

SIMULAÇÃO DA REFORMA CATALÍTICA DO ETANOL A PARTIR DO REAPROVEITAMENTO DO CALOR PROVENIENTE DOS FUMOS DE UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA

Alunos: Aymê Utimati Guain – ayme.utimati@outlook.com; Elody Georges Assi – elodyassi@gmail.com; Gabriel Felipe Leme de Oliveira – gleme.oliveira@gmail.com; Gustavo Trevisan Silva – gusthavo_t@hotmail.com.
Orientador: João Guilherme Rocha Poço – jgrpoco@fei.edu.br.

INTRODUÇÃO

Um dos principais problemas atuais relacionados a motores à combustão é a alta emissão de gases poluentes. Com o aumento de incentivo à redução do consumo de combustíveis fósseis e a utilização de combustíveis alternativos, aumentou-se o consumo de etanol como combustível para motores à combustão, por se tratar de uma substância de fonte renovável.

Grande parte da energia do motor é desperdiçada em forma de calor, afetando diretamente no rendimento deste. Uma possível opção para o aumento de rendimento do motor é o reaproveitamento do calor dos fumos para realização da reforma do combustível, transformando parte deste em hidrogênio e outros produtos como monóxido de carbono e água.

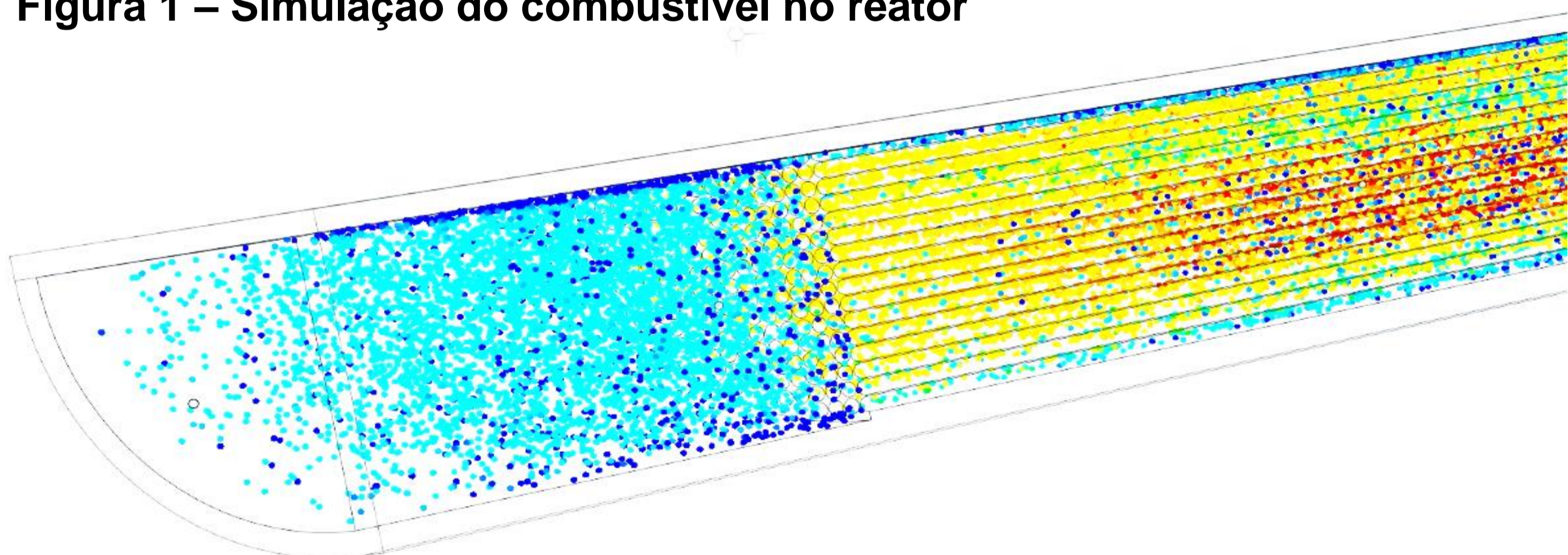
A reforma catalítica consiste basicamente em obter moléculas de hidrogênio a partir de hidrocarbonetos e água, realizando-se uma reação endotérmica em meio catalítico heterogêneo. Este tipo de reação demanda uma grande quantidade de calor que, neste caso, é obtido pela recuperação dos fumos.

Segundo Pashchenko^[1] ao se utilizar a recuperação termoquímica de calor, o aumento na eficiência do equipamento consumidor de combustível pode ocorrer não apenas devido ao aumento da eficiência energética, mas também devido à melhoria na combustão do combustível. Portanto, a redução da irreversibilidade da combustão e das emissões de poluentes também podem ser consideradas benefícios para futuras implementações da recuperação térmica de calor.

METODOLOGIA

A proposta é o projeto de um reator, baseado em balanços de massa e energia, para a reforma de etanol utilizando-se a energia dos gases de escape, visando o aumento de eficiência do ciclo de combustão no motor.

Figura 1 – Simulação do combustível no reator



Os balanços molares e energéticos foram deduzidos a partir do princípio de conservação de massa em um sistema contínuo. As equações diferenciais (1), (2), (3) e (4)^[2] que representam a variação entre entrada e saída do reator, de cada componente, foram resolvidas utilizando-se o método de Euler, uma ferramenta matemática para aproximar valores da solução de equações diferenciais ordinárias (EDOs) quando conhecidos os valores iniciais. Este método tem extrema importância para a resolução do projeto, pois cada componente exige uma equação diferencial e os parâmetros de temperatura exigem suas respectivas equações; além disto, todas as EDOs precisam ser resolvidas simultaneamente. Sendo assim, é possível calcular a variação de temperatura no sistema e a conversão de etanol no reator.

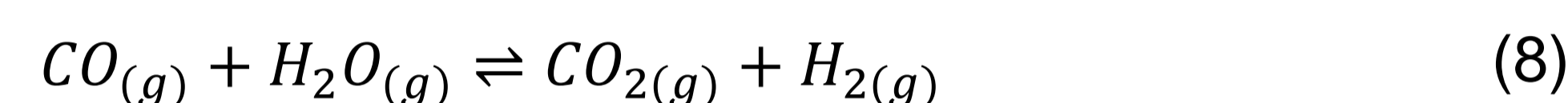
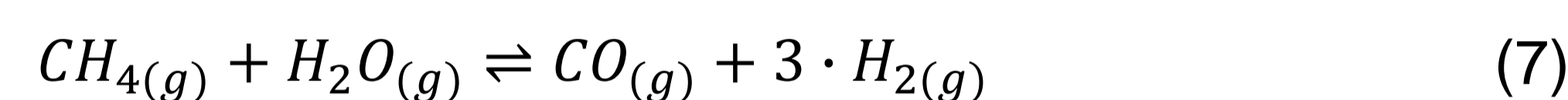
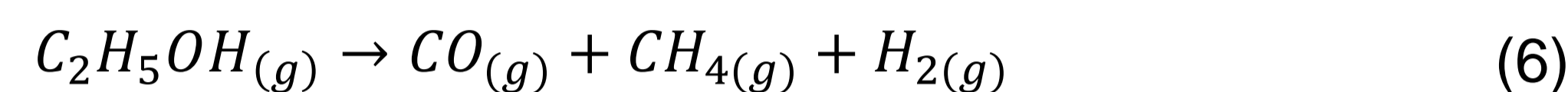
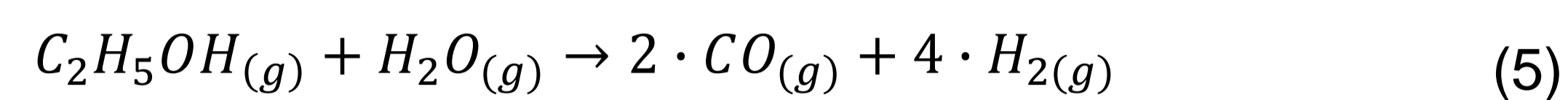
$$r_1 = \frac{k_1 \cdot y_{C_2H_5OH} \cdot y_{H_2O}}{(1 + K_{C_2H_5OH} \cdot y_{C_2H_5OH} + K_{H_2O} \cdot y_{H_2O} + K_{CH_4} \cdot y_{CH_4})^2} \quad (1)$$

$$r_2 = \frac{k_2 \cdot y_{C_2H_5OH}}{1 + K_{C_2H_5OH} \cdot y_{C_2H_5OH} + K_{H_2O} \cdot y_{H_2O} + K_{CH_4} \cdot y_{CH_4}} \quad (2)$$

$$r_3 = \frac{k_3 \cdot [y_{CH_4} \cdot y_{H_2O} - (y_{H_2}^3 \cdot \frac{y_{CO}}{K_1})]}{(1 + K_{C_2H_5OH} \cdot y_{C_2H_5OH} + K_{H_2O} \cdot y_{H_2O} + K_{CH_4} \cdot y_{CH_4})^2} \quad (3)$$

$$r_4 = \frac{k_4 \cdot (y_{CO} \cdot y_{H_2O} - y_{H_2} \cdot \frac{y_{CO_2}}{K_2})}{(1 + K_{C_2H_5OH} \cdot y_{C_2H_5OH} + K_{H_2O} \cdot y_{H_2O} + K_{CH_4} \cdot y_{CH_4})^2} \quad (4)$$

As Equações (5), (6), (7) e (8)^[2] são as reações que regem o sistema de reforma.



RESULTADOS E DISCUSSÃO

Figura 2 – Fluxos em contracorrente

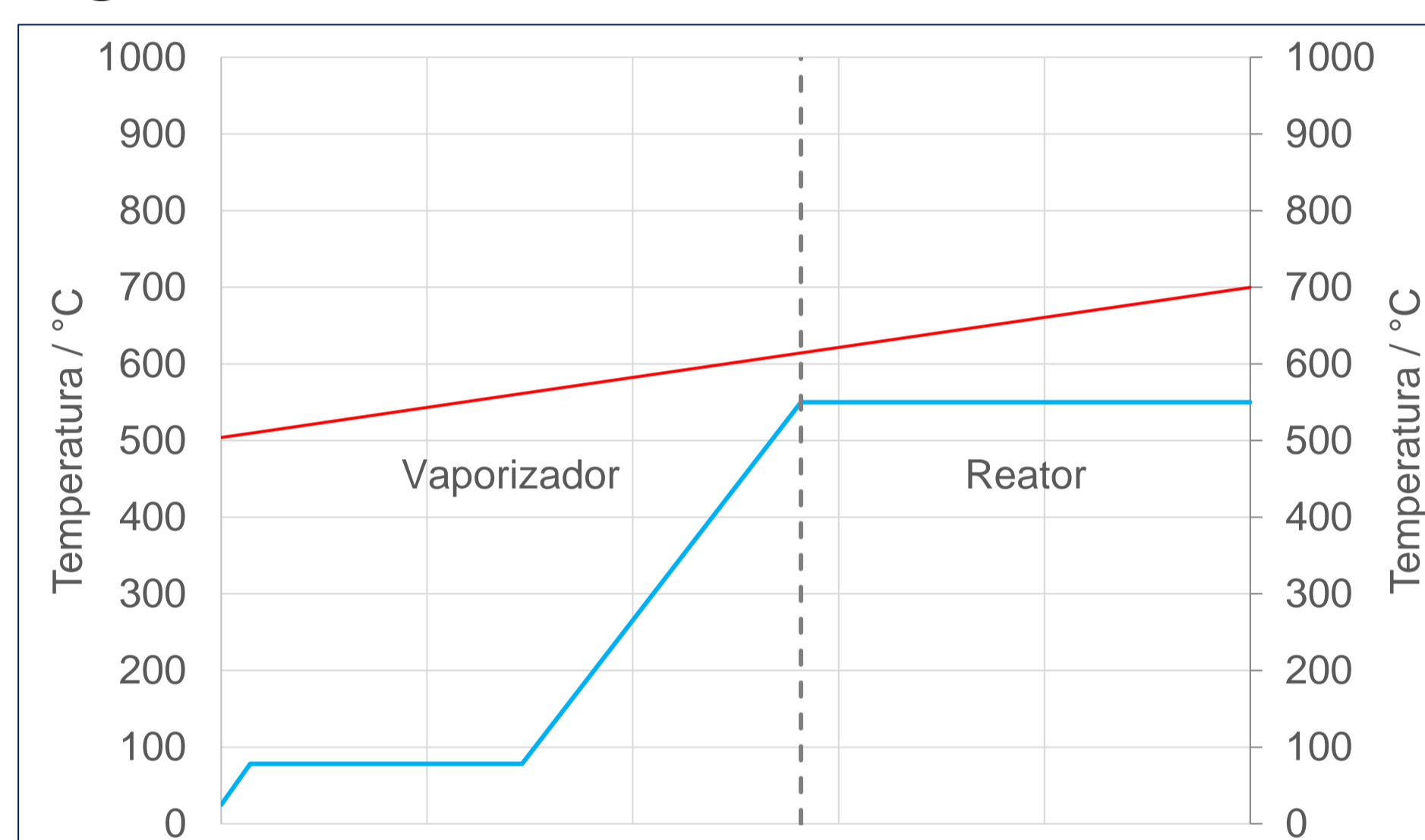
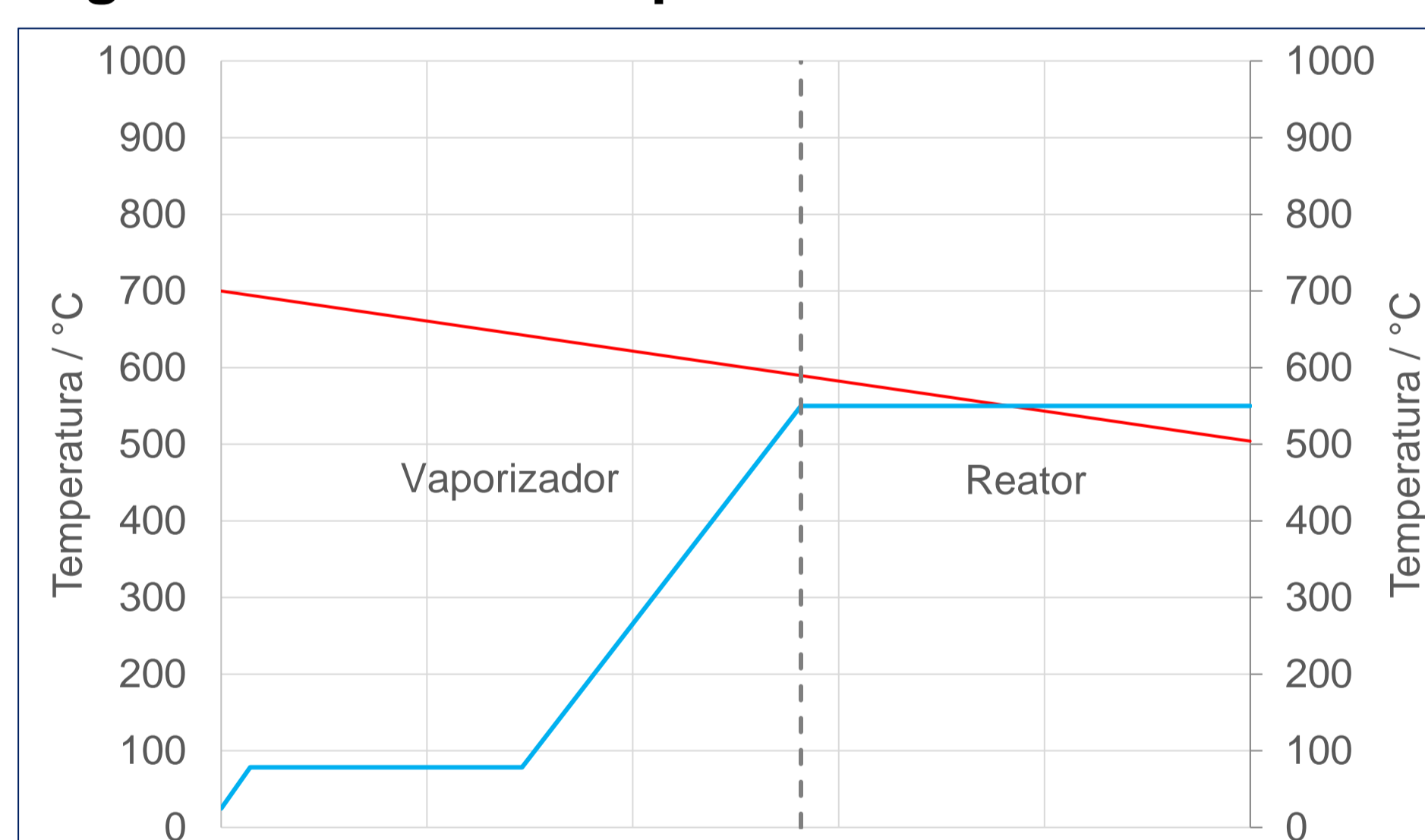


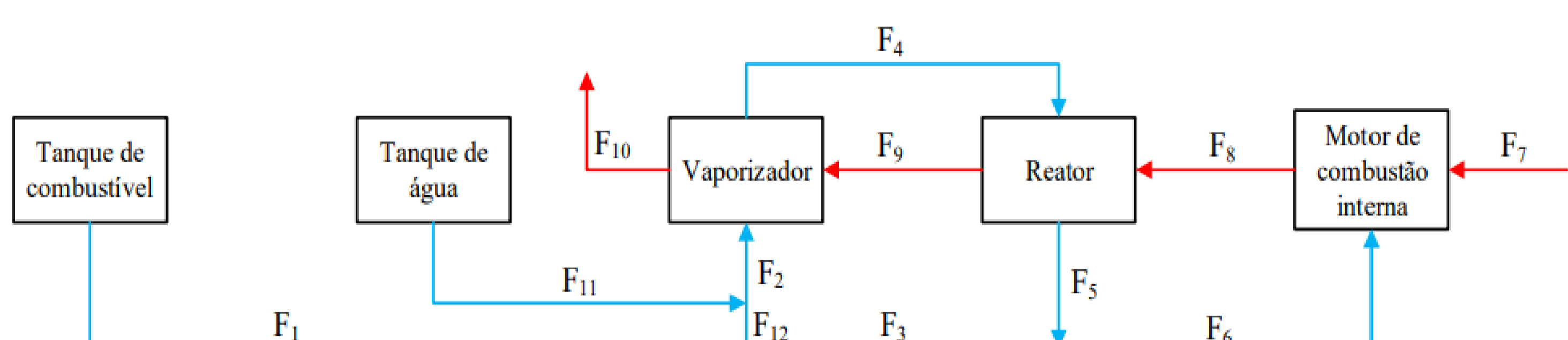
Figura 3 – Fluxos em paralelo



A análise da força motriz se separou em dois testes, sendo o primeiro com fluxo em contracorrente, representado pela Figura 2, e o segundo com fluxo em paralelo, observado na Figura 3. A partir deste estudo definiu-se o sistema de reforma com fluxo em contracorrente. Esta escolha se deve ao fato de que se o sistema estiver em paralelo, este viola as leis da termodinâmica, pois as temperaturas das correntes entram em equilíbrio antes do fim do processo e a condição posterior a este ponto representa uma situação impossível, o que inviabiliza o processo.

A Figura 4 representa a disposição dos equipamentos, tendo as correntes de combustível representadas pela cor azul e as de fumos pela cor vermelha. Neste esquema, os fumos de combustão passam primeiramente pelo reator e posteriormente pelo vaporizador, reafirmando que os fluxos de combustível e fumos estão em contracorrente.

Figura 4 - Esquema do sistema de reforma contendo as correntes envolvidas



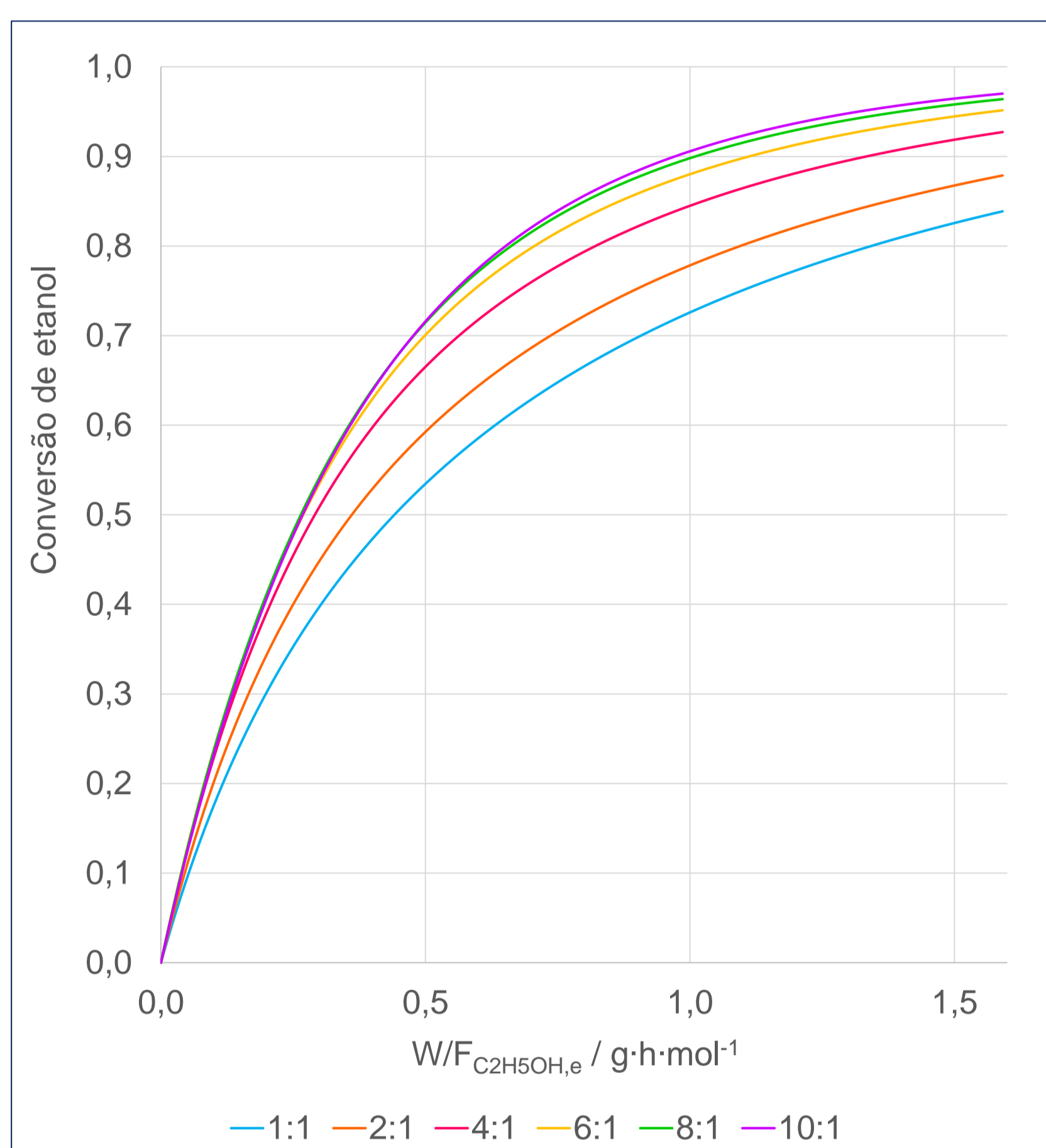
A Figura 5 apresenta a variação da conversão de etanol em função da razão da massa de catalisador pela vazão inicial de etanol, em diferentes razões molares de água/etanol, na temperatura de 798K.

SIMULAÇÃO DA REFORMA CATALÍTICA DO ETANOL A PARTIR DO REAPROVEITAMENTO DO CALOR PROVENIENTE DOS FUMOS DE UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA

Alunos: Aymê Utimati Guain – ayme.utimati@outlook.com; Elody Georges Assi – elodyassi@gmail.com; Gabriel Felipe Leme de Oliveira – gleme.oliveira@gmail.com; Gusthavo Trevisan Silva – gusthavo_t@hotmail.com.
Orientador: João Guilherme Rocha Poço – jgrpoco@fei.edu.br.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Figura 5 – Conversão de etanol



Esta figura mostra que quanto maior a quantidade de água injetada, maior a conversão do etanol; entretanto, ao se atingir uma proporção de 6:1 o aumento desta razão se torna desprezível. Como a diferença entre as razões 4:1 e 6:1 é pequena em relação à conversão e grande em relação à quantidade de água, a melhor opção é se trabalhar com a razão de 4:1, com o intuito de minimizar o tanque de armazenamento de água no carro.

Figura 6 – Vazão molar de cada componente

Os fluxos molares de cada componente ao longo do reator, com 20% de desvio do combustível líquido e razão de água/etanol igual 4 na temperatura de 873K, são apresentados na Figura 6 e indicam que o melhor cenário, nas condições impostas, é a utilização de no máximo 30g de catalisador, pois valores acima deste não apresentam aumento significativo na produção de hidrogênio. O consumo de metano também tem influência na eficiência da mistura, pois este é utilizado no processo de combustão.

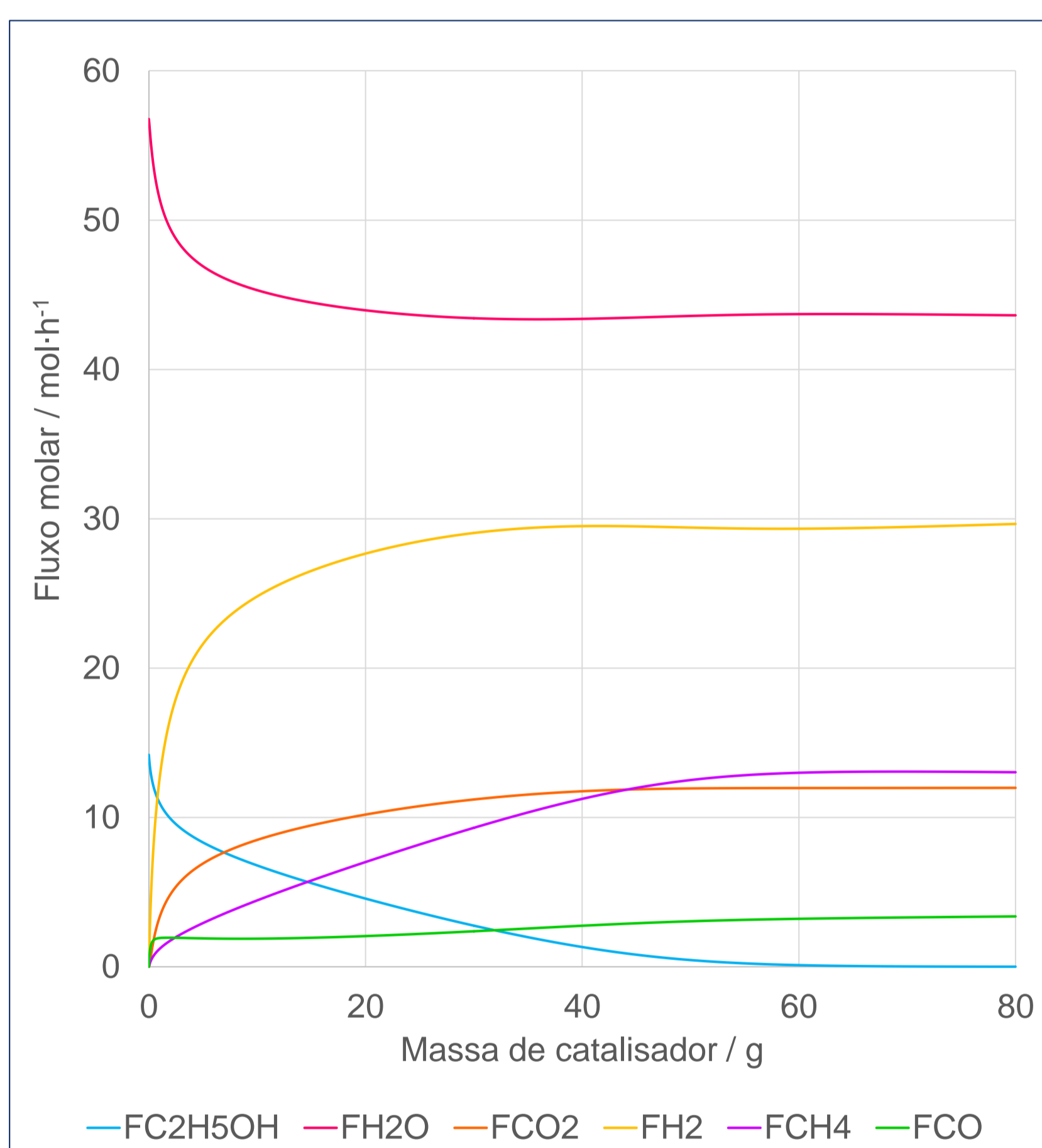
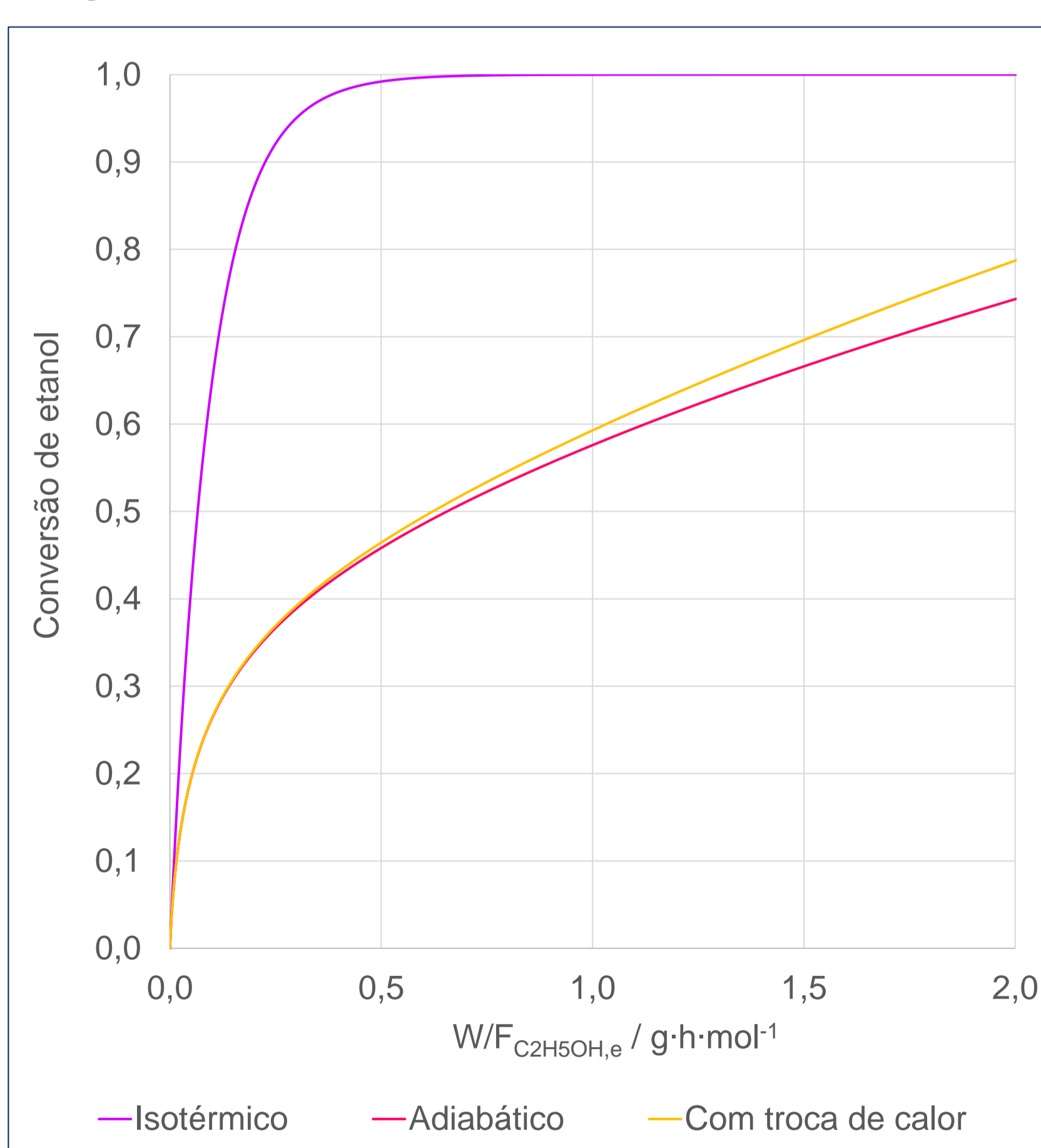


Figura 7 - Conversão de etanol



A troca de calor influencia diretamente na conversão do etanol. Na condição isotérmica, a conversão de etanol é mais rápida, pois as reações de reforma são endotérmicas e a temperatura tem influência direta na velocidade de reação. Quando há troca de calor no sistema, a temperatura tende a variar; neste caso, o calor que os fumos fornecem ao reator faz com que a queda de temperatura neste seja menor em relação ao sistema adiabático.

Realizou-se uma análise com 30g de catalisador, comprimento do reator equivalente a 37,4cm, 20% de desvio de combustível líquido, temperatura na entrada do reator de 873K, razão de água/etanol 4:1 e igualando as pressões no cilindro quando utilizado combustível puro e aditivado. Após a reforma, a mistura apresenta 2,6% em volume de hidrogênio; sendo assim, há redução no consumo de combustível equivalente a 9,69%, entretanto a perda de energia da mistura é de 1,48%.



↓ 9,69% no consumo de combustível

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos se mostram promissores, indicando que este processo é viável e benéfico no quesito de economia de combustível em motores à combustão.

A análise da força motriz indica a disposição dos equipamentos da seguinte forma: tanque de combustível, seguido por vaporizador, reator e motor, consecutivamente. A rota dos fumos mais indicada é em fluxo paralelo ao reator e contracorrente ao vaporizador. Como a variação de temperatura é mais acentuada no início do reator e apresenta queda brusca, devido às concentrações de reagentes e alta velocidade de reação, é favorável ao sistema que este déficit seja compensado com a troca de calor; ao se definir o fluxo em paralelo com o reator, os fumos começam a trocar calor com os fluidos do reator próximo a sua temperatura máxima no sistema, apresentando maior força motriz e favorecendo a velocidade de reação. Apesar disso, o sistema apresenta-se praticamente adiabático, pois a troca de calor é muito pequena.

Com as condições impostas no projeto, como massa de catalisador, porcentagem de desvio, razão de água/etanol, temperatura e pressão, há redução no consumo de combustível; em contrapartida, há perda de energia no combustível aditivado, mas esta é muito pequena, não afetando significativamente o desempenho do motor.

A simulação da queda de pressão nos fumos é insignificante e não apresenta problemas para o processo. O vaporizador pode substituir o silenciador, assim evitando o excesso de pressão no sistema de exaustão, estresse nos componentes mecânicos e juntas e perda de potência.

De modo geral, os resultados são promissores e encorajam a continuação das pesquisas relacionadas à produção de hidrogênio para aditivção de combustíveis. Um dos pontos que pode ser melhorado é a troca térmica entre os fumos e a corrente de combustível, visando se atingir maior conversão no reator. Outro ponto a ser trabalhado é o projeto do trocador de calor associado ao reator, completando o sistema.

REFERÊNCIAS

- [1] PASHCHENKO, D. Thermochemical recuperation by ethanol steam reforming: Thermodynamic analysis and heat balance. *International Journal of Hydrogen Energy*, [S.l.], v. 44, n. 59, pages 30865-30875, 29 nov. 2019.
- [2] PEELA, N. R.; KUNZRU, D. Steam Reforming of Ethanol in a Microchannel Reactor: Kinetic Study and Reactor Simulation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Kanpur, v. 50, n. 23, pages 12881-12894, 19 sep. 2011.