

## MODELAGEM DA CÉLULA ELETROQUÍMICA PARA PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO VERDE E HIPOCLORITO DE SÓDIO

Rodrigo V. Lima <sup>1</sup>, Júlio I. H. T. Neto<sup>2</sup>, Amanda S. Peiter<sup>3</sup> e Leonardo F. L. Souza<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Alagoas, Rio Largo - AL, rodrigo.lima@ceca.ufal.br

<sup>2</sup> Universidade Federal de Alagoas, Rio Largo - AL, julio.neto@ceca.ufal.br

<sup>3</sup>Universidade Federal de Alagoas, Rio Largo - AL, amanda.peiter@ceca.ufal.br

<sup>4</sup>Universidade Federal de Alagoas, Rio Largo - AL, leonardo.souza@ceca.ufal.br

### Resumo

*Este trabalho apresenta a modelagem matemática e experimental de um reator eletrolítico contínuo para produção de hidrogênio verde a partir de água do mar, utilizando eletrodos de Titânio DSA. O estudo analisa o comportamento de geração de hipoclorito de sódio e hidrogênio, correlacionando os resultados experimentais com os previstos pelo modelo teórico baseado na Lei de Faraday. A comparação entre os dados mostrou boa concordância na tendência de crescimento, embora com diferenças quantitativas associadas à presença de íons interferentes e perdas eletroquímicas no sistema. O modelo desenvolvido se mostrou adequado para prever a produção de hidrogênio e pode servir como base para estudos de otimização de reatores sustentáveis.*

*Palavras-chave: Hidrogênio Verde, Eletrólise Química.*

### Introdução

Com os intensos aumentos da temperatura causados pelo aquecimento global, desencadeados pela constante emissão de gases do efeito estufa (GEE), a busca de geração de energia por rotas sustentáveis e renováveis é crescente. O Hidrogênio, um dos possíveis vetores energéticos da transição energética, precisa desenvolver tecnologias sustentáveis para geração de forma sustentável, produzindo assim o Hidrogênio Verde. Contudo é necessário desenvolver metodologias confiáveis para geração desse possível vetor.

### Objetivos

Desenvolver modelo matemático que seja capaz de prever a produção do hidrogênio e do hipoclorito de sódio baseado nas variáveis do processo eletroquímico.

### Resumo Teórico

A eletrólise é um processo eletroquímico no qual a passagem de corrente elétrica provoca reações de oxirredução não espontâneas. Na água do mar, os íons cloreto participam dessas reações, resultando na geração simultânea de hidrogênio e hipoclorito de sódio. Segundo a Lei de Faraday, a quantidade de produto formado é proporcional à carga elétrica aplicada, permitindo prever a produção a partir de variáveis como corrente, tempo

e volume do reator. Fatores como temperatura, densidade de corrente e composição do eletrólito influenciam diretamente a eficiência global do processo.

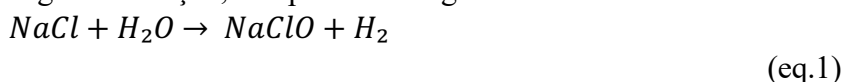
## Metodologia

### Caracterização do sistema

O reator eletroquímico contínuo de 656 ml com eletrodo Ti-DSA, utilizando água do mar como eletrólito, operando com densidade de corrente de aproximadamente 200 mA/cm<sup>2</sup>, temperatura de 25° C, vazões variáveis de 3,4, 8,9 e 19,9 mL/min com objetivo de avaliar tempo de residência para produção de NaClO e o H<sub>2</sub>.

### Desenvolvimento do modelo matemático teórico

A equação global que rege essa reação, é expressa da seguinte forma:



Na água do mar, o NaCl se dissocia em íons Na<sup>+</sup> e Cl<sup>-</sup>. No reator, ocorre a oxidação dos ânions Cl<sup>-</sup>, formando Cl<sub>2</sub> e liberando elétrons. Essa variação eletrônica permite estimar a concentração de produto ao longo do tempo, conforme a Lei de Faraday, que relaciona a quantidade gerada à corrente elétrica aplicada:

$$n = \frac{I \cdot t}{z \cdot F} \quad (\text{eq.2})$$

onde n é o número de mols de NaClO produzidos; I, a corrente elétrica (A); t, o tempo (s); z, o número de elétrons transferidos; e F, a constante de Faraday (96 485 C/mol). Em termos de concentração, a taxa de geração pode ser expressa como:

$$r_{ger} = \frac{I}{z \cdot F \cdot V} \quad (\text{eq.3})$$

onde V é o volume do reator (L). Para um reator do tipo CSTR, o balanço de massa é descrito por:

$$\text{Acúmulo} = \text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} \quad (\text{eq.4})$$

No caso da concentração de NaClO:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{V}{Q} (C_{in} - C) + r_{ger} \quad (\text{eq.5})$$

em que  $C$  é a concentração de NaClO no reator (mol/L),  $Q$  é a vazão volumétrica (L/s),  $V$  é o volume do reator (L),  $C$  a concentração de entrada de NaClO (mol/L), nula neste caso, devido a não haver entrada de hipoclorito de sódio no sistema, fazendo com que  $C$  seja *en* igual a 0, ficando da seguinte forma:

$$\frac{dc}{dt} = -\frac{V}{Q} C + r_{ger} \quad (\text{eq.6})$$

Para a obtenção de uma resolução numérica, foi utilizado o método de Euler, que aproxima a equação diferencial por diferenças finitas, facilitando a implementação em programas computacionais:

$$C_{t+\Delta t} = (C_t + \Delta t * (-\frac{V}{Q} C_t + r_{ger})) \quad (\text{eq.7})$$

onde  $C_{t+\Delta t}$  é a concentração no próximo instante ( $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ ),  $C_t$  é a concentração no instante atual ( $\text{mol} \cdot \text{L}^{t+\Delta t-1}$ ),  $\Delta t$  é passo de tempo adotado (s).

No entanto, segundo Asokan e Subramanian (2009), a concentração máxima de hipoclorito de sódio em solução aquosa obtida por eletrólise não ultrapassa valores cerca de 8 g/L, uma vez que o aumento da temperatura durante o processo promove a decomposição química do NaClO formado, reduzindo a eficiência da reação. Dessa forma, para representar essa restrição no modelo, foi inserido um limitante  $C_{max}$ , de modo a impedir que as simulações numéricas alcancem valores irrealistas. Assim, a equação é reescrita como:

$$C_{t+\Delta t} = (C_t + \Delta t * (-\frac{V}{Q} C_t + r_{ger}) * (1 - \frac{C_t}{C_{max}})) \quad (\text{eq.8})$$

### 4.3 Implementação Computacional

Algoritmo elaborado no Google Sheets calculando produção teórica de  $H_2$  e  $NaClO$ . Gráficos comparativos foram gerados para visualizar a produção variando o tempo de residência.

### Validação do modelo

Foi realizada a comparação entre as concentrações experimentais de hipoclorito de sódio, obtidas por análise titulométrica, e os valores teóricos previstos pela Lei de Faraday, permitindo estimar a eficiência real do processo e as perdas por reações paralelas. A validação do modelo baseou-se nessa correlação, considerando a estequiometria para estimar a produção correspondente de hidrogênio.

### Resultados e discussões

Com o modelo matemático completo, foi possível obter os seguintes resultados, para visualizar as curvas de crescimento reais semelhantes às das figuras 1 e 2.

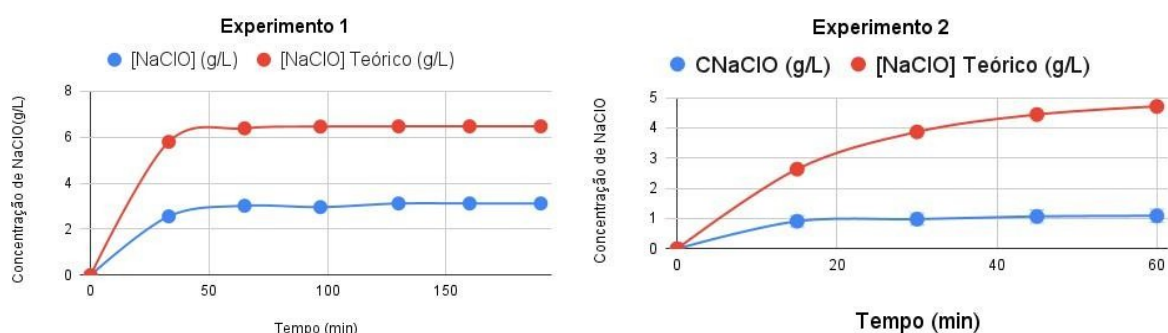


Fig.:1: Gráficos de Geração dos experimentos 1 e 2

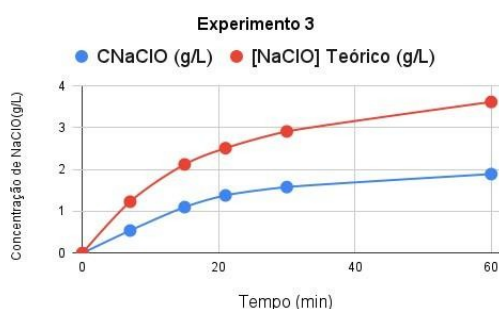


Fig.:2: Gráficos de Geração Experimento 3

## Agradecimentos

Gostaria de agradecer a toda a equipe do Laben, meu orientadores Dr. Julio Holanda, Dra. Amanda Peiter, Dr. Leonardo Souza pela capacitação, confiança e por conceder uma oportunidade de desenvolvimento para os alunos, a FAPEAL pelo suporte financeiro cedido a esse projeto.

## Referências

Jimena Incer-Valverde, Amira Korayem, George Tsatsaronis, Tatiana Morosuk, “Colors” of hydrogen: Definitions and carbon intensity. *Energy Conversion and Management*, Volume 291, 2023

NASCIMENTO, Ronaldo. *Processos Eletrolíticos: Fundamentos e aplicações em matrizes ambientais*. 1. ed. Fortaleza: Imprensa Universitária UFC, 2021.

Alexandra M Oliveira, Rebecca R Beswick, Yushan Yan, A green hydrogen economy for a renewable energy society, *Current Opinion in Chemical Engineering*, Volume 33, 2021

LEVENSPIEL, Octave. *Chemical reaction engineering*. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999.

CHAPRA, Steven C.; CANALE, Raymond P. *Métodos numéricos para engenharia*. 5. ed. Porto Alegre: AMGH Editora, 2011.

ASOKAN, K.; SUBRAMANIAN, K. *Design of a tank electrolyser for in-situ generation of NaClO*. *Proceedings of the World Congress on Engineering and Computer Science*, v. 1, p. 20–22, San Francisco, USA, 2009.