

# Modelagem Matemática para Produção de Hidrogênio em um Reator Termoquímico Solar de Membrana a partir da Reforma a Vapor do Metanol

*Mathematical Modeling for Hydrogen Production in a Membrane Solar Thermochemical Reactor from Steam Reforming of Methanol*

Emerson Barbosa dos Anjos <sup>1</sup>  [orcid.org/0000-0001-5727-2427](https://orcid.org/0000-0001-5727-2427)

Jornandes Dias da Silva <sup>1</sup>  [orcid.org/0000-0001-5727-2427](https://orcid.org/0000-0001-5727-2427)

<sup>1</sup> Escola Politécnica de Pernambuco, Universidade de Pernambuco, Recife, Brasil,

E-mail do autor principal: Emerson Barbosa dos Anjos [emersonanjos@poli.br](mailto:emersonanjos@poli.br)

## Resumo

A distribuição da irradiação solar concentrada tem um impacto significativo na variação de temperatura nos reatores solares. Dessa forma, o presente artigo tem como objetivo analisar o desempenho térmico de um reator termoquímico solar de membrana através de um modelo matemático e a conversão de metanol neste reator para produzir hidrogênio. Equações diferenciais parciais formaram esse modelo e foram transformadas em equações diferenciais ordinárias pelo método da diferença finita. Além disso, um código no software Mathematica com o comando NDSolve foi elaborado para obter os resultados deste artigo. Neste sentido, para realizar a investigação do comportamento térmico da distribuição de radiação e temperatura, foi utilizada a aproximação de Rosseland. Assim, as influências típicas do fluxo de calor da radiação, porosidade, emissividade e distribuição de temperatura e conversão do metanol foram investigadas.

**Palavras-Chave:** Solar; Reatores; Mathematica.

## Abstract

The distribution of concentrated solar irradiation has a significant impact on temperature variation in solar reactors. Thus, the aim of this paper is to analyze the thermal performance of a membrane solar thermochemical reactor through a mathematical model and the conversion of methanol in this reactor to produce hydrogen. Partial differential equations formed this model and were transformed into ordinary differential equations by the finite difference method. Also, a code in Mathematica software with the NDSolve command has been written to obtain the results of this article. In order to investigate the thermal behavior of the radiation and temperature distribution, the Rosseland approximation was used. Thus, the typical influences of radiation heat flux, porosity, emissivity, and temperature distribution and methanol conversion were investigated.

**Key-words:** Solar; Reactors; Mathematica.

## 1 Introdução

Atualmente, devido ao crescimento populacional e ao aumento do consumo de energia, que levam ao esgotamento gradual dos combustíveis fósseis convencionais, estudos sobre novas formas de produção de energia é linha de pesquisa para vários cientistas [1]. A energia solar que é limpa e renovável é abundante e generalizada para atender à demanda por combustíveis de forma ambientalmente amigável e sustentável [2]. Um método de utilização desta energia solar é a conversão da radiação solar em energia para a obtenção de combustíveis químicos, e o hidrogênio, que é um combustível alternativo, pode ser produzido por radiação solar em um reator termoquímico solar. No entanto, o projeto destes reatores e seu desempenho térmico são fatores relevantes que têm um impacto significativo na eficiência da produção e precisam ser investigados.

Existem vários estudos sobre a importância da transferência de calor no reator termoquímico solar. Wang et al. [3] estudaram que a distribuição da irradiação solar concentrada tem um impacto significativo na distribuição de temperatura do receptor de meio poroso. Os autores combinaram os métodos de rastreamento de raios de Monte Carlo e o Software *Fluent* com as funções definidas pelo usuário para investigar o desempenho térmico do receptor de meio poroso, desta forma as influências típicas da condição de limite do fluxo de calor, perda de calor de radiação, porosidade, emissividade, massa de fluxo e o diâmetro médio de partículas nas distribuições de temperatura foram calculadas ao longo do receptor. Paal et al. [4] desenvolveram uma abordagem de transferência de calor analítica para receptor de mídia volumétrica poroso, que levou em consideração a distribuição de irradiação tridimensional e sua influência sobre o fluxo de fluidos. Os resultados numéricos mostram que as distribuições de temperatura do receptor de mídia poroso volumétrica são fortemente influenciadas pela distribuição de radiação solar. Zhang et al. [5] estudaram as características de transporte térmico e o fluxo de fluidos em reatores termoquímicos solares de mídia porosa de alta temperatura, eles investigaram com diferentes modelos termo-físicos usando funções definidas pelo software FLUENT. Os resultados indicaram que o modelo local de não-equilíbrio térmico e o modelo de transferência radiativa são indispensáveis para a análise de desempenho térmico do sistema de reação termoquímico de alta temperatura de trabalho. No

entanto, o cálculo da radiação solar pode ser calculado por diferentes métodos, e há muitas dúvidas sobre a melhor maneira de simular a radiação e como analisar o efeito da temperatura em um reator termoquímico solar.

Além disso, a maioria das pesquisas foram investigadas experimental e numericamente para produzir  $H_2$  em alta temperatura, superior a 700K, sem fonte solar [6]. O principal foco dos estudos experimentais foi desenvolver os catalisadores robustos que serão resistentes à deposição de carbono. Por um lado, os reatores convencionais industriais são operados entre 808 e 3535 kPa e 1073 a 1273 K, mas o processo de equilíbrio limitado pode chegar a uma conversão do componente de cerca de 93%. Neste sentido, o uso de reatores de membrana tem sido amplamente pesquisado, devido à facilidade de produção e ao conceito de "intensificação do processo", ou seja, produção e separação no mesmo equipamento por meio de membranas seletivas. As aplicações de reatores de membrana oferecem uma possível forma para superar a baixa conversão, removendo seletivamente o hidrogênio de um sistema seletivo de membrana, resultando em maiores conversões de metanol em temperaturas mais baixas. As membranas mais comumente usadas para remover hidrogênio são membranas de paládio densas ou membranas de paládio. Estas membranas oferecem alta seletividade sobre outros gases por causa da dissolução seletiva de átomos de hidrogênio na matriz metálica.

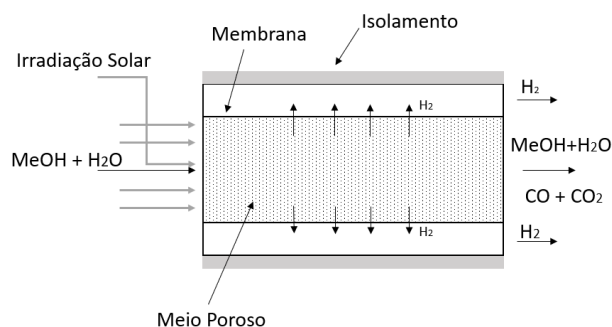
Neste sentido, a modelagem matemática e a solução numérica são usadas para obter uma melhor representação dos fenômenos no reator termoquímico solar (STR) através da consideração de turbulência, calor e transferências em massa, reações químicas, bem como a fenomenologia do reator. Os modelos matemáticos são úteis para investigar os efeitos das condições operacionais primárias, otimização e ampliação no STR. O desempenho dos STRs pode ser investigado além da faixa de parâmetros já estudadas experimentalmente devido às limitações impostas por considerações econômicas e de segurança [6]. Os parâmetros físicos e químicos são acoplados pelos fenômenos de transferência de calor e massa presentes no reator [7].

Portanto, para estudar a análise térmica do desempenho de um reator termoquímico solar e a conversão do tolueno, este trabalho apresenta a modelagem numérica da transferência de calor e massa em um reator termoquímico solar com a

radiação solar calculada pela aproximação de Rosseland. Assim, com base na transferência de calor e massa, um sistema de equações diferenciais parciais (EDP) foi formulado para descrever equações de governo do balanço de massa e energia. Aplicando a metodologia da Diferença Finita (FD) foi possível transformar o PDE em Equações Diferenciais Ordinárias (EDO), e com o comando NDSolve em software Mathematica. Assim, foram obtidos os gráficos das temperaturas, análises de sensibilidade de parâmetros, o valor da radiação solar e a conversão do metanol.

## 2 Formulação do Problema

Nas últimas duas décadas, pesquisas provaram o uso eficiente da energia solar térmica para impulsionar reações de reforma altamente endotérmicas. Para este fim, uma configuração esquemática (ver Fig. 1) foi empregada para estudar a transferência de calor. Fig. 1 mostra o esquema simplificado de um reator termoquímico solar que é usado como geometria de domínio computacional para a simulação numérica. É possível perceber pela figura que a transferência de calor que ocorrerá no reator será influenciada pela irradiação solar concentrada que atuará diretamente na região porosa.



**Figura 1.** Modelo simplificado de reator termoquímico solar com membrana.

### 2.1 Modelo Matemático

O objetivo principal desta seção é o desenvolvimento de um modelo matemático robusto que será capaz de simular o comportamento da transferência de calor e massa no STR.

A equação de balanço de massa no lado do tubo é expressa levando em consideração a difusão na direção radial e a transferência de massa convectiva

na direção axial. Os parâmetros e equações presentes na modelagem podem ser encontrados na referência [13].

$$v \cdot \nabla C_i^t = \varepsilon^t \nabla \cdot (D_{e_i}^t \nabla C_i^t) + \rho_k^t (1 - \varepsilon^t) x \sum_{j=1}^{N_R} \gamma_{ij} r_j^t \quad (1)$$

- Condições de contorno:

$$\begin{aligned} z=0; C_i^t &= C_{in}^t; r=0: \nabla C_i^t = 0 \\ r=R_I; C_i^t &= C_{in}^c; r=R_I: D_{e_i}^t \varepsilon^t \nabla C_i^t = D_{e_i}^c \varepsilon^c \nabla C_i^c \end{aligned} \quad (2)$$

Para o balanço de energia, as seguintes considerações foram adotadas: (i) fase ideal de gás, (ii) dispersão axial dentro do STR, (iii) sem fenômenos de difusão de componentes químicos na superfície catalisadora e dentro do catalisador ocorrem, (iv) pressão STR constante (sem queda de pressão no STR) e velocidade superficial constante, (v) STR opera em regime estacionário, (vi) porosidade na direção axial do STR foi considerada constante, (vii) propriedades físicas constantes (densidade, peso catalisador, tamanhos de partículas uniformes) sobre a gama de condições operacionais a partir de STR, respectivamente. Mais detalhes sobre a transferência de calor em meios podem ser observados em Ref. [14] Com base nas suposições acima, a equação energética (dentro do STR) é formulada da seguinte forma.

- Balanço de Energia

$$(\varepsilon_b \rho C_p) v \cdot \nabla T_g = \nabla \cdot (\lambda_{eff} \nabla T_g) + (1 - \varepsilon_b) \frac{3h_{gs}}{R_p} (T_g - T_s)|_{r=R_p} \quad (3)$$

No Eq. 1,  $\rho$  ( $\text{kg/m}^3$ ) é a densidade da mistura gasosa,  $T_g$  (K) é a temperatura da fase gasosa,  $C_p$  (kJ/kg K) é a capacidade de calor molar em pressão constante da mistura gasosa,  $h_{gs}$  (W/m<sup>2</sup> K) coeficiente de transferência de calor de convecção volumétrico entre a fase fluida e a fase sólida,  $\varepsilon_b$  (-) é a fração de vazio do leito,  $r_p$  (m) é o raio de partículas,  $T_s$  (K) é a temperatura da fase sólida, respectivamente.

$$\lambda_{eff} = \left( \lambda_g + \frac{16n^2\sigma T_\infty^3}{3k_R} \right) \quad (4)$$

Onde,  $\lambda_g$  (W/m K) é a condutividade térmica a gás,  $n$  (-) é o índice refrativo,  $\sigma$  (W/m<sup>2</sup> T<sup>4</sup>) é a constante de Stefan-Boltzmann,  $T_\infty$  (K) é a temperatura ambiente,  $k_R$  (m-1) é o coeficiente de extinção de Rosseland em meio poroso, respectivamente,

O símbolo  $h_{gs}$  é o coeficiente de transferência de calor de convecção volumétrica entre a fase fluida e a fase sólida. A correlação empírica proposta por Wu et al. [8] é usado:

$$h_{gs} = \lambda_f (32.504 \varepsilon_b^{0.38} - 109.94 \varepsilon_b^{1.38} + 166.65 \varepsilon_b^{2.38} - 86.598 \varepsilon_b^{3.38}) \frac{Re^{0.438}}{d_c^2} \quad (5)$$

Essa correlação é válida para  $0.66 < \varepsilon_b < 0.93$  e  $70 < Re < 800$

As condições iniciais e de limite adequadas de Eq. (1) são dadas da seguinte forma:

Na entrada:

$$\lambda_g \nabla T_g = \frac{DNI}{T_{g,0}} \quad (6)$$

Onde o DNI é a Irradiação Normal Direta ( $W/m^2$ ) e  $T_{g,0}$  é a temperatura inicial da fase gasosa.

Na saída:

$$\nabla T_g = 0 \quad (7)$$

## 2.2 Radiação Solar

Entre os fenômenos térmicos que podem ocorrer em um reator termoquímico solar, o termo de radiação é considerado o mais complexo quando comparado à convecção e condução. Desta forma, o seu estudo recebe um destaque. Uma vez que o meio poroso absorve fortemente a radiação solar, é de alta espessura óptica e apresenta um caminho médio de transporte de radiação curto. Para obter o termo fonte de radiação, a Equação de Transferência Radiativa (RTE) precisa ser resolvida [9]:

$$\frac{dI(z)}{dz} = -k_e I(z) + k_a I_b(b) + \frac{k_s}{4\pi} \int_{4\pi} I(z, \Omega') \Phi(\Omega', \Omega) d\Omega' \quad (8)$$

Onde o símbolo "i" é a intensidade de radiação local no meio poroso que varia de acordo com o espaço (z) e a direção ( $\Omega$ ), a função de fase  $\Phi$  varia de direção. O símbolo  $k_e$  é o coeficiente de extinção do receptor solar da mídia porosa,  $k_a$  é o coeficiente de absorção, e  $k_s$  é o coeficiente de dispersão.

Para resolver o ETR a aproximação de Rosseland é uma das melhores opções, porque este método é usado para problemas de espessura óptica considerável e não consome tempo devido à simplicidade e pode fornecer previsões razoavelmente boas em comparação com medidas experimentais para estudar os mecanismos de transferência radiativa em meios de comunicação porosos [10].

## 2.3 Aproximação de Rosseland

Através da aproximação de Rosseland, o RTE pode ser simplificado como [11].

$$q_r = \frac{4n^2\sigma}{3k_R} \frac{\partial T^4}{\partial z} \quad (9)$$

Foi considerado que as diferenças de temperatura dentro do fluxo são tais que o termo  $T^4$  pode ser expresso como uma função linear da temperatura. Isso é conseguido expandindo o  $T^4$  em uma série de Taylor sobre  $t^1$  e negligenciando a ordem superior.

$$T^4 \cong 4T_\infty^3 T - 3T_\infty^4 \quad (10)$$

Assim, o problema de transferência de calor radiativo é reduzido para ser um problema de condução simples com condutividade fortemente dependente de temperatura, da seguinte forma.

$$q_r = \frac{16n^2\sigma T_\infty^3}{3k_R} \frac{\partial T}{\partial z} \quad (11)$$

O coeficiente de extinção ( $k_R$ ) é avaliado como a soma da absorção ( $k_\alpha$ ) e coeficientes de dispersão ( $\sigma_s$ ) da seguinte forma

$$k_R = k_\alpha + \sigma_s \quad (12)$$

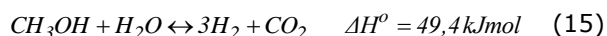
$$k_\alpha = \frac{3\varepsilon_m(1-\varepsilon_b)}{2d_s} \quad (13)$$

$$\sigma_s = \frac{3(2-\varepsilon_m)(1-\varepsilon_b)}{2d_s} \quad (14)$$

Onde,  $\varepsilon_m$  é a porosidade do reator,  $\varepsilon_b$  é a porosidade da cama, e  $d_s$  é o diâmetro da cama.

## 2.4 Reformar a Vapor do Metanol

A reação de reforma a vapor do metanol é vista como muito atraente e promissora para produção de hidrogênio de acordo com a literatura científica e pode ser descrita pelas seguintes reações químicas:



Onde, a reação (15) se refere a reforma a vapor do metanol (RVM), (16) a reação de decomposição (RD) e a (17) é a reação do deslocamento gás-água (RDGA). Deve-se notar que, algebricamente a reação (15) é a soma das outras duas reações.

Nesse estudo, a análise cinética para o processo de reforma a vapor do metanol é desenvolvida baseada no modelo proposto por Peppley [12]. No desenvolvimento do modelo cinético, é suposto que os sítios ativos para a reação de decomposição são diferentes daqueles para as reações de reforma a vapor do metanol, deslocamento gás-água, hidrogênio e as espécies contendo oxigênio absorvem sobre diferentes sítios ativos. Baseada no modelo de Langmuir-Hinshelwood as taxas das três reações são expressas como:

- Expressão para Taxa de Reação para a Reforma à Vapor do Metanol.

$$r_R = \frac{\left( k_R K_{CH_3O^{(l)}} / K_H^{1/2} \right) C_{S_1}^T C_{S_{1a}}^T}{\phi_1 \phi_{1a}} \times \frac{\left( 1 - (1/K_R) \left( p_{H_2}^3 p_{CO_2} / p_{CH_3OH} p_{H_2O} \right) \right) C_{S_1}^T C_{S_{1a}}^T}{\phi_1 \phi_{1a}} \quad (18)$$

- Expressão para Taxa de Reação de deslocamento gás-água.

$$w = \frac{\left( k_W K_{CO^{(l)}} K_{OH^{(l)}} / K_H^{1/2} \right) \left( p_{CO} p_{H_2O} / p_{H_2} \right) \left( C_{S_1}^T \right)^2}{\phi_1^2} \times \frac{\left( 1 - (1/K_W) \left( p_{CO_2} p_{H_2} / p_{CO} p_{H_2O} \right) \right) \left( C_{S_1}^T \right)^2}{\phi_1^2} \quad (19)$$

- Expressão para Taxa de Reação de decomposição do metanol.

$$r_D = \frac{\left( k_D K_{CH_3O^{(2)}} / K_H^{1/2} \right) 2a \left( p_{CH_3OH} / p_{H_2} \right) C_{S_2}^T C_{S_{2a}}^T}{\phi_2 \phi_{2a}} \times \frac{\left( 1 - (1/K_D) \left( p_{H_2}^2 p_{CO} / p_{CH_3OH} \right) \right) C_{S_2}^T C_{S_{2a}}^T}{\phi_2 \phi_{2a}} \quad (20)$$

Onde,  $\phi_1, \phi_2$  e  $\phi_{1a}, \phi_{2a}$  são denominados como o termo de absorção para cada reação e  $C_{S_1}^T, C_{S_2}^T, C_{S_{1a}}^T, C_{S_{2a}}^T$  são a concentração total da superfície do catalizador.

Onde,  $k_j$  para ( $j = R, D, W$ ) representa a taxa para as diferentes reações (Eqs. 11-13) e  $K_j$  para ( $j = R, D, W$ ) são as constantes de equilíbrio para as diferentes reações

As constantes de equilíbrio  $K_j$  para ( $j = CH_3O_{(1)}, HCOO_{(1)}, OH_{(1)}, CO_{2(1)}, H_{(1a)}, CH_3O_{(2)}, HCOO_{(2)}, OH_{(2)}, CO_{2(2)}, H_{(2a)}$ ) de cada componente presente na Ref. [13].

## 3 Metodologia de Solução

Para resolver as equações propostas, foi adotado o Método da Diferença Finita (DF). A DF é um método tradicional de resolução de equações diferenciais que se baseiam na aproximação de derivados por diferenças finitas. A fórmula de aproximação foi obtida da série Taylor da função derivada. As definições abaixo, Eq. (13 - 16), foram utilizadas com as respectivas condições de limite de cada elemento. Após a aplicação do DFM e através do software Mathematica e comando NDSolve foi possível obter os resultados deste trabalho. Para ilustrar o MDF, Fig. 2 mostra uma abordagem simplificada para os pontos da malha escolhida.

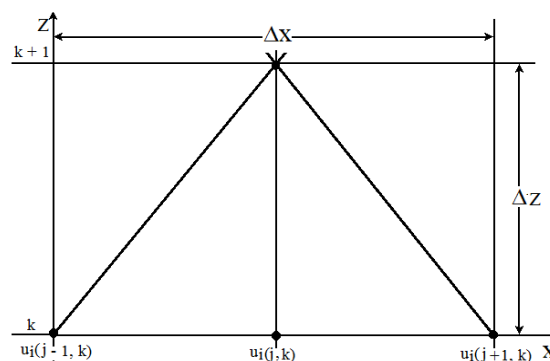


Figura 2. A malha aponta para uma solução numérica usando o método da diferença finita.

A relação abaixo foi utilizada na equação geral do problema e da condição de contorno, permitindo a discretização e a obtenção dos EDOs para cálculo em Mathematica.

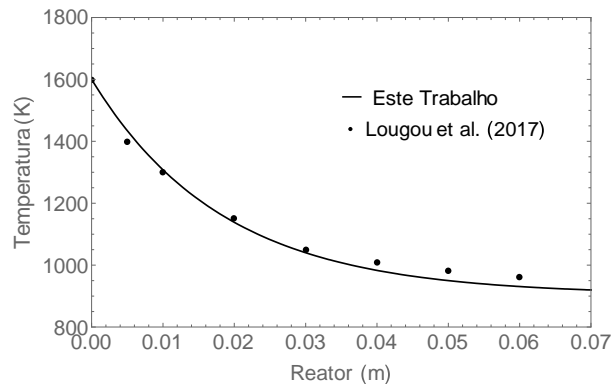
$$\left. \frac{\partial T(x, z)}{\partial x} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{\Delta x} [(T)_{j+1}^k - (T)_j^k] \quad (21)$$

$$\left. \frac{\partial T(x, z)}{\partial x} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{\Delta x} [(T)_j^k - (T)_{j-1}^k] \quad (22)$$

$$\left. \frac{\partial T(x, z)}{\partial x} \right|_{(j,k)} = \frac{1}{\Delta x^2} [(T)_{j+1}^k - 2(T)_j^k + (T)_{j-1}^k] \quad (23)$$

## 4 Resultados

Um algoritmo computacional na plataforma Mathematica a sub-rotina *Solve* foi elaborado pelos autores para resolver as equações do modelo mencionadas neste trabalho. Portanto, as condições operacionais, parâmetros energéticos para simular as variáveis do processo SRT são apresentadas na Tabela 1. Neste estudo, o modelo matemático foi confirmado através da distribuição de temperatura no SRT. Fig. 3 mostra o perfil de temperatura obtido por Lougou et al. [1], e a simulação numérica do presente estudo. A comparação mostra um bom ajuste entre os resultados deste trabalho com a literatura, e ambos seguem um comportamento semelhante.

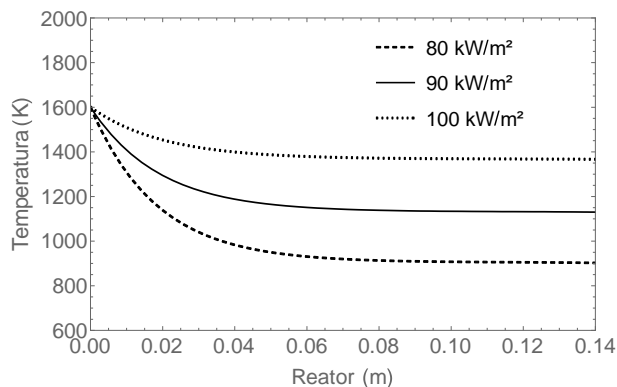


**Figura 3.** Variação de temperatura em um reator termoquímico solar, e comparação com resultados encontrados na literatura.

**Tabela 1.** Condições operacionais, parâmetros cinéticos e parâmetros de massa.

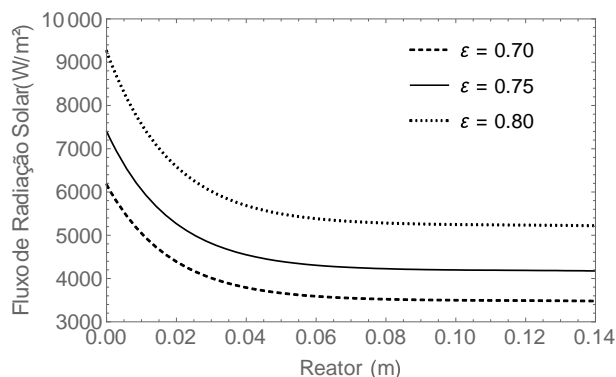
Categorias	Propriedades	Valores numéricos
Condições de operação	Pressão operacional	1.01
	Temperatura operacional	1800
	Taxa de fluxo de gás	3.5x10 <sup>-5</sup>
	Fração de vazio da cama	0.77
	Emissividade da mídia porosa	0.92
	Diâmetro do reator	0.032
	Comprimento do reator	0.14
Parâmetros térmicos	A densidade da mistura gasosa	0.693
	A capacidade de calor molar	1.079
	Diâmetro STR	0.32
	Condutividade térmica a gás	109.123
	Stefan-Boltzmann constante	2.67x10 <sup>-8</sup>
	Coef. trans. de calor gás-sólido	13.3x10 <sup>2</sup> ;
	Temperatura ambiente	300
	Coefficiente de Rosseland	1.738x10 <sup>4</sup>

A figura 4 mostra o perfil da distribuição de temperatura do reator com 14 cm. Como indicado em Fig. 4, a cavidade interna do reator é mais aquecida quando as intensidades difusas de irradiação solar foram aumentadas de 80 para 100 kW/m<sup>2</sup>. A temperatura mais alta observada na região frontal do reator é evidente devido ao maior fluxo de calor radiativo emitido porque a irradiação solar é difundida diretamente nesta parte Ref. [1]. Os altos valores de temperatura e a distribuição de fluxo de calor de radiação obtidos poderiam fornecer a energia térmica necessária para a realização da reação química para produzir hidrogênio ou gás de síntese.



**Figura 4.** Perfil da temperatura em três valores em intensidades difusas da irradiação solar.

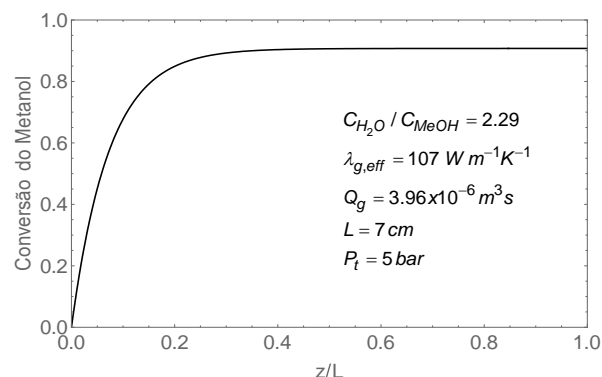
A figura 5 mostra o fluxo de calor da radiação ao longo do sentido do fluxo do reator. O parâmetro de porosidade tem uma forte influência sobre o coeficiente de extinção e o coeficiente de transferência de calor do reator termoquímico solar. Para analisar isso, os efeitos da porosidade na distribuição do fluxo de calor radiação foram traçados em Fig. 5. Três porosidades, 0, 7,0, 0, 8,0, 0, 9, foram investigados. Como se observa, o fluxo de calor da radiação aumenta com o aumento da porosidade, portanto, foi obtida a temperatura máxima com o valor mais alto da porosidade. O Fluxo de Calor de Radiação inicial com aproximadamente 9100 W/m<sup>2</sup>, 7200 W/m<sup>2</sup> e 6100 W/m<sup>2</sup> e com sua respectiva porosidade, 0, 90, 0, 80 e 0,40 estabiliza com 5800 W/m<sup>2</sup>, 4200 W/m<sup>2</sup> e 3400 W/m<sup>2</sup>. A espessura da região térmica não-equilíbrio aumenta lentamente com o aumento da porosidade.



**Figura 5.** Perfil do fluxo de calor de radiação em diferentes condições de porosidade.

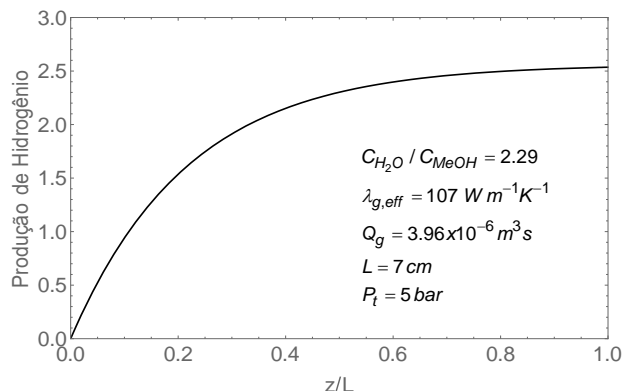
A conversão do metanol é calculada a partir das concentrações obtidas pelo balanço de massa e pela diferença da razão dos componentes iniciais pela

razão do componente calculado com os iniciais. Utilizando esta metodologia, a conversão do metanol é apresentada na Fig. 6, é notado que praticamente 90% do metanol foi convertido, sendo este transformado em gás de síntese ou hidrogênio.



**Figura 6.** Conversão do Metanol em um Reator Termoquímico Solar.

A Fig. 7 apresenta a produção de hidrogênio no reator termoquímico solar. Esta produção é calculada com relação da razão quantidade de concentração de hidrogênio calculada, pela concentração de metanol de entrada. A produção de hidrogênio alcançou um valor de 2.5 a quantidade inicial de metanol. Desta forma, pode-se concluir que o RTS, é um equipamento aconselhável para produzir energia renovável e pesquisa sobre formas de armazenamento e utilização desse hidrogênio devem ser realizadas.



**Figura 7.** Produção de Hidrogênio em um Reator Termoquímico Solar.

## 5 Conclusão

O desempenho térmico e a conversão do metanol em um reator termoquímico solar para a produção de gás de síntese foram investigados. Esta pesquisa foi realizada numericamente através do método de diferença finita, e comando NDSolve no Mathematica e o modelo foi validado com os resultados disponíveis na literatura (Lougou et al. 2017). A diferença finita foi usada para transformar os EDPs em EDOs e com NDSolve foram obtidos os perfis da temperatura, da radiação do reator termoquímico solar, conversão do metanol, e produção de hidrogênio. As seguintes conclusões foram tiradas:

(i) A perda de calor de radiação na superfície do reator não pode ser negligenciada durante a análise de desempenho térmico do receptor de mídia poroso.

(ii) O fluxo máximo de calor de radiação aumenta com o aumento da porosidade.

(iii) A cavidade interna do reator é mais aquecida quando a irradiação solar difusa foi aumentada de 80 para 100 kW/m<sup>2</sup>.

(iv) 90% do metanol foi convertido, sendo utilizado para produção de hidrogênio. A produção de hidrogênio em um RTS, alcançou 2.5 vezes em relação a quantidade inicial de metanol.

## Referências

[1] LOUGOU, B. G., SHUAI, Y., XING, H., YUAN, Y. AND TAN, H., 2017. Thermal performance analysis of a solar thermochemical reactor for syngas production. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.111, p. 410-418, 2017.

[2] WANG H., LIU M., KONG H. AND HAO, Y.. Thermodynamic Analysis on Mid/low-Temperature Solar Methane Steam Reforming with Hydrogen Permeation Membrane Reactors. **Applied Thermal Engineering**. v.152, p. 925-936, 2019.

[3] WANG, F., SHUAI, Y., TAN, H, AND YU, C.

Thermal performance analysis of porous media receiver with concentrated solar irradiation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. v. 62, p. 247-254, 2013.

[4] PAAL, R.P., HOFFSCHMIDT, B., BÖHMER, M., AND BECKER, M. Experimental and numerical evaluation of the performance and flow stability of different types of open volumetric absorber under non-homogeneous irradiation. **J. Sol. Energy Eng.** v. 60, p. 135-150, 1997.

[5] ZHANG, H., LOUGOU, B., PAN, R., SHUAI, Y. WANG, F., CHEN, Z., TAN, H. Analysis of thermal transport and fluid flow in high-temperature porous media solar thermochemical reactor. **Solar Energy**, v. 173, p. 814-824, 2018.

[6] ANJOS, E., DAMASCENO, J., OLIVEIRA, C., SILVA, A., SILVA, J. Numerical Analysis of the steam reforming of toluene to produce hydrogen in a fixed bed catalytic reactor. In Proceedings of the 17th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering – **ENCIT 2018**. Águas de Lindoia - SP, Brazil, 2018.

[7] ANJOS, E., OLIVEIRA, C., SILVA, J. Dynamic analysis to produce hydrogen in a fixed bed catalytic reactor by the steam reforming of toluene. **Chemical Engineering Transaction**. v.74, p. 553-558, 2019.

[8] WU, Z., CALIOT, C., FLAMANT, G., WANG, Z. Numerical simulation of convective heat transfer between airflow and ceramic foams to optimize volumetric solar air receiver performances. **Int. J. of Heat and Mass Transfer**. v.54, p.1527-1537, 2011.

[9] WANG, F., MAN, L., CHENG, Z., TAN, J. HUANG, LINHU, X. L. Radiative heat transfer in solar thermochemical particle reactor: A comprehensive review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**. v. 73, p. 935-949, 2017.

[10] KODAMA, T., GOKON, N. "Thermochemical cycles for high-temperature solar hydrogen production." **Chem. Rev.** v. 107, p. 4048-4077, 2007.



- [11] MAGYARI, E., PANTOKRATORAS, A. Note on the effect of thermal radiation in the linearized Rosseland approximation on the heat transfer characteristics of various boundary layer flows. **International Communications in Heat and Mass Transfer**. v. 38, p. 554-556, 2011.
- [12] PEPPLEY, B. A. Methanol steam reforming on Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts. Part 2. A comprehensive kinetic model. **Applied Catalysis A: General**. v.179, p. 31-49, 1999.
- [13] SAIDI., M. Performance assessment and evaluation of catalytic membrane reactor for pure hydrogen production via steam reforming of methanol. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 42, p. 16170-16185, 2017.
- [14] NIELD, D., BEJAN, A. **Convection in porous media**. New York: springer, 2006.