



Coordenação de Pós-Graduação em Engenharia de Sistemas

Proposta de Dissertação de Mestrado

Área: Cibernética

Linha de Pesquisa: Modelagem e simulação de sistemas inteligentes e embarcados

Título Provisório: Otimização da Produção de Hidrogênio (H_2) Puro para célula combustível em um reator catalítico de membrana de leito fixo (RCMLF) Usando o Método Numérico de Volume Finito (MNVF)

Orientador: Jornandes Dias da Silva

Descrição: Os processos baseados na conversão termoquímica de biomassa são de grande importância, uma vez que, eles apresentam maior eficiência energética do que a combustão direta. A gaseificação de biomassa para produção de gás de síntese é uma tecnologia considerada como uma das mais promissoras da atualidade. A gaseificação é definida como um processo que converte os combustíveis sólidos e líquidos para uma mistura de gás combustível de baixo ou médio poder calorífico ($4-10 \text{ MJ/Nm}^3$) na presença de um agente gaseificante (Ar , O_2 , CO_2 e/ou de vapor). Além de gás de síntese, alguns contaminantes, tais como cinzas, sulfeto de hidrogênio, amônia e alcatrões estão presentes. Alcatrão contém hidrocarbonetos oxigenados e hidrocarbonetos aromáticos, os quais são difíceis de degradar. Portanto, a conversão eficiente de transforma os hidrocarbonetos oxigenados e hidrocarbonetos aromáticos em gás combustível é uma rota desejada por pesquisadores [1,2]. A reforma a vapor catalítica de hidrocarbonetos aromáticos foi investigada em muitos sistemas catalíticos usando catalisadores químicos. Catalisador de Rh mostrou um excelente desempenho catalítico para as reações de reforma com baixa formação de coque. Geralmente, os metais nobres como Rh são extremamente caros. Por outro lado, os catalisadores de Ni também têm sido utilizados devido ao seu baixo custo em comparação com os metais nobres (Rh). Dentre estes catalisadores, o catalisador Ni tem sido conhecido por facilitar a deposição de carbono durante o processo de reforma a vapor de hidrocarbonetos aromáticos [3]. A modelagem matemática e simulação computacional em reatores catalíticos de LF estão em contínua evolução, com o objetivo de melhorar o conhecimento dos processos fenomenológicos neste equipamento [4]. Como aplicações, estes reatores são aplicados nos processos das indústrias químicas, bioquímicas, petroquímicas e refinarias de petróleo para estudar os processos de hidrodessulfurização, hidrotreatamento e hidrocrackeamento [5]. Dentre estas aplicações nos reatores catalíticos de LF, a modelagem pode atuar em muitos processos químicos tais como a transferência de calor na interface gás-sólido, a transferência de massa na interfase gás-sólido, a difusão de componentes químicos para dentro dos poros do catalisador sólido e as interações (fluido-sólido), tais como adsorção, dessorção e reação. O objetivo desta proposta dissertação é estudar a atuação de um modelo matemático bidimensional para otimizar a produção de hidrogênio (H_2) puro para célula combustível em um reator catalítico de membrana de leito fixo (RCMLF).

Referências Bibliográficas:

- [1] D. Swierczynski, C. Courson, A. Kiennemann, Study of steam reforming of toluene used as model compound of tar produced by biomass gasification, *Chemical Engineering and Processing*, 47 (2008) 508-513.
- [2] Y. Sekine, D. Mukai, Y. Murai, S. Tochiya, Y. Izutsu, K. Sekiguchi, N. Hosomura, H. Arai, E. Kikuchi, Y. Sugiura, Steam reforming of toluene over perovskite-supported Ni catalysts, *Applied Catalysis A: General*, 451 (2013) 160-167.
- [3] D. L. Trimm, Coke formation and minimisation during steam reforming reactions, *Catalysis Today*, 37 (1997) 233-238.
- [4] D. L. Trimm, Catalysts for the control of coking during steam reforming, *Catalysis Today*, 49 (1999) 3-10.
- [5] J. D. Silva, C.A.M. Abreu, Mathematical modeling of a three-phase trickle bed reactor, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 29 (2012) 567-576.