Gestão:

Reunião de Acompanhamento e Avaliação - RAA 2026

Programa de Inovação e Sustentabilidade no Setor Petroquímico e de Biocombustíveis

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio)
Coordenadora: Amanda Lemette T. Brandão / E-mail: amanda.lemette@puc-rio.br

PROGRAMA PRH-ANP 23 / PUC-RIO

PROGRAMA DE INOVAÇÃO E SUSTENTABILIDADE NO SETOR PETROQUÍMICO E DE BIOCOMBUSTÍVEIS

Objetivo

Qualificar profissionais para atuar em óleo, gás, biocombustíveis e energia. Linhas temáticas alinhadas com as prioridades da ANP e diretrizes do CNPE:

Biocombustíveis | **Transformação Digital** | **Armazenamento de Energia**

Instituição sede

PUC RIO

Departamentos envolvidos

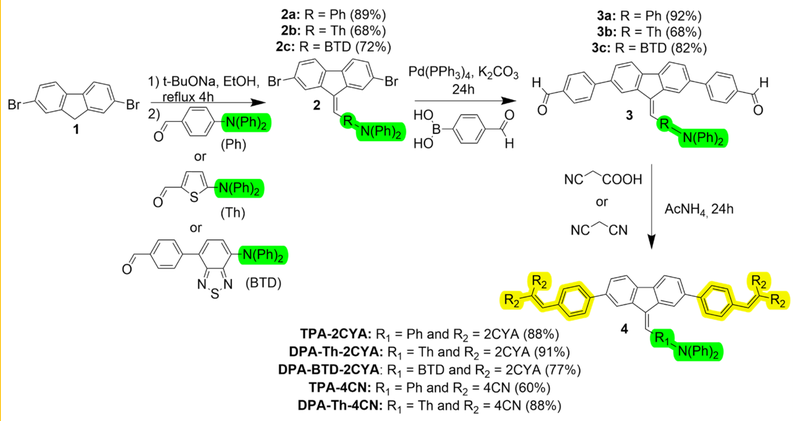
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA PUC-Rio

Deqm*

ÁREA DE ATUAÇÃO

Projetos de pesquisas distribuídos em três grandes áreas de atuação:

Segurança, Sustentabilidade e Inovação em Materiais



Síntese de corantes orgânicos para células solares do tipo DSSC

Eficiência e Sustentabilidade no Abastecimento Petroquímico



Modelo OSCAR utilizado para prever dispersão de óleo em derramamentos na Margem Equatorial

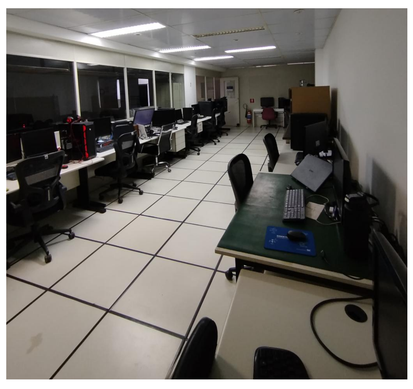
Biocombustíveis e Energia Renovável



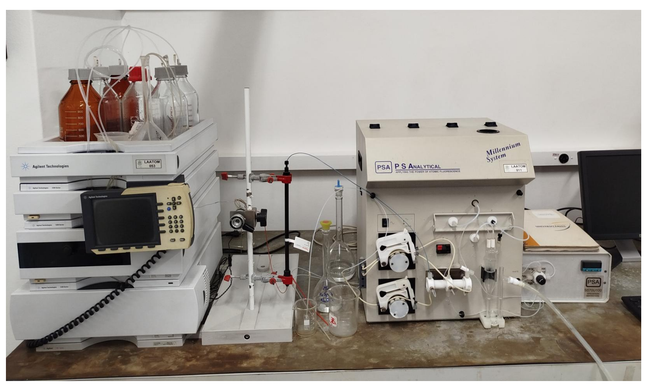
Recuperação energética de resíduos produzidos no setor sucroalcooleiro

INFRAESTRUTURA

Central Analítica Pe. Leopoldo Hainberger S.J. CAPLH | LASURF | MicDigi PUC-Rio | LaSOQF Laboratório de Síntese Orgânica e Química Fina PUC-Rio | GAAP









16 Laboratórios do Departamento de Engenharia Química e de Materiais (DEQM) / 19 Laboratórios do Departamento de Química (DQ)

RESULTADOS (CICLO 2025 – 2026)



REPÚBLICA FEDERATIVA DO BRASIL
MINISTÉRIO DO DESENVOLVIMENTO, INDÚSTRIA, COMÉRCIO E SERVIÇOS
INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL
DIRETORIA DE PATENTES, PROGRAMAS DE COMPUTADOR E TOPOGRAFIAS DE CIRCUITOS

Certificado de Registro de Programa de Computador

Processo Nº: **BR512026000245-1**

O Instituto Nacional da Propriedade Industrial expede o presente certificado de registro de programa de computador, válido por 50 anos a partir de 1º de janeiro subsequente à data de 16/05/2025, em conformidade com o 52º, art. 2º da Lei 9.609, de 19 de Fevereiro de 1998.

Título: Simulação aceleradas da microestrutura de copolímeros usando Monte Carlo

Data de criação: 16/05/2025

Titular(es): FACULDADES CATOLICAS

Autor(es): AMANDA LEMETTE TEIXEIRA BRANDÃO; JOÃO GONÇALVES NETO; ISABELA CHIARA ALLAM DA SILVA

Linguagem: PYTHON

Campo de aplicação: FO-14; FQ-15; IN-03

Tipo de programa: FA-04; SM-01

Algoritmo hash: SHA-256

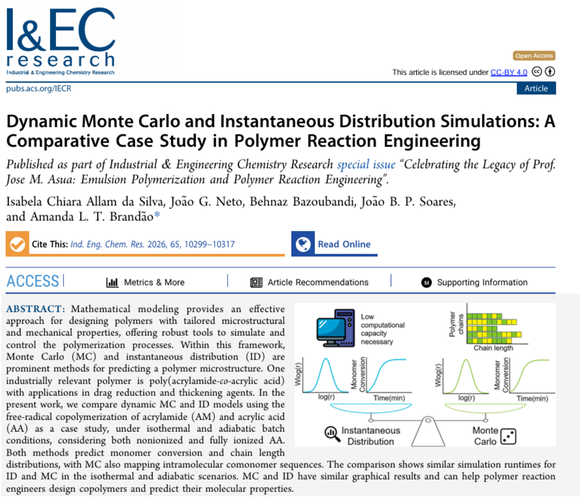
Resumo digital hash: 06C41467EFDE6C39561993DF877EFB82A79058A8548D63DFCD29C06D57596

Expedido em: 27/01/2026

REPÚBLICA FEDERATIVA DO BRASIL 15 de Novembro de 1889

Aprovado por:
ERICA GUIMARAES CORREA
Chefe da Divisão de Programas de Computador e Topografias de Circuitos Integrados

+



I&EC research
Industrial & Engineering Chemistry Research
pubs.acs.org/IECR
Article

Open Access
This article is licensed under CC BY 4.0

Dynamic Monte Carlo and Instantaneous Distribution Simulations: A Comparative Case Study in Polymer Reaction Engineering

Published as part of Industrial & Engineering Chemistry Research special issue "Celebrating the Legacy of Prof. Jose M. Asua: Emulsion Polymerization and Polymer Reaction Engineering".

Isabela Chiara Allam da Silva, João G. Neto, Behnaz Bazoubandi, João B. P. Soares, and Amanda L. T. Brandão*

Cite This: *Ind. Eng. Chem. Res.* 2026, 65, 10299−10317

Read Online

ACCESS | Metrics & More | Article Recommendations | Supporting Information

ABSTRACT: Mathematical modeling provides an effective approach for designing polymers with tailored microstructural and mechanical properties, offering robust tools to simulate and control the polymerization processes. Within this framework, Monte Carlo (MC) and instantaneous distribution (ID) are prominent methods for predicting a polymer microstructure. One industrially relevant polymer is poly(acrylamide-*co*-acrylic acid) with applications in drag reduction and thickening agents. In the present work, we compare dynamic MC and ID models using the free-radical copolymerization of acrylamide (AM) and acrylic acid (AA) as a case study, under isothermal and adiabatic batch conditions, considering both nonionized and fully ionized AA. Both methods predict monomer conversion and chain length distributions, with MC also mapping intramolecular comonomer sequences. The comparison shows similar simulation runtimes for ID and MC in the isothermal and adiabatic scenarios. MC and ID have similar graphical results and can help polymer reaction engineers design copolymers and predict their molecular properties.

+



+



Publicação de artigos científicos; Registro de Software, Apresentação em Eventos e Visitas Técnicas

PARCERIAS NACIONAIS E INTERNACIONAIS

PEQ COPPE UFRJ | CE CHIMICA EDILE | UNIVERSITY OF ALBERTA | HRW

CANAIS DE DIVULGAÇÃO

https://