

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Junior

TÍTULO: Modelagem matemática e simulação computacional de sistemas eletroquímicos aplicados ao tratamento de efluentes

RESUMO

A contaminação por nitratos é encontrada extensivamente nas águas subterrâneas. O uso excessivo de fertilizantes nitrogenados e o lançamento de esgoto são as principais fontes de contaminação por nitratos. Por outro lado, a reação eletroquímica de redução de nitrato à amônia é uma rota promissora. Quando alimentada por eletricidade renovável, a eletrólise fornece um método sustentável para gerar amônia a partir de íons nitrato. A modelagem matemática pode ser usada para investigar características da(s) célula(s) e a dinâmica de fluidos durante reações de redução eletroquímica. Além disso, sistemas bioeletroquímicos, como células a combustível microbianas (MFCs), são dispositivos que exploram a capacidade de microrganismos exoeletrogênicos para transferir elétrons. Ao longo dos últimos anos, as MFCs têm recebido crescente interesse devido à abordagem sustentável para o tratamento de águas residuais, juntamente com o uso como sistemas alternativos para geração de energia. MFCs podem converter em corrente elétrica a energia química contida nos substratos orgânicos presentes em águas residuais. Recentemente, alguns estudos experimentais foram realizados usando efluentes de refinaria de petróleo em MFCs. As águas residuais de refinarias de petróleo são poluentes ambientais se o tratamento não for adequado. A abordagem vem sendo estendida em MFCs aplicadas ao tratamento de águas residuais de biorrefinarias de bioetanol/biodiesel. Um dos parâmetros mais importantes de uma MFC é a sua curva de polarização, que é usada para avaliar o desempenho com base na geração de energia elétrica. Uma curva de polarização representa a tensão em função da corrente. A MFC é um sistema relativamente complexo que envolve processos bioeletroquímicos, transferência de carga, massa e energia. Assim, tendo como base informações experimentais disponíveis na literatura, desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para sistemas eletroquímicos aplicados ao tratamento de efluentes.

Palavras-chaves: Sistemas eletroquímicos; modelagem matemática; processos eletroquímicos e biológicos