

Lead institution: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo (USP) – Work Address of the position: Departamento de Eng. Química – Av. Prof. Lineu Prestes, 580 Cidade Universitária	
Supervisor name: Rita Maria de Brito Alves	Department: Chemical Engineering
Co-supervisor (if any): Camila Emila Kozonoe	Department: Chemical Engineering
Recipient: http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ Ref: 17SIR031 http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/	Type: Undergraduate Scientific Initiation Number of months: 12
Project title: (Portuguese and English) Avaliação de Rotas para Obtenção de Hidrogênio Combustível – Projeto 13 Evaluation of routes to Hydrogen Production – Project 13	
Research theme area: (Portuguese and English) energia; purificação de H ₂ ; células combustíveis; simulação energy; H ₂ purification; fuel cells; simulation	
Abstract (Portuguese and English) Espera-se que a pesquisa de iniciação científica seja desenvolvida em colaboração com pesquisadores do <u>projeto 13</u> do programa de Físico Química do Research Centre for Gas Innovation – RCGI da USP (programa e projetos estão disponíveis no site do RCGI www.usp.br/rcgi). O impacto ambiental dos combustíveis fósseis bem como a sua finitude tem impulsionado o desenvolvimento de formas alternativas de obtenção de energia. Neste contexto, as células combustíveis (ou fuel cells) são uma tecnologia promissora por utilizarem, como reagentes, hidrogênio e oxigênio na produção de energia elétrica, emitindo apenas componentes não tóxicos, como vapor de água. Um problema relacionado a esse tipo de equipamento é a exigência de uma fonte de hidrogênio de alta pureza (99,999% em massa), já que, pequenas frações de contaminantes como, por exemplo, o monóxido de carbono, podem danificar o catalisador da célula e diminuir sua vida útil. Para alcançar tal pureza, a indústria aplica uma série de processos de separação que acabam por aumentar o custo do hidrogênio combustível. O objetivo deste projeto é propor e estudar processos de purificação de hidrogênio a partir do gás de síntese, que alcancem as concentrações necessárias de H ₂ e CO de alimentação das células combustíveis. A análise dos diversos processos de purificação será realizada utilizando o software comercial de simulação de processos Aspen Plus®. Serão avaliadas as condições de operação, e estudados os cenários econômicos e ambientais dos distintos processos propostos, verificando sua viabilidade.	

This Undergraduate Scientific Initiation position is expected to be developed in collaboration with researchers from the Project 13 of the Physical Chemical Programme of the Research Centre for Gas Innovation (RCGI) at the University of Sao Paulo (USP) -- summary of the program and projects can be found in the RCGI website at www.usp.br/rcgi.

The environmental impact of fossil fuels as well as their finitude has driven the development of alternative ways of obtaining energy. In this context, fuel cells (or fuel cells) are a promising technology to use, such as reagents, hydrogen and oxygen in the production of electric energy, emitting only non-toxic components such as water vapor. A problem related to this type of equipment is the requirement for a source of hydrogen of high purity (99.999% by mass), since small fractions of contaminants such as carbon monoxide can damage the cell's catalyst and life. To achieve such purity, the industry applies a number of separation processes that ultimately increase the cost of hydrogen fuel. The objective of this project is to propose and to study processes of purification of hydrogen from the synthesis gas, that reach the necessary concentrations of H₂ and CO of fuel supply of the fuel cells. The analysis of the various purification processes will be performed using commercial Aspen Plus® process simulation software. The operating conditions will be evaluated, and the economic and environmental scenarios of the different proposed processes will be studied, verifying their viability.

Description (Portuguese and English)

As fuelcells (ou células combustíveis) requerem gás hidrogênio com alto grau de pureza e concentrações de monóxido de carbono (CO) e compostos sulfúricos inferiores a um limite pré-estabelecido, que varia de acordo com o tipo de célula empregada. Dentre as tecnologias existentes para a purificação de gases apenas quatro são capazes de atingir o alto grau de pureza necessário. Dentre elas há processos capazes de diminuir a concentração apenas de monóxido de carbono (Preferential Oxidation e Methanation), e outros que são considerados processos universais de purificação (Pressure Swing Adsorption e membranas). O estudo aqui apresentado faz parte de um projeto maior possuindo, dentre outras etapas, o processo de reforma de gás metano. Nessa etapa, ocorre a transformação de metano em hidrogênio e monóxido de carbono, obtendo-se, dessa forma, o gás de síntese que servirá como alimentação para os processos de purificação que serão avaliados. Dentre os tipos de fuelcells existentes, optou-se por utilizar as especificações da Proton Exchange MembraneFuelCell (PEMFC), que é, atualmente, a fuelcell mais produzida, pelo fato de ser compacta, o que possibilita seu uso no setor automobilístico. Há um acordo internacional (ISO 14687-2) que estabelece uma pureza e uma concentração máxima de monóxido de carbono para essa fuelcell nos valores de 99.999% de H₂ e 10ppm de CO. ("INTERNATIONAL STANDARD Hydrogen fuel — Product specification — Part 2: fuel cell applications for road vehicles", 2012). O caráter finito e poluidor dos combustíveis fósseis tem incentivado, ao longo dos últimos anos, o investimento em formas alternativas de obtenção de energia. As fuelcells se apresentam como boas substituintes por utilizarem, como reagentes, gases facilmente encontrados na atmosfera, ou produzidos em reações de outras naturezas (H₂ e O₂). E, além disso, possui como produto a formação de água (H₂O), molécula não poluente e que pode ser utilizada em outros processos. A justificativa para fomento ao projeto se dá vista a necessidade de geração de conhecimento na área de obtenção de novas formas de energia limpa. O objetivo geral do presente projeto é analisar os processos que alcancem as especificações requeridas na corrente de saída, analisando a viabilidade econômica e ambiental, e as condições de operação necessárias a partir de simulações com o software Aspen Plus®.

Fuelcells require high purity hydrogen gas and concentrations of carbon monoxide (CO) and sulfur compounds below a pre-set limit, which varies according to the type of cell used. Among the existing technologies for gas purification only four are able to achieve the high degree of purity required. Among them are processes that can reduce the concentration of carbon monoxide

(Preferential Oxidation and Methanation), and others that are considered universal processes of purification (Pressure Swing Adsorption and membranes). The study presented here is part of a larger project with, among other steps, the methane gas reform process. In this stage, the transformation of methane into hydrogen and carbon monoxide takes place, obtaining, in this way, the synthesis gas that will serve as feed for the purification processes that will be evaluated. Among the types of existing fuelcells, we chose to use the Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC) specifications, which is currently the most produced fuelcell because it is compact, which makes it possible to use it in the automotive sector. There is an international agreement (ISO 14687-2) which establishes a purity and a maximum concentration of carbon monoxide for this fuelcell in the values of 99.999% H₂ and 10ppm CO. ("INTERNATIONAL STANDARD Hydrogen fuel - Product specification - Part 2: fuel cell applications for road vehicles", 2012). The finite and polluting character of fossil fuels has encouraged, in recent years, the investment in alternative forms of obtaining energy. The fuelcells present themselves as good substituents for using as reagents gases easily found in the atmosphere, or produced in reactions of other natures (H₂ and O₂). In addition, it has the formation of water (H₂O), a non-polluting molecule that can be used in other processes. The justification for promoting the project is given the need to generate knowledge in the area of obtaining new forms of clean energy. The overall objective of this project is to analyze the processes that meet the required output current specifications, analyzing the economic and environmental feasibility, and the operating conditions required from simulations with Aspen Plus® software.

Requirements to fill the position. (Ex: specific experience, minimum or maximum years after concluding the course) (Portuguese and English)

Os requisitos da posição são:

- Ter conhecimento em modelagem de processos;
- Ter habilidades em simulação e otimização de processos;
- Escrever e ler relatórios e artigos em inglês;
- Apresentar resultados de pesquisa em conferências, reuniões e eventos;
- Estar no terceiro/quarto ano de graduação em engenharia química;
- Ser comunicativo e disposto a aprender.
- É desejável média geral acima de 7.0.

Este projeto é adequado para um indivíduo altamente qualitativo + quantitativo. O candidato aprovado se juntará a uma equipe de pesquisadores multidisciplinares com oportunidades de colaboração internacional.

O candidato selecionado receberá bolsa concedida pela FAPESP. Maiores informações e inscrição em <http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 17SIR031) até 20 de Novembro de 2017.

The requirements of the position are to:

- To have knowledge in process modeling;
- To have skills in simulation and optimization of process;
- To write and read reports and articles in English;
- To present research outputs at conferences, meetings and events;
- To being in the third/fourth year of undergraduate course in chemical engineering;
- To be communicative and willing to learn.
- It is desirable an overall grade above 7.0.

This project is well-suited to a highly qualitative + quantitative individual. Scripting skills will be beneficial alongside excellent communication. The successful applicant will join a team of leading multi-disciplinary researchers with opportunities for international collaboration.

The selected candidate will be given fellowship granted by FAPESP. More information and application at <http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 17SIR031) up to 20 November 2017.