

**ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos**

**DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Junior**

**TÍTULO: Modelagem e simulação de células a combustível enzimáticas**

**RESUMO**

As células a combustível biológicas usam microrganismos ou enzimas como catalisadores. Em uma célula a combustível microbiana, as reações de oxidação são catalisadas por microrganismos. Alternativamente, quando o catalisador é uma enzima, a célula é chamada de célula a combustível enzimática. O funcionamento de uma célula a combustível biológica se assemelha ao de uma célula a combustível convencional: no ânodo, um combustível sofre oxidação. Esta reação libera elétrons que alcançam o cátodo por meio de um circuito externo. No cátodo, um oxidante (geralmente oxigênio) é reduzido. As células a combustível biológicas usualmente utilizam, no ânodo, substratos orgânicos como álcoois e açúcares, e operam em temperatura amena. Atualmente, ainda é necessário compreender melhor e/ou prever o comportamento de sistemas de células a combustível biológicas por meio de seus principais processos eletroquímicos, biológicos e de transferência de massa, a fim de desenvolver ainda mais essa tecnologia (de modo a viabilizar suas aplicações práticas). Neste contexto, a modelagem matemática e a simulação computacional podem ser “ferramentas” importantes. Assim, desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para uma célula a combustível enzimática. Mais especificamente, pretende-se aplicar um modelo unidimensional considerando a transferência acoplada de calor, carga e massa, juntamente com as reações bioeletroquímicas que ocorrem na célula. Utilizar-se-á o software Scilab (ou o Matlab) para a implementação do modelo e solução das suas equações. O modelo poderá prever as tendências para a influência da densidade de corrente na tensão da célula, bem como a influência da concentração do(s) substrato(s) e de outros fatores.

**Palavras-chaves:** Modelagem e simulação; células a combustível enzimáticas; transferência acoplada de calor, carga e massa; reações bioeletroquímicas