

Modelagem cinética da gaseificação catalítica da biomassa para produção de hidrogênio e geração de eletricidade numa célula de membrana permutadora de prótons (PEM).

Pedro Tavares-Borges¹, Electo Silva-Lora², Diego Yepes-Maya³, Carlos Diaz-González⁴

¹Núcleo de Excelência em Geração Termoelétrica e Distribuída - NEST, Itajubá, Universidade Federal de Itajubá-UNIFEI, Brasil. Email: d2023100628@unifei.edu.br

²Núcleo de Excelência em Geração Termoelétrica e Distribuída - NEST, Itajubá, Universidade Federal de Itajubá-UNIFEI, Brasil. Email: silva.electo52@gmail.com

³Núcleo de Excelência em Geração Termoelétrica e Distribuída - NEST, Itajubá, Universidade Federal de Itajubá-UNIFEI, Brasil. Email: diegoyepes@unifei.edu.br

⁴Grupo de Pesquisa em Recursos, Energia e Sustentabilidade - GIRES, Bucaramanga, Universidad Autónoma de Bucaramanga -UNAB, Colômbia. Email: cdiaz23@o365.unab.edu.co

Resumo

No ano de 2022, um total de 95 Mt H₂ foram consumidos sendo que de todo esse quantitativo consta que cerca de 80% proviram de combustíveis fósseis, resultando num total de 950 Mt de CO₂ emitidos. A produção do combustível por meio da biomassa é contudo um sistema auxiliar a actual transição energética. Dito isto o objetivo do presente trabalho é modelar e avaliar a gaseificação catalítica de resíduos do eucalipto para produção de H₂, que permitirá obter um gas de síntese com um teor de hidrogênio entre 10-30 % maior que durante a gaseificação com vapor e sem catalisador. A metodologia perpassa por construir e aplicar o modelo cinético de LHHW no software Aspen Plus®. Complementado por um sistema de limpeza por membranas e pela aplicação do hidrogênio em uma célula combustível do tipo membrana permutadora de prótons (PEM). Os resultados mostram que um combustível com 65 % e 99,99 % volume de H₂ é produzido na gaseificação e após a membrana, respectivamente. Além disso um total de 1025 kWe foram produzidos para um fluxo de 400 kmol/hr de H₂. As conclusões do trabalho enfatizam a gaseificação catalítica de biomassa como um excelente método de produção de hidrogênio e eletricidade de baixo carbono.

Palavras-chave: Gaseificação da biomassa; catalisadores; modelagem; hidrogênio verde; Aspen Plus®.

Abstract

In 2022, a total of 95 Mt of H₂ were consumed, of which around 80% came from fossil fuels, resulting in a total of 950 Mt of CO₂ emitted. The production of fuel using biomass is, however, an auxiliary system for the current energy transition. That said, the aim of this work is to model and evaluate the catalytic gasification of eucalyptus residues to produce H₂, which will make it possible to obtain a synthesis gas with a hydrogen content 10-30 % higher than during gasification with steam and without a catalyst. The methodology involves building and applying the LHHW kinetic model in Aspen Plus® software. Complemented by a membrane cleaning system and the application of hydrogen in a proton exchange membrane (PEM) type fuel cell. The results show that a fuel with 65% and 99.99% H₂ volume is produced in gasification and after membrane cleaning, respectively. In addition, a total of 1025 kWe were produced for a flow rate of 400 kmol/hr of H₂. The conclusions of the work emphasize the catalytic gasification of biomass as an excellent method for producing hydrogen and low-carbon electricity.

Keywords: Biomass gasification; catalysts; modeling; green hydrogen; Aspen Plus®.

1. Introdução

Dado ao aumento do consumo de energia, atualmente há uma procura incesante por fontes energéticas sustentáveis, substituindo assim o uso de combustíveis fósseis e contribuindo a mitigar o aquecimento global [1].

Várias fontes de produção de energia podem ser consideradas sustentáveis, a exemplo da energia solar, eólica, nuclear, hidroelétrica e da biomassa. A produção de energia através da biomassa apesar de depender da sua disponibilidade, e aspectos logísticos, é uma tecnologia em que a matéria prima pode ser produzida, logo possui baixa intermitência e variabilidade. Ao contrário das demais fontes que ou são intermitentes e sazonais ou são tecnologias complexas, tornando a biomassa uma fonte de apoio promissora na actual transição energética e descarbonização.

A conversão da biomassa em combustível ou energia pode ser bioquímica onde processos como a fermentação escura, hidrólise fotossintética, catálise enzimática, digestão anaeróbica, entre outros, são utilizáveis. Alguns dos principais produtos obtidos podem ser: biometano, biodiesel, hidrogênio (H₂) e outros. Por outro lado pode-se também aplicar sistemas termoquímicos para converção da biomassa, onde processos como a pirólise, combustão, gaseificação, torefação e craqueamento hidrotérmico, são aplicáveis para a obtenção de produtos como: hidrogênio, carvão, biometano, amônia, etc [2].

O hidrogênio, apontado como um dos principais vetores da actual transição energética, teve um consumo de 95 Mt H₂ no ano de 2022, de notar que as refinarias consumiram cerca de 41 Mt H₂, sendo aplicados em uso direto como matéria prima, reagentes, ou ainda fonte de energia. A indústria química consumiu cerca de 53 Mt H₂ sendo 60% para a produção de amônia, 30% para a produção de metanol e 10% para a redução direta do ferro produzindo aço. Os outros 1% são divididos no setor de transporte, construções e geração de eletricidade [3].

De todo esse quantitativo consumido, consta que cerca de 80% provém de combustíveis fósseis diretamente, e o restante advém de gases residuais da indústria petroquímica e refinarias, resultando num total de 950 Mt de CO₂ emitidos. Em contraponto a todo esse poluidor emitido, o uso de energias renováveis em eletrolizadores para separar a molécula da água, é a tecnologia de maior maturidade para a produção de H₂.

No entanto, como mencionado, essas fontes limpas são intermitentes e variáveis. Sendo assim é primordial que o potencial da produção de hidrogênio por matérias primas de menor intermitência, seja, modelados e simulados, como é o caso da gaseificação catalítica da biomassa. Em termos da metodologia de modelagens do processo de produção térmica da biomassa, pode-se conceituar, os modelos cinéticos, os

modelos em equilíbrio, os modelos de simulação fluido dinâmicos e os modelos de redes artificiais neurais.

No trabalho aqui apresentado, realiza-se uma modelagem cinética do processo de gaseificação catalítica da biomassa pelo método de Langmuir-Hinshelwood (LHHW) no Aspen Plus, tendo em vista a obtenção de um gás combustível com elevadas concentrações de H₂. Simplificando assim o processo de purificação para uma simples membrana e culminando com a avaliação energética da aplicação do syngas obtido em uma célula a combustível de membrana trocadora de prótons (PEM).

2. Modelagem de sistemas catalíticos heterogêneos complexos no Aspen Plus e seus equacionamentos

Quando almeja-se simular um dado sistema no software Aspen Plus por modelos cinéticos, ele disponibiliza dois caminhos possíveis. Um por meio das equações de estado PowerLaw e outro por meio das equações de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW). Sendo este último o único capaz de modelar sistemas catalíticos heterogêneos complexos.

A taxa de reação pelo modelo de LHHW nada mais é do que a razão entre o fator cinético multiplicado pela expressão da força motriz e a expressão da absorção. Sendo ela reduzida a eq.1 quando os parâmetros não são especificados.

$$r = \frac{k_e e^{(-E/RT)} (K_1 \prod_{i=1}^N C_i^{\alpha_i} - K_2 \prod_{j=1}^N C_j^{\beta_j})}{\left(\sum_{i=1}^M K_i \left(\prod_{j=1}^N C_j^{\nu_j} \right) \right)^m} \quad \text{Eq. 1}$$

Onde: r é a taxa da reação em kmol.s.m⁻³; C_i e C_j são as concentrações em kmol.m⁻³; e por último, as constantes K são dependentes da temperatura como se segue na eq.2:

$$\ln K = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT \quad \text{Eq. 2}$$

Os coeficientes (A, B, C e D), são constantes do modelo de LHHW e diferem consoante é a ordem de reação avaliada. Na tabela 1 são apresentados todos os parâmetros cinéticos, ainda em suas equações de taxas que foram introduzidos no modelo LHHW do Aspen plus®, tendo em vista a convergência do modelo. A partir dos mesmos é possível calcular os coeficientes das reações diretas e reversas, figura 1.

Tabela 1. Reações típicas da gaseificação e as respectivas taxas cinéticas de reações implícitas.

Tipos de reação	Reações	Constante aparente das taxas (fator cinético e força motriz)	Ref.
Reações de carbono			

R1	$C + CO_2 \leftrightarrow 2CO$	$36,16 \times e^{\left(\frac{-77,39}{0,008314 \times T}\right)}$	[4]
R2	$C + H_2O \leftrightarrow CO + H_2$	$1,517^4 \times e^{\left(\frac{-126,62}{0,008314 \times T}\right)}$	[5]
R3	$C + 2H_2 \leftrightarrow CH_4$	$4,189^{-3} \times e^{\left(\frac{-19,21}{0,008314 \times T}\right)}$	[6]
R4	$C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	$2,3T \times P_{O_2}^{0,4}$	[7]
<i>Reações de oxidação</i>			
R5	$C + O_2 \rightarrow CO_2$	$4,72^{-3} \times e^{\left(\frac{-37,787}{0,008314 \times T}\right)}$	[8]
R6	$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	$3,98^{20} e^{\left(\frac{-1,67^5}{0,008314 \times T}\right)} \times P_{H_2O}^{0,5} P_{CO}^1 P_{O_2}^{0,4}$	[8]
R7	$CH_4 + 2O_2 \leftrightarrow CO_2 + 2H_2O$	$4,225^{15} \times e^{\left(\frac{-240100}{0,008314 \times T}\right)} \times P_{CH_2}^1 P_{O_2}^{0,5} + 5,35^{-1} \times e^{\left(\frac{-7500}{T}\right)} P_{CH_2}^1 P_{O_2}$	[4]
R8	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	$2,19^{18} e^{\left(\frac{-1,09^5}{0,008314 \times T}\right)} \times P_{H_2}^1 P_{O_2}^{0,4}$	[9]
<i>Reações de troca</i>			
R9	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	$2,824^{-2} \times e^{\left(\frac{-32,84}{0,008314 \times T}\right)}$	[4]
<i>Reações De metanação</i>			
R10	$2CO + 2H_2 \rightarrow CH_4 + CO_2$	$5,35^{-1} \times e^{\left(\frac{-7500}{T}\right)}$	[4]
R11	$CO + 3H_2 \leftrightarrow CH_4 + H_2O$	$4,225^{15} \times e^{\left(\frac{-240100}{0,008314 \times T}\right)}$	[9]
R14	$CO_2 + 4H_2 \rightarrow CH_4 + 2H_2O$	$1,020^{15} \times e^{\left(\frac{-243900}{0,008314 \times T}\right)}$	[9]
<i>Reações de reforma a vapor</i>			
R12	$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$	$7,301^{-2} \times e^{\left(\frac{-36,15}{0,008314 \times T}\right)}$	[4]

R13	$CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2$	$5,0119^{11} \times P_{CH_4}^{0,7} P_{O_2}^{0,8} \times e^{\left(\frac{-126,62}{0,008314 \times T}\right)}$	[4]
<i>Reações de catalização</i>			
R15	$CaO + CO_2 \rightarrow CaCO_3$	$1,44^8 e^{\frac{8308}{T+9,079}} \times \frac{1}{8,314T}$	[10]

3. Metodologia

3.1. Materiais e métodos

O método do artigo proposto perpassa pela construção de modelos e realização de simulações do processo de gaseificação catalítica da biomassa para a produção do *syngas* rico em H_2 . As simulações foram realizadas no software Aspen plus® V11 [11], onde o modelo da cinética do processo é aplicado. O processo começa por um pré-tratamento da biomassa “secagem” seguido pela “gaseificação catalítica” em si e por último separação de particulados. Após esses processos de produção do *syngas* com alto teor de H_2 , realizou-se a modelagem e simulação da aplicação do gás em uma célula combustível do tipo membrana permutadora de prótons (PEM).

3.2. Hipóteses para as modelagens

Algumas das hipóteses levadas em consideração na construção e simulação do modelo são listadas abaixo:

- As cinzas são consideradas inertes;
- O processo se dá em estado estacionário;
- A pressão é considerada uniforme no interior do reator;
- Não há perdas de calor e de pressão no reator;
- Todos os compostos gasosos têm comportamento de gás ideal (CO , CO_2 , CH_4 , H_2);
- A formação de NH_3 , HCl e H_2S não foram considerados;
- O carbono sólido não convertido estava presente nos produtos;
- A velocidade de fluidização no reator não foi considerada como parâmetro no modelo;

realizadas laboratorialmente e descritas por [12] na tabela 2, foram introduzidas como dados base no software, especificamente no fluxo “biomass” observado na figura 2.

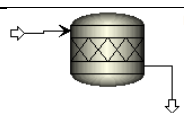
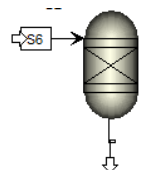
Tabela 2. Análise última e próxima da biomassa utilizada no Aspen plus.

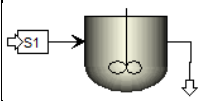
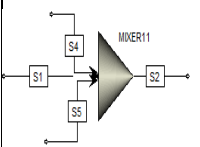
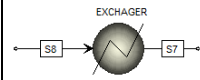
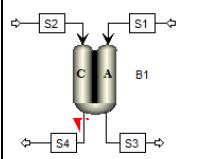
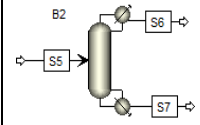
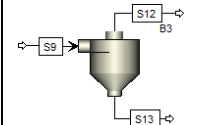
Parâmetros	
Resíduos de Eucalipto	
	Análise próxima (base seca)
Teor de humidade	11,17
Materiais voláteis	72,86
Carbono fixo	15,18
Cinzas	0,79
	Análise Última (base seca)
Carbono	49
hidrogênio	6,3
Nitrogênio	0,2
Enxofre	0,1
Oxigênio	44,4

Fonte: Adaptado de [12].

Como mencionado anteriormente o Aspen plus funciona por meio de blocos dinâmicos que realizam balanços de massa, energia e aplicam suas equações de convergência. Na tabela 3, estão representados os blocos aplicados no projeto bem como sua nomenclatura no software e a descrição das suas funções.

Tabela 3. Blocos do Aspen plus® básicos usados para modelagem da gaseificação catalítica da biomassa.

Nome do bloco	Descrição e funções usuais	Bloco
Secador “RStoic”	Reduz a humidade do combustível [13].	
Decomposit or “RYield”	Decomposição da biomassa com base nas suas análises finais e próximas [14].	
Reator de tanque	Modela um reator de tanque de agitação contínua. Este modelo é útil quando a	

agitado contínuo. “RCSTR”	cinética da reação é conhecida. Também é preciso quando os sólidos, como o carvão participam nas reações. Muito usual para modelar os reatores do tipo leito fluidizado [15].	
Misturador “Mixer”	Possibilita misturar vários fluxos e introduzi-los posteriormente em algum bloco para reagir.	
Aquecedor/r esfriador “Exchange”	Aplicado para aquecer ou resfriar um determinado fluxo.	
PEM “Stack models”	Modelo do ACM de uma célula a combustível do tipo membrana permutadora de prótons (PEM).	
Humidificad or “Rad frac”	Modelos de absorvedores, strippers, humidificadores, etc. para fracionamento de 2 ou 3 fases em colunas únicas.	
Cyclone “Ssplit”	Remove partículas sólidas do fluxo do gás.	

3.3.1. Purificação do gás por membranas, equações e métodos

O sistema de purificação utilizado foi o por membrana, ela foi modelada aplicando uma

calculadora “C-1-MEM” em um bloco separador “SEP: MEMBRAN1”, figura 2. Em cujo os equacionamentos para o cálculo e as variáveis de convergência foram baseados nas propriedades físicas de membranas comerciais, apêndice A. De salientar que a membrana introduzida foi a 22B. Assim sendo, as equações aplicadas são apresentadas na tabela 4 [16].

Tabela 4. Sistema de equações, cálculos e variáveis para a membrana modelada da figura 2.

Variáveis definidas	Cálculos realizados	Sequência
Pressão (P)	Baseado nos resultados do fluxo SYNGAS-D.	Entrada
Fração molar		
XCH ₄	Baseado nos resultados do fluxo SYNGAS-D.	Entrada
XH ₂	Baseado nos resultados do fluxo SYNGAS-D.	Entrada
XCO ₂	Baseado nos resultados do fluxo SYNGAS-D.	Entrada
XCO	Baseado nos resultados do fluxo SYNGAS-D.	Entrada
XH ₂ O	Baseado nos resultados do fluxo SYNGAS-D.	Entrada
Permeabilidade (Fluxo em fração molar: H₂-PERM)		
RCH ₄	RCH ₄ =1-EXP (- (P*XCH ₄ /1115))	Saída
RH ₂	RH ₂ =1-EXP (- (P*XH ₂ /8.8))	Saída
RCO ₂	RCO ₂ =1-EXP (- (P*XCO ₂ /21.7))	Saída
RCO	RCO =1-EXP (- (P*XCO/305))	Saída

Fonte: baseado em [16].

3.3.2. Produção de energia na célula PEM, equações, métodos e cálculos

Para a análise da produção de energia por meio da célula a combustível, utilizou-se do modelo da *Aspen Custom Modeler* (ACM) de um bloco dinâmico de uma

membrana trocadora de prótons (PEM) do próprio Aspen Tech, figura 2, bloco B1. O bloco da PEM da Aspen Tech, foi aberta na ACM carregando-a da pasta de arquivos padrão disponibilizada pela empresa no momento da compra do software. Após carregado no ACM as propriedades físicas da célula podem ser alteradas. No referido trabalho elas não foram alteradas, tabela 5.

Tabela 5. Grandezas físico-químicas e fluxos da membrana trocadora de prótons (PEM) aplicada.

Grandeza	Valores	Unidades
Célula		
Tensão na célula	0,675	Volts
Tensão na “pilha”	101,26	Volts
Densidade média da corrente	1,1	A/cm2
Potência total	1025,31	kW
Conversão fracionada de hidrogênio	0,014	
Anodo		
Fluxo	400	kmol/hr
Temperatura	80	°C
Pressão	1,013	bar
H ₂	0,561	kmol/kmol
H ₂ O	0,429	kmol/kmol
Cátodo		
Fluxo	134,64	kmol/hr
Pressão	1,013	bar
Temperatura	80	°C

A exportação e utilização da membrana permutadora de prótons (PEM) do Aspen Custom modeler (ACM) para o Aspen Plus foi realizado usando da aba de simulação e seguindo os seguintes tópicos “Custom modeling >> Models >> PEMfuelcell”. Ao clicar na célula, conseguiu-se a exportação da referida na aba “package model for Aspen Plus / Hysys”.

Quando já enviado para o Aspen Plus, introduziu-se o modelo através da interfase “Customize>>Manage ACM models>>Stack models”. Uma vez no software o bloco pode ser introduzido no fluxograma. A seguir devido a corozão da membrana permutadora de prótons pela ação do H₂ e do O₂, foram introduzidos humidificadores no sistema “Rad frac”, que aumentam a vida útil da célula, figura 5.b.

Os humidificadores foram modelados para simularem o equilíbrio, com um total de 10 estágios e considerando uma taxa de destilação de 4281 kg/hr e 18075 kg/hr nos humidificadores 2 e 1, respectivamente.

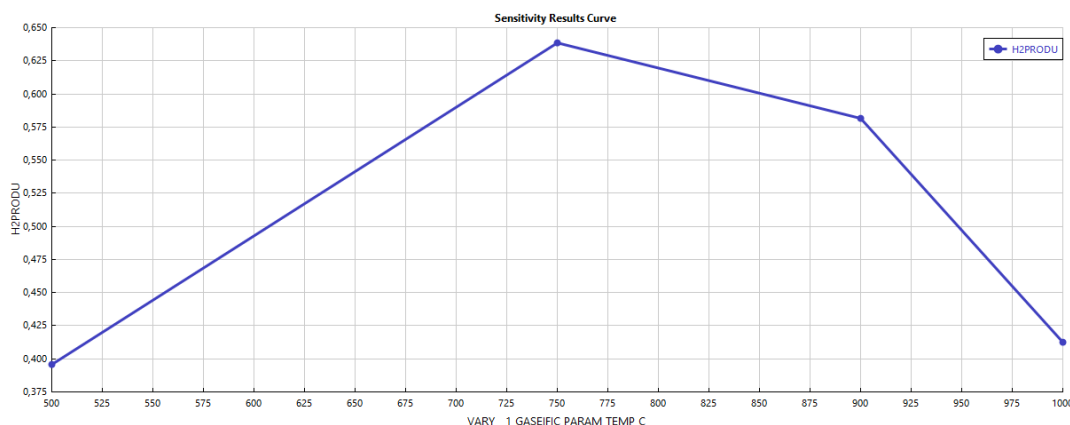


Figura 3. Curva de produção do hidrogênio v.s. temperatura no leito do reator (catalisador/biomassa = 1,25; Vapor/biomassa = 0,75).

Com isso o modelo proposto completa-se e ao fim ao cabo obtivemos um sistema de gaseificação catalítica complexa e que aplica membranas como sistema de separação do hidrogênio que por fim é aplicado em uma célula a combustível tipo membrana permutadora de prótons (PEM).

4. Resultados e discussões

Ao observarmos o processo da gaseificação catalítica da biomassa inferimos que além dos parâmetros geométricos do reator, aspectos como: a temperatura no mesmo, o fluxo de entrada da biomassa, catalisador e agente gaseificante (vapor) são variáveis implicadoras da qualidade do produto obtido. Sendo assim, análises de sensibilidade são necessárias para mapear o ponto ou pontos ótimos de operação do sistema proposto, tendo em vista a obtenção do syngas de alta qualidade.

Na figura 3, pode-se encher o comportamento da fração molar de H_2 , CH_4 , CO , CO_2 no syngas obtido, em virtude da variação de temperatura ($^{\circ}C$). Onde a concentração molar de H_2 no produto chega a 64,04% de volume a $900^{\circ}C$.

De forma semelhante, ao analisarmos a influência do fluxo mássico do catalisador em relação ao da biomassa (catalisador/biomassa), é possível obter o estado em que a relação possibilite a máxima percentagem de volume do hidrogênio no gás produzido, figura 4.

4.1. Validação do modelo

Ao observarmos a confiabilidade do modelo proposto através de uma análise comparativa de erros quadráticos médios, conclui-se que o modelo é bastante assertivo.

Na figura 5 foi possível comparar alguns trabalhos que avaliam a gaseificação catalítica da

biomassa, aplicando o mesmo catalisador (CaO). No trabalho de [17] onde são realizados experimentos laboratoriais, os resultados são relativamente próximos aos obtidos pelo modelo proposto. O erro quadrático médio é de 3,42 e se analisarmos apenas a composição de hidrogênio, o trabalho experimental obteve um total de 65,5% de volume de H_2 enquanto que o modelo proposto projetou um total de 64,4% de volume de H_2 . Isso considerando também a mesma temperatura e a mesma biomassa.

Se considerarmos o mesmo experimento [17], mas avaliarmos outros compostos os resultados já não são tão próximos como é o caso do CO e CO_2 .

As avaliações mostram também que o tipo de biomassa faz alterar em muito os resultados, além é claro da razão biomassa/vapor e biomassa/catalisador. No caso do trabalho de [18], onde é avaliado um sistema de fornecimento de energia para edifícios residenciais combinando gaseificação de biomassa torreficada e energia solar. Os valores são bastante diferentes com erros quadráticos médios de 17,86, assim como os experimentos de [19], onde os erros são de 12,45, figura 5.

5. Conclusões

Do trabalho proposto, conclui-se que o sistema de produção do hidrogênio pela gaseificação catalítica da biomassa é promissora, chegando a uma eficiência global do sistema de 34,80%, carecendo ainda de análises econômicas e do ciclo de vida do processo.

Com relação a aplicação de catalisadores, o modelo mostra-se bastante assertivo e tendo em conta que outros catalisadores possam entregar um syngas ainda mais puro após a gaseificação, a abordagem configura como a variável que irá aumentar a atratividade do processo. Uma vez que o processo que

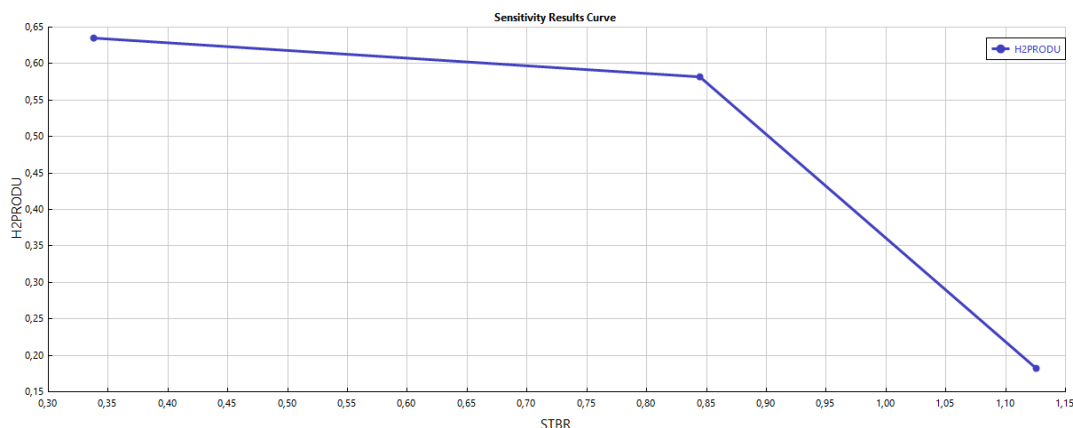


Figura 4. Curva do quantitativo do hidrogênio no syngas (% volume) v.s. razão vapor-biomassa (temperatura = 900°C).

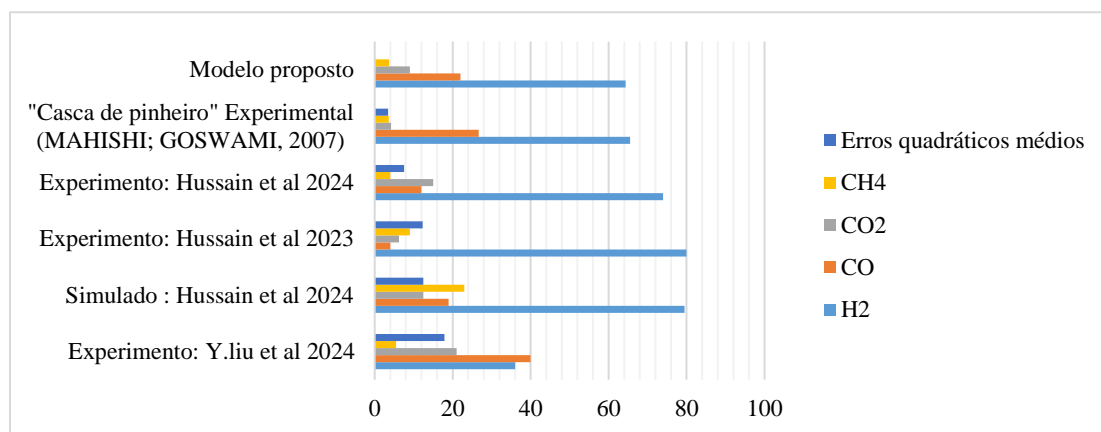


Figura 5. Validação dos resultados obtidos na modelagem da gaseificação catalítica pelo modelo proposto com outras referências. Fonte: Baseados em [17] [18] [19].

possuí mais gastos energéticos é o da limpeza ou purificação.

De forma semelhante o sistema de aplicação direta em uma célula a combustível do hidrogênio, no caso uma membrana permutadora de prótons, é impactante na medida que um dos principais problemas da aplicabilidade do hidrogênio é o armazenamento do mesmo em altas pressões. Sendo assim o sistema de armazena/geração de energia a partir de células a combustível mostra-se propício.

A modelagem cinética do processo apesar de ser complexa, mostrou ser capaz de entregar valores muito próximos aos experimentais, quando validados.

Agradecimentos

A UNIFEI pela oportunidade de acesar a seus laboratórios, equipamentos e espaços e a Fapemig pela bolsa do projeto.

6. Referências

- [1] C. Robert, A. Ravey, R. Perey, and D. Hissel, "Global warming potential and societal-governmental impacts of the hydrogen ecosystem in the transportation sector," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 66, pp. 55–65, May 2024, doi: 10.1016/j.ijhydene.2024.04.085.
- [2] J. Corton *et al.*, "Expanding the biomass resource: sustainable oil production via fast pyrolysis of low input high diversity biomass and the potential integration of thermochemical and biological conversion routes," *Appl Energy*, vol. 177, pp. 852–862, Sep. 2016, doi: 10.1016/j.apenergy.2016.05.088.
- [3] INTERNATIONAL ENERGY AGENCY, "Global Hydrogen Review 2023." Accessed:

- May 28, 2024. [Online]. Available: www.iea.org
- [4] M. S. Challiwala, G. Ibrahim, H. A. Choudhury, and N. O. Elbashir, "Scaling up the advanced dry reforming of methane (DRM) reactor system for multi-walled carbon nanotubes and syngas production: An experimental and modeling study," *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, vol. 197, Mar. 2024, doi: 10.1016/j.cep.2024.109693.
- [5] U. I. Amran, A. Ahmad, and M. R. Othman, "Kinetic based simulation of methane steam reforming and water gas shift for hydrogen production using aspen plus," *Chem Eng Trans*, vol. 56, pp. 1681–1686, 2017, doi: 10.3303/CET1756281.
- [6] Q. Dang, X. Zhang, Y. Zhou, and X. Jia, "Prediction and optimization of syngas production from a kinetic-based biomass gasification process model," *Fuel Processing Technology*, vol. 212, p. 106604, Feb. 2021, doi: 10.1016/j.fuproc.2020.106604.
- [7] K. Rabea, S. Michailos, M. Akram, K. J. Hughes, D. Ingham, and M. Pourkashanian, "An improved kinetic modelling of woody biomass gasification in a downdraft reactor based on the pyrolysis gas evolution," *Energy Convers Manag*, vol. 258, p. 115495, Apr. 2022, doi: 10.1016/j.enconman.2022.115495.
- [8] M. Puig-Gamero, D. T. Pio, L. A. C. Tarelho, P. Sánchez, and L. Sanchez-Silva, "Simulation of biomass gasification in bubbling fluidized bed reactor using aspen plus®," *Energy Convers Manag*, vol. 235, May 2021, doi: 10.1016/j.enconman.2021.113981.
- [9] A. Sharma and R. Nath, "Chemical Kinetic Modeling of Air-Steam Gasification of Eucalyptus Wood Sawdust for H₂-Rich Syngas Production," *ACS Omega*, vol. 8, no. 14, pp. 13396–13409, Apr. 2023, doi: 10.1021/acsomega.3c00908.
- [10] B. Hejazi and J. R. Grace, "Simulation of tar-free biomass syngas enhancement in a calcium looping operation using Aspen Plus built-in fluidized bed model," *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 99, Aug. 2020, doi: 10.1016/j.ijggc.2020.103096.
- [11] Aspen Technology, "Aspen Plus," 2022, *Aspen plus*: 11.
- [12] C. A. Díaz González, D. C. de Oliveira, D. M. Yepes, L. E. Pacheco, and E. E. Silva, "Aspen Plus model of a downdraft gasifier for lignocellulosic biomass adjusted by Principal Component Analysis," *Energy Convers Manag*, vol. 296, Nov. 2023, doi: 10.1016/j.enconman.2023.117570.
- [13] N. Ramzan, A. Ashraf, S. Naveed, and A. Malik, "Simulation of hybrid biomass gasification using Aspen plus: A comparative performance analysis for food, municipal solid and poultry waste," *Biomass Bioenergy*, vol. 35, no. 9, pp. 3962–3969, Oct. 2011, doi: 10.1016/j.biombioe.2011.06.005.
- [14] S. A. Salaudeen, B. Acharya, M. Heidari, P. Arku, and A. Dutta, "Numerical investigation of CO₂ valorization via the steam gasification of biomass for producing syngas with flexible H₂ to CO ratio," *Journal of CO₂ Utilization*, vol. 27, pp. 32–41, Oct. 2018, doi: 10.1016/j.jcou.2018.07.003.
- [15] M. B. Nikoo and N. Mahinpey, "Simulation of biomass gasification in fluidized bed reactor using ASPEN PLUS," *Biomass Bioenergy*, vol. 32, no. 12, pp. 1245–1254, Dec. 2008, doi: 10.1016/j.biombioe.2008.02.020.
- [16] T. A. Adams, *Learn Aspen Plus in 24 Hours, Second Edition*.
- [17] M. MAHISHI and D. GOSWAMI, "An experimental study of hydrogen production by gasification of biomass in the presence of a CO₂/CO₂ sorbent," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 32, no. 14, pp. 2803–2808, Sep. 2007, doi: 10.1016/j.ijhydene.2007.03.030.
- [18] Y. Liu, D. Bi, M. Yin, K. Zhang, H. Liu, and S. Liu, "Modeling and exergy-economy analysis of residential building energy supply systems combining torrefied biomass gasification and solar energy," *Thermal Science and Engineering Progress*, vol. 50, p. 102584, May 2024, doi: 10.1016/j.tsep.2024.102584.
- [19] M. Hussain, H. Zabiri, F. Uddin, S. Yusup, & Lemma, and D. Tufa, "Pilot-scale biomass gasification system for hydrogen production from palm kernel shell (part A): steady-state simulation", doi: 10.1007/s13399-021-01474-1/Published.