culturas agrícolas (DARDANELLI et al., 2003). Para o estudo da dinâmica da água no solo, torna-se fundamental determinar a curva de retenção da água no solo, uma relação não linear entre o potencial mátrico (h) e a umidade do solo (θ) (REICHARDT & TIMM, 2004). Diversos modelos para curva de retenção são encontrados na literatura, sendo o modelo de van Genuchten um dos mais utilizados:

$$\theta(h) = \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\alpha|h|)^\eta)^{1/\eta}} + \theta_r \quad (1)$$

Os parâmetros físico-hídricos que caracterizam a Eq. (1) são a umidade residual do solo (θ_r), a umidade de saturação (θ_s) e os parâmetros de ajuste da curva α e η . O objetivo deste trabalho é buscar os parâmetros do modelo a partir de dados observados (mensurados) de (h , θ) e um Algoritmo Genético (AG) de representação binária. O código computacional para o AG baseia-se no apresentado em (LINDEN, 2008), onde foi acrescentado a técnica de elitismo, que consiste em assegurar o melhor indivíduo de cada geração para a geração seguinte, para que não haja perda de uma boa solução uma vez que fora encontrada. O AG foi implementado para buscar os maximizadores de uma função objetivo, neste caso definida como o coeficiente de determinação (R^2) que varia entre 0 e 1, indicando o quão ótimo a curva está ajustada com os valores observados. Quanto maior o R^2 , melhor é o ajuste. Diferente dos chamados algoritmos determinísticos, os Algoritmos Genéticos se caracterizam por serem menos suscetíveis a ficarem presos em um extremo local e serem de fácil implementação. Como resultado preliminar, são apresentados dados observados de θ em função de h coletados na literatura e compara-se a curva ótima ajustada usando o AG com o software *Soil Water Retention Curve* (SWRC), que ajusta a curva utilizando um método determinístico. Os parâmetros ótimos encontrados com o AG foram $\alpha = 0,03$, $\theta_s = 0,521$, $\theta_r = 0,116$, $\eta = 1,609$, com o SWRC os parâmetros foram $\alpha = 0,0273$, $\theta_s = 0,5$, $\theta_r = 0,115$, $\eta = 1,604$.

Palavras-Chave: Física do solo; otimização; recursos hídricos.

Referências Bibliográficas

J. L. Dardanelli, J. T. Ritchie, M. Calmon, J. M. Andriani and D. J. Collino. An empirical model for root water uptake, *Field Crops Research*, 2003. DOI: 10.1016/j.fcr.2003.09.008.

R. Linden, *Algoritmos genéticos - Uma importante ferramenta da inteligência computacional*, 2a. edição. Brasport, Rio de Janeiro, 2008.

K. Reichardt and L. C. Timm. *Solo, Planta e Atmosfera: conceitos, processos e aplicações*. Manole, Barueri, São Paulo, 2004.

ESTIMANDO PARÂMETROS PARA A MODELAGEM DE DOENÇAS VIRAIS

Thais Madruga de Oliveira Mendonça¹, Nathalia Kathleen Santana Reyes², Douglas Souza de Albuquerque³, Josiane da Silva Cordeiro Coelho⁴, Claudia Mazza Dias⁵

1. Aluno PICV, Discente do Curso de Matemática Aplicada Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 2. Aluno PICV, Discente do Curso de Matemática Aplicada Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 3. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática Aplicada e Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 4. Professor do DEMAT/UFRRJ; 5. Professor do DTL/IM/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A modelagem matemática em epidemiologia é ferramenta consagrada no entendimento da propagação e do controle de doenças. Quando se trata de doenças virais, principalmente aquelas que atingem o indivíduo e sua infância, seu estudo ganha também importância social. Para citar alguns exemplos, hoje nosso país lida com alarmante número de casos de Sarampo, doença que já era considerada erradicada na maior parte de nosso território [1]. Outra doença não menos preocupante, mas pouco conhecida do grande público, é a Síndrome da Rubéola Congênita (SRC), uma doença decorrente da infecção da mãe pelo vírus da Rubéola durante as primeiras semanas da gravidez, causando grande influência no desenvolvimento da criança [2]. Como exemplo também citamos a Coqueluche, doença infecciosa aguda do trato respiratório, cujo número de casos é considerando grande pelos especialistas [3]. Todas estas doenças podem ser estudadas e descritas por modelos determinísticos, mas um desafio sempre presente nestes modelos é a estimativa dos seus parâmetros. A modelagem de doenças virais é de fundamental importância para o entendimento dos processos envolvidos e planejamento de ações de controle. A obtenção eficiente dos parâmetros a partir das bases históricas de dados e utilizando técnicas estatísticas adequadas, permite ao modelador uma melhor qualidade na obtenção de cenários futuros. Além disso, o estudo de tais técnicas de inferência estatística clássica e bayesiana no contexto de modelos determinísticos é assunto novo e interessante na formação dos estudantes do curso de bacharelado em matemática. Este trabalho tem como objetivo estudar diferentes técnicas de estimação estatística dos parâmetros envolvidos nesses modelos. A partir de dados disponíveis publicamente para algumas das doenças citadas e utilizando-se técnicas de inferência estatística, clássica ou bayesiana, é possível obter estimativas de valores dos parâmetros necessários aos modelos que descrevem as dinâmicas populacionais.

Palavras-Chave: matemática, modelagem, epidemiologia, parâmetros.

Referências Bibliográficas

- [1] Matéria de O Globo. <https://g1.globo.com/am/amazonas/noticia/manaus-tem-85-novos-casos-desarampo-confirmados-diz-semsa.ghtml>. Acesso em: 23/06/18.
- [2] Ministério da Saúde. <http://portalsms.saude.gov.br/>. Acesso em 05/02/19.
- [3] Boletim Epidemiológico da Secretaria de Vigilância em Saúde do Ministério da Saúde. 47(32),2016.

PERFIL SOCIODEMOGRÁFICO DOS ESTUDANTES DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO DA UFRRJ**Rita Zhen Chen¹; Giselle Soares Passos²; Marcos Gonçalves de Santana³ & Lígia Maria Soares Passos⁴**

1. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Ciência da Computação, IM/UFRRJ; 2. Professora da CISAU/REJ/UFG; 3. Professor da CISAU/REJ/UFG; 4. Professora do DCC/IM/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Este trabalho apresenta o perfil sociodemográfico dos estudantes do curso de Ciência da Computação da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ). Para isso, um estudo foi conduzido, entre os meses de março e agosto de 2019, com uma amostra de 180 discentes desse curso ($n=180$), com idade entre 18 e 30 anos, regularmente matriculados e que ingressaram no curso há, no máximo, cinco anos. O cálculo do tamanho da amostra foi realizado com o portal Qualtrics, considerando o nível de confiança de 95% e margem de erro de 5%, e a seleção dos discentes para a amostra deu-se de forma aleatória. Cada estudante selecionado foi contatado sobre a pesquisa e apenas foi agendado um local/horário para a realização da coleta de dados com os discentes que aceitaram participar. Após essa coleta, os dados foram digitados em planilha do Microsoft Excel e, posteriormente, importados para o software TIBCO STATISTICA v.13.5.0 para a realização da análise dos dados.

O presente estudo foi aprovado no Comitê de Ética em Pesquisa da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (Protocolo n°.1270/18). Todos os participantes assinaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE) para a participação no estudo.

Os resultados mais expressivos a serem apresentados neste artigo são referentes aos dados de um questionário sociodemográfico aplicado aos estudantes participantes. Os seguintes resultados foram obtidos: 80,6% da amostra é do sexo masculino e 19,4%, feminino; 98,3% dos discentes são solteiros; 90,6% têm idade entre 18 a 23 anos; 79,5% dos participantes possuem uma renda familiar entre 1 a 7 salários mínimos; 85,6% residem na companhia dos pais/irmãos; 63,9% dos estudantes têm como local de procedência a Baixada Fluminense, enquanto 35,0%, em outro município do Rio de Janeiro; e 80,0% dos discentes estão com a qualidade de sono entre 4 e 8. Além dos resultados apresentados, o questionário ainda aborda as seguintes questões:

- a) Você já fez tratamento para ansiedade e/ou depressão? (sim (20,0%) / não (80,0%));
- b) Você está fazendo tratamento para ansiedade e/ou depressão? (sim (11,1%) / não (88,9%));
- c) Você se considera uma pessoa com religiosidade? (sim (46,7%) / não (53,3%));
- d) Exerce atividade remunerada? (sim (38,9%) / não (61,1%));
- e) Possui atividades de lazer como música, dança, cinema etc? (sempre (34,4%) / esporadicamente (45,6%) / raramente (20,0%));
- f) Pratica exercícios físicos regularmente? (sim (53,9%) / não (46,1%));
- g) Como você classificaria seu grau de satisfação com o curso atual? (péssimo (1,1%) / ruim (6,1%) / razoável (33,3%) / bom (47,2%) / excelente (12,2%).

Palavras-chave: Perfil sociodemográfico; Estudantes de Ciência da Computação; UFRRJ.

Referências Bibliográficas

QUALTRICS. Sample Size Calculator. [S.l.], 4 jul. 2019. Disponível em: <https://www.qualtrics.com/blog/calculating-sample-size>. Acesso em: 7 ago. 2019.
TIBCO Statistica™: Software para análises estatísticas. Versão 13.5.0.17. [S.l.], TIBCO Software Inc., 2018. Disponível em: <https://www.tibco.com/resources/product-download/tibco-statistica-trial-download-windows>. Acesso em: 7 ago. 2019.

**CARACTERIZAÇÃO DA FONTE DOS DIABÁSIOS DE ALTO-Ti E BAIXO-Ti DA
FORMAÇÃO SARDINHA, BACIA DO PARNAÍBA****Yara Veloso Magalhães Frank¹, Leilane Souza Scribelk²; Viviane Magalhães² & Sérgio Valente³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geologia, IA/UFRRJ; 2. Bolsista Projeto Parnaíba, Discente do curso de Geologia, IA/UFRRJ, 3. Professor do DEGEO/IA/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo caracterizar as fontes geradoras dos diabásios de baixo-TiO₂ e altoTiO₂ da Formação Sardinha (Cretáceo) da Bacia do Parnaíba que afloram nas regiões de Piripiri (PI) e Colinas (MA), respectivamente. Eles são afíricos (Piripiri) ou inequigranulares porfíricos (Colinas), hipohialinos e constituídos de fenocristais de plagioclásio e clinopiroxênio em matriz fina (<1mm) a afanítica desvitrificada. Os minerais opacos e a apatita são as fases acessórias. Clorita e biotita são os produtos de alteração a partir do vidro. Os diabásios de Piripiri são quartzo toleíticos ($Q_{nor}=8,21\pm 1,37\%$ peso; $Hy_{nor}=13,91\pm 1,51\%$ peso; $TiO_2=1,30\pm 0,15\%$ peso), enquanto que os diabásios de Colinas são quartzo toleíticos transicionais ($Q_{nor}=12,34\pm 3,46\%$ peso; $Hy_{nor}=11,14\pm 2,29\%$ peso; $TiO_2=2,95\pm 0,39\%$ peso), sendo os últimos mais evoluídos ($2,34 < MgO < 5,23\%$ peso) que os primeiros ($5,69 < MgO < 8,14\%$ peso). A análise de diagramas de variação e das variações das razões de elementos traço mostraram que os diabásios das duas regiões constituem suítes magmáticas que evoluíram por AFC (*assimilation and fractional crystallization*), com fracionamento de olivina (críptica), clinopiroxênio, plagioclásio e óxidos de Fe-Ti (estes últimos somente na suíte de Colinas). As razões La/Yb, normalizadas ao condrito (**McDonough & Sun, 1995**), de amostras representativas de magmas com mesmo grau de evolução (GP-O7D, GP-32; MgO ~ 5,0%) diferem em cerca de três vezes (3,3 em Piripiri e 9,0 em Colinas). Essa diferença poderia ser explicada por processos de AFC muito distintos, diferentes quantidades de fusão parcial de uma mesma fonte ou geração a partir de diferentes fontes mantélicas. Dessa forma, para determinar a origem da diferença entre as razões de elementos traços incompatíveis das amostras, e conseqüentemente diferentes evoluções magmáticas ou fontes matélicas, utilizou-se diagrama multi-elementar e modelos de fusão parcial em equilíbrio modal. O diagrama mostra diferentes inclinações e razões La/Yb_(n) e La/Nb_(n) maior que um, indicando pelo menos uma contribuição de fontes litosféricas para a gênese das duas suítes. Já o modelo de fusão parcial em equilíbrio modal mostrou que as razões La/Yb_(n) de Piripiri e Colinas não podem ser geradas num intervalo de fusão parcial (25%-45%) necessário à formação de magmas basálticos toleíticos. Em conclusão, as duas suítes não podem ser associadas a diferentes quantidades de fusão parcial de uma mesma fonte harzburgítica com granada residual, característica do manto litosférico, implicando gênese a partir de diferentes fontes mantélicas.

Palavras-chave: Diabásio, Bacia do Parnaíba, Fonte Mantélica.

Referências Bibliográficas

McDonough, W.F; Sun, S. 1995. The composition of the Earth. Chem. Geol. 120, 223–253.

MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL PARA A HANSENÍASE

Douglas Souza de Albuquerque¹, Nathalia Kathleen Santana Reyes², Thais Madruga de Oliveira Mendonça², Erito Marques de Souza Filho³ & Claudia Mazza Dias³

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática Aplicada e Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 2. Aluno PICV, Discente do Curso de Matemática Aplicada Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 3. Professor do DTL/IM/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A Hanseníase é uma doença infectocontagiosa causada pelo *Mycobacterium Leprae*, acometendo principalmente os nervos periféricos das pessoas doentes. A doença pode afetar praticamente todos os órgãos e sistemas em que existam macrófagos, exceto o sistema nervoso central. Ela faz parte do grupo conhecido como doenças negligenciadas, comuns nos grandes bolsões de pobreza, onde a falta de recursos médicos, saneamento básico, entre outros fatores, contribuem fortemente para a propagação de doenças infectocontagiosas. Assim, o desenvolvimento de modelos matemáticos para a doença é de grande interesse econômico e social. No entanto, os modelos matemáticos para a Hanseníase são escassos na literatura. Assim, a motivação principal para esse trabalho é o estudo de novos modelos matemáticos para a doença. Primeiramente, foi utilizado como base o modelo compartimental SIR desenvolvido por Kermack e McKendric, onde a população total é dividida em três categorias: Suscetíveis, Infectados e Recuperados. Pela característica da Hanseníase, um paciente curado não volta a ser infectado pela doença novamente, portanto o modelo SIR pode ser usado na modelagem pois representa de forma simplificada a dinâmica da doença. Depois de estudado o modelo simples, partiu-se para o estudado de uma situação considerada rara e um fenômeno por si só interessante de ser analisado, que é a chamada transmissão vertical da doença (transmissão de mãe para filho). Este novo modelo analisa a dinâmica de transmissão de gestantes para seus filhos e considera a população de gestantes suscetíveis à Hanseníase ou infectadas pela doença e seus bebês nascidos com e sem a doença. Embora não seja a forma de transmissão mais frequente da Hanseníase, ainda assim merece estudo já que não é incomum que se encontrem gestantes infectadas, que podem passar para seus filhos hematógenos que podem se espalhar pela placenta. Em ambas abordagens, se tem como resultado sistemas de equações diferenciais ordinárias, que foram solucionados por métodos numéricos como o Método de Runge-Kutta de quarta ordem. Os resultados obtidos permitem observar o comportamento dos diferentes grupos frente a diferentes cenários de simulação. Além disso, a partir de dados disponíveis publicamente e utilizando-se técnicas de inferência estatística, foram feitas estimativas para os valores de alguns dos parâmetros utilizados.

Palavras-Chave: Hanseníase, Modelagem Matemática, Epidemiologia.

Referências Bibliográficas

- BLOK, D. J., FISCHER, E. A. J., RICHARDUS, J. H.. Advances in Parasitology. **Mathematical Modelling of Leprosy and Its Control**, 2015. DOI: 10.1016/bs.apar.2014.12.002.
- KERMACK, W. O. & MCKENDRICK, A. G. A. Contribution to the mathematical theory of epidemics. **Proc. R. Soc. Lond. A.**, v. 115, p. 700-721, 1927.
- RAIMUNDO, S. M., YANG, H. M., VENDITE, L. L. Dinâmica da Transmissão Vertical do HIV e a Idade Reprodutiva das Adolescentes. **Tendências em Matemática Aplicada e Computacional**, 3, No. 1, 173-182, 2002.

IMOBILIZAÇÃO DE NANOPARTÍCULAS DE OURO EM FIBRAS ÓPTICAS**Mariana Ribeiro de Paula Vale¹, Isabel Cristina dos Santos Carvalho², Greice Kelly Bezerra da Costa Fontes³**

1. Bolsista PIBIC-CNPq, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Professora do Departamento de Física/PUC-RIO; 3. Professora do DEFIS/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

As nanopartículas metálicas AuNPs (1-100) nm nos últimos anos tem sido o foco das aplicações para sensoriamento químico e biológico, como por exemplo na detecção biológica da Escherichia Coli. A característica única dos metais nobres que depende fortemente das dimensões das nanopartículas, Ressonância de Plasmon de Superfície Localizada (LSPR), que é a oscilação coletiva ressonante de elétrons livres das nanopartículas metálicas sob irradiação de um campo eletromagnético, sendo altamente sensível ao índice de refração (IR) do meio circundante [1]. Várias técnicas têm sido utilizadas para produzir as nanopartículas, tais como a evaporação de um filme de ouro seguida por um tratamento térmico, ablação a laser e método de crescimento mediado por sementes. O último é capaz de fornecer soluções coloidais AuNPs monodispersas e com controle do diâmetro. Para utilizar as nanopartículas como sensor é necessário imobilizá-las sobre um substrato sólido, anteriormente dispersas em solução coloidal, visando otimizar a sensibilidade óptica no sensoriamento. Neste trabalho realizou-se a síntese de AuNPs pelo método de crescimento mediado por sementes, com diâmetros de aproximadamente 15 nm, e confeccionou-se um sensor de medidas de índice de refração usando uma fibra óptica de plástico (POF) com AuNPs imobilizados em uma das suas extremidades (Diâmetro prévia e quimicamente reduzido). As AuNPs possuem estrutura cristalina, tendo sido caracterizadas pela fase $(\text{NH}_4)_6(\text{AuCl}_4)_3\text{Ag}_2\text{Cl}_5$. A POF utilizada foi a CK-40 com 1000 μm de diâmetro, para a confecção do sensor o revestimento foi retirado com acetona e a ponta foi inserida em solução de ciclopentanona até seu núcleo diminuir para 700 μm (diâmetro controlado pela evaporação do solvente), diâmetro suficiente para otimizar a intensidade do sinal nas medidas de reflectância [2]. Para o revestimento da ponta da POF, mergulha-se a ponta da fibra em uma solução de AuNPs a 20°C, estas se aderem à ponta conforme a secagem da solução quando ocorre a nucleação [3]. Utilizou-se um Microscópio Eletrônico de Varredura (MEV) para observar a POF revestida com AuNPs. Em seguida, realizaram-se medidas de sensibilidade das AuNPs a mudança de IR através da montagem de um set-up óptico, composto por um espectrômetro da marca *Ocean Optics HR4000*, uma fonte de luz branca, um acoplador 2 x 1 e a POF com as AuNPs imobilizadas. Através do sensor foi possível medir a alteração do sinal de reflectância da ressonância de plasmon da superfície longitudinal (LSP) das AuNPs, na medida em que o índice de refração do meio circundante foi modificado. Para as medidas foi utilizado o índice de refração do laboratório Cargille com padrões de referência $n = 1,26, 1,30, 1,40, 1,48$ e $1,70$. O sensor apresentou sensibilidade na faixa de análise de IR entre 1,00 e 1,70, havendo melhor resposta entre 1,33 e 1,40 (150 nm/RIU) podendo então ser aplicado para o sensoriamento da Escherichia Coli, que possui índice de refração nesta faixa.

Palavras-chave: sensoriamento de índice de refração; fibra óptica plástica; nanopartículas de ouro.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] XIONG, Y. e LU, X. **Metallic nanostructures**. Springer, 301p (2015).
- [2] MERCHANT, D.F.; SCULLY, P.J. E SCHMITT, N.F. **Chemical tapering of polymer optical fiber**. *Sensors and Actuators* 76, 365-371 (1999).
- [3] ZHENG, R-S.; LU, Y-H. ; CHIE, Z-G. ; TAO, J.; LIN, K-Q. e MING, H. **Surface Plasmon Resonance sensors based on polymer optical fiber**. *Journal of electronic science and technology of china* 6(4), 357-360 (2008).

SÍNTESE DE 7-ALCOXI-AMINO-3-AMINO-CUMARINAS FLUORESCENTES POTENCIALMENTE ÚTEIS COMO TERANÓSTICAS NO TRATAMENTO DA DOENÇA DE ALZHEIMER

Marcus Felipe de Oliveira Quetez ¹; Nathalia Fonseca Nadur ²; Daiana de Fatima Portella Franco ³; Luciana Luiz de Azevedo ⁴ & Arthur Eugen Kümmerle ⁵

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRJ; 2. Mestranda, do programa de pós-graduação em Química, UFRRJ; 3. Doutoranda, do programa de pós-graduação em Química, UFRRJ; 4. Pós-doutoranda, do programa de pós-graduação em Química; 5. Professor do Departamento de Química Orgânica, Instituto De Química, UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A Doença de Alzheimer (DA) é uma afecção neurodegenerativa progressiva e irreversível de aparecimento insidioso, que acarreta perda da memória e diversos distúrbios cognitivos. O uso de compostos híbridos com potencial inibidor para mais de um alvo, como a AChE (acetilcolinesterase) e agregação de placas β -Amiloide, pode ser de grande valia no tratamento da DA, devido à possibilidade de inibir simultaneamente alvos que contribuem para a instalação e manutenção da doença. A AChE atua no controle dos níveis do neurotransmissor acetilcolina (ACh) na fenda sináptica, o qual está envolvido nos processos de aprendizagem e memória. A agregação de placas A β é uma das principais responsáveis pela morte neuronal. Desta forma, este trabalho tem como objetivo geral a síntese e a avaliação farmacológica de 7-alcoxi-amino-3-aminocumarinas planejadas como possíveis inibidores da enzima AChE e inibidores da agregação de placas β -Amiloide para o tratamento da DA. A síntese dos compostos foi realizada a partir síntese da 7-hidroxycumarina em meio ácido entre o ácido málico e resorcinol em microondas convencional, obtendo-se 70% de rendimento após etapa de purificação. Em seguida realizou-se uma reação de O-alquilação em meio básico entre a 7-hidroxycumarina e uma série de dibromoalcanos com tamanho de cadeia variando entre dois e três carbonos. O rendimento obtido após processo de purificação variou de 65-68%. Posteriormente foi realizada uma reação de bromação na posição 3 da 7-bromo-alcoxicumarina, utilizando bromo (Br₂) em meio ácido. O rendimento dessa reação variou entre 78-89%. Em seguida, uma reação de aminação foi realizada entre os compostos obtidos anteriormente com a piperidina, com rendimentos variando entre 95-97%. Por fim, foi realizada uma reação de acoplamento cruzado de Buchwald-Hartwig catalisado com Paládio entre os compostos obtido na última etapa anterior e a anilina em meio básico. O rendimento obtido após processo de purificação em coluna cromatográfica do produto N-arilado foi de 88%. Todos os compostos sintetizados foram caracterizados inequivocamente por técnicas espectroscópicas e o derivado final, obtido pela reação com a anilina, testado frente a inibição de colinesterases, apresentando inibição de AChE na faixa de 0,05 a 0,30 μ M. A síntese dos compostos planejados está sendo executada de forma satisfatória e os resultados farmacológicos estão de acordo com o planejamento dos compostos.

Palavras-chave: Cumarina, Acetilcolinesterase, Agregação de placas β -Amiloide, Doença de Alzheimer

Referências Bibliográficas

- HUANG, L.; MIAO, H.; SUN, Y.; MENG, F.; LI, X. **Discovery of indanone derivatives as multi-target-directed ligands against Alzheimer's disease.** European journal of medicinal chemistry, 87, p. 429-439, 2014.
- SOUZA, G.; CISTIA, C.; PIRES, P.; PIRES, L.; PASSOS, Y.; CARDOSO, C.; CASTRO, R.; SANT'ANA, C.; KÜMMERLE, A. **Discovery of novel dual-active 3-(4-(dimethylamino)phenyl)-7-aminoalcoxy-coumarin as potent and selective acetylcholinesterase inhibitor and antioxidant.** Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry 2019, Vol. 34, No. 1, 631-637

DESENVOLVENDO TÉCNICAS DE AGRICULTURA 4.0 PARA O MONITORAMENTO DA CULTURA DO TOMATE NO ESTADO DO RIO DE JANEIRONícolas Terra Maia¹, Sergio Manuel Serra da Cruz²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Sistemas de Informação ICE/UFRRJ; 2. Professor do DECOMP/ICE/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O estado do Rio de Janeiro é um importante produtor de tomates, tendo produzido em 2018 aproximadamente 153 mil toneladas. De acordo com a Empresa de Assistência Técnica e Extensão Rural do Estado do Rio de Janeiro, só no estado sua comercialização movimentou R\$245 milhões em 2018. Além disso, a demanda pelo tomate com reduzida carga de agroquímicos vem crescendo, portanto, a adoção de novas práticas da agricultura digital na gestão de propriedades e lavouras apoiadas por aplicativos móveis se faz cada vez mais necessária para ampliar a produtividade e a qualidade dos produtos. Este trabalho se fundamenta no paradigma da agricultura 4.0, que, de acordo com (Massruhá e Leite, 2017), emprega métodos computacionais de alto desempenho, rede de sensores, comunicação máquina para máquina, conectividade entre dispositivos móveis, computação em nuvem, métodos e soluções analíticas para processar grandes volumes de dados e construir sistemas de suporte à tomada de decisões de manejo. Para tanto, este projeto apresenta a continuação do desenvolvimento de uma arquitetura datacêntrica baseada em computação distribuída que armazena e compartilha dados georeferenciados sobre as culturas, safras, aplicações de agroquímicos e ocorrências de doenças e pragas em lavouras em tomateiros (Lopes e Cruz, 2018). Esta evolução tecnológica visa corrigir algumas falhas de funções já existentes e adicionar algumas novas, com o objetivo de, no futuro, expandir a abrangência para outras hortaliças além do tomate. O aplicativo MyFarm++ permite armazenar/organizar as imagens de uma propriedade, talhões ou de ocorrências de pragas e doenças, podendo ser compartilhadas com serviços agronômicos credenciados e previamente registrados. Nossa atualização permite a geração de gráficos, mapas e relatórios acerca do planejamento e da produção de tomates e dos gastos com insumos de uma propriedade. A ferramenta visa auxiliar agricultores e agrônomos para que gerenciem a produção, registrando e racionalizando o uso de insumos, possivelmente contribuindo para o aumento da produtividade, sustentabilidade e diminuindo a degradação do meio ambiente. Além disso, está sendo desenvolvido o acesso a um dashboard, onde o usuário é capaz de registrar de modo georreferenciado suas propriedades, talhões, plantas, e os acontecimentos referentes aos cultivos e safras. A metodologia adotada neste trabalho foi a da Fábrica de Software baseada em Métodos Ágeis desenvolvida pelo PET-SI da UFRRJ (Cruz et al., 2013). MyFarm++ é uma ferramenta agrícola de próxima geração, multiusuária, multiplataforma e de fácil utilização que utiliza o framework javascript React Native no ambiente de desenvolvimento NodeJS em conjunto com a API do Google Maps e o banco de dados NoSQL CouchDB para operar de maneira *offline-first*, que permite sua utilização em ambientes rurais com conectividade intermitente. Para maiores informações visite o site r1.ufrj.br/petsi.

Palavras-chave: Tomateiros; Aplicativos Móveis; Computação Distribuída; NoSQL, Gestão Dados Agrícolas; Agricultura 4.0.

Referências Bibliográficas

- MASSRUHÁ, S. M. F. S.; LEITE, M. A. de A. 2017, Agro 4.0 – Rumo À Agricultura Digital.
LOPES, B. C. do P.; CRUZ, S. M. S. 2018, MyFarm++: Monitoramento Online De Doenças Em Tomateiros Baseado Em Smartphones.
CRUZ, S. M. S. et al. 2013, Relato De Um Experimento Piloto De Uma Fábrica De Software Baseada Em Métodos Ágeis. Disponível em: <http://r1.ufrj.br/petsi/wp-content/uploads/2013/11/ENAPET.pdf>. Acesso em: 02 ago. 2018.

**DESREPLICAÇÃO POR CG-EM DA FRAÇÃO HEXÂNICA DE FOLHAS DE *Myrciaria tenella* (DC.)
O.Berg**

Yasmim da Silva Ferreira¹; Liliana Princisval França²; Víctor de Carvalho Martins³; Ronoel Luiz de Oliveira Godoy⁴ & Mario Geraldo de Carvalho⁵

1. Bolsista PIBIC-CNPq, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Bolsista PIBIC-CNPq, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 3. Doutorando em Química, IQ/UFRRJ; 4. Pesquisador da Embrapa Agroindústria de Alimentos; 5. Professor do IQ/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

Nº do protocolo: AEADE65

A espécie *Myrciaria tenella* (DC.) O.Berg, popularmente conhecida como “murta-do-campo” ou “cambuí”, pertence à família Myrtaceae, que é destacada por ser uma das dez famílias de angiospermas de maior representatividade em território brasileiro com alta taxa de endemismo (FORZZA et al., 2010). Existe trabalho científico apenas sobre a composição química de óleo essencial das folhas desta espécie, porém não localizado nas restingas do Rio de Janeiro (ANDRADE et al., 2006). O objetivo deste trabalho é ampliar o conhecimento sobre a composição química dessa planta e fazer avaliações de atividades biológicas. Nesse sentido, realizamos a identificação de metabólitos especiais, através de desreplicação por cromatografia a gás acoplada a detector por espectrometria de massas (CG-EM) da partição hexânica do extrato metanólico de folhas de *Myrciaria tenella* (DC.) O.Berg. As folhas foram coletadas em Março de 2018 na restinga da Marambaia (Rio de Janeiro - RJ), com identificação taxonômica confirmada pelo botânico Marcelo Souza (ICBS-UFRRJ). As folhas foram previamente secas à temperatura ambiente e em local protegido da luz solar por 7 dias e trituradas em liquidificador. Foi realizada a extração por maceração exaustiva com metanol, e em seguida, particionou-se o extrato metanólico com hexano. A fração hexânica foi submetida à cromatografia em coluna aberta com sílica gel e fase móvel com gradiente de polaridade crescente, utilizando diferentes solventes (hexano, diclorometano, acetato de etila, metanol e água), onde foram recolhidas 69 frações. Uma prévia triagem das frações foi realizada por Cromatografia em Camada Delgada, utilizando radiação ultravioleta (254 nm) e revelador químico vanilina sulfúrica como reveladores, as quais foram agrupadas em 28 frações. Posteriormente as substâncias presentes nessas frações foram caracterizadas por CG-EM com coluna 5% difenil e 95% dimetilpolisiloxano (30 m x 0,25 mm x 0,25 µm), com rampa de aquecimento de 10°C e gradiente de temperatura do forno de 60°C a 290°C, através de comparação dos dados obtidos com biblioteca especializada. Na fração hexânica, foram identificados um total de 23 substâncias, dentre as quais destacam-se sesquiterpenos, triterpenos e ésteres metílicos de ácidos graxos. Em relação aos sesquiterpenos, alguns foram identificados na fração volátil extraída deste material vegetal em um trabalho anterior, como o *E*-cariofileno, aromadendreno, α -humuleno, allo-aromadendreno, viridifloreno, óxido de cariofileno e guaiol (FERREIRA et al., 2018). Além dos ésteres, palmitato de metila, linoleato de metila, linolenato de metila, estearato de metila e 18-metil-nonadecanoato de metila; o diterpeno, fitol; os triterpenos, esqualeno, β -amirina, betulina, e lupeol; e os esteroides, β -sitosterol e α -tocoferol fizeram, também, parte dos constituintes identificados nas frações analisadas. Este trabalho está em andamento e esses resultados revelam novos constituintes em extratos dessa planta.

Palavras-chave: *Myrciaria tenella*; Myrtaceae; cromatografia.

Referências Bibliográficas

- FORZZA, R. C. et al. INSTITUTO DE PESQUISAS JARDIM BOTÂNICO DO RIO DE JANEIRO. Catálogo de plantas e fungos do Brasil [online]. Rio de Janeiro: Andrea Jakobsson.
- ANDRADE, E. H. A. et al. Constituents of the Essential Oil of *Myrciaria tenella* (DC.) O. Berg. J. Essent. Oil Res., **2006**,18,93.
- FERREIRA, Y. S. et al. Constituintes químicos voláteis de folhas de *Myrciaria tenella* (DC.) O.Berg. In: JORNADA FLUMINENSE DE PRODUTOS NATURAIS, 4, 2018, Seropédica-RJ.

DESENVOLVIMENTO DE UM APLICATIVO MOBILE PARA A COLETA E DISSEMINAÇÃO DE INFORMAÇÃO GEOGRÁFICA VOLUNTÁRIA COM MÉTODOS DE MELHORIA DE QUALIDADE DE DADOS VOLUNTÁRIOS

João Pedro Martins Dias de Oliveira¹; Wagner Dias de Souza² & Mauro Antonio Homem Antunes³

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica, IT/UFRRJ; 2. Professor do DE/IT/UFRRJ; 3. Professor do DE/IT/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A disseminação de dados geoespaciais na Web está massiva, intensa e crescendo acima de diversos padrões previstos, conseqüentemente gerando um grande volume de informações sobre a superfície terrestre. Este tipo de dado auxilia, por exemplo, no processo de gestão em governos e instituições privadas, pois ao situar uma informação no espaço é possível definir alocação de recursos ou estratégias de atuação mais eficientes (HAKLAY et al., 2014). Tais dados possuíam anteriormente um alto custo de produção, porém, com a popularização de tecnologias, como sensores e receptores GNSS, associadas à grande utilização de dispositivos móveis é possível que um cidadão comum atue como um produtor de dados geoespaciais (GOODCHILD, 2007). Desta forma, são desenvolvidos ambientes colaborativos para coleta, disseminação e validação deste tipo de dado. A plataforma Geopost Seropédica é um desses ambientes e o principal objetivo do presente trabalho foi o desenvolvimento de soluções de software auxiliares para seu pleno funcionamento. A primeira etapa do projeto foi a implementação de algoritmos de Sistemas de Recomendação de conteúdo para melhoria do processo de disseminação e validação de Informação Geográfica Voluntária (VGI). Foram analisados alguns métodos baseados na técnica de Filtragem Colaborativa (do inglês *Collaborative Filtering*) que determinam o conteúdo relevante para um usuário tendo como base de informações dados coletados durante as interações de um ou mais usuários com o sistema. Informações como categorias mais acessadas ou avaliações atribuídas às postagens são armazenadas e analisadas determinando graus de similaridade entre usuários para posterior indicação de conteúdo sugerido (RAJARAMAN; ULLMAN, 2011). Na segunda etapa, visando uma maior abrangência para utilização do ambiente colaborativo, foi desenvolvido um aplicativo *mobile* para as principais plataformas do mercado. Este *app* é capaz de coletar dados de localização, comentários, descrições, fotos, URL de vídeo e arquivos em geral. Para o funcionamento da aplicação fez-se necessária a implementação de uma API (do inglês *Application Programming Interface*), estabelecendo a comunicação entre a interface para dispositivos móveis, o servidor e o banco de dados do Geopost Seropédica. As soluções de software que possuem execução no lado do servidor, por exemplo, os algoritmos de recomendação e a API de comunicação, foram desenvolvidas através da linguagem PHP (do inglês *Hypertext Preprocessor*). Para modelagem da API buscou-se seguir os padrões da arquitetura REST (*Representational State Transfer*), uma técnica de modelagem que representa uma aplicação Web como um conjunto de recursos e suas alterações como transferências de estado. A interface da aplicação móvel foi implementada através da linguagem Dart e do *framework* Flutter, tecnologias recentes e adequadas para a criação de interfaces de aplicações multiplataforma. Como produto final deste projeto destaca-se a implementação dos algoritmos de recomendação que, associados ao uso do aplicativo móvel, podem incrementar a taxa de disseminação de informações mais relevantes devido sua acessibilidade e usabilidade. Além disso, a interface de troca de dados, entre o aplicativo e o servidor, pode ser reaproveitada posteriormente para efetuar uma comunicação com softwares de terceiros. Portanto, é possível utilizar os dados brutos coletados pelo ambiente Geopost Seropédica em outros projetos.

Palavras-chave: Informação Geográfica Voluntária, Sistemas de Recomendação, Aplicativos Móveis.

Referências Bibliográficas

- HAKLAY, Mordechai et al. **Crowdsourced geographic information use in government**. World Bank Publications, 2014.
- GOODCHILD, M. F. **Citizens as sensors: the world of volunteered geography**. GeoJournal, Springer, v. 69, n. 4, p. 211–221, 2007.
- RAJARAMAN, A.; ULLMAN, J. **D.Mining of massive datasets**. [S.l.]: CambridgeUniversity Press, 2011.

PLÁSTICOS: UM PROBLEMA AMBIENTAL

Mariana Motta de Freitas¹, André Luís de Sá Salomão²; Rodrigo Coutinho da Silva³; Patrícia Anselmo Duffles Teixeira⁴

1. Discente do Curso de Gestão Ambiental, DCMA/UFRRJ; 2. Professor do DESMA/UERJ; 3. Mestrando do DESMA/UERJ; 4. Professor do DCMA/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A partir do século XX o aumento na produção dos plásticos transformou esse composto em parte constituinte dos ciclos biológicos, geológicos e químicos do planeta Terra. Esse trabalho teve como objetivo apresentar o estado da arte do conhecimento sobre a contaminação de plásticos em rios. A metodologia utilizada foi o levantamento bibliográfico, sendo consultado mais de 25 artigos científicos, abrangendo revistas como *Anthropocene*, *Marine Pollution Bulletin*, *Environmental Pollution* e *Water Research*, além de teses, dissertações e livros. O levantamento bibliográfico permitiu compreender que os plásticos tem sido divididos a partir do seu tamanho entre macroplásticos, onipresentes nos ambientes e de fácil visualização, como copos, sacolas e embalagens, e os microplásticos, partículas plásticas com o tamanho inferior a 5 mm que podem ser produzidas ocasionalmente para composição de produtos ou geradas através da degradação de unidades maiores que chegam até os rios por meio dos ventos, esgoto, estações de tratamento e erosão de aterros sedimentares e sanitários. A baixa densidade dessas micropartículas favorece sua permanência na coluna de água sendo transportadas para lagos e mares onde tendem a serem presos em restos orgânicos. Dessa forma, os rios são os principais canais transportadores de plásticos para o seu destino final os ambientes marinhos (Zalasiewicz et al., 2016). Estudos recentes apontam a presença de plásticos e contaminação de ecossistemas em rios importantes como o europeu Danúbio e asiático Yangtze. Durante dois anos foram feitas amostras na superfície no leito do Rio Danúbio, 17349 itens plásticos foram reunidos e a pesquisa estimou que 42 toneladas por ano de materiais plásticos sejam transportados para o Mar Negro por meio das águas desse rio (Lechner et al., 2014). No estuário do Rio Yangtze foram realizadas sete amostras, ao decorrer de um dia, utilizando uma bomba de 12V DC Teflon para coletar águas superficiais e os resultados apontaram as fibras de microplásticos, como o formato mais abundante nas amostras, seguidos por grânulos e filmes (Zhao et al., 2014). Escassos são os estudos para o levantamento dessa problemática ambiental para o Rio Paraíba do Sul que margeia da cidade de Três Rios e o Instituto ITR-UFRRJ e constitui o principal meio de abastecimento da cidade do Rio de Janeiro. A pesquisa realizada permitiu concluir que embora a maior parte dos plásticos chegue aos mares através de águas doces, estudos em rios são escassos, não havendo um padrão de distribuição e classificação dos plásticos nessa área dificultando assim apresentação de soluções estratégicas, sustentáveis e de baixo custo que impeçam a chegada dos plásticos em sistemas marinhos por meio dos rios.

Palavras-chaves: Plásticos; transporte; rio

Referências Bibliográficas

- LECHNER, Aaron et al. The Danube so colourful: a potpourri of plastic litter outnumbers fish larvae in Europe's second largest river. *Environmental pollution*, v. 188, p. 177-181, 2014.
- ZALASIEWICZ, Jan et al. The geological cycle of plastics and their use as a stratigraphic indicator of the Anthropocene. *Anthropocene*, v. 13, p. 4-17, 2016.
- ZHAO, Shiye et al. Suspended microplastics in the surface water of the Yangtze Estuary System, China: first observations on occurrence, distribution. *Marine pollution bulletin*, v. 86, n. 1-2, p. 562-568, 2014.

IDENTIFICAÇÃO DE METABÓLITOS ESPECIAIS COM DESREPLICAÇÃO POR CG-EM DA FRAÇÃO HEXÂNICA DE FOLHAS DE *Eugenia Copacabanensis* Kiaersk. (Myrtaceae)**Liliana Princisval França¹; Yasmim da Silva Ferreira²; Víctor de Carvalho Martins³; Ronoel Luiz de Oliveira Godoy⁴ & Mario Geraldo de Carvalho⁵**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Doutorando em Química, IQ/UFRRJ; 4. Pesquisador da Embrapa Agroindústria de Alimentos; 5. Professor do DQO/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra
Nº do protocolo (SIGGEN): AEADE65

RESUMO

A espécie *Eugenia copacabanensis* Kiaersk. (princesinha-de-Copacabana) pertence à família Myrtaceae, sendo localizada normalmente em restingas do estado do Rio de Janeiro e utilizado para ornamentação ou consumo de sucos dos frutos. Em trabalhos anteriores, desenvolveu-se o estudo fitoquímico desta planta usando cromatografia clássica e conduziu à identificação de β -sitosterol, β sitosterol-glicosídeo, oito triterpenos, (mistura de α - e β -amirina, ácido ursólico, ácido 30-hidroxiursólico, betulina, friedelina, friedelan-3,4-lactona e taraxerol), a mistura de três sesquiterpenos, (clovandiol, globulol e viridiflorol), três flavonoides (canferol-3-O- β -D-ramnosídeo, quercetina-3-O- α -L-arabinosídeo e quercetina), além da mistura de quatro ésteres derivados do ácido cumárico em extratos de galhos e folhas dessa planta (CARVALHO JUNIOR et al, 2014). Considerando a possibilidade de identificação de outros constituintes, incluindo os voláteis, além da preparação de extratos para avaliação de atividades biológicas, resolveu-se incluir esta planta como parte do projeto envolvendo estudos de espécies de Myrtaceae coletadas na restinga da Marambaia. Desenvolvendo-se, assim, estudos adicionais com desreplcação por cromatografia a gás acoplada a espectrometria de massas (CG-EM). Nesse trabalho, apresenta-se o estudo da partição hexânica do extrato metanólico de folhas de *Eugenia copacabanensis* Kiaersk. O material vegetal foi coletado em março de 2018 na restinga da Marambaia (Rio de Janeiro - RJ). Folhas foram secas, moídas e submetidas a extração por maceração estática a exaustão com metanol e, em seguida, particionou o extrato metanólico em um funil de separação com hexano (EFEC-H). A fração hexânica foi fracionada em coluna aberta de sílica gel, utilizando como fase móvel solventes em gradiente crescente de polaridade. Foram recolhidas 86 frações de aproximadamente 100 mL, que foram analisadas por CCDA e reunidas em grupos, resultando em 21 frações. As frações reunidas foram analisadas por CG/EM e foram identificadas 24 substâncias, sendo os sesquiterpenos (*E*)-Cariofileno, α -humuleno, alloaromadendreno, γ -muuroloeno, α -muuroloeno, α -calacoreno e o diterpeno α -kaureno, detectados anteriormente na fração volátil de folhas da planta (FRANÇA et al, 2018). Além destas foram identificados a 4-hidroxi-4-metil-2pentanona; os sesquiterpenos α -copaeno, δ -cadineno, gleenol, espatulenol, δ -cadinol e clovanediol; os ésteres metílicos palmitato de metila, linolenato de metila, linoleato de metila e estearato de metila; atocoferyl, γ -tocoferol e β -tocoferol; e os triterpenos β -amirina, α -amirina e β -sitosterol. Além disso, foi observada coloração característica da presença de carotenoides nas frações obtidas inicialmente na coluna de sílica gel. Procedeu-se a análise da fração EFEC-H1-3 por Cromatografia Líquida de Alta Eficiência acoplado ao Detector de Arranjo de Diodos (CLAE-DAD) e foram identificados 4 carotenoides, sendo 13-*cis*- β -caroteno, α -caroteno, β -caroteno e 9-*cis*- β -caroteno. O uso da desreplcação por CG-EM permitiu a identificação de substâncias já conhecidas de diferentes classes metabólicas não identificados anteriormente na espécie. A próxima etapa do estudo consistirá na aplicação das frações de interesse em diferentes testes biológicos.

Palavras-chave: *Eugenia copacabanensis*; Cromatografia; Desreplcação.

Referências Bibliográficas

- CARVALHO JUNIOR, et al. Constituintes químicos e atividade antioxidante de folhas e galhos de *Eugenia copacabanensis* Kiaersk (Myrtaceae). Quim. Nova, 37|3| 477, 2014.
FRANÇA, L. P. et al. Constituintes químicos voláteis de folhas de *Eugenia copacabanensis* Kiaersk. (Myrtaceae). In: JORNADA FLUMINENSE DE PRODUTOS NATURAIS, 4, 2018, SeropédicaRJ.

**DETERMINAÇÃO COLORIMÉTRICA DE CLORETO EM ALIMENTOS CASEIROS:
UM PROPOSTA DIDÁTICA PARA O ENSINO DE QUÍMICA E O COMBATE À HIPERTENSÃO**
Wanny Tavares Nogueira¹, Sheisi Fonseca Leite da Silva Rocha², Leila Martins da Costa
Quinteiro³, Cristina Maria Barra³ & José Geraldo Rocha Junior³

1. Bolsista BIXT, Discente do Curso de Química Industrial IQ/UFRRJ; 2. Professora do FAT/DQA/UERJ. 3. Professor do IQ/DQA/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

Nº do protocolo: 23083031574/2018-90

RESUMO

A hipertensão arterial é um fator de risco importante para as doenças cardiovasculares (principalmente infarto e AVC). Em matéria publicada pela Agência da Saúde, no Dia Nacional de Combate à Hipertensão, o Ministério da Saúde alerta que 34 pessoas morrem por hora de doenças cardiovasculares no Brasil e que o número de óbitos por hipertensão em 2017 foi maior que 302 mil. Entre os fatores que influenciam os níveis de pressão arterial está o consumo excessivo de sódio (o principal componente do NaCl utilizado em nossa culinária). Como o brasileiro consome mais que o dobro da quantidade recomendada (5 g NaCl) de sal em sua alimentação, pode se fazer o controle da quantidade de sódio ou cloreto em alimentos. Daí o objetivo deste projeto, que é propor uma metodologia de baixo custo e fácil execução para estimar os teores de sódio através da determinação de cloreto em amostras de alimentos caseiros, pois a maior parte do sódio provém do sal de cozinha (NaCl) adicionado no alimento. O método se baseia na intensidade da coloração avermelhada produzida após a sua reação com o Hg (SCN) em presença de íons Fe³⁺. O cloreto desloca o tiocianato que, por sua vez, forma complexo vermelho-sangue com o Fe³⁺. Três amostras de 2,0 (± 0,0001) g de arroz cozido sem sal foram pesadas diretamente em tubos Falcon de 50 mL. As amostras foram maceradas e sofreram adição de solução padrão de NaCl 0,1000 mol.L⁻¹ suficiente para produzir soluções amostra de 0,10, 2,0 e 40 mmol.L⁻¹. A concentração de 2,0 mmol L⁻¹ equivale ao valor limite de sódio que pode ser consumido (em uma dieta de 2000 Kcal.dia⁻¹). A seguir, 500 µL destas amostras foram testadas com 500 µL de Reagente 1 (solução de Hg (SCN) 20,02 mol.L⁻¹, em HNO₃ 3,0 mol.L⁻¹ e indicador Fe(NO₃)₃). A intensidade das cores produzidas foi semelhante às dos padrões de NaCl nas mesmas concentrações, indicando que o cloreto não sofre interferência da matriz da amostra. A seguir, duas amostras distintas de arroz cozido com sal foram submetidas ao mesmo procedimento dos padrões. As soluções amostra foram testadas com o Reagente 1, produzindo coloração equivalente às soluções padrão de NaCl 5,0 e 20 mmol L⁻¹. A determinação titrimétrica de cloreto nestas amostras, pelo método de Mohr, indicou concentração de 5,1 e 19 mmol.L⁻¹, respectivamente, demonstrando que o método colorimétrico é confiável para a determinação. A metodologia proposta apresenta simplicidade teórica e facilidade de execução suficientes para ser realizada em escolas de nível médio para aplicação do aprendizado, despertar o interesse na pesquisa científica e conscientização acerca dos males provocados na saúde devido ao excesso do consumo de sódio.

Palavras-chave: sódio; hipertensão; colorimetria; método de Mohr

Referências Bibliográficas

MS (Ministério da Saúde), Agência da Saúde, Hipertensão afeta um entre quatro adultos no Brasil, publicado em 26/04/2019. Disponível em: <http://www.saude.gov.br/noticias/agencia-saude/45394-hipertensao-afeta-um-a-cada-quatro-adultos-no-brasil>. Acesso em 09/08/2019.
CASEMIRO, J.P.; FONSECA, A.B.C.D.; SECCO, F.V.M. Promover saúde na escola: reflexões a partir de uma revisão sobre saúde escolar na América Latina, Ciência & Saúde Coletiva, n. 19, p. 829-840, 2014.

LOCAIS DE INTERESSE GEOLÓGICO E SEU CONTEXTO Julianne Vital Martins¹; Lucas Pereira Portela Brito¹ & Patricia Anselmo Duffles Teixeira²

1. Discente do curso de gestão ambiental DCMA/ITR/UFRRJ; 2. Professora do DCMA/ITR/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O conceito de geodiversidade surgiu em 1993. Pode ser considerado como o conjunto de rochas, minerais e fósseis, ou pode abranger as comunidades dos seres vivos. A definição proposta pela Royal Society for Nature Conservation do Reino Unido propõem que geodiversidade consiste na variedade de ambientes geológicos, fenômenos e processos ativos que dão origem a paisagens, rochas, minerais, fósseis, solos e outros depósitos superficiais que são o suporte para a vida na terra, ou seja, é a compreensão de aspectos não vivos do planeta (Brilha, 2005). A geodiversidade constitui o suporte essencial para a biodiversidade, pois é a partir dela que os organismos vivos encontram condições de subsistência nos conjuntos abióticos indispensáveis. Os principais pontos da geodiversidade podem ser a evolução da civilização que é a disponibilidade de alimentos, locais de abrigo, materiais de construção e o desenvolvimento tecnológico que são as extrações dos elementos químicos das rochas e minerais. Os responsáveis pela geodiversidade são os minerais, o clima, os fósseis e os solos. A geoconservação (necessidade de conservar) tem por objetivo a preservação da diversidade natural de significativos aspectos e processos geológicos, geomorfológicos e de solo, mantendo a evolução natural desses aspectos e processos. Seus valores podem ser intrínsecos, cultural, estético, econômico, funcional, científico e educativo. A maior parte das ameaças à geodiversidade advém direta ou indiretamente da atividade humana. Ela encontra-se ameaçada a diversas escalas e em graus distintos. Pode-se assistir desde a degradação da paisagem natural à degradação de um pequeno afloramento. Este projeto baseia-se na identificação de contextos geológicos, a partir dos quais são identificados os locais de interesse geológico (LIG). Trata-se de lugar de interesse devido ao seu caráter único e representativo, para o estudo e interpretação da origem e evolução dos grandes domínios geológicos, incluindo os processos que os modelaram, os climas do passado e sua evolução paleobiológica (Garcia Cortes, 2009). Esta definição proposta, também é válida para a denominação de "ponto de interesse geológico". A concentração desses LIGs em um dado território deve ser capaz de resultar em outra figura com características diferentes, como parque natural, geoparque, parque geológico que vise preservar o patrimônio geológico. O Patrimônio geológico pode ser entendido como o conjunto de recursos naturais geológicos de interesse científico, cultural ou de valor educativo que nos permitem conhecer, estudar e interpretar a origem e evolução da Terra, os processos que o modelaram, os climas e paisagens do passado e do presente e a origem e evolução da vida.

Palavras-chave: Geodiversidade; geoconservação; locais de interesse geológico

Referências Bibliográficas

- BRILHA, J. Patrimônio geológico e geoconservação: a conservação da natureza na sua vertente geológica. Braga: Palimage, 2005.
CORTÉS, G. Documento Metodológico para La elaboración Del inventario español de lugares de interes geológico (IELIG). Instituto Geológico y Minero de España. 64p, 2009.

IDENTIFICANDO ELEMENTOS DA GEODIVERSIDADE**Lucas Pereira Portela Brito¹, Julianne Vital Martins¹ & Patrícia Anselmo Duffles Teixeira²**

1. Discente do curso de gestão ambiental DCMA/ITR/UFRRJ; 2. Professora do DCMA/ITR/UFRRJ.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra**Resumo**

A geodiversidade consiste na variedade de ambientes geológicos, fenômenos e processos ativos que dão origem a paisagens, rochas, minerais, fósseis, solos e outros depósitos superficiais que são o suporte para a vida na terra. A geodiversidade sempre esteve presente na história da humanidade, desde os tempos mais remotos à evolução da civilização vem extraindo e utilizando esses recursos, seja para construção de abrigos e ferramentas no período pré-histórico, construção de castelos no período medieval e desenvolvimento tecnológico, do qual estamos reféns, isso tudo só foi possível devido à disponibilidade de rochas e minerais. O clima contribui bastante para a formação das paisagens, porém pode também se manifestar como resultado da existência de seres vivos que evoluíram ao longo dos anos e cujas evidências ficaram presentes nas rochas. A geodiversidade influencia em diversos fatores, dentre os quais os nomes de regiões ao redor do mundo devido a aparência das formações geomorfológicas de uma região, estas paisagens possuem um enorme valor estético para as regiões de onde recebem visitas de turistas de todo o mundo assim contribuindo para a economia local. A geodiversidade possui grande importância no contexto energético e econômico mundial, pois fornece materiais com petróleo, carvão e gás natural; As águas subterrâneas possuem grande valor socioeconômico principalmente em períodos de seca; As explorações dos recursos naturais interferem muito na geodiversidade, pois através dessas explorações paisagens, fósseis e regiões possivelmente históricas são danificadas com estas explorações em busca de recursos naturais, a exploração dos recursos naturais interferem na geodiversidade, pois através dessas explorações paisagens, fósseis e regiões possivelmente históricas são danificadas com estas explorações em busca de recursos naturais. Existem muitas definições de patrimônios e locais de interesses geológicos dentre os quais o patrimônio geológico e um dos mais importantes pois abrangem várias áreas como cultural, educacional e científico, ou seja, esses locais possuem um rico acervo histórico e cultural como a presença de fósseis em algumas dessas regiões, formações geológicas que podem apresentar belas paisagens, podem apresentar locais de impactos de meteoritos além de apresentar uma vasta e rica presença de minerais. Todos esses fatores auxiliam no estudo para o entendimento dos processos de origem e evolução da terra, ou seja, abrangendo os processos que a modelaram sua estrutura e relevo, a formação de climas e paisagens tanto do passado como a do presente e a origem e processos da evolução da vida na terra. O local de interesse geológico tem por objetivo o estudo de uma região com a finalidade de entender todo o processo geológico de uma área desde a sua origem até o estado atual, ou seja, através do estudo de minerais e rochas encontrados no local, assim como as paisagens e relevos definir e organizar os locais com o objetivo de apresentar de uma forma clara todo o conteúdo pesquisado e estudado de uma região, visando assim o compartilhamento do conhecimento encontrado na região tanto para a própria população local quanto para outras pessoas, assim incentivando a conservação e visita dos locais.

Palavras chaves: Geodiversidade; geoconservação; patrimônio geológico.**Referências Bibliográficas**

CORTÊS, G. Documento Metodológico para La elaboración Del inventario español de lugares de interes geológico (IELIG). Instituto Geológico y Minero de España. 64p, 2009.

DETERMINAÇÃO DE AGROQUÍMICO EM ALIMENTOS *IN NATURA* ATRAVÉS DA OTIMIZAÇÃO DE MÉTODO ANALÍTICO PARA EXTRAÇÃO EM CROMATOGRAFIA LÍQUIDA DE ALTA EFICIÊNCIA.**Diego da Paixão Alves¹, Durval Reis Mariano Junior², Gabriele Oliveira Silva³ & Vanessa Gomes Kelly Almeida⁴**

1. Aluno de Iniciação Científica Voluntária, Discente do Curso de Agronomia, IA/UFRRJ, 2. Mestre em Química, IQ/UFRRJ, 3. Discente do curso de Agronomia, IA/UFRRJ 4. Professora do DQA/IQ/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra.

RESUMO

Agroquímicos são produtos desenvolvidos para controle de pragas e doenças na agricultura. No Brasil, o consumo desses defensivos foi crescente nos últimos anos, devido ao aumento populacional e por consequência uma maior demanda da agricultura, principalmente na última década (IBAMA, 2018), onde que, em 2016, a comercialização desses químicos foi de aproximadamente 539 toneladas. Dentre os utilizados na agricultura, neste trabalho dá-se destaque ao Clorpirifós, nome comum do químico [0,0-dietil-0-(3,5,6-tricloro-piridil) -fósforo-tionato]. É um inseticida organofosforado de classe II, altamente tóxico e prejudicial ao meio ambiente. Para a saúde humana, ele coloca em risco o funcionamento da enzima colinesterase, inibindo-a, causando síndrome colinérgica, sendo classificado como neurotóxico. Devido a isso, é importante determinar a presença de traços desse agroquímico nos vegetais, como alerta ao uso excessivo do mesmo. Neste trabalho são apresentados estudos para a determinação do clorpirifós em folhas de alface coletadas em hortifrúteis no município de Seropédica (RJ), utilizando diclorometano como solvente extrator. Foram avaliados também as melhores condições para análise do clorpirifós em HPLC, tendo utilizado como fase móvel metanol e ácido acético 0,02% 90:10, com temperatura de 35°C, injeção de 50µL, fluxo de 1mL/min e detecção em 290nm. O Método tem linearidade entre 24,0mg/L e 240mg/L. Entre as alfases analisadas, chegou-se aos seguintes resultados: em duas amostras, o agroquímico foi detectado com concentrações de 0,055mg e 0,034mg. A Anvisa, determina que não tenha traços do clorpirifós em alface (pois não é indicado para a cultura), mas caso ocorra, que tenha no máximo 0,01mg. Na amostra restante, não foi atingido o nível de detecção do método utilizado para a análise, onde conclui-se que, se foi feito o uso do inseticida, a dosagem foi abaixo do limite mínimo de detecção. De acordo com essas análises, observa-se que o uso indiscriminado de inseticida ainda ocorre, podendo ser por falta de informação do produtor, uma vez que o produto não é indicado para o uso em alfases. Com relação ao método de análise, conclui-se que é simples, podendo ser implementado na rotina laboratorial para quantificação de clorpirifós em alimentos *in natura*. O grande benefício desta técnica é um método de extração simples, tendo uma maior facilidade no preparo de amostras, em menor tempo de análise.

Palavras-chave: Clorpirifós; HPLC; Organofosforado

Referências Bibliográficas

IBAMA. Agrotóxicos. Disponível em <https://www.ibama.gov.br/agrotoxicos>.

PENA, M. F.; AMARAL, E. H.; SPERLING, E. V.; CRUZ I. Método para determinação de resíduos de clorpirifós em alface por cromatografia líquida de alta eficiência. *Pesticidas: R. Ecotoxicol. E Meio Ambiente*, v. 13, 2003

SILVA, D. K. F.; SANTOS, E. M. A. Desenvolvimento de método analítico para determinação de resíduos de pesticidas em hortaliças e legumes por HPLC. IFCE: Ceará, 2017

DECOMPOSIÇÃO DA METILAMINA, ETILALMINA E ETANOLAMINA EM MEIO INTERESTELAR

Jean Moniz B. A. da Silva¹ & Glauco Favilla Bauerfeldt²

1. Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professor do IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Evidências para a formação de aminas alifáticas em meteoritos, gelos e em nuvens no meio interestelar (ISM) têm sido apontadas na literatura. Ainda que estas espécies tenham sido detectadas, rotas para sua síntese não são bem conhecidas. Observada esta lacuna, este trabalho visa o estudo das reações unimoleculares de metilamina (MA), etilamina (EA) e etanolamina (MEA) a fim de coletar dados termodinâmicos e cinéticos suficientemente precisos para que possam contribuir com a discussão acerca da formação e decomposição destas espécies em ambiente interestelar e que possam ser incorporados nos modelos cinéticos astroquímicos. Os cálculos teóricos foram realizados em nível MP2/aug-cc-pVTZ, incluindo otimizações de geometria, frequências vibracionais e caminhos de reação. Coeficientes de velocidade foram calculados adotando a teoria de estado de transição com correção de Wigner para o efeito túnel. As reações estudadas foram: MA→H₂CNH+H₂ (R.1), MA→HCNH₂+H₂ (R.2), MA→CH₃+NH₂ (R.3), EA→HCCH₂NH₂+H₂ (R.4), EA→H₃CCNH₂+H₂ (R.5), EA→H₃CCHNH+H₂ (R.6), EA→CH₃+CH₂NH₂ (R.7), EA→CH₃CH₂+NH₂ (R.8), MEA→HOCH₂CHNH+H₂ (R.9), MEA→HOCCH₂NH₂+H₂ (R.10), MEA→HOCH₂CNH₂+H₂ (R.11), MEA→CH₂CH₂OH+NH₂ (R.12), MEA→CH₂OH+CH₂NH₂ (R.13). Os pontos de sela foram localizados para todas as reações unimoleculares, exceto as dissociações (R3, R7, R8, R12 e R13), cujos caminhos de reação são representados por potenciais de Morse. Coeficientes de velocidade para as reações diretas (k(T)) e inversas (k_{rev}(T)) foram calculados. Para as reações diretas, a equação de Eyring foi adotada. Para as reações inversas, os coeficientes de velocidade foram obtidos considerando a reversibilidade microscópica. Para tanto, constantes de equilíbrio, em função da temperatura, também foram calculadas. As diferenças de energia de reação obtidas, ΔrE0(kcal/mol), foram: 25,73 (R.1); 63,63 (R.2); 86,09 (R.3); 24,40 (R.4); 58,01 (R.5); 21,20 (R.6); 84,12 (R.7); 88,10 (R.8); 24,04 (R.9); 70,43 (R.10); 57,80 (R.11); 89,03 (R.12); 81,83 (R.13). As energias de barreira obtidas, E_o (kcal/mol), foram: 103,53 (R.1); 82,91 (R.2); 108,07 (R.4); 82,14 (R.5); 98,43 (R.6); 99,51 (R.9); 88,49 (R.10); 82,68 (R.11). Os coeficientes de velocidade a 100 K, k (100 K, s⁻¹), calculados são: 4,29x10⁻²¹³ (R.1); 1,78x10⁻¹⁶⁸ (R.2); 3,28x10⁻¹⁷¹ (R.3); 6,10x10⁻²²⁴ (R.4); 5,09x10⁻¹³⁴ (R.5); 7,75x10⁻¹⁸⁹ (R.6); 1,45x10⁻¹⁶⁹ (R.7); 3,55 x10⁻¹⁸¹ (R.8); 2,28x10⁻²⁰⁴ (R.9); 7,92x10⁻¹⁸¹ (R.10); 4,98x10⁻¹⁶⁸ (R.11); 9,67x10⁻¹⁸³ (R.12); 2,71x10⁻¹⁶¹ (R.13). Os coeficientes de velocidade para as reações reversas, k_{rev} (100 K, cm³molécula⁻¹s⁻¹), também foram calculados, sendo: 2,75x10⁻¹⁸⁰ (R.1); 7,88x10⁻⁵³ (R.2); 2,69x10⁻⁷ (R.3); 3,56x10⁻¹⁹⁴ (R.4); 1,18x10⁻⁶³ (R.5); 3,02x10⁻¹⁷⁹ (R.6); 3,77x10⁻¹¹ (R.7); 2,14x10⁻¹⁴ (R.8); 1,36x10⁻¹⁷⁵ (R.9); 1,47x10⁻⁵⁰ (R.10); 2,10x10⁻⁶⁵ (R.11); 3,63x10⁻¹⁴ (R.12); 1,95x10⁻⁹ (R.13). Os resultados obtidos neste estudo permitem concluir que R.2, R.5 e R.11 são os caminhos de decomposição mais importantes (entre os estudados) para MA, EA e MEA, respectivamente. As rotas de síntese cineticamente favorecidas, por outro lado, são as vias de reações entre os radicais.

Palavras Chave: aminas, caminhos de reação, meio interestelar, cinética química.

Referências Bibliográficas

Förstel, M. et al. Formation of Methylamine and Ethylamine in Extraterrestrial Ices and Their Role as Fundamental Building Blocks of Proteinogenic α-amino Acids. *The Astrophysical Journal*, 845, 2017.

CRIOGRAFIA DE CURVAS ELÍPTICAS
Iago de Carvalho Abalada¹ & Cláudio César Saccomori Junior²

1. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Matemática, ICE/UFRRJ; 2. Professor do DEMAT/ICE/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O homem sempre teve necessidade de esconder informação e manter segredos. Na guerra, e até mesmo no amor, o desenvolvimento de técnicas para ocultar mensagens data desde a idade antiga. Tais técnicas consistiam em métodos para transformar a mensagem original em um texto ininteligível que apenas o destinatário pudesse decifrar. Para isso, era necessário que (somente) este possuísse a chave para realizar a decifração da mensagem. Deste modo, mesmo que a mensagem fosse interceptada o espião não conseguiria descobrir a verdadeira informação. Na Criptografia Clássica (também chamada de Pré-computacional), os textos eram cifrados de forma que o processo pudesse ser invertido manualmente ou até mesmo mentalmente. Logo, tais algoritmos eram relativamente simples se comparados com os que utilizamos hoje em dia. Com o advento da computação, a criptografia começou a evoluir significativamente. As máquinas, com sua capacidade de realizar cálculos muito mais rápido que os humanos, viabilizaram a implementação de algoritmos mais complexos. Um dos eventos marcantes da criptografia moderna foi o método de troca de chaves desenvolvido por Whitfield Diffie e Martin Hellman, que permite aos interlocutores definir uma chave secreta sem a necessidade de um canal privado para tal (eliminando uma fragilidade do sistema, visto que o segredo estaria arruinado caso um espião interceptasse a chave). Com o método Diffie-Hellman, cria-se uma chave a partir de uma combinação de partes transmitidas publicamente e partes geradas em particular. Este processo se realiza de forma que ambos os interlocutores combinam uma chave em comum, mas um terceiro interceptando o canal não consegue recriar a chave com as informações transmitidas publicamente em um tempo viável. Atualmente, utilizamos criptografia em diversas situações do dia a dia: ao realizar transações bancárias, acessar um site com "https", enviar mensagens eletrônicas, etc. Além disso, muitos algoritmos de criptografia surgiram após Diffie-Hellman, como o RSA e a criptografia de ElGamal, sendo o primeiro um dos mais famosos e amplamente aplicados. A criptografia de ElGamal se baseia na dificuldade de se calcular logaritmos discretos em certos grupos e pode ser aplicada em qualquer grupo cíclico finito; em particular, sobre grupos de curvas elípticas. O projeto consiste num texto científico introdutório à criptografia sobre curvas elípticas. No início do trabalho, são apresentados os resultados sobre corpos finitos e espaços projetivos necessários para a compreensão do tema, como o teorema que caracteriza a ordem e a estrutura de corpos finitos e a relação entre espaços projetivos e vetoriais de mesma dimensão sobre um mesmo corpo. Posteriormente, são apresentadas as curvas elípticas e uma determinada estrutura de grupo sobre mesmas, bem como as propriedades de tais grupos relevantes às aplicações na criptografia. É discutido o problema do logaritmo discreto (no qual se baseiam os sistemas criptográficos sobre curvas elípticas aqui discutidos) juntamente com os algoritmos mais conhecidos para resolvê-lo, que ilustram a sua dificuldade. Por fim, tratamos dos dois principais sistemas criptográficos que utilizam curvas elípticas (ElGamal e ECIES) e do algoritmo RSA, estabelecendo um comparativo entre os mesmos.

Palavras-chave: Criptografia; Curvas Elípticas.

Referências Bibliográficas

CAMERON, P. J. Combinatorics: topics, techniques, algorithms. Cambridge: Cambridge University Press, 1994. LANG, S. Algebra. 3. ed. New York: Springer-Verlag, 2002.
WASHINGTON L. C. Elliptic Curves: Number Theory and Cryptography. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2003.

ESTUDO CINÉTICO DA REAÇÃO ENTRE O DIMETIL SULFETO E RADICAIS HIDROXIL
Mateus Costa e Silva Bichels de Oliveira¹ & Glaucio Favilla Bauerfeldt²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professor do DQF/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A partir de 1987 com a publicação de Charlson e colaboradores, trabalha-se e investiga-se o papel do dimetil sulfeto (DMS) no transporte de enxofre dos oceanos para a atmosfera. A molécula é liberada na atmosfera por espécies de fitoplâncton marinho, e sua oxidação formaria núcleos de condensação de nuvens na atmosfera, filtrando os raios solares e, conseqüentemente, diminuindo a temperatura na região. Por isso, estudos sobre DMS e suas reações, são vistos com bons olhos para um melhor entendimento sobre a regulação de temperatura em ambientes aquáticos. Podendo, inclusive ser considerado um gás efeito estufa negativo, apesar do seu grau de atuação na diminuição da temperatura do planeta ainda não ser definida. A oxidação de DMS em atmosfera marinha é iniciada por radicais hidroxil (OH). O objetivo deste trabalho é investigar os caminhos de reação de DMS com OH e propor coeficientes de velocidade. Otimizações de geometria, cálculos de frequências vibracionais e caminhos de reação foram conduzidos em nível M06-2X/aug-cc-pVTZ com o programa Gaussian 09. Cálculos termodinâmicos e dos coeficientes de velocidade variacionais canônicos foram conduzidos com o programa kcv. Inicialmente, buscou-se identificar os intermediários das reações do DMS com OH. Seguindo a literatura, nesta reação abrem-se os canais de abstração de hidrogênio (formando CH_3SCH_2 e H_2O) e de adição (formando o aduto DMS.OH). Além das geometrias correspondentes aos reagentes e produtos, pontos de sela e complexos pré-barreira foram localizados. Concomitantemente, os parâmetros energéticos e termodinâmicos foram calculados. Os resultados mostram que o caminho de abstração apresentou duas rotas possíveis, distintas pela posição do hidrogênio, ambas apresentaram pré-complexo e ponto de sela diferentes, com um $\Delta E = -24,0$ kcal/mol dos produtos em relação aos reagentes. O caminho de adição foi identificado com apenas uma rota, sem ponto de sela e com um $\Delta E = -9,6$ kcal/mol, com reagentes também como referencial. Com os dados teóricos obtidos, coeficientes de velocidade de abstração de hidrogênio foram calculados e comparados com a literatura, que aponta uma dependência dessa constante com a temperatura seguindo a função $k_a(T) = 1,13 \times 10^{-11} \exp(253/T)$. Para comparação, foi feita a razão entre coeficiente de velocidade teórico e experimental, na faixa de temperatura entre 230 e 320 K, sendo encontradas as razões na faixa de 0,70 (320 K) a 0,85 (230 K). O canal de reação de adição é reversível, dando abertura para o canal de abstração de hidrogênio. O modelo teórico proposto permite a previsão de coeficientes de velocidade em excelente acordo com os dados experimentais.

Palavras-chave: Sulfeto de dimetila; Dimetil sulfeto; Química atmosférica; Cinética Química; Teoria de Estado de Transição Variacional.

Referências Bibliográficas

NUNES-NETO N.F., DO CARMO R.S., EL-HANI C.N. **Uma Conexão Entre Algas e Nuvens: Fundamentos Teóricos da Hipótese Claw e suas Implicações para as Mudanças Climáticas.** *Oecologia Brasiliensis*, n. 13(4), 596-608, dezembro 2009;

WILLIAMS M.B., CAMPUZANO-JOST P., COSSAIRT B. M., HYNES A. J., POUNDS. A. J. **Experimental and Theoretical Studies of the Reaction of the OH Radical with Alkyl Sulfides: 1. Direct Observations of the Formation of the OH-DMS Adduct-Pressure Dependence of the Forward Rate of Addition and Development of a Predictive Expression at Low Temperature.** *The Journal of Physical Chemistry A*, n. 111, 89-10, 2007.

SÍNTESE E ATIVIDADE ANTITUMORAL DE 1,3,4-TIADIAZÓLIOS
Dandara dos Santos Carmo Pereira¹, Andressa Esteves-Souza²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professora do DQO/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Natureza

RESUMO

O presente trabalho teve como intuito realizar a síntese de uma série de 1,3,4- tiadiazólios por meio da reação de ciclização de tiosemicabazonas com FeCl₃, inicialmente, uma série de arilaldeídos substituídos (H, OCH₃, CH₃, Cl, Br, F, NO₂ e CF₃), reagiram com a tiossemicarbazida por meio de dois métodos, o método *Tradicional* e o método *One Pot*. O método *Tradicional*, foi realizado a partir da adição de quantidades equimolares dos arilaldeídos e tiossemicarbazida em solução etanólica e duas gotas de HCl concentrado, com refluxo de duas horas. No método *One Pot*, que é caracterizado por ser um método dentro dos princípios da Química Verde, quantidades equimolares dos arilaldeídos e da tiossemicarbazida foram adicionados à uma cápsula de porcelana e macerados manualmente por 30 minutos. Após este tempo, foram adicionados 10mL de uma solução saturada de bicarbonato de sódio. No final de cada método as substâncias obtidas foram devidamente caracterizadas pelas técnicas espectroscópicas de rotina: infravermelho, RMN ¹H e ¹³C. Os rendimentos dessas substâncias também foram obtidos e comparados entre si, sendo observado uma pequena diferença entre os rendimentos das substâncias obtidas pelo método Tradicional e as substâncias obtidas pelo método One Pot. Tendo obtido as tiossemicarbazonas, o próximo passo foi realizar a síntese dos 1,3,4tiadiazólios. Esta etapa foi realizada através da suspensão das tiossemicarbazonas em 25mL de água morna e 25mL de uma solução de 0,15M de FeCl₃, sob agitação e aquecimento(80-95°C) por 6 horas, e depois foi filtrada à quente. Em seguida, foram adicionados à mistura reacional 25mL de uma solução tampão de ácido cítrico(0,11M) e citrato de sódio(0,05M), sendo seguida por uma neutralização com hidróxido de amônio 10%. Os produtos obtidos foram filtrados e caracterizados pelas técnicas espectroscópicas de rotina. Os rendimentos desta etapa, no entanto não foram tão interessantes, ficando em torno de 10% para a maioria dos compostos. No entanto, resultados preliminares da inibição da enzima tirosinase, um importante alvo na quimioterapia do câncer, nos animou a aprimorar a metodologia para a síntese dos compostos 1,3,4-tiadiazólios e aprofundar o estudo do seu potencial antitumoral em uma próxima etapa do trabalho e continuar estudando essa classe de substâncias.

Palavras-chave: Tiossemicarbazona; tiadiazólio; tirosinase

Referências Bibliográficas

- Jadhav SA, Dengle ST, Vaidya SR, Nagre HB, Chemistry Research Journal, vol 2, pág. 65-70, 2016.
Ali Darehkordi* Behnam Zarezadeh Abarquoui, and Fariba Rahmani; Journal of Heterocyclic Chemistry, Vol 54, pág. 1872-1879, maio 2017.
Sousa-Pereira, D.; Goulart, C. M.; Reis, C. M.; Echevarria, A. Rev. Virtual Quim., Vol 5, pág. 770-785, agosto 2013.

GEOCRONOLOGIA DO MACIÇO DO ALTO CHAPÉU (ES)
Isabel Sant' Ana Rocha¹ & Patrícia Anselmo Duffles Teixeira²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Gestão Ambiental, UFRRJ/ITR; 2. Professora da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro/Instituto Três Rios.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O maciço do Alto Chapéu foi cartografado como um corpo ígneo, localizado na região próxima aos municípios de Castelo e Muniz Freire, sul do Espírito Santo, de formato aproximadamente elipsoidal com seu eixo maior orientado segundo a direção NW-SE, contrastando com a direção NE-SW dos outros plutons situados nas proximidades (Machado Filho *et al*, 1983; Silva, 1983). Pedrosa Soares *et al* (2000) interpretaram essa intrusão neoproterozóica, vizinha ao Maciço Intrusivo Santa Angélica, como pertencente ao contexto da Supersuíte G5 (pós-colisional) do Orógeno Araçuai. A pesquisa consistiu em uma análise detalhada de imagens de catodoluminescência em grãos de zircão comparadas com os resultados geocronológicos U-Pb obtidos na Universidade de São Paulo pelo método LA-ICP-MS visando verificar seu contexto no cenário geotectônico regional. Essa análise permitiu a individualização de três populações dos grãos de zircão, típicos de rochas ígneas, com diferentes histórias de cristalização. A primeira população revelou grãos euédricos, prismáticos biterminados com núcleos luminescentes, bordas metamíticas e crescimento oscilatório bimodal. Esses grãos de zircão apresentaram idades concordantes de $531,5 \pm 3,6\text{Ma}$ e foram interpretados como a idade de cristalização do Maciço Alto Chapéu, correlacionada com o evento orogênico pós-colisional da Faixa Araçuai. Em muitos grãos, foram observados o crescimento zonado interrompido por descontinuidade textural ao longo da qual o zonamento original foi reabsorvido e sucedido por novo crescimento oscilatório refletindo períodos de insaturação de Zr no magma, devido ao fenômeno de mistura magmática. A segunda população revelou grãos subédricos, luminescentes com bordas arredondadas, ora com padrão de crescimento caótico, ora crescimento oscilatório. Esses grãos de zircão apresentaram idades concordantes de $666,1 \pm 9,8\text{Ma}$ e foram interpretados como idade de cristalização da rocha encaixante, o Ortognaisse Estrela, possivelmente correlacionada ao evento pré-colisional. A terceira população revelou grãos heterogêneos, sem um padrão bem definido, por serem grãos herdados. Nesta população, grãos euédricos a anédricos, alguns eram alongados, outros apresentaram formas curtas, alguns apresentaram-se luminescentes no núcleo, outros apenas nas bordas, além disso possuíam por vezes crescimento oscilatório, por vezes crescimento caótico. Esses grãos forneceram idades mais antigas do que 700Ma, tendo sido datado um grão com $958 \pm 16\text{Ma}$. A heterogeneidade de grãos e idades obtidas foi representativa da complexidade de processos que envolve a cristalização na câmara magmática.

Palavras-chave: Alto Chapéu; LA-ICP-MS; U-Pb.

Referências Bibliográficas

- MACHADO-FILHO, L., RIBEIRO, M., GONZALEZ, S. R., SCHENINI, C. A., SANTOS-NETO, A., PALMEIRAR, C., PIRES, J. L., TEIXEIRA, W., CASTRO, H. E. F. Folhas SF. 23/24, Rio de Janeiro/Vitória: Geologia, Geomorfologia, Pedologia, Vegetação e Uso Potencial da Terra/ Projeto RADAMBRASIL. Rio de Janeiro: 1983.
- PEDROSA-SOARES, A. C., WIEDEMANN-LEONARDOS, C. M. Evolution of the Araçuai Belt and its connection to the Ribeira Belt, Eastern Brazil. *Tectonic Evolution of South America*. Sociedade Brasileira de Geologia. São Paulo: 2000.
- SILVA, J. N. Programa Levantamentos Geológicos Básicos do Brasil. Folha SF-24-V-A-V. Escala 1:100000. DNPM/CPRM. Espírito Santo: Cachoeiro de Itapemirim, 1993.

**PROPOSTA DIDÁTICA ALTERNATIVA PARA O ENSINO DA TEORIA DA RELATIVIDADE
RESTRITA NA EDUCAÇÃO BÁSICA**
**Karine Gomes dos Anjos Gagno¹; Rodrigo Francisco dos Santos² & Viviane Morcelle de
Almeida³**

1. Discente do Curso de Física, DEFIS/UFRRJ; 2. CEDERJ; 3. Professora Adjunta do DEFIS/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A introdução a conceitos científicos básicos, deve ser parte da missão da escola, no contexto da formação do cidadão. O objetivo deste trabalho é demonstrar a importância do estudo de Física Moderna e Contemporânea (FMC) no Ensino Médio (EM) e como a utilização de recursos lúdicos podem auxiliar a compreensão do conteúdo por parte dos discentes da educação básica. É garantido pela Constituição Federal de 1988 e pela Lei de Diretrizes e Bases (LDB) que o aluno da educação básica deve possuir um certo domínio dos princípios científicos e tecnológicos que atuam na produção moderna. Contudo, a partir da homologação em 2017 da Base Nacional Comum Curricular (BNCC), se prevê a junção das disciplinas Física, Biologia e Química em “Ciências da Natureza e suas Tecnologias”, além de retirar a sua obrigatoriedade no EM. Como consequência amplia-se a defasagem do estudante, uma vez que o mesmo pode sair do EM sem ter aprendido qualquer conteúdo de Física, caso não opte por tal itinerário. Se o currículo de FMC para o ensino formal já é compactado, para a Educação de Jovens e Adultos (EJA) tem-se um obstáculo maior, visto que tais conteúdos nem aparecem no currículo, dependendo do estado de nossa federação. Neste trabalho focamos na Teoria da Relatividade Restrita (TRR) com objetivo de desenvolver uma alternativa lúdica de apresentar o tema, visto que dificilmente é abordado no EM. Pautado nas teorias de aprendizagem significativa e educação não bancária, foi concebido o jogo “Relativamente Divertido”. Para o desenvolvimento do jogo, realizamos uma pesquisa bibliográfica em distintos livros, a fim de analisar como estava sendo abordado o conteúdo da TRR na literatura usada no EM e superior. Além de ter sido realizada uma ampla pesquisa sobre questões históricas pertinentes. Foram construídos um tabuleiro, um dado e cartas com questões relacionadas à Física e história da Ciência relacionada, utilizando materiais de baixo custo. Realizamos aplicações do jogo com alunos da graduação em Licenciatura em Física, a fim de mapearmos como interagiam com a metodologia e formulações apresentadas através das cartas. Estes alunos fazem parte de programas como PET e PIBID em Física, tendo contato direto com estudantes do EM. Os graduandos se mostraram muito entusiasmados e afirmaram que o jogo seria uma ferramenta muito interessante para trabalhar com alunos, principalmente do EJA. A aplicação do jogo com estudantes do EM está em andamento em duas turmas de 1º ano, pois somente o cronograma do terceiro bimestre apresenta conteúdos referentes a TRR bem como modelos atuais do universo. O uso de metodologias que envolvem o lúdico tem se mostrado um ótimo recurso gerar o interesse dos alunos por conteúdos de Ciência, em especial no Ensino de Física. Os objetivos das primeiras etapas foram alcançados, visto o desenvolvimento do jogo e os resultados obtidos com estudantes dos programas de iniciação à docência da UFRRJ. Espera-se ao fim da atual etapa, analisar os resultados obtidos e que os mesmos possam refletir uma aprendizagem significativa e incentivar estudantes a ingressarem nas carreiras de Ciências Exatas.

Palavras-chave: Teoria da Relatividade Restrita; Lúdico; Ensino de Física.

Referências Bibliográficas

- FREIRE, P. Pedagogia do Oprimido. 25ª ed. Rio de Janeiro: Paz e Terra, 1998.
MOREIRA, M.A. e MASINI, E.A.F.S. Aprendizagem significativa de David Ausubel. 2ª ed. Editora São Paulo: Centauro, 2006.
STACHEL, J. O Ano miraculoso de Einstein: cinco artigos que mudaram a face da física; organização e introdução de John Stachel; assistência de Trevor Lipscombe, Alice Calaprice e Sam Elworthy; apresentação de Roger Penrose; tradução de Alexandre Carlos Tort. –2ª ed. Rio de Janeiro: Editora UFRJ, 2005.

CÁLCULO DE COEFICIENTES DE VELOCIDADE VARIACIONAIS PARA AS DISSOCIAÇÕES UNIMOLECULARES DE POLIOXI METILENO DIMETIL ÉTERES.**Rafaela Romão de Sá¹; Mateus Costa e Silva Bichels de Oliveira²; Rodrigo Rangel Vasquez Castro³ & Glauco Favilla Bauerfeldt⁴**

1. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 3. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/IT/UFRRJ; 4. Professor do DQF/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A previsão de coeficientes de velocidade em ampla faixa de temperaturas para as reações de dissociação unimolecular, demonstradas ser de grande importância na iniciação de diversos mecanismos de combustão, geralmente mostra-se uma tarefa difícil, uma vez que as ferramentas computacionais disponíveis são escassas. Entre tais mecanismos de combustão, destacam-se os de compostos da classe dos polioximetileno dimetil éteres (POMDME), que têm se mostrado eficiente alternativa aos combustíveis fósseis, com menor liberação de resíduos (BURGER *et al.*, 2010). Assim, neste trabalho, propõe-se: (1) a extensão do código computacional *kcvt* para a previsão de coeficientes de velocidade de dissociações unimoleculares e (2) a avaliação da cinética de dissociações primárias e secundárias dos POMDME ($n = 2$). As geometrias das espécies envolvidas na combustão primária e secundária dos compostos da classe dos POMDME ($n = 2$) foram otimizadas utilizando o pacote ORCA (NEESE, 2012) em nível M06-2X/aug-cc-pVTZ. Caminhos de reação de dissociação foram calculados considerando a ação de um potencial de Morse modificado e coeficientes de velocidade variacionais canônicos foram obtidos através do código computacional *kcvt*, cuja extensão foi desenvolvida neste trabalho na linguagem FORTRAN. Considerando-se as reações unimoleculares de dissociação primária e secundária dos POMDME, $n = 2$, destacam-se as sete reações a seguir, por apresentarem menor barreira de energia: (R. 1) $\text{CH}_3\text{O}(\text{CH}_2\text{O})_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2\text{O} + \text{CH}_3$; (R. 2) $\text{CH}_3\text{O}(\text{CH}_2\text{O})_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2 + \text{CH}_3\text{O}$; (R. 3) $\text{CH}_3\text{O}(\text{CH}_2\text{O})_2\text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O} + \text{CH}_3\text{OCH}_2$; (R. 4) $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{CO}$; (R. 5) $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{CO}$; (R. 6) $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2\text{CO}$; (R. 7) $\text{CH}_3\text{OCH}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{CO}$. As barreiras de energia para as reações R. 1 – 7 são, respectivamente, 81,29, 87,66, 86,21, 15,46, 14,95, 16,40 e 10,54 kcal mol⁻¹. Os coeficientes de velocidade variacionais canônicos previstos na faixa de temperatura de 500 a 3000 K são apresentados, para cada uma das sete reações, pelas equações de Arrhenius a seguir, utilizando-se o fator pré-exponencial, *A*, e os coeficientes de velocidade, *k*, em s⁻¹ e a energia de ativação, *E_a*, em kcal mol⁻¹: $k_1 = 5,92 \times 10^{16} \times e^{(-84,88/RT)}$; $k_2 = 3,54 \times 10^{17} \times e^{(-88,38/RT)}$; $k_3 = 1,10 \times 10^{18} \times e^{(-94,34/RT)}$; $k_4 = 2,9 \times 10^{14} \times e^{(-12,75/RT)}$; $k_5 = 2,02 \times 10^{14} \times e^{(-10,05/RT)}$; $k_6 = 1,84 \times 10^{14} \times e^{(-8,48/RT)}$; $k_7 = 4,84 \times 10^{13} \times e^{(-4,24/RT)}$. Comparações com a literatura, quando possíveis, sugerem excelente acordo entre os resultados previstos e os experimentais. A dependência destes coeficientes de velocidade com a pressão será também discutida neste trabalho. É possível concluir que o método proposto se mostra eficiente, rápido e de baixa demanda computacional, para a previsão dos coeficientes de velocidade de reações de dissociação. Em relação ao modelo de combustão dos POMDME, as reações que, possivelmente, apresentam maior contribuição para o modelo cinético de combustão dos POMDME, $n = 2$, são as de formação do formaldeído.

Palavras-chave: Polioximetileno dimetil éteres; Dissociações unimoleculares; Coeficientes de velocidade variacionais.

Referências Bibliográficas

BURGUER, J.; SIEGERT, M.; STRÖFER, E; HASSE, H. *Fuel* 89, 3315-3319, 2010.

NEESE, F. "The ORCA program system". *Wiley interdisciplinary Reviews - Computational Molecular Science*, vol. 2, 73–78, 2012.

CARACTERIZAÇÃO GEOLÓGICO-ESTRUTURAL DA MICROBACIA DO CÓRREGO INGÁ
Isabel Sant' Ana Rocha¹ & Patrícia Anselmo Duffles Teixeira²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Gestão Ambiental, UFRRJ/ITR; 2. Professora da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro/Instituto Três Rios.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A Microbacia Hidrográfica do córrego Ingá, no distrito de Andrade Costa, município de Vassouras, Rio de Janeiro, foi caracterizada como pertencente à Região Hidrográfica III-Médio Paraíba do Sul do Estado do Rio de Janeiro, com 2,17 km² de área (Dinali & Ribeiro, 2015; INEA, 2013) e canais fluviais até 3^o ordem. Foram observadas que muitas residências em Andrade Costa praticavam lançamento de seus efluentes diretamente no córrego ou na rede pluvial. A ONG Vale Verdejante já promoveu ações de educação ambiental na região. Geologicamente, a área de estudo foi inserida na Zona de Cisalhamento Além Paraíba, onde Giraldo et al. (2019) observaram afloramentos de milonitos de forte orientação vertical a subvertical com direção NE-SW. O objetivo deste trabalho foi caracterizar a geologia estrutural da Microbacia Hidrográfica do córrego Ingá para somar-se ao esforço de recuperação ambiental permitindo a elaboração de diretrizes para a gestão integrada de recursos hídricos subterrâneos e de superfície da área de estudo. A pesquisa se iniciou a partir de levantamentos bibliográficos sobre o histórico da área e análise do mapa topográfico do IBGE. Foram realizadas duas etapas de campo, totalizando cinco dias, com descrição de aspectos geológicos e estruturais em treze pontos dentro da área da microbacia, com adensamento de pontos na área onde localiza-se a Associação Civil Vale Verdejante, acompanhados de coleta de amostras e registro fotográfico. A descrição constou a litologia, medida das foliações, fraturas e observações gerais de cada um dos treze pontos de afloramento. A montante da Microbacia Hidrográfica do córrego Ingá, sul da área de mapeamento, foi descrito o afloramento de um ortognaisse milonítico leucocrático, foliação 148/75 e fraturamento 65/60, rico em K-feldspato com camadas de aproximadamente vinte centímetros de um ortognaisse milonítico mesocrático. Na maior parte da microbacia estudada, áreas de terrenos colinosos, havia o paragnaisse milonítico marcado por foliações 125/90 orientadas por minerais félsicos (quartzo feldspáticos) e minerais máficos (biotitas), e fraturas 74/90. No alto da colina do Vale Verdejante, ponto culminante da área da Associação Civil com 415 metros de altitude havia o afloramento de rochas calcissilicáticas que constaram foliações 100/85 e fraturas 70/70. As drenagens de 1^a e 2^a ordem foram observadas encaixadas de forma concordante com os planos de fraturamento (trend 70/70; 65/70), enquanto as drenagens de 3^a ordem concordam com os planos da foliação milonítica. A caracterização geológico-estrutural, portanto, permitiu compreender que os aspectos estruturais da região concordavam com as drenagens locais.

Palavras-chave: Caracterização geológico-estrutural; microbacia do Ingá; Andrade Costa.

Referências Bibliográficas

DINALI, Y. T., RIBEIRO, G.J.G. Caracterização Ambiental do Maciço do Alto da Pedra. Relatório de trabalho de campo para o projeto Cadê a Água de Andrade Costa. Rio de Janeiro: Andrade Costa, 2015.
GIRALDO, S.J., TROUW, R.A.J., DUFFLES, P., COSTA, R.V., MEIJA, M.I., MARIMON, R.S. Structural analysis combined with new geothermo barometric and geochronological results of the Além Paraíba shear zone, between Três Rios and Bananal, Ribeira Orogen, SE Brazil, Journal of South American Earth Sciences v. 90. Rio de Janeiro: 2019.
INEA. Regiões Hidrográficas do Estado do Rio de Janeiro. SMA. Governo do Estado do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro: 2013.

INTERFACE GRÁFICA PARA PROVADOR DE TEOREMAS DA LÓGICA LINEAR QUE REPRESENTAM MODELOS EM REDE DE PETRIJosé Lucas Alves Gomes¹ & Lígia Maria Soares Passos²

1. Bolsista de Iniciação Científica da Faperj, Discente do Curso de Ciência da Computação, IM/UFRRJ;
2. Professora do DCC/IM/UFRRJ.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra**RESUMO**

As redes de Petri (PETRI, 1962) são um modelo formal, matemático, para modelagem e análise de sistemas discretos. De acordo com Murata (1989), as redes de Petri clássicas são grafos bipartidos direcionados, nas quais os nós são divididos em dois grupos: lugares e transições, com arcos direcionados entre eles, com a peculiaridade de que um arco não pode conectar nós do mesmo tipo (lugares com lugares e transições com transições). Os lugares são representados por forma de círculo e as transições por retângulos (ou barras). A partir de recursos iniciais, que representam artifícios variados para cada sistema, cada transição transfere recursos de acordo com as regras definidas na rede de Petri, pelo sarcos, como já dito anteriormente, cada recurso pode ser designado para diversos elementos, de acordo com as preferências e a fim de facilitar a representação do sistema. Uma das funcionalidades das redes de Petri na análise de sistemas é a verificação de deadlocks, nos quais os recursos se encontram “presos” e não mudam de lugar mesmo com as transições disponíveis. A Lógica Linear (GIRARD, 1987) é um tipo de Lógica onde as proposições são recursos, representados por átomos, que podem ser produzidos ou consumidos, logo, a lógica linear não se limita apenas a sentenças verdadeiras ou falsas, ela também manipula recursos. O objetivo do trabalho consiste na construção de árvores de prova através da Lógica Linear (no contexto das redes de Petri, apenas os conectivos time se implicação linear, que representam disponibilidade simultânea de recursos e transições, respectivamente, são usados), utilizando redes de Petri para extração dos sequentes de um dado sistema, aplicando a Lógica Linear para a avaliação dos sequentes. Um trabalho anterior consistiu de confeccionar um provador de teoremas que gera uma árvore de prova para um sequente da Lógica Linear que representa um modelo em rede de Petri. O trabalho atual, visando estender a utilidade do anterior, consiste em uma interface gráfica para a utilização facilitada de usuários do provador, além da criação de uma página web, na qual pode ser realizado o cálculo da árvore de prova, da mesma forma que o programa gráfico, com a mesma finalidade de aumentar a qualidade de interações humano-computador. Ambas as ferramentas consistem de uma área para que usuários informem o sequente desejado para fins do cálculo da árvore de prova, logo em seguida, uma mensagem é gerada com a árvore calculada (ou uma mensagem dizendo que o cálculo da árvore não é possível, em caso de um sequente inválido). A ferramenta permite o cálculo de datas de produção e consumo dos átomos em uma árvore de prova. As datas geradas têm valores simbólicos e possuem diversas aplicações em, por exemplo, modelos de redes de Petri t-temporais, onde o tempo é um fator determinante em cada transição da rede. Como trabalhos futuros, busca-se ampliar a funcionalidades da ferramenta de cálculo de árvores de prova da Lógica Linear, assim como a hospedagem da página web produzida.

Palavras-chave: rede de Petri; Lógica Linear; provador de teoremas.**Referências Bibliográficas**

- GIRARD, J.-Y. Linear logic. Theoretical Computer Science, Elsevier Science Publishers Ltd., Essex, UK, v. 50, n. 1, p. 1–102, 1987. ISSN 0304-3975.
- MURATA, T. Petri nets: Properties, analysis and applications. Proceedings of the IEEE, v. 77, n. 4, p. 541–580, 1989.
- PETRI, C. A. Kommunikation mit Automaten. Tese (Doutorado) — Institut für instrumentelle Mathematik, Bonn, Germany, 1962

AVALIANDO A DETECÇÃO E O TRATAMENTO DE FLASH CROWDS UTILIZANDO O SIMGRID**Caio César Alves Sampaio¹; Vitor Pinheiro David² & Ubiratam Carvalho de Paula Junior³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Ciência da Computação, DCC/UFRRJ; 2. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Ciência da Computação, DCC/UFRRJ; 3. Professor do DCC/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A computação em nuvem é um paradigma de computação altamente escalável onde os recursos são entregues, via Internet, aos usuários sob demanda, com o modelo *pay-as-you-go* (pague pelo uso), que não exige uma infraestrutura computacional própria. Existem várias áreas que podem se beneficiar da computação em nuvem e, em especial uma está ganhando muita atenção: o tratamento de flash crowds. Eventos de flash crowd acontecem geralmente quando os servidores são incapazes de lidar com o volume de requisições para um conteúdo específico (ou um conjunto de conteúdos), fazendo com que algumas destas requisições sejam atendidas com uma baixa qualidade de serviço (QoS) e alta latência, ou, até mesmo, sejam recusadas. Atualmente, com especial ajuda das redes sociais, esse tipo de situação se torna cada vez mais frequente, pois é muito fácil que um determinado conteúdo tenha sua popularidade aumentada, tornando-se um viral rapidamente. Para o tratamento de eventos de flash crowd em aplicações Web, as nuvens podem oferecer computação elástica e capacidade de armazenamento durante esses eventos, a fim de atender todas as requisições. No entanto, é importante que os eventos de flash crowd sejam rapidamente detectados e que a quantidade de recursos a serem instanciados durante a flash crowd seja corretamente estimada. Uma sub ou super estimativa poderia reduzir o acesso ao conteúdo ou produzir altos custos financeiros, respectivamente. Várias soluções para este problema já foram estudadas por diversos pesquisadores. Na tese do professor orientador, foi apresentado um mecanismo de detecção de flash crowd. Além disso, o tratamento destes eventos foi modelado matematicamente e uma heurística também foi proposta. O mecanismo de detecção e a heurística foram avaliados teoricamente e em pequenos cenários executados na nuvem da Amazon EC2. Devido ao alto custo monetário para avaliar estas soluções em ambientes reais, neste artigo é apresentada uma proposta de simulação para este problema utilizando o simulador SimGrid. Desta forma, pode-se avaliar a qualidade das soluções em cenários maiores e que representam situações reais de flash crowds. Os testes iniciais foram satisfatórios e promissores, indicando que os resultados da simulação são equivalentes às execuções nas nuvens. Futuramente, pretende-se realizar mais testes, com cenários maiores.

Palavras-chave: Flash Crowd; Computação em Nuvem; Simulação.

Referências Bibliográficas

- DE PAULA, U. (2015). Detecção e Tratamento de Eventos de Flash Crowd em Nuvens Computacionais. PhD thesis, Universidade Federal Fluminense - Instituto de Computação.
- DE PAULA, U., DRUMMOND, L., DE OLIVEIRA, D., FROTA, Y., AND BARBOSA, V. C. (2015). Handling flash crowd events to improve the performance of web applications. In Proceedings of the 30th Annual ACM Symposium on Applied Computing, SAC '15, pages769– 774, New York, NY, USA. ACM.
- YOSHIDA, N. Dynamic CDN Against Flash Crowds. In Content Delivery Networks, R. Buyya, M. Pathan, and A. Vakali, Eds., vol. 9 of Lecture Notes Electrical Engineering. Springer Berlin Heidelberg, 2008, p. 275296.

HISTÓRIA DA FÍSICA E A APRENDIZAGEM DE FÍSICA NUCLEAR**Érico Antônio Mata Castro¹; Gabriel Abraão Freitas Lopes² & Viviane Morcelle Almeida³**

1. Bolsista Pibic. Discente do Curso de Licenciatura em Física; 2. Discente do Curso de Licenciatura em Física; 3. Professora do DEFIS/ICE/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A ciência está em constante evolução a milhares de anos, com dois aspectos diferentes, um de facilitar a vida humana e outro de estabelecer soberania entre nações. Tomemos como exemplo o descobrimento da roda na idade antiga, através desse evento foi possível obter melhorias no transporte de mercadorias, aumento na velocidade de viagem, agilidade nas construções, consequentemente, uma aceleração de produção, então ciência é sinônimo de poder, e cada descoberta científica traz consequências sociais e econômicas. Estudar a história da ciência não está ligado somente a entender como as descobertas foram feitas, é fundamental para entender que a cada descoberta um novo arranjo é feito no globo, em questões econômicas e sociais. Quando tratamos de física nuclear, estamos nos referindo a tempos mais "modernos" pois é preciso de ferramentas um pouco mais sofisticadas para seu estudo, mas sua descoberta foi fundamental para uma nova era científica, que tem seu início com a descoberta da radioatividade por Marie Curie apresentada em sua tese de doutorado "Recherches sur les Substances Radioactives". Também podemos destacar características comuns a grandes físicos, segundo Emilio Segrè: capacidade de trabalho (saber analisar dados e ter conhecimento), perseverança, otimismo e imaginação científica, habilidades que devemos cultivar em nossas carreiras. Também podemos perceber que a Física evoluiu com a contribuição de cada um, onde o momento histórico é o mais importante para a descoberta e não o indivíduo, tanto é que algumas descobertas são feitas quase que simultaneamente em lugares diferentes do mundo, como o caso da descoberta do modelo de camadas e que descreve o núcleo atômico. Dois dos pontos mais interessantes sobre a imaginação científica é que ela faz com que encontremos novas interpretações que nos permitem explicar os resultados que já descobrimos, mas desconhecemos sua natureza e manter condizente com aqueles que já conhecemos, chamamos a este evento de quebra de paradigma. Também é a imaginação científica a responsável por permitir que exploremos a natureza criando: novos equipamentos, estratégias de exploração etc. Ressaltamos que a Física Nuclear foi um dos campos que mais evoluiu no século XX, sendo representada por mais de uma dezena de prêmios Nobel em Física e até 2017, a única área da Física em que mulheres ganharam o referido prêmio. Contextualizar o ensino de Física Nuclear através da História, permite uma melhor compreensão por parte dos alunos de como se dão as relações de conhecimento, étnicas, de gênero e disputa de poder nos laboratórios. Desmistificando o estereótipo do cientista gênio e além disso, permitindo também compreender conceitos físicos mais complexos através de descobertas e experimentos desenvolvidos. Este trabalho permitiu explicar fenômenos como Radioatividade, Espalhamento Elástico, Fissão e Fusão através da trajetória da evolução deste campo, o que incluiu a desinvisibilização de mulheres cientistas como Marie Curie, Lise Meitner, Irene Curie, Maria Göppert-Mayer, Ida Nodack. De forma, que concluímos ser este um excelente método auxiliar para estudantes interessados em entender conceitos de Física Nuclear e que pretendem fazer iniciação científica ainda nos primeiros períodos da graduação.

Palavras-chave: História da Física, Física Nuclear, Pesquisa e Ensino

Referências Bibliográficas

- SEGRE, E. Dos Raios-X aos Quarks: Físicos Modernos e suas descobertas. Trad. de Wamberto. W. Ferreira. Brasília. Editora Universidade de Brasília, 1987.
- TENNENBAUM, J. Energia Nuclear: Uma Tecnologia Feminina. Trad. de Gildo Magalhães. Rio de Janeiro. Editora MS1a, 2000. BERTULANI, Carlos. Introdução à Física Nuclear. Rio de Janeiro. Editora Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1999

DETERMINAÇÃO IODOMÉTRICA DE GLICEROL EM AMOSTRAS DE BIODIESEIS ENVOLVENDO REAÇÃO COM PERIODATO E MASCARAMENTO COM MOLIBDATO
Lucas Carvalho Ferreira Serrano¹; Luana de Oliveira Santos²; Cristina Maria Barra³ & José Geraldo Rocha Junior³

1. Discente do Curso de Engenharia de Alimentos, IT/DTA/UFRRJ; 2. Discente do PPGQ/UFRRJ; 3. Professor do IQ/DQA/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O biodiesel vem sendo apresentado como uma matriz energética limpa e renovável obtido através da reação de transesterificação entre óleos vegetais, gorduras de origem animal, óleos ou gorduras residuais ou óleos de microalgas com álcoois em presença de um catalisador homogêneo, heterogêneo ou enzimático. 1O glicerol gerado nesta reação, juntamente com o biodiesel, é o principal contaminante orgânico encontrado no combustível. Em níveis acima dos limites preconizados pela legislação, este componente pode provocar a formação de depósitos e incrustações bem como o entupimento de bicos injetores em motores. 2De acordo com a resolução nº 45/2014 instituída pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), é permitido no máximo 0,02% m/m de glicerol livre (GL) presente em qualquer matriz energética. No presente trabalho, objetivou-se desenvolver uma metodologia alternativa rápida e eficiente para a determinação de GL em amostras de biodiesel via titulação como uma técnica analítica de baixo custo, proposta esta que se diferencia dos métodos referendados na literatura através das normas ASTM D6584, EN 14105, EN 14106 e ABNT NBR 15908 regulamentadas pela ANP, que é baseada na cromatografia gasosa (CG). 3O método proposto se baseou na oxidação do glicerol pelo periodato, produzindo o íon iodato. O excesso de periodato foi mascarado pela adição de íon molibdato, levando a formação de um complexo estável em pH 3,0 ($[I(MoO_4)_5]^-$). Posteriormente, foi adicionado solução de KI para reagir com o iodato, produzindo triiodeto, que é titulado por uma solução padrão de tiosulfato, empregando amido como indicador. O molibdato impede a reação do excesso do íon periodato com o iodeto adicionado. As matrizes de biodiesel analisadas para a quantificação do GL foram de soja e palma. A extração do glicerol da matriz foi realizada com água destilada e sob agitação vigorosa, na presença de n-heptano para separar os metil-ésteres (biodiesel). Todas as análises foram feitas em triplicata. O branco empregado foi a água obtida após o procedimento de extração, sem a adição de biodiesel. Os teores de GL obtidos foram 0,0152 ($\pm 0,0007$) e 0,018 ($\pm 0,004$) % m/m nos biodieseis de soja e de palma, respectivamente, estando este parâmetro dentro do limite preconizado pela ANP. As amostras de biodiesel foram fortificadas com padrões de glicerol em três níveis de concentração, correspondendo a um incremento nos valores das % m/m equivalente a 0,030, 0,060 e 0,12% m/m. Os percentuais de recuperação encontrados foram satisfatórios. Para o biodiesel de soja, estes valores foram, respectivamente: 112 (± 5)%, 97 (± 7)% e 94,3 ($\pm 0,5$)%; e para palma: 111 (± 9)%, 103 (± 2)% e 95 (± 3)%.

Palavras-chave: titrimetria; iodometria; amido; biocombustível.

Referências Bibliográficas

CREMONEZ, P.A.; FEROLDI, M.; NADALETI, W.C.; DE ROSSI, E.; FEIDEN, A.; DE CAMARGO, P.M.; CREMONEZ, F.E.; KLAJN, F.F. Biodiesel production in Brazil: current scenario and perspectives. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 42, p. 415-428, 2015. LÔBO, I.P.; FERREIRA, S.L.C.; DA CRUZ, R.S. Biodiesel: quality parameters and analytical methods. *Biodiesel: parâmetros de qualidade e métodos analíticos. Química Nova*, v. 32, p. 1596-1608, 2009. 3. AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCMBUSTÍVEIS (Brasil). RESOLUÇÃO nº 45, de 25 de agosto de 2014.

MÉTODO TITRIMÉTRICO ALTERNATIVO PARA A DETERMINAÇÃO DE GLICEROL
Pâmela Da Silva Honório Marinho¹, Luana de Oliveira Santos², Sheisi Fonseca Leite da Silva
Rocha³, Cristina Maria Barra⁴ & José Geraldo Rocha Junior⁴

1. Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Mestranda em Química, IQ/PPGQ/UFRRJ; 3. Docente da FAT/DQA/UERJ; 4. Docente do IQ/DQA/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O glicerol é o produto da reação de saponificação de ésteres de ácidos graxos presentes em óleos, azeites ou sebo com hidróxido de sódio ou de potássio¹. O mesmo na sua forma pura, pode ser aplicado na indústria de cosméticos, farmacêutica, indústria de alimentos, fabricação de detergentes, resinas e aditivos, entre outros, é de suma importância que novas técnicas, mais rápidas e de baixo custo sejam desenvolvidas para que seja possível quantificá-lo; e, assim, garantir a qualidade dos produtos que empregam esta substância.¹ Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia analítica para a quantificação do glicerol em diferentes matrizes, considerando a sua extração para a fase aquosa, baseada na titulação iodométrica. Os métodos titulométricos recomendados na literatura para a determinação do glicerol envolvem a sua oxidação com o periodato, seguida da titulação do periodato remanescente ou da titulação do ácido fórmico produzido [NORMA AOAC 942.22GASTM D7637]. Contudo, estes métodos envolvem diversas etapas, requerem longo tempo de análise, além do uso de ácido arsenioso, altamente tóxico.^{2,3} A metodologia proposta neste trabalho se baseia na formação do iodato produzido da reação do glicerol com o periodato e complexação do periodato remanescente com o íon molibdato. Soluções padrão de glicerol de concentração 10,0, 20,0, 30,0, 40,0 e 50,0 mg L⁻¹ foram empregadas para avaliação da exatidão do método. Uma alíquota de 1,00mL destas soluções foi reagida com solução de NaIO₄ 5,0 mmolL⁻¹ por 3 minutos, sob agitação vigorosa. Em seguida, o periodato excedente foi complexado com molibdato em pH 3,0 e, por último, foi realizada a reação de Dushman, no qual iodato reage com o iodeto para gerar o tri-iodeto (castanho), que é titulado com uma solução padrão de Na₂S₂O₃, na presença de indicador amido. As análises dos padrões foram realizadas em 6 réplicas e a dos brancos (água destilada) em 10 réplicas. Obteve-se os respectivos teores de glicerol nos padrões, em mgL⁻¹: 10,1 (± 0,8); 20,0 (± 0,3); 31 (± 3); 39,9 (± 0,9); 50,3 (± 1,3). Os resultados obtidos não diferiram significativamente dos valores dos padrões, ao nível de confiança de 95%. Os desvios padrões relativamente altos podem ser explicados pela baixa concentração do analito e do volume de padrão empregado, o que requereram baixos volumes de titulante. A análise dos brancos juntamente com a variação da quantidade de titulante gasto nas análises destes padrões permitiram a determinação dos limites de detecção (LD) e quantificação (LQ) do método sendo, respectivamente, 1,0mgL⁻¹ e 3,5mgL⁻¹.

Palavras-chave: periodato; molibdato; glicerina; iodometria.

Referências Bibliográficas

- DELGROSSI, Talita. Agência Embrapa de Informação Tecnológica. Disponível em: <<http://www.agencia.cnptia.embrapa.br/gestor/agroenergia/arvore/CONT000fj1mqgo602wyiv802hvm3j818huet.html>>. Acesso em: 06 de agosto de 2019.
- Official Methods of Analysis of AOAC International, 15th Edition Online Glycerol: Determination (AOAC 942.22G). 1990.
- ASTM-American Society for Testing Materials. Determination of Glycerin Assay by Titration (Sodium Meta Periodate) (ASTMD7637). In annual book of ASTM, 2015.

SÍNTESE DE DERIVADOS IMIDAZÓLICOS DA β -LAPACHONA E DA ISATINA, COM POTENCIAIS ATIVIDADES ANTICHAGÁSICAS**Gabriella Calheiros Magalhães¹; Gabriel Freitas do Rio² & Aurélio Baird Buarque Ferreira³.**

1. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Licenciatura em Química, IQ/UFRRJ; 2. Discente de Doutorado em Química, IQ/UFRRJ; 3. Professor do DQO/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O imidazol (**1** – Figura 1) é um heterociclo aromático ao qual seus compostos derivam da fórmula $C_3H_4N_2$, como um 1-3-diazol e está presente em vários produtos naturais, destacadamente o aminoácido *histidina*, além da *biotina* (vitamina B7) e muitos alcalóides. Imidazóis multi substituídos constituem uma classe importante de compostos farmacêuticos: exibem um amplo espectro de atividades biológicas, tais como analgésica, anticonvulsivante, anti-inflamatória, antiparasitária, antifúngica, antidepressiva, antituberculose, antialérgica, antibacteriana, antitumoral e antiviral. A síntese de imidazóis a partir de isatina (**2** - Figura 1) ocorre através de uma reação de condensação entre uma α -acetoamida, um aldeído e amônia ou amina (ou sal de amônio) (BIRADAR et. al, 2008).

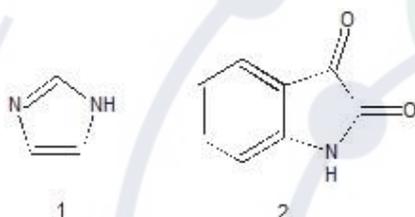


Figura 1

Com base em trabalhos anteriores, foi descrito que imidazóis derivados da β -lapachona apresentam atividades biológicas contra o *Tripanossoma cruzi*, protozoário hemoflagelado, agente etiológico da doença de Chagas (PARDEE; LI; LI, 2002). Comercialmente, apenas dois fármacos estão disponíveis para o tratamento desta doença: Nifurtimox (na verdade descontinuado) e o Benzonidazol, derivado nitroimidazólico. Infelizmente, eles não são consistentemente eficazes e têm sérios efeitos colaterais que evidenciam a necessidade de desenvolvimento de novas soluções quimioterápicas, mais eficazes e seletivas (RASSI JR.; RASSI; ANTONIO MARIN-NETO, 2010). A isatina apresenta duas carbonilas vizinhas em situação análoga às carbonilas presentes na estrutura da β -lapachona. Na isatina essas carbonilas são de naturezas distintas: uma carbonila cetônica e outra amídica. Portanto pode-se considerar a possibilidade de relações entre as reatividades destes dois compostos, em particular quanto à formação de imidazóis e derivados. Neste trabalho foram realizadas sínteses de imidazóis através de diversas rotas sintéticas, nas quais foram utilizados aquecimento convencional ou microondas, como fonte de energia, além de variar os solventes utilizados, tempo de reação, proporções dos reagentes, bases e catalisadores utilizados durante as reações. Até o presente momento, a reação que obteve o melhor resultado foi aquela realizada com aquecimento convencional, sob agitação constante. A reação foi conduzida por uma hora, sob refluxo, utilizando Isatinas e aldeídos selecionados, além de acetato de amônio e ácido acético, sendo essa reação isolada a partir do ajuste de pH e filtração. As metodologias de análise utilizadas foram a espectroscopia de massas de alta resolução e o infravermelho, confirmando a formação dos imidazóis. Contudo, métodos de purificação da reação ainda estão sendo aprimorado, por este fator, os derivados serão enviados posteriormente para avaliação biológica.

Palavras-chave: Imidazol; Isatina; *Tripanossoma cruzi*; doença de Chagas.

Referências Bibliográficas

1. BIRADAR, J. S., MUGALI, P. S., SOMAPPA, S. B., RAJESAB, P. *One Pot Syntesis of Substituted Imidazoles Contains Indole and their Antimicrobial Activities*, Organic Chemistry, v.4, p. 408 – 411, 2008.
2. PARDEE, A.B.; LI, Z.Y.; LI, C.J. Cancer Therapy with β -Lapachone. *Current Cancer Drug Targets*, v. 2, p. 227-242, 2002.].
3. RASSI JR., A., RASSI, A., MARIN-NETO, J.A., Chagas disease. *Lancet*, v. 17, p. 1388–1402, 2010.

VALIDAÇÃO DE MODELO FÍSICO DA PAISAGEM DO PARQUE NACIONAL DO ITATIAIA PELOS GESTORES PÚBLICOS**Érika Medina de Medeiros¹; Mateus Ribeiro Rodriguez² & Gustavo Mota de Sousa³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geografia, DGEO/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Geografia, DGEO/UFRRJ; 3. Professor do IA/DGEO/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O estudo das relações do homem com a paisagem é uma das várias linhas de pensamento da Geografia (Christofolletti, 2004) e uma das mais antigas também, mas não menos importante pois a mesma consegue relacionar os atores físicos e os antrópicos, formadores do espaço geográfico. Visto isto, a construção de modelos físicos da paisagem, conhecidos como maquetes, se torna um dos instrumentos mais adequados para a representação desses atores físicos e de vossa relação com os atores antrópicos, evidenciando assim as modificações sofridas pela paisagem como é o exemplo dos incêndios florestais. Nesta pesquisa, o Parque Nacional do Itatiaia (PNI) foi escolhido como objeto de estudo por ser um dos parques mais ameaçados pelos incêndios florestais, devido a este fato, o objetivo desta pesquisa foi a construção de uma maquete do PNI capaz de possibilitar a identificação, demarcação e espacialização 3D de pontos de queimadas comprovados dentro e fora da área do PNI, sendo possível apontar, com o auxílio de outros dados geoambientais, as causas de tais incêndios e o método de validação do objeto utilizado foi a apresentação e aplicação de questionário para um grupo de gestores do PNI o que produziu, de antemão, resultados positivos. Para a concretização da pesquisa fez-se necessária a definição de uma metodologia dividida em três etapas. A Primeira Etapa se restringiu a aquisição de dados, manipulação e criação do mapa em software livre QGIS. Tal etapa exigiu a busca por dados confiáveis, os quais foram encontrados no Banco de Dados de Queimadas elaborado pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) entre o período de 1999 a 2016, como também a aquisição do polígono que demarca o limite do PNI e seu entorno (buffer 5km) (Tomzhiski, et al., 2012), desta forma, pode-se construir um mapa do PNI com todos os focos de incêndios ocorridos no período pesquisado. Já a Segunda Etapa caracterizou-se pela aquisição de dados altimétricos por meio do Projeto TOPODATA (Valeriano, 2005) onde pode-se obter as curvas de nível que demarcaram a altimetria da região e que possibilitaram a construção do modelo físico da paisagem. E, por fim, a terceira etapa se deu na confecção de questionários a serem aplicados aos diversos gestores do Parque que, de acordo com as suas especialidades, avaliaram de diferentes formas o mesmo modelo gerando um resultado positivo no geral, validando assim a capacidade do instrumento de identificar e espacializar os focos de incêndios captados e documentados no Banco de Dados do INPE. Isto posto, foi ratificado que com o modelo físico da paisagem se torna mais facilitada a promoção da prevenção, fiscalização e educação ambiental para todos os tipos de públicos (inclusive para aqueles com algum comprometimento físico), visando o ensino do respeito a natureza para crianças e adultos visitantes do parque. Importante salientar, que tais ações são essenciais para a permanência de um dos últimos refúgios de florestas protegidas e genuinamente brasileiras existentes no país.

Palavras-chave: validação; modelo físico; paisagem; parque nacional do Itatiaia.

Referências Bibliográficas

- CHRISTOFOLETTI, A.L.H. Sistemas dinâmicos? As abordagens da Teoria do Caos e da Geometria Fractal em Geografia., 2004. In: Reflexões sobre a Geografia Física no Brasil. MENEZES, P.M.L.; FERNANDES, M.C. Roteiro de Cartografia. São Paulo: Oficina de Textos, 288 p., 2013.
- TOMZHISKI, G. W.; RIBEIRO, K. T.; FERNANDES, M. C. (2012). Análise Geoecológica dos Incêndios Florestais do parque Nacional do Itatiaia. Instituto Chico Mendes de Conservação da Biodiversidade. Parque Nacional do Itatiaia. Boletim Número 15. Ministério do Meio Ambiente. 164 p. Disponível online via: <http://www.icmbio.gov.br/parnaitatiaia/o-que-fazemos/pesquisa/boletins.html>. Acessado em 15 de abril de 2017.
- VALERIANO, M. M. Modelo digital de variáveis morfométricas com dados SRTM para o território nacional: o projeto TOPODATA. In: Anais do XII Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto, Goiânia-GO, 2005.

**ESTUDOS NO PLANEJAMENTO, SÍNTESE E AVALIAÇÃO
ANTIPARASITÁRIA DE NOVOS HÍBRIDOS PIPERINA-NITROÍMIDAZÓIS**

Afonso Santine Magalhães Mesquita-Velez (IC)¹, Douglas Chaves Alcântara (PG)², Paulo Pitasse-Santos (PG)², Débora Decoté-Ricardo (PQ)³, Marco Edilson Freire de Lima (PQ)⁴

1. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Química, IQ-UFRRJ; 2. Discentes do PPGQ-UFRRJ; 3. Professora Associada do DEMIV-IV-UFRRJ; 4. Professor Titular do IQ-DQO-UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra.

RESUMO

A doença de Chagas (tripanosomíase americana) é uma parasitose causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*. A via de transmissão vetorial tem como o inseto conhecido “barbeiro” (*Triatoma infestans*) como principal agente. Segundo dados da WHO de 2012, essa parasitose faz parte de um grupo de enfermidades denominadas doenças tropicais negligenciadas (DTN's); o arsenal terapêutico para o tratamento dos pacientes chagásicos conta com apenas dois fármacos, ambos derivados nitroheterocíclicos, o Nifurtimox e o Benzonidazol. Apesar de esses dois fármacos estarem disponíveis no mercado há mais de 50 anos, eles não apresentam total eficiência no tratamento da doença de Chagas sendo, praticamente, ineficazes na fase crônica da doença (sintomática), além de necessitar de um longo tempo de tratamento, muitas vezes sem êxito. Outro fator relevante são os severos efeitos colaterais ocasionados aos pacientes em tratamento com os fármacos disponíveis. Com isso, é grande e muito urgente a demanda pelo desenvolvimento de novos compostos com potencial para o tratamento da doença de Chagas, como também para o conjunto das DTN's, uma vez que essas infecções não recebem atenção devida da indústria farmacêutica, visto acometerem principalmente populações de baixa renda localizadas em bolsões de pobreza em países em desenvolvimento, e assim, apesar de haver grande demanda por tratamento, não há mercado. Dessa forma, esse trabalho visa contribuir para o preenchimento desta lacuna, buscando o desenvolvimento de novos fármacos com potencial atividade antiparasitária, através da estratégia de hibridização molecular. Em nosso grupo de pesquisa já foi reportado a atividade antiparasitária da amida natural piperina, extraída em ótimos rendimentos dos frutos secos da pimenta-do-reino (*Piper nigrum*). Em trabalhos mais recentes, também do nosso grupo de pesquisa, foi preparada uma série de treze novos derivados heterocíclicos a partir da homologiação de um anel 1,2,4- triazólico à estrutura da amida natural. Estes novos derivados apresentaram uma atividade antiparasitária bastante relevante quando testados contra formas epi- e amastigotas de *T. cruzi* (FRANKLIM et al., 2019). Neste trabalho, descrevemos o planejamento molecular, a síntese e a avaliação biológica dos novos híbridos que possuem como precursores a amida natural piperina e moléculas contendo anéis nitroimidazólicos, presentes na estrutura de fármacos com conhecida atividade antiparasitária, como metronidazol e benzonidazol. Os novos híbridos foram sintetizados em bons rendimentos a partir da amida natural piperina. Para os híbridos já sintetizados, procedeu-se a realização do ensaio da atividade antiparasitária, contra as formas amastigotas de *T. cruzi* (cepa Tulahuen C2C2 LacZ) (BUCKNER, et al. 1996). O benzonidazol foi usado como controle positivo para os ensaios. Os resultados obtidos foram extremamente promissores e validaram nossa estratégia de hibridização molecular.

Palavras-Chave: Trypanosoma cruzi, hibridização molecular, produtos naturais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Buckner F. S., et al. Efficient technique for screening drugs for activity against *Trypanosoma cruzi* using parasites expressing beta-galactosidase. *Antimicrob. Agents Chemother.* 40:2592-2597, 1996.
- FRANKLIM, T. N., et al. Design, synthesis, Trypanocidal activity, and studies on human albumin interaction on novel S-alkyl-1,2,4-triazoles. *J. Braz. Chem. Soc.*, vol. 00, No. 00, p. 1-17, 2019.
- WHO-World Health Organization. Research priorities for Chagas disease, human African trypanosomiasis and leishmaniasis. Technical report series, nr. 975, 2012.

PROJETO DE INTRODUÇÃO AO PENSAMENTO ALGORÍTMICO PARA ESTUDANTES DO ENSINO MÉDIO**Ramon Machado de Almeida¹; Wagner de Souza de Oliveira²; Samuel Igor dos Santos Pessoa³; Natália Chaves Lessa Schots⁴ & Lígia Maria Soares Passos⁵**

1. Bolsista da PROAES/PROPPG, Discente do Curso de Ciência da Computação, IM/UFRRJ; 2. Bolsista da PROAES/PROPPG, Discente do Curso de Ciência da Computação, IM/UFRRJ; 3. Bolsista da PROAES/PROPPG, Discente do Curso de Ciência da Computação, IM/UFRRJ; 4. Professora do DCC/IM/UFRRJ; 5. Professora do DCC/IM/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Com o advento da Tecnologia da Informação (TI), e, conseqüentemente, o crescimento do mercado de trabalho nessa área, tem surgido uma grande demanda por profissionais qualificados [1]. Entretanto, existe um problema que deve ser levado em consideração, que é a falta de profissionais na área de TI. O curso de Ciência da Computação apresenta um índice elevado de evasão [2,3], que algumas vezes ocorre pelo fato de que muitos se inscrevem sem ter conhecimento do que é estudado no curso. Com isto, o Projeto de Introdução ao Pensamento Algorítmico (PIPA) busca ensinar algoritmos para estudantes do Ensino Médio (EM) como uma forma de ensinar o que é visto em Computação, incentivando estudantes a gostarem do curso. Portanto, o objetivo do projeto é contribuir para a formação do raciocínio lógico computacional destes estudantes, apresentar o ambiente universitário e despertar o interesse de cursar o Ensino Superior, como uma forma de amenizar o problema da evasão. Para a realização do projeto, 45 alunos de Ensino Médio da rede pública foram selecionados. Foram criadas 3 turmas de 15 alunos cada, onde cada turma era composta por alunos de uma mesma série do EM. Cada turma participou de 10 aulas, cada aula com uma duração de 4 horas, totalizando 40 horas por turma. As aulas ocorreram no próprio IM/UFRRJ, pois assim os alunos puderam conhecer o câmpus e o laboratório de Ciência da Computação. Para a coleta de dados, os alunos responderam dois questionários anônimos, um na primeira aula e outro na última aula, que serviram para avaliar as expectativas, informações e conhecimentos proporcionados pelo curso. No curso foram apresentados os conceitos centrais do pensamento algorítmico, cosmológica, algoritmo e programação utilizando a Linguagem C. Além do conteúdo teórico visto em sala de aula, o curso contou com aulas práticas em laboratório que contribuíram para que o estudante conhecesse melhor o ambiente universitário, uma vez que foi utilizado o mesmo laboratório dos graduandos em Ciência da Computação. Os resultados mostram que, após participar do curso 64,3% dos estudantes tinham conhecimento do que se estudava em um curso de Ciência da Computação, índice muito maior em comparação com os dados coletados no início, onde apenas 23,8% sabiam. Com relação ao conteúdo apresentado, 80,5% não sabia o que era algoritmo e após o curso esse número diminuiu para 25%. Este trabalho também registrou que apenas 26,2% dos alunos já haviam visitado uma universidade, e após terem frequentado as aulas do projeto, 75% dos estudantes pesquisados afirmaram possuir interesse em cursar Ciência da Computação. O presente estudo foi aprovado no Comitê de Ética em Pesquisa da UFRRJ (Protocolo nº. 1.102/18). Todos os participantes assinaram o Termo de Assentimento e os seus respectivos responsáveis assinaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE), autorizando a participação do estudante neste estudo.

Palavras-chave: Educação; Tecnologia da Informação; Pensamento Algorítmico; Ensino Médio.

Referências Bibliográficas

- VIEIRA, V. Demanda cresce por profissionais de TI durante a crise. 2017. Disponível em: <<https://exame.abril.com.br/carreira/demanda-cresce-por-profissionais-de-ti-durante-a-crise/>> Acesso em: 13 nov. 2017.
- RODRIGUES, F.S. Estudo sobre a evasão no curso de Ciência da Computação da UFRGS. 2013. 87 f. TCC (Graduação) - Curso de Ciência da Computação, Instituto de Informática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2013.
- PALMEIRA, L.B.; SANTOS, M.P. Evasão no bacharelado em Ciência da Computação da Universidade de Brasília: análise e mineração de dados. 2014. 127 f. TCC (Graduação) - Curso de Ciência da Computação, Instituto de Ciências Exatas, Universidade de Brasília, Brasília, 2014.

MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL PARA A HANSENÍASE

Douglas Souza de Albuquerque¹, Nathalia Kathleen Santana Reyes², Thais Madruga de Oliveira Mendonça², Erito Marques de Souza Filho³ & Claudia Mazza Dias³

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática Aplicada e Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 2. Aluno PICV, Discente do Curso de Matemática Aplicada Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 3. Professor do DTL/IM/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A Hanseníase é uma doença infectocontagiosa causada pelo *Mycobacterium Leprae*, acometendo principalmente os nervos periféricos das pessoas doentes. A doença pode afetar praticamente todos os órgãos e sistemas em que existam macrófagos, exceto o sistema nervoso central. Ela faz parte do grupo conhecido como doenças negligenciadas, comuns nos grandes bolsões de pobreza, onde a falta de recursos médicos, saneamento básico, entre outros fatores, contribuem fortemente para a propagação de doenças infectocontagiosas. Assim, o desenvolvimento de modelos matemáticos para a doença é de grande interesse econômico e social. No entanto, os modelos matemáticos para a Hanseníase são escassos na literatura. Assim, a motivação principal para esse trabalho é o estudo de novos modelos matemáticos para a doença. Primeiramente, foi utilizado como base o modelo compartimental SIR desenvolvido por Kermack e McKendric, onde a população total é dividida em três categorias: Suscetíveis, Infectados e Recuperados. Pela característica da Hanseníase, um paciente curado não volta a ser infectado pela doença novamente, portanto o modelo SIR pode ser usado na modelagem pois representa de forma simplificada a dinâmica da doença. Depois de estudado o modelo simples, partiu-se para o estudo de uma situação considerada rara e um fenômeno por si só interessante de ser analisado, que é a chamada transmissão vertical da doença (transmissão de mãe para filho). Este novo modelo analisa a dinâmica de transmissão de gestantes para seus filhos e considera a população de gestantes suscetíveis à Hanseníase ou infectadas pela doença e seus bebês nascidos com e sem a doença. Embora não seja a forma de transmissão mais frequente da Hanseníase, ainda assim merece estudo já que não é incomum que se encontrem gestantes infectadas, que podem passar para seus filhos hematógenos que podem se espalhar pela placenta. Em ambas abordagens, se tem como resultado sistemas de equações diferenciais ordinárias, que foram solucionados por métodos numéricos como o Método de Runge-Kutta de quarta ordem. Os resultados obtidos permitem observar o comportamento dos diferentes grupos frente a diferentes cenários de simulação. Além disso, a partir de dados disponíveis publicamente e utilizando-se técnicas de inferência estatística, foram feitas estimativas para os valores de alguns dos parâmetros utilizados.

Palavras-Chave: Hanseníase, Modelagem Matemática, Epidemiologia.

Referências Bibliográficas

- BLOK, D. J., FISCHER, E. A. J., RICHARDUS, J. H.. Advances in Parasitology. Mathematical Modelling of Leprosy and Its Control, 2015. DOI: 10.1016/bs.apar.2014.12.002.
- KERMACK, W. O. & MCKENDRICK, A. G. A. Contribution to the mathematical theory of epidemics. Proc. R. Soc. Lond. A., v. 115, p. 700-721, 1927.
- RAIMUNDO, S. M., YANG, H. M., VENDITE, L. L. Dinâmica da Transmissão Vertical do HIV e a Idade Reprodutiva das Adolescentes. Tendências em Matemática Aplicada e Computacional, 3, No. 1, 173-182, 2002.

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CLORIDRATOS MESOIÔNICOS 1,3,4-TIADIAZÓLIO-2-AMINIDASIgor Resendes Barbosa¹ & Aurea Echevarria²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professora do IQ/DQO/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra**RESUMO**

Os compostos da classe 1,3,4-tiadiazólio-2-aminida tiveram sua síntese relatada pela primeira vez por Ollis e Ramsden em 1971 (Ollis & Ramsden, 1971) e pertencem à longa família dos compostos mesoiônicos. Seus precursores, os cloridratos mesoiônicos, têm sido extensivamente sintetizados e estudados por nosso grupo de pesquisa, devido, principalmente, as suas atividades biológicas promissoras, tais como suas ações antitumoral e leishmanicida demonstradas tanto *in vitro* quanto *in vivo* (Gozzi *et al.*, 2015; Rodrigues *et al.*, 2009). Assim, neste trabalho, três cloridratos mesoiônicos do tipo cloreto de 4-fenil-5-(X-cinamoil)-1,3,4-tiadiazólio-2-fenilamina, onde X= H (**CIM1**), F (**CIM2**) ou NO₂ (**CIM3**), foram sintetizados e caracterizados por ponto de fusão e infravermelho (ATR). Para a síntese desses compostos, alguns intermediários foram anteriormente preparados. Um desses intermediários, a 1,4-difeniltiosemicarbazida (**T1**), foi facilmente preparada a partir do isotiocianato de fenila e da fenil-hidrazina, em tolueno anidro como solvente, com rendimento de **95%**. **T1** foi purificada por recristalização em etanol, rendendo cristais incolores de ponto de fusão de 175-176°C. Os ácidos cinâmicos foram obtidos com bons rendimentos (**76,5-91,4%**) pela condensação de Knövenagel-Hans, a partir dos benzaldeídos adequados (benzaldeído, *p*-fluorbenzaldeído ou *p*-nitrobenzaldeído) e ácido malônico, na presença de piridina como solvente. Os produtos foram formados na forma de sais solúveis os quais precipitaram sob a adição de solução aquosa de HCl, devido a formação de suas formas ácidas insolúveis. Esses ácidos foram posteriormente convertidos em seus respectivos cloretos, utilizando grande excesso de cloreto de tionila como agente halogenante e aquecimento. O excesso de cloreto de tionila foi eliminado em evaporador rotatório e os produtos imediatamente utilizados na etapa seguinte sem purificação e caracterização prévia, devido sua alta reatividade. Os cloridratos mesoiônicos foram obtidos a partir desses cloretos de ácido e o composto **T1**, em 1,4-dioxano anidro como solvente. Os produtos precipitaram na forma de cristais amarelos (**CIM1**, rendimento: 62,5%, ponto de fusão: 261-263°C; **CIM2**, rendimento: 56,1%, ponto de fusão 240-242°C) ou laranja-avermelhados (**CIM3**, rendimento: 19%, ponto de fusão: 220-243 °C) os quais foram filtrados e lavados com dioxano gelado. Os espectros de infravermelho dos sólidos confirmaram a obtenção dos sais desejados, sendo notada uma banda larga característica do grupo C=NHAr em 2662-2709 cm⁻¹ para todos os compostos. Foram, também, observadas bandas em 30493058 cm⁻¹, 1597-1609 cm⁻¹ e 1566-1571 cm⁻¹ atribuídas aos ν (C-H), ν (C=C), ν (C=N).

Palavras-chave: Mesoiônicos; cloridratos mesoiônicos; bioatividade.**Referências bibliográficas**

- Gozzi, G. J.; Pires, A. R. A.; Valdameri, G.; Rocha, M. E. M.; Martinez, G. R.; Noletto, G. R.; Acco, A.; Souza, C. E. A.; Echevarria, A.; Reis, C. M.; Di Pietro, A.; Cadena, S. M. S. C. PLOS One, v. 10, n. 6, e0130046-e0130063, 2015.
- Ollis, W. D.; Ramsden, C. A. Journal of the Chemical Society D: Chemical Communications, n. 19, p. 1222-1223, 1971.
- Rodrigues, R. F.; Charret, K. S.; da Silva, E. F.; Echevarria, A.; Amaral, V. F.; Leon, L. L.; Canto-Cavalheiro, M. M. Antimicrobial Agents and Chemotherapy, v. 53, n. 2, p. 839-842, 2009.

ANÁLISE DA DINÂMICA ESPACIAL DA COBERTURA VEGETAL NO OESTE DO ESTADO DA BAHIA**Felippe de Oliveira Lima¹; Sthefane Dias Alves²; Leandro Andrei Beser de Deus³ & Alessandra Carreiro Baptista⁴**

1. Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica, IT/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica, IT/UFRRJ; 3. Professor do DGF/IG/UERJ; 4. Professora do DE/IT/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O oeste do Estado da Bahia possui significativa importância na produção agrícola brasileira. Essa região possui 24 municípios e concentra dois terços do produto interno bruto (PIB) agropecuário da Bahia. As principais culturas agrícolas da região são a soja, algodão e milho. Apenas no ano de 2014, o oeste da Bahia exportou mais de dois milhões de toneladas de soja e seus derivados, aproximadamente 220 mil toneladas de algodão e cerca de 62 mil toneladas de milho e derivados. Nesse sentido, é de fundamental importância o conhecimento futuro sobre o potencial agropecuário da região tendo em vista as alterações causadas pelas variações climáticas e por ações antrópicas que podem levar a um estado de desertificação. A simulação de um estado futuro da paisagem é possível através da aplicação do módulo Land Change Modeler (LCM), o qual trabalha com Cadeia de Markov (CM), do software TerrSet. Assim, este trabalho objetiva simular as alterações sofridas pela cobertura vegetal no cenário do ano de 2040, utilizando dados históricos de imagens de satélite para diferentes épocas. Para o mapeamento do uso e ocupação do solo, foram utilizadas duas imagens, com resolução espacial de 30 m, do sensor TM Landsat 5 para (t1) e TM Landsat 8 para (t2), para a previsão para ano de 2040 (t3), tendo como base as mudanças do uso do solo ocorridas em 1999 (t1) e 2018 (t2), utilizando três métodos: (a) Rede Neural Multi-Layer Perceptron (RNMLP), (b) Algoritmo de Aprendizagem baseado em Instâncias Ponderadas por Similaridade (Similarity-Weighted Instance Based Machine Learning Algorithm SimWeight) e (c) Regressão Logística (RL). A probabilidade de análise de mudança para o uso e cobertura do solo em t3 foi prevista através da Cadeia de Markov, que está inserida no módulo do LCM. A CM apresenta a probabilidade de mudança (ou não) das classes de cobertura do solo desde um momento até o outro, essa chance de mudança é descrita pela matriz de transição, que é o principal produto da Cadeia de Markov (AKIN et al., 2014). Através dela a probabilidade de mudança é conhecida por cada categoria, mas não há conhecimento da distribuição espacial. O estudo identificou consideráveis variações no uso e ocupação do solo, principalmente comparando as classes de vegetação e agricultura, principal atividade da região, mostrando uma perda de mais de 7 mil km² de vegetação para as atividades agropecuárias, um decréscimo de mais de 18% da área verde. Para um cenário no ano de 2040 ceteris paribus, ou seja, com um cenário tendencial constante de mudanças ambientais, uma perda de mais de 2.200 km² de vegetação para a agricultura foi simulada através do algoritmo. Portanto, foi possível elaborar com sucesso um modelo futuro da região, mostrando um encolhimento desenfreado e possivelmente ilegal da vegetação nativa, causando diversos impactos ambientais, o que confirma assertivas de outros estudos científicos. Nesse sentido, este trabalho pode ser usado como base em tomadas de decisões estratégicas em instrumentos de planejamento ambiental.

Palavras-chave: Cadeia de Markov; desmatamento; cenários.

Referências Bibliográficas

AKIN, A.; ALIFFI, S.; SUNAR, F. Spatio-temporal urban change analysis and the ecological threats concerning the third bridge in Istanbul City. The International Archives of Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences, v. 40, n. 7, p. 9, 2014.

OBTENÇÃO DE NOVOS COMPLEXOS DE PRATA(I) COM POTENCIAL ATIVIDADE FARMACOLÓGICA

Lorena de Souza Teixeira¹ & Gustavo Bezerra da Silva²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professor do DQF/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Complexos de prata(I) são amplamente conhecidos pelo seu potencial bactericida, porém estudos mais recentes vêm sendo realizados avaliando também o potencial citotóxico dessa classe de complexos. Uma das estratégias para potencializar a atividade é a hibridização molecular e, dessa forma, duas classes de compostos são bastante promissoras: os núcleos antraquinônicos e quinolínicos por apresentarem um amplo espectro de atividades farmacológicas. Portanto, esse trabalho visou a síntese e caracterização de novos complexos metálicos de prata(I) com ligantes antraquinônicos e quinolínicos. Inicialmente, sintetizou-se uma série de compostos de híbridos de *Bases de Schiff* quinolínicos do tipo (*E*)-2-(((2-((7-cloro-4a,8a-dihidroquinolin-4-il)amino)etil)imino)metil)-4-R-fenol, onde R = H (**HL1**), OCH₃ (**HL2**), NO₂ (**HL3**) e Br (**HL4**), através da reação de condensação entre a *N*¹-(7-cloroquinolin-4-il)etano-1,2-diamina e os respectivos 5-R-2-hidroxi-benzaldeídos substituídos, à temperatura ambiente. Os produtos foram obtidos sob a forma de sólidos amarelos, sem necessidade de purificação e com rendimentos de aproximadamente 60%. A identidade dos compostos foi confirmada por análises espectroscópicas (IV e RMN ¹H) e analíticas (pf). Em seguida, as reações de complexação com AgNO₃ foram investigadas na proporção 1:1 de metal:ligante **HL1-4** e na presença de trietilamina para desprotonação da porção fenólica. Os complexos análogos **C1-C4** foram obtidos como sólidos verdeamarronzados. Os produtos foram devidamente caracterizados e a complexação pôde ser confirmada através dos dados de IV. Nos complexos há a ausência da banda de estiramento O–H presente nos ligantes por volta de 3400 cm⁻¹, o que indica a coordenação através do fenolato do ligante. Além disso, há um deslocamento da banda da imina de 1530 para 1520 cm⁻¹ o que sugere a coordenação também pela C=N. Devido à natureza de centro metálico de prata(I) em formar complexos lineares e sabendo que os ligantes **HL1-4** se coordenam pelo fenolato e pela imina, a estrutura proposta é aquela em que duas moléculas de **HL** se coordenam simultaneamente a dois centros de prata(I), onde cada íon metálico se liga de forma linear ao fenolato de uma molécula e ao nitrogênio imínico de uma segunda molécula, como já descrito para sistemas similares. Tentativas de complexação da antraquinona 1,2-diaminoantraceno-9,10-diona com AgNO₃ também foram investigadas, porém os dados de IV não foram conclusivos, pois não mostraram deslocamentos característicos após a coordenação. O espectro de RMN ¹H em clorofórmio deuterado também não mostrou os sinais esperados possivelmente devido à baixa solubilidade dessa classe de compostos. Seguem como perspectivas desse trabalho a finalização das caracterizações dos ligantes **HL1-4** e de seus respectivos complexos **C1-C4** bem como avaliar outras rotas de síntese de complexos de Ag(I), em especial, usando ligantes auxiliares polinitrogenados para sintonização da solubilidade e posterior avaliação das propriedades farmacológicas.

Palavras-chave: complexos de prata(I), atividade farmacológica, quinolina.

Referências Bibliográficas

- ZANON, V. S.; LIMA, J. A.; CUYA, T.; LIMA, F. R. S.; DA FONSECA, A. C. C.; GOMEZ, J. G.; RIBEIRO, R. R.; FRANÇA, T. C. C.; VARGAS, M. D. In-vitro evaluation studies of 7-chloro-4-aminoquinoline Schiff bases and their copper complexes as cholinesterase inhibitors. In: Journal of Inorganic Biochemistry: v. 191, p. 183-193, 2019.
- ALTAY, A.; CAGLAR, S.; CAGLAR, B.; SAHIN, O. Synthesis, structural, thermal elucidation and in vitro anticancer activity of novel silver(I) complexes with non-steroidal anti-inflammatory drugs diclofenac and mefenamic acid including picoline derivatives. In: Polyhedron: v. 151, p. 170-180, 2018

SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES PELA TÉCNICA DE DISCRETIZAÇÃO DO ESPAÇO SEM MALHA

Gabriel Valim Calçada¹ & Edivaldo Figueiredo Fontes Junior²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática, ICE/UFRRJ; 2. Professor do DEMAT/ICE/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A simulação de fenômenos físicos ou químicos por meio da solução numérica de equações diferenciais ou integrais permite minimizar custos, acelerar o desenvolvimento de novas tecnologias e fazer previsões. Essas simulações podem ser realizadas por meio de inúmeras técnicas computacionais desenvolvidas para a solução numérica de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's) e Equações Diferenciais Parciais (EDP's). Geralmente, na solução de EDP's, discretiza-se o espaço contínuo por meio de malhas estruturadas ou não estruturadas gerando um sistema de equações lineares. Vale destacar os tradicionais Método de Diferenças Finitas (MDF), Método dos Elementos Finitos (MEF) e Método dos Elementos de Contorno (MEC). Entretanto, existem diversos métodos numéricos que não utilizam uma malha, as chamadas técnicas sem malha. Como exemplo, o método local de Petrov-Galerkin e métodos sem malha acoplados com outros métodos [2]. Cada um destes métodos possuem vantagens e desvantagens, cabendo ao pesquisador de acordo com suas experiências numéricas em diversos métodos estudados, avaliar em qual situação sua aplicação será mais indicada para modelar determinado fenômeno, aproveitando o que cada um tem de melhor. Neste trabalho, aplicou-se a técnica sem malha (*meshless*), denominado Método da Solução Fundamental (MSF) utilizando funções de base radial (FBR) [3] na interpolação. A ideia básica do MSF detalhado em [1] é aproximar a solução do problema por meio da combinação linear de soluções fundamentais do problema em questão. Neste trabalho, aplicou-se a técnica do MSF em conjunto com as FBR para a obtenção da solução numérica da equação de Poisson, e fez-se a comparação de soluções numéricas obtidas com o código computacional desenvolvido com a soluções analíticas. A formulação matemática do método foi implementada em linguagem de programação Fortran. A equação de Poisson em coordenadas retangulares, descrita pelo operador de Laplace, foi resolvida assumindo-se a solução geral da equação expressa como $u = u_h + u_p$, onde u_h é a solução do problema de valor de contorno de Laplace homogênea, que foi obtida numericamente por meio do MSF e u_p é uma solução particular da equação $\nabla^2 u_p = b$ onde b é um termo de fonte, podendo ser inclusive não-linear. A função u_p foi aproximada com a função de base radial multiquadrática de suporte compacto por meio do método das soluções particulares (MSP). Pode-se destacar como principal vantagens desta técnica computacional o fato da não utilização de uma malha pré-definida e a possibilidade de fácil aplicação a diversos tipos de fenômenos físicos com pouca modificação na formulação. Os resultados obtidos permitiram avaliar a eficiência das técnicas estudadas e mostraram que a solução numérica e analítica apresentaram desvios pouco significativos. Em trabalhos futuros pretende-se avançar na solução de problemas mais complexos e verificar a possível aplicação da técnica desenvolvida em problemas que os tradicionais métodos numéricos ainda não são aplicáveis de forma eficiente.

Palavras-chave: Métodos sem Malha; Método da Solução Fundamental; Funções de Base Radial; Equação de Poisson.

Referências Bibliográficas

- [1] FASSHAUER, G. E. Meshfree Approximation Methods with MATLAB, World Scientific Publishing Co., Inc., 2007.
- [2] FONTES, E.F., SANTIAGO, J.A.F., TELLES, J.C.F. An iterative coupling between meshless methods to solve embedded crack problems, Engineering Analysis with Boundary Elements, v. 55, pp. 52-57, 2015.
- [3] WENDLAND, H. Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree, Advances in Computational Mathematics, n. 4, pp. 389-396, 1995.

Maquete 3D do Departamento de Geografia e Geociências (DG/UFRRJ): Percepção e identificação espacial da representação do lugar e espaço vivido

Hanna Aimée da Fraga Gonçalves¹; Priscila Almeida de Oliveira²; Juliana Moulin Fosse³; João Gonçalves Bahia⁴ & Gustavo Mota de Souza⁵

1. Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica, IT/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura Cartográfica, IT/UFRRJ; 3. Professor do Departamento de Engenharia/IT/UFRRJ; 4. Professor do Departamento de Engenharia/IT/UFRRJ; 5. Professor do Departamento de Geografia/DGG/UFRRJ;

Grande Área: Ciências Exatas da Terra

RESUMO

A compreensão da realidade geográfica através das maquetes traz significados que auxiliam no reconhecimento do lugar identificado através da comunicação cartográfica realizada na representação dos objetos da superfície terrestre. O estudo tem como finalidade representar o espaço vivido com o recurso de um Modelo, obtido por meio do Levantamento Planialtimétrico realizado por alunos do curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica – UFRRJ com orientação do Professor João Gonçalves Bahia, tal levantamento foi verificado topologicamente para que fosse possível a impressão 3D, no qual, foi obtida por intermédio da impressora de baixo custo *Stella 2*. O Objeto de estudo é o Departamento de Geociências e Geografia (DG) que foi selecionado através das suas características geomorfológicas e público de alunos dos cursos de Geografia e Geologia. O Departamento é composto por três edificações que estão localizadas dentro do Campus Seropédica da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, em Seropédica – RJ. As alturas das edificações foram medidas por uma trena eletrônica - *LEICA*, disponibilizada pelo Técnico Pedro Moreira da Silva Neto – Instituto de Tecnologia da UFRRJ. A partir da inspeção topológica do levantamento, foi gerado um modelo 3D no software livre *QGIS* com o complemento *2threejs*, onde foi possível a definição de especificações como: exagero vertical, limite, comprimento e largura da base e suavização do objeto, visando exportar as camadas em extensão *STL (StereoLithography)* reconhecida pela impressora 3D. Após isto, ocorreu o modelamento das camadas no software *3D Builder*, disponibilizado gratuitamente pela *Microsoft*, tornando possível dimensionar a escala de 1:2000 e por último fez o uso do programa *Repetier Host*, que utiliza ferramentas que operam baseadas no sistema cartesiano x, y e z; a impressão se inseriu nas dimensões de 20cmx20cmx8cm; o filamento utilizado foi o filamento *PLA (Ácido Polilático)* biodegradável, deve ser aquecido por volta de 200°C, tendo como diferencial do filamento *ABS (Acrilonitrila Butadieno Estireno)* a mesa extrusora não aquecida. Por fim, o diâmetro de saída do *hotend*, ou bico de saída, foi de 0.2 mm, sendo que os diâmetros variam de 0.1 mm a mais de 1.0mm, o que permite inferir na qualidade e no tempo que um objeto deve ser impresso. O modelo impresso apresentou tempo de impressão de aproximadamente 4 horas e dimensões 16x10x5 cm. Mediante isto, propõe-se a inserção da tecnologia 3D na percepção espacial através de questionários e relatos de pessoas que vivenciam as edificações do DG o conceito do Lugar através da identificação de pontos que chamam mais a atenção e partes dos prédios que mais ocorre identificação por parte dos entrevistados. Essa aproximação visa também buscar um mapeamento do significado do DG para os seus alunos, professores e técnicos.

Palavras-chave: Cartografia; Percepção Espacial; Impressão 3D.

Referências Bibliográficas

- Loch, Ruth E. Nogueira. Cartografia: representação, comunicação e visualização de dados espaciais. Florianópolis: Ed. Da UFSC, 2006.
- Tuler, M.E Saraiva, S. Fundamentos de Topografia. São Paulo: Bookman, 2014.
- Gonçalves, H.A.F.; Sousa, G.M.; Lima Filho, D. Construção de maquetes topográficas para o ensino de cartografia e geomorfologia através da impressão 3D. In.: **Anuário do Instituto de Geociências da UFRJ.**

CAMINHOS BIOGEOGRÁFICOS NO JARDIM BOTÂNICO DA UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO**Lucas de Araujo Silva¹, Karine Bueno Vargas²**

¹ Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geografia, IA/UFRRJ; ² Professora do Departamento de Geografia, IA/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Os Caminhos Biogeográficos correspondem a um circuito pré-definido com pontos de parada para observação e discussão ambiental, os quais podem ser discutidos pela biogeografia. Afim de oferecer uma atividade educativa e um instrumento didático interativo aos visitantes, foi criado no Jardim Botânico (JB) da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), um roteiro biogeográfico com inúmeras opções de discussão e análises ambientais e geográficas *in loco*, já que possui diversas espécies da flora nativa e exótica, sendo um espaço destinado a conservação *ex-situ*, o qual apresenta inúmeros micro ecossistemas que podem ser explorados. A partir de trabalhos de campo foram definidos 23 pontos de interesses biogeográficos constituído de uma cartilha autoexplicativa do conteúdo a ser abordado pelos caminhos do JB, que além de educativos preza pela conservação e preservação dos recursos naturais, sobretudo a Mata Atlântica, bioma em que está inserido. Segundo Conama (2003), os jardins botânicos são áreas protegidas constituídas de coleções de plantas vivas catalogadas, tendo por finalidade o estudo, a pesquisa, documentação do patrimônio florístico do país e a conservação. O presente trabalho adaptou a metodologia de elaboração de trilhas interpretativas para os caminhos físicos do JB, utilizando a biogeografia como norteadora das discussões da análise da paisagem e as geotecnologias na elaboração dos mapas (aplicativo Vicon Saga e software ArcGis) sendo construído um roteiro com conceitos, curiosidades e teorias da ciência biogeográfica, a qual serve também de suporte as explicações ao longo do percurso analisado para os monitores/professores que aplicarem a proposta. O roteiro dessa forma leva conhecimento a comunidade não só acadêmica, mas também aos residentes de Seropédica, aproximando sociedade e natureza. Para a criação do roteiro foi necessário um planejamento ambiental, afim de estabelecer locais delimitados a serem percorridos, não afetando o paisagismo, ou áreas suscetíveis a degradação. Os pontos de destaque que compõem o roteiro são: Sede do Jardim Botânico, Biogeografia de Ilhas, Jardim das Amoreiras, Horta de Plantas Medicinais, Estufa dos Malvaviscos, Bosque da Mata Atlântica e Bromeliário.

Palavras chave: Roteiro Biogeográfico, Educação Ambiental, Biogeografia Aplicada, Conservação Ex-Situ, Jardim Botânico.

Referências Bibliográficas

Conselho Nacional de Meio Ambiente - CONAMA. RESOLUÇÃO CONAMA nº 339 de 2003. Dispõe Sobre a Criação, Normatização e o Funcionamento dos Jardins Botânicos, e dá Outras Providências. Disponível em: <http://www.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=377> Acessado em 14/06/18.

VARGAS, K. - SILVA, L. Caminhos Biogeográficos no Jardim Botânico da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. XVIII SBGFA – Simpósio Brasileiro de Geografia Física Aplicada. Fortaleza, 2019 p. 1-3.

SÍNTESE E PLANEJAMENTO DE NOVOS DERIVADOS BENZIMIDAZÓLICOS COM POTENCIAL AÇÃO CONTRA A LEISHMANIOSE**Rafael de Lima Pinto¹, Maurício Rocha de Brito², Aurea Echevarria³ & Cláudio Eduardo Rodrigues dos Santos⁴³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ, 2. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ, 3. Professora do IQ/UFRRJ, 43. Professor do IQ/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A leishmaniose é uma doença negligenciável causada por parasitas protozoários do gênero *Leishmania*, sendo o vetor transmissor o flebotomíneo, conhecido como “mosquito palha”. Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS), depois da malária, a leishmaniose é a doença parasitária que mais mata no mundo. A estimativa é que atualmente esta doença afeta cerca de 12 milhões de pessoas, e no mundo inteiro mais de 1 bilhão de pessoas correm risco de infecção. Ela pode se apresentar em três formas diferentes: leishmaniose cutânea, muco cutânea e visceral, sendo esta última a forma mais grave. As abordagens quimioterápicas atuais usadas para tratar esta doença são insatisfatórias. O alto custo e efeitos colaterais severos dos fármacos empregados, destacam a necessidade da busca de novos compostos que contribuam para o desenvolvimento de tratamentos mais eficazes e seguros para os enfermos. Neste contexto se têm buscado novos compostos que atendam estas necessidades, como por exemplo, os derivados benzimidazólicos. Estas substâncias possuem o núcleo benzimidazol em suas estruturas, e apresentam diversas atividades biológicas descritas na literatura sendo uma delas a antiparasitária. Partindo deste princípio, o presente trabalho tem como objetivo a síntese e caracterização de compostos desta classe. A síntese destes compostos ocorre em duas etapas (**figura 1**), na qual a primeira consiste na formação do anel imidazólico através da condensação do 3,4-metilenodioxibenzaldeído com o ácido 3,4-diaminobenzóico, utilizando a mistura de solventes DMF/água 9:1 em refluxo. O produto obtido nesta etapa apresentou rendimento de 99%. Na segunda etapa realizada a reação de cloração dos compostos obtidos, seguida pela adição *in situ* da fenilhidrazina, utilizando como solvente o etanol, e a reação foi mantida em refluxo até a formação do composto de interesse. Este por sua vez apresentou rendimento de 59%. As reações foram monitoradas por cromatografia em camada fina, o produto obtido apresentou ponto de fusão de aproximadamente 130 °C e o mesmo foi caracterizado pelas técnicas de RMN de ¹H e ¹³C, evidenciando que os compostos desejados foram possíveis de serem sintetizados utilizando este método. Os dados espectroscópicos estão descritos a seguir: RMN 1H (500MHz, Metanol-d₄+ácido trifluoroacético), δ (ppm): 6,17 – 6,27 (2H, metileno dióxido, s); 7,18 – 8,44 (região de aromático). 8,41 – 8,44 (1H, H-Ar, s); 8,26 – 8,31 (1H, H-Ar, d); 7,85 – 7,91 (1H, H-Ar, d); 7,73-7,81 (1H, H-Ar, s); 7,58 – 7,65 (1H, H-Ar, d). RMN 13C (500MHz, DMSO-d₆), δ (ppm): 102,18 (CH₂, metileno dióxido); 166,75 (C=O - amida).

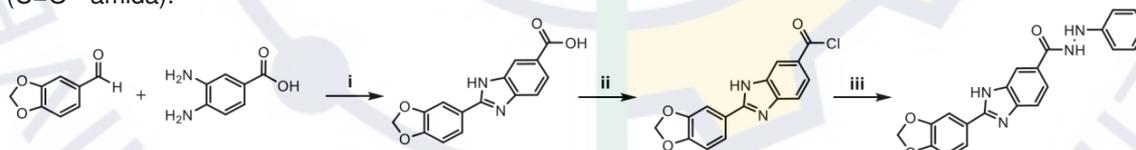


Figura 1. i. DMF/H₂O (9/1), refluxo 24 h, ii. SOCl₂, refluxo 8 h; iii. C₆H₅NHNH₂, etanol, refluxo.

Palavras-chaves: leishmania; benzimidazol; fenilhidrazina

Referências Bibliográficas

- 1- BLANCO, V. R.; NASCIMENTO-JÚNIOR, N. M. Leishmaniose: Aspectos Gerais Relacionados com a Doença, o Ciclo do Parasita, Fármacos Disponíveis, Novos Protótipos e Vacinas. **Revista Virtual de Química**, Araraquara, v. 9, p. 861-876, Maio/Junho 2017.
- 2- SILVA-JARDIM, I.; THIEMANN, O. H.; ANIBAL, F. F. Leishmaniasis and Chagas Disease Chemotherapy: a Critical Review. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 25, p. 18101823, Setembro 2014.
- 3- TONELLI, M. et al. Benzimidazole derivatives endowed with potent antileishmanial activity. **Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry**, v. 33, p. 210–226, Dezembro 2017.

**SÍNTESE DE ARIL-SEMICARBAZONAS COM POTENCIAL
ATIVIDADE FRENTE À TIROSINASE**Geicy Kelly Pires Barboza¹ & Aurea Echevarria²*1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professora do DEQUIM/ICE/UFRRJ.*

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

Nº do protocolo: PVC 345-2018

RESUMO

As semicarbazonas exibem um amplo espectro de atividades biológicas, como ação antiepiléptica, antihipertensiva, hipolipidêmica, antineoplásica, hipnótica e anticonvulsivante.¹ A influência das semicarbazonas na atividade catalítica da tirosinase vem sendo cada vez mais analisada, tendo em vista a facilidade de quelação do oxigênio presente no grupo com os íons cobre da enzima.² Dentro deste contexto o objetivo deste trabalho foi sintetizar uma série de aril-semicarbazonas derivadas de diferentes aldeídos com cloridrato de semicarbazida, caracterizá-los por espectroscopia no infravermelho, RMN de ¹H e ¹³C, para posterior análise da sua potencial atividade frente à tirosinase. Os compostos foram preparados a partir da reação entre o cloridrato de semicarbazida (9,0 mmols) em água (30,0 mL) e os respectivos benzaldeídos (6,0 mmols; benzaldeído, 4-metoxibenzaldeído, 4-etoxibenzaldeído, 4-hidroxibenzaldeído, 3-hidroxi-4-metoxibenzaldeído, 4-clorobenzaldeído e 4-bromobenzaldeído), na presença de acetato de sódio (18,26 mmols). A mistura foi mantida em agitação constante a temperatura ambiente por 1 hora. Após o término da reação o produto foi filtrado e lavado com éter etílico e em seguida purificado com etanol e água, obtendo assim cristais esbranquiçados [benzaldeído semicarbazona (**S-H**), rendimento: 63%, p.f.: 212-214,4°C; 4-metoxibenzaldeído semicarbazona (**S-OMe**), rendimento: 50%, p.f.: 205,1-205,8 °C; 4-etoxibenzaldeído semicarbazona (**SOEt**), rendimento: 50%, p.f.: 203,6-203,8 °C; 4-hidroxibenzaldeído semicarbazona (**S-OH**), rendimento: 67,4%, p.f.: 213,3-214,3 °C; 3-hidroxi-4-metoxibenzaldeído semicarbazona (**S-3,4**), rendimento: 31%, p.f.: 214,7-215,2°C; 4-clorobenzaldeído semicarbazona (**S-Cl**), rendimento: 45,3%, p.f.: 216,8-218,3 °C; 4-bromobenzaldeído semicarbazona (**S-Br**), rendimento: 27,7%, p.f.: 223,7-224,5°C]. Os dados espectroscópicos confirmaram a obtenção dos compostos planejados. As faixas dos principais valores de deslocamento químico de RMN ¹H (500 MHz, DMSO-d₆, ppm) foram: δ 10,00–10,30 (N-H); 7,707.90 (CH=N); 6,40-6,70 (NH₂); os deslocamentos químicos característicos de RMN de ¹³C (125 MHz, DMSO-d₆, ppm) foram: δ 157,1-157,3 (C=O); 134,2-140,2 (C=N) e, os demais sinais foram observados de acordo com o esperado considerando-se os efeitos eletrônicos dos substituintes. As faixas das principais absorções nos espectros de infravermelho (ATR, cm⁻¹) foram: 3452-3457 e 3268-3282 (NH₂); 3226-3060 (NH); 1645-1675 (C=O); 1506-1585 (C=N); 1085 (ArC-Cl para S-Cl) e 1220 (ArC-Br para SBr). Finalmente, conclui-se que a metodologia utilizada para a preparação das aril-semicarbazonas foi satisfatória e as análises espectroscópicas confirmaram as estruturas propostas.

*Palavras-chave: aril-semicarbazonas, tirosinase***Referências Bibliográficas**

1. VIEIRA, R. P. *et al.* Benzaldeído Semicarbazona: um candidato a fármaco que alia simplicidade estrutural a um amplo perfil de atividades. *Revista Virtual Química*, v. 2, n. 1, p. 2-9, 2010.
2. CARDOSO, E.T.C. Inibição da atividade da tirosinase por análogos do ácido kójico. 2014. Dissertação (Pós-graduação em Neurociências e Biologia Celular) – Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará, Belém.

REAÇÃO MULTICOMPONENTE: SÍNTESE DE NOVOS COMPOSTOS PARA FINS ANTI-MALÁRICOS**Jônatas Sennas de Souza¹; Vitoria de Souza Fernandes da Silva ² & Cedric Stephan Graebin³**

1. Discente do curso de Farmácia, ICBS/DCFar/UFRRJ; 2. Discente do curso de pós-graduação em química PPGQ/IQ/UFRRJ; 3. Professor do IQ/DQO/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra.

RESUMO

A malária é uma doença potencialmente grave causada por parasitos do gênero *Plasmodium* da família *Plasmodiidae*. Das espécies, quatro são causadoras da malária sendo o *P. vivax* responsável pela forma mais branda da doença e o *P. falciparum*, a mais grave. Os plasmódios possuem mosquitos do gênero *Anopheles* como vetor os quais se reproduzem melhor em condições de alta umidade e temperaturas moderadamente elevada, o que explica os altos índices da doença em áreas tropicais. As Reações Multicomponentes (RMC) são reações que partem de três ou mais reagentes, de modo a se obter um único produto final que contenha todos ou a maior parte dos átomos de carbono envolvidos em sua formação. No contexto da Química Verde as RMC despontam como a idealidade, com sua economia atômica e a menor geração de resíduos. Além disso, estas reações são uma importante ferramenta para a criação de uma gama de compostos de onde surgem moléculas biologicamente ativas³. A reação de Biginelli, criada por Pietro Biginelli (1860-1937), é uma RMC que, originalmente, utilizava três componentes: acetoacetato de etila, benzaldeído e ureia. Com isso, este trabalho tem por objetivo a síntese de DHPMs com atividade antimalárica. A partir da síntese da Biginelli clássica, sete diidropirimidinonas foram sintetizadas (MV-02, MV-03, MV-04, MV-06, MV-09, MV-16 e MV-18). Para as sínteses das DHPMs, foram utilizados β -cetoésteres, aldeídos aromáticos e derivados de ureia. Como solventes, foram utilizados metanol (99,8% P.A) e etanol (95% P.A). As reações foram feitas em frascos com tampa de rosca e agitador magnético e aquecidos na chapa de aquecimento em temperaturas de 75°C, para reações com etanol, e 60°C, para reações com metanol, controladas por um sensor de temperatura. Os compostos obtidos foram filtrados por filtração à vácuo, sendo lavados por seus respectivos solventes gelados. Os produtos foram secos em temperatura ambiente e purificados através de uma fervura dos sólidos, na temperatura de 50°C por dez minutos, de acordo com o solvente de cada reação. Apenas MV-16 e MV-18 obtiveram rendimentos satisfatórios (>50%) com um rendimento percentual de 70,44% para MV-16 e 71,92% para MV-18. Os produtos sintetizados foram encaminhados aos testes de atividade antiparasitária.

Palavras-chave: malária; reação multicomponente: biginelli; diidropirimidinonas

Referências Bibliográficas

- 1) CAMARGO, Erney Plessmann. Malária, maleita, paludismo. Cienc. Cult., São Paulo, v. 55, n. 1, p. 26-29, Jan. 2003.
- 2) REY, L. Bases da parasitologia médica: 3.ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 2010.
- 3) ROGÉRIO, K. R. et al. Reações Multicomponentes: Um breve Histórico e a Versatilidade destas Reações na Síntese de Moléculas Bioativas, Rev. Virtual Quim., 2016, Rio de Janeiro.

SÍNTESE DE MESOIÔNICOS DERIVADOS DO 6-NITRO-PIPERONAL E AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE ANTITUMORAL EM CÉLULAS DERIVADAS DE HEPATOCARCINOMA HUMANO

William Queiroz Felipe¹, Natália Drumond Lopes², Mariana Borges Barreto Bezerra³, Ana Paula Pereira da Silva⁴, Aurea Echevarria Asnar Neves⁵

1. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professora da Universidade Estácio de Sá; 3. Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ; 4. Professora do DBQ/IQ/UFRRJ & 5. Professora do DQO/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra
Nº do protocolo: PVC 345-2018

RESUMO

Compostos mesoiônicos possuem heterociclos com cinco membros, sendo classificados como betaínas mesoméricas. Esses compostos têm sido estudados devido a seu potencial como substâncias bioativas através de suas aplicações terapêuticas, especialmente como agentes antitumorais (GALUPPO, 2015; GOZZI *et al.* 2015). O câncer é uma das principais causas de morte no Brasil e no mundo e, a estimativa para o biênio 2018-2019 aponta que no Brasil ocorrerão 600 mil novos casos. No Brasil, o câncer de fígado tem apresentado um aumento do número de casos e a alta mortalidade associada à doença o torna um importante problema de saúde pública (INCA, 2019). Fármacos com elevada toxicidade em relação a células saudáveis e resistência ao tratamento representam grandes problemas na quimioterapia, ressaltando a necessidade do desenvolvimento de compostos mais eficazes no tratamento dessa doença. Dessa forma, esse trabalho teve como objetivo a síntese e avaliação dos efeitos de cloridratos mesoiônicos da classe 1,2,3,4-tiadiazólio-2-aminidas sobre a viabilidade e metabolismo glicolítico de células derivadas de hepatocarcinoma humano (HepG2). Os derivados mesoiônicos, sintetizados a partir de tiossemicarbazidas e de 6-nitropiperonal foram obtidos com bons rendimentos e completamente caracterizados, utilizando-se ponto de fusão, infravermelho, massas e RMN de ¹H e ¹³C, em cloreto de 5-(6'-R₂-piperonil)-1,3,4-tiadiazólio-2-(4"-R₁-fenil)amina, sendo PMI-1 (R₁= H, R₂= H), PMI-2 (R₁= H, R₂= NO₂), PMI-3 (R₁= H, R₂= Br), PMI-4 (R₁= NO₂, R₂= H), PMI-5 (R₁= Cl, R₂= H) e PMI-6 (R₁= Br, R₂= H). Nos ensaios de viabilidade, células com 24 horas de crescimento foram incubadas com cada um dos compostos em diferentes concentrações (0,1 a 100 µM) e a viabilidade celular foi determinada através do ensaio de MTT (3-(4,5-dimetil-2-tiazolil)-2,5-difeniltetrazolio brometo). O fluxo glicolítico foi avaliado através da medida da liberação de lactato no meio de cultura pelas células. Os compostos PMI-2 e PMI-3 apresentaram efeitos mais expressivos sobre a viabilidade celular. As concentrações capazes de inibir em 50% a viabilidade celular após 24 horas de incubação com esses compostos foram 9,52 ± 0,85 e 20,4 ± 2,94 µM, respectivamente. O efeito do composto mais ativo (PMI-2) sobre o fluxo glicolítico também foi avaliado, no entanto, nenhum efeito significativo foi observado nas condições testadas.

Palavras-chaves: Câncer; glicólise; hepatoma; quimioterapia; metabolismo; citotoxicidade; compostos aromáticos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- INSTITUTO NACIONAL DE CÂNCER JOSÉ ALENCAR GOMES DA SILVA (INCA). Rio de Janeiro: INCA, 2019. Disponível em: <<<https://www.inca.gov.br/>>>. Acesso em: 18 de julho de 2019.
- GALUPPO, L. F. **Efeitos Antitumorais e Hematológicos *in vivo* do Composto Mesoioônico Sidnona 1**. Curitiba. UFPR (dissertação de mestrado, 2015).
- GOZZI, G. J. J.; PIRES, A. R.; VALDAMARI, G.; ROCHA, E. M.; MARTINEZ, G. R.; NOLETO, G. R.; ACCO, A.; SOUZA, C. E. A.; ECHEVARRIA, A.; REIS, C. M.; DIPIETRO, A.; CADENA, S. M. S. C. **Selective Cytotoxicity of 1,3,4-Thiadiazolium Mesoionic Derivatives on Hepatocarcinoma Cells (HepG2)**. *PlosOne*, 10(6), e0130046 (2015).

ESTIMANDO PARÂMETROS PARA A MODELAGEM DE DOENÇAS VIRAIS**Thais Madruga de Oliveira Mendonça¹, Nathalia Kathleen Santana Reyes², Douglas Souza de Albuquerque³, Josiane da Silva Cordeiro Coelho⁴ & Claudia Mazza Dias⁵**

1. Aluno PICV, Discente do Curso de Matemática Aplicada Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 2. Aluno PICV, Discente do Curso de Matemática Aplicada Computacional, DTL/IMUFRRJ; 3. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática Aplicada e Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 4. Professor do DEMAT/UFRRJ; 5. Professor do DTL/IM/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A modelagem matemática em epidemiologia é ferramenta consagrada no entendimento da propagação e do controle de doenças. Quando se trata de doenças virais, principalmente aquelas que atingem o indivíduo e sua infância, seu estudo ganha também importância social. Para citar alguns exemplos, hoje nosso país lida com alarmante número de casos de Sarampo, doença que já era considerada erradicada na maior parte de nosso território [1]. Outra doença não menos preocupante, mas pouco conhecida do grande público, é a Síndrome da Rubéola Congênita (SRC), uma doença decorrente da infecção da mãe pelo vírus da Rubéola durante as primeiras semanas da gravidez, causando grande influência no desenvolvimento da criança [2]. Como exemplo também citamos a Coqueluche, doença infecciosa aguda do trato respiratório, cujo número de casos é considerando grande pelos especialistas [3]. Todas estas doenças podem ser estudadas e descritas por modelos determinísticos, mas um desafio sempre presente nestes modelos é a estimativa dos seus parâmetros. A modelagem de doenças virais é de fundamental importância para o entendimento dos processos envolvidos e planejamento de ações de controle. A obtenção eficiente dos parâmetros a partir das bases históricas de dados e utilizando técnicas estatísticas adequadas, permite ao modelador uma melhor qualidade na obtenção de cenários futuros. Além disso, o estudo de tais técnicas de inferência estatística clássica e bayesiana no contexto de modelos determinísticos é assunto novo e interessante na formação dos estudantes do curso de bacharelado em matemática. Este trabalho tem como objetivo estudar diferentes técnicas de estimação estatística dos parâmetros envolvidos nesses modelos. A partir de dados disponíveis publicamente para algumas das doenças citadas e utilizando-se técnicas de inferência estatística, clássica ou bayesiana, é possível obter estimativas de valores dos parâmetros necessários aos modelos que descrevem as dinâmicas populacionais.

Palavras-Chave: matemática, modelagem, epidemiologia, parâmetros.

Referências Bibliográficas

- Materia de O Globo. <https://g1.globo.com/am/amazonas/noticia/manaus-tem-85-novos-casos-desarampo-confirmados-diz-semsa.ghtml>. Acesso em: 23/06/2018.
- Ministério da Saúde. <http://portalms.saude.gov.br/>. Acesso em 05/02/2019.
- Boletim Epidemiológico da Secretaria de Vigilância em Saúde do Ministério da Saúde. 47(32), 2016.

UMA APLICAÇÃO DO MÉTODO DAS SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS PARA SIMULAR SISTEMAS DE PROTEÇÃO CATÓDICA**Ulises Marcelo Pereira Bravo¹ & Wilian Jeronimo dos Santos²**

1. Bolsista de Iniciação Científica FAPERJ, Discente do Curso de Bacharelado em Matemática Pura, ICE/UFRRJ; 2. Professor do DEMAT/ICE/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Para o dimensionamento de um sistema de proteção catódica são necessários conhecer a distribuição de potencial (ϕ) e a densidade de corrente (i) na superfície das estruturas metálicas, tais como plataformas off-shore, tubulações enterradas, tanques de armazenamento, navios, entre outros. Simulações numéricas de sistemas de proteção catódica podem ser realizadas para reduzir custos através da otimização de projetos e determinação de áreas críticas para inspeção. O problema de potencial eletroquímico é governado pela equação de Poisson com condições de contorno as curvas de polarização ($\phi = f(i)$), ou seja, são relações não lineares entre o potencial e a densidade de corrente. O método numérico proposto é o Método das Soluções Fundamentais (MSF). O MSF pertence à classe dos métodos sem malha (meshless). No MSF, a solução aproximada do problema é representada na forma de uma superposição linear das soluções fundamentais com pontos singulares localizados fora do domínio do problema. Estes pontos singulares são denominados de fontes virtuais e formam um "pseudo-contorno" sem pontos comuns com o contorno real do problema. A essência do MSF é o uso da solução fundamental, que satisfaz exatamente a equação diferencial homogênea associada à equação governante em qualquer ponto, exceto no ponto fonte. Os coeficientes que ocorrem na solução aproximada do MSF, geralmente chamados de intensidades ou amplitudes das fontes virtuais, são determinados de forma que a superposição linear satisfaça as condições de contorno, usualmente sobre um conjunto de pontos no contorno (pontos de colocação). Com base nas características mencionadas acima, verifica-se a viabilidade do uso do MSF para a determinação do potencial eletroquímico e da densidade de corrente sobre a superfície metálica. O problema fundamental na aplicação do MSF é a determinação do posicionamento das fontes virtuais. Em geral, as fontes virtuais são distribuídas de forma circular ou, ainda, com geometria similar a do contorno da região considerada. Contudo, a qualidade da solução numérica depende do raio deste círculo ou da distância entre as fontes virtuais e o contorno devido ao mal-condicionamento dos sistemas algébricos formados. Para otimizar o processo, foi implementado um código para ser executado no programa Octave, tal código foi criado para gerar alguns pontos sobre a geometria do problema (fontes campo) e pontos fora do contorno (fontes virtuais), para que não fosse necessário o uso de um outro programa, assim automatizando todo processo. Após a implementação do código, foi resolvido um problema envolvendo uma equação parcial não-homogênea, com condições de contorno de Dirichlet e de Neumann. Tal problema foi resolvido usando o MSF e uma aproximação da solução particular por meio de uma função de base radial (função que depende apenas do raio). É de importância informar que era conhecida a solução analítica do problema proposto, dessa forma foi feita uma análise dos resultados esperados a partir da solução esperada (de forma analítica) e a solução obtida (usando o método da solução particular e o MSF).

Palavras-chave: Proteção Catódica; métodos numéricos; MSF.

Referências Bibliográficas

V. Gentil. Corrosão. Rio de Janeiro, Brasil, LTC, 5a. edição, 2007.

A. Karageorghis, G. Fairweather. "The method of fundamental solutions for the solution of nonlinear plane potential problems", IMA J. Numer. Anal. n. 9, 231- 242, 1989.

P. A. Ramachandra, "Method of Fundamental Solutions: Singular Value Decomposition Analysis", Communication in Numerical Methods in Engineering, v. 18, 789- 891, 2002.

MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL PARA O SARAMPO**Nathalia Kathleen Santana Reyes¹, Douglas Souza de Albuquerque², Thais Madruga de Oliveira Mendonça¹, Erito Marques de Souza Filho³ & Claudia Mazza Dias³**

1. Aluno PICV, Discente do Curso de Matemática Aplicada Computacional, 2. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Matemática Aplicada e Computacional, DTL/IM/UFRRJ; 3. Professor do DTL/IM/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O Sarampo é uma doença infecciosa aguda, viral, transmissível, extremamente contagiosa e muito comum na infância. Os sintomas iniciais apresentados pelo doente são: febre acompanhada de tosse persistente, irritação ocular e corrimento do nariz. Após estes sintomas, geralmente há o aparecimento de manchas avermelhadas no rosto, que progridem em direção aos pés, com duração mínima de três dias. Além disso, pode causar infecção nos ouvidos, pneumonia, ataques (convulsões e olhar fixo), lesão cerebral e morte. Posteriormente, o vírus pode atingir as vias respiratórias, causar diarreias e até infecções no encéfalo. Acredita-se que estas complicações sejam desencadeadas pelo próprio vírus do Sarampo que, na maior parte das vezes, atinge mais gravemente os desnutridos, os recém-nascidos, as gestantes e as pessoas portadoras de imunodeficiências. Embora a incidência global tenha sido significativamente reduzida através da vacinação, o sarampo continua sendo um importante problema de saúde pública. Como a cobertura vacinal não é uniformemente alta em todo o mundo, o sarampo é o principal assassino evitável de crianças em todo o mundo. A motivação principal para esse trabalho é o estudo de novos modelos matemáticos para a doença. Primeiramente, foi utilizado como base o modelo compartimental SEIR, alguns aspectos do modelo de Kermack e McKendric como a homogeneidade da população (sem idade e sem estrutura social), onde a população total é dividida em quatro categorias: Suscetíveis, Expostos, Infectados e Recuperados. Considerando como característica do Sarampo, que um paciente curado ou vacinado não será infectado pela doença, portanto o modelo SEIR pode ser usado na modelagem pois representa de forma simplificada a dinâmica da doença. Depois de estudado o modelo simples, partiu-se para o estudo de uma situação onde temos uma parte da população vacinada. Este novo modelo tem como objetivo verificar a efetividade da aplicação da vacina no alastramento da doença. Em ambas abordagens, se tem como resultado sistemas de equações diferenciais ordinárias, que foram solucionados por métodos numéricos como o Método de Runge-Kutta de quarta ordem. Os resultados obtidos permitem observar o comportamento dos diferentes grupos frente a diferentes cenários de simulação. Além disso, a partir de dados disponíveis publicamente e utilizando-se técnicas de inferência estatística, foram feitas estimativas para os valores de alguns dos parâmetros utilizados.

Palavras-Chave: Sarampo, Equações Diferenciais, Epidemiologia.

Referências Bibliográficas

- Fundação Oswaldo Cruz. Site: <http://www.bio.fiocruz.br/index.php/saramposintomas-transmissao-e-prevencao>. Consulta em: 23/06/18.
- KERMACK, W. O. & MCKENDRICK, A. G. A. Contribution to the mathematical theory of epidemics. **Proc. R. Soc. Lond.A.**, v. 115, p. 700-721, 1927.
- O. O. Onyejekwe; E. Z. Kebede. Epidemiological Modeling of Measles Infection with Optimal Control of Vaccination and Supportive Treatment. *Applied and Computational Mathematics*. 4(4): 264-274, 2015.

FREEFILA: UM NOVO SOFTWARE DE GERENCIAMENTO DE FILA
Patrick Emanuel Spilari Ferreira¹ & Raimundo José Macário Costa²

1. Discente Orientado do Curso de Sistemas de Informação, DECOMP/ICE/UFRRJ; 2. Professor Doutor, DECOMP/ICE/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O número crescente de demanda por ofertas de serviços tem revelado de suma importância deste mercado na economia internacional. Neste contexto, verifica-se a mudança de estratégias promovidas pela concorrência entre os prestadores de serviço, e sua constante atualização em novas abordagens tanto tecnológicas quanto sociais para angariar uma maior fatia do mercado consumidor (SCHONS e col,2009). Pode-se observar que devido a evolução da tecnologia e disseminação de informação, o mercado torna-se cada vez mais globalizado, tendo seus processos produtivos distribuídos por todo o mundo, permitindo assim um aumento na eficiência tanto produtiva quanto para venda ou prestação de um produto/serviço. Contudo, essa disseminação de informações não ficou nas mãos apenas dos prestadores de serviços ou empresas, mas passou a incorporar uma nova classe de clientes mais exigentes, que gerou um novo cenário econômico, onde a percepção de qualidade, não está mais diretamente ligada apenas ao produto/serviço final, mas também a qualidade do atendimento durante a prestação de serviço, o “pós-venda” e a organização dos processos e padrões de qualidade. Sendo assim, quando um determinado processo do serviço ou capacidade produtiva de uma organização é insuficiente para atender a demanda há uma incidência de um gargalo ocasionando desta forma o processo de formação de filas. O processo de formação de filas, contempla algumas variáveis que os gestores do estabelecimento servidor devem observar para uma melhor percepção de fila por parte dos clientes e tendo em vista essas variáveis, o escopo do projeto foi elaborado. O trabalho visa a criação de uma aplicação que seja suportada tanto em computadores quanto em smartphones para o gerenciamento virtual de uma fila. Onde o usuário possa: Visualizar previamente a fila de um estabelecimento que presta serviço ou vende algum produto, inserir-se na fila sem comparecer ao estabelecimento presencialmente, verificar o tempo médio de atendimento caso decida participar da fila. A aplicação se destina a todos os estabelecimentos comerciais que atuem em qualquer tipo de área que preste um serviço ou venda algum produto, e que tenha o desejo de gerenciar as filas remotamente, sem a necessidade do cliente estar presente, aguardando para ser atendido. A metodologia adotada neste trabalho, será o clássico modelo em cascata de produção de software. O modelo em cascata é um composto de atividades sequencias de: Levantamento de Requisitos, Análise, Projeto de Software, Implementação, Teste de Software, Implantação e Manutenção. Espera-se ao final do trabalho que o aplicativo seja totalmente desenvolvido e possa auxiliar os usuários na gerência de seu tempo de modo mais adequado. Portanto, visando melhorar a experiência dos consumidores de produtos e serviços, que gastam parte do seu tempo em filas de espera improdutivas, seja para o atendimento em algum estabelecimento comercial ou governamental, esta aplicação tem por fim melhorar este período, dando liberdade para que estes consumidores efetuem outras atividades, enquanto a fila de espera se realiza virtualmente.

Palavras-chave: Gerenciamento de Fila; FREEFILA; Atendimento.

Referências Bibliográficas

- SCHONS, C. H., & RADOS, G. V. A IMPORTÂNCIA DA GESTÃO DE FILAS NA PRESTAÇÃO DE SERVIÇOS: UM ESTUDO NA BU/UFSC. *Revista Digital de Biblioteconomia e Ciência da Informação*, 116-135, 2009.
- SOARES, M. D. Metodologias Ágeis Extreme Programming e Scrum para o Desenvolvimento de Software. 3 (1), 2004.
- MARROQUIN, J.C. FOLHA DE S. PAULO. Fonte: FOLHA: <https://www1.folha.uol.com.br/topofmind/2014/10/1528719-novo-consumidor-mais-informadomais-exigente-mais-consciente.shtml>, (27 de 10 de 2014).

REDES SOCIAIS, MANIPULAÇÃO E POLARIZAÇÃO: FAKE NEWS E A DISSEMINAÇÃO DA DESINFORMAÇÃO**Guilherme Senra Ribeiro José Maria¹; Raimundo José Macário Costa²**

1. Discente do Curso de Sistemas de Informação, DECOMP/UFRJ; 2. Professor do DECOMP/UFRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O crescimento da propagação de notícias falsas e de conteúdo tendencioso apresentam-se como integrantes regulares no processo de polarização política que ocorre atualmente no Brasil. Utilizando conhecimentos e teorias relacionadas ao comportamento humano e também sobre a maneira como os avanços tecnológicos tem alterado as formas e fronteiras de comunicação existentes entre as pessoas, elucidar de maneira melhor a influência da internet em questões de relevância social se torna um novo desafio. Esclarecer quais são as possíveis consequências da sociedade do conhecimento e da informação descrita por Alonso, Ferneda e Santana (2010, p.7) através do estudo dos algoritmos de distribuição de informação presentes na rede social Facebook, junto do conteúdo contido na informação veiculada na rede social se faz cada vez mais necessário. O estudo não se limita a identificar as consequências deste fenômeno, como também compreender como casos de violência e discriminação podem ser motivados por ele. O trabalho também aborda como esta mudança de paradigmas se tornou o palco para o surgimento de um meio propício para o mau uso do potencial de alcance da internet. Distanciados das consequências de suas ações, alguns usuários se veem livres para disseminar ideais e informações que podem ser prejudiciais à sociedade. Entre essas informações estão presentes desde notícias sem embasamento factual como também dados parcialmente tendenciosos e até mesmo falsos. Entre os tipos de conteúdos nocivos presentes, foi identificado como detentor de grande importância as notícias cunhadas como Fake News, citadas por Delmazo e Valente (2018, p.4), como artigos noticiosos que são intencionalmente falsos. Objetivo: Este trabalho tem como objetivo determinar e analisar a influência advinda da rede social Facebook no processo de polarização política crescente e a propagação de notícias falsas tendo como foco o âmbito nacional. O método sendo aplicado no trabalho configura-se como hipotético-dedutivo, já que se pauta na hipótese de que as redes sociais, com foco no Facebook agravam o processo de polarização política observado na sociedade contemporânea. Conterá também com uma análise quali-quantitativa das informações coletadas pela pesquisa. Conclusão: Desta forma, espera-se alcançar os resultados desejados a partir da junção dos conhecimentos relativos às áreas sendo analisadas em conjunto com duas pesquisas de opinião realizadas separadamente através de formulários de respostas. Nos formulários poderão ser encontrados questionamentos relacionados ao comportamento dos usuários na rede social em relação a notícias apresentadas na mesma. A partir dos resultados apurados pretende-se realizar uma análise comparativa para determinar a magnitude da influência deste fenômeno no dia a dia do brasileiro. Com o estudo ainda em andamento, os possíveis resultados da pesquisa serão esclarecidos na finalização do trabalho de conclusão de curso.

Palavras-chave: Fake News, Tecnologia, Desinformação, Notícias, Polarização.

Referências Bibliográficas

ELMAZO, Caroline; VALENTE, Jonas C. L. Fake News nas redes sociais online: Propagação e reações à desinformação em busca de cliques, 2018 Disponível em: http://www.scielo.mec.pt/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2183-54622018000100012

UTILIZAÇÃO DE DOCKING MOLECULAR PARA PREVER POTENCIAL PERFIL ANTICÂNCER DE ACRIDINONAS

Luiz Henrique de Carvalho Oliveto¹; Carlos Germano dos Santos Pimentel²; Marina Brandão Fonseca³ & Cedric Stephan Graebin⁴

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Discente Graduado do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 3. Mestranda, do programa de pós-graduação em Química; 4. Professor do Departamento de Química Orgânica, Instituto De Química, UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Define-se câncer, o conjunto de doenças que têm em comum o crescimento desordenado das células, pelas palavras do INCA. Novos casos de câncer tal como o número de mortes têm crescido a cada ano. Seu tratamento coleciona diversos fatores adversos que, entre eles, os principais são os efeitos colaterais e o alto custo, em boa parte dos casos, o que torna inacessível a uma parte da população, portanto, faz-se necessário a busca por novos tratamentos que, tanto amenizem efeitos colaterais, como os gastos. Uma das formas viáveis atuais para o tratamento encontra-se na tubulina, atuando em função de inibir a polimerização de microtúbulos (Fonseca, 2017). Modelagem molecular é um conjunto de técnicas e métodos computacionais capaz de modelar e prever os comportamentos de moléculas, utilizando-se de conhecimentos das mecânicas clássica e da quântica, simulando conformações, interações e também orientações moleculares. Em trabalhos anteriores do nosso grupo de pesquisa, foi encontrada uma boa atividade, in vitro, de acridinonas contra células de linhagem tumoral (MDA-MB231). Baseado nisso, foram realizados dockings moleculares para 104 acridinonas (35 moléculas constitucionalmente distintas e seus respectivos enantiômeros) a fim de predizer se essas estruturas teriam, teoricamente, um perfil de atividade na tubulina. (Magalhaes, Marques, Fonseca, Rogério, Graebin, 2016). As simulações de dockagem foram realizadas no programa Gold, que admite um sistema de pontuação (score) onde, quanto maior for o score das moléculas testadas, maior é a interação com a proteína de interesse. Score maiores que 80 são os mais indicados. Os valores de scores obtidos variam de 20,96 a 89,69. Das 104 moléculas, apenas 9 têm scores menores que 50,00 e 18 moléculas têm scores acima de 80,00. A molécula de score mais alto foi a (R)-7-((R)-2-(piridin-4-il)benzo[d][1,3]dioxol-5-il)-9,10,11,12-tetraidrobenzo[c]acridin-8(7H)-ona que obteve um score de 89,69; esse valor é o mais próximo encontrado do valor do ligante padrão (que já se encontra cristalizado na proteína) que é de 90,14. (Meng, Mezei, Cui, 2011). Uma vez que, quando se pensa em síntese, o ideal seria uma síntese sem ser enantiomericamente seletiva, por ser menos custosa, a molécula que apresenta o melhor perfil é a (2S)-2-metoxi-4-(8-oxo-7,8,9,10,11,12-hexaidrobenzo[c]acridin-7-il)fenilpirrolidina-2-carboxilato, pois tem o maior valor médio entre os scores dos enantiômeros R e S (80,58), tornando-a um bom objeto de estudo.

Palavras-chave: Câncer, Tubulina, Docking molecular.

Referências Bibliográficas

Fonseca, M.B. Síntese de heterociclos com atividade anticâncer. Trabalho de conclusão de curso. Seropédica: Departamento de Química/UFRRJ, 2017.

Magalhaes, L.G.; Marques, F.B.; da Fonseca, M.B.; Rogério, K.R.; Graebin, C.S.; Andricopulo, A.D. Discovery of a Series of Acridinones as Mechanism-Based Tubulin Assembly Inhibitors with Anticancer Activity. PLoS ONE, v. 11, n. 8, p. e0160842, 2016.

Meng, X.; Zhang, H.; Mezei, M.; Cui, M. Molecular Docking: A powerful approach for structure-based drug discovery. Curr Comput Aided Drug Des. 2011.

DINÂMICA DO ÍNDICE DE ÁREA FOLIAR EM ÁREA DE RECOMPOSIÇÃO FLORESTAL NO ESTADO DO RIO DE JANEIRO

Bianca de Oliveira André¹; Mariane dos Santos Pessanha²; Gustavo Bastos Lyra³ & Ednaldo Oliveira dos Santos

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Engenharia Florestal, IF/UFRRJ; 2. Discente de Mestrado do PPGEEAmb/IT/UFRRJ; 3. Professor do DCA/IF/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A dinâmica do índice de área foliar (IAF) de uma cobertura vegetal é resultante das respostas ecofisiológica das plantas às condições químicas, físicas e biológicas do solo, além disso das condições do microclima (temperatura, umidade e radiação), das condições bióticas como herbivoria, competição e das interdependências desses fatores nos diferentes estágios sucessionais da vegetação. Desta forma, o IAF tem grande correlação com a produtividade primária e com a biomassa da vegetação, sendo uma avaliação de importante relevância para as estimativas de massa e energia da relação entre solo-planta-atmosfera. No presente estudo foram utilizados métodos não destrutivos para obtenção do índice de área foliar da área e altura da vegetação composta basicamente por *Brachiaria* spp., na área experimental na Reserva Ecológica de Guapiaçu (REGUA), localizada na cidade de Cachoeiras de Macacu/RJ. Ambas as variáveis foram mensuradas dentro e fora do cercado onde fica localizado o Sistema Micrometeorológico, sendo classificado como sendo interno (dentro do cercado - int) e externo (fora do cercado - ext). As análises dos dados obtidos das variáveis altura e IAF foram realizadas no programa RStudio, onde foi possível calcular medidas descritivas de média, mediana, coeficiente de variação, quartil e assimetria, gerando ainda gráficos de distribuição de frequência em histogramas quantitativos. De acordo com a pesquisa foi possível observar que a altura da pastagem na área externa aumenta ao longo dos meses, enquanto a área foliar sofre oscilações que podem ser explicadas pela presença de gado no local. Já na área interna do cercado foi possível notar um comportamento com menor variação da área foliar e um aumento contínuo dos índices. Os resultados apresentaram valores de Coeficiente de Variação (CV) para área externa de aproximadamente 20% (IAFext) e entre 15 e 40% (Hext). Já na área interna, devido a necessidade de se manter a vegetação no Sistema Micrometeorológico (interno) no mesmo padrão de altura vegetativa da área externa do experimento observamos o CV de 10 a 30% (IAFint) e entre 23 a 45% (Hint). Pode-se concluir que a área analisada apresenta uma considerável variação dos índices de área foliar e de altura da vegetação. Sendo observado também que o crescimento da vegetação retrocede em alguns momentos devido às interferências antrópicas e herbívoras de animais, o que impede uma análise mais precisa da correlação entre o crescimento em altura e a área foliar. Contudo, a caracterização dos aspectos biométricos obtidos no estudo mostrou um desenvolvimento positivo da vegetação.

Palavras-chave: Índice de área foliar; produtividade primária bruta; recomposição florestal.

Referências Bibliográficas

- BIANCO, S.; PITELLI, R. A.; CARVALHO, L. B. Estimativa da área foliar de *Cissampelos glaberrima* usando dimensões lineares do limbo foliar. *Planta Daninha*, p. 353-356, 2002.
- CARUZZO, A.; DA ROCHA, H. R. Estimativa do Índice de Área Foliar (IAF) em Regiões de Pastagem e Floresta com um método indireto ('gap fraction') durante o Experimento AMC/LBA-1999. In: *Anais do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia*. Rio de Janeiro. 2000.
- CHAPIN III, F. S.; CHAPIN, M. C.; MATSON, P. A.; VITOUSEK, P. **Principles of terrestrial ecosystem ecology**. Springer, 2011.
- WANDELLI, E. V.; MARQUES FILHO, A. O. Medidas de radiação solar e índice de área foliar em coberturas vegetais. *Acta Amazônica*. 29(1). p. 57-78, 1999.

CLIMMAPVIEW: PLATAFORMA FUNDAMENTADA EM SISTEMAS DE INFORMAÇÃO GEOGRÁFICOS ABERTOS PARA A ASSISTÊNCIA NA VISUALIZAÇÃO DE DADOS CLIMÁTICOS
Gustavo Garcia dos Reis Nunes¹; Gustavo Bastos Lyra²; Ednaldo Oliveira dos Santos² & Sergio Manuel Serra da Cruz³

1 Bolsista do grupo PET-SI/UFRRJ e discente do Curso de Sistemas de Informação, DECOMP/ICE/UFRRJ; 2 Professor do DCA/IF/UFRRJ; 3 Professor do DECOMP/ICE/UFRRJ, Tutor do Grupo PET-SI/UFRRJ,

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Previsões indicam que a população mundial alcançará 9 bilhões de habitantes em 2050 e no final do século serão mais de 10 bilhões (INED, 2013). Com base nessa informação, a Organização das Nações Unidas para Alimentação e Agricultura (FAO), agência das Nações Unidas, projeta a necessidade do aumento de no mínimo 60% da produção de alimentos. A agricultura é de suma importância nessa questão, a qual o Brasil tornou-se grande exportador agrícola, sendo o terceiro maior exportador desde a década de 2000 e tende a aumentar sua produção, de tal forma, que possa atender as demandas alimentícias. Entre os diversos fatores que influenciam na produção agrícola, destaca-se o clima. Portanto, é necessário focar no aumento da produção agrícola, para assim atender a demanda de alimentos da população mundial. Nesse cenário, destacam-se as variabilidades e as mudanças climáticas como fatores que mais impactam o setor agrícola. Com isso, o objetivo deste trabalho é apresentar a plataforma *CLIMMAPVIEW*, baseada em Sistemas de Informações Geográficas (SIG) de dados abertos. A Plataforma disponibiliza a visualização dos metadados e dados de precipitação brutos e curados de estações pluviométricas para o estado do Rio de Janeiro por meio de uma interface mobile, em aplicativo disponíveis em smartphone ou em computadores por meio de navegadores, ambos conectados na Internet. Para acessar os metadados e dados, a Plataforma recebe as informações da base de dados do sistema existente denominado METEORO (ANDRADE et al, 2015). Na codificação da plataforma, foi usado as *Application Programming Interface* (APIs) de geolocalização do *Google Maps*. Já no modelo web foi usado *javascript* para manipular os dados obtidos pelo sistema METEORO e apresentá-los no mapa virtual de acordo com suas coordenadas, como também utilizou-se a *Hypertext Markup Language* (HTML), para que os navegadores possam interpretar as imagens dos mapas recebidas pela API. Para desenvolvimento da versão *mobile*, foi usado o *framework* denominado de *react-native*. Vale ressaltar, que o sistema usa a geolocalização do dispositivo como meio de orientação de posição para apresentar o mapa. Ao acessar o *CLIMMAPVIEW* é possível visualizar as estações no mapa indicada por um marcador de cor azul com uma nuvem para simbolizar que no local marcado existe uma estação, com isso, ao clicar nesse marcador é aberto uma janela com as especificações técnicas da estação. Com isso, é possível visualizar os dados brutos e curados de acordo com uma data pré-determinada pelo usuário. Outra funcionalidade é que há um pin de cor azul, que referencia a posição do usuário, pois ao clicar nesse *pin*, o Sistema redireciona para a local que se encontra o usuário, dando um zoom até a região. A viabilidade da visualização das estações meteorológicas em vários dispositivos pode potencialmente demonstrar vantagem competitiva para diversos usuários, com o foco em pequenos e médios agricultores, que têm dificuldade de acesso a *softwares* mais avançados, visto que a única necessidade é ter uma conexão com a Internet, logo, poderá realizar análises e melhorar o seu planejamento agrícola.

Palavras-Chave: dados meteorológicos, estações pluviométricas.

Referências Bibliográficas

ANDRADE, L. S. et al. Aperfeiçoamento do Sistema Meteoro para Gerenciamento de Dados Pluviométricos no Rio de Janeiro. In: III Reunião Anual de Iniciação Científica da UFRRJ - III RAIC, Seropédica/RJ, 2015.

INED - Institut National D'étude Démographique. Disponível em: < https://www.ined.fr/en/everything_about_population/graphs-maps/interpreted-graphs/growth_population_2050/ />. Acesso: 25 de julho de 2019.

TECNOLOGIA APLICADA À SAÚDE

Lucas Costa Xavier¹; Ariel Mota de Carvalho² & Raimundo José Macário Costa³

1. Discente do curso de Sistemas de Informação UFRRJ; 2. Discente do curso de Sistemas de Informação UFRRJ; 3. Professor do Departamento de Computação-DECOMP/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

“Mal do século” é uma expressão, original de Chateaubriand (em francês: mal du siècle), utilizada como um tópico literário para se referir à crise de crenças e valores desencadeada na Europa no século XIX, comumente no contexto do romantismo. Trata-se de um sentimento de decadência, tédio, desilusão e melancolia, da inutilidade e futilidade da existência, que afetou profundamente os jovens e permeou na literatura da época. “A depressão vitimiza cerca de 350 milhões de pessoas no mundo, um fenômeno global caracterizado pelo estado integral de melancolia, tristeza e total desprovemento de felicidade” (Nota divulgada pela Organização Mundial da Saúde OMS). Nesse sentido, especialistas indicam que a psicoterapia é essencial para o tratamento, pois o psicólogo auxilia na reestruturação mental do indivíduo, compreensão da sua situação e resolução de conflitos. Nesse contexto nossa pesquisa visa atender as pessoas que necessitam de terapia através de uma plataforma online, fazer com que os psicólogos possam prestar um atendimento mais fiel possível do atendimento tradicional de forma remota. Nesse ambiente computacional, os profissionais poderão oferecer seus serviços e configurar seus “consultórios online” de forma a especificar melhor como trabalham para que os clientes possam escolher e marcar suas consultas. O Conselho Federal de Psicologia em maio de 2018, publicou a Resolução onde atualiza a mesma sobre o atendimento psicológico on-line e demais serviços realizados por meios tecnológicos de comunicação a distância, possibilitando assim o desenvolvimento dessa pesquisa em questão. Segundo Wagner, Horn & Maercker (2013) da Universidade de Zurique citado por Andreia Cabral Psicóloga Clínica e da Saúde (2016), em sua investigação concluiu que a psicoterapia à distância é tão eficaz quanto a presencial em casos de depressão moderada. 62 pessoas participaram neste estudo, divididos em 2 grupos: o que teria terapia à distância e o que teria terapia presencial. No final dos tratamentos, os níveis depressivos de ambos os grupos diminuiram significativamente e o grau de satisfação com o acompanhamento era igualmente elevado. Desenvolver um ambiente computacional para atendimento de terapia online. Através de pesquisas exploratórias a fim de aprofundar e ganhar familiaridade com a Psicologia e Psicoterapia e suas possíveis aplicações, com o empenho em buscar pesquisas bibliográficas e citações relevantes que facilitam o entendimento do assunto abordado. Utilizando-se de abordagens qualitativas, mediante entrevistas e estudos culturais para a análise dos dados. Por intermédio de pesquisa descritiva foram feitas análises detalhadas e minuciosa do objeto de estudo. Utilizando-se de abordagens Quali-quantitativa mediante a questionários e estudo de casos. Esse trabalho encontra-se no processo de desenvolvimento e ao final espera-se atingir os objetivos de que os possíveis usuários, no caso, psicólogos e psicoterapeutas, possam utilizar a plataforma da melhor forma, a fim de proporcionar um ambiente computacional de fácil entendimento, fácil acesso, seguro e inclusivo para o atendimento de terapia online, sempre respeitando os padrões de atendimento terapêutico, a privacidade dos pacientes, profissionais e os padrões de Interação Humano-Computador.

Palavras-chave: Desenvolvimento; Psicologia; Online.

Referências Bibliográficas

- Conselho Federal de Psicologia. In: Resolução CFP nº 11/2018. Atualização da norma anterior (Resolução nº 011/2012). Em vigor desde 10 de novembro de 2018.
François-René de Chateaubriand. Mal do século. In: René, “mal du siècle”, 1802.
Shekhar Saxena, diretor de departamento de Saúde Mental e Abuso de Substâncias da Organização Mundial da Saúde(OMS)

PRODUTOS PRIMÁRIOS DA GLICINA NO MEIO INTERESTELAR (ISM): UMA PROPOSTA DE MECANISMO DE DECOMPOSIÇÃO**Diego Nascimento de Jesus¹, Neubi Francisco Xavier Junior² e Glauco Favilla Bauerfeldt³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Ciências Biológicas, ICBS/UFRRJ; 2. Doutorando do Programa de Pós-Graduação em Química, IQ/UFRRJ; 3. Professor do DQF/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Atualmente, o estudo de fenômenos interestelares vem acompanhado de novos questionamentos que movem a comunidade científica. Uma destas questões, ainda em estudo, lida com a relação entre a detecção de aminoácidos em amostras de meteoritos e cometas (KVENVOLDEN et al., 1970) com o surgimento da vida na Terra prebiótica. A presença da glicina, o mais simples dos aminoácidos, no ISM é muito estudada, tendo sido crescente o número de trabalhos propondo rotas de formação para tal (GARROD, 2013). Em trabalhos anteriores, uma descrição teórica da decomposição da glicina e seus caminhos de reação preferenciais, assim como seus principais produtos e coeficientes de velocidade foram reportados (XAVIER JUNIOR, BAPTISTA & BAUERFELDT, 2019). Neste trabalho, temos por objetivo os produtos secundários da decomposição e a proposição, a partir dos dados obtidos, de um mecanismo de reação com os coeficientes de velocidades. Cálculos de otimização geométrica e de frequências vibracionais das espécies envolvidas, bem como os pontos de sela das reações e seus respectivos caminhos de reação, obtidos pelo algoritmo IRC (*intrinsic reaction path*), foram realizados no programa *Gaussian09*. Foi adotada a Teoria do Funcional de Densidade (DFT), especificamente utilizando o funcional M06-2X, com a base aug-cc-pVTZ. Pontos de sela foram identificados para as reações e reações de dissociações foram caracterizadas por potencial e Morse. As reações estudadas e seus respectivos valores de diferença de energia (ΔE) entre o ponto de sela e os reagentes, assim como a diferença de energia das dissociações, são: **R1**, $\text{CH}_2\text{NH}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{NH}$, 43,16 kcal mol⁻¹; **R2**, $\text{CH}_3\text{NH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{NH}$, 76,42 kcal mol⁻¹; **R3**, $\text{CH}_3 + \text{NH} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{N}$, 2,53 kcal mol⁻¹; **R4**, $\text{CH}_3\text{NH}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{NH}_2 + \text{H}$, 90,30 kcal mol⁻¹; **R5**, $\text{CH}_3\text{NH}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_2\text{NH}$, 103,85 kcal mol⁻¹; **R6**, $\text{NCH}_2\text{NH}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{CH}_2\text{NH}$, 65,21 kcal mol⁻¹; **R7**, $\text{CH}_2\text{NH} \rightarrow \text{HCN} + \text{H}_2$, 96,10 kcal mol⁻¹; **R8**, $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}$, 105,17 kcal mol⁻¹; **R9**, $\text{NH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{NH} + \text{H}$, 90,31 kcal mol⁻¹; **R10**, $\text{HOOC} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$, 26,36 kcal mol⁻¹; **R11**, $\text{HOOC} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$, 0,29 kcal mol⁻¹. O mecanismo de decomposição proposto parte dos produtos primários da glicina NH_3 , CH_3NH_2 e HOOC . Dentre as reações estudadas, **R11**, que gera os produtos CO_2 e H , é a mais favorável com uma diferença de energia de apenas 0,29 kcal mol⁻¹. Outros caminhos de reação propostos geram outros produtos também identificados no ISM (HCN e NH), complementando assim, o mecanismo de decomposição da glicina no ISM.

Palavras chave: Glicina, Decomposição, Mecanismo de Reação, Espaço Interestelar, ISM.

Referências Bibliográficas

- KVENVOLDEN, K.; LAWLESS, J.; PERING, K. et al. *Nature*, 1970, 228, 923–926.
GARROD, R.T. *ApJ*, 2013, 765:60.
XAVIER JUNIOR, N. F.; BAPTISTA, L.; BAUERFELDT, G. F. *MNRAS*, 2019, 486, 2153-2164.

O PROBLEMA MATEMÁTICO DA RADIOCIRURGIA POR GAMMA KNIFE: UMA FORMULAÇÃO COMO O PROBLEMA DA CLIQUE MÁXIMA EM UM GRAFO**Rafael Santos de Oliveira¹ & Renan Vicente Pinto²**

1. Discente do curso de Matemática, ICE/UFRRJ; 2. Professor do DEMAT/ICE/UFRRJ

Grande Área: Ciência Exatas e da Terra**RESUMO**

O tratamento pela radiocirurgia conhecida como *Gamma Knife* é um método não invasivo para tratar tumores no cérebro. O tratamento é realizado por emissões de radiação gama (conhecidas como *shots*) que queimam o tecido cerebral em uma região aproximadamente esférica. A posição e o tamanho desses *shots* podem ser ajustados através de equipamentos. Combinando diversos *shots*, é possível recobrir todo o volume cancerígeno, a fim de se obter a queima total desse tumor. O processo como um todo depende bastante tempo. Em parte, devido ao alto peso dos equipamentos, que são manipulados com o auxílio de máquinas, e devido também ao fato de que, após cada *shot*, deve-se ajustar o equipamento aparafusado na cabeça do paciente, para que não haja erro de precisão na localização do shot. Para muitos pacientes, esse processo torna-se bastante tedioso e demorado. Além disso, a qualidade do plano de tratamento depende altamente da experiência e paciência dos profissionais responsáveis. Por essas razões, há o desejo de automatização do processo de planejamento do tratamento via *Gamma Knife*, objetivando encontrar um bom recobrimento da região do tumor e acelerar o processo de planejamento do tratamento. Otimizar a quantidade de *shots*, a posição dos seus centros e cada um de seus tamanhos pode reduzir as não-homogeneidades e evitar que tecidos saudáveis sejam afetados pela irradiação, além de alcançar o recobrimento desejado. O problema matemático associado é o de recobrimento de sólidos por esferas de diferentes raios. As variáveis do problema são a quantidade de esferas (*shots*), a posição de seus centros, seus raios e o peso (importância) de cada uma das esferas na solução. Esse problema é naturalmente formulado como um modelo de programação não-linear e não-convexo. Utilizando técnicas de discretização, pode-se reformular esse problema como um modelo de programação linear inteira que consiste em encontrar a clique de peso máximo em um grafo. Devido ao enorme tamanho do grafo que resulta da reformulação, métodos exatos para encontrar a clique de peso máximo são ineficientes, visto que essa classe de problemas é conhecida na literatura como sendo de difícil resolução. Implementamos um algoritmo baseado no esquema de *Branch-and-Cut* que é capaz de encontrar boas soluções viáveis em tempos curtos, quando comparados com resolvedores atuais existentes.

Palavras chave: Clique de Peso Máximo; Otimização; Gamma Knife; Branch-and-Cut**Referências Bibliográficas**LIBERTI, L., MACULAN, N., ZHANG, Y. Optimal configuration of gamma ray machine radiosurgery units: the sphere covering subproblem. *Optimization Letters* (2009), Volume 3, pp 109-121.

PINTO, R. O Problema de Recobrimento de Sólidos por Esferas de Diferentes Raios. Tese de Doutorado, PESC/COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro.

SÍNTESE DE DERIVADOS 3-AMINO-1,2,4-TRIAZOIS-N-1,5-TRISUBSTITUÍDOS
COMO INIBIDORES DE COLINESTERASES PARA O TRATAMENTO DA DOENÇA DE
ALZHEIMER Bruno Alves Pinheiro¹; Daiana Portella Franco²; Sabrina Neves Santos²; Luciana
Luiz de Azevedo² e Arthur Eugen Kümmerle³

1. Discente do curso de Farmácia, ICBS/DCFAR/UFRRJ; 2. Doutoranda do Programa de Pós-Graduação em Química; 3. Professor do IQ/DQO/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A Doença de Alzheimer (DA) é a principal demência neurodegenerativa, que se caracteriza por deterioração da função cognitiva, de modo superior ao esperado ao envelhecimento normal. Consiste em problemas de memória, orientação, compreensão, aprendizagem, linguagem, causa dificuldade em realizar tarefas diárias e influencia diretamente a vida de cuidadores e familiares dos portadores desta síndrome. É conduzida por múltiplos fatores deletérios às funções neuronais, porém a origem desses fatores ainda é indeterminada. Dentre os estudos de causas para a evolução da síndrome no organismo são exemplos: Deposição de peptídeos β -amilóide, filamentos neurofibrilares insolúveis associados a proteína *tau* (*PTau*); neuroinflamação de células da Glia; Perda sináptica e diminuição da atividade colinérgica neuronal e dos níveis do neurotransmissor acetilcolina. Uma das abordagens terapêuticas para o tratamento da DA é aumentar a disponibilidade de acetilcolina nas fendas sinápticas, com a inibição de enzimas colinesterase. Portanto, este estudo propõe a síntese de 3-amino-1,2,4-triazóis como inibidores de colinesterase, baseado em bioisoterismo não-clássico de substituição de triazinas por 3-amino-1,2,4-triazóis e de hibridação molecular com o fármaco clássico donepezil (inibidor de colinesterase atualmente comercializado para tratamento sintomático da DA). A síntese dos aminotriazóis envolveu diversas etapas, começando pela síntese da S-metil-tiouréia, através de uma reação de substituição nucleofílica bimolecular com a tiouréia e iodeto de metila (R=96%). Em seguida, a S-metil-tiouréia foi protegida com dicarbamato de diterc-butila (Boc) em meio básico (R= 84%). Posteriormente, derivados acetilados foram sintetizados via substituição nucleofílica acílica, a partir dos compostos protegidos, utilizando os cloretos de benzoila portando diferentes substituintes (X=Cl; 4MeO; 3,4,5-triMeO; 4-NO₂; 2-piridina) (R= 45% - 68%). Para formar o amino-triazol, os compostos anteriores contendo substituintes X foram reagidos com hidrazinas portadoras de substituintes Y (Y= H; 4-F; 4-NO₂; 4-SO₂CH₃), obtendo 8 compostos combinados na forma de sólidos brancos e amarelados com bom rendimento (R= 61% - 75%). As etapas seguintes foram de alquilação, a partir de 1,3-dibromo propano (R= 73% - 88%) e aminação utilizando benzil piperazina (R= 60% - 79%). Por fim a última etapa, foi a desproteção do grupo Boc em meio ácido, obtendo excelentes rendimentos (R= 86% - 92%). Todos os produtos foram caracterizados por RMN ¹H e ¹³C, e ensaiados utilizando método adaptado de Ellman para determinar a atividade anticolinesterásica, frente as enzimas Acetilcolinesterase e Butirilcolinesterase. Os resultados observados foram bons, apresentando Cl₅₀ frente a AChE entre 0,38-2,16 μ M e BChE entre 3,35-20,17 μ M, no qual o composto mais ativo (X=H; Y=NO₂) apresentou Cl₅₀ igual a 0,38 e 5,82 μ M frente AChE e BChE, respectivamente, e seletividade de 15 vezes. A fim de otimizar as atividades enzimáticas, utilizou-se a ferramenta de modelagem molecular teórica para analisar interações entre os amino-triazóis com o sítio ativo da enzima, para desenhar compostos que possuam maior interação. Foram obtidos valores (Score: 107,39 – 88,87) maiores que o composto de referência sem substituintes 86,53, o que mostra, teoricamente, um aumento de interação com a AChE. Como perspectivas futuras estão finalizar a síntese de compostos da nova série, realizar ensaios de perfil cinético frente a enzima, ensaios antioxidantes dos compostos obtidos, avaliar o efeito dos mesmos sobre agregados de peptídeo β -amilóide e realizar ensaios de neurotoxicidade.

Palavras-chave: Alzheimer; Triazóis; Colinesterase.

Referências Bibliográficas

- SINHA, Anshuman; TAMBOLI, Riyaj S.; SETH, Brashket. et al. Neuroprotective Role of Novel Triazine Derivatives by Activating Wnt/ β Catenin Signaling Pathway in Rodent Models of Alzheimer's Disease. *Mol Neurobiol*, New York, 15 set 2014
- BARREIRO, Eliezer J; FRAGA, Carlos Alberto Manssour. *Química Medicinal: As bases moleculares da ação dos fármacos*. 3ª . ed. Porto Alegre: Artmed, 2015.
- FERRI, Cleusa P.; PRINCE, Martin; BRAYNE, Carol. Global prevalence of dementia: a Delphi consensus study. *Lancet*, [S. l.], 17 dez. 2005.

ESTUDO DO MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO USANDO A TEORIA DE CAMPO MÉDIO

Michel Xisto Silva Silveira¹; Christopher Thomas²

1. Discente do Curso de Física, DEFIS/UFRRJ; 2. Professor do DEFIS/ICE/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo apresentar e discutir sobre o Modelo de Ising Ferromagnético. No modelo em questão, temos que em cada sítio da rede, o momento magnético é representado por um spin que pode apontar para cima ou para baixo. A energia é obtida pela interação dos spins com seus vizinhos e o efeito do campo magnético aplicado em cada spin. Na primeira interação, os spins tendem a se alinharem paralelamente entre si quando a interação for negativa e antiparalelamente quando for positiva. Na segunda interação, o efeito do campo magnético aplicado é induzir os spins a se alinharem na sua direção. Analisamos o caso de uma rede de duas dimensões e a relação dos spins com seus primeiros vizinhos, desprezando a interação dos segundos vizinhos e os subsequentes. A magnetização do sistema varia entre valores de -1 a 1 e o seu módulo nos diz o quão ordenado o sistema pode estar. Sendo próximo a 0 muito desordenado, com aproximadamente metade dos spins apontados para cima e a outra metade para baixo, e perto de 1 muito ordenado, com a maioria dos spins apontando na mesma direção. O sinal da magnetização nos diz se os spins da rede estão apontando para cima, no caso do positivo, e para baixo, no negativo. Para esse estudo, utilizamos a Teoria de Campo Médio, que considera que cada spin da rede está na presença de um campo magnético efetivo gerado pelo demais spins, sendo este campo proporcional à magnetização média do sistema, e somente parte da flutuação de cada spin em torno do seu valor médio é considerada. A partir disso, calculamos a energia e a entropia em função da magnetização, chegando então a outro potencial termodinâmico importante neste problema, a energia livre de Helmholtz. Minimizando a energia livre, chegamos à magnetização como uma função autoconsistente. Foram usados alguns casos para entender melhor o comportamento, com o campo aplicado nulo e também com valores maiores que zero, em ambas situações com temperatura variando. Foi possível demonstrar transições, obter a temperatura crítica e descrever diagramas de fase, além de obter o calor específico e a susceptibilidade magnética. Inclusive, visualizamos a transição de fase de primeira ordem com o campo magnético aplicado quando a temperatura for menor que a temperatura crítica e de segunda ordem quando estamos exatamente na temperatura crítica. Comparamos os resultados deste trabalho com as referências e os resultados obtidos estão de acordo com os da literatura. A solução da equação autoconsistente foi realizada numericamente, utilizando a linguagem de programação Python e as figuras geradas pelo programa Gnuplot.

Palavras-chave: Teoria de Campo Médio; Modelo de Ising; Ferromagnetismo.

Referências Bibliográficas

- LÍBERO, Valter L. De Ising a Metropolis. *Revista Brasileira de Ensino de Física*. São Carlos, vol. 22, no. 3, Setembro 2000.
- SELINGER, J. *Introduction to the Theory of Soft Matter: From Ideal Gases to Liquid Crystals*. Springer International Publishing Switzerland, 1st ed, 2016. p. 7-24.

**MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO UTILIZANDO O ALGORITMO DE METROPOLIS
COM O METODO MONTE CARLO****Alan Leal Cecilio¹; Christopher Thomas²***1. Discente do curso de Física; DEFIS/UFRRJ; 2. Professor do DEFIS/ICE/UFRRJ. Grande*Área: Ciências Exatas e da Terra**RESUMO**

O objetivo deste trabalho é uma revisão do modelo de Ising usando o método Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis. O modelo de Ising considera uma rede ordenada onde em cada sítio há um momento magnético associado ao spin. O spin pode estar apenas nas configurações para cima ou para baixo. A energia do sistema envolve contribuições da interação entre os spins dos sítios vizinhos da rede e o efeito do campo magnético externo. O caso estudado neste trabalho envolve a interação ferromagnética entre os spins vizinhos mais próximos, que favorece o alinhamento paralelo entre os spins. O efeito do campo magnético é induzir os spins a se alinharem no mesmo sentido do campo aplicado. É estudado uma rede quadrada bidimensional com condições de contorno periódicas, onde os spins da borda da rede são forçados a interagirem com os spins da borda geometricamente oposta. Com a descrição é possível definir o parâmetro de ordem magnético, a magnetização, que é obtida pela diferença do número de spins para cima e o número de spins para baixo. A magnetização possui seus valores extremos em 1 e -1. Nestas situações, todos os spins encontram-se alinhados paralelamente. Quando a magnetização é zero, os spins estão alinhados antiparalelamente. Os valores intermediários significam que parte dos spins estão em um sentido e os restantes no sentido oposto. A temperatura crítica é definida quando ocorre uma transição de fase entre o estado ordenado ferromagnético e o estado desordenado paramagnético, este último de magnetização nula. A temperatura crítica estimada é fortemente dependente do tamanho da rede. O método Monte Carlo é utilizado para levar o sistema ao limite termodinâmico, sendo o número de passos diretamente proporcional e o tamanho da rede inversamente proporcional a probabilidade do sistema estar em equilíbrio. O método Monte Carlo consiste em: iniciar a configuração do spin de cada sítio aleatoriamente; escolher de forma aleatória um sítio e mudar a configuração do spin selecionado. Se a inversão for energeticamente favorável ela é realizada, se não, ela é feita com uma probabilidade definida pelo algoritmo de Metropolis, que é um algoritmo de rejeição e seleciona apenas as boas amostras de uma função distribuição de probabilidade; O processo é realizado em média sobre todos os sítios da rede. Ao final, é realizada a média sobre vários processos e são calculados a energia, a magnetização, o calor específico e a susceptibilidade magnética. Os resultados obtidos, como o diagrama de fase que separa uma fase ordenada de uma fase desordenada, estão de acordo com os dos materiais bibliográficos de referência. Para resolver o problema foi escrito um código numérico utilizando a linguagem Python e o programa Gnuplot foi utilizado para a apresentação das figuras.

Palavras chave: Modelo de Ising, Método Monte Carlo, Ferromagnetismo.**Referencias Bibliográficas**

SELINGER, J. **Introduction to the theory of soft matter: From ideal Gases to liquid Crystals** Springer International Publishing Switzerland, 1st ed, 2016. p. 7-24.

KOTZE, Jacques. **Introduction to Monte Carlo methods for an Ising model of a ferromagnet.**[2008]. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/0803.0217>. Acesso em: 13/08/2019

Sistema para análise de desempenho da atividade física**Renan Carlos Silva de Souza¹; Raimundo José Macário Costa²;***1. Discente do Curso de Sistemas de Informação, PAP/UFRRJ; 2. Professor do ICE/PAP/UFRRJ.*

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A tecnologia, que está cada vez mais presente na vida das pessoas, invadiu o mundo dos esportes e chegou para ficar. Novos sistemas e aplicativos oferecem uma gama de informações referentes à atividade física praticada. Por meio delas, é possível encontrar os aspectos que contribuem ou não para o rendimento físico do praticante, permitindo que o profissional da área de Educação Física possa criar estratégias eficientes. Dentro desse contexto, os aplicativos *fitness* vêm conquistando cada vez mais espaço na rotina das pessoas devido à comodidade e o baixo custo que eles proporcionam. A aceitabilidade das pessoas em relação ao uso dos *smartphones* nas suas vidas, bem como o crescente interesse por parte dos usuários em cuidar de si no mundo contemporâneo estimulam o desenvolvimento de produtos e serviços que possibilitem que o indivíduo saia da inércia. De acordo com o relatório do Estado de Serviços Móveis (*App Annie*, 2018), elaborado pela consultoria especializada em dados sobre aplicativos para dispositivos móveis, o Brasil é o 5º país do mundo em ranking de uso diário de celulares. Uma evidência disso é o crescente interesse dos usuários em adquirir aplicativos voltados para a área da saúde e *fitness*. Os dados da *Flurry (Flurry Analytics Blog*, 2017) mostram que os usuários dos aplicativos desta categoria são altamente comprometidos com seus aplicativos, possuindo altas taxas de retenção com todas as categorias. Fortalecendo essa abordagem, um estudo da empresa alemã *Freeletics* sobre o Mapa Nacional do Impacto da Tecnologia no Esporte e Sedentarismo apresenta um cenário promissor. O resultado mostrou que 74% dos brasileiros que não praticam exercícios com frequência acreditam que poder se exercitar em qualquer hora ou lugar seria muito mais estimulante do que as fórmulas padrões do mercado. A falta de motivação próprio foi elencada como principal justificativa. Diante disso, 40% dos entrevistados prefeririam seguir os exercícios propostos por um aplicativo do que frequentar uma academia. Para desenvolver este projeto, seria necessário um levantamento sobre o interesse dos profissionais de educação física em participar de um sistema como esse, sendo necessário investigar como seria a adesão deles à ideia proposta. A aplicação a ser desenvolvida deve permitir que o usuário tenha autonomia para decidir qual atividade física ele gostaria de realizar, e que os seus resultados sejam analisados por um profissional capacitado, gerando um *feedback* ao usuário. Este trabalho apresenta uma proposta de elaboração de um aplicativo que acompanhará a evolução do usuário durante os seus treinos, e também permitirá uma interação com profissionais da área de Educação Física com o objetivo de potencializar os resultados e orientar o usuário em seus treinos, atuando como uma espécie de Analista de Desempenho Esportivo.

Palavras-chave: Análise de Desempenho; *fitness*; aplicativos.**Referências Bibliográficas**ANNIE, APP. Estado de Serviços Móveis: **Average Daily Hours Spent Per Device on Mobile**. 2018.KESIRAJU, Lali. **Health & Fitness app users are going the distance with record-high engagement**. 2017.GUSMÃO, G. **Mapa Nacional do Impacto da Tecnologia no Esporte e Sedentarismo**. Disponível em: <<https://www.freeletics.com/pt/>>.

CASA DOS ESPELHOS: UM JOGO DIGITAL PARA O ENSINO DE ÓPTICAAna Clara Correa da Silva¹; Raimundo José Macário ²

1. Discente Orientado do Curso de Sistemas de Informação DECOMP/ICE/UFRRJ; 2. Professor Doutor do DECOMP/ICE/UFRRJ;

Grande Área: Ciências Exatas

Este artigo tem como objetivo descrever um jogo digital criado a partir de técnicas computacionais com a finalidade de promover o ensino de conceitos da óptica, especificamente das leis da reflexão de raios de luz. De acordo com a Base Nacional Comum Curricular (BNCC) para o ensino fundamental, já a partir do primeiro ano o aluno deve ser capaz lidar com problemas geometria e grandezas espaciais, levando profissionais da educação a buscar estratégias para transmitir o saber. Em revisões sistemáticas na área do ensino da Física como a de Nardi (2016) demonstrou que houve uma melhoria significativa no ensino da Física no Brasil para os alunos do nível fundamental e médio quando professores passaram a utilizar em sala de aula equipamentos laboratoriais e juntamente a ensaios experimentais, ressaltando mais uma vez a importância como a visualização de um conceito afeta positivamente no aprendizado. Na revisão de Savi (2008) jogos digitais ganha destaque no processo de aprendizagem por conta de sua presença no dia a dia dos alunos e do engajamento provocado. Jogos de um modo geral permitem que a abordagem do processo educacional se desprenda da memorização conteudista e avance para um aprendizado construído através da experiência (PAULA, 2016). O jogo trata-se de um *puzzle*(estratégia) 2D contendo quatro agentes controlados pelo usuário: três espelhos e um raio laser. O desafio proposto ao usuário é de que ele mova os espelhos até o ponto que ele julgar ser ideal para que, ao disparar o raio laser, estes estejam na posição correta para refletir o raio nos três espelhos e assim ganhar o jogo. O jogo disponibiliza três janelas contendo o ângulo de cada espelho respectivamente, induzindo o aluno a raciocinar sobre o caminho matemático que um raio de luz percorre. Outro elemento visual explorado é o rastro deixado pelo raio de luz para exemplificar o fenômeno físico da reflexão e suas leis além de um contador de tentativas para estimar o desenvolvimento do usuário até o alcance do objetivo e também para usar a competitividade estimulada como um motor de engajamento. O jogo foi desenvolvido utilizando o Scratch, que é um *software* livre que se utiliza de blocos lógicos, e itens de som e imagem, para a criação de histórias interativas, jogos e animações. O Scratch é um projeto do grupo Lifelong Kindergarten no Media Lab do MIT (Instituto de Tecnologia de Massachusets), onde foi idealizado por Mitchel Resnick. Durante o desenvolvimento requisitos de qualidade foram levantados e observados contribuir com a faceta pedagógica da experiência. O jogo permite uma percepção evolutiva a respeito do comportamento de raios de luz por conta da interação proposta de tentativa-erro, que através dos rastros deixados cria uma atmosfera de aprendizagem ativa quando o usuário começa a criar e testar teorias para atingir os objetivos. Dada a contribuição pedagógica trazida com o jogo como objetivo futuro pretende-se realizar testes de campo levando o jogo para alunos de escolas públicas avaliar suas experiências com o jogo.

Palavras-chave: Jogos Educativos; Óptica; Jogos Digitais.

Referências Bibliográficas

- NARDI, Roberto. Memórias da educação em ciências no Brasil: a pesquisa em ensino de física. *Investigações em Ensino de Ciências*, v. 10, n. 1, p. 63-101, 2016.
- SAVI, Rafael; ULBRICHT, Vania Ribas. Jogos digitais educacionais: benefícios e desafios. *Renote*, v. 6, n. 1, 2008.
- PAULA, Bruno Henrique de; VALENTE, José Armando. Jogos digitais e educação: uma possibilidade de mudança da abordagem pedagógica no ensino formal. *Revista Ibero-americana de Educação*, v. 70, n. 1, p. 9-28, 2016.

ANÁLISE DO POTENCIAL DE DADOS AEROGAMAESPECTROMÉTRICOS NO MAPEAMENTO PRELIMINAR GEOLÓGICO DA REGIÃO DE NOVA FRIBURGO - RJ
Blenda Pereira Bastos¹; Helena Saraiva Koenow Pinheiro²;

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geologia, UFRRJ; 2. Professor Adjunto Departamento de Solos-IA, UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O estudo indireto da superfície terrestre por técnicas de sensoriamento remoto tem se tornado um método de pesquisa crescente devido a sua capacidade de detectar e analisar objetos de maneira não invasiva e dar suporte de forma preliminar ao trabalho de campo na escolha de alvos de interesse. A aerogamaespectrometria se insere nesse contexto e é caracterizada pela prospecção de elementos radioativos (K, Th e U) através da radiação gama proveniente de diferentes tipos de rocha e solos. Desta forma, a pesquisa teve como objetivo o uso desses dados para análise do potencial para caracterização litológica e geomorfológica da região de Nova Friburgo do Estado do Rio de Janeiro. O Banco de Dados gamaespectrométricos pré-processados foram disponibilizados pela CPRM (Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais) e são provenientes do Projeto Aerogeofísico 1117 - Rio de Janeiro realizado por aerolevantamento de altura média de 100 m, direção das linhas de voo N-S com espaçamento de 500 m e linhas de controle de direção E-W com espaçamento de 10.000 m (CPRM, 2012). Os dados foram importados para o programa Oasis Montaj™ (Geosoft) v. 9.4, cuja licença utilizada foi concedida por parceiros do projeto (Laboratório de Pesquisas em Geofísica Aplicada, LPGA – UFPR), e interpolados pelo método Mínima Curvatura para a geração de mapas de K (%), eTh (ppm) e eU (ppm), razões entre os elementos e Contagem Total (CT) com resolução espacial de 120 m e, adicionalmente, mapa de composição ternária (RGB) dos três elementos (K, eTh e eU). No software ArcGIS™ Desktop (Esri) v.10.3, licença adquirida pelo Departamento de Solos (Instituto de Agronomia – UFRRJ), foi feita a organização do banco de dados, geração do Modelo Digital de Elevação (MDE), perfis topográficos e análise do mapa geológico (1:400.000) (CPRM, 2016) e das folhas Nova Friburgo e Casimiro de Abreu (1:100.000) disponibilizados pela CPRM. O MDE foi obtido por interpolação a partir da base cartográfica vetorial do Estado do Rio de Janeiro (1:25.000), disponibilizada pelo Instituto Brasileiro de Geografia e estatística (IBGE) em parceria com a Secretaria de Estado do Ambiente (SEA). Como resultado, a partir da interpretação qualitativa, foi possível observar boa correlação dos dados gama com as unidades geológicas locais, principalmente em áreas de afloramento de rocha onde são destacados altos valores dos três elementos: Granitos da Suíte Nova Friburgo. Como também a sua aplicabilidade na interpretação geomorfológica e processos da dinâmica de paisagem a partir do entendimento da mobilidade e enriquecimento relativo dos três radionuclídeos: Suítes Cordeiro, Imbé, Trajano de Moraes e Serra dos órgãos, Complexo Rio Negro e Unidade São Fidélis.

Palavras-chave: aerogamaespectrometria, mapeamento, integração geológica-geofísica

Referências Bibliográficas

CPRM - Companhia de Pesquisa e Recursos Minerais. Mapa geológico e recursos minerais do estado do Rio de Janeiro, disponível no GEOBANK (<http://geobank.cprm.gov.br>). Belo Horizonte: CPRM, 2016. Escala 1:400.000.

CPRM - Companhia de Pesquisa e Recursos Minerais. Projeto Aerogeofísico Rio de Janeiro - Relatório final do levantamento e processamento dos dados magnetométricos e gamaespectrométricos: Volume 1. CPRM, 2012.

SÍNTESE DE NOVAS DIAMINO-CHALCONAS FLUORESCENTES BASEADAS NO J8, UM INIBIDOR DE EVENTOS FIBRILARES ASSOCIADO À PROTEÍNA PRIÓNICAJulietta Gonçalves Neta¹; Lucas Caruso Araujo Bezerra²; & Arthur Eugen Kümmerle³*1. Discente do Curso de Engenharia Química, IT/UFRRJ; 2. Mestrando do Programa de Pós-Graduação em Química, PPGQ/UFRRJ; 3. Professor do IQ/UFRRJ.*Grande Área: Ciências Exatas e da Terra**RESUMO**

As doenças relacionadas a eventos de enovelamento incorreto de proteínas são uma família de desordens neurológicas debilitantes, degenerativas, progressivas, fatais e atualmente intratáveis. Na doença priônica, a proteína priônica normal (PrP^C) é convertida à isoforma infectante (PrP^{Sc}) rica em folhas β , de difícil degradação por proteases e propensas a formar agregados fibrilares responsáveis pela neurotoxicidade da isoforma patogênica. Embora muitos compostos tenham demonstrado inibir o processo de conversão à PrP^{Sc}, até o momento não há terapia eficaz para esse tipo de doença visto que a maioria dos compostos estudados *in vitro* possuem perfil farmacocinético desfavorável (WILLE; REQUENA, 2008). Este trabalho propõe a síntese de novos compostos baseados no J8, uma chalcona que apresentou atividade anti-príon com potência de 1 μ M, de forma que sejam conservados os grupos farmacofóricos trimetoxila do anel A e *N*-aril do anel B, que se mostraram importantes para atividade, e propondo derivatizações na unidade amino visando melhores resultados (FERREIRA et al, 2014; FERREIRA et al, 2018). A primeira série de compostos foi sintetizada com rendimentos satisfatórios através da condensação em meio metanólico alcalino da 2,4,5-trimetoxi-acetofenona com 4-bromobenzaldeído levando à formação da 2,4,5-trimetoxi-4'-bromo-chalcona com rendimento de 85%. Posteriormente a 2,4,5-trimetoxi-4'-bromo-chalcona foi acoplada em diversas aminas através da reação de *N*-arilação de Buchwald-Hartwig, na presença do conjunto de paládio, base e ligante adequados dando origem à série de amino-chalconas, que foram caracterizadas por RMN ¹H e ¹³C, com rendimentos entre 29-71%. Estudos teóricos de ancoramento molecular possibilitaram a melhor compreensão do sítio de ligação da proteína priônica e foi possível o planejamento de uma nova série de diamino-chalconas. A síntese da segunda série foi dividida em dois blocos: o primeiro contendo a mesma 2,4,5-trimetoxi-4'-bromo-chalcona utilizada na série anterior e o segundo contendo as diaminas obtidas através da síntese de Gabriel. A primeira etapa da construção do segundo bloco foi realizada através da reação entre a ftalimida e 1,2-dibromoetano formando a ftalimida alquilada com 74% de rendimento. A segunda etapa consistiu na reação de SN₂, entre a ftalimida alquilada e a morfolina formando a *N*-alquilamina-ftalimida com 45% de rendimento e posteriormente novas aminas secundárias serão utilizadas nesta mesma reação. Em posse de diversas *N*-alquilamina-ftalimidadas, estas serão submetidas à reação de desproteção da ftalimida com hidrazina em etanol, levando à formação das diaminas finais do segundo bloco. Com ambos os blocos sintetizados estes serão acoplados através da reação de *N*-arilação de Buchwald-Hartwig formando assim os compostos finais da segunda série. Após a síntese completa da segunda série serão realizados testes de avaliação das atividades como inibidores de eventos fibrilares para constatação da atividade antipríon dos compostos aqui planejados.

Palavras-chave: Amino-chalcona; proteína priônica; Buchwald-Hartwig,**Referências Bibliográficas**

- WILLE, H., REQUENA, J. R. The Structure of Human Prions: From Biology to Structural Models - Considerations and Pitfalls. **Pathogens**, 7, 20, 2008.
- FERREIRA, N. C. et al. Anti-prion activity of a panel of aromatic chemical compounds: *in vitro* and *in silico* approaches. **Plos One**, 9, e84531, 2014.
- FERREIRA, N. C. et al. A promising antiprion trimethoxychalcone binds to the globular domain of the cellular prion protein and changes its cellular location. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 62, n. 2, p. e01441-17, 2018.

ELABORAÇÃO DE METODOLOGIA PARA A CONSTRUÇÃO DE SISTEMAS MICROFLUÍDICOS PARA ANÁLISE POR INJEÇÃO EM FLUXO

Gabriel Martins Viegas¹, Tatiane Félix de Araújo Oliveira², Evelton Alves Casartelli³

1. Mestrando do PPGQ-UFRRJ; 2. Aluna do Curso de Química Industrial – UFRRJ; 3. Professor do DQA/IQ/UFRRJ

Palavras Chave: Injeção em Fluxo, Microfluídica, Dry-Film

RESUMO

Desde sua introdução na Química Analítica em meados dos anos 1970, a Análise por Injeção em Fluxo, comumente denominada de FIA (do nome em inglês: Flow Injection Analysis), tem sido aplicada em diversas áreas, tais como: química ambiental, farmacêutica, industrial, análises clínicas, agronomia, etc. Muitos avanços foram realizados para o aperfeiçoamento da técnica, tais como: os sistemas de zonas coalescentes para a diminuição do volume de reagentes e amostras utilizados, variantes como análise por injeção sequencial, micro injeção em fluxo e etc. Esta última resultou, a partir dos anos 2000, em uma nova área de pesquisa denominada microfluídica. Assim como o surgimento dos microchips que revolucionaram a era da informática e eletrônica na década de 60, a evolução dos sistemas microfluídicos é também uma revolução na área de química analítica. Em 1990, Manz, Graber e Widmer introduziram o conceito de um microssistema de análises totais, ou μ Tas. Os μ Tas eram microssistemas em que várias etapas analíticas eram integradas em um único microchip, como por exemplo: introdução da amostra, pré-tratamento da amostra, reações químicas, separação e detecção dos componentes. Por conta de possuir várias etapas que seriam realizadas em um laboratório, esses dispositivos também são chamados de Lab-on-chip (LOC). (MANZ, GRABER e WIDMER, 1990). Com o avanço da tecnologia dos últimos tempos, e o surgimento de novos materiais, os polímeros começaram a se destacar como substratos para a fabricação dos microchips. Eles apresentam características significativas, como: baixo custo, transparente opticamente, são quimicamente inertes e possuem facilidade de micro fabricação. (VILKNER, JANASEK e MANZ, 2004)

O presente trabalho descreve o desenvolvimento de uma metodologia para a criação de microchips para análise por FIA e montagem de um sistema. Os microchips são fabricados através do processo de litografia macia, onde é feito um molde contendo os canais do sistema, e esse molde é usado para a fabricação dos microchips contendo o circuito FIA. Utilizou-se de polímeros para a construção de todas as peças do Sistema, e apresentou-se uma maneira de fabricação do molde do microchip utilizando o Dry Film, um fotorresiste bastante utilizado para a fabricação de placas de circuito impresso utilizadas em eletrônica.

O Sistema era composto por: uma bomba peristáltica ISMATEC de rotação fixa de 20rpm, com dois canais para a propulsão das soluções, operando com mangueiras capilares Tygon que produziam uma vazão de 100 μ L/min; uma válvula de injeção proporcional, construída em epóxi, contendo uma alça de amostragem de 1 μ L; uma cela de fluxo contínuo onde foram acoplados dois cabos de fibra ótica plástica com 1mm de diâmetro. Um desses cabos estava ligado a um diodo emissor de luz (LED), com máximo de emissão em 474,38 nm, e o outro estava conectado a um mini espectrômetro USB 4000. Todos os componentes foram conectados com mangueiras capilares de teflon.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

MANZ, A.; GRABER, N.; WIDMER, H. M. Miniaturized Total Chemical Analysis Systems: a Novel Concept for Chemical Sensing. **Sensors and Actuators B**, v. 1, p. 244-248, 1990.

VILKNER, T.; JANASEK, D.; MANZ, A. Micro total analysis systems. Recent developments. **Analytical Chemistry**, v. 76, p. 3373-3385, 2004.

MODELAGEM MOLECULAR APLICADA AO DESENVOLVIMENTO DE NOVOS INIBIDORES DE METALOPROTEASES DE LEISHMANIA SPP.

Luan dos Santos Amaro¹; Catarina De Nigris Del Cistia²; Arthur Eugen Kummerle³ & Carlos Mauricio Rabello de Sant'Anna⁴.

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso Química, IQ/UFRRJ; 2. Pós Doutorado do PPGMMC/UFRRJ; 3. Professor do DQO/IQ/UFRRJ; 4. Professor do DQF/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Parasitas do gênero *Leishmania* desenvolveram formas sofisticadas de subverter a resposta imune inata, permitindo sua infecção e propagação nos macrófagos do hospedeiro mamífero. Entre os vários fatores de virulência de *Leishmania* identificados e considerados importantes para o desenvolvimento da leishmaniose estão as metaloproteases (MP) de zinco.¹ Estudos do nosso grupo demonstraram a viabilidade de utilizar ferramentas de modelagem molecular para o planejamento de inibidores eficazes de metaloproteases.² Este trabalho teve como objetivo empregar as mesmas técnicas para identificar inibidores de MP como protótipos de novos fármacos para o tratamento da leishmaniose.

Os compostos testados foram as mesmas semicarbazonas e tiossemicarbazonas (Fig. 1) exploradas no trabalho anterior² e são apresentados na Tabela 1. As estruturas foram preparadas e otimizadas com o método quântico semi-empírico PM6 disponível no Programa Spartan'14 (Wavefunction). Um estudo de docagem dessas estruturas na MP de *Leishmania major*, a única MP do gênero *Leishmania* disponível no *Protein Data Bank* (1LML, resolução de 1,86 Å)³, foi feito com o programa GOLD 5.6 (CCDC). A análise foi feita em triplicata e os melhores resultados de docagem foram obtidos com a função de pontuação *Chemscore*. As soluções selecionadas apresentaram coordenação entre o átomo X (O ou S) dos compostos com o íon catalítico Zn²⁺. As melhores soluções foram usadas como arquivos de entrada para cálculos da entalpia de interação (ΔH_{int}) dos compostos com a enzima, usando-se o método semi-empírico PM7 do programa Mopac2016 (Stewart Comp. Chem.), assumindo-se que no estado inicial o zinco estava coordenado com uma molécula de água.

Os resultados obtidos até o momento indicam que todos os compostos apresentaram ΔH_{int} favorável com a MP de *L. major*, o que sugere que os compostos avaliados são candidatos promissores a inibidores da MP desta enzima.

Tabela 1: Entalpia de interação (ΔH_{int}) dos compostos com a MP de *L. major*, método PM7.

Comp.	X	R ₁	R ₂	ΔH_{int} (kcal/mol)
2a	S	H	H	-20,49
2b	S	H	4-OMe	-26,51
2c	S	H	4-Br	-13,95
2d	S	H	4-Cl	-26,41
2e	S	H	3-OH,4-OMe	-36,92
3a	O	H	4-OMe	-27,95
3b	O	H	4-CO ₂ H	*
3c	O	H	4-Cl	-20,34
3d	O	H	2,4-OMe	-52,51
3e	O	H	4-OH	-10,08
3f	O	H	3-OH,4-OMe	-12,65
3g	O	H	3-OH	-17,70
5a	S	(CH ₂) ₂ CO ₂ H	4-OMe	-25,89
5b	S	(CH ₂) ₃ CO ₂ H	4-OMe	-23,39

*Cálculos ainda não concluídos.

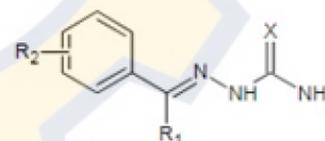


Figura 1: Estrutura geral das semicarbazonas e tiossemicarbazonas

Palavras-chave: Modelagem molecular; metaloprotease; *Leishmania*.

Referências Bibliográficas

ISNARD, A. ET AL., *Frontiers Cell. Infect. Microbiol.*, 2, 72 (2012).
FERREIRA, F. B. ET AL., *ACS Med. Chem. Lett.*, 8, 1136-1141 (2017). SCHLAGENHAUF, E. ET AL. *Structure* 6 1035-1046 (1998).

CARACTERIZAÇÃO PETROGRÁFICA DOS PEPERITOS DA FORMAÇÃO MOSQUITO, BACIA DO PARNAÍBA, NE**José Mateus Alves Matos¹; Sergio de Castro Valente², Artur Corval³& Alan Wanderley Albuquerque Miranda⁴**

1. Bolsista COPPETEC, discente do curso de Geologia/UFRRJ; 2, 3 e 4. Docentes do curso de Geologia/UFRRJ.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A Bacia do Parnaíba está localizada na região Nordeste e abrange parte dos territórios dos estados do Piauí, Maranhão, Pará, Ceará, Tocantins e Bahia. Essa bacia é caracterizada como intracratônica, com parte da sua evolução relacionada à fragmentação do Pangea e do Gondwana. Dois eventos magmáticos de idades distintas são identificados na bacia, quais sejam: Formação Mosquito (TriássicoJurássico) e Formação Sardinha (Cretáceo). A Formação Mosquito é caracterizada por derrames de composição basáltica, concentrados, principalmente na borda oeste da bacia. Esses derrames basálticos geraram interações vulcano-sedimentares, nas quais, um dos produtos é denominado como Peperito. Esses tipos de rochas são formados a partir de uma interação in situ por desintegração de uma intrusão magmática e posterior mistura com sedimentos inconsolidados ou fracamente consolidados, na presença de água; pode-se referir também à misturas similares geradas pelos mesmos processos, operando nos contatos entre lavas e outros depósitos vulcanoclásticos quentes, tais como sedimentos (White et al., 2000). Este trabalho tem como objetivo a descrição detalhada de lâminas petrográficas dos peperitos, visando aperfeiçoar o entendimento de sua gênese, bem como a identificação de texturas de fluxo e caracterização mineralógica da matriz peperítica. Adicionalmente, as descrições permitiram uma correlação com as análises experimentais de tais interações realizadas por Wohletz (2000), que utiliza a teoria da interação do tipo FCI (fuel-coolant interaction) como base para analisar se a transferência de calor entre magma-sedimento ocorre de maneira explosiva ou por um resfriamento gradual. As morfologias de clastos juvenis podem ser identificadas com base nas classificações feitas por de Skilling (2002); texturas em rochas vulcânicas, bem como a mineralogia que preenche vesículas também são objeto de estudo neste trabalho. A metodologia utilizada neste trabalho compreende uma prévia revisão bibliográfica, trabalho de campo realizado por professores da UFRRJ envolvidos no Projeto Basalto para a coleta de amostras utilizadas na confecção de quatro lâminas delgadas, descrição das lâminas com fotomicrografias utilizando o microscópio de luz polarizada com câmera acoplada do Laboratório de Pesquisa do Departamento de Petrologia da UFRRJ. Como resultado, obteve-se a descrição dos peperitos presentes na bacia do Parnaíba relacionados aos basaltos da Formação Mosquito, sendo possível a identificação de texturas de fluxo que registram o momento da interação vulcano-sedimentar, assim como morfologias em clastos juvenis do tipo blocky, fluidal e quebra-cabeça (jigsaw fit). O detalhamento da mineralogia presente na matriz peperítica foi dificultada devido a sua granulometria muito fina e ao seu estado de alteração para minerais secundários, bem como o tipo de contato que os grãos apresentavam; tais fatos corroboram para a hipótese de uma mistura altamente energético do tipo FCI, como descrito experimentalmente por Wohletz (2000). As texturas encontradas na rocha vulcânica são as ofíticas, subofíticas, intersetal, intergranular, vesicular e amigdaloidal, além da quantificação mineralógica microscópica das amostras e as composições mineralógicas das amígdalas.

Palavras-chave: Bacia do Parnaíba; Peperitos; interação Vulcano-sedimentar; Petrografia.

Referências Bibliográficas

- SKILLING, I. P.; WHITE, J. D. L.; MCPHIE, J. Peperite: a review of magma-sediment mingling. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v. 114, n. 1-2, p. 1-17, 2002
- WOHLETZ, Kenneth. Water/magma interaction: some theory and experiments on peperite formation. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, v. 114, n. 1-2, p. 19-35, 2002.
- WHITE, James DL; MCPHIE, Jocelyn; SKILLING, Ian. Peperite: a useful genetic term. *Bulletin of Volcanology*, v. 62, n. 1, p. 65-66, 2000.

ALTERAÇÕES TECNÓGENICAS EM CANAIS FLUVIAIS DA BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO DA GUARDA, NA BAIXADA DE SEPETIBA (RJ): IMPACTOS DA CONSTRUÇÃO DO ARCO METROPOLITANO E DO CTR SEROPÉDICA**Beatriz Peixoto Dias¹; Andreilson Bispo Silva² & Laura Delgado Mendes³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geografia, IM/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Geografia IM/UFRRJ; 3. Professora do curso de Geografia, IM/UFRRJ

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A atuação humana sobre o ambiente, modelando-o e adaptando-o por meio da técnica conforme suas necessidades garantiu ao homem o status de agente geológico, que supera seus equivalentes naturais pela intensidade e velocidade de transformação, indicando inclusive o surgimento de um novo período geológico: o tecnógeno (TER-STEPANIAN, 1988). Embora a ação humana no meio produza significativas transformações em geral, é no sistema fluvial que essas alterações se tornam mais evidentes devido, inclusive, à sua sensibilidade às transformações e rápidas respostas aos processos atuantes nele. Constitui-se, assim, como importante elemento na compreensão das modificações da paisagem por intervenção antrópica. Sendo assim, o objetivo dessa pesquisa foi identificar alterações na rede de drenagem da bacia hidrográfica do rio da Guarda, na Baixada de Sepetiba (RJ), decorrentes da construção do eixo rodoviário Arco Metropolitano do Rio de Janeiro (AMRJ) (BR-493 e RJ-109), e do Aterro Sanitário de Seropédica (Centro de Tratamento de Resíduos – CTR, operado pela Ciclus Ambiental do Brasil S/A). A identificação e mapeamento dos canais obstruídos foram realizados em três etapas: 1) Análise de imagens de satélite disponíveis no programa Google Earth Pro em um período de quinze anos para detectar alterações na rede de drenagem; 2) Levantamento de campo, com observação direta para confirmação de informações obtidas na etapa 1, além de registros fotográficos dos pontos analisados; e 3) Os canais identificados foram delimitados com o uso do programa de Sistema de Informação Geográfica Quantum GIS (v. 3.60), sendo utilizados dados do Ministério Público do Rio de Janeiro (MPRJ em Mapas: <http://apps.mprj.mp.br/sistema/cadg/>). Através do mapeamento realizado foi possível constatar que há canais que se encontram obstruídos devido aos aterramentos realizados para a construção da rodovia Arco Metropolitano e para a construção do Centro de Tratamento de Resíduos de Seropédica. Embora o Relatório de Impacto Ambiental relacionado à construção do eixo rodoviário cite a necessidade de preservação de nascentes e pequenos cursos d'água (DER-RJ/CONCREMAT TECNOSOLO, 2007), foi constatada a ausência de tais medidas de preservação. Em um dos pontos analisados foi observado que havia uma estrutura que possivelmente serviria como túnel de escoamento, distante do curso do canal que, por sua vez, encontrava-se represado e com sinais de eutrofização. Desta forma, conclui-se que tanto a construção do Arco Metropolitano, quanto a do Centro de Tratamento de Resíduos, associadas à falta de medidas de preservação da rede de drenagem, resultaram na obstrução de alguns canais da bacia hidrográfica do rio da Guarda, que afetaram a dinâmica fluvial numa área importante sob o ponto de vista da dinâmica de águas superficiais, como contribuinte da Baía de Sepetiba, assim como pela subterrânea, considerando que drena área de importante aquífero, o Piranema. Destaca-se também a necessidade de estudos para avaliar os impactos decorrentes dessas alterações.

Palavras-chave: tecnógeno; baixada de Sepetiba; sistema fluvial.

Referências Bibliográficas

DER-RJ/CONCREMAT TECNOSOLO. Relatório de Impacto Ambiental do Projeto de Implantação do Arco Metropolitano do Rio de Janeiro (BR-493, RJ-109). Junho de 2007. Disponível em: <<http://www.dnit.gov.br/download/meio-ambiente/acoes-e-atividades/estudos-ambientais/br-493-rj-br-493-rj.pdf>> Acesso em 14 de agosto de 2019.

TER-STEPANIAN, G. Beginning of the Tecnogene. *Bulletin I. A. E. G.*, v. 38, p. 133-142. 1988.

**PROPOSTA PARA RECUPERAÇÃO DE PRATA A PARTIR DE REJEITOS
CONTENDO ÓLEO VEGETAL****Rafael Torre¹, Gabriel Costa² & Evelton Alves Casartelli³**

1. Discente do Curso de Química Industrial, DQA/IQ/UFRRJ; 2. Graduado em Engenharia Química/ UFRRJ;
3. Professor do DQA/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências exatas e da Terra

RESUMO

O método de Volhard, para a determinação indireta de halogenetos em águas, é um experimento comum a todos os cursos de graduação que tenham a disciplina de Química Analítica Experimental em seus currículos. É caracterizado pela adição de uma quantidade exata, e em excesso, de nitrato de prata à amostra, sendo que a prata residual é titulada por uma solução de tiocianato de potássio de concentração exata. A quantidade de cloreto é a diferença entre essas quantidades. Usualmente o cloreto de prata deve ser isolado do contato com a solução, pela adição de nitrobenzeno, que é volátil e tóxico (WHO, 2003). No laboratório de aulas práticas de Química Analítica, o trabalho pioneiro de Quintero (2006) comprovou a possibilidade do uso do óleo de cozinha como alternativa, contudo esta substância dificulta a recuperação da prata residual além de criar um passivo ambiental, pois sua recuperação por meios convencionais como destilação é impraticável. O presente estudo trata da investigação preliminar sobre a utilização de carvão ativado para separação do óleo e da prata por meio de adsorção. Assim, o nitrato de prata, um reagente de alto custo e fundamental para a execução dos experimentos de volumetria de precipitação, e o óleo poderiam ser regenerados e reutilizados. Foram realizados dois testes em coluna de adsorção contendo 5 mL (3,0 g) de carvão ativado retirado de um filtro Milli-Q exaurido. Através da percolação do óleo de soja puro pela coluna, determinou-se um volume de corte ou de saturação de 2,5 mL. Preparou-se uma mistura de óleo com o precipitado de prata (tiocianato e cloreto) simulando o resíduo produzido por cinco grupos de alunos no laboratório, para realizar os testes de eficiência de separação. Um volume de 5,0 mL da mistura foi injetados na coluna, a qual, posteriormente, foi percolada com 10 alíquotas sequenciais de 5,0 mL de acetato de etila (EtAc), um solvente de base renovável e de baixo custo (Júnior, 2010), para extração do óleo e da prata de duas formas: percolação convencional do eluente e a percolação utilizando, de forma inédita, um oscilador excêntrico acoplado à coluna. As concentrações de óleo nos eluatos foram determinadas por espectrometria de absorção molecular no UV/VIS no comprimento de onda de 252 nm. Demonstrou-se que o método convencional recuperou apenas 25% do óleo na primeira alíquota, necessitando de 10 alíquotas do solvente para atingir 84,52 % de eficiência. Por outro lado o uso do oscilador excêntrico resultou em uma eficiência de 92% de recuperação de óleo na primeira alíquota de cinco mL de solvente, totalizando 100% nas três primeiras percolações. O precipitado de prata, após cada teste, foi separado por centrifugação e pesado. Determinou-se uma recuperação de 82,5% de prata. Os resultados obtidos viabilizam o uso de osciladores excêntricos em processos de separação em colunas de adsorção, visando maiores rendimentos com menor quantidade de reagentes.

Palavras-chave: prata; óleo; carvão ativo; método de Volhard.

Referências Bibliográficas

JÚNIOR, D.C.M. PRODUÇÃO DE ACETATO DE ETILA EM BIORREFINARIA, UMA ANÁLISE DE VIABILIDADE. Dissertação de Mestrado, Escola de Economia de São Paulo - Fundação Getúlio Vargas. São Paulo. 61pp., 2010.

QUINTERO, L.M.C e LÃ, R.B.P. MÉTODO DE VOLHARD MODIFICADO - UMA PROPOSTA PARA SUBSTITUIÇÃO DO NITROBENZENO POR ÓLEO DE SOJA NA DETERMINAÇÃO DE CLORETO EM DIFERENTES MATRIZES. Anais da XIII Jornada de Iniciação Científica da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, 2006.

WHO, WORLD HEALTH ORGANIZATION. ENVIRONMENTAL HEALTH CRITERIA 230: NITROBENZENE. World Health Organization, Geneva, 163 pp., 2003.

BUSCA DE NOVOS INIBIDORES DE ENZIMAS DE PEÇONHAS POR DOCAGEM MOLECULAR COM RESTRIÇÕES FARMACOFÓRICAS

Alessandra Lima Gonçalves¹; Arthur Eugen Kürmmerle² & Carlos Mauricio Rabello de Sant'Anna²

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professor do IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Segundo a Organização Mundial de Saúde, cerca de 5 milhões de pessoas são picadas por serpentes anualmente¹ e pelo menos 100.000 pessoas morrem como resultado de amputações e outras deficiências permanentes causadas pelos acidentes.² Os efeitos do veneno são causados, principalmente, por fosfolipases A2 (PLA2), metaloproteases (MP) e serina proteases (SP), sendo as MP as responsáveis pela ação hemorrágica. Nosso grupo planejou por métodos computacionais, sintetizou e patenteou uma série de tiossemicarbazonas, que apresentaram atividade inibitória contra uma MP isolada de *Bothrops pauloensis*, demonstrando o uso destes métodos para o desenvolvimento de inibidores com aplicações potenciais no tratamento dos efeitos locais de acidentes ofídicos³. No presente trabalho exploramos a docagem molecular baseada em mapa farmacofórico para a avaliação de carbazonas e tiossemicarbazonas (Figura 1 e Tabela 1) como ligantes da MP de outra serpente, *B. asper*. Neste método, são favorecidas interações específicas selecionadas por meio de propostas de pontos farmacofóricos nos ligantes, durante o procedimento de docagem. Utilizou-se uma estrutura cristalográfica da MP de *B. asper* disponível no *Protein Data Bank* (PDB), 2W12. Os compostos foram construídos e otimizados pelo método de funcional de densidade B3LYP do programa Spartan'14 (Wavefunction). O estudo da interação entre a MP e os compostos foi feito por docagem molecular com o programa GOLD 5.7 (CCDC). Para escolha da função de pontuação, foi inicialmente feito um estudo de redocagem do ligante co-cristalizado na estrutura 2W12, tendo a função *ChemPLP* apresentado o melhor desempenho. Essa função foi usada no estudo de docagem dos compostos avaliados, feito em triplicata. As melhores pontuações de ajuste obtidas para os compostos são apresentadas na Tabela 1.

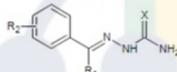


Figura 1: Estrutura geral das semicarbazonas e tiossemicarbazonas

Tabela 1: Substituintes usados e resultados de docagem molecular

Comp.	X	R ₁	R ₂	Distância - Zn-X (Å)	Pontuação de ajuste
2A	S	H	H	2,38	46,28
2B	S	H	4-OMe	3,67	48,92
2C	S	H	4-Br	5,96	48,24
2D	S	H	4-Cl	3,78	47,25
2E	S	H	3-OH,4-OMe	4,51	47,34
3A	O	H	4-OMe	1,48	56,67
3B	O	H	4-CO ₂ H	1,35	54,11
3C	O	H	4-Cl	1,45	56,72
3D	O	H	2,4-OMe	2,51	59,30
3E	O	H	4-OH	2,51	53,71
3F	O	H	3-OH,4-OMe	5,34	45,83
5A	S	(CH ₂) ₂ :CO ₂ H	4-OMe	3,85	54,43
5B	S	(CH ₂) ₃ :CO ₂ H	4-OMe	3,90	55,38

Tabela 1: Substituintes usados e resultados de docagem molecular

Pode ser visto que, com esta metodologia, as semicarbazonas são previstas, em média, como melhores ligantes do que as tiossemicarbazonas, com exceção dos ligantes 5A e 5B, que possuem o substituinte R₁ como um grupo ácido carboxílico. Os valores de distância indicam que a maioria dos compostos devem interagir com o zinco catalítico e as pontuações sugerem que todos os compostos são promissores candidatos a inibidores da MP de *B. asper*.

Palavras-chave: Modelagem molecular; metaloprotease; acidentes ofídicos.

Referências Bibliográficas

¹ World Health Organization, Report of a consultative meeting, Geneva, 10 January 2007, p14

² CHIPPAUX, J. P. B. World Health Organization. **1998**, 76, 515-524

³ FERREIRA, F. B. *et al.*, inventores; UFRRJ/UFU, depositante. BR 10 2016 020255 8, 2016 set 13.

SÍNTESE DE NOVOS COMPLEXOS DE CU(II) CONTENDO HÍBRIDOS CUMARINAHIDRAZONA COMO SONDAS INORGÂNICAS BIOLÓGICAS DE TIÓIS

Yuri Terra Maia¹; Leandro Rodrigues da Silva²; Thiago Moreira Pereira³; Guilherme Pereira Guedes⁴; Arthur Eugen Kümmerle⁵; Amanda Porto Neves⁵.

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Química Industrial, IQ/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Licenciatura em Química, IQ/UFRRJ; 3. Discente do Programa de Pós Graduação em Química, IQ/UFRRJ; 4. Professor do DEQUIM/IQ/UFF; 5. Professor do DEQUIM/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Os tióis constituem uma classe de biomoléculas que desempenham importante papel no sistema biológico, como regulação de processos redox e defesa antioxidante [1]. Níveis irregulares de tióis tais como GSH, cisteína e homocisteína, estão relacionados a uma série de doenças [1] e a detecção e a quantificação destes compostos no meio celular é uma necessidade. Nesse sentido, sondas inorgânicas de Cu(II)-fluoróforo constituem uma alternativa eficiente de sondas biológicas de tióis [2]. Conhecendo a ampla gama de propriedades biológicas e fluorescentes das cumarinas [3], este trabalho tem como objetivo a síntese de novos complexos de Cu(II) contendo ligantes derivados de cumarina e hidrazona com potencial aplicação como sonda de cisteína. Os complexos foram sintetizados adicionando sal de $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ a uma solução equimolar do ligante cumarina (L) em metanol junto a um equivalente de trietilamina. A reação ocorreu durante 3h a temperatura ambiente. Foram obtidos três complexos inéditos de Cu(II) do tipo $[\text{Cu}(\text{L}1-3)\text{Cl}]$ 1-3. A cumarina se encontra coordenada de forma tridentada ao metal através de um quelato O,N,O, além de um Cl^- completando sua esfera de coordenação. Tal estrutura foi confirmada por difração de Raios X de monocristal para os complexos 1 e 2, contendo os substituintes H e Cl no ligante cumarina. O complexo 3 possui estrutura análoga, sendo substituído com um grupamento metóxi no ligante. As estruturas de RX mostraram que o metal apresentou geometria quadrática plana distorcida. Os complexos foram ainda caracterizados por espectroscopia no infravermelho e ultravioleta-visível. No espectro vibracional, o deslocamento das bandas de $\nu_{\text{C=O}}$ de 1686 cm^{-1} para a região entre 1668 e 1645 cm^{-1} evidenciaram a complexação pela lactona da cumarina e o desaparecimento da banda de $\delta_{\text{N-H}}$ (entre 1544 a 1539 nos ligantes), indicou a desprotonação do ligante. Os espectros eletrônicos dos ligantes apresentaram um máximo em torno de 412 a 409 nm e um ombro entre 490 e 483 nm , referente às transições $\pi \rightarrow \pi^*$ do anel cumarínico. Já para os complexos, têm-se um máximo na faixa entre 477 e 453 nm devido às transferências de carga metal-ligante, além de um máximo próximo a 630 nm devido à transições d-d. Os ligantes e complexos foram sintetizados e caracterizados de modo satisfatório, onde dois complexos tiveram suas estruturas confirmadas por DRX. Os ensaios de avaliação dos complexos de cobre como sondas biológicas de tióis estão em andamento.

Palavras-chave: Cumarina; Hidrazona; Complexos; Cobre; Zinco.

Referências Bibliográficas

- [1] CHEN, X.; ZHOU, Y.; PENG, X.; YOON, J. Fluorescent and colorimetric probes for detection of thiols. *Chem. Soc. Rev.* 2010.
- [2] HE, G.; LI, J.; YANG, L.; HOU, C.; NI, T.; YANG, Z.; QIAN, X.; LI, C. The Synthesis of a Coumarin Carbohydrazone Dinuclear Copper Complex Based Fluorescence Probe and Its Detection of Thiols. *Plos One*, 2016
- [3] NASR, T.; BONDOCK, S.; YOUNS, M. Anticancer activity of new coumarin substituted hydrazone–hydrazone derivatives. *Eur. J. Med. Chem.* 2014.

MONITORAMENTO DO DISTRITO AREEIRO DE ITAGUAÍ-SEROPÉDICA ATRAVÉS DE GEOTECNOLOGIAS**João Victor Pequeno Rufino¹ & Laura Delgado Mendes²**

1. Discente do Curso de Geografia IM/UFRRJ; 2. Professora do curso de Geografia, IM/UFRRJ

Grande área: Ciências Exatas e da Terra**RESUMO**

Configurando-se como um dos mais importantes materiais na construção civil, a areia é um dos muitos recursos naturais utilizados pelas práticas antrópicas devido ao seu baixo valor agregado, enorme potencial de exploração, abundância e um dos mais extraídos do mundo. Em uma escala regional, o distrito Areeiro de Itaguaí-Seropédica, favorecido pelos fatores geológicos e geomorfológicos, com a presença de grandes depósitos de sedimentos nas planícies fluviais quaternárias, possui uma área total de 50 km², com cavas de extração de areia atingindo extensões variadas dependendo da evolução da atividade com uma média de 28 metros de profundidade, além de ser responsável por abastecer 70 % da areia para construção civil utilizada na Região Metropolitana do Rio de Janeiro – RMRJ (MARQUES, 2010). Destaca-se, portanto, na produção fluminense e até mesmo nacional, com o município de Seropédica estando entre os maiores produtores de areia do Brasil sendo responsável pela produção de mais de duas toneladas no ano de 2015 (DNPM, 2015). O objetivo desse trabalho é identificar e monitorar as alterações no distrito areeiro de Itaguaí-Seropédica de 2004 a 2019, considerando a sua importância e impactos. Os procedimentos metodológicos foram realizados em cinco etapas: 1) Análise de imagens de satélites obtidas a partir do programa Google Earth Pro para localizar e delimitar as áreas de exploração; 2) Análise de imagens de satélite *Landsat 7* e *8* (obtidas no dia 20 de fevereiro de 2004 e 30 de janeiro de 2019), obtidas via *Landviewer* (<https://eos.com/landviewer/>) para análise da evolução das áreas de extração de areia; 3) Confecção de mapas com o programa de Sistema de Informação Geográfica Quantum GIS (v. 3.00); 4) Levantamento de dados sobre o consumo de agregados para construção civil (Departamento Nacional de Produção Mineral – DNPM) e populacionais (Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística - IBGE); 5) Integração, análise e discussões dos resultados. Através do monitoramento realizado constata-se que houve aumento significativo na extração de areia no distrito Areeiro de Itaguaí-Seropédica, com formação de novas cavas de extração, decorrente do aumento da procura por agregados para construção civil. Esse aumento pode ser analisado junto aos dados de produção obtidos (com aumento de 187.000.000 t para 349.087.00 t entre 2004 e 2015, respectivamente) (DNPM, 2015) e ao aumento da população em municípios da RMRJ, com base nos dados do Censo demográfico (IBGE, 2010), principalmente nos municípios de Itaguaí e Seropédica. Destaca-se nesse contexto a ocorrência de grandes obras de infraestrutura no Estado do Rio de Janeiro no período de 2004 a 2019 como, por exemplo, a construção da rodovia do Arco Metropolitano do Rio de Janeiro e outros empreendimentos relacionados diretamente ou não aos megaeventos esportivos sediados no Rio de Janeiro. Conclui-se sobre o aumento numérico e espacial das áreas de extração de areia, tanto legais como ilegais, no distrito Areeiro de Itaguaí-Seropédica e que parece estar relacionado ao contexto sócio-econômico regional, com o aumento da demanda desse recurso natural.

Palavras-chave: geotecnologias; areia; análise ambiental.**Referências Bibliográficas**

- DEPARTAMENTO NACIONAL DE PRODUÇÃO MINERAL – DNPM. Sumário Mineral. Brasília: DNPM, 2015. Disponível em: <<http://www.anm.gov.br/dnpm/publicacoes/serie-estatisticas-eeconomia-mineral/sumario-mineral/sumario-mineral-brasileiro-2015>>. Acesso em: 05 mai. 2018
- IBGE - INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA. Censo Demográfico 2010 – Edição 2010. Rio de Janeiro: IBGE, 2011. Disponível em: <https://biblioteca.ibge.gov.br/visualizacao/periodicos/93/cd_2010_caracteristicas_populacao_domicilios.pdf>. Acesso em: 05 mai. 2018
- MARQUES, E. D. Impactos da mineração de areia na bacia sedimentar de Sepetiba, RJ: estudo de suas implicações sobre as águas do aquífero Piranema. Tese (Doutorado em Geociências) Universidade Federal Fluminense. Niterói: 2010. Disponível em:<<http://rigeo.cprm.gov.br/jspui/handle/doc/354>> Acesso em: 05 mai. 2018.

ALTERAÇÕES FISIAGRÁFICAS NA APA DO RIO GUANDU EM ÁREA DE EXTRAÇÃO DE AREIA: UMA ANÁLISE TEMPORAL E ESPACIAL ENTRE OS ANOS DE 2004 E 2019**João Victor Pequeno Rufino¹; Tales Gaspar de Mattos Reis² & Laura Delgado Mendes³**

1. Discente do Curso de Geografia IM/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Geografia IM/UFRRJ; 3. Professora do curso de Geografia, IM/UFRRJ

Grande área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

As Áreas de Proteção Ambiental – APA's são regulamentadas no Brasil pela lei nº 9.985/00, que instaurou o Sistema Nacional de Unidade de Conservação – SNUC, como o objetivo básico proteger a diversidade biológica, disciplinar o processo de ocupação e assegurar a sustentabilidade do uso dos recursos naturais (BRASIL, 2000). A partir disso muitas UC's foram criadas, entre elas a Área de Proteção Ambiental do Rio Guandu – APA Guandu, no Estado do Rio de Janeiro, através do decreto estadual nº 40.670 de 22 de março de 2007. Com aproximadamente 74,272 mil hectares e abrangendo cerca de 10 municípios essa UC tem o propósito legal de “garantir a qualidade e quantidade da água da Bacia do rio Guandu, protegendo os remanescentes florestais, margens fluviais, nascentes e encostas, nos trechos montanhosos e de baixadas, de modo a manter importantes fontes de abastecimento de água potável para a região metropolitana do Rio de Janeiro” (Rio de Janeiro, 2007). Desde a década de 90 a atividade de extração de areia é praticada em localidades que abrangem os limites da UC, especialmente no município de Seropédica, em área popularmente conhecida como “distrito areeiro”. Sendo assim, o objetivo do trabalho é monitorar alterações na Área de Preservação Ambiental (APA) do rio Guandu entre 2004 e 2019, portanto, com início anterior ao seu decreto de criação. A pesquisa foi realizada em quatro etapas: 1) Análise de imagens de satélites obtidas a partir do programa *Google Earth Pro* no período de 2004 a 2019, para identificar as áreas de extração de areia; 2) Confecção de mapas (2004 e 2019), utilizando programa de Sistema de Informação Geográfica *Quantum GIS* (v. 3.00) e imagens de *Landsat 7* e *8* (coletadas do dia 20 de fevereiro de 2004 e 30 de janeiro de 2019) obtidas via *LandViewer* (<https://eos.com/landviewer/>) para refinamento da análise; 3) Levantamento de dados sobre a exploração ilegal de areia no Brasil e dados do Departamento Nacional de Produção Mineral – DNPM sobre consumo de agregados para construção civil no Estado do Rio de Janeiro; 4) Integração dos dados e discussões dos resultados. Constatou-se que houve mudanças fisiográficas na área, especialmente nas cavas de extração, após o ano de 2007, ou seja, mesmo após a criação da APA Guandu. Observa-se que muitas extrações ocorreram, com algumas áreas de exploração expandindo-se para dentro dos seus limites, outras operando no entorno. A manutenção dessa atividade configura crime ambiental com implicações diretas e indiretas no ecossistema local. A criação dessa UC deveria inibir a retirada de areia, que causa feições de cavas no solo, com conseqüente exposição do lençol freático e outras implicações ambientais. As desativações observadas a partir de 2007 mostraram que a APA cumpriu, pelo menos em parte, o seu papel na tentativa de conservar e proteger o meio ambiente e os recursos hídricos, porém a extração de areia continua ocorrendo na Área de Proteção Ambiental do Rio Guandu de forma ilegal impulsionada pelo aumento da demanda por agregados para construção civil.

Palavras-chave: geotecnologias, areia, extração, APA, Guandu.

Referências Bibliográficas

BRASIL. Sistema Nacional de Unidades de Conservação - SNUC. Lei nº 9.985, de 18 de julho de 2000, Disponível em: < http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/leis/19985.htm >. Acesso em: 05 mai. 2018.

DEPARTAMENTO NACIONAL DE PRODUÇÃO MINERAL – DNPM. Sumário Mineral. Brasília: DNPM, 2015. Disponível em: <<http://www.anm.gov.br/dnpm/publicacoes/serie-estatisticas-economia-mineral/sumario-mineral/sumario-mineral-brasileiro-2015> >. Acesso em: 05 mai. 2018

Rio de Janeiro (Estado). Decreto nº 40.6270, 22 de março de 2007. Dispõe sobre a criação da Área de Proteção Ambiental do rio Guandu (APA Guandu) e outras providências. Diário Oficial do Estado do Rio de Janeiro, Brasília, DF, março de 2007.

ALTERAÇÕES TECNÓGENICAS EM CANAIS FLUVIAIS DA BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO DA GUARDA, NA BAIXADA DE SEPETIBA (RJ): IMPACTOS DA CONSTRUÇÃO DO ARCO METROPOLITANO E DO CTR SEROPÉDICA

Beatriz Peixoto Dias¹; Andreilson Bispo Silva² & Laura Delgado Mendes³

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geografia, IM/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Geografia IM/UFRRJ; 3. Professora do curso de Geografia, IM/UFRRJ

Grande Área: Ciências Humanas

RESUMO

A atuação humana sobre o ambiente, modelando-o e adaptando-o por meio da técnica conforme suas necessidades garantiu ao homem o status de agente geológico, que supera seus equivalentes naturais pela intensidade e velocidade de transformação, indicando inclusive o surgimento de um novo período geológico: o tecnógeno (TER-STEPANIAN, 1988). Embora a ação humana no meio produza significativas transformações em geral, é no sistema fluvial que essas alterações se tornam mais evidentes devido, inclusive, à sua sensibilidade às transformações e rápidas respostas aos processos atuantes nele. Constitui-se, assim, como importante elemento na compreensão das modificações da paisagem por intervenção antrópica. Sendo assim, o objetivo dessa pesquisa foi identificar alterações na rede de drenagem da bacia hidrográfica do rio da Guarda, na Baixada de Sepetiba (RJ), decorrentes da construção do eixo rodoviário Arco Metropolitano do Rio de Janeiro (AMRJ) (BR-493 e RJ-109), e do Aterro Sanitário de Seropédica (Centro de Tratamento de Resíduos – CTR, operado pela Ciclus Ambiental do Brasil S/A). A identificação e mapeamento dos canais obstruídos foram realizados em três etapas: 1) Análise de imagens de satélite disponíveis no programa Google Earth Pro em um período de quinze anos para detectar alterações na rede de drenagem; 2) Levantamento de campo, com observação direta para confirmação de informações obtidas na etapa 1, além de registros fotográficos dos pontos analisados; e 3) Os canais identificados foram delimitados com o uso do programa de Sistema de Informação Geográfica Quantum GIS (v. 3.60), sendo utilizados dados do Ministério Público do Rio de Janeiro. Através do mapeamento realizado foi possível constatar que há canais que se encontram obstruídos devido aos aterramentos realizados para a construção da rodovia Arco Metropolitano e para a construção do Centro de Tratamento de Resíduos de Seropédica. Embora o Relatório de Impacto Ambiental relacionado à construção do eixo rodoviário cite a necessidade de preservação de nascentes e pequenos cursos d'água (DER-RJ/CONCREMAT TECNOSOLO, 2007), foi constatada a ausência de tais medidas de preservação. Em um dos pontos analisados foi observado que havia uma estrutura que possivelmente serviria como túnel de escoamento, distante do curso do canal que, por sua vez, encontrava-se represado e com sinais de eutrofização. Desta forma, conclui-se que tanto a construção do Arco Metropolitano, quanto a do Centro de Tratamento de Resíduos, associadas à falta de medidas de preservação da rede de drenagem, resultaram na obstrução de alguns canais da bacia hidrográfica do rio da Guarda, que afetaram a dinâmica fluvial numa área importante sob o ponto de vista da dinâmica de águas superficiais, como contribuinte da Baía de Sepetiba, assim como pela subterrânea, considerando que drena área de importante aquífero, o Piranema. Destaca-se também a necessidade de estudos para avaliar os impactos decorrentes dessas alterações.

Palavras-chave: tecnógeno; baixada de Sepetiba; sistema fluvial.

Referências Bibliográficas

DER-RJ/CONCREMAT TECNOSOLO. Relatório de Impacto Ambiental do Projeto de Implantação do Arco Metropolitano do Rio de Janeiro (BR-493, RJ-109). Junho de 2007. Disponível em: <<http://www.dnit.gov.br/download/meio-ambiente/acoes-e-atividades/estudos-ambientais/br-493-rj/br-493-rj.pdf>> Acesso em 14 de agosto de 2019.

TER-STEPANIAN, G. Beginning of the Tecnogene. *Bulletin I. A. E. G.*, v. 38, p. 133-142, 1988.

**EXPLORANDO NOVAS FORMAS DE NEGOCIAÇÃO, COMERCIALIZAÇÃO E
DIVULGAÇÃO DE PRODUTOS AGROECOLÓGICOS DA AGRICULTURA FAMILIAR NA
BAIXADA FLUMINENSE**

Larissa da Silva Paiva¹; Ana Cláudia de Macêdo Vieira² & Sergio Manuel Serra da Cruz³

1. Bolsista PET Sistemas de Informação, Discente do Curso de Sistemas de Informação ICE/UFRRJ; 2. Professor do DPNA/UFRJ, 3. Tutor do PET Sistemas de Informação, Professor do DECOMP/ICE/UFRRJ

Grande área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Projeções realizadas sobre o crescimento populacional indicam que será necessário expandir até o ano de 2050, em até 60% a produção agrícola a fim de atender a demanda mundial do mercado agroalimentar (MARIN, 2016). A potência do cenário agropecuário nacional, indica que o país é uma das apostas para atender à essas demandas. Todavia, o aumento da produção agrícola não está exclusivamente relacionado ao prolongamento das terras aráveis. Para atingir o nível de produção desejado, será necessário que o Brasil assegure uma forma de cultivo eficiente e menos agressiva ao meio ambiente. Desta forma, é viável entender a Agricultura Familiar como uma alternativa em potencial para alcançar as futuras necessidades agrícolas do planeta. A Agricultura Familiar desempenha um papel fundamental no abastecimento do mercado agroalimentar brasileiro, e é considerada a 8ª maior produtora de alimentos do mundo (MAPA, 2018). Além disso, de acordo com o Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento, ela também é responsável por conter o êxodo rural no país, mantendo cerca de 12 milhões de pessoas economicamente ativas no campo, contribuindo para a geração de empregos e renda, e para o desenvolvimento econômico local de diversos municípios e distritos rurais. No entanto, a rotina de trabalho do pequeno produtor familiar é cercada de inúmeros obstáculos: dificuldades em estabelecer uma boa comunicação com os seus consumidores; dificuldades no escoamento da produção; o desconhecimento das cotações nos mercados; além, do desperdício de alimentos. Adicionalmente, percebe-se um aumento do interesse do consumidor em descobrir a origem, procedência, e qualidade dos produtos que serão consumidos, além de um movimento de revalorização da cultura tradicional camponesa. Dessa forma, nota-se a oportunidade de desenvolver propostas em apoio à Agricultura Familiar de caráter tecnológico, visto que elas podem criar condições para a manutenção da viabilidade econômica das propriedades familiares, além de contribuir para a modernização do setor. A modernização da Agricultura Familiar passa pela capacitação do uso adequado de recursos, da utilização de maquinários e ferramentas apropriados ao segmento agroecológico, e por fim, pela adoção de técnicas emergentes da agricultura digital. Entende-se como agricultura digital ou 4.0, todas as inovações desenvolvidas para aumentar a produtividade agrícola. Este trabalho apresenta o Magé AgroFamiliar, uma das primeiras plataformas sociais de agricultura digital com o intuito de viabilizar melhorias na vida dos pequenos produtores familiares. Esta ferramenta, que incorpora conceitos de agricultura 4.0, é capaz de melhorar a disponibilidade e divulgação de oferta dos produtos agroecológicos provindos das unidades de produção familiares do município de Magé para a população da baixada fluminense. Esta aplicação tem como objetivo ser um instrumento que beneficie o compartilhamento de informações consolidadas das produções agrícolas em tempo real.

Palavras-chave: Agricultura Familiar; Agricultura 4.0; Banco de Dados; Aplicativos Móveis..

Referências Bibliográficas

- MAPA, 2018. Agricultura familiar do Brasil é 8ª maior produtora de alimentos do mundo. Disponível em: <<http://www.mda.gov.br/sitemda/noticias/agricultura-familiar-do-bra-sil-%C3%A9-8%C2%AA-maior-produtora-de-alimentos-do-mundo>>. Acesso em: 17 abr. 2019.
- MARIN, F.R., Pilau, F.G., Spolador, H.F., and Otto, R., Pedreira, C.G., 2016. Intensificação sustentável da agricultura brasileira: cenários para 2050. Revista de Política Agrícola, 25(3), pp.108-124.
- MEDEIROS, J. X. O desenvolvimento científico e tecnológica e a agricultura familiar. In: LIMA, D. M. A.; WILKINSON, J. Inovação nas tradições da agricultura familiar. Brasília: Paralelo 15, 2002. p. 23-38.

ANÁLISE ESTRUTURAL DOS LINEAMENTOS DE DIREÇÃO N30E NA SERRA DO IBITIPOCA, MG**Bárbara Coelho de Andrade¹ Theresa Rocco Pereira Barbosa² Helena Saraiva Koenow Pinheiro³ Clauzionor Lima da Silva⁴ Alexis Rosa Nummer⁵**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geologia, IA/UFRRJ; 2. Discente do Curso de Geologia, IA/UFRRJ; 3. Professora do Departamento de Solos, IA/UFRRJ; 4. Professor do Departamento de Petrologia e Geotectônica, IA/UFRRJ; 5. Professor do Departamento de Petrologia e Geotectônica, IA/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A Serra do Ibitipoca, regionalmente, situa-se em uma zona de deformação intensa sob interferência das Faixas Brasília e Ribeira (PACIULLO et al, 1996; NUMMER, 1991). Apesar dos diversos trabalhos publicados sobre a deformação dúctil, a deformação rúptil que afeta estas rochas ainda carece de estudos. Os mais recentes indicam correlação destas estruturas com o campo de tensão extensional que culminou na abertura do Oceano Atlântico (MOHRIAK, 2012). Este trabalho visou o estudo da zona de deformação rúptil de direção NE-SW e o campo de tensão atuante na região, com base no levantamento bibliográfico, topográfico e cartográfico, e correlação com dados de campo. Foi gerado o Modelo Digital de Elevação (MDE) pelo software ArcGIS Desktop 10.3, com resolução 10m, através da interpolação de dados de parte da Folha BIAS FORTES (SF-23-X-C-VI-1) correspondente ao Parque Estadual do Ibitipoca (PEI). A partir do MDE, derivou-se o sombreamento sintético do relevo (*Hillshade*) para o traçado NE-SW marcantes. Estes também foram delimitados a partir da hidrografia e de imagens LANDSAT 8 com resolução 30m. Os dados foram importados para o software RockWorks 2017 para análise em diagrama de rosetas, agrupando-os e facilitando a identificação de tendências. As rupturas na drenagem, que são expressões mais recentes no relevo, foram detectadas pela ferramenta *Knickpoint Finder* no ArcGIS. Atividades de campo foram realizadas para coleta de dados estruturais, que foram plotados no software WinTensor v.5.8.8 para análise de paleotensão, utilizando o método de Diedros Retos. Com a sobreposição do MDE ao Mapa Geológico do Estado de Minas Gerais na escala 1:1.000.000, observou-se no PEI a predominância de quartzitos da Formação São Thomé das Letras e localmente gnaisses da Formação Arantina, ambas pertencentes ao Grupo Andrelândia. Os lineamentos traçados baseados na hidrografia frequentemente estão entre 30/50NE, sendo que os N50E somam 22km de extensão. A imagem LANDSAT 8 gerou uma tendência N45E, que totalizam 50km. O *Hillshade* gerou o maior volume de dados, com *trend* N45E. A ferramenta *Knickpoint Finder* apontou acréscimo de dados em função do aumento da escala e diminuição da equidistância, com valores anômalos concentrados na porção sul da Bacia do Rio do Salto e nos trechos NE-SW. Dos dados de campo, a maioria são falhas normais oblíquas destrais aproximadamente N36E/30 e mergulho para sul/sudeste. Subordinadamente as falhas normais oblíquas sinistrais, N73E/35. As transcorrentes são sinistrais N30E/80 e destrais N40E/85. Há ainda falhas inversas N56E/55. Na maioria dos gráficos observa-se uma compressão máxima na vertical e distensão NW-SE, porém as transcorrências sinistrais e as falhas inversas divergem. Em campo observou-se que as falhas normais (cachoeiras) cortam as transcorrentes (paredões e trechos retilíneos no Rio do Salto), por isso devem ser mais recentes. Conclui-se que a zona de deformação rúptil NE-SW é composta de mais de um evento tectônico envolvendo transcorrências destrais e sinistrais, falhamentos normais puros e oblíquos, que são facilmente visualizados em mapa e no campo. Esta análise pode ser útil para o Plano de Manejo do Parque, no aprofundamento de pesquisas de prevenção de risco em pontos de visitação turística do PEI.

Palavras-chave: Deformação rúptil, geotecnologias; Plano de Manejo;

Referências Bibliográficas

- NUMMER, A. R. 1991. **Análise estrutural e estratigráfica do Grupo Andrelândia na região de Santa Rita do Ibitipoca, sul de Minas Gerais**. 1991. Dissertação (Mestrado em Geologia) - Centro de Ciências Matemáticas e da Natureza, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- PACIULLO, F. P., FONSECA, A. C., ANDREIS, R. R., RIBEIRO, A., TROUW, R. A., & WIEDEMANN, C. M. 1996. **Contribuição à geologia do sul de Minas Gerais edição das folhas 1: 50.000 Itumirim, Itutinga, Madre de Deus, Luminárias, Minduri e Andrelândia**. Anuário do Instituto de Geociências, 19, 123-142.
- MOHRIAK, W. **Bacias de Campos, Santos e Espírito Santo** in: HASUI, Y.; CARNEIRO, C.D.R.; ALMEIDA, F.F.M.; BARTORELLI, A. (Orgs.). Geologia do Brasil, Editora Beca, p. 549-571, 2012.

GERENCIAMENTO DIGITAL DE LAUDOS E DIAGNÓSTICO DE DOENÇAS EM PLANTAS ORNAMENTAIS**Camila Marques Cesar Coelho¹; Fernanda Balbino Garcia dos Santos²; João Sebastião de Paula Araújo³ & Sérgio Manuel Serra da Cruz⁴**

1. Bolsista do grupo PET-SI/UFRRJ e discente do Curso de Sistemas de Informação, DECMP/ICE/UFRRJ; 2. Bolsista de Iniciação Científica e discente do Curso de Agronomia da UFRRJ; 3. Professor de Agronomia/UFRRJ, Tutor do Grupo PET-SI/UFRRJ

Grande área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

As plantas ornamentais, assim como os demais vegetais, correm riscos de serem infectadas por agentes externos que podem interferir nos seus ciclos de vida. Fungos, bactérias, vírus e nematóides, podem causar doenças que venham a ser fatores limitantes de uma cultura, ou até mesmo que levem à perda completa da mesma (PITTA, 1995). Sendo assim, destaca-se a importância do diagnóstico precoce de doenças em plantas ornamentais para evitar a perdas, alterações na estruturas, vitalidade, funcionalidade ou beleza das mesmas. Este trabalho apresenta a ferramenta CLÍNICA VEGETAL, trata-se de um dos primeiros sistemas do Brasil voltados para o diagnóstico online e precoce de doenças em plantas ornamentais e gerenciamento automatizado de laudos digitais. Computacionalmente, a ferramenta é um sistema multiusuário e distribuído em nuvem de computadores, sendo composto por um banco de dados de imagens e dois aplicativos (app) móveis desenvolvidos em uma biblioteca Javascript chamada React Native. O sistema é fruto de uma parceria extensionista entre o programa PET-SI/UFRRJ, o laboratório de Clínica Vegetal do IA/UFRRJ e Centro Cultural Sítio Roberto Burle Marx (SRBM). O foco do trabalho é considerar os aspectos de distribuição geográfica das equipes de especialistas em botânica, as necessidades de alta eficácia e custos reduzidos para diagnosticar rapidamente doenças de plantas ornamentais por meio de imagens disponibilizadas em um banco de dados. Foi utilizado a metodologia FSMA (CRUZ et al., 2013) seguido de um levantamento da literatura e modelagem do sistema. O primeiro app é direcionado para coletas digitais de dados textuais e imagens de plantas ornamentais diretamente nos viveiros do SRBM, sendo transmitidos e analisados pela Clínica Vegetal do IA/UFRRJ conjuntamente com as amostras. Através do app, é possível que os pesquisadores do laboratório emitam laudos e visualizem as séries históricas das coletas. O segundo app foi elaborado considerando-se os princípios da ciência cidadã (EITZEL et al, 2017). Sendo assim, o objetivo do segundo aplicativo é disponibilizar os dados digitais e laudos para o público interessado na área de botânica, seja por motivos educacionais, profissionais ou pessoais. Através desse app é possível fazer pesquisas em múltiplas categorias: hospedeiro, praga, nome científico ou nome vulgar da planta, e ter acesso aos laudos de determinadas espécies, contendo imagens, sintomas e dados sobre a doenças, a fim de que seja possível que os interessados utilizem o aplicativo para realizar um pré-diagnóstico da doença nas suas plantas. Além disso, é possível consultar recomendações de manejo para cada doença relacionada às espécies. Após o término do desenvolvimento dos aplicativos, estima-se que eles atuarão em conjunto para facilitar o gerenciamento de toda teia de relacionamentos profissionais comum à área da Botânica, auxiliando em um diagnóstico precoce de doenças em plantas, através de formulários com dados científicos e um banco de imagens, a fim de que se possa tratar o problema antes que haja perdas significativas de toda uma produção. Maiores informações sobre a ferramenta estão disponíveis em www.pet-si.ufrrj.br/clinicavegetal.

Palavras-chave: Agricultura 4.0, Botânica, Computação Distribuída, Diagnóstico Remoto.

Referências Bibliográficas

- PITTA, G.P.B. Flores e plantas ornamentais para exportação: aspectos fitossanitários. Brasília: EMBRAPA-SPI, 1995. 50p. (Série Publicações Técnicas, Frupex 17).
- CRUZ, S. M. S. et al. Relato De Um Experimento Piloto De Uma Fábrica De Software Baseada Em Métodos Ágeis. 2013. Disponível em: <http://r1.ufrrj.br/petsi/wp-content/uploads/2013/11/ENAPET.pdf>. Acesso em: 12 ago. 2019.
- EITZEL, M. et al. Citizen Science Terminology Matters: Exploring Key Terms. Citizen Science: Theory and Practice, vol. 1 no. 2. (2017).

GERENCIAMENTO DA API DO OPENSOLS ATRAVÉS DO WSO2

Alexia Duarte¹; Sergio Manuel Serra da Cruz²

¹Bolsista do grupo PET-SI/UFRRJ e discente do Curso de Sistemas de Informação, DECOMP/ICE/UFRRJ; ²Professor do DECOMP/ICE/UFRRJ, Tutor do Grupo PET-SI/UFRRJ.

Palavras-Chave: agricultura 4.0, solos, API, documentação, inovação.

Resumo

A inovação e a modernização dos processos de coleta e análise de dados de solos têm se mostrado uma necessidade crescente em diversos países, assim como no Brasil. Quanto maior a precisão e completude de um projeto pedológico com análise de perfis e tradagens de solos, maiores os benefícios para os agricultores ou tomadores de decisões. As novas tecnologias de mapeamento, coleta e análise de grandes volumes de dados de solos são temáticas ligadas à Agricultura 4.0 que buscam aumentar a produtividade, o crescimento sustentável e, conseqüentemente, as chances de sucesso do empreendimento. Uma das tecnologias desenvolvidas neste cenário é o *framework* OpenSoils (CRUZ et al., 2018), disponibilizando serviços web, aplicações móveis e uma API Rest. Em geral, as API provêm uma maneira mais prática de integrar diferentes aplicações. No entanto, com a disponibilização de uma API, entra em questão um novo fator que, como apontado pela empresa de consultoria Gartner, mostra-se essencial para a execução de maneira produtiva: o gerenciamento. O foco deste trabalho é apresentar os estudos sobre o gerenciamento da API do OpenSoils. Tal gerenciamento implica na criação de uma documentação técnica que possibilite aos desenvolvedores ter acesso a informações sobre como utilizá-la, integrando-a aos seus próprios projetos de software, de maneira mais imediata e com baixo custo. A documentação fornece dados e explicações referentes ao uso de diferentes rotinas, funções, classes, assim como padrões de código daquela API que, de outra forma, seriam pouco intuitivos para desenvolvedores externos ao projeto. Além disso, uma documentação bem estruturada sobre uma API pode atingir um maior número de desenvolvedores que buscam a API para integrarem aos seus projetos. Levando estes aspectos em consideração, utilizamos a metodologia FSMA (CRUZ et al., 2013) e realizamos um levantamento da literatura em busca de uma ferramenta computacional que produza documentação e gerenciamento da API do OpenSoils. Neste estudo, foi escolhida a ferramenta *WSO2 API Manager* (WSO2 Inc, 2015). Optou-se pela ferramenta por conta da sua completude; ela fornece uma ampla gama de opções para a administração da API, abrangendo diversos aspectos do ciclo de vida de uma API. A inserção da API Rest do OpenSoils no WSO2 é feita por meio da loja na própria ferramenta, desenvolvendo um arquivo do tipo *Swagger* para sua implementação; após isso são definidos planos para limites de acesso e restrições da API (caso existam); ao final, a API é publicada e fica disponível para a utilização por terceiros. Após a publicação da API, estima-se que haverá aumento de desenvolvedores dispostos a utilizá-la, oferecendo-a uma maneira mais intuitiva e adaptada à velocidade com que as tecnologias são requisitadas e desenvolvidas no cenário atual. Maiores informações sobre a API estão disponíveis em www.opensoils.org.

Referências Bibliográficas

CRUZ, S. M. S. et al. Relato De Um Experimento Piloto De Uma Fábrica De Software Baseada Em Métodos Ágeis. 2013. Disponível em: <http://r1.ufrrj.br/petsi/wp-content/uploads/2013/11/ENAPET.pdf>. Acesso em: 12 ago. 2019.

CRUZ, S. M. S. et al. "Towards an e-infrastructure for open science in soils security." *Anais do XII Brazilian e-Science Workshop*. SBC, 2018.

WSO2 Inc. "WSO2 API Manager Documentation". 2015-2018. Disponível em: <https://docs.wso2.com/display/AM260/WSO2+API+Manager+Documentation>. Acesso em: 16 ago. 2019.

DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE EDUCACIONAL PARA PROCESSAMENTO DE DADOS TOPOGRÁFICOS**Lucas Lima Finoti¹; João Pedro Martins Dias de Oliveira¹; Luis Filipe Batista Alves Paula¹; Wagner Dias de Souza² & Rosane Maciel de Araújo Vargas²***1. Discente do Curso de Engenharia de Agrimensura e Cartográfica, IT/UFRRJ; 2. Professor do Departamento de Engenharia IT/UFRRJ.*Grande Área: Ciências Exatas e da Terra**RESUMO**

Os avanços tecnológicos que vem ocorrendo intensamente na fase da coleta de dados topográficos tornaram, ainda mais, indispensável a informatização do processamento destes dados. Novos aplicativos são desenvolvidos com as mais diferentes linguagens e técnicas computacionais. Inovações no âmbito computacional fornecem uma maior eficiência no ambiente de trabalho seja para armazenamento, processamento ou distribuição dos dados coletados. A grande maioria destes softwares, voltados para o processamento de dados adquiridos com estações totais ou tecnologias GNSS, são proprietários, ou seja, seus procedimentos, algoritmos e implementações não estão acessíveis ao usuário. Na UFRRJ, o Departamento de Engenharia vinculado ao Instituto de Tecnologia é o responsável pela oferta de disciplinas da área de Topografia para alguns cursos de graduação, por exemplo, Engenharia de Agrimensura e Cartográfica, Engenharia Agrícola e Ambiental, Agronomia, entre outros. Em cada semestre são criados diversos dados topográficos, na ordem de centenas ou milhares de pontos, durante as aulas práticas. Apesar de diversos programas proprietários para processamento estarem disponíveis no Laboratório de Topografia, os docentes não permitem seu uso nas turmas iniciais por ainda ser a etapa de cálculos objeto de estudo na disciplina. Este trabalho resultou na criação de um software para auxiliar os discentes, didaticamente, durante o processo de cálculos das poligonais topográficas, através de ferramentas para melhorar o processo de ensino-aprendizagem entre professor e aluno. Sua utilização pelos alunos será motivada para a fixação dos conhecimentos adquiridos durante as aulas. O programa MappingHow, como foi nomeado, apresenta uma interface simples e intuitiva para qualquer nível de usuário, facilitando todo o processamento de dados. Utiliza os procedimentos propostos pela NBR 13.133/ABNT 1994, os quais regulamentam o levantamento topográfico no Brasil. Optou-se pela implementação da aplicação como um sistema Web, dessa forma é possível acessá-la usando diferentes plataformas e locais. Pode-se usar este sistema através de smartphones em campo ou em sala de aula com um notebook. Visando uma maior estabilidade e rapidez para soluções de cálculos mais robustos no futuro este sistema foi desenvolvido na linguagem C++. A interface do MappingHow foi desenvolvida com a utilização de tecnologias Web front-end como HTML, CSS e JavaScript. A comunicação da interface Web com o servidor da aplicação foi escrita na linguagem PHP. Para a troca de dados entre diferentes partes do sistema foi utilizada a linguagem JSON. Este sistema pode ser usado para armazenar dados de poligonais topográficas com base na notação de objetos para JavaScript em arquivos de texto, representando a realidade do levantamento em meio computacional. O programa foi testado através de simulações de poligonais topográficas. Pretende-se realizar testes utilizando-se os dados coletados por alunos das disciplinas de topografia no período vigente. Como produto final do trabalho destaca-se o sistema Web MappingHow e suas futuras possibilidades de melhoria que podem ser importantes fontes de projetos de pesquisa e aprendizado para os alunos de graduação da UFRRJ uma vez que possibilitam práticas de campo na área de topografia, geodesia e computação.

Palavras-chave: Softwares Educacionais, Topografia, Sistemas Web.

CLIMMAPVIEW: PLATAFORMA FUNDAMENTADA EM SISTEMAS DE INFORMAÇÃO GEOGRÁFICOS PARA A ASSISTÊNCIA NA VISUALIZAÇÃO DE DADOS CLIMÁTICOS**Gustavo Garcia dos Reis Nunes¹; Gustavo Bastos Lyra²; Ednaldo Oliveira dos Santos² & Sergio Manuel Serra da Cruz³**

1. Bolsista do grupo PET-SI/UFRRJ e discente do Curso de Sistemas de Informação, DECOMP/ICE/UFRRJ; 2. Professor do DCA/IF/UFRRJ; 3. Professor do DECOMP/ICE/UFRRJ, Tutor do Grupo PET-SI/UFRRJ.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Previsões indicam que a população mundial alcançará 9 bilhões de habitantes em 2050 e no final do século serão mais de 10 bilhões (INED, 2013). Com base nessa informação, a Organização das Nações Unidas para Alimentação e Agricultura (FAO), agência das Nações Unidas, projeta a necessidade do aumento de no mínimo 60% da produção de alimentos. A agricultura é de suma importância nessa questão, a qual o Brasil tornou-se grande exportador agrícola, sendo o terceiro maior exportador desde a década de 2000 e tende a aumentar sua produção, de tal forma, que possa atender as demandas alimentícias. Entre os diversos fatores que influenciam na produção agrícola, destaca-se o clima. Portanto, é necessário focar no aumento da produção agrícola, para assim atender a demanda de alimentos da população mundial. Nesse cenário, destacam-se as variabilidades e as mudanças climáticas como fatores que mais impactam o setor agrícola. Com isso, o objetivo deste trabalho é apresentar a plataforma *CLIMMAPVIEW*, baseada em Sistemas de Informações Geográficas (SIG) de dados abertos. A Plataforma disponibiliza a visualização dos metadados e dados de precipitação brutos e curados de estações pluviométricas para o estado do Rio de Janeiro por meio de uma interface mobile, em aplicativo disponíveis em smartphone ou em computadores por meio de navegadores, ambos conectados na Internet. Para acessar os metadados e dados, a Plataforma recebe as informações da base de dados do sistema existente denominado METEORO (ANDRADE et al, 2015). Na codificação da plataforma, foi usado as *Application Programming Interface (APIs)* de geolocalização do *Google Maps*. Já no modelo web foi usado javascript para manipular os dados obtidos pelo sistema METEORO e apresentá-los no mapa virtual de acordo com suas coordenadas, como também utilizou-se a *Hypertext Markup Language (HTML)*, para que os navegadores possam interpretar as imagens dos mapas recebidas pela API. Para desenvolvimento da versão mobile, foi usado o *framework* denominado de *react-native*. Vale ressaltar, que o sistema usa a geolocalização do dispositivo como meio de orientação de posição para apresentar o mapa. Ao acessar o *CLIMMAPVIEW* é possível visualizar as estações no mapa indicada por um marcador de cor azul com uma nuvem para simbolizar que no local marcado existe uma estação, com isso, ao clicar nesse marcador é aberto uma janela com as especificações técnicas da estação. Com isso, é possível visualizar os dados brutos e curados de acordo com uma data pré determinada pelo usuário. Outra funcionalidade é que há um *pin* de cor azul, que referencia a posição do usuário, pois ao clicar nesse pin, o Sistema redireciona para o local que se encontra o usuário, dando um zoom até a região. A viabilidade da visualização das estações meteorológicas em vários dispositivos pode potencialmente demonstrar vantagem competitiva para diversos usuários, com o foco em pequenos e médios agricultores, que têm dificuldade de acesso a *softwares* mais avançados, visto que a única necessidade é ter uma conexão com a Internet, logo, poderá realizar análises e melhorar o seu planejamento agrícola.

Palavras-chave: dados meteorológicos, estações pluviométricas.

Referências Bibliográficas

ANDRADE, L. S. et al. Aperfeiçoamento do Sistema Meteoro para Gerenciamento de Dados Pluviométricos no Rio de Janeiro. In: III Reunião Anual de Iniciação Científica da UFRRJ - III RAIC, Seropédica/RJ, 2015.

INED - Institut National D'étude Démographique. Disponível em: <https://www.ined.fr/en/everything_about_population/graphs-maps/interpretedgraphs/growth_population_2050/>. Acesso: 25 de julho de 2019.

ATUALIZAÇÃO DO SISTEMA METEORO PARA GERENCIAMENTO E TRATAMENTO DE DADOS PLUVIOMÉTRICOS NO ESTADO DO RIO DE JANEIRO

**Sidney Sampaio Alves¹, Gustavo Bastos Lyra^{3,4},
Ednaldo Oliveira dos Santos^{3,4}, Sérgio Manuel Serra da Cruz^{2,4},**

1. *Discente do curso de Sistemas da Informação da UFRRJ, Bolsista do grupo PET-SI*; 2*Docente do Departamento de Computação/ICE/UFRRJ*; 3*Docente do Departamento de Ciências Ambientais/IF/UFRRJ*; 4*Professor orientador.*

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Todo trabalho técnico-científico necessita de fontes de dados confiáveis para fomentar a discussão dos temas que aborda, porém, esta tarefa é complexa. Na área da meteorologia isto não é diferente, uma das principais dificuldades enfrentadas por cientistas quando se realizam trabalhos com dados meteorológicos é a obtenção de informações ordenadas, com as mesmas bases e em períodos similares, sobretudo quando se necessita trabalhar com dados climáticos de longo prazo. Atualmente, no Brasil, verifica-se que ainda não existe um sistema integrado em nível nacional disponível com dados meteorológicos (VICENTE-SERRANO & BEGUERÍA-PORTUGUÉS, 2003), esses dados são obtidos a partir de estações meteorológicas, geograficamente distribuídas em todo território nacional e fornecidos por vários órgãos, entre eles, a Agência Nacional de Águas (ANA). Dado essa limitação, percebeu-se a necessidade da criação do sistema *Meteoro*, que é focado na coleta e tratamento de dados pluviométricos em larga escala. O sistema *Meteoro* tem a premissa de fornecer resultados de consultas de dados meteorológicos com séries de longo tempo, de qualidade e contínuas, melhorando o desempenho no gerenciamento dos mesmos (LEMOS FILHO et. al., 2013). Entretanto, com as constantes evoluções e mudanças nas ferramentas tecnológicas usadas pela sociedade, houve a necessidade de uma atualização no sistema *Meteoro* para que o mesmo seja capaz de acompanhar, com eficiência e eficácia, as novidades existentes e continue oferecendo seus serviços de maneira satisfatória. Este projeto apresenta a continuação do desenvolvimento do sistema *Meteoro*, com a refatoração das antigas funções do sistema e a criação de novas, além de uma *Application Programming Interface* (API) pública que fornecerá os dados das estações meteorológicas em formato JSON aberto para aplicações de terceiros. A metodologia utilizada nesta pesquisa foi a Fábrica de Software baseada em Métodos Ágeis desenvolvida pelo PET-SI da UFRRJ (CRUZ et al., 2013). A nova atualização do sistema *Meteoro* utiliza o *framework* PHP denominado Laravel, banco de dados relacional MySQL e um *design* responsivo em sua *landing page*. Conclui-se que apenas um conjunto de dados confiáveis podem dar sustentação aos estudos e pesquisas, sendo assim, o sistema *Meteoro* oferece um apoio tecnológico aos tomadores de decisão que necessitam acessar dados meteorológicos de qualidade, além disso ele democratiza o acesso ao conhecimento científico.

Palavras-chave: Chuva, precipitação, dados pluviométricos.

Referências Bibliográficas

VICENTE-SERRANO, S. M.; BERGUERÍA-PORTUGUÉS, S. Estimating Extreme Dry-Spell Risk in the Middle Ebro Valley (Northeastern Spain): A Comparative Analysis of Partial Duration Series with a General Pareto Distribution and Annual Maxima Series With a Gumbel Distribution. *International Journal of Climatology*, 2003.

LEMOS FILHO, G. R.; PRECINOTO, R. S.; CORREIA, T. P.; SANTOS, E. O.; LYRA, G. B.; CRUZ, S. M. S., 2013. Assimilação, Controle de Qualidade e Análise de Dados de Meteorológicos Apoiados por Proveniência. XXXIII CONGRESSO DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE COMPUTAÇÃO/BreSci – VII Brazilian e-Science Workshop, Maceió/AL, Julho/2013.

CRUZ, S. M. S. et al. 2013, Relato De Um Experimento Piloto De Uma Fábrica De Software Baseada Em Métodos Ágeis. Disponível em: <http://r1.ufrrj.br/petsi/wp-content/uploads/2013/11/ENAPET.pdf>. Acesso em: 15 ago, 2019.

SIMPLIFICAÇÃO DO MÉTODO PERMANGANIMÉTRICO PARA A DETERMINAÇÃO DE CARBONO ORGÂNICO TOTAL EM SOLOS**Cayo Matheus de Amorim Scot¹; Cristina Maria Barra²; Otavio Raymundo Lã² & José Geraldo Rocha Jr²**

1. Bolsista PICV, Discente do Curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Professor do DQA/IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra**RESUMO**

Yeomans-Bremner (1988) - (YB) é o método mais utilizado para determinação de carbono orgânico total (COT) em solos, baseado na oxidação de carbono orgânico com dicromato, em meio fortemente ácido, a quente (digestão). Após, faz-se uma retrotitulação do excesso de dicromato com Fe(II). O inconveniente do método YB é a produção de grandes quantidades de Cr no rejeito, o que gera um passivo ambiental a ser considerado. Azevedo (2018) propôs um método alternativo de oxidação de carbono orgânico (MACO) que produz um resíduo menos tóxico ao substituir o $K_2Cr_2O_7$ por $KMnO_4$ na etapa de digestão. Como a oxidação do carbono orgânico reduz o permanganato a MnO_2 nas condições estudadas, na retrotitulação, ambos, MnO_2 e permanganato em excesso reagem com o titulante Fe(II). O que não é um problema, pois conhecendo as reações envolvidas, e, através de estequiometria adequada, pode-se determinar o teor de carbono. Como a redução de MnO_2 a Mn(II) é mais lenta que a redução de MnO_4^- a Mn(II), introduziu-se no MACO uma etapa adicional, que é a adição de quantidade conhecida de Fe(II) e retrotitulação do excesso de Fe(II) com uma solução diluída de $KMnO_4$ de concentração molar conhecida. Este trabalho, tem por objetivo eliminar a etapa adicional, introduzindo, após a etapa de oxidação/digestão, a centrifugação para completa sedimentação do MnO_2 . Após, faz-se a retrotitulação de uma alíquota do sobrenadante (contendo somente excesso de permanganato) com Fe(II). O hidrogenofteralato de potássio (BFK) foi utilizado como fonte de carbono orgânico para avaliar a exatidão dos métodos YB e MACO e também foi feita a determinação do carbono orgânico total em solos (COT). As condições utilizadas foram: acidez - H_2SO_4 0,125 e 0,250 mol L⁻¹, temperatura de digestão de 70°C e tempo de digestão de 30 minutos, 4 réplicas. YB e o método proposto foram comparados através de teste de recuperação com o padrão BFK. ANOVA e test-t foram aplicados aos resultados de recuperação. A %REC de BFK em H_2SO_4 0,125 mol L⁻¹ do método proposto (101,0±0,8%) não foi significativamente diferente da %REC do método YB (101,0±2,0%). O método também foi aplicado a dois tipos de solos. No Chernossolo, não houve diferença significativa entre os teores de COT, YB - 24,0±0,1 g C Kg de solo e método proposto 23,8±0,3 g C Kg de solo. No Latossolo, YB - 17,3±0,5 g C Kg de solo e método proposto - 19,3±0,6 g C Kg de solo, não se pode afirmar que os teores de COT não foram diferentes.

Palavras-chave: COT, Yeomans e Bremner, oxidação de carbono orgânico.**Referências Bibliográficas**

- AZEVEDO, C.A. Determinação titrimétrica de carbono orgânico utilizando $KMnO_4$ como oxidante alternativo ao $K_2Cr_2O_7$. 33f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação). Instituto de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, 2018.
- YEOMANS, J.C.; BREMNER, J.M. A rapid and precise method for routine determination of organic carbon, *Comm. Soil Plant Anal.*, v 19, 1467, 1988.

ÍNDICE DE QUALIDADE DA ÁGUA (IQA) PARA AVALIAÇÃO DA ÁGUA SUPERFICIAL NA BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO DA GUARDA, BAIXADA DE SEPETIBA (RJ)**Andreilson Bispo Silva¹; Niriele Bruno Rodrigues²; Laura Delgado Mendes³**

1. Bolsista PIBIC, Discente do Curso de Geografia, IM/DGEO/UFRRJ; 2. Mestranda do Programa de Pós-Graduação em Agronomia – Ciência do Solo, UFRRJ; 3. Professora do IM/DGEO/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O uso e ocupação da terra causa impactos na qualidade da água numa bacia hidrográfica, especialmente em bacias urbanizadas. Nelas a poluição provém do despejo de efluentes domésticos e industriais que impactam a sua qualidade ambiental (TUCCI, 2008). Para averiguar a qualidade das águas superficiais pode-se utilizar marcadores ambientais como o Índice de Qualidade da Água (IQA). O objetivo desse trabalho é analisar a qualidade do sistema de drenagem do rio da Guarda através do IQA. A bacia hidrográfica localiza-se nos municípios de Itaguaí, Seropédica e Rio de Janeiro, numa área de, aproximadamente, 346 km². Com a instalação dos distritos industriais e a construção do porto de Itaguaí (década de 1960), a concentração urbano-industrial no entorno da baía de Sepetiba gerou um enorme impacto nos recursos naturais (água e solo). Os procedimentos foram levantamento bibliográfico teórico-conceitual, aquisição de dados brutos do IQA, no recorte temporal de 2014 a 2018, do Boletim de Qualidade das Águas Região Hidrográfica II - Guandu do Instituto Estadual do Ambiente do Estado do Rio de Janeiro (INEA), baseados na CETESB (2004), e do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE) e análise dos resultados. O mapeamento foi executado com o programa *Quantum GIS* (v. 2.18.2). Conforme a classificação do IQA, os corpos d'água oscilaram entre médio ($70 > IQA \geq 50$) e ruim ($50 > IQA \geq 25$). Os principais resultados são os que têm mais peso no cálculo do IQA, indicados a seguir, embora outros (Fósforo Total, Nitrato, Turbidez, Sólidos Dissolvidos Totais, Temperatura da água e do ar) também tenham sido analisados. O pH teve variação de 6,6 a 7,4. Ressalta-se que valores de pH afastados da neutralidade afetam a vida aquática e microorganismos responsáveis pelo tratamento biológico dos esgotos. O Oxigênio dissolvido (OD) é o principal parâmetro de caracterização dos efeitos de poluição das águas por despejos orgânicos, com valores inferiores à saturação (9,2 mg/L) indicando a presença de matéria orgânica (efluentes). O conjunto de dados de OD está abaixo do valor de saturação (o mais alto é 8,4mg/L). A variação da DBO de 2,0 a 16,0 (mg/l) aponta o aumento da estação chuvosa (12,0 mg/l em 2014) para a seca (16,0 mg/l em 2018), que violam parâmetros de referência (BRASIL, 2005) e indicam a baixa capacidade de decomposição por via aeróbica de matéria orgânica. Nesse sentido, o teor de matéria orgânica é elevado, proveniente do maior volume de despejos de efluentes no sistema de drenagem. Os Coliformes Termotolerantes apresentaram variação de 2.200 (período seco) à 1.600.000 (período chuvoso), indicando picos de poluição via efluente doméstico, e possibilidade de conter patógenos, esses responsáveis pela transmissão de doenças de veiculação hídrica. Os resultados indicam a condição de poluição das águas superficiais do rio da Guarda, proveniente de efluentes domésticos e industriais que afetam as suas características físico-químicas, por conseguinte, impactam na qualidade ambiental do sistema fluvial e se refletem nos dados do IQA. Constata-se que são necessárias medidas de mitigação no planejamento ambiental, especialmente sobre recursos hídricos.

Palavras-chave: Qualidade ambiental; sistema fluvial; águas urbanas.

Referências Bibliográficas

CETESB, Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental. **Relatório de Qualidade das Águas Interiores do Estado de São Paulo 2003/CETESB**. São Paulo: CETESB, 2004. 264 p.

CONAMA. Conselho Nacional do Meio Ambiente. **Resolução 557 de 17 de março de 2005, publicada no DOU nº 053, de 18/08/2005: Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes, e dá outras providências**. Disponível em: <<http://www2.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=459>>. Acesso em 16 de agosto de 2019.

TUCCI, C. E. M. Águas urbanas. **Estudos avançados**. São Paulo, v. 22, n. 63, p. 97-112, 2008.

ESTUDO DA TOXIDEX E POSSÍVEL ATIVIDADE ANTIOXIDANTE DOS EXTRATOS HEXÂNICO E ETANÓLICO DE PRÓPOLIS VERDE EM CÉLULAS DE *Saccharomyces cerevisiae***Bárbara de Souza Cardoso¹; Marina Wajsenzon Fonseca ²; Rosane Nora Castro³; Cristiano Jorge Riger⁴**

1. Discente do Curso de Química, IQ-UFRRJ; 2. Discente do PPGQ-UFRRJ; 3. Professora titular do IQ-DQO-UFRRJ; 4. Professor Adjunto do IQ-DBQ-UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra.

RESUMO

Espécies reativas de oxigênio (EROs) do metabolismo podem causar estresse oxidativo em vários tipos de células de tecidos afetados por várias patologias. Estas EROs aumentam a concentração de radicais livres e podem danificar as membranas plasmáticas pela peroxidação lipídica e promover o extravasamento e entrada de substâncias nas células alterando a homeostase celular, aumentando os níveis de estresse oxidativo e causando a morte celular. No entanto, existem substâncias endógenas e exógenas com propriedades antioxidantes, que podem reduzir o estresse nas células. Estudos mostram que a própolis possui atividade antioxidante e vários compostos com essas características foram detectados e isolados em diferentes extratos de própolis. O objetivo deste trabalho é avaliar a toxicidade e o potencial antioxidante de extratos etanólicos e hexânicos de própolis verde utilizando células de *Saccharomyces cerevisiae*, modelo eucariótico celular amplamente utilizado nesses estudos. Para testar a tolerância das células contra os extratos, estas foram cultivadas por aplicação em meio líquido de YPD a 2% (glicose a 2%, extrato de levedura a 1%, peptona a 2%). Em seguida, um volume correspondente a 20 mg de células foi incubado em meio líquido com diferentes concentrações dos de acordo com o metabolismo celular, se o metabolismo celular estiver acelerado ou normal, sua coloração ficará rosa, e quanto mais lento o seu metabolismo, a cor será azul e, conseqüentemente, menos fluorescente. Isso também pode ser observado qualitativamente. A análise antioxidante foi medida extratos (25, 50, 100 e 200 µg.mL⁻¹) por 1 hora, juntamente com controles negativos (não estressados) e positivos (estressado com 2,0 mM de H₂O₂). Após a incubação, as células foram colhidas, lavadas e o ensaio de vitalidade celular foi realizado. Neste ensaio foi utilizada a substância resazurina (azul), que, quando reduzida, forma a resorufina (rosa). O composto corante rosa apresentou fluorescência e sua quantificação foi realizada a 534nm (excitação) e 590nm (emissão). Como a resazurina é reduzida pelos níveis lipídicos peroxidizados nas membranas celulares, através do método TBARS, mantendo os mesmos parâmetros do teste de vitalidade. No entanto, houve pré-incubação com os extratos e subseqüente estresse com peróxido de hidrogênio 2,0 mM. Pela análise da vitalidade celular, os resultados revelaram que o extrato etanólico é menos tóxico para as células de levedura do que o extrato hexânico. Os resultados são expressos em porcentagens em comparação com o controle negativo. No experimento com extrato etanólico as quatro diferentes concentrações apresentaram valores iguais a 100%; enquanto o estresse por peróxido diminuiu a vitalidade celular para 91 ± 6,94%. Nos experimentos com o extrato de hexano, temos os seguintes resultados: 100 ± 1,62%, 99 ± 0,60%, 99 ± 1,15%, 97 ± 2,61% em ordem crescente de concentração do extrato. Os resultados da peroxidação lipídica ainda são preliminares, mas aparentemente a menor concentração do extrato etanólico tem atividade antioxidante. Os valores encontrados são expressos como pmol MDA / mg células e foram 94,87 para células sem estresse; 104,31 para células sob estresse com H₂O₂; e 95,29 para as células de estresse pré-incubadas com o extrato de 25 µg.mL⁻¹.

Palavras-chave: *Saccharomyces cerevisiae*, própolis, atividade antioxidante

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- YUAN, W., *et al.* Brazilian green propolis inhibits OX-LDL-stimulated oxidative stress in human umbilical vein endothelial cells partly through PI3K/Akt/m TOR-mediated Nrf2/HO-1 pathway. **Evid Based Complement Alternat Med**, 2019.
- DANTAS SILVA, R. P., *et al.* Antioxidant, antimicrobial, antiparasitic, and cytotoxic properties of various Brazilian propolis extracts. **PLOS ONE**, 12(3), e0172585. doi:10.1371/journal.pone.0172585 Antioxidant, antimicrobial, antiparasitic, and cytotoxic properties of various Brazilian propolis extracts. **PLoS One**, 12(3), e0172585.
- ZACCARIA, V., *et al.* Effect of green and brown propolis extracts on the expression levels of miRNAs, mRNAs and proteins, related to oxidative stress and inflammation. **Nutrients**, 9(10), E1090.

OPENSOILS WEB – SISTEMA DE GOVERNANÇA DE DADOS DE SOLOS

Ricardo Augusto Cordeiro¹; Alexia Duarte²; Filipe Klinger Marques de Lima³; Marcos Bacis Ceddia⁴ & Sérgio Manuel Serra da Cruz⁵

1. Bolsista de Iniciação Científica FAPUR, Discente do Curso de Sistemas de Informação, ICE/UFRRJ; 2. Bolsista do Programa de Educação Tutorial - PET-SI/UFRRJ, Discente do Curso de Sistemas de Informação, ICE/UFRRJ; 3. Bolsista do Programa de Educação Tutorial - PET-SI/UFRRJ, Discente do Curso de Sistemas de Informação, ICE/UFRRJ; 4. Professor do DS/IA/UFRRJ e PPGMMC/UFRRJ; 5. Professor do DECOMP/ICE/UFRRJ e PPGMMC/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

O solo é um recurso natural muito importante para a vida na terra. Tal recurso é explorado pela humanidade de diversas formas como, por exemplo, na agricultura para o plantio de alimentos, na mineração para a extração de metais preciosos, na construção civil como alicerce para a estrutura das edificações, dentre outros. Muitos esforços são realizados em diversas áreas no intuito de obter conhecimento a respeito do solo que se deseja explorar. Segundo LEPSCH (2011, p. 39), “engenheiros, agrônomos, químicos, geólogos, geógrafos, microbiologistas, silviculturistas, sanitaristas e especialistas em planejamentos regionais fazem uso e contribuem de forma significativa para o avanço da Ciência do Solo”. Os estudos a respeito do solo e os avanços tecnológicos contribuem para a eficiência produtiva nessas atividades socioeconômicas e para a redução dos impactos ambientais causados pela exploração deste recurso natural. A pedologia é a parte da ciência do solo que trata da origem, morfologia, mapeamento e classificação do solo. O trabalho do pedólogo começa a ser realizado no campo e com a utilização de ferramentas simples para o manuseio e captação das informações. Após o término do trabalho de caracterização do solo, as pesquisas desenvolvidas pelos pedólogos ficam frequentemente suscetíveis a perdas, uma vez que essas informações ficam salvas em documentos físicos e/ou arquivos em máquinas locais. Além disso, no Brasil existem diversos dados abertos de solos em órgãos reguladores, bibliotecas e acervos, porém muitas dessas informações encontram-se em papéis e/ou formatos pouco eficientes para acesso e manipulação. O OpenSoils é um sistema multiplataforma que busca informatizar, facilitar e centralizar o processo de governança dos dados de solos. O OpenSoils Web é uma ferramenta online para projetos de classificação e mapeamento de solos. Pela plataforma, o usuário é capaz de inserir desde dados mais simples, como a descrição morfológica, até dados mais complexos, como as análises laboratoriais. Em cada projeto é possível inserir uma nova equipe de trabalho, e para cada profissional é vinculado um nível de acesso, o que contribui para maior segurança e controle dos dados pelos gestores dos projetos. Além disso, a ferramenta gera relatórios a partir dos dados inseridos, permitindo a exportação e compartilhamento dessas informações. O OpenSoils Web possui ainda interface de programação para compartilhamento de funções e dados com outras aplicações. A partir disso foi possível desenvolver um aplicativo para coleta de dados *in situ* (OpenSoils Field) e outro aplicativo para consulta de dados abertos (OpenSoils Edu). O OpenSoilsDB é um banco de dados em nuvem estruturado conforme as necessidades dos profissionais de solos. Dessa forma, o OpenSoils facilita e otimiza o trabalho do pedólogo, uma vez que centraliza os esforços em um único sistema, diminui os retrabalhos e evita perdas de informações. O sistema proporciona a acessibilidade aos dados abertos, contribuindo assim para o aperfeiçoamento da exploração de cada tipo de solo e para a preservação ambiental. Sendo a preservação do solo um processo vital para a sociedade, tanto para a geração atual como para a geração futura.

Palavras-chave: Pedologia; Solo; Agroinformática; Agricultura Digital; Agricultura 4.0;

Referências Bibliográficas

KER, J. C. *et al.* **Pedologia fundamentos**. Viçosa: Sociedade Brasileira de Ciência de Solo, 2012.
CRUZ, S. M. S. da *et al.* **OpenSoils: e-Science em Segurança de Solos**. TICAL, 2018. LEPSCH, I. F. **19 lições de pedologia**. São Paulo: Oficina de textos, 2011.

ESTUDO DA VIABILIDADE CELULAR DE ÓLEOS ESSENCIAIS EM *Saccharomyces cerevisiae***Daniele Cabral Pires¹; Rodrigo de Paulo Osorio²; Marco André Alves de Souza³; Yara Peluso Cid⁴ & Cristiano Jorge Riger⁵**

1. Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Bolsista de mestrado CAPES, IQ/UFRRJ; 3. Professor do Departamento de Bioquímica, IQ/UFRRJ; 4. Professora do Departamento de Ciências Farmacêuticas, ICBS/UFRRJ; 5. Professor do Departamento de Bioquímica, IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Os óleos essenciais são compostos oleosos complexos, naturais e voláteis extraídos de plantas. Esses compostos apresentam várias propriedades biológicas como atividade antibacteriana, inseticida e antioxidantes. Por conta da atividade dos óleos essenciais contra pulgas e a problemática de agressividade de outros compostos empregados atualmente para esse fim; alguns óleos essenciais foram estudados e dois de destaque foram selecionados para este trabalho: o *Cymbopogon nardus* e o *Ocimum gratissimum*, comumente conhecidos como capim citronela e alfavaca cravo, respectivamente. Para a execução deste trabalho foi utilizada a cepa BY4741 de *Saccharomyces cerevisiae* na realização de ensaios *in vivo*. O objetivo deste trabalho foi avaliar a toxicidade dos óleos essenciais *Cymbopogon nardus* e o *Ocimum gratissimum* em células da levedura *Saccharomyces cerevisiae*. As células de levedura foram crescidas, incubadas com as substâncias e plaqueadas em placas de petri contendo meio YPD 2% sólido para as análises da citotoxicidade dos óleos. Os testes de toxicidade foram realizados através do método de viabilidade celular em placa de petri a partir da exposição das células durante períodos de 24 e 48 horas e os compostos fipronil e timol foram empregados como controles positivos nos testes. Os resultados foram determinados através da média e desvio padrão de pelo menos três ensaios independentes e expressos em porcentagem calculadas em função do controle negativo. Utilizou-se o teste ANOVA como ferramenta estatística para validação dos resultados em grupo e o pós-teste de Tukey para a comparação entre os valores individuais, com $p < 0,05$ em todos os resultados avaliados. A partir dos resultados de viabilidade celular no período de 24 horas, observou-se que os óleos essenciais e o fipronil não apresentaram efeitos significativos de toxicidade à *Saccharomyces cerevisiae*, porém o timol apresentou alta toxicidade, com viabilidade de 48,20%. Para o período de 48 horas de contato das células com as substâncias testadas, apenas *Cymbopogon nardus* na concentração de $100 \mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ e timol demonstraram redução na viabilidade celular, com valores de 85,22% e 18,42%, respectivamente. Concluindo, ambos os óleos essenciais apresentaram baixa toxicidade, demonstrando-se promissores quando comparados com o timol e o fipronil, amplamente empregados no combate a este tipo de praga.

Palavras-chaves: *Saccharomyces cerevisiae*, óleos essenciais, viabilidade celular.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

ANGOLIN et al. Eficácia do óleo de citronela [*Cymbopogon nardus* (L.) Rendle] no controle de ectoparasitas de bovinos. **Revista brasileira de plantas medicinais**, Santa Maria, v. 12, n. 4, outubro - dezembro 2010.

AZAMBUJA, W. **oleosessenciais.org**, 2017. Disponível em: <<http://www.oleosessenciais.org/timol/>>. Acesso em: 30 setembro 2018.

BARONE, A.; FERNANDES, A. **Filo arthropoda**. Profbio. [S.l.], p. 3. 2015.

ESTUDO COMPARATIVO DA INTERAÇÃO ENTRE ALBUMINA SÉRICA HUMANA (ASH) E DOIS POTENCIAIS INIBIDORES DE MONOAMINA OXIDASE

Sara de Souza Monteiro¹ Adriele Oliveira Batista² Renatta de Oliveira Machado.² Isabelle Fernanda Cezar da Silva² e Dari Cesarin Sobrinho³

1. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ, 2. Aluno PICV. Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ, 3. Professor do IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A desaminação oxidativa de amins endógenas presentes como neurotransmissores (e.g. serotonina e epinefrina) são catalisadas pela família das enzimas denominadas monoamina oxidase (MAO), sendo estas divididas em subclasses: MAO-A e MAO-B [1]. Diversos distúrbios neurológicos, incluindo depressão, doença de Alzheimer (DA) e doença de Parkinson (DP) são afetadas principalmente pela alteração dos níveis de concentração das isoformas da MAO no cérebro. Na DP, o tipo seletivo de inibidores da MAO-B é recomendado como terapia adjuvante com levodopa, para aumentar o nível de dopamina [1]. Estudos indicam que o efeito do substituinte doador de elétrons na posição *para* no anel A da estrutura base de chalcona pode modificar profundamente a seletividade frente à MAO-B. Ao mesmo tempo, a introdução de grupos lipofílicos, tais como flúor, bromo, cloro e trifluorometila no anel B pode aumentar a ação inibitória da MAO-B humana (hMAO-B) [1]. A albumina sérica humana (ASH) é uma das proteínas globulares mais abundantes no sistema circulatório humano, tendo como principal função o de transporte e biodistribuição de compostos bioativos de caráter hidrofóbico [2]. Desse modo, a interação entre albumina e compostos bioativos pode impactar diretamente na disponibilidade de potenciais fármacos (e.g. inibidores de MAO) na corrente sanguínea. O presente trabalho visa estudar a interação entre ASH e dois derivados imidazólicos de chalcona (ICHs) substituídas por átomos de flúor (**Figura 1**), empregando-se técnicas espectroscópicas de absorção e emissão de fluorescência.

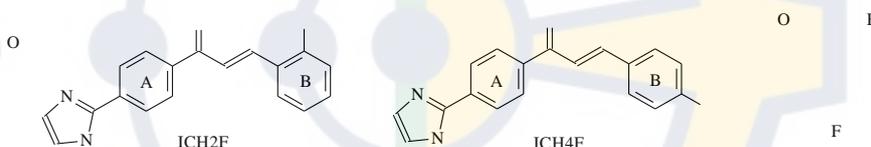


Figura 1 Estrutura química das imidazol chalconas: ICHs (ICH2F e ICH4F).

Através dos estudos de supressão de fluorescência, foram calculados os valores termodinâmicos (G° , H° e S°) bem como as constantes de velocidade de supressão (k_q) e de ligação (K_b) e o número de sítios de ligação (n) (**Tabela 1**). Os resultados indicam que há interação fraca no estado fundamental em um principal sítio da ASH, sendo que a posição de átomos de flúor exerce influência na interação.

Tabela 1. Valores para os parâmetros G° , H° e S° , K_q , K_b , e n em pH = 7,4. $C_{ASH} = 1.0 \times 10^{-5}$ mol/L

	T (K)	H°	S°	G°	K_b	k_q	n
ICH2F	310	-4,99	0,105	-37,68	$1,59 \times 10^4$	$4,35 \times 10^{12}$	0,890
ICH4F	310	-19,8	0,151	-66,68	$9,66 \times 10^3$	$2,89 \times 10^{12}$	0,910

Palavras-chaves: Chalcona; Imidazol; ASH

Referências Bibliográficas

- SASIDHARAN R., BAEK S. C., MANJU S. L., KIM H. e MATHEW B. Imidazole bearing chalcones as a new class of monoamine oxidase inhibitors. **Biomedicine & Pharmacotherapy**, 106 p. 8–13 (2018)
- CHAVES O. A., AMORIM A. P. O., CASTRO L. H. E., SANT'ANNA, C. M. R. OLIVEIRA M. C. C., CESARIN-SOBRINHO D., NETTO-FERREIRA J. C. e FERREIRA A. B. B. Fluorescence and Docking Studies of the Interaction between Human Serum Albumin and Pheophytin. **Molecules**, 20, p. 19526-30 (2015)

ESTUDO COMPARATIVO DA INTERAÇÃO ENTRE ALBUMINA SÉRICA HUMANA (ASH) E DOIS POTENCIAIS INIBIDORES DE MONOAMINA OXIDASE

Sara de Souza Monteiro¹ Adriele Oliveira Batista² Renatta de Oliveira Machado.² Isabelle Fernanda Cezar da Silva² e Dari Cesarin Sobrinho³

1. Bolsista PIBIC, Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ, 2. Aluno PICV. Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ, 3. Professor do IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

A desaminação oxidativa de amins endógenas presentes como neurotransmissores (e.g. serotonina e epinefrina) são catalisadas pela família das enzimas denominadas monoamina oxidase (MAO), sendo estas divididas em subclasses: MAO-A e MAO-B [1]. Diversos distúrbios neurológicos, incluindo depressão, doença de Alzheimer (DA) e doença de Parkinson (DP) são afetadas principalmente pela alteração dos níveis de concentração das isoformas da MAO no cérebro. Na DP, o tipo seletivo de inibidores da MAO-B é recomendado como terapia adjuvante com levodopa, para aumentar o nível de dopamina [1]. Estudos indicam que o efeito do substituinte doador de elétrons na posição *para* no anel A da estrutura base de chalcona pode modificar profundamente a seletividade frente à MAO-B. Ao mesmo tempo, a introdução de grupos lipofílicos, tais como flúor, bromo, cloro e trifluorometila no anel B pode aumentar a ação inibitória da MAO-B humana (hMAO-B) [1]. A albumina sérica humana (ASH) é uma das proteínas globulares mais abundantes no sistema circulatório humano, tendo como principal função o de transporte e biodistribuição de compostos bioativos de caráter hidrofóbico [2]. Desse modo, a interação entre albumina e compostos bioativos pode impactar diretamente na disponibilidade de potenciais fármacos (e.g. inibidores de MAO) na corrente sanguínea. O presente trabalho visa estudar a interação entre albumina e dois derivados imidazólicos de chalcona (ICHs) substituídas por átomos de flúor (**Figura 1**), empregando-se técnicas espectroscópicas de absorção e emissão de fluorescência.

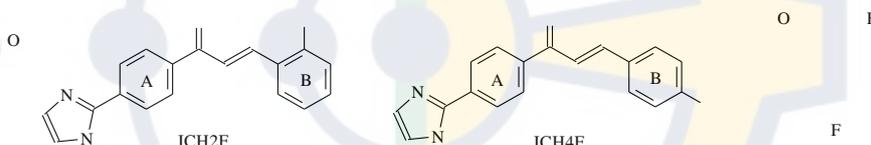


Figura 1 Estrutura química das imidazol chalconas: ICHs (ICH2F e ICH4F).

Através dos estudos de supressão de fluorescência, foram calculados os valores termodinâmicos (G° , H° e S°) bem como as constantes de velocidade de supressão (k_q) e de ligação (K_b) e o número de sítios de ligação (n) (**Tabela 1**). Os resultados indicam que há interação fraca no estado fundamental em um principal sítio da ASH, sendo que a posição de átomos de flúor exerce influência na interação.

Tabela 1. Valores para os parâmetros G° , H° e S° , K_q , K_b , e n em pH = 7,4. $C_{ASH} = 1.0 \times 10^{-5}$ mol/L

	T (K)	H°	S°	G°	K_b	k_q	n
ICH2F	310	-4,99	0,105	-37,68	$1,59 \times 10^4$	$4,35 \times 10^{12}$	0,890
ICH4F	310	-19,8	0,151	-66,68	$9,66 \times 10^3$	$2,89 \times 10^{12}$	0,910

Palavras-chaves: Chalcona; Imidazol; ASH

Referências Bibliográficas

- [1] SASIDHARAN R., BAEK S. C., MANJU S. L., KIM H. e MATHEW B. Imidazole bearing chalcones as a new class of monoamine oxidase inhibitors. **Biomedicine & Pharmacotherapy**, 106 p. 8–13 (2018)
- [2] CHAVES O. A., AMORIM A. P. O., CASTRO L. H. E., SANT'ANNA, C. M. R. OLIVEIRA M. C. C., CESARIN-SOBRINHO D., NETTO-FERREIRA J. C. e FERREIRA A. B. B. Fluorescence and Docking Studies of the Interaction between Human Serum Albumin and Pheophytin. **Molecules**, 20, p. 19526-30 (2015)

ANÁLISE DA INSTABILIDADE DO RELEVO POR EROSÃO OU TECTONISMO POR MEIO DE ÍNDICES GEOMÓRFICOS APLICADOS EM BACIAS HIDROGRÁFICAS NA REGIÃO DA SERRA DO IBITIPOCA (MG)

Iany Macedo Barcelos¹, Paloma Moreira da Silva², Vivian Carmello Grom³, Amanda Ribeiro de Souza⁴, Clauzionor Lima da Silva⁵

1. Participante de projeto de pesquisa, Discente do Curso de Geologia, DPG/UFRRJ; 2. Participante de projeto de pesquisa, Discente do Curso de Geologia, DPG/UFRRJ; 3. Bolsista de Iniciação Científica PIBIC, Discente do Curso de Geologia, DPG/UFRRJ; 4. Discente do mestrado no Curso de Geologia, DPG/UFRRJ; 5. Professor do DPG/UFRRJ.

Grande Área: Geociências

RESUMO

A região da Serra do Ibitipoca, zona da mata mineira, se trata de uma área importante e que atrai tanto turistas, quanto cientistas, diante da fauna e flora que compõem o principal parque florestal da região, o Parque Estadual do Ibitipoca (PEI). Do ponto de vista geológico, o local abrange gnaisses paleoproterozoicos dos complexos Juiz de Fora e Mantiqueira e quartzitos neoproterozoicos do grupo Andrelândia, situados sob sucessivos eventos deformacionais dúcteis, cujo relevo tem sido relacionado a eventos orogênicos que abrange empurrões, dobramentos e zonas de cisalhamento. Eventos tectônicos rúpteis têm sido reportados recentemente, com controle efetivo na formação das cachoeiras, corredeiras e cavernas muito comuns na região, contrastando com os processos erosivos entre as rochas quartzíticas intercaladas com xistos na referida serra e os gnaisses das áreas adjacentes. Nesse sentido, foram analisadas a bacia do rio do Salto e parte das bacias dos rios Vermelho, córrego Santo Antônio e Grão-Mogol, localizadas na porção leste da serra, com o objetivo de avaliar a influência tectônica nesse relevo e sua instabilidade. O método empregado envolveu a aplicação de índices geomórficos como perfis longitudinais, análise de *knickpoints*, índices de declividade normalizados (KSN) e gráficos de *Chi-plot*, em modelos digitais de elevação (DEM SRTM) a partir de rotinas adotadas no MatLab (versão 9.3 2017). Na bacia do rio do Salto, que flui, em grande parte, sobre os quartzitos da serra, foram observadas inúmeras rupturas de declive, as quais foram associadas a zonas de falhas. Os gráficos mostram um desequilíbrio dessa drenagem, cujo processo de erosão tem resposta associada às orientações das falhas. Na área adjacente à serra, as bacias dos rios Vermelho, córrego Santo Antônio e Grão-Mogol, que se desenvolvem parte no quartzito e boa parte em gnaíse, apresentam rupturas erosivas relativas ao contato litológico, mas há indícios de processo de captura fluvial e *knickpoints* que possivelmente têm origem tectônica. As análises mostram uma migração do divisor da bacia do rio do Salto no sentido das bacias adjacentes, devido a pequenas instabilidades observadas por meio dos gráficos *Chi-plot*. Desse modo, conclui-se que o sistema se encontra em estágio transiente, resultado da combinação da atuação tectônica e erosão subsequente, as quais devem conduzir as transformações geomorfológicas e a reorganização das bacias hidrográficas na região supracitada.

Palavras-chave: Índices geomórficos, deformações rúpteis, Serra do Ibitipoca.

Referências Bibliográfica

Willett et al. **Dynamic Reorganization of River Basins**. Science vol. 343, mar. 2014.

PERRON, J. Taylor, ROYDEN, Leigh. **An integral approach to bedrock river profile analysis**. Earth Surface Processes and Landforms vol. 38, pag. 570-576, ago. 2012.

ANTIOXIDANT POTENTIAL OF *Petroselinum crispum* (PARSLEY) AQUEOUS EXTRACT in *Saccharomyces cerevisiae* cells**Jéssica Sodré Mendes¹; Karine Falcão dos Santos²; Neide Mara de Menezes Epifanio³; Douglas Siqueira de Almeida Chaves⁴ & Cristiano Jorge Riger⁵**

1.Discente do Curso de Engenharia Química, DEQ/UFRRJ; 2.Discente do Curso de Química, DQUIM/UFRRJ; 3.Pós graduanda do curso de Química DQUIM/UFRRJ; 4.Docente do Departamento de Ciências Farmacêuticas ICBS/UFRRJ; 5. Docente do Departamento de Bioquímica ICE/UFRRJ.

Grande área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Oxidative stress is caused by an imbalance between oxidant species, such as reactive oxygen species (ROS) and the insufficient intracellular defense mechanisms. These species cause damage to cells and tissues, and may be precursors to a number of pathologies as neurodegenerative and circulatory diseases, as well as carcinomas. Due to this fact, several studies investigate the prevention of the production of this oxidative stress through substances that have antioxidant action capable of maintaining intracellular redox homeostasis. In our previous studies, apiin showed antioxidant activity in *S. cerevisiae* cells, and their glycosylated flavonoid is present in the aqueous extract of *Petroselinum crispum* (parsley). Considering that aqueous extract of parsley has approximately 6.0% apiin, it was interesting to verify the antioxidant action of the aqueous extract of parsley in the same cellular model of study in order to compare with the results of the apiin. Therefore, the aim of this study was to verify if non-cytotoxic concentrations of the aqueous extract of parsley would show, in *S. cerevisiae* cells, a protective antioxidant effect through the oxidative stress induced by hydrogen peroxide solution. Cell toxicity and viability assays in addition to membrane lipid damage were performed on yeast cells. In the toxicity assay, cells were incubated in YPD 2% (2% glucose, 2% peptone, 1% yeast extract) for 1 hour with 200 and 400 $\mu\text{L.mL}^{-1}$ of the aqueous extract and then seeded onto plates of petri with YPD 2% solid medium and the colonies counted after 48 hours. The viability assay followed the same experimental standards, however the hydrogen peroxide addition step (1.0 mM) was added after treatment of the cells with both extracts concentrations. In the lipid peroxidation test, cells preincubated with the extract and under oxidative stress with H_2O_2 were lysed with glass beads, and the malonaldehyde formed in the peroxidation was determined spectrophotometrically (532 nm) in reaction with thiobarbituric acid. The results showed that 200 and 400 $\mu\text{L.mL}^{-1}$ were the highest non-cytotoxic concentrations to yeast cells, obtaining survival percentages of $81.67 \pm 4.16\%$ and $105.33 \pm 6.81\%$ respectively. The results of the antioxidant potential parsley extract by cell viability through the oxidative stress by hydrogen peroxide (1.0 mM) showed similar protection in both concentrations. Cells stressed with H_2O_2 had viability of $26.50 \pm 8.88\%$, and with preincubation with extracts increased to $54.25 \pm 20.67\%$ and $46.33 \pm 5.51\%$ respectively. Preliminary results of lipoperoxidation showed the parsley extract did not decrease the damages in the cell membranes caused by H_2O_2 . *Petroselinum crispum* aqueous extract at concentrations of 200 and 400 $\mu\text{L.mL}^{-1}$ showed an antioxidant action on *Saccharomyces cerevisiae* cells, however, the lipoperoxidation tests were are not conclusive need future investigations with different concentrations.

Palavras-chave: oxidative stress with H_2O_2

Referências Bibliográficas

TLATEMOANI. Espanha: Revista Acadêmica de Investigação, n. 11, set 2012.

ESTUDOS DO PERFIL FENÓLICO E ATIVIDADE ANTIOXIDANTE DE COMPOSTOS FENÓLICOS FERMENTADOS POR LACTOBACILOS UTILIZANDO COMO MODELO A LEVEDURA *Saccharomyces cerevisiae*

Marcos Vinicius da Conceição Braz¹; Edlene Ribeiro Prudêncio²; Rosane Nora Castro³ & Cristiano Jorge Riger⁴

1. Discente do curso de Química, IQ/UFRRJ; 2. Discente de Doutorado, IQ/UFRRJ; 3. Professora do Departamento de Química Orgânica, IQ/UFRRJ; 4. Professor do Departamento de Bioquímica, IQ/UFRRJ.

Grande Área: Ciências Exatas e da Terra

RESUMO

Várias linhas de evidência sugerem que dietas ricas em polifenóis podem ter efeitos neuroprotetores que resultam em um menor risco de doenças neurodegenerativas, incluindo a Doença de Parkinson (DP). A DP está associada ao envelhecimento e apresenta acúmulo de uma proteína intraneuronal geradora de corpos Levy, que leva à perda seletiva de neurônios dopaminérgicos localizados na região da substância negra. Estudos indicam que há uma relação de PD com o acúmulo de espécies reativas de oxigênio (ROS) e disfunção mitocondrial, contribuindo para processos que levam a distúrbios celulares, causando danos irreversíveis às regiões neuronais. Os compostos polifenólicos são bem conhecidos por sua capacidade de eliminação de ROS, o fato de que eles podem chegar ao cérebro leva à sugestão de que eles podem aliviar a neurodegeneração através de mecanismos adicionais de proteção. Estudos recentes indicam que a atividade antioxidante dos fenólicos pode ser modificada pela fermentação microbiana, uma vez que os efeitos benéficos dos compostos fenólicos podem estar relacionados, em parte, a seus metabólitos. O objetivo deste trabalho foi avaliar a influência da incubação de compostos fenólicos com probióticos sobre a atividade antioxidante desses compostos fenólicos utilizando o controle de *Saccharomyces cerevisiae* e células mutantes. Para avaliar se a fermentação influencia a atividade antioxidante dos compostos fenólicos, o CAPE e a mangiferina foram expostos a probióticos com incubação por contato de 0,1 mM de CAPE e mangiferina com 10^8 células.L¹ de mistura probiótica Babybiotic®. O perfil fenólico foi determinado antes e depois da fermentação por HPLC / DAD. A atividade antioxidante foi avaliada em células de levedura após tratamento com 0,1 mM de fenólicos (fermentados ou não) por 2 horas. Em seguida, as culas foram expostas a peróxido de hidrogênio (2,0 mM) durante 1 hora, diluídas e plaqueadas em meio YPD. Os resultados foram comparados com controles negativos (não estressados) e positivos (apenas estressados com H₂O₂). Cromatogramas obtidos por HPLC indicam que 50% do CAPE foi convertido em seus precursores ácido cafeico e ácido quinico, provavelmente devido a esterases produzidas pela bactéria. Por outro lado, apenas 0,3% da mangiferina foi convertida em outros produtos. Na linhagem BY4741 (strain controle) o CAPE, o CAPE fermentado e a mangiferina promoveram maior viabilidade, alcançando cerca de 60% de sobrevivência, em comparação com 40% do controle positivo. A fermentação diminuiu a atividade da mangiferina, uma vez que esse tratamento não promoveu tolerância ao estresse oxidativo. Quando a cepa Δ ctt1 foi avaliada, o CAPE manteve a sobrevivência do controle positivo (60%), enquanto os demais tratamentos foram levemente tóxicos (40% de sobrevivência). Perfil semelhante foi observado na linhagem Δ gsh1, com a diferença de que a mangiferina fermentada era altamente tóxica para as células, inibindo o crescimento das leveduras, enquanto outras eram semelhantes às células sob estresse de peróxido (20% de sobrevivência). A mesma metodologia será utilizada para analisar a influência da cepa mutante superóxido dismutase (Δ sod1). Os resultados mostram que os fenólicos se comportam de diferentes maneiras de acordo com a deleção no sistema de defesa. Em geral, a fermentação reteve a atividade antioxidante do CAPE, mas reduziu a atividade da mangiferina. Embora a análise por HPLC tenha mostrado que apenas uma pequena fração da mangiferina foi modificada, outros componentes do metabolismo bacteriano podem estar influenciando a atividade antioxidante dos fenólicos.

Palavras-chaves: *Saccharomyces cerevisiae*, compostos fenólicos, atividade antioxidante.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- MELO, E.A; GUERRA, N.B. Ação antioxidante de compostos fenólicos naturalmente presentes em alimentos. **Bol. SBCTA**. Campinas: v.36, n. 1, p. 1-11, 2002.
- MICHAEL, T.; LIN, M.; FLINT, BEAL. Mitochondrial dysfunction and oxidative stress in neurodegenerative diseases. *Nature*, v. 443 p. 787-795, 2006.
- Antioxidant Effect of Caffeic Acid Derivatives on Sod and Glutathione Defective Yeasts Applied *Biochemistry and Microbiology*, 55(3), 264-269