SIMULAÇÃO E ANÁLISE TERMODINÂMICA DO PROCESSO DE REFORMA DO GÁS NATURAL PARA A PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO AZUL

Palavras-Chave: Hidrogênio Azul, Reforma a vapor, Gás natural

Autores(as):

JULIA FERREIRA TANAN, FEQ-UNICAMP

LAURA GIOVANA GIACOMINI DE LACERDA MIRANDA, FEQ-UNICAMP

DIANA WENDY RÉ ESTANISLAU, FEQ-UNICAMP

Prof. Dr. JOSÉ VICENTE HALLAK D'ANGELO (orientador), FEQ-UNICAMP

INTRODUÇÃO:

A crise climática tem impulsionado a busca por fontes de energia mais sustentáveis e a transição para uma economia de baixo carbono (IEA, 2023). Nesse cenário, o hidrogênio se destaca como vetor energético promissor devido à sua alta densidade energética, capacidade de armazenamento e versatilidade.

Entre as rotas de produção, a Reforma a Vapor do Metano (SMR) representa cerca de 75% da produção global de hidrogênio (IEA, 2019), sendo amplamente utilizada pela sua eficiência, maturidade tecnológica e adaptabilidade a diferentes fontes de metano. No entanto, a SMR convencional, produtora de hidrogênio cinza, gera significativas emissões de CO_2. A incorporação de tecnologias de captura e armazenamento de carbono (CCS) permite a obtenção de hidrogênio azul, com redução de até 90% nas emissões (EPE, 2025).

Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo simular e analisar termodinamicamente a produção de hidrogênio via reforma a vapor do gás natural brasileiro, buscando condições otimizadas de operação que aliem eficiência energética e menor impacto ambiental. Serão avaliados parâmetros como temperatura, pressão e razão vapor/metano, visando contribuir com o avanço de tecnologias mais sustentáveis.

METODOLOGIA:

A metodologia deste trabalho baseia-se na simulação do processo de produção de hidrogênio azul via reforma a vapor do gás natural, utilizando o software Aspen Hysys®. A seguir serão descritas todas as etapas até a simulação e análise paramétrica.

Descrição do processo de reforma a vapor

Como citado anteriormente, o processo escolhido para a produção de hidrogênio azul foi a reforma a vapor do gás natural (SMR), seguida pela reação de deslocamento gás-água (WGS). O fluxograma simplificado do processo foi adaptado daquele proposto por Chehade *et al.* (2020), e pode ser observado na Figura 1.

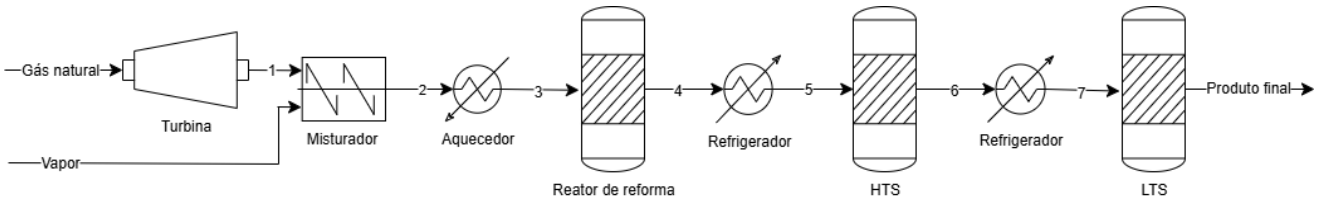

Figura 1 - Diagrama do processo de produção de hidrogênio através de reforma a vapor

A reação WGS é realizada em duas etapas: alta temperatura (HTS) e baixa temperatura (LTS), visando equilibrar cinética e termodinâmica. O HTS favorece a velocidade da reação, enquanto o LTS, após o resfriamento da corrente, maximiza a conversão de CO (Molburg e Doctor, 2003). A reação do reformador é endotérmica (Equação 1), e a WGS, exotérmica (Equação 2).

$$C_nH_{2n+2} + nH_2O \leftrightarrow nCO + (2n + 1)H_2 \quad (1)$$

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2 \quad (2)$$

Definição das condições do caso base

Para que a simulação e análise de sensibilidade realizadas a seguir sejam representativos e produzam resultados confiáveis, é imprescindível que as condições do gás natural como composição, temperatura e pressão, sejam reais. Na Tabela 1 abaixo, estão todos os dados utilizados na simulação em Aspen Hysys® do gás natural na corrente de entrada.

Tabela 1 - Dados de entrada do gás natural.

Composição (% molar)	Metano	89,24
	Etano	7,86
	Propano	0,24
	Dióxido de carbono	1,25
	Nitrogênio	1,34
	Oxigênio	0,07
	Temperatura (°C)	25
	Pressão (kgf/cm²)	32

Fontes: (Cegás, 2024; SCGás, 2024)

Simulação do Processo no Aspen Hysys

A fase inicial do projeto envolveu a construção de um modelo do processo de produção de hidrogênio azul no software Aspen Hysys®. O pacote termodinâmico escolhido foi Peng-Robinson devido à sua boa precisão na modelagem de sistemas contendo hidrocarbonetos leves (Chehade *et*

al., 2020). O reator de equilíbrio foi escolhido porque objetiva-se encontrar uma estimativa teórica do limite máximo de conversão para um dado conjunto de condições operacionais e as reações químicas envolvidas são conhecidas e bem definidas (Durán *et al.*, 2020). As condições de entrada foram escolhidas conforme dados da literatura e podem ser vistas na Tabela 2.

Tabela 2 - Dados de entrada do processo.

Temperatura do [Vapor] (°C)	120
Pressão de [1] (bar)	10
Temperatura de [3] (°C)	600
Temperatura de [4] (°C)	700
Temperatura de [5] (°C)	500
Temperatura de [6] (°C)	400
Temperatura de [7] (°C)	200
Temperatura de [Produto Final] (°C)	150
Vazão molar de [Gás Natural] (kmol/h)	1000
Razão H2O/Gás Natural	1

Como é possível visualizar através dos dados dispostos na Tabela 2, o processo descrito não ocorre de forma adiabática e nem isotérmica. Essa escolha foi feita objetivando um maior controle sobre o perfil de temperatura ao longo do reator. Isto é, suprir ou retirar o calor necessário do processo para manter uma alta conversão constantemente (Molburg e Doctor, 2003).

Análise paramétrica

A partir do modelo descrito e validado no Aspen Hysys®, a etapa subsequente consistiu em uma análise paramétrica com o objetivo de investigar quantitativamente a influência de três variáveis críticas na produção de hidrogênio, quais sejam:

- **Temperatura do reator de reforma (400–1000 °C):** influência significativa devido ao caráter endotérmico da reação.
- **Pressão do sistema (1–32 bar):** afeta o equilíbrio e os custos operacionais.
- **Razão molar vapor/metano (1–5):** desloca o equilíbrio e reduz a formação de coque.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

A partir do caso base simulado, obtiveram-se os resultados dispostos na Tabela 3. Esses resultados evidenciam um potencial significativo de melhoria no processo.

Tabela 3 - Resultados do caso base

Energia requerida (kJ/h)	1,051E8
Fração molar de H_2 em [4]	0,377
Fração molar de H_2 em [Produto Final]	0,512

Fração molar de CH_4 em [Produto Final]	0,249
Vazão molar de [Produto Final] (kmol/h)	2746,42

Diante disso, foi realizada a análise paramétrica descrita anteriormente, alterando as variáveis críticas de operação, com o objetivo de maximizar a produção de hidrogênio. Os gráficos apresentados a seguir ilustram o resultado obtido. Os resultados foram exportados para uma planilha eletrônica e posteriormente analisados com suporte do Python, permitindo a visualização gráfica do impacto dessas variáveis sobre os principais parâmetros de interesse.

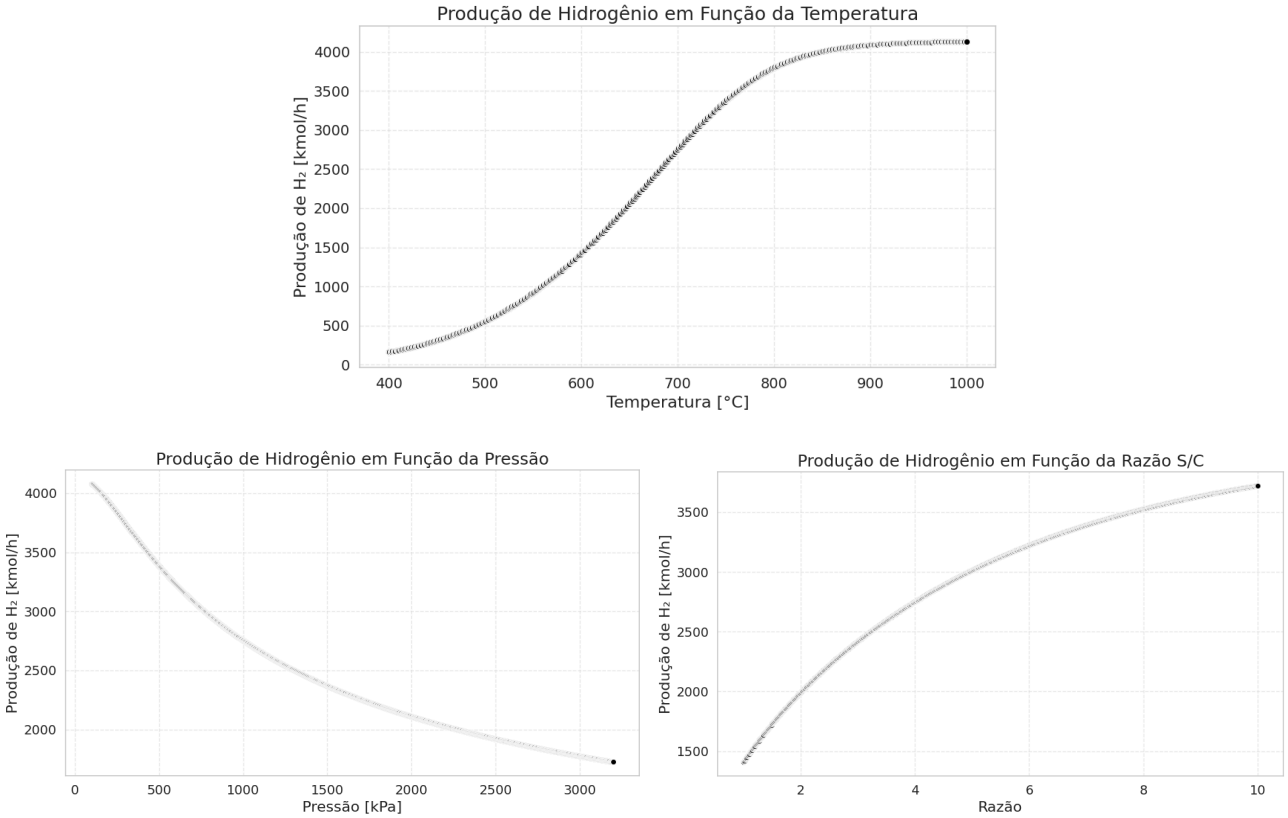

Figura 2, 3 e 4 - Variação da produção de hidrogênio em relação a temperatura, pressão e razão vapor-carbono

A partir das imagens observou-se que a pressão tende a desfavorecer a formação de produtos quando elevada, com isso, a pressão de operação escolhida foi a de 1 bar. Em contrapartida, tanto a razão H_2O/Gás natural quanto a temperatura do sistema, quando aumentam têm uma influência positiva na formação de H_2. Em função disso, utilizou-se o método de tentativa e erro para avaliar o impacto conjunto dessas variáveis - isto é, encontrar a menor combinação entre elas que produza a maior produção de H_2. Essa combinação de fatores foi com uma razão H_2O/Gás natural igual a 3, e a uma temperatura na saída do reator igual a 800 °C. Valores extremamente razoáveis quando comparados com a literatura. Todos os resultados desse caso podem ser observados na Tabela 4.

Tabela 4 - Resultados do caso base

Energia requerida [kJ/h]	1,837E8
Fração de H_2 em [4]	0,504
Fração de H_2 em [Produto Final]	0,676

Fração de CH_4 em [Produto Final]	0,004
Vazão molar de [Produto Final] (kmol/h)	6108,72

CONCLUSÕES:

Este trabalho apresentou a modelagem e análise do processo de reforma a vapor do metano no Aspen HYSYS, com foco no impacto de variáveis operacionais na produção de hidrogênio. Os resultados mostraram que o caso base possui eficiência limitada e potencial de otimização. A análise paramétrica indicou que altas temperaturas e maior razão H_2O/CH_4 favorecem a produção de hidrogênio, enquanto o aumento da pressão a reduz. A análise gráfica permitiu identificar regiões operacionais mais vantajosas.

Como trabalhos futuros, pretende-se avaliar o impacto dessas variáveis na energia requerida e exergia destruída, realizar uma otimização numérica e expandir o modelo para incluir a reação WGS e etapas de captura de carbono.

BIBLIOGRAFIA

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). Energy Technology Perspectives 2023. Paris: IEA, 2023. Disponível em: https://www.iea.org/reports/energy-technology-perspectives-2023. Acesso em: 19 jul. 2025.

EPE (Empresa de Pesquisa Energética). Hidrogênio Azul: Produção a partir da reforma do gás natural com CCUS. Disponível em: https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-654/NT%20Hidrogenio%20Azul.pdf. Acesso em: 19 jul. 2025.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). World Energy Outlook 2019. Paris: IEA, 2019. Disponível em: https://iea.blob.core.windows.net/assets/98909c1b-aabc-4797-9926-35307b418cdb/WEO2019-free.pdf. Acesso em: 19 jul. 2025.

CHEHADE, Aya M. El Hajj; DAHER, Elie A.; ASSAF, Jean Claude; RIACHI, Bassam; HAMD, Wael. Simulation and optimization of hydrogen production by steam reforming of natural gas for refining and petrochemical demands in Lebanon. International Journal of Hydrogen Energy, [S.l.], v. 45, n. 49, p. 33235–33247, 2020. Elsevier. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.09.077.

Duran, F. J., Dorado, F., & Sanchez-Silva, L. (2020). Exergetic and economic improvement for a steam methane-reforming industrial plant: Simulation tool. Energies, 13(15), 3807. https://doi.org/10.3390/en131538077

SCGÁS. O gás natural - Gasoduto. 2024. Disponível em: https://www.scgas.com.br/scgas/site/o-gas-natural/gasoduto. Acesso em: 20 jul. 2025.

CEGÁS. O gás natural. 2024. Disponível em: https://www.cegas.com.br/gas-natural/o-gas-natural/. Acesso em: 20 jul. 2025.

MOLBURG, John C.; DOCTOR, Richard D. Hydrogen from steam-methane reforming with CO_2 capture. In: INTERNATIONAL PITTSBURGH COAL CONFERENCE, 20., 2003, Pittsburgh. Anais... Pittsburgh: [s.n.], 2003. p. 1-21.