



JOÃO DIOGO DE BASTOS BARBEIRO

Licenciado em Ciências de Engenharia Mecânica

**ESTUDO CFD PARA OBTENÇÃO DE LINHAS
ORIENTADORAS PARA O RETROFITTING
DE QUEIMADORES DE GÁS NATURAL PARA
MISTURAS COM HIDROGÉNIO**

MESTRADO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Universidade NOVA de Lisboa

Dezembro, 2023



ESTUDO CFD PARA OBTENÇÃO DE LINHAS ORIENTADORAS PARA O RETROFITTING DE QUEIMADORES DE GÁS NATURAL PARA MISTURAS COM HIDROGÉNIO

JOÃO DIOGO DE BASTOS BARBEIRO

Licenciado em Ciências de Engenharia Mecânica

Orientador: Daniel Cardoso Vaz

Professor Auxiliar, Nova School of Science & Technology FCT/NOVA

Coorientador: Jorge Emanuel Pereira Navalho

Professor Auxiliar, Nova School of Science & Technology FCT/NOVA

Júri

Presidente: José Manuel Paixão Conde

Professor Auxiliar, Nova School of Science & Technology FCT/NOVA

Vogais: Moisés Gonçalves de Brito

Professor Auxiliar, Nova School of Science & Technology FCT/NOVA

Miguel Borges Lança

Professor Adjunto Convidado, Escola Superior Tecnologia Instituto Politécnico de Setúbal

Daniel Cardoso Vaz

Professor Auxiliar, Nova School of Science & Technology FCT/NOVA

Estudo CFD para obtenção de linhas orientadoras para o retrofitting de queimadores de gás natural para misturas com hidrogénio

Copyright © João Diogo de Bastos Barbeiro, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade NOVA de Lisboa.

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade NOVA de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

À minha família,

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer ao meu orientador, Professor Daniel Vaz pelos contributos, disponibilidade e sessões de mentoria. De seguida, expresso um agradecimento ao meu coorientador, Professor Jorge Navalho pelo apoio no decorrer desta dissertação.

À FCT, ao DEMI e em particular ao NMFTA deixo um agradecimento por fornecerem as condições para poder realizar este trabalho.

À minha mãe e ao meu pai, agradeço toda ajuda e dedicação para garantir que nunca me faltou nada.

À minha irmã um obrigado pela presença e paciência.

Ao avô Chico, avó Jú, e avó Helena obrigado por sempre acreditarem em mim.

Aos meus amigos e colegas Daniel Simões, Mafalda Palma, Miguel Matos, João Filipe, Pedro Tavares e Catarina Matos, um grande obrigado pela ajuda, pelas horas de convívios e trabalhos fosse online ou presencial, em covid ou em Madrid. Obrigado por me acompanharem neste percurso académico.

À Carolina Costa agradeço a ajuda e apoio constante neste desafio final de curso.

Por fim, um agradecimento aos meus colegas de curso e às amizades que se formaram dentro e fora da faculdade durante este percurso académico. Por fim, um grande agradecimento à equipa do FSFCT pelas amizades, pelo apoio e pelas aprendizagens e crescimento que proporcionaram.

”

*«Try and leave this world a little better than you
found it.»*

— **Robert Baden-Powell**

RESUMO

A dissertação contempla o estudo numérico do queimador *Cambridge Stratified Swirl Burner*, através da ferramenta *ANSYS FLUENT 18.2*, com o objetivo de obter linhas orientadoras para o *retrofitting* deste equipamento, da queima de CH_4 puro para a queima de H_2 ou misturas. Este queimador tem pré-mistura e mecanismos de estabilização de chama do tipo bluff-body e swirl, mas não tem câmara de combustão.

Dado ser um queimador aberto, realizou-se um estudo comparativo com a teoria de jatos livres. Realizou-se, também, um estudo de independência de malha. A queima de CH_4 puro ocorreu com sucesso, e os resultados foram validados com base em resultados da literatura. A queima de misturas de H_2 e CH_4 foi obtida com sucesso para percentagens de H_2 a oscilar entre os 2% e os 80%. Estudou-se, por último, o impacto da variação da velocidade de injeção de misturas no comportamento da chama.

Concluiu-se que a adição de H_2 aumenta o tamanho e temperatura da chama e que a fração mássica máxima de CO_2 apenas se reduz quando é adicionado mais de 40% de H_2 . Concluiu-se que a variação da velocidade axial não é suficiente para igualar as propriedades da chama de misturas de hidrogénio à original de CH_4 .

Palavras-chave: Queimador, Pré-mistura, Combustão, Hidrogénio, Metano, Simulações Numéricas

ABSTRACT

This dissertation looked at the numerical study of the Cambridge Stratified Swirl Burner using the ANSYS FLUENT 18.2 software, searching for guidelines for the retrofitting of this equipment, from the burning of pure CH_4 to the burning of H_2 . This is an open burner with premixing and flame stabilization mechanisms through bluff-body geometry and swirl.

As it is an open burner, a comparative study was carried out with the free jet theory. An independence mesh study was carried out. The CH_4 pure combustion was achieved with success, and the results were validated with the literature. The burning of mixtures of H_2 and CH_4 was successfully achieved with percentages of H_2 ranging from 2% to 80%. It was studied the impact on the flame behavior with the variation of the injection speed of the mixtures.

It was concluded on this study, that the addition of H_2 increases the size and temperature of the flame and that the maximum mass fraction of CO_2 is only reduced when more than 40% of H_2 is added. It was concluded that varying the axial velocity is not enough to match the flame properties of mixtures to the original CH_4 flame.

Keywords: Burner, Premixing, Combustion, Hydrogen, Methane, Numerical Simulations

ÍNDICE

Índice de Figuras	x
Índice de Tabelas	xvi
Siglas	xviii
Símbolos	xix
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Revisão bibliográfica	6
1.2.1 Tipos de queimadores de combustíveis gasosos	6
1.2.2 <i>Retrofitting</i> de queimadores de CH ₄ para a queima de H ₂	9
1.2.3 Importância do uso de simulações numérica, <i>Computational Fluid Dynamics</i> (CFD)	14
1.2.4 Modelos de interação química-turbulência	18
1.2.5 Escolha do queimador a estudar	18
1.3 Contribuição da dissertação (Objetivos)	22
2 Caso de Estudo	25
2.1 Domínio computacional	25
2.1.1 Casos tridimensionais	26
2.1.2 Casos bidimensionais	28
2.2 Condições de fronteira	29
2.2.1 Casos tridimensionais	29
2.2.2 Casos bidimensionais	31
2.2.3 Propriedades das condições de fronteira de entrada de fluido	32
2.2.4 Comparação com teoria de jato livre	35
2.3 Modelos de turbulência	36
2.4 Estudo de independência de malha	36

2.5	Parâmetros de qualidade da malha escolhida	36
2.6	Modelos de reação química	37
2.7	Modelos de combustão	38
2.8	Modelos de radiação	43
2.9	Métodos de cálculo para a solução	44
3	Apresentação e Discussão de Resultados	47
3.1	Comparação da condição de fronteira <i>pressure inlet</i> e <i>pressure outlet</i> para a lateral do domínio computacional	47
3.2	Estudo comparativo entre os modelos $K - \omega$, $K - \epsilon$ e $K - \epsilon$ <i>Realizable</i>	50
3.3	Estudo de independência de malha	53
3.4	Parâmetros de qualidade da malha escolhida	64
3.5	Validação da dimensão do domínio computacional tendo por base a teoria de jato livre	71
3.6	Estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura <i>Zimont</i> e <i>Peters</i>	73
3.7	Caso CH ₄ puro	78
3.7.1	Campos de temperatura	78
3.7.2	Campos de velocidade	80
3.7.3	Campos das taxas de deformação e formação de produtos de reação	83
3.7.4	Comparação e validação de resultados	84
3.8	Casos misturas de CH ₄ e H ₂	92
3.8.1	Resultados para a temperatura	93
3.8.2	Resultados para a fração mássica de radicais livres: H, O e OH	97
3.8.3	Fração mássica de CO ₂	102
3.9	Caso H ₂ puro	105
3.10	Linhas orientadoras para o <i>retrofitting</i> para o caso de 80 % H ₂	106
3.10.1	Resultados de temperatura	107
3.10.2	Resultados para a fração mássica de radicais livres: H, O e OH	108
3.10.3	Fração mássica de CO ₂	113
3.11	Comparação dos casos, 0 %, 20 % e 40 % de H ₂ com os resultados numéricos de Rahimi et al., 2023	116
4	Conclusão	123
4.1	Conclusão	123
4.2	Sugestões para trabalho futuro	125
	Bibliografia	127

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1	Consumo de gás natural em Portugal entre 2008 e 2021.	2
1.2	Percentagem do consumo de gás natural consumido no setor da "Eletricidade, gás,vapor, água quente e fria e ar frio"em Portugal entre 2008 e 2021.	3
1.3	Queimador com pré-mistura. (Baukal, 2000).	6
1.4	Queimador sem pré-mistura. (Baukal, 2000).	7
1.5	Queimador com pré-mistura parcial. (Baukal, 2000).	7
1.6	Queimador com <i>swirl</i> . (Marragou et al., 2022).	8
1.7	Queimador do tipo <i>bluff-body</i> . (Tong et al., 2017).	9
1.8	Chamas de hidrogénio com adição percentual de tolueno, com imagem de controlo à esquerda com 100% de gás natural. Representação de meia chama à esquerda com estabilização a 64 mm e à direita a 50 mm. (Gee et al., 2022).	10
1.9	Queima gás natural com 10% de hidrogénio e adição percentual de tolueno, com imagem de controlo à esquerda com 100% de gás natural.Representação meia chama à esquerda com estabilização a 64 mm e à direita a 50 mm. (Gee et al., 2022).	11
1.10	Influência da temperatura na tensão limite de elasticidade de um aço com entalhe. (Lancaster, 1999).	12
1.11	Geometria do queimador <i>Cambridge Stratified Swirl Burner</i> . (A) Entrada axial para <i>inner slot</i> ; (B) Entrada axial para <i>outer slot</i> ; (C) Entrada com <i>swirl</i> para o <i>outer slot</i> ; (D) Colarinho de fixação; (E) Tubo externo; (F) Tubo do meio; (G) Tubo interior; (H) Restritores de fluxo; (I) Colar gerador de <i>swirl</i> ; (J) Tampa cerâmica; (k) Malha metálica; (L) Malha em favos de abelha; (M) Discos perfurados; Todas as dimensões estão em milímetros e foram omitidas as conexões de fluxo para maior clareza. (Sweeney et al., 2012).	21
1.12	Vista de topo do queimador. Todas as dimensões estão em milímetros. R significa raio. (Rahimi et al., 2023.)	21
2.1	Resultado numérico de Rahimi et al., 2023 para o campos de temperatura para o caso sem <i>swirl</i> . (Rahimi et al., 2023).	26

2.2	Domínio computacional utilizado na presente dissertação para os casos tridimensionais.	27
2.3	Vista lateral do domínio computacional para os casos tridimensionais.	27
2.4	Vista de topo do domínio computacional para os casos tridimensionais.	28
2.5	Representação do domínio computacional para os casos bidimensionais. Em milímetros.	28
2.6	a) Paredes do queimador destacadas a vermelho; b) Vista de baixo do queimador, destaque para as paredes do queimador a vermelho.	29
2.7	Face de saída do domínio computacional, <i>outlet</i> , destacada a vermelho, onde foi aplicado a condição de <i>pressure outlet</i>	30
2.8	Condição de <i>pressure inlet</i> aplicada nas faces laterais do domínio computacional após o queimador destacadas a vermelho.	30
2.9	<i>Inlet coflow</i> destacado a vermelho. <i>Inlet outer slot</i> destacado a azul. <i>Inlet inner slot</i> a verde.	31
2.10	Localização e definição das condições de fronteira do domínio computacional para os casos bidimensionais.	31
2.11	Linhas de corrente para um jato circular turbulento livre. (Vaz, 2007).	35
3.1	Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional truncado a 30 mm.	48
3.2	Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional para a comparação de condições de fronteira.	49
3.3	Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional truncada a 30 mm.	51
3.4	Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional para a comparação de modelos de turbulência.	52
3.5	Localização do ponto de estagnação em função do número de nós para os casos bidimensionais.	56
3.6	Localização do ponto de estagnação em função do número de nós para os casos tridimensionais.	57
3.7	Velocidade axial sobre a linha central do domínio coincidente com o eixo de revolução.	58
3.8	Gráfico da localização do ponto onde a velocidade axial é metade da velocidade máxima de injeção em função do número de nós para os casos bidimensionais.	59
3.9	Gráfico da localização do ponto onde a velocidade axial é metade da velocidade máxima de injeção em função do número de nós para os casos tridimensionais.	60
3.10	Gráfico do ângulo entre a cota, <i>z</i> (de diferentes linhas radiais) e a localização de pontos (sobre estas linhas radiais) onde a fração mássica de CH ₄ é metade do valor máximo, para os casos bidimensionais.	61

3.11	Gráfico do ângulo entre a cota, z (de diferentes linhas radiais) e a localização de pontos (sobre estas linhas radiais) onde a fração mássica de CH_4 é metade do valor máximo, para os casos tridimensionais.	62
3.12	Histograma do parâmetro ortogonalidade dos elementos.	65
3.13	Histograma do parâmetro distorção dos elementos.	65
3.14	Histograma do parâmetro rácio de crescimento dos elementos.	66
3.15	Linhas utilizadas para definir o topo do domínio computacional.	67
3.16	Vista de topo da zona central da malha escolhida.	68
3.17	Vista de topo da malha escolhida.	68
3.18	Vista lateral da malha escolhida.	69
3.19	Interior do domínio computacional na zona de saída dos <i>inlets</i> . A figura não está a escala.	69
3.20	Vista em corte com destaque para os <i>inlets inner slot</i> e <i>outer slot</i>	70
3.21	Vista em corte com destaque para a zona inicial do domínio.	70
3.22	Vista em corte com destaque para a zona final do domínio.	71
3.23	Trajetórias de partículas virtuais para o caso sem combustão coloridas pela magnitude de velocidade (m/s).	72
3.24	Trajetórias de partículas virtuais para o caso com combustão de CH_4 puro coloridas pela magnitude de velocidade (m/s).	72
3.25	Temperatura sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.	74
3.26	Velocidade axial sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.	75
3.27	Magnitude de velocidade sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.	76
3.28	Fração mássica de CO_2 sobre uma linha radial entre 0 e 25 mm a 10 mm da saída do queimador.	77
3.29	Campo de temperaturas, em Kelvin, para o caso de combustão de CH_4 puro.	78
3.30	Campo de temperaturas, em Kelvin, truncada a partir de 1600 K para o caso de combustão de CH_4 puro.	79
3.31	Campo da magnitude da velocidade, em m/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.	80
3.32	Campo de velocidade axial, em m/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.	81
3.33	Campo de velocidade radial, em m/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.	81
3.34	Campo de velocidade tangencial, em m/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.	82
3.35	Trajetórias de partículas virtuais coloridas pela temperatura, em Kelvin, para o caso de combustão de CH_4 puro.	82
3.36	Trajetórias de partículas virtuais coloridas pela temperatura, em Kelvin, com destaque para a saída do queimador para o caso de combustão de CH_4 puro.	83
3.37	Campo da taxa de formação dos produtos de reação, 1/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.	83
3.38	Campo da taxa de deformação, 1/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.	84

3.39	Gráfico de temperatura sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	85
3.40	Gráfico de temperatura sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	85
3.41	Gráfico de temperatura sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	86
3.42	Gráfico de velocidade axial sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	87
3.43	Gráfico de velocidade axial sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	87
3.44	Gráfico de velocidade axial sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	88
3.45	Gráfico de velocidade tangencial sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	89
3.46	Gráfico de velocidade tangencial sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	90
3.47	Gráfico de velocidade tangencial sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	90
3.48	Gráfico da fração mássica de CO ₂ sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	91
3.49	Gráfico da fração mássica de CO ₂ sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	91
3.50	Gráfico da fração mássica de CO ₂ sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH ₄ puro.	92
3.51	Campos de temperatura, em Kelvin, sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio.	94
3.52	Campos de temperatura, em Kelvin, truncado a valores inferiores a 1600 K sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio.	94
3.53	Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.	96
3.54	Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 150 mm da saída do queimador.	96
3.55	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.	97
3.56	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador.	98
3.57	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.	98
3.58	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.	99

3.59	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador.	99
3.60	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.	100
3.61	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.	100
3.62	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador.	101
3.63	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.	101
3.64	Gráfico da fração mássica de CO ₂ em função do raio de uma linha radial a 250 mm da saída do queimador.	103
3.65	Gráfico da fração mássica de CO ₂ em função do raio de uma linha radial a 500 mm da saída do queimador.	104
3.66	Gráfico da fração mássica de CO ₂ sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.	104
3.67	Localização de temperatura, em Kelvin, sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.	105
3.68	Campos de temperatura, em Kelvin, sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional, truncado a partir de 1600 K.	106
3.69	Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	107
3.70	Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 150 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	108
3.71	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	109
3.72	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	109
3.73	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	110
3.74	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	110
3.75	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	111
3.76	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	111
3.77	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	112

3.78	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i> .	112
3.79	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i> .	113
3.80	Gráfico da fração mássica de CO ₂ em função do raio de uma linha radial a 250 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i> .	114
3.81	Gráfico da fração mássica de CO ₂ em função do raio de uma linha radial a 500 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i> .	114
3.82	Gráfico da fração mássica de CO ₂ sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i> .	115
3.83	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	117
3.84	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	117
3.85	Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	118
3.86	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	118
3.87	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	119
3.88	Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	119
3.89	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	120
3.90	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	120
3.91	Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.	121

ÍNDICE DE TABELAS

1.1	Potência instalada nas centrais elétricas Portugal de 2008 a 2014. Adaptado de DGEG, 2022.	4
1.2	Potência instalada nas centrais elétricas Portugal de 2015 a 2021. Adaptado de DGEG, 2022.	5
2.1	Parâmetros para modelação da turbulência para os <i>inlets</i>	33
2.2	Parâmetros para os métodos de cálculo.	45
2.3	Fatores de relaxação para o método de cálculo.	46
2.4	Resumo de parâmetros e modelos definidos para a construção do caso numérico.	46
3.1	Resumo dos resultados do estudo comparativo das condições de fronteira para a lateral do domínio computacional.	50
3.2	Resumo dos resultados do estudo comparativo dos diferentes modelos de turbulência.	53
3.3	Casos para o estudo de independência de malha.	54
3.4	Resumo dos resultados do primeiro parâmetro do estudo de independência de malha.	57
3.5	Resumo dos resultados do segundo parâmetro do estudo de independência de malha.	60
3.6	Resumo dos resultados do terceiro parâmetro do estudo de independência de malha.	63
3.7	Comparação entre os casos bidimensionais e tridimensionais.	63
3.8	Resumo dos resultados para o primeiro parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura <i>Zimont</i> e <i>Peters</i>	74
3.9	Resumo dos resultados para o segundo parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura <i>Zimont</i> e <i>Peters</i>	75
3.10	Resumo dos resultados terceiro ao sexto parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura <i>Zimont</i> e <i>Peters</i>	77

3.11	Resumo dos resultados para o sétimo parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura <i>Zimont</i> e <i>Peters</i>	78
3.12	Fração mássica máxima de CO ₂ sobre o eixo de revolução do domínio computacional.	105
3.13	Fração mássica máxima de CO ₂ sobre o eixo de revolução do domínio computacional para o estudo comparativo de variação de velocidades no <i>inner slot</i>	115

SIGLAS

AFR	<i>Air-to-fuel ratio (pp. 33, 34)</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics (pp. viii, 13–15, 23, 126)</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulations (p. 15)</i>
DO	<i>Discrete Ordinates (p. 18)</i>
DTRM	<i>Discrete Transfer Radiation Method (pp. 18, 43)</i>
EDC	<i>Eddy Dissipation Concept (pp. 18, 39, 86, 89, 95, 122, 125, 126)</i>
FGM	<i>Flamelet Generated Manifold (p. 42)</i>
LES	<i>Large Eddy Simulations (pp. 15, 22, 41)</i>
MC	<i>Monte-Carlo (pp. 18, 43)</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes (pp. 15, 41, 44)</i>
RSM	<i>Reynolds Strees Model (p. 17)</i>
S2S	<i>Surface to Surface (pp. 18, 43)</i>

SÍMBOLOS

α	Coeficiente de absorção (p. 43)
αL	Espessura ótica do domínio (p. 43)
D	Diâmetro (p. 39)
D_{exterior}	Diâmetro exterior (p. 32)
D_H	Diâmetro hidráulico (pp. 32, 33)
D_{interior}	Diâmetro interior (p. 32)
ϕ	Razão de equivalência (pp. 32–34, 126)
f	Mixture fraction (p. 34)
I	Intensidade turbulenta (pp. 32, 33)
L	Comprimento característico (pp. 43, 44)
M_i	Massa molar da espécie química i (p. 33)
μ	Viscosidade dinâmica (pp. 32, 39)
n_i	Número de moles da espécie química i (pp. 32–34)
P	Pressão (p. 34)
ρ	Massa volúmica (pp. 32, 39)
R	Constante dos gases ideais (p. 34)
r	Raio (p. 35)
Re	Número de Reynolds (pp. 32, 39)
T	Temperatura (p. 34)

V	Velocidade (pp. 32, 33, 39)
V_0	Volume (p. 34)
x_i	Fração molar da espécie química i (pp. 32, 34)
Y_i	Fração volúmica da espécie química i (p. 34)

INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

Em 2023, na Era da tecnologia digital, Portugal, a Europa e os restantes países do mundo dependem ainda, parcialmente, para a sua indústria e serviços, do petróleo e dos seus derivados. Contudo, desde os finais do século XIX, o mundo tem se preocupado com as alterações climáticas, a camada de ozono e os gases poluentes que cada país emite, tendo sido redigido em 2015 o Acordo de Paris com o objetivo de alcançar a descarbonização das economias mundiais, e ainda, limitar em 2 °C, o aumento da temperatura média global, tendo por base os níveis pré-industriais. (Nations, 2015). A emissão de gases com efeito de estufa tem provocado alterações climáticas que se começam a refletir, por exemplo, em Portugal, em períodos de seca extrema cada vez mais frequentes e duradouros, tal como descrito em «Diário da República Despacho n 2768-A», 2022. Deste modo, Portugal criou adicionalmente um plano nacional com metas ambientais e energéticas até 2030 (DR, 2020a).

Tendo em vista a redução das emissões de gases poluentes e a descarbonização das economias têm sido estudadas várias alternativas aos combustíveis fósseis. Particularmente nas indústrias, têm sido procuradas alternativas à queima destes combustíveis, transitando para combustíveis "verdes" tais como a biomassa, o biogás e o hidrogénio. Vários estudos têm sido efetuados no sentido de atingir a descarbonização e reduzir as emissões de gases poluentes e, segundo Burbano et al., 2008, a adição de 15% de hidrogénio em queimas de gás natural permitirá a redução em 110 ppm das emissões de CO quando comparada à queima de apenas CH₄. Resultados como este têm motivado a comunidade mundial a aprofundar o estudo da queima de hidrogénio.

É de importante relevância que o hidrogénio consumido seja produzido através da eletrólise da água. Esta, por sua vez, deve ser obtida através de energia gerada por fontes renováveis, designando-se assim de hidrogénio verde. Este têm-se apresentado como uma solução plausível de ser implementada na substituição total ou parcial do gás natural em queimadores industriais, como estudado por Mayrhofer et al., 2021. Esta solução de hidrogénio verde permitirá que num futuro o processo completo de geração

de calor através de queimadores industriais, desprezando o ciclo de vida e produção dos equipamentos, não emita gases que aumentem o efeito de estufa.

À data deste documento, a Direção Geral de Energia e Geologia contém estatísticas sobre o consumo de gás natural em Portugal desde 2008 a 2021, sendo os resultados de 2018 a 2021 ainda considerados como provisórios (DGEG, 2023).

Na Figura 1.1 é apresentado um gráfico dos consumos de gás natural em Portugal, bem como os consumos de gás natural no setor "Eletricidade, gás, vapor, água quente e fria e ar frio". Na Figura 1.2 é apresentado um gráfico com a percentagem de gás natural consumido pelo setor "Eletricidade, gás, vapor, água quente e fria e ar frio" em Portugal entre os anos de 2008 e 2021.

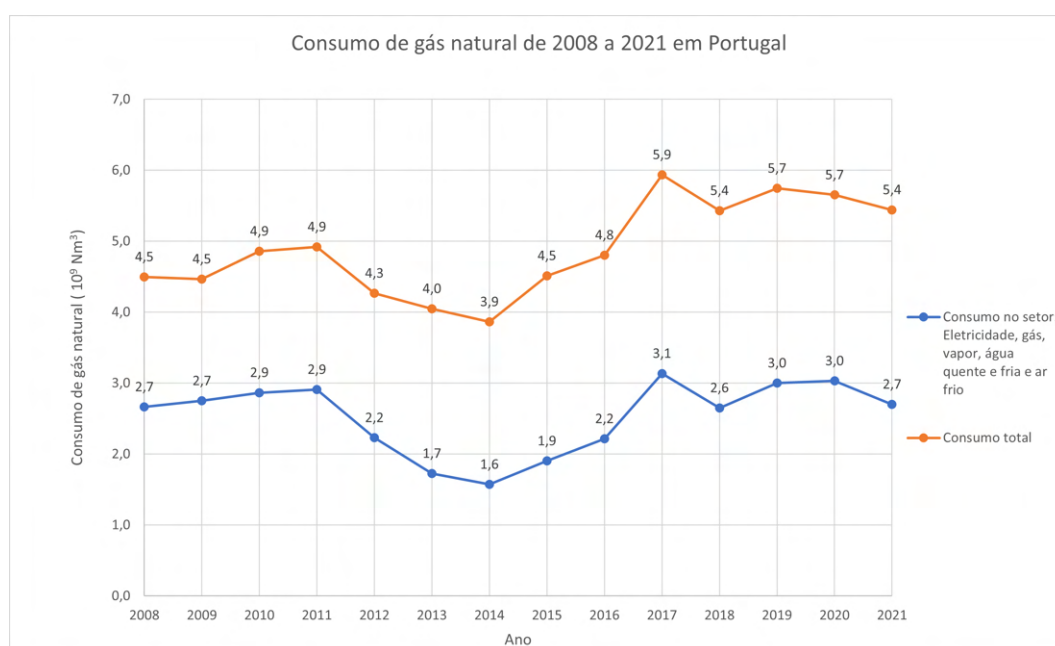


Figura 1.1: Consumo de gás natural em Portugal entre 2008 e 2021.

Dos gráficos conclui-se que mais de 40% do gás natural consumido em Portugal é consumido no setor da produção de energia. Isto revela que esta deverá ser uma das áreas alvo de investigação futura, no sentido de converter os queimadores a gás natural existentes para queimadores de energias limpas como o hidrogénio verde.

Na Tabela 1.1 é apresentada a potência instalada nas centrais produtoras de eletricidade em Portugal entre 2008 e 2014 e na Tabela 1.2 é apresentada a potência instalada nas centrais produtoras de eletricidade em Portugal entre 2015 e 2021 (DGEG, 2022). Conclui-se que, de 2008 até 2021, reduziu-se em percentagem, a potência instalada em centrais não renováveis de 48,7% para 30% devido ao fecho das centrais a carvão, como por exemplo em Sines. A potência instalada em centrais a gás natural aumentou de 17,3% para 22,9%. As centrais produtoras de energia a partir de fontes renováveis viram a percentagem de capacidade de produção aumentar de 51,3% para 70% no mesmo período. Não obstante, apesar de Portugal já ter tido dias excepcionais, em que as condições atmosféricas permitiram que

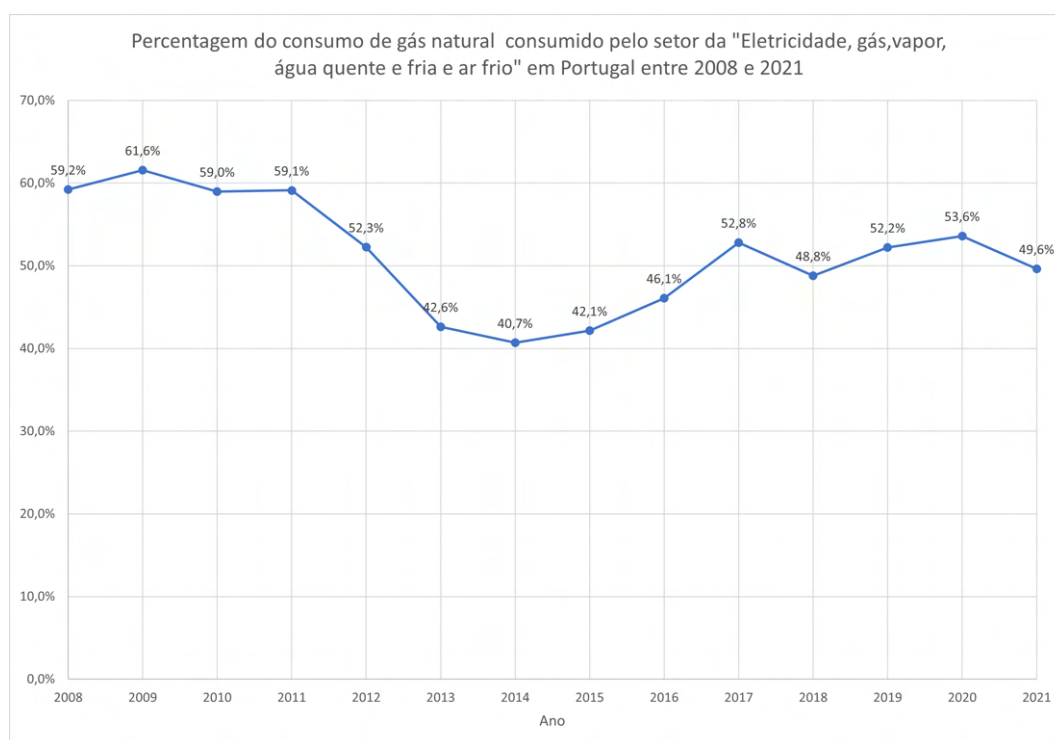


Figura 1.2: Percentagem do consumo de gás natural consumido no setor da "Eletricidade, gás,vapor, água quente e fria e ar frio"em Portugal entre 2008 e 2021.

o país fosse autossuficiente em energias a partir de fontes renováveis, o mesmo não é constante ao longo do ano. No verão, o risco de seca extrema não permite a produção a partir de energia hídrica com a mesma capacidade que no inverno e, num dia sem vento, é limitada a produção de energia eólica. No inverno a falta de sol devido a dias encobertos ou à falta de vento levam novamente à impossibilidade da produção de energia fotovoltaica e eólica respetivamente. A produção de energia pressupõe que o que seja produzido iguale o consumo instantâneo, sendo por isso fundamental que a produção de energia seja de fácil ajuste às necessidades da rede. Sendo as três principais fontes de energia renováveis em Portugal, hídrica, fotovoltaica e eólica, altamente dependentes das condições atmosféricas, é difícil ajustar rapidamente as condições de produção às necessidades de consumo. Contrariamente, uma central a gás natural, entra em funcionamento mais rapidamente que uma central hídrica que, por sua vez, pode estar também sujeita as condições da albufeira. As centrais a gás natural apresentam-se em grande vantagem por utilizarem uma fonte de energia facilmente armazenável, gás natural, através da rede pública ou através de tanques, garantido uma maior disponibilidade para mudar o regime de funcionamento quando necessário.

O hidrogénio, por permitir o seu armazenamento sobre o estado liquefeito ou gasoso, torna-se numa fonte de energia (química) sempre disponível, tal como o gás natural. Deste modo, é garantido que não ocorrem problemas de intermitência de produção devido às condições atmosféricas que limitam as outras fontes de energias renováveis.

Tabela 1.1: Potência instalada nas centrais elétricas Portugal de 2008 a 2014. Adaptado de DGEG, 2022.

Total	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014
Unidade: MW	16 477	18 109	19 631	20 630	20 425	19 625	19 679
* Não Renovável	8 018	9 005	9 948	10 006	9 372	8 312	8 001
%	48,70%	49,70%	50,70%	48,50%	45,90%	42,40%	40,70%
Gás natural	2 854	3 804	4 714	4 758	4 957	4 986	5 023
%	17,30%	21,00%	24,00%	23,10%	24,30%	25,40%	25,50%
* Renovável	8 459	9 104	9 683	10 624	11 053	11 313	11 678
%	51,30%	50,30%	49,30%	51,50%	54,10%	57,60%	59,30%
Hídrica	4 857	4 882	4 896	5 332	5 537	5 535	5 570
%	29,50%	27,00%	24,90%	25,80%	27,10%	28,20%	28,30%
Eólica	3 058	3 564	3 914	4 378	4 529	4 731	4 953
%	18,60%	19,70%	19,90%	21,20%	22,20%	24,10%	25,20%
Fotovoltaica	62	110	134	174	244	299	419
%	0,40%	0,60%	0,70%	0,80%	1,20%	1,50%	2,10%
Biomassa (1)	437	495	679	661	651	651	625
%	2,70%	2,70%	3,50%	3,20%	3,20%	3,30%	3,20%
Biogás	16	24	31	50	62	67	81
%	0,10%	0,10%	0,20%	0,20%	0,30%	0,30%	0,40%
Geotermia	29	29	29	29	29	29	29
%	0,20%	0,20%	0,10%	0,10%	0,10%	0,10%	0,10%
Ondas	0	0	0	0	1	1	1
%	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%	0,01%	0,01%	0,01

(1) inclui resíduos vegetais/florestais, licores sulfúricos e resíduos sólidos urbanos

* valor atualizado em outubro 2022

Apesar das claras vantagens que o hidrogénio apresenta em termos ambientais, energéticos, e da facilidade de obtenção por eletrólise da água, recurso abundante no planeta, muitos *stakeholder* e empresas mostram-se relutantes à conversão dos seus queimadores para a queima de hidrogénio. Isto deve-se principalmente ao receio da ocorrência de fenómenos de fragilização dos materiais pela presença de hidrogénio, conhecido como *hydrogen embrittlement*. Segundo Wu et al., 2022, vários estudos têm sido conduzidos nesta matéria, inclusive estudos sobre a influência que a introdução de hidrogénio terá na vida útil das redes de distribuição de gás natural, maioritariamente constituídas por materiais metálicos. Apesar de Portugal, os gasodutos de alta pressão, (80 bar) serem metálicos para poderem suportar as elevadas pressões a que estão sujeitos. Já existem estudos a decorrer sobre a injeção de hidrogénio na rede nacional, estando nomeadamente um projeto piloto a decorrer no Seixal, com a empresa Floene (Floene, 2023). Este projeto irá abranger cerca de 80 consumidores e arrancará no presente ano, 2023, com 2% de H₂ injetado e espera-se um aumento gradual até 20% num espaço de 2 anos. Segundo Zhao et al., 2019, a adição de até 15% de hidrogénio na rede não implicará qualquer mudança nos equipamento domésticos, a gás dos consumidores finais, nem terá consequências na rede de distribuição de gás.

Tabela 1.2: Potência instalada nas centrais elétricas Portugal de 2015 a 2021. Adaptado de DGEG, 2022.

Total	2015	2016	2017	2018	2019	2020	***2021
Unidade: MW	20 184	21 305	21 616	21 824	*22 282	*22 455	**21 957
* Não Renovável	7 909	7 888	7 852	7 830	7 859	*7 851	**6 587
%	39,20%	37,00%	36,30%	35,90%	35,30%	35,00%	30,00%
Gás natural	4 964	5 001	4 984	4 991	5 023	5 021	**5 019
%	24,60%	23,50%	23,10%	22,90%	22,50%	22,40%	22,90%
* Renovável	12 275	13 417	13 764	13 994	*14 423	*14 605	15 370
%	60,80%	63,00%	63,70%	64,10%	64,70%	65,00%	70,00%
Hídrica	6 031	6 812	7 086	7 098	7 129	7 129	7 126
%	29,90%	32,00%	32,80%	32,50%	32,00%	31,70%	32,50%
Eólica	5 034	5 313	5 313	5 379	5 459	5 502	5 643
%	24,90%	24,90%	24,60%	24,60%	24,50%	24,50%	25,70%
Fotovoltaica	454	520	585	673	*925	1 076	1 701
%	2,20%	2,40%	2,70%	3,10%	4,20%	4,80%	7,70%
Biomassa (1)	641	653	653	718	782	*771	768
%	3,20%	3,10%	3,00%	3,30%	3,50%	3,40%	3,50%
Biogás	85	89	92	92	94	93	97
%	0,40%	0,40%	0,40%	0,40%	0,40%	0,40%	0,40%
Geotermia	29	29	34	34	34	34	34
%	0,10%	0,10%	0,20%	0,20%	0,20%	0,20%	0,20%
Ondas	1	1	1	0	0	0	0
%	0,01%	0,01%	0,01%	0,00%	0,00%	0,00%	0,00%

(1) inclui resíduos vegetais/florestais, licores sulfíticos e resíduos sólidos urbanos

* valor atualizado em outubro 2022

** valor atualizado em dezembro 2022

*** resultados provisórios

Portugal, de forma a cumprir com as normas nacionais, europeias e o acordo de Paris, definiu uma estratégia nacional para o hidrogénio que visa impulsionar os fornecimentos e consumos nos vários setores da economia nacional, criando uma economia de hidrogénio estável (DR, 2020b). Têm-se como objetivo na presente estratégia nacional, a descarbonização de diversos setores da economia, de setores energéticos, da indústria e transportes bem como toda a rede de gás natural até 2050.

Conhecendo a importância de queimadores de gás natural no setor energético, e a necessidade eminente de diminuir as emissões de gases que provocam efeito de estufa, pretende-se com este trabalho, obter linhas orientadoras para o *retrofitting* de queimadores de CH₄ para a queima de hidrogénio.

O *retrofitting* de queimadores industriais apresenta-se como um desafio devido à variedade de queimadores existentes, pelas especificidades de cada chama, e necessidades que cada aplicação industrial. Para o estudo de *retrofitting* de queimadores industriais de CH₄ para H₂ há que ter em atenção às diferenças na queima destes componentes, dado que o hidrogénio produz uma chama incolor, sem fuligem e que a radiação produzida pela chama que se comportará de maneira diferente da queima de gás natural.

1.2 Revisão bibliográfica

Em primeiro lugar serão apresentados os diferentes tipos de queimadores de CH_4 . No Subcapítulo 1.2.5 será descrito em pormenor o queimador escolhido para o estudo de *retrofitting* para a queima de H_2 .

1.2.1 Tipos de queimadores de combustíveis gasosos

Os queimadores de gás natural podem ser classificados segundo a forma como é feita a admissão do combustível, dividindo-se em queimadores com pré-mistura onde o combustível e o comburente saem do queimador já misturados ou queimadores onde a mistura ocorre após a saída do queimador. Existem ainda queimadores onde é feita uma pré-mistura parcial antes da saída, ocorrendo a mistura completa após a saída do queimador.

De seguida serão abordados cada uma dos tipos de queimadores descritos acima, bem como algumas alterações à geometria dos mesmos de forma a otimizar a mistura do combustível e do comburente, melhorando as propriedades na queima, e obtendo zonas de recirculação.

1.2.1.1 Queimadores com pré-mistura

Este tipo de queimadores é caracterizado por no seu interior ocorrer a mistura total entre o comburente e o combustível, ar e CH_4 respetivamente. Na Figura 1.3 é apresentado um esquema deste tipo de queimador.

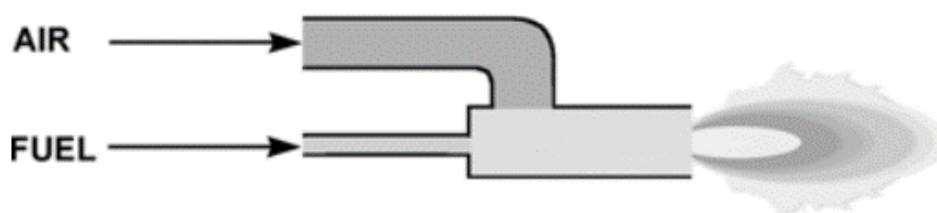


Figura 1.3: Queimador com pré-mistura. (Baukal, 2000).

Segundo Baukal, 2000, este tipo de queimador permite obter geralmente chamas mais intensas, mas de menores dimensões quando comparadas com chamas do tipo de difusão, sem pré-mistura. Neste tipo de queimador, segundo Baukal, 2000, é provável obter zonas com altos gradientes térmicos e pequenas zonas localizadas com temperaturas muito elevadas, podendo levar a um aquecimento não uniforme e, conseqüentemente, maiores emissões de NO_x .

1.2.1.2 Queimadores sem pré-mistura

Nos queimadores sem pré-mistura, o comburente e o combustível só entram em contacto após a saída do queimador. Este tipo de equipamento é propenso ao aparecimento de

chamas do tipo difusivas. Segundo Baukal, 2000, este tipo de queimadores com chamas difusivas apresentam várias vantagens, especialmente no que respeita à segurança do processo já que, previnem a ocorrência de *far-field* da chama e minimizam o risco de explosão. A chama obtida nos queimadores sem pré-mistura tem, por norma, um tamanho superior às dos queimadores com pré-mistura. Neste tipo de chamas, não existe uma zona localizada com elevada temperatura sendo a distribuição da temperatura mais uniforme.

Na Figura 1.4 é apresentado um esquema de um tipo de queimador sem pré-mistura.



Figura 1.4: Queimador sem pré-mistura. (Baukal, 2000).

1.2.1.3 Queimadores com pré-mistura parcial

Existem ainda queimadores onde é feita uma pré-mistura apenas de forma parcial, ou seja, o comburente é adicionado ao combustível apenas em pequenas quantidades, de modo a facilitar a mistura completa. Esta apenas ocorrerá à saída do queimador, tal como num queimador sem pré-mistura.

Na Figura 1.5 é apresentado um esquema de um queimador com pré-mistura parcial.

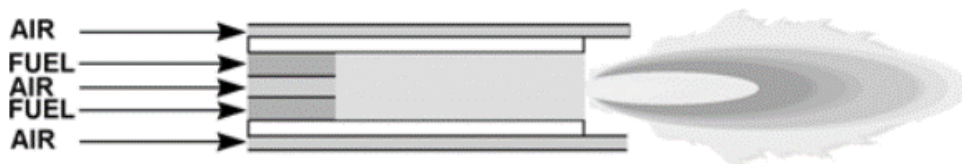


Figura 1.5: Queimador com pré-mistura parcial. (Baukal, 2000).

Segundo Baukal, 2000, estes tipos de queimadores apresentam-se como mais estáveis por terem uma pré-mistura parcial mas, como têm uma baixa concentração de comburente na mistura, aproximam-se também do caso de queimador sem pré-mistura com chama difusiva, o que permite minimizar a ocorrência de *far-field* da chama.

1.2.1.4 Queimadores com mecanismos de criação de zonas de recirculação

Uma maneira de criar zonas de recirculação passa por, nos canais de entrada do queimador, criar rotação ao escoamento através de pás guadoras. Este tipo de queimadores é referido como queimadores com *swirl*. Deste modo, os fluidos quando saem do queimador têm velocidade axial e radial. Elbaz et al., 2022 realizaram um estudo sobre a estabilidade e

características da chama de $\text{NH}_3/\text{CH}_4/\text{ar}$ num queimador com um mecanismo de *swirl* duplo. Yang et al., 2020 realizaram também um estudo provando que o mecanismo de *swirl* criado por pás guiadores ajuda a manter a chama de hidrogénio mais estável. Por fim, Marragou et al., 2022 realizaram um estudo sobre as emissões de NO_x num queimador de CH_4 e hidrogénio com *swirl* duplo provando também que o mecanismo de *swirl* ajuda a estabilizar a chama. Na Figura 1.6 é apresentado um esquema da montagem experimental do estudo de Marragou et al., 2022 de onde se destaca o mecanismo de *swirl*.

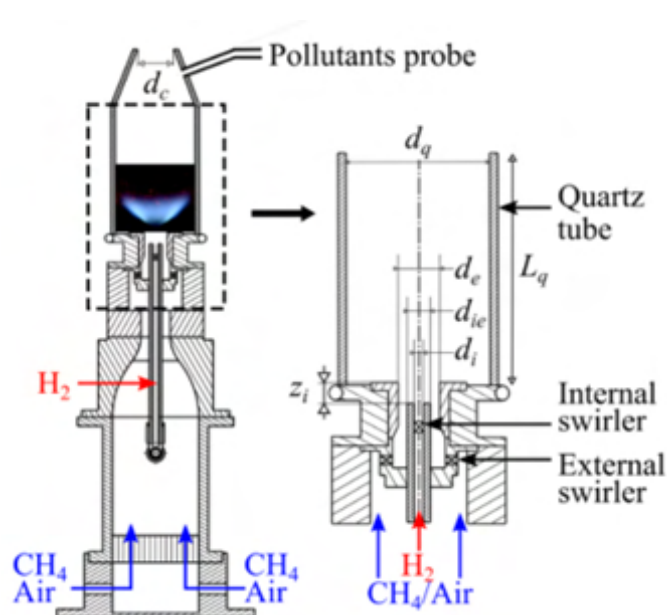


Figura 1.6: Queimador com *swirl*. (Marragou et al., 2022).

Outra maneira de obter zonas de recirculação, com vista à melhor estabilização da chama, passa pela utilização de queimadores do tipo *bluff-body*. A saída dos canais de admissão de combustível/ar destes queimadores faz-se com um ângulo relativamente ao seu eixo axial. Deste modo, a velocidade do fluido na saída tem duas componentes, axial e radial. Bagheri et al., 2014 estudaram a influência que diferentes geometrias de *bluff-body* têm na estabilidade de chama de hidrogénio. Ibrahim et al., 2022, mais recentemente, realizaram outro estudo sobre o mesmo tema. Na Figura 1.7 é apresentada a geometria de um queimador do tipo *bluff-body* sem câmara de combustão estudado por Tong et al., 2017 e é apresentado um esquema das zonas de recirculação neste tipo de queimadores. À esquerda são apresentados os resultados da zona de recirculação quando o escoamento anelar exterior é dominante, ao centro quando nenhum domina e à direita quando o escoamento central de combustível é dominante.

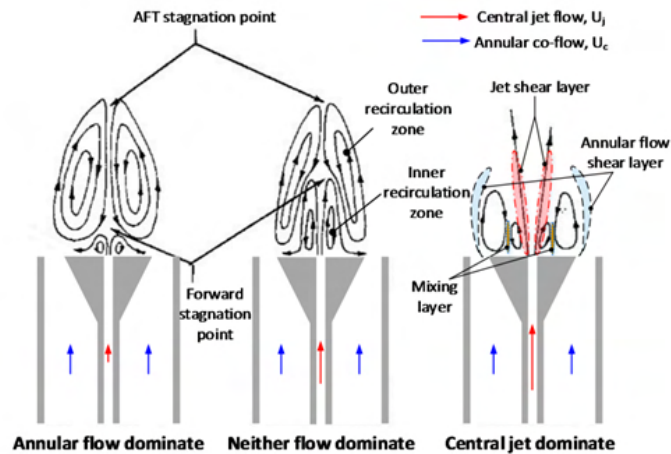


Figura 1.7: Queimador do tipo *bluff-body*. (Tong et al., 2017).

1.2.2 Retrofitting de queimadores de CH_4 para a queima de H_2

A decisão sobre o *retrofitting* de queimadores existentes ou a aquisição de novos queimadores deverá ser ponderada tendo em conta vários fatores além do aspeto económico.

As chamas de CH_4 , são normalmente, chamas luminosas, ou seja, emitem radiação numa determinada frequência. Certas aplicações industriais necessitam para o seu processo de uma chama que emita uma radiação específica. Deste modo, deve-se ter em conta a adequação da chama de hidrogénio para cada aplicação industrial. Ainda dentro do tipo de chamas obtidas na queima de CH_4 , há que analisar as diferenças entre a queima de H_2 e CH_4 , nomeadamente no comportamento da velocidade de queima dos gases e da velocidade da chama de CH_4 e de H_2 .

Outro ponto decisivo no estudo de *retrofitting* prende-se com os materiais que constituem o queimador. Como referido anteriormente existem materiais que, quando submetidos a elevadas quantidades de H_2 , poderão reagir com o mesmo, sofrendo uma degradação bastante superior ao expectável, ou seja sofrem o fenómeno de *hydrogen embrittlement*.

Por fim, é importante referir que o *retrofitting* propõem-se como uma solução onde se pretende, sem investir em novos equipamentos, utilizar os queimadores implementados para a queima de CH_4 , estando as infraestruturas já amortizadas ou não e passar a realizar a queima mista de CH_4 com H_2 e, posteriormente a queima de apenas H_2 . Os custos associados ao *retrofitting* prendem-se apenas com a instalação da rede de hidrogénio e de pequenas modificações para que o mesmo possa ser admitido no queimador, enquanto que a implementação de um novo queimador implica adicionalmente a aquisição e montagem do queimador com os respetivos custos de adaptação da infraestrutura.

1.2.2.1 Tipos de Chama

A queima de gás natural implica, na maioria dos casos a formação de fuligem, *soot*, que aparece devido à queima incompleta de combustíveis fósseis. Estes têm na sua composição

carbono responsável pela formação desta fuligem.

A queima de hidrogénio é considerada uma queima limpa por não ter carbono na sua composição. O hidrogénio é por isso considerado apto a ser utilizado na substituição dos combustíveis fósseis para a descarbonização das indústrias.

Quando queimado, o gás natural produz chamas luminosas, contrariamente ao hidrogénio. Deste modo é necessário estudar a aplicabilidade do hidrogénio na substituição direta do gás natural em indústrias nas quais o processo produtivo está altamente dependente da radiação produzida pela chama, nomeadamente, a indústria do vidro com chamas amarelas.

Gee et al., 2022 estudaram a influência da adição de tolueno na queima de misturas de hidrogénio e gás natural num queimador do tipo *bluff-body*. Resultados comparativos deste estudo são apresentados na Figura 1.8 a partir de meias chamas. À esquerda as chamas foram estabilizadas a 64 mm do queimador e à direita a 50 mm. Na primeira chama a contar da esquerda é apresentada a chama de apenas gás natural. Na segunda chama a contar da esquerda é apresentada a chama de apenas hidrogénio. A partir daí são apresentadas chamas de hidrogénio com adição percentual de tolueno de 1% a 5% na mistura. Todas as chamas foram produzidas a um número de Reynolds igual a 10000.

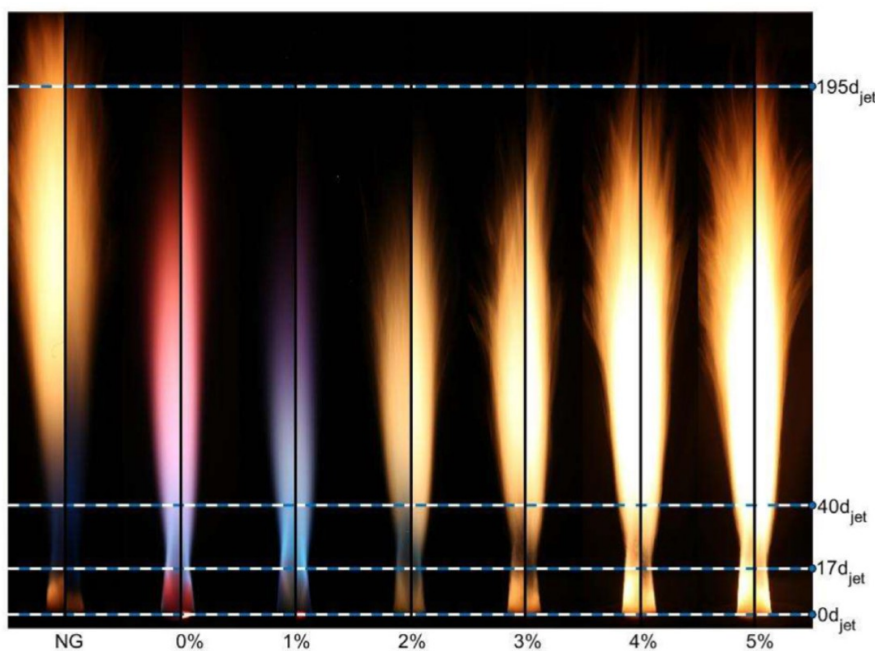


Figura 1.8: Chamas de hidrogénio com adição percentual de tolueno, com imagem de controlo à esquerda com 100% de gás natural. Representação de meia chama à esquerda com estabilização a 64 mm e à direita a 50 mm. (Gee et al., 2022).

O estudo realizado por Gee et al., 2022 considerou ainda a queima de gás natural com 10% de hidrogénio. Na Figura 1.9, são apresentados os resultados experimentais desse estudo, com chama repartida, à esquerda estabilizada a 64 mm e à direita a 50 mm. A chama da esquerda representa a queima total de gás natural e as restantes da mistura de

10% de hidrogénio mais a adição de tolueno nas respetivas percentagens indicadas na escala da figura.

Como é apresentado na Figura 1.8, a chama à esquerda sendo a chama de 100% de gás natural pode ser diretamente comparada com a chama de 100% de hidrogénio representada na segunda chama a contar da esquerda na mesma figura. É de fácil conclusão que a chama de hidrogénio sem qualquer outro aditivo apresenta uma cor diferente da chama de gás natural. Deste modo, entende-se que a chama terá propriedades diferentes, tanto térmicas como no espectro de radiação emitida. Ao observar a chama de gás natural aditivada com 10% de hidrogénio, representada como a segunda chama a contar da esquerda na Figura 1.9, conclui-se que a adição de apenas 10% de hidrogénio não altera a tonalidade da chama, tendo portanto pouca variação no espectro de radiação emitida.

Segundo um estudo de Schefer et al., 2009, as chamas de hidrogénio podem emitir radiação em diferentes gamas espectrais, sendo mesmo possível obter emissões na região do ultravioleta, visível e infravermelho, ou seja é possível obter chamas de hidrogénio com diferentes propriedades variando as condições de operação do queimador.

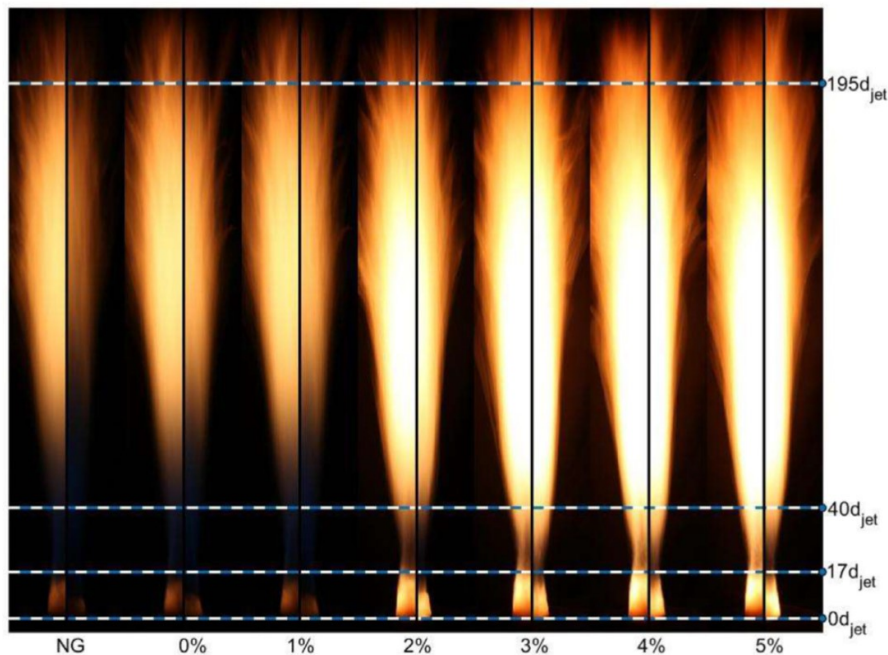


Figura 1.9: Queima gás natural com 10% de hidrogénio e adição percentual de tolueno, com imagem de controlo à esquerda com 100% de gás natural. Representação meia chama à esquerda com estabilização a 64 mm e à direita a 50 mm. (Gee et al., 2022).

Deste modo, conclui-se que o estudo aprofundado para o *retrofitting* de queimadores de gás natural deve comparar as chamas que se pretendem obter, semelhantes à queima de gás natural puro, com as chamas obtidas nas misturas de hidrogénio e gás natural e propondo mudanças no regime de funcionamento, caso seja possível, para se obter chamas com propriedades semelhantes. Caso não seja possível obter chamas semelhantes, deverá ser estudada a adição de outros compostos que, idealmente, não deverão emitir gases com

efeito de estufa quando queimados.

1.2.2.2 *Hydrogen embrittlement*

O fenômeno de *hydrogen embrittlement* consiste na fragilização do material devido à redução da sua ductilidade, conduzindo à fratura do mesmo. Alguns materiais, principalmente os aços e, em particular, os de elevada resistência, quando sujeitos a uma atmosfera rica em hidrogénio poderão sofrer este tipo de fenômenos dando-se o nome de *hydrogen embrittlement*.

Estudos realizados por Oriani e Josephic, 1974 indicaram que o grau de pureza do hidrogénio, consoante a pressão a que o material está sujeito, influencia o aparecimento de fissuras em ligas de aço, mostrando que quanto mais puro e maior a pressão a que o material está sujeito, maior a probabilidade de aparecimento de fissuras. O estudo de *retrofitting* de queimadores de gás natural para a queima de hidrogénio puro deverá assim ter em conta as limitações que os aços apresentam e a perda de ductilidade dos mesmos. Segundo um estudo realizado por Lancaster, 1999, um aço, com um entalhe, vê a sua tensão limite de elasticidade reduzida na presença de uma atmosfera rica em hidrogénio sempre que a temperatura esteja entre os $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$ e os $200\text{ }^{\circ}\text{C}$. Estes resultados são apresentados na Figura 1.10. Lancaster, 1999 refere ainda que o fenômeno de *hydrogen embrittlement* provocado pela presença de hidrogénio é um processo dependente do tempo de exposição do material ao hidrogénio, pelo que, para ocorrer uma fratura, deverá decorrer tempo suficiente para o hidrogénio penetrar e difundir nas fissuras e interstícios do material. Mais recentemente, Okuno e Takai, 2023 estudaram a difusibilidade do hidrogénio e a suscetibilidade de aços de alta resistência ao fenômeno de *hydrogen embrittlement*, tendo os resultados obtidos sido em tudo concordantes com os apresentados por Lancaster, 1999 na Figura 1.10.

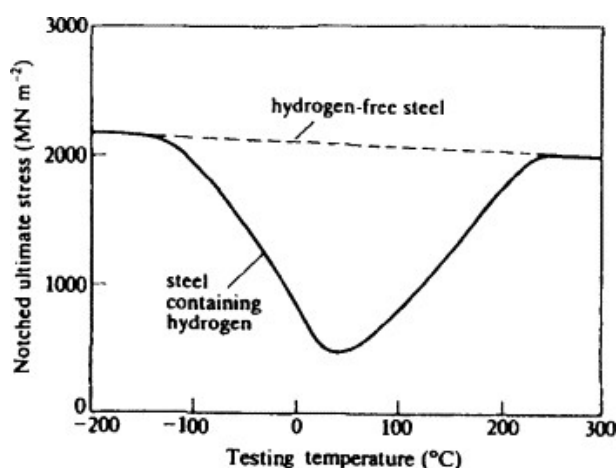


Figura 1.10: Influência da temperatura na tensão limite de elasticidade de um aço com entalhe. (Lancaster, 1999).

Conclui-se que o *retrofitting* de queimadores de gás natural para a queima de hidrogénio deve ser realizado com base num estudo prévio da possibilidade de ocorrência de

fenómenos de *hydrogen embrittlement*, especialmente se o material de base do queimador for uma liga de aço.

1.2.2.3 Vantagens do *retrofitting*

O *retrofitting* de queimadores de gás natural para a queima de hidrogénio, seja ele puro ou misturas de H_2 com CH_4 , tem como principal objetivo a redução das emissões de gases com efeito de estufa, cumprindo, até 2050, os objetivos do Acordo de Paris e o Plano Nacional com metas ambientais e energéticas até 2030.

O *retrofitting* de queimadores existentes apresenta-se vantajoso quando comparado com a compra ou fabrico de um novo queimador, pois têm-se como objetivo a utilização dos equipamentos já existentes.

Dada a complexidade e custos de implementação de centrais de hidrogénio verde, obtido através de eletrólise da água, com capacidade suficiente para uma transformação total dos queimadores de gás natural para a queima total de hidrogénio verde, os esforços das indústrias baseiam-se, num futuro próximo, na adição de hidrogénio em pequenas percentagens queimando assim misturas de CH_4 e H_2 . Com a crescente experiência na queima de hidrogénio, o avanço das tecnologias de obtenção de hidrogénio verde e o aumento do investimento nesta área, espera-se que seja aumentada, progressivamente a percentagem de hidrogénio verde queimado e que, conseqüentemente, se diminua o consumo de gás natural. Com isto, espera-se que em 2050, Portugal consiga cumprir com o Acordo de Paris, tendo efetuado com sucesso a descarbonização da sua indústria.

A substituição direta de CH_4 por H_2 apresenta alguns desafios como o *hydrogen embrittlement* e diferenças no tipo de chama e transferência de calor que a mesma permite. O estudo efetuado por Gee et al., 2022 prova que, numa substituição direta de gás natural para hidrogénio, quando se atinge 80% de H_2 na mistura se verifica uma redução em 80% na taxa de transferência de calor. O autor indica que com a adição de 4% de tolueno se obtém a mesma taxa de transferência de calor que com a queima de apenas CH_4 . Estudos como estes motivam a comunidade científica a investir na temática do *retrofitting* de queimadores de gás natural para a queima de hidrogénio, esperando-se que com o contínuo investimento no estudo desta área, a indústria possa implementar as mudanças propostas, e, conseqüentemente, possam ser obtidos melhores rendimentos e um maior sucesso nesta transição energética.

O estudo de *retrofitting* de queimadores de gás para a queima de hidrogénio é, portanto, uma mais-valia na transição energética, permitindo a baixo custo uma transição mais suave entre a queima de apenas CH_4 , e a queima de 100% de H_2 .

É de particular interesse o estudo de *retrofitting* associado a simulações através de CFD pois permitem estudar a viabilidade do *retrofitting* e permitem a identificação de algum tipo de adaptação que seja necessário realizar, antes de ser feito qualquer tipo de investimento

1.2.3 Importância do uso de simulações numérica, CFD

O uso de simulações numéricas, particularmente *computational fluid dynamics* CFD, tem ganho relevo nas últimas décadas, principalmente com a evolução dos modelos numéricos que melhor representam as situações que se pretendem estudar. O aparecimento de programas de simulação de CFD deu-se no início do século XX com a tentativa de simular a interação fluido-estrutura ao redor de um cilindro a duas dimensões L.M., 1973. Desde então, o estudo de CFD foi importância à medida que foi possível começar a simular perfis de alares, perfis de asa. Posteriormente, com a evolução dos modelos numéricos e dos recursos computacionais, passou a ser possível a simulação a três dimensões. O estudo de um componente através de CFD é altamente influenciado pelo modelo numérico e discretização da malha utilizada, dado que se baseia na discretização do domínio computacional para resolver as equações de *Navier-Stokes* e ou outras que sejam derivadas ou simplificações das mesmas. Atualmente, o estudo de CFD é amplamente utilizado na engenharia ao projetar um componente. Slotnick et al., 2014 num estudo para a NASA defendem ainda que a utilização de CFD irá revolucionar o estudo aerodinâmico de componentes .

O uso de CFD no projeto de equipamentos apresenta-se como uma mais-valia já que, após cada estudo numérico e caso não tenham sido obtidos os resultados pretendidos, é possível realizar alterações à geometria ou ao regime de funcionamento implementando assim melhorias nos sistemas de forma virtual, sem os elevados custos que uma mudança física acarreta. Por fim, com o estudo numérico completo é possível apenas fabricar a versão que apresenta melhores resultados.

Contudo, os estudos CFD apresentam-se no entanto como uma tarefa que exige elevados recursos computacionais, conhecimento da física do problema, da dinâmica do escoamento e requer uma capacidade crítica na análise dos resultados, para além de um investimento em licenças e tempo de investigação até serem obtidos resultados fidedignos e próximos dos reais.

Estudos CFD têm dado contributos significativos em estudos de queimadores, e em particular na transição do tipo de combustível a ser utilizado, permitindo fundamentar estudos ambientais ao nível de emissões dos mesmos. É exemplo disso o estudo de emissões de NO_x ao realizar o *retrofitting* de queimadores para a queima de hidrogénio realizado por Ditaranto et al., 2013 ou por Tigges et al., 2009 no estudo de conversão de centrais de carvão para a queima de oxy-fuel. Gómez et al., 2019 estudou também, através de simulações de CFD, a transição de gás natural para *syngas* em queimadores cerâmicos.

Conclui-se que a utilização de CFD, quando planeada a tempo, permite um processo tecnológico sem necessidade de altos investimentos para obter resultados.

1.2.3.1 Modelos de turbulência

Para o caso de estudo desta dissertação, no estudo de *retrofitting* de queimadores de gás natural para a queima de hidrogénio, devem ter-se em conta os modelos de turbulência

a utilizar na modelação da aerodinâmica do escoamento, os modelos de combustão e reação química do metano e hidrogénio para simular a queima e ainda a implementação de modelos de radiação de forma a aproximar os resultados obtidos CFD à realidade da transmissão de calor através da queima.

As equações diferenciais de *Navier-Stokes* descrevem o comportamento de escoamento de fluidos. Com estas equações, é possível descrever os campos de velocidade e pressão dos fluidos, e, deste modo, é possível estimar a direção do escoamento, zonas onde a velocidade é nula e zonas de recirculação. O número de Reynolds permite caracterizar o regime de escoamento como sendo laminar, turbulento ou misto. É de maior interesse localizar as zonas onde o regime é turbulento e descrevê-lo no espaço e tempo com a utilização de modelos numéricos que permitem fazer esta estimativa.

É possível agrupar os modelos numéricos em 3 grandes grupos, *Direct Numerical Simulations (DNS)*, *Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)* e *Large Eddy Simulations (LES)*.

Segundo Menter et al., 2021, os modelos numéricos do grupo DNS são apenas aconselhados para problemas numéricos onde as velocidades são reduzidas e o número de Reynolds é também ele baixo, ou seja, para regimes laminares. No caso dos queimadores industriais as velocidades de injeção de combustível são geralmente altas e sabe-se que ocorrerão zonas de recirculação. Como tal o regime será certamente turbulento.

Os modelos numéricos do tipo LES são bastante mais complexos, de maior precisão e de elevado custo computacional. Estes modelos modelam o efeito dissipativo dos pequenos turbilhões e simulam a dinâmica dos grandes. Contudo, segundo Menter et al., 2021 os modelos LES têm problemas em resolver rápidas mudanças no estilo de escoamento, ou seja, pouco adequados para simulação numérica de arranque e paragem do queimador.

Os modelos numéricos RANS apresentam-se como uma solução aos problemas apresentados anteriormente pelos restantes grupos de modelos numéricos. Segundo Menter et al., 2021 os modelos RANS não resolvem diretamente o escoamento e a turbulência no tempo e espaço, no entanto fazem a média das soluções, obtendo por isso uma solução que responde às necessidades da maioria dos problemas de engenharia. Os modelos RANS têm um custo computacional muito menor que os modelos LES uma vez que não utilizam as equações relacionadas com a física da turbulência. No entanto, para simularem a turbulência, os modelos RANS utilizam um processo iterativo, ou seja, baseiam-se nas iterações anteriores para realizarem as iterações seguintes. É de notar que todos os modelos apresentados são sensíveis à malha escolhida e à escala a que a mesma é construída, sendo sempre necessário um estudo prévio de independência da malha.

Dado que os modelos numéricos RANS permitem a resolução do tipo de escoamentos pretendidos no interior de um queimador e respetiva câmara de combustão, em regime turbulento e com zonas de recirculação, e apresentam um custo computacional menor que os LES de seguida serão apresentados os modelos numéricos mais utilizados e que estão disponibilizados no software comercial *ANSYS FLUENT 18.2*, software utilizado na presente dissertação.

a. Modelo *Spallart-Allmaras*

O modelo *Spallart-Allmaras* apresenta-se como um modelo de uma única equação de transporte para a viscosidade turbulenta e tem como principal utilização a modelação de escoamentos exteriores, muito aplicado na indústria aeronáutica (Menter et al., 2021). Este modelo permite obter resultados melhores que o modelo $K - \varepsilon$ em escoamentos com gradientes de pressão adversos e pontos de separação. (Menter et al., 2021). Por ser de equação única este modelo permite que a simulação numérica necessite de menos recursos computacionais, mas para obter uma resposta satisfatória, este modelo necessita de uma malha mais refinada que os modelos de duas equações.

Segundo Menter et al., 2021, este modelo é desaconselhado para um uso genérico pois não está corretamente calibrado para escoamento não confinado e, apesar de conseguir prever a velocidade de separação do fluido entre as diferentes *layers*, não prevê escoamentos de jatos que são altamente dissipativos.

b. Modelo $K - \varepsilon$

O modelo $K - \varepsilon$ é um modelo de duas equações de transporte para a viscosidade turbulenta. Este modelo é amplamente utilizado e historicamente um dos primeiros modelos de duas equações. Este modelo permite a modelação das tensões de Reynolds («ANSYS Fluent Users Guide», 2013).

Este modelo apresenta pouca sensibilidade para gradientes adversos, para a definição da camada limite e separação da mesma, podendo originar resultados demasiado otimistas, não sendo por isso recomendada a sua utilização para escoamentos exteriores («ANSYS Fluent Users Guide», 2013). Este modelo apesar das suas limitações, continua a ser um dos mais conhecidos e utilizados em engenharia pois apresenta um grau de precisão razoável.

O modelo $K - \varepsilon$ possui limitações também na modelação da taxa dissipativa de energia cinética turbulenta e falha em escoamentos de jatos axissimétricos. Surgiram, por isso, à volta deste modelo outras variações, sendo o mais utilizado desta família o modelo $K - \varepsilon$ *Realizable*. Esta variante permite uma melhor resolução pois altera a forma como é calculada a viscosidade turbulenta e a equação de transporte («ANSYS Fluent Users Guide», 2013).

c. Modelo $K - \omega$

O modelo $K - \omega$ é também um modelo de duas equações de transporte para a viscosidade turbulenta. Este modelo em geral apresenta várias vantagens ao modelo $K - \varepsilon$. Primeiramente, este modelo permite uma resolução da parede com melhor robustez, por ser mais sensível ao parâmetro y^+ . Outra grande motivação para a utilização deste modelo prende-se com a capacidade do mesmo de prever com maior precisão gradientes de pressão adversos e a separação da camada limite («ANSYS Fluent Users Guide», 2013).

Contudo, este modelo é muito sensível aos valores de K e ω fora da camada limite, sendo por isso um modelo que dificilmente converge para uma solução estável. Por esse motivo, segundo, «ANSYS Fluent Users Guide», 2013, este modelo não é recomendado para o software comercial *ANSYS FLUENT 18.2*. O software apresenta outra versão do modelo $K - \omega$, sendo esta a SST que responde as limitações do modelo original, sendo esta preferida sobre o próprio.

d. Modelo *Reynolds Stress Model* (RSM)

O modelo *Reynolds Stress Model* (RSM) apresenta-se como um modelo bastante complexo, com um esforço computacional bastante superior aos anteriores por utilizar cinco equações para simular escoamentos em bidimensionais, contrariamente aos anteriores que apenas utilizavam 2 equações («ANSYS Fluent Users Guide», 2013).

Este modelo apresenta alguma dificuldade em atingir a convergência dos resíduos nos resultados devido ao uso das cinco equações e, somado ao superior tempo de simulação, poderá não justificar a utilização do mesmo. O uso deste modelo deve ser utilizado em escoamentos com elevado *swirl*, turbulência e em escoamentos onde as linhas de corrente são curvas («ANSYS Fluent Users Guide», 2013).

Em casos onde a definição da camada limite na parede for importante, é recomendado a utilização de uma combinação do modelo RSM com a equação característica ω da família dos modelos $K - \omega$ («ANSYS Fluent Users Guide», 2013).

Diversos estudos numéricos têm sido feitos com queimadores de gás natural. Kie-drzyńska et al., 2020 realizaram um estudo de simulação numérica de um queimador de gás natural e *syngas* onde foi utilizado o modelo $K - \varepsilon$. Yang et al., 2020 utilizaram também o modelo $K - \varepsilon$ nas simulações numéricas de modo a confirmar os seus resultados experimentais. Kore et al., 2023 realizaram um estudo de estabilização de chamas de hidrogénio com queimador do tipo *bluff-body* e novamente utilizaram o modelo $K - \varepsilon$. Em dissertações anteriores, orientadas pelo Núcleo de Mecânica dos Fluidos e Termodinâmica Aplicada da Nova School of Science and Technology, particularmente na dissertação de Ferreira, 2021 usou-se novamente o modelo $K - \varepsilon$, e particularmente o modelo $K - \varepsilon$ *Realizable*. Na dissertação de Gameiro, 2020 conclui-se também que o modelo $K - \varepsilon$ *Realizable* consegue obter resultados bastante próximos do real para a simulação da chama e zonas próximas da mesma.

1.2.3.2 Modelos de reação química

Para a modelação da queima é necessário definir as reações químicas que ocorrem, tanto na queima de CH_4 como na queima de H_2 . Diversos modelos de reação química são propostos para a queima destes gases, sendo de particular interesse para a presente dissertação os mecanismos de reação química do CH_4 e H_2 . Idealmente será melhor utilizar modelos que incorporem logo os dois gases, estando os mesmos preparados para a queima de ambos.

O software comercial *ANSYS FLUENT 18.2* têm na sua biblioteca um mecanismo de reação H_2 - ar com apenas uma reação e dois mecanismos de CH_4 - ar um com apenas uma reação e outro com três reações sendo a segunda e a terceira apenas referentes à formação e decomposição de CO_2 . Deste modo, tanto os mecanismos de CH_4 como de H_2 disponibilizados pelo programa *ANSYS FLUENT 18.2* apresentam-se como muito simples.

Para a queima de hidrogénio, Mueller et al., 1999 propõe um mecanismo com 21 reações para a reação H_2 - ar. Boivin, 2011 apresenta um mecanismo simplificado ao de

Mueller et al., 1999 contando apenas com 12 reações para a reação de H_2 - ar.

Já para a queima de CH_4 , diversos autores como Lu e Law, 2008, Luca et al., 2017, CERFACS, 2023 ou Laurent, 2020 apresentam mecanismos de reação com base no mecanismo GRI-MECH 3.0. O mecanismo GRI-MECH 3.0 deriva do mecanismo GRI-MECH 2.11. Ambos resolvem o problema metano-hidrogênio-ar e estão disponíveis para serem implementados diretamente a partir de um ficheiro do tipo *CHEMKIN* no programa *ANSYS FLUENT 18.2*.

No Subcapítulo 2.6 serão abordados os vários modelos de reação química, as suas principais diferenças e será apresentado qual o modelo que deve ser utilizado para o estudo da presente dissertação.

1.2.4 Modelos de interação química-turbulência

Para que seja possível simular os mecanismos de reação em escoamentos de regime turbulento deve ser adicionado um modelo que faça a interação entre os modelos de turbulência e os modelos de reação química. O modelo de *Eddy Dissipation Concept (EDC)* apresentado por Magnussen e Hjertager, 1977 permite simular este tipo de interações, sendo contudo, um modelo com elevado custo computacional. Kore et al., 2023 no estudo de estabilização de chamas de hidrogênio num queimador do tipo *bluff-body*, utilizou o modelo EDC para a simulação em regime turbulento, com a utilização do modelo $K - \epsilon$ e o mecanismo de reação de 21 reações de Mueller et al., 1999. Outros modelos são também disponibilizados no programa *ANSYS FLUENT 18.2*, nomeadamente os modelos *Finite-rate*, *Eddy Dissipation* ou *Finite-rate/Eddy Dissipation*. Estão ainda disponíveis outros modelos como *Chemical Equilibrium* e *Steady Diffusion Flamelet* ou *Flamelet Generated Manifold*.

No Subcapítulo 2.7 serão abordados os vários modelos e quais os mais adequados para o estudo da presente dissertação.

1.2.4.1 Modelos de radiação

O software de simulação numérica *ANSYS FLUENT 18.2* conta com seis modelos de radiação incorporados: *Discrete Transfer Radiation Method (DTRM)*, *P-1*, *Rosseland*, *Surface to Surface (S2S)*, *Discrete Ordinates (DO)*, *Monte-Carlo (MC)*. (Ferreira, 2021).

Para o estudo do *retrofitting* de queimadores de gás natural será avaliado no Subcapítulo 2.8, qual o melhor modelo de radiação para o caso em estudo já que o tipo de queimador selecionado e geometria do mesmo influenciam o tipo de modelo a utilizar.

1.2.5 Escolha do queimador a estudar

Para o presente trabalho será necessário definir qual o queimador alvo de estudo. Os parâmetros selecionados para a escolha do mesmo serão descritos em diante.

Como referido anteriormente, os queimadores mais seguros não têm pré-mistura já que nestes apenas coexistem combustível e comburente, elementos essenciais para

ocorrer combustão, após a saída do queimador. Para se atingir uma queima completa, é recomendado que os queimadores contenham mecanismos de recirculação, sejam estes criados pela geometria do queimador, *bluff-body*, ou por pás no interior dos *inlets* que conferem rotação ao escoamento. Deverá, portanto, ser utilizado um queimador com pelo menos um destes mecanismos.

Na construção do caso numérico e validação dos resultados, deverá ser escolhido, idealmente, um queimador que contenha resultados experimentais. Caso apresente resultados numéricos, estes devem estar previamente validados experimentalmente para a combustão de metano.

Por fim, caso o queimador em estudo contenha câmara de combustão será possível definir de forma clara as condições de fronteira que deverão ser impostas no domínio computacional do caso numérico. Caso o queimador em questão não apresente câmara de combustão, deverão ser validadas as condições de fronteira escolhidas de modo a garantir a validade das simulações numéricas.

Toda a pesquisa bibliográfica para a escolha do queimador foi realizada até abril de 2023, pelo que, todos os artigos de seguida mencionados foram analisados *a priori* dessa data.

Autores como Bagheri et al., 2014, Kore et al., 2023, Franco et al., 2021 ou İlbaş et al., 2016 têm realizado estudos numéricos para a queima de hidrogénio. Outros como Burbano et al., 2008, Elbaz et al., 2022 ou Marragou et al., 2022 realizam apenas trabalhos experimentais também para a queima de hidrogénio. Contudo, os mesmos apresentam um queimador com pré-mistura e com uma geometria que não contém *bluff-body* não sendo portanto do interesse da presente dissertação.

Gómez et al., 2019, Kiedrzyńska et al., 2020, Schefer et al., 1996, Massey et al., 2018, Hosseini et al., 2020 e Karyeyen, 2018 têm conduzido estudos numéricos em queimadores de gás natural, sem a preocupação de adição de hidrogénio. Por outro lado, Tong et al., 2017, Aravind et al., 2021, Gough et al., 1998 ou Kalt et al., 2002 apresentam estudos experimentais de queima de apenas gás natural, podendo algum destes trabalhos vir a servir de base para validação de resultados numéricos.

O *retrofitting* de queimadores de gás natural tem sido uma preocupação e autores como Mayrhofer et al., 2021, Yang et al., 2020, Zhao et al., 2019 apresentam estudos com misturas de metano e hidrogénio. Contudo, os presentes trabalhos não apresentam um queimador com uma geometria do tipo *bluff-body*, não sendo portanto do interesse da presente dissertação a continuação destes trabalhos.

Gee et al., 2022 e Rahimi et al., 2023 apresentam resultados experimentais para queimadores com uma geometria do tipo *bluff-body*, para a queima de metano e misturas de hidrogénio mas não apresentam confinamento. Gee et al., 2022 apresenta um estudo sem pré-mistura e sem resultados numéricos. Rahimi et al., 2023 apresentam um estudo com resultados experimentais e numéricos para dois casos, um com pré-mistura e outro denominado de *stratified*. Este é um caso especial de pré-mistura parcial onde o combustível e o comburente estão a ser injetados nas condições limites para existir combustão. (Masri,

2015)

Pelo exposto, para a presente dissertação optou-se por dar continuidade ao trabalho de Rahimi et al., 2023 dado ser um estudo em que os resultados numéricos estão validados experimentalmente para a queima de metano. Deste modo, a presente dissertação poderá ver os seus resultados validados ao utilizar este trabalho como base.

1.2.5.1 Geometria do queimador em estudo

O queimador, *Cambridge Stratified Swirl Burner* escolhido para o estudo de *retrofitting* na presente dissertação é apresentado por Rahimi et al., 2023 e Sweeney et al., 2012.

Este queimador apresenta uma geometria do tipo *bluff-body* e contém três *inlets* com uma configuração anelar. O *inlet* mais exterior denominado de *coflow* tem um diâmetro hidráulico de 161,9 mm. Neste é injetado apenas ar. Junto à linha central, eixo de revolução do queimador, existem dois *inlets*, onde são injetados combustível e ar.

Na Figura 1.11 é apresentada uma vista de corte da geometria do referido queimador de onde se pode observar as diferentes partes e constituintes do mesmo.

Na Figura 1.12 é apresentada uma vista de topo da zona central do queimador, com os respetivos *inlets*, *inner slot* e *outer slot* e dimensões. O *inner slot* tem um diâmetro hidráulico de 10,9 mm. O *outer slot* têm um diâmetro hidráulico de 9,4 mm. O *inlet coflow* não visível na figura, começa em raio igual a 19,05 mm entendendo-se até a um raio igual a 100 mm.

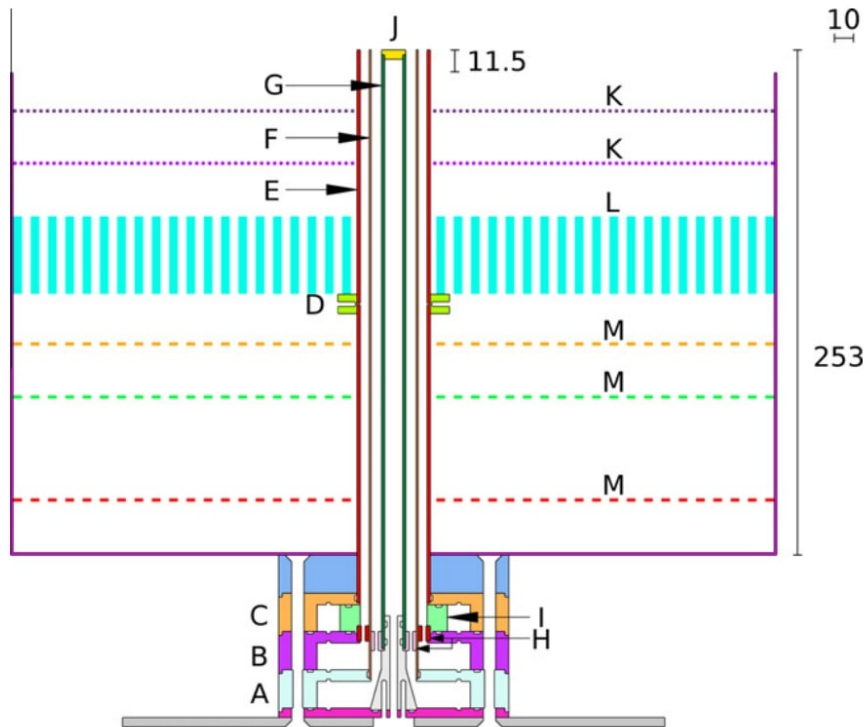


Figura 1.11: Geometria do queimador *Cambridge Stratified Swirl Burner*. (A) Entrada axial para *inner slot*; (B) Entrada axial para *outer slot*; (C) Entrada com *swirl* para o *outer slot*; (D) Colarinho de fixação; (E) Tubo externo; (F) Tubo do meio; (G) Tubo interior; (H) Restritores de fluxo; (I) Colar gerador de *swirl*; (J) Tampa cerâmica; (k) Malha metálica; (L) Malha em favos de abelha; (M) Discos perfurados; Todas as dimensões estão em milímetros e foram omitidas as conexões de fluxo para maior clareza. (Sweeney et al., 2012).

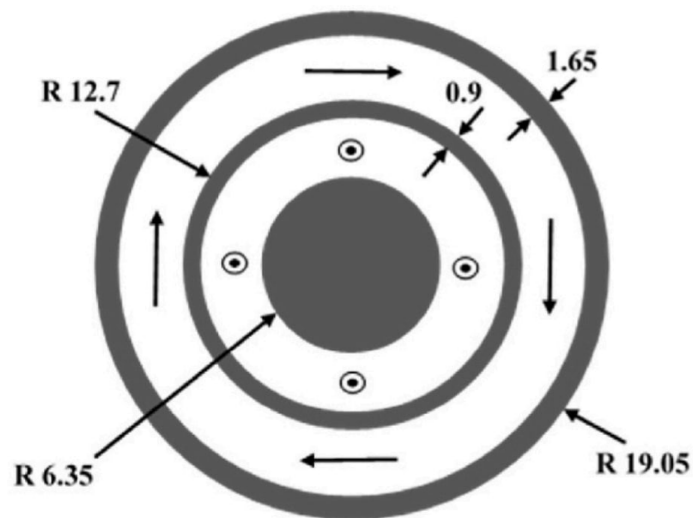


Figura 1.12: Vista de topo do queimador. Todas as dimensões estão em milímetros. R significa raio. (Rahimi et al., 2023.)

1.2.5.2 Apresentação do estudo de Rahimi et al., 2023 para validação de resultados

Rahimi et al., 2023 contemplam a adição de misturas de 20% e 40% de H₂ na queima de CH₄ através do programa *Openfoam*. Neste trabalho, existe sempre pré-mistura contendo sempre *swirl* no *outer slot*. O queimador *Cambridge Stratified Swirl Burner* é um queimador que não contém câmara de combustão. Deste modo, Rahimi et al., 2023 definiram como domínio computacional para o problema, após a saída do queimador, um cilíndrico com 200 mm de diâmetro e 300 mm de comprimento. Rahimi et al., 2023 não apresentam qual a dimensão axial que foi considerada para os *inlets*.

Rahimi et al., 2023 apresentam resultados para a queima de CH₄ que foram comparados com resultados experimentais e numéricos (LES) por Schneider et al., 2019 e Wen et al., 2021, respetivamente. Por fim, apresenta um estudo comparativo entre a situação de queima de apenas CH₄ e os casos com 20% e 40% de H₂ para os casos em que o H₂ é adicionado no *inner slot*, no *outer slot* ou em ambos, caso denominado por *both slots*.

Para a construção do caso numérico, Rahimi et al., 2023 definiram que todas as paredes do queimador, não têm escorregamento e são adiabáticas. Considerou também a opção *far-field* para as paredes laterais do domínio cilíndrico e a condição *outlet* para o topo do domínio computacional. Nestas, foram definidas que todas as variáveis têm gradiente nulo, e a pressão é igual à pressão atmosférica. Rahimi et al., 2023 definiram as condições de fronteira para os *inlets* nas Tabelas 2 e 3 do seu artigo. Contudo as mesmas apresentam incongruências. Da interpretação do artigo, texto e tabelas concluiu-se que, para o caso de pré-mistura, a velocidade axial no *inlet inner slot* deverá ser 8,31 m/s, e 18,7 m/s no *inlet outer slot*. No *inlet coflow* a velocidade será de 0,4 m/s. Este caso apresenta *swirl* para o *inlet outer slot* e o mesmo tem um valor de 0,45. A razão de equivalência para o caso com pré-mistura será sempre de 0,75, tanto para *inner slot* como para o *outer slot*, e igual para os casos com e sem introdução de hidrogénio. No *inlet coflow* não é injetado combustível, só ar, não fazendo por isso sentido a definição do parâmetro razão de equivalência para este *inlet*.

Rahimi et al., 2023 utilizaram o programa *Openfoam* no estudo apresentado e utilizaram o modelo de turbulência $K - \omega SST$ e um modelo PaSR para a modelação da interação química-turbulência, foi ainda utilizado por Rahimi et al., 2023 um mecanismo químico de 57 reações e 15 espécies químicas e o algoritmo PISO para o cálculo da solução.

1.3 Contribuição da dissertação (Objetivos)

Na presente dissertação pretende-se realizar um estudo numérico, de *retrofitting* do queimador de gás natural, *Cambridge Stratified Swirl Burner*, utilizado também por Rahimi et al., 2023, para a queima de misturas de H₂ e CH₄, tentando obter conclusões de uma futura queima apenas de hidrogénio.

Esta dissertação pretende responder a uma lacuna detetada na literatura, onde os estudos numéricos sobre esta temática são apenas comparativos, como o de Rahimi et al.,

2023 e fazem a adição de hidrogénio sem tentar aproximar as propriedades da queima de misturas à queima original de apenas gás natural, sendo este o problema real das indústrias. Ao tentar aproximar o desempenho dos dois tipos de chama, espera-se guiar as indústrias para uma transição de forma suave para a queima de combustíveis verdes, como o hidrogénio.

A presente dissertação recorre o uso de simulações numéricas, CFD, para o estudo de *retrofitting* pois pretende-se obter resultados o mais próximo do real sem os custos, erros e perigos de montagens experimentais.

A transição energética e a implementação do hidrogénio verde na indústria tende a ser realizada de forma gradual começando pela introdução na queima de CH₄ de baixas percentagens de H₂, pelo que, esta dissertação contemplará inicialmente o estudo com a queima de 0% de H₂ (100% de CH₄), passando depois pela análise de misturas de CH₄ e H₂ até se obter resultados para a queima de 100% H₂ (0% de CH₄).

O estudo de Rahimi et al., 2023 permitirá validar os resultados obtidos na presente dissertação, uma vez que o mesmo contém resultados de simulações numéricas e estes estão validados experimentalmente para a queima de CH₄.

Rahimi et al., 2023 utilizaram o programa *Openfoam* e na presente dissertação será utilizado o programa *ANSYS FLUENT 18.2* esta diferença aumenta a relevância da presente dissertação uma vez que se espera conseguir comparar os resultados obtidos por cada uma das ferramentas computacionais.

Para garantir que a malha que for construída é capaz de resolver o problema descrito sem estar a influenciar os resultados das simulações deverá ser realizar-se um estudo de independência de malha.

Há que ter em atenção que, para o presente estudo estar corretamente justificado, poderá ser necessário realizar diversos estudos comparativos entre diferentes condições de fronteira, modelos de turbulência, modelos de reação química ou ainda modelos de interação química-turbulência. Esta é uma necessidade dado que o assunto da presente dissertação, e nomeadamente a obtenção de resultados válidos para a queima através de estudos CFD, é um assunto de elevada complexidade, com numerosos parâmetros que não foram alvo de estudo durante o percurso curricular.

Como primeiro objetivo pretende-se obter os seguintes resultados para poder validar o caso numérico montado para a queima de apenas CH₄:

- Campos de Velocidade
- Campos de Temperatura
- Campos de Fração Mássica de CO₂

Após ter sido validado os resultados da queima de CH₄, pretende-se adicionar hidrogénio de forma gradual dado que é expectável o aparecimento de diversos problemas nomeadamente no que diz respeito à estabilização da chama. Será então feita a introdução

de hidrogénio pela seguinte ordem, 2%, 5%, 10%, e por fim 20%, condição cujo resultado pode ser novamente comparado com o de Rahimi et al., 2023. Após os casos apresentados pretende-se prosseguir com a adição de 40%, seguido de 60%, 80% e por fim 100%. É expectável que não seja possível chegar à queima de 100% sem ser necessário alterar configurações do queimador, nomeadamente geométricas, pelo que poderá após os 40% de hidrogénio, percentagem máxima inserida por Rahimi et al., 2023 os objetivos poderão ter de ser redefinidos para fazerem frente as dificuldades sentidas.

Rahimi et al., 2023 apresentam um estudo comparativo entre colocar hidrogénio, no *inner slot*, no *outer slot* ou em ambos, do qual se conclui que a melhor configuração para manter a chama estável e reduzir as emissões de NO_x é a adição de hidrogénio no *inner slot*. No entanto, para diminuir as emissões de CO_2 concluiu que a melhor configuração é a introdução de hidrogénio em ambos os *inlets*. Deste modo, na presente dissertação idealmente deveria ser considerado apenas a adição de hidrogénio no *inner slot*. Contudo, dado a limitações do programa, apresentadas no Subcapítulo 2.7, será feito o estudo para a adição de hidrogénio em ambos os *inlets*, *inner slot* e *outer slot*.

Para a queima de misturas de CH_4 e H_2 tem-se como objetivo obter os seguintes resultados:

- Campos de Temperatura
- Campos de Frações Mássicas de elementos químicos e radicais livres

Dada a elevada complexidade do estudo que se pretende efetuar e os recursos computacionais disponíveis, tem-se como objetivo que a presente dissertação possa servir de base para futuros estudos e/ou, possa ser dada continuidade à mesma caso não seja possível atingir todos os objetivos propostos.

CASO DE ESTUDO

2.1 Domínio computacional

Como descrito anteriormente, o queimador em estudo não apresenta câmara de combustão. Rahimi et al., 2023 apresentam um domínio computacional no qual não está definido o comprimento dos *inlets*, mas que define na saída do queimador um domínio cilíndrico tridimensional de 200 mm de diâmetro e 300 mm de comprimento. Rahimi et al., 2023 apresentam campos de temperatura através das simulações numéricas para o caso de pré-mistura em estudo. Estes são apresentados na Figura 2.1.

Da Figura 2.1 é de fácil percepção que, ao adicionar hidrogénio, em qualquer um dos *inlets*, apenas no *inner slot* (caso "S1"), apenas no *outer slot* (caso "S2"), ou em ambos os *inlets*, *inner slot* e *outer slot* (caso "BS") nas figuras, a chama tem uma dimensão superior e com zonas de temperatura mais elevada e mais acentuadas. O aumento da dimensão da chama sugere que o domínio computacional definido por Rahimi et al., 2023 para o problema possa não conseguir responder corretamente ao adicionar mais do que 40% de hidrogénio. No presente estudo será considerado a adição de combustível nos *inlets inner slot* e *outer slot*. Deste modo, e de forma a tentar garantir que as condições de fronteira aplicadas não têm influência na resolução do problema, na presente dissertação o domínio computacional foi estendido até aos 500 mm, mantendo os 200 mm de raio. Contudo, estender apenas o domínio computacional não permite validar com certeza a influência das condições de fronteira na correta resolução do problema em estudo, deste modo, será realizada no Subcapítulo 2.2.4 uma comparação com a teoria de jatos livres para o problema sem chama. Esta serve para validar que o escoamento sem chama se comporta como a teoria de jato livre, e que é plausível de ser aceite o domínio computacional. Dado que Rahimi et al., 2023 não definiram de forma clara um comprimento para o domínio computacional nos *inlets*, foi definido 150 mm. Sendo esta medida 10 vezes superior ao diâmetro hidráulico dos *inlets*, o escoamento deverá estar completamente desenvolvido ao sair do queimador.

O caso de estudo na presente dissertação poderá ser modelado com a construção de uma malha tridimensional no programa *ANSYS FLUENT 18.2*. Contudo, uma vez que

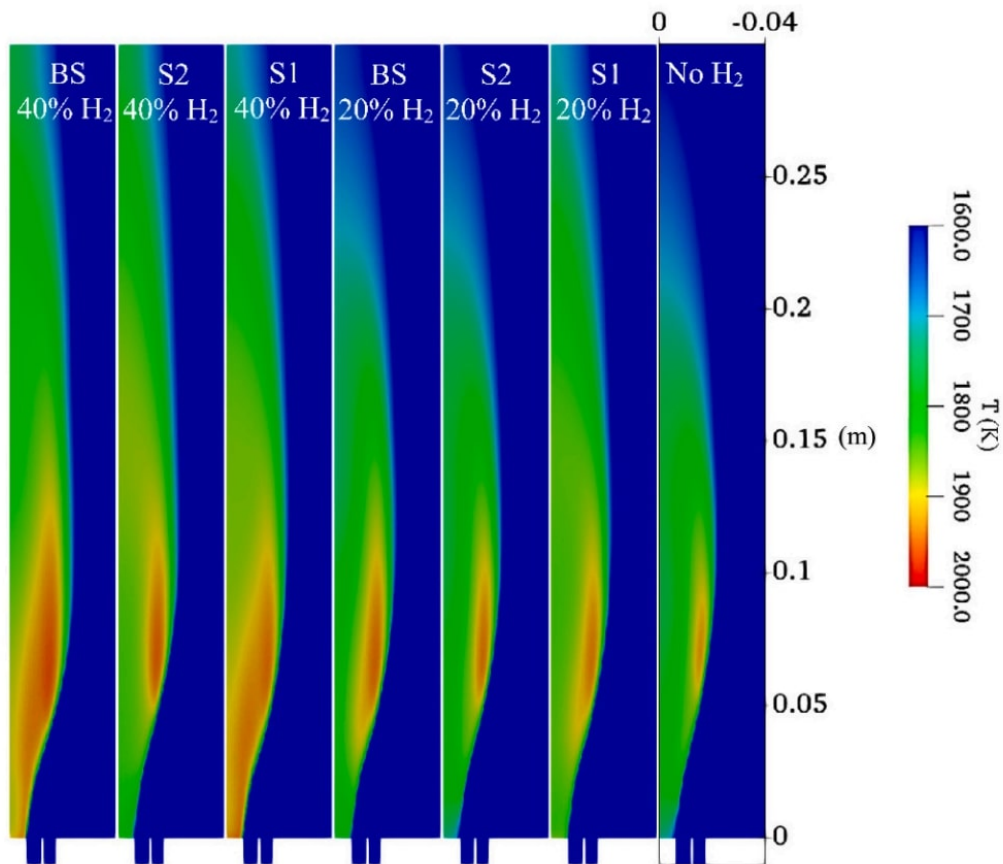


Figura 2.1: Resultado numérico de Rahimi et al., 2023 para o campos de temperatura para o caso sem *swirl*. (Rahimi et al., 2023).

o queimador é axissimétrico, o programa *ANSYS FLUENT 18.2* possui uma ferramenta que permite a construção de uma malha bidimensional e ao definir o eixo de revolução, permite realizar a simulação para um caso axissimétrico. Na presente dissertação será realizado um estudo comparativo entre os casos bidimensionais e tridimensionais para o caso sem reação química e, por consequente, sem combustão. Este estudo comparativo será apresentado em conjunto com o estudo de independência de malha, apresentado no Subcapítulo 2.4 e 3.3.

2.1.1 Casos tridimensionais

O domínio computacional utilizado para a construção dos casos tridimensionais é apresentado na Figura 2.2.

Para facilitar a construção e alteração da malha e garantir que a mesma está estruturada, os *inlets* do queimador foram divididos em duas partes, sendo esta divisão feita a 50 mm do seu início. Pela mesma razão, após a saída do queimador, o domínio computacional foi dividido em cinco secções de igual dimensão, com 100 mm de comprimento. Na Figura 2.3 é possível ver o domínio computacional dividido segundo a direção longitudinal.

Na direção tangencial, o queimador foi dividido em quatro quadrantes. Na direção

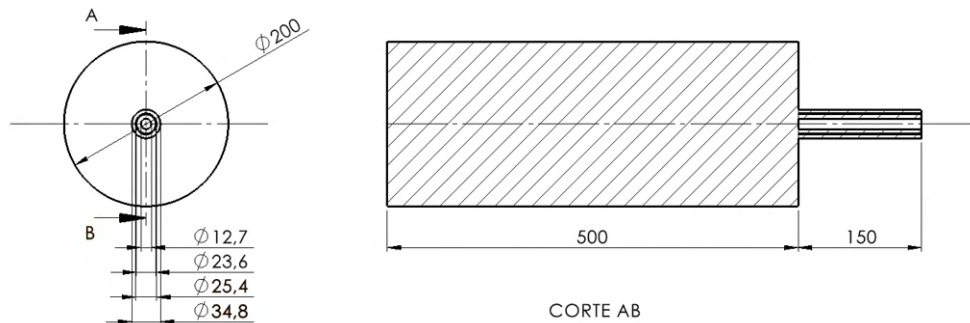


Figura 2.2: Domínio computacional utilizado na presente dissertação para os casos tridimensionais.

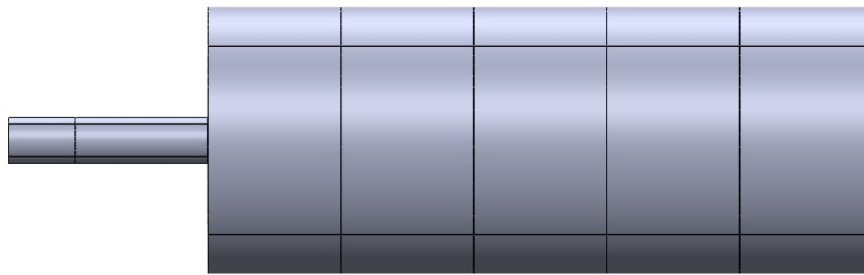


Figura 2.3: Vista lateral do domínio computacional para os casos tridimensionais.

radial foram utilizadas as paredes do queimador como referência para separar o restante domínio na zona central. Junto às paredes exteriores do domínio computacional (200 mm de diâmetro), o domínio foi dividido a 10 mm da parede. Desta forma, é possível garantir uma zona junto dos limites do domínio onde os elementos de malha estão mais refinados. Esta discretização dos elementos junto aos limites do domínio computacional permitirá que os resíduos sejam inferiores e com menores flutuações, garantido assim resultados mais estáveis e, portanto, melhores.

Na Figura 2.4 é possível observar o domínio computacional dividido segundo as direções radial e axial.

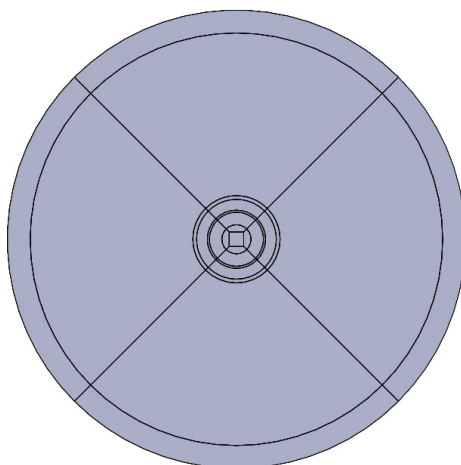


Figura 2.4: Vista de topo do domínio computacional para os casos tridimensionais.

2.1.2 Casos bidimensionais

O domínio computacional para os casos bidimensionais apresenta-se em tudo idêntico aos casos tridimensionais. Para a obtenção do mesmo, basta realizar um meio corte num caso tridimensional sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional. Dado que, para a definição dos casos bidimensionais, o programa *ANSYS FLUENT 18.2* realiza uma revolução, (360°), sobre o eixo de revolução do domínio computacional, apenas é necessário um meio corte.

Na Figura 2.5 é apresentado o domínio computacional para os casos bidimensionais.

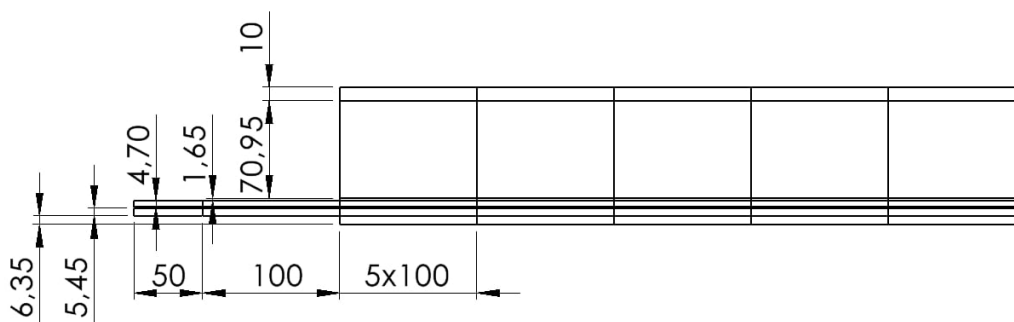


Figura 2.5: Representação do domínio computacional para os casos bidimensionais. Em milímetros.

Para a construção do domínio computacional para os casos bidimensionais foram realizadas as mesmas divisões de domínio que nos casos tridimensionais, isto porque, mantém-se o interesse em ter zonas junto aos limites exteriores do domínio com elementos de malha mais refinados. A divisão segundo a direção axial permite construir malhas estruturadas e com diferentes refinamentos segundo esta direção.

2.2 Condições de fronteira

Como referido anteriormente, foi realizada uma comparação entre a simulação do problema com uma malha bidimensional ou com uma malha tridimensional dado este problema é axissimétrico. Após apresentadas as dimensões do domínio computacional para cada um dos casos, serão apresentadas as condições de fronteiras aplicadas.

2.2.1 Casos tridimensionais

As paredes do queimador foram definidas como *wall* no programa comercial *ANSYS FLUENT 18.2*, e definidas sem escorregamento e com a opção *standard* para a rugosidade. Não foram alterados parâmetros da rugosidade das paredes dado que não é do interesse do tema da dissertação o estudo do escoamento sobre estas paredes, dado que a mesma incide sobre a queima exterior ao queimador. O comprimento dos *inlets*, dez vezes superior ao diâmetro hidráulico dos mesmos, garante que o escoamento se desenvolve no interior dos mesmos. Na Figura 2.6 são destacadas a vermelho as superfícies que foram definidas com a condição *wall* para os casos tridimensionais, sendo as mesmas as paredes do queimador.

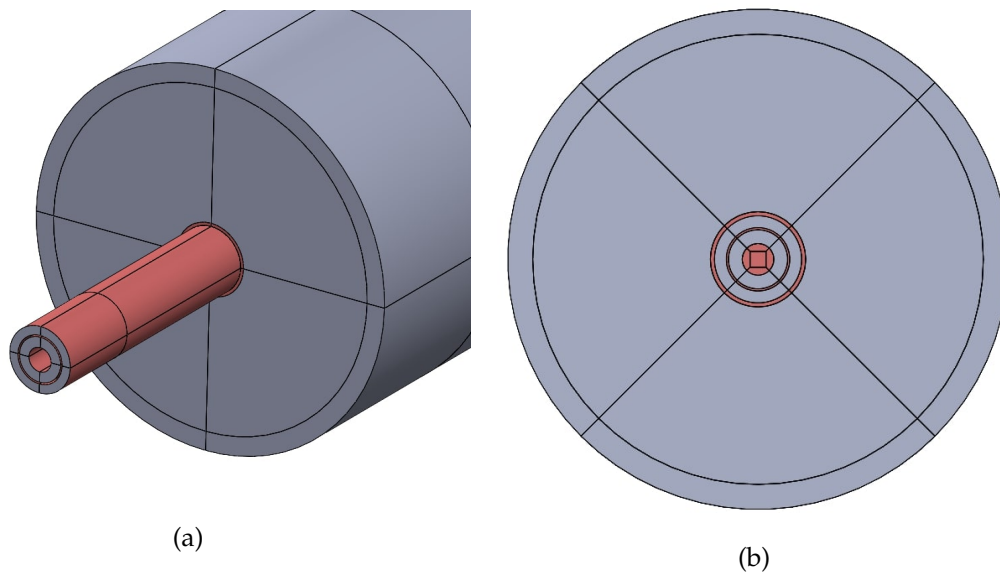


Figura 2.6: a) Paredes do queimador destacadas a vermelho; b) Vista de baixo do queimador, destaque para as paredes do queimador a vermelho.

O topo do domínio computacional foi definido com a condição de *pressure outlet*. Esta condição foi definida com *Gauge Pressure* = 0 dado que a pressão é igual à pressão atmosférica. O domínio computacional após a saída do queimador deve ser definido como não possuindo paredes (por não existir câmara de combustão), ou seja, as condições devem refletir apenas a existência de ar. Sendo a direção do escoamento dos *inlets*, entradas, para o *outlet*, saída, definida como a face oposta aos *inlets*. Na Figura 2.7 é apresentado a face *outlet* com a condição de *pressure outlet*.

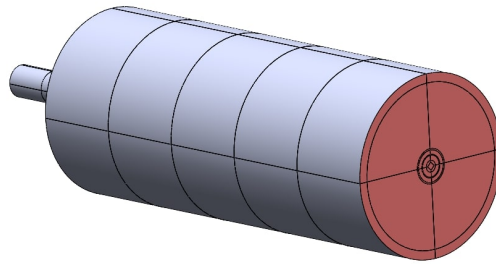


Figura 2.7: Face de saída do domínio computacional, *outlet*, destacada a vermelho, onde foi aplicado a condição de *pressure outlet*.

As laterais do domínio computacional após a saída do queimador, definidas a vermelho na Figura 2.8, devem conter uma condição de fronteira que represente um sistema aberto, dado que não existe câmara de combustão.

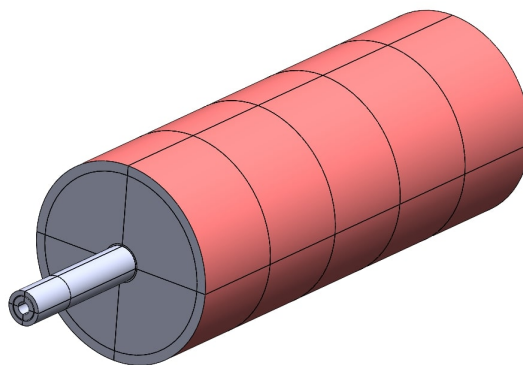


Figura 2.8: Condição de *pressure inlet* aplicada nas faces laterais do domínio computacional após o queimador destacadas a vermelho.

Rahimi et al., 2023 definiram as laterais do domínio computacional como *far-field*. O programa *ANSYS FLUENT 18.2* contém uma opção similar, *Pressure far-field*. Contudo, esta pede como condição de fronteira o número de *Mach*. Como não são conhecidas as velocidades do fluido através desta fronteira, não foi possível utilizar esta condição de fronteira. Em oposição, dado que se sabe que a pressão deverá ser igual à pressão atmosférica a definição desta fronteira poderá ser feita com a opção *Pressure inlet* ou *Pressure outlet*. O programa *ANSYS FLUENT 18.2* com estas condições apenas respeita que à pressão será igual a pressão atmosférica, permitindo que ao longo da parede o fluido escoe com velocidades diferentes. Deste modo, é conseguida uma alimentação dos jatos que não está restrita pela condição de fronteira. No Subcapítulo 3.1, é apresentado um estudo comparativo entre a opção *Pressure inlet* ou *Pressure outlet*. Por estarmos a simular a combustão com ar seco, apenas O_2 e CO poderá atravessar estas paredes. Deste modo e como a pressão é igual à pressão atmosférica, foi definido que *Gauge Pressure* = 0. Dado que só ar seco pode atravessar esta zona do domínio, foi definido que, por simplificação,

apenas atravessa O_2 com uma fração molar de 0,21 e CO com uma fração molar de 0,79.

Por fim, para definir as restantes paredes do domínio computacional é ainda necessário definir as condições de fronteira nos *inlets*. Na Figura 2.9 é apresentada a localização de cada um dos *inlets*, a vermelho o *coflow*, a azul o *outer slot* e a verde o *inner slot*.

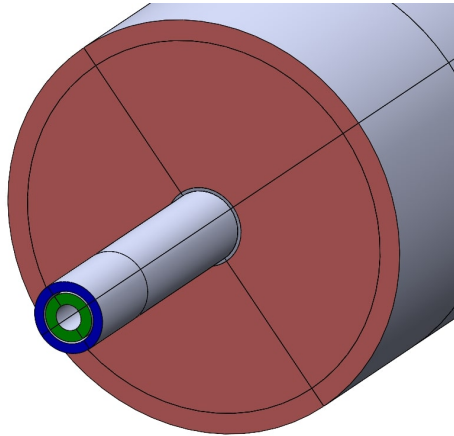


Figura 2.9: *Inlet coflow* destacado a vermelho. *Inlet outer slot* destacado a azul. *Inlet inner slot* a verde.

2.2.2 Casos bidimensionais

Para a definição das condições de fronteira para o caso bidimensional há que ter em consideração que as mesmas devem ser idênticas para o caso tridimensional. A maior diferença apresenta-se na linha central, coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional, que no caso bidimensional se apresenta como uma condição de fronteira do domínio. O programa *ANSYS FLUENT 18.2*, para a correta definição de um caso axissimétrico, obriga à definição do eixo de revolução com a condição *axis*, eixo, sendo esta a única condição que não aparece nos casos tridimensionais. Na Figura 2.10 é possível observar as condições de fronteira definidas para os casos bidimensionais.

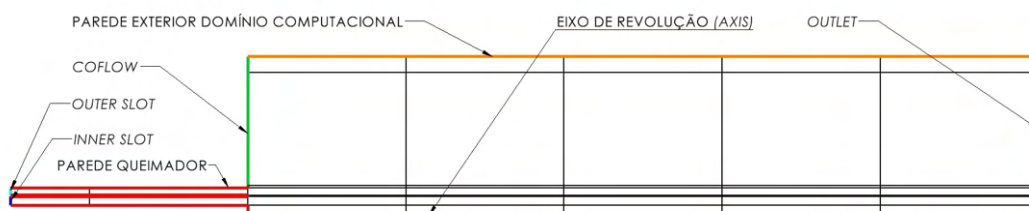
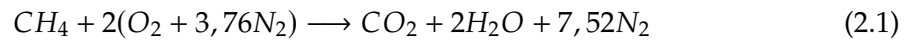


Figura 2.10: Localização e definição das condições de fronteira do domínio computacional para os casos bidimensionais.

2.2.3 Propriedades das condições de fronteira de entrada de fluido

Como referido, todas as condições de fronteira foram definidas da mesma maneira para os casos tridimensionais e bidimensionais.

Para calcular as frações molares de O_2 e CO que atravessam as laterais do domínio computacional, foi utilizado, a reação definida na Equação 2.1, retirada Raghavan, 2016, sendo a mesma que o programa *ANSYS FLUENT 18.2* utiliza para o seu modelo de uma reação. Este é um modelo representa a reação estequiométrica (oxidação total) de CH_4 . Simplificando, por não existir CH_4 a entrar nesta zona do domínio, a fração molar, x_i de O_2 e CO é dada pelas Equações 2.2 e 2.3 respetivamente. Nas equações, n_i , corresponde ao número de moles de O_2 e CO .



$$x_{O_2} = \frac{n_{O_2}}{n_{O_2} + n_{N_2}} = \frac{2}{2 + 3,76 \cdot 2} = 0,21 \quad (2.2)$$

$$x_{N_2} = \frac{n_{N_2}}{n_{O_2} + n_{N_2}} = \frac{2 \cdot 3,76}{2 + 3,76 \cdot 2} = 0,79 \quad (2.3)$$

No *inlet coflow* apenas é injetado ar a uma velocidade de 0,4 m/s. Por outro lado, nos *inlets inner slot* e *outer slot* é injetado combustível com uma razão de equivalência (ϕ) de 0,75. A velocidade de injeção no *inner slot* é de 8,31 m/s, enquanto que no *outer slot*, por conter *swirl*, contém componentes, segundo a direção axial e tangencial de 18,7 m/s e 8,415 m/s respetivamente.

Nos *inlets*, para a definição da turbulência, foram ainda definidos o diâmetro hidráulico, D_H , dos *inlets* e a intensidade turbulenta, I . A intensidade turbulenta segundo «ANSYS Fluent Users Guide», 2013 pode ser determinada pela Equação 2.4.

$$I \equiv 0,16 \cdot (Re_{D_H})^{-1/8} \quad (2.4)$$

O número de Reynolds, Re , para o diâmetro hidráulico, é dado pela Equação 2.5 onde V , é a velocidade, D_H o diâmetro hidráulico, ρ a densidade e μ a viscosidade dinâmica do fluido.

$$Re_{D_H} = \frac{\rho V D_H}{\mu} \quad (2.5)$$

O diâmetro hidráulico, D_H , de uma secção anelar é definido pela Equação 2.6, e é dado pela diferença entre o diâmetro exterior, $D_{exterior}$, e o diâmetro interior, $D_{interior}$.

$$D_H = D_{exterior} - D_{interior} \quad (2.6)$$

Foi considerado, por simplificação, que ρ e μ são valores para um escoamento de ar seco nas condições atmosféricas, 1 atm a 20 °C. Os valores foram retirados da Tabela A.4 de White, 2011, $\rho = 1,2 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ Ns/m}^2$.

Tabela 2.1: Parâmetros para modelação da turbulência para os *inlets*.

	<i>inner slot</i>	<i>outer slot</i>	<i>coflow</i>
Diâmetro hidráulico, D_H mm	10,9	9,4	161,9
Velocidade axial injeção, V m/s	8,31	18,7	0,4
Velocidade tangencial injeção, V m/s	0	8,415	0
Intensidade turbulenta, I (%)	5,31	4,90	5,62

Para a correta definição das condições dos *inlets*, resta apenas definir as frações molares de CH_4 , O_2 e CO para cada um dos *inlets* sabendo que o presente estudo incide sobre um queimador com pré-mistura e tem um razão de equivalência, ϕ , de 0,75.

O razão de equivalência, (ϕ) é definido por Speight, 2020 na Equação 2.8.

$$\phi = \frac{\text{fuel-to-oxidizer ratio}}{(\text{fuel-to-oxidizer ratio})_{st}} = \frac{m_{fuel}/m_{ox}}{(m_{fuel}/m_{ox})_{st}} = \frac{n_{fuel}/n_{ox}}{(n_{fuel}/n_{ox})_{st}} \quad (2.7)$$

Da equação 2.1 é possível concluir que, estequiometricamente, o número de moles, n_i de CH_4 é igual a 1 mol e o número de moles de oxidante, é igual ao número de moles de O_2 mais o número de moles de CO , logo 9,52 mol.

Através da Equação 2.8 e da Equação 2.1, sabendo que $\phi = 0,75$ em todos os *inlets* obtém-se

$$0,75 = \phi = \frac{n_{fuel}/n_{ox}}{(n_{fuel}/n_{ox})_{st}} = \frac{\frac{n_{CH_4}}{n_{O_2} + n_{N_2}}}{\left(\frac{n_{CH_4}}{n_{O_2} + n_{N_2}}\right)_{st}} \Leftrightarrow \frac{n_{CH_4}}{n_{O_2} + n_{N_2}} \approx 0,079 \quad (2.8)$$

Sabendo que o oxidante corresponde a ar seco, das Equações 2.3 e 2.2, obtém-se que no ar seco 21% corresponde a oxigénio e o restante a nitrogénio. Pode, então, da Equação 2.1 concluir-se a seguinte relação:

$$n_{N_2} = 3,76n_{O_2} \quad (2.9)$$

Através da Equação 2.8 e 2.9, pode calcular-se as frações molares de CH_4 , O_2 e CO para o *inner slot* e *outer slot*. Para o *coflow*, dado só existir ar, as frações molares são consideradas as das Equações 2.3 e 2.2.

$$x_{CH_4} = \frac{n_{CH_4}}{n_{CH_4} + n_{O_2} + n_{N_2}} = \frac{n_{CH_4}}{n_{CH_4} + (n_{CH_4}/0,079)} \approx 0,073 \quad (2.10)$$

$$x_{O_2} = \frac{n_{O_2}}{n_{CH_4} + n_{O_2} + n_{N_2}} = \frac{n_{O_2}}{1,079 \cdot n_{O_2} + 1,079 \cdot 3,76 \cdot n_{O_2}} \approx 0,195 \quad (2.11)$$

$$x_{N_2} = 1 - (x_{CH_4} + x_{O_2}) \quad (2.12)$$

Dependendo do método que é utilizado para modelar a combustão no lugar das frações molares, será vantajoso saber o rácio ar para combustível *Air-to-fuel ratio* (AFR). O mesmo pode ser calculado através da Equação 2.13, utilizando as massas molares de cada componente, M_i .

$$AFR = \frac{mass_{ar}}{mass_{fuel}} = \frac{n_{O_2} \cdot M_{O_2} + n_{N_2} \cdot M_{N_2}}{n_{CH_4} \cdot M_{CH_4}} \approx 17,121 \quad (2.13)$$

Sabendo o rácio de ar para combustível, pode ser determinado, a fração de mistura, *mixture fraction*, f , que segundo «ANSYS Fluent Users Guide», 2013 é dada por:

$$f = \frac{\phi}{\phi + AFR} = \frac{0,75}{0,75 + 17,12} \approx 0,042 \quad (2.14)$$

A adição de hidrogénio no estudo de Rahimi et al., 2023 foi feita com base em percentagens volúmicas de combustível. Deste modo, para garantir a coerência dos resultados, esta lógica foi mantida na presente dissertação. Ou seja, a referencia à adição de 20% de hidrogénio corresponde a um volume de combustível de 20% de hidrogénio e 80% de metano. Deste modo, a fração volúmica, Y_i , de hidrogénio define-se pela Equação 2.15.

$$Y_{H_2} = \frac{V_{O_{H_2}}}{V_{O_{H_2}} + V_{O_{CH_4}}} \quad (2.15)$$

Considerando CH_4 e H_2 pode ser utilizada a equação dos gases ideais, Equação 2.16, onde o número de moles é dado por n_i , a pressão por P , o volume de cada elemento por V_0 , a temperatura T e por fim a constante dos gases ideais R . A pressão, temperatura e a constante dos gases ideais são iguais para ambas as espécies químicas pelo que, utilizando a Equação 2.16 na Equação 2.15, conclui-se que a fração volúmica é igual à fração molar.

$$n = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} \quad (2.16)$$

Dado que a introdução de misturas de hidrogénio não altera o razão de equivalência, ϕ , do problema, resta definir as frações molares, o *Air-to-fuel ratio* (AFR) e a *mixture fraction* (f) para cada caso. Deste modo, será deixada em ordem à fração molar, x_i , de hidrogénio.

$$Y_{H_2} = \frac{V_{H_2}}{V_{H_2} + V_{CH_4}} = \frac{\left(\frac{R \cdot T}{P}\right) \cdot n_{H_2}}{\left(\frac{R \cdot T}{P}\right) \cdot (n_{H_2} + n_{CH_4})} = \frac{n_{H_2}}{n_{CH_4} + n_{H_2}} = x_{H_2} \quad (2.17)$$

O parâmetro *Air-to-fuel ratio* em função da fração molar de hidrogénio é apresentado na Equação 2.18. Substituindo as massas molares de cada componente na Equação 2.18 pode ser calculada a *mixture fraction* (f), Equação 2.19 em função também da fração molar, x_i de hidrogénio.

$$AFR = \frac{mass_{ar}}{mass_{fuel}} = \frac{((n_{O_2} \cdot x_{CH_4}) + (n_{O_2} \cdot x_{H_2})) \cdot M_{O_2} + n_{N_2} \cdot x_{CH_4} \cdot M_{N_2}}{n_{CH_4} \cdot x_{CH_4} \cdot M_{CH_4} + n_{H_2} \cdot x_{H_2} \cdot M_{H_2}} \quad (2.18)$$

$$f = \frac{\phi}{\phi + AFR} = \frac{0,75}{0,75 + AFR} \Leftrightarrow f = \frac{0,75}{0,75 + \frac{242,56 - 212,06 \cdot x_{H_2}}{16 - 14 \cdot x_{H_2}}} \quad (2.19)$$

2.2.4 Comparação com teoria de jato livre

Para garantir que a definição do problema e as condições de fronteira estão corretamente aplicadas e representam corretamente o comportamento físico de jatos axissimétricos, propõem-se a comparação dos resultados com teorias de jatos turbulentos axissimétricos. Vaz, 2007, na sua dissertação de doutoramento, utilizou conceitos da teoria indutiva de turbulência de Reichardt, 1943 e o estudo comparativo de diversas teorias de turbulência de Reichardt, 1943 para, analiticamente, descrever um jato turbulento livre e circular.

Na Figura 2.11, retirada de Vaz, 2007, são apresentadas as linhas de corrente para um jato turbulento livre centrado sobre um ponto a um raio, r , e num plano $z = 0$.

Conclui-se que as linhas de corrente que alimentam o jato são perpendiculares ao seu eixo quando afastadas do mesmo.

Para que o domínio computacional escolhido no presente estudo seja considerado válido e para avaliar as condições de fronteira definidas, devem ser traçadas as linhas de corrente para um caso sem combustão e perceber até que zona do domínio as condições de fronteira não influenciam o resultado. Os resultados de Vaz, 2007 são válidos para um jato circular. Contudo, na presente dissertação, se for desprezada a zona inicial que está influenciada pelo *inlet coflow*, os *inlets inner slot* e *outer slot* (de onde sai combustível) por possuírem uma configuração anelar, é esperado que tomem o mesmo comportamento que um jato circular, numa zona afastada da saída dos mesmos como o apresentado na Figura 2.11.

No Subcapítulo 3.5 serão apresentados os resultados da presente dissertação para um caso sem combustão e será feita a comparação com os resultados de Vaz, 2007.

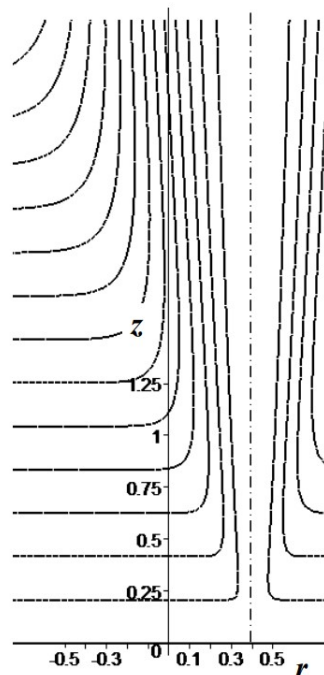


Figura 2.11: Linhas de corrente para um jato circular turbulento livre. (Vaz, 2007).

2.3 Modelos de turbulência

Como descrito no Subcapítulo 1.2.3.1, o modelo Modelo $K - \omega$ e particularmente o modelo Modelo $K - \omega SST$, apresenta diversas vantagens em relação ao Modelo $k - \varepsilon$, sendo mais adequado quando se procura resolver problemas de camada limite em que a interação fluido-estrutura é de interesse. No caso da presente dissertação, é mais relevante o estudo do escoamento exterior fora do queimador. Contudo, o Modelo $K - \omega SST$ foi utilizado por Rahimi et al., 2023.

Dado já ter sido provado anteriormente a validade do Modelo $k - \varepsilon$ e do Modelo $k - \varepsilon Realizable$ para o estudo de queimadores, nomeadamente em dissertações anteriores orientadas pelo Núcleo de Mecânica dos Fluidos e Termodinâmica Aplicada da Nova School of Science and Technology, particularmente na de Gameiro, 2020 e na de Ferreira, 2021. Na presente dissertação realizou-se um estudo comparativo entre o Modelo $K - \omega SST$ e o Modelo $k - \varepsilon$ e o Modelo $k - \varepsilon Realizable$ apresentado no Subcapítulo 3.2.

2.4 Estudo de independência de malha

A modelação de escoamentos, por ser regida pelas equações de *Navier-Stokes*. Estas são equações diferenciais de elevada complexidade e sem solução determinística, que para a sua forma mais genérica de resolução carecem de simplificações ou de um método iterativo. Realizar um método iterativo para um problema complexo é impossível sem o recurso a simulações numéricas. Estas resolvem os campos de escoamento com base nos resultados de iterações anteriores. Quando o resultado da iteração seguinte é considerado igual ao da anterior, diz-se que a solução convergiu para um valor.

Para resolver os campos de escoamento, através de simulações numéricas, é necessário discretizar o domínio computacional, ou seja, é necessário dividir o domínio em elementos de menor dimensão. Quanto menor o tamanho do elementos, mais elementos estarão presentes no domínio e com isso o tempo de computação será superior. No entanto, a solução ficará mais próxima do resultado real.

É necessário realizar um estudo de independência de malha, onde todos os parâmetros são mantidos constantes exceto o tamanho dos elementos. Pretende-se concluir a partir de que número de elementos (descretização do domínio) o resultado deixa de ser alterado. Escolhe-se a malha com menor número de elementos que garanta o mesmo resultado que malhas mais descretizadas.

No Subcapítulo 3.3 será apresentado o estudo de independência de malha.

2.5 Parâmetros de qualidade da malha escolhida

Escolhida uma malha, devem ser apresentados os parâmetros relativos à construção e qualidade da mesma. Estes serão apresentados no Subcapítulo 3.4. Serão apresentados a ortogonalidade, a distorção e o rácio de crescimento dos elementos da malha. Não será

analisado o parâmetro y^+ , dado que não é do interesse o estudo da interação fluido-estrutura, mas sim, como a chama se desenvolve no interior do domínio computacional após a saída do queimador.

O parâmetro ortogonalidade dos elementos é um parâmetro adimensional que avalia o desvio entre o ângulo que liga os centroides de dois elementos adjacentes e o vetor normal à superfície dos mesmos. Este toma valores entre 0 e 1, sendo que se os elementos adjacentes forem cúbicos o valor deste parâmetro deverá ser igual a 1, valor ótimo.

O segundo parâmetro, a distorção dos elementos, avalia o desvio entre o vetor que liga os centroides de dois elementos adjacentes e o vetor que ligas as faces opostas dos mesmos elementos adjacentes. Se os elementos forem cúbicos e com as mesmas dimensões não ocorre distorção, pelo que o valor deste parâmetro deverá ser igual a zero. O parâmetro distorção dos elementos é também um parâmetro adimensional que toma valores entre 0 e 1.

O terceiro parâmetro analisado será o rácio de crescimento dos elementos. Este reflete a forma geométrica dos elementos, realizando o rácio entre o lado maior e o lado menor. Quando os elementos são um cubo, todos os lados têm exatamente a mesma dimensão, logo este toma o seu valor ótimo, 1.

2.6 Modelos de reação química

Para a modelação da combustão é necessário definir primeiro quais são os modelos de reação química que devem ser utilizados, ou seja, devem ser definidas as reações químicas que poderão ocorrer e a probabilidade das mesmas ocorrerem. Primeiramente, deverá ser modelada a combustão de apenas CH_4 e apenas depois dos resultados estarem comprovados com as simulações e os resultados experimentais apresentados por Rahimi et al., 2023, deverá ser feita a adição de hidrogénio. Deste modo, em primeiro lugar, devem ser considerados os modelos de reação de metano com o ar.

Como apresentado no Subcapítulo 2.2.3, o programa *ANSYS FLUENT 18.2* contém um modelo de reação metano-ar muito simples de apenas uma reação. É expectável que com este modelo as simulações sejam rápidas dado a modelação de reação química ser muito simples. O programa *ANSYS FLUENT 18.2* possui ainda outro modelo, também de baixa complexidade, onde são usadas três reações químicas, onde duas delas fazem referencia à formação e decomposição de CO_2 («ANSYS Fluent Users Guide», 2013), (Gameiro, 2020) («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009).

Apesar de não estarem disponíveis mais modelos previamente já implementados no programa *ANSYS FLUENT 18.2*, diversos autores desenvolveram modelos de reação química para a modelação do problema de reação CH_4 -ar. Sankaran et al., 2007, Lu e Law, 2008 Luca et al., 2017, Cazères et al., 2021, Laurent, 2020 apresentam modelos para a reação CH_4 - ar sendo todos eles simplificações do modelos GRI-Mech3.0.

O programa *ANSYS FLUENT 18.2* não inclui um mecanismo que conjugue uma reação H_2 - CH_4 -ar, e apenas conta com um mecanismo simples de uma reação para a reação de

H₂ e ar.

Autores como Boivin, 2011 ou Mueller et al., 1999 apresentam mecanismos mais complexos para a modelação do problema hidrogénio-ar, com 12 e 21 reações respetivamente.

Rahimi et al., 2023 no seu trabalho, ao qual a presente dissertação pretende dar continuidade, utiliza um modelo com 57 reações para a modelação do problema metano-ar-hidrogénio o qual foi deduzido de um mecanismo mais complexo. Contudo, não são apresentados os dados necessários para a direta adição do modelo utilizado no programa *ANSYS FLUENT 18.2*. Deste modo, não foi utilizado o mesmo modelo químico que Rahimi et al., 2023 pois, para o utilizar, seria necessário realizar a decomposição, como feito por Rahimi et al., 2023, de outro modelo mais complexo. Esta decomposição implicaria uma compreensão profunda do modelo, de todas as reações que estão presentes, nomeadamente das probabilidades de cada reação ocorrerem.

Através de CERFACS, 2023, estão disponíveis diversos modelos de reação química, sendo que os modelos de CH₄- ar disponíveis têm por base e utilizam parte das reações dos modelo GRI-Mech 2.11, apresentado em Bowman et al., 1997 ou GRI-Mech 3.0, apresentado em Smith et al., s.d.

Tanto os modelos GRI-Mech 2.11 como o GRI-Mech 3.0, respondem ao problema da combustão de metano, hidrogénio e ar, e estão disponíveis para serem introduzidos diretamente no programa *ANSYS FLUENT 18.2* através dum ficheiro *CHEMKIN*. O modelo GRI-Mech 2.11 contempla 279 reações e 49 espécies químicas. O modelo GRI-Mech 3.0 apresenta 325 reações e 53 espécies químicas, sendo este modelo uma versão atualizada e melhorada do modelo GRI-Mech 2.11. Dada a elevada complexidade ambos os modelo são capazes de modelar a formação de NO_x. (CERFACS, 2023). Após duas simulações onde se comparou o tempo de simulação dos dois modelos, concluiu-se que os tempos estão dentro da mesma ordem de grandeza, contudo, o modelo GRI-Mech 2.11 apresentou-se mais rápido a convergir. Ou seja, o aumento de complexidade do modelo GRI-Mech 3.0 em relação ao GRI-Mech 2.11, fez aumentar o tempo de simulação, como era expectável.

Deste modo, dado que as melhorias do modelo GRI-Mech 3.0 não são significativas o suficiente para o estudo que se pretende efetuar, e dado que o tempo de simulação é ligeiramente superior, escolheu-se o modelo GRI-Mech 2.11, que é também amplamente utilizado.

2.7 Modelos de combustão

O programa *ANSYS FLUENT* tem capacidade de resolver problemas de escoamentos com interação química de diversas maneiras. Cada uma apresenta as suas vantagens e limitações.

Primeiramente, é possível utilizar o módulo *Species Transport*, que resolve as equações de conservação para as espécies químicas ao ativar a função *Reactions: Volumetric*. Este módulo prevê a fração mássica de cada espécie de forma individual, através da solução de convecção-difusão («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009). Através deste módulo, é

possível utilizar os modelos pré disponíveis pelo programa *ANSYS FLUENT 18.2* ou carregar um modelo químico no formato *CHEMKIN* ficando disponíveis as seguintes opções para a modelação química-turbulenta:

- *Finite Rate/ No TCI*
- *Finite Rate / Eddy dissipation*
- *Eddy dissipation*
- *Eddy dissipation concept*

Os modelos laminares *Finite-Rate* desprezam as flutuações turbulentas e as taxas de reação são determinadas pelas expressões cinéticas de Arrhenius («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009).

Já os modelos *Eddy dissipation* assumem que as taxas de reação são controladas pela turbulência, evitando assim o cálculo das expressões de cinética química de Arrhenius. Apesar deste modelo ter um custo computacional baixo, só apresenta bons resultados se forem utilizados modelos com uma ou duas reações químicas. «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009 Esta limitação prende-se com o facto deste modelo considerar apenas uma escala de tempo para as reações, e em modelos de reação mais complexos diferentes reações ocupam diferentes escalas de tempo.

Por último, o modelo *Eddy Dissipation Concept (EDC)* incorpora a cinética química de Arrhenius em chamas turbulentas. Contudo, apresenta um elevado custo computacional.

O tipo de chama, laminar ou turbulenta, é um fator decisivo no modelo a utilizar, deste modo para determinar o tipo de chama, foi necessário determinar o número de Reynolds (*Re*) para o queimador. Dado os resultados experimentais e numéricos apresentados por Rahimi et al., 2023, conclui-se que a chama terá um diâmetro máximo, *D*, aproximado de 38,1 mm coincidente com o diâmetro do queimador. A velocidade, *V*, registada ao traçar uma linha coincidente com o eixo de revolução do queimador será de aproximadamente 8,5 m/s sendo este o valor para o cálculo do número de Reynolds. Resta apenas determinar a densidade, ρ , e a viscosidade dinâmica, μ , para o cálculo do número de Reynolds (*Re*), que é dado pela Equação 2.20.

$$Re = \frac{\rho V D}{\mu} \quad (2.20)$$

No local da chama em que a velocidade é máxima, 8,5 m/s, a densidade nesse mesmo ponto da mistura é de $0,24 \text{ kg/m}^3$. Dado não ter sido possível retirar a viscosidade dinâmica, para o ponto de velocidade máxima, nem para a mistura de CH_4 e ar seco, e sabendo que para o ar seco a 20°C a mesma toma um valor de $1,8 \cdot 10^{-5}$ e para o metano a 20°C é de $1,1 \cdot 10^{-5}$, considerou-se o maior destes valores. Assim o valor de *Re* será o menor possível e, portanto, poderá ser avaliado o tipo de chama (laminar ou turbulenta).

Ao substituir na Equação 2.20, conclui-se que o valor do número de Reynolds será de 4318, ou seja, superior a 4 mil, não sendo portanto laminar.

Os modelos *Finite-Rate*, segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009, são apenas exatos para chamas laminares, sendo pouco precisos para chamas turbulentas devido à alta não linearidade das expressões de cinética química de Arrhenius. Deste modo, o primeiro modelo da lista apresentada não deve ser utilizado para o presente estudo.

Segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009, a opção *Finite-Rate / eddy dissipation* não deve ser utilizada por modelos que contenham mais de duas reações químicas, pois produzirá resultados incorretos. Tal acontece porque a componente deste modelo referente ao modelo *Eddy dissipation* apenas considera uma escala de tempo para as reações e em modelos mais complexos, existem várias escalas de tempo para as diversas reações. Para se utilizar um modelo químico mais complexo capaz de modelar a queima de CH₄ e que permita a incorporação de hidrogénio, o mesmo terá de conter mais de duas reações, tornando inviável a opção de usar o modelo *Finite-Rate / eddy dissipation*.

A utilização do modelo *Eddy dissipation*, limitada a modelos com reações com a mesma escala de tempo é possível para casos onde os combustíveis queimem rapidamente, podendo as taxas de reação ser controladas pela mistura turbulenta. Tal acontece em casos sem pré-mistura e com câmara de combustão, onde rapidamente o combustível e o comburente se misturam e ardem. Em casos com pré-mistura, dada a cinética do problema, a mistura entre fluido que está a arder e a mistura fria ainda sem arder demora mais tempo a ocorrer e, por isso, a combustão nestes casos denomina-se *mixing-limited* («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009). Neste modelo as taxas de reação químicas regem-se pelo conceito *large-eddy mixing time scale*, k/ϵ , e a combustão ocorre quando $k/\epsilon > 0$. Neste modelo não é necessário recorrer a uma fonte de ignição «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009. Por esta razão, é aceitável o uso deste modelo para casos sem pré-mistura, contudo, quando se aplica este modelo a casos com pré-mistura, ocorrerá a combustão assim que o combustível e comburente misturados entrem no domínio computacional, antes até do estabilizador de chama *bluff-body* («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009). Deste modo, dado que o caso em estudo tem pré-mistura, ocorrerá combustão dentro dos *inlets* a montante da face do queimador. Tal não acontece na realidade pelo que este modelo não deverá ser utilizado para o caso em estudo.

Por fim, para a utilização do módulo *Species Transport* resta apenas a opção do modelo *Eddy dissipation Concept* para a integração da turbulência química. Este modelo permite incluir mecanismos detalhados para chamas turbulentas, sendo uma extensão do mecanismo *Eddy dissipation*. No entanto, este modelo apresenta um elevado custo computacional, pelo que, só deve ser utilizado caso não exista outra maneira de modelar a interação química-turbulência. A utilização deste modelo permite ainda decidir entre a utilização de dois mecanismos para a resolução da química: *Stiff Chemistry Solver* ou *CHEMKIN-CFD Solver*. O *CHEMKIN-CFD Solver* apresenta-se como um mecanismo para resolver mecanismos químicos mais complexos («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009).

Outra opção ao uso do módulo *Species Transport* é a utilização do módulo *Premixed*

Combustion, no entanto o mesmo é limitado a problemas onde o razão de equivalência é igual para todos os *inlets*, o que não é verdadeiro para o caso do queimador em estudo («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009).

Dada a limitação do módulo *Premixed Combustion*, o programa ANSYS FLUENT 18.2 contém incorporado um módulo que permite diferentes razão de equivalência para diferentes *inlets*, o *Partially Premixed Combustion*.

Ao utilizar o módulo *Partially Premixed Combustion*, o programa disponibiliza dois tipos de modelos para o cálculo de problemas com pré-mistura parcial: *Thin Flamelet* e *Flamelet Generated Manifold(FGM)*. Ao utilizar os modelos do tipo *Thin Flamelet* ficam disponíveis dois tipos de modelos de pré-mistura: *C Equation* e *Extended Coherent Flame Model*. Ao utilizar o *Flamelet Generated Manifold(FGM)* apenas se podem utilizar modelos do tipo *C Equation*. Segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009, os modelos de pré-mistura do tipo *Extended Coherent Flame Model* apresentam um custo computacional superior ao modelos do tipo *C Equation*. Por esta razão, optou-se por utilizar os modelos do tipo *C Equation*.

Ao utilizar os modelos *C Equation*, ficam disponíveis os seguintes modelos de pré-mistura:

- *Peters*
- *Zimont*

Ao usar qualquer um dos modelos, deve ser utilizado, a opção *transport equation* dado ser mais adequada para a modelação *Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)*, enquanto que o modelo *algebraic* é mais adequado para simulações *Large Eddy Simulations (LES)* segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009.

Dado a falta de informação na literatura e nos manuais do software sobre as limitações e aplicabilidade destes modelos, foi realizado um estudo comparativo entre o modelo *Zimont* e *Peters*, apresentado no Subcapítulo 3.6. Deste concluiu-se que ambos apresentam resultados semelhantes e, como o modelo *Zimont* apresenta um menor custo computacional, mostra-se o ideal para ser utilizado na presente dissertação.

Para qualquer um destes modelos ficam disponíveis os seguintes modelos para a modelação química-turbulência:

- *Finite Rate*
- *Turbulent Flame Speed*
- *Finite-Rate/Turbulent Flame Speed*

Como referido anteriormente, segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009, o modelo *Finite Rate* por si só, apenas garante resultados exatos para chamas laminares. Já o modelo *Turbulent Flame Speed* tem a sua aplicabilidade restrita quando a menor escala turbulenta,

escala de *Kolmogorov* é menor que a espessura da chama. Este modelo tem ainda dificuldade em modelar chamas que se equilibrem e prolonguem por um longo período de tempo («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009). Deste modo, será utilizado o terceiro modelo, de modo a responder as limitações que os outros apresentam.

Para a modelação química, ao utilizar os modelos de pré-mistura do tipo *C Equation* ficam disponíveis as seguintes opções:

- *Chemical Equilibrium*
- *Steady Diffusion Flamelet*
- *Flamelet Generated Manifold (FGM)*

O modelo *Chemical Equilibrium* é aplicável para casos onde existe equilíbrio químico, não sendo o caso da presente dissertação uma vez que não é adicionado combustível no *inlet coflow* e que nos outros *inlets* é adicionado uma mistura de combustível e ar, deixando o caso de estar em equilíbrio químico.

O modelo *Steady Diffusion Flamelet* modela a estrutura da chama como um conjunto de chamas laminares discretas e constantes. Estas são chamadas de chamas de difusão. Segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009, é assumido que as chamas individuais de difusão apresentam a mesma estrutura de chamas laminares mais simples. Este modelo é limitado a chamas onde a mistura química é muito rápida, não sendo capaz de responder a modelação profunda de problemas que não estão em equilíbrio, a problemas de ignição, extinção e modelação lenta da química como por exemplo a modelação da formação de NO_x . («ANSYS Fluent Theory Guide», 2009)

O modelo *Flamelet Generated Manifold (FGM)* é significativamente diferente do modelo *Steady Diffusion Flamelet*, deixando de assumir que uma chama turbulenta é um conjunto de chamas laminares que possuem uma estrutura interna que não é alterada significativamente pela turbulência. O modelo *Steady Diffusion Flamelet* é caracterizado pela deformação, sendo que à medida que a taxa de deformação diminui em direção ao *outlet*, a termo-química do problema tende para o equilíbrio químico. Já o modelo FGM, não assume que as chamas têm de ser finas e consegue modelar a ignição e extinção da chama. Este modelo, segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009, é parametrizado pelo progresso da reação, contrariamente ao modelo *Steady Diffusion Flamelet*. Segundo «ANSYS Fluent Users Guide», 2013, o modelo FGM apresenta diversas vantagens sobre o modelo *Steady Diffusion Flamelet*, como por exemplo a modelação da ignição e não assumir que a chama turbulenta é um conjunto de chamas laminares, tendo sido por isso utilizado na presente dissertação.

Ao utilizar como modelo de combustão o *Flamelet Generated Manifold* do módulo *partially premixed combustion* apenas é possível definir um tipo de combustível, que torna inviável o estudo da introdução hidrogénio em apenas um dos *inlets* já que teria de ser configurado um combustível pré-misturado com hidrogénio para um *inlet* e outro sem o hidrogénio

noutro *inlet*. Para introduzir dois combustíveis diferentes teria de ser utilizado um modelo do módulo *Species Transport* nomeadamente o modelo *Eddy dissipation concept* que para a presente dissertação apresenta tempos de simulação muito superiores ao modelo *Flamelet Generated Manifold* não sendo exequível o seu uso. Deste modo, foi realizado o estudo de adição de hidrogénio em ambos os *inlets*, *inner slot* e *outer slot*.

Dado que os parâmetros de mistura são dados pelo *Air-to-fuel ratio* e pela *mixture fraction* ao definir os parâmetros do modelo *Partially Premixed Combustion* deve ser considerada para o oxidante a fração molar de O_2 , igual a 0,21, e de CO igual a 0,79, e para o combustível, as frações molares de metano podem ser dadas por 1 menos a fração molar de hidrogénio.

Rahimi et al., 2023 definiram que as paredes do queimador são adiabáticas, tendo sido mantido, essa condição de fronteira nas paredes físicas do queimador. Contudo, apesar do ligeiro aumento no tempo de computação, devido à ativação da equação da energia no programa, foi definido que o problema é não adiabático já que é aberto para o exterior e, por isso, permite-se que possam ocorrer trocas de calor com o exterior. Ao ativar esta opção, é permitido que sejam implementados modelos de radiação.

2.8 Modelos de radiação

Como apresentado no Subcapítulo 1.2.4.1 o programa *ANSYS FLUENT 18.2* contém disponíveis seis modelos de radiação, sendo os mesmos:

- *Discrete Ordinates (DO)*
- *Monte Carlo (MC)*
- *Surface to Surface (S2S)*
- *Discrete Transfer (DTRM)*
- *Rosseland*
- *P1*

Rahimi et al., 2023 utilizaram, no seu estudo, o modelo *Discrete Ordinates*, tal como Gameiro, 2020. Contudo, o modelo *Discrete Ordinates* apresenta um elevado custo computacional tal como o modelo *Monte-Carlo (MC)*.

O modelo *Surface to Surface (S2S)* é útil para modelar a radiação entre paredes, não sendo do interesse do caso em estudo, e o modelo *Discrete Transfer Radiation Method (DTRM)* não se encontra disponível pelo programa para a modelação turbulência-química proposta.

Considerando L o comprimento característico do domínio, definido pelo diâmetro da câmara de combustão e α o coeficiente de absorção, pode concluir-se que a espessura ótica do domínio é dada por αL . Dado o interesse na adição do hidrogénio, considera-se que a espessura ótica será a do mesmo. Segundo Ílbas et al., 2005 e Ferreira, 2021 esta é de 0, 45

m^{-1} . Dado que o problema em estudo não contém câmara de combustão, foi considerado que L tende para infinito, tornando a espessura ótica do domínio maior que 1 e, portanto, segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009, entramos na zona de aplicabilidade do modelo $P1$.

O Modelo *Rosseland* poderá também ser aplicado, no entanto o mesmo apenas modela problemas do tipo *gray radiation*. Por outro lado o modelo $P1$ permite a modelação de ambos os tipos de radiação (*gray radiation* e *non gray radiation*) usando apenas a banda *gray radiation*. O modelo $P1$ permite também a modelação da transmissão de radiação entre partículas e gases.

Deste modo, é proposto utilizar o modelo $P1$ para a modelação da radiação. A utilização deste modelo revela-se de elevada importância no estudo numérico de queimadores, segundo Ílbas et al., 2005, dado que a energia transferida na forma de calor pelos gases tem uma elevada componente de radiação térmica.

2.9 Métodos de cálculo para a solução

Para a resolução numérica através do programa *ANSYS FLUENT 18.2* considerou-se que o cálculo da solução deve ser pelo tipo *Pressure-Based*. Rahimi et al., 2023 utilizaram para o cálculo do esquema pressão-velocidade o modelo *PISO*.

O programa *ANSYS FLUENT 18.2* possui, para além do modelo *PISO*, outros esquemas para a modelação pressão-velocidade:

- *SIMPLE*
- *SIMPLEC*
- *PISO*
- *Coupled*

Os esquemas *SIMPLE*, *SIMPLEC* e *PISO* são esquemas do tipo desacoplados enquanto o esquema *Coupled*, é do tipo acoplado.

O modelo *PISO* foi utilizado por Rahimi et al., 2023. Contudo, segundo «ANSYS Fluent Users Guide», 2013, o mesmo é adequado para problemas transientes ou que usem uma elevada escala de tempo. O modelo *PISO* tem uma boa aplicabilidade em modelação RANS para malhas muito distorcidas, não sendo o caso da presente dissertação. O mecanismo *PISO* é capaz de resolver e obter soluções semelhantes aos mecanismos *SIMPLE* e *SIMPLEC* não apresentando uma clara vantagem, dado que o mesmo necessita de um maior poder computacional («ANSYS Fluent Users Guide», 2013).

Os modelos *SIMPLE* e *SIMPLEC* apresentam-se como mecanismos desacoplados, que podem ser aplicados numa grande variedade de escoamentos. O modelo *SIMPLE* apresenta-se como o modelo predefinido pelo programa *ANSYS FLUENT 18.2*, mas o modelo *SIMPLEC* apresenta vantagens dado que consegue atingir a convergência

mais cedo devido aos mecanismos de relaxação mais elevados. Em casos com elevada turbulência ou onde são usados mais modelos, como por exemplo modelos de reação química ou de radiação o modelo *SIMPLEC* apenas melhora a convergência se o problema for limitado pelo esquema pressão-velocidade, não sendo por norma o caso. O tempo de simulação é, desta forma, equivalente para o uso de ambos os modelos, *SIMPLE* e *SIMPLEC*.

O modelo *Coupled*, segundo «ANSYS Fluent Users Guide», 2013, apresenta diversas vantagens sobre os modelos desagregados, obtendo um resultado mais precisos para escoamentos estacionários, no entanto o mesmo tem um custo computacional superior.

Apesar de Rahimi et al., 2023 terem utilizado o modelo *PISO*, na presente dissertação será utilizado o modelo *SIMPLEC*.

Para a obtenção de resultados mais precisos, segundo «ANSYS Fluent Theory Guide», 2009 e «ANSYS Fluent Users Guide», 2013, foram considerados, na Tabela 2.2 os parâmetros para os métodos de cálculo.

Tabela 2.2: Parâmetros para os métodos de cálculo.

<i>Gradient</i>	<i>Least squared cell based</i>
<i>Pressure</i>	<i>Second order</i>
<i>Momentum</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>Turbulent Kinetic Energy</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>Turbulent Dissipation Rate</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>Energy</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>FGM Scalar Transport</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>Progress Variable</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>Mean Mixture Fraction</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>Mixture Fraction Variance</i>	<i>Second order upwind</i>
<i>Progress Variabel Variance</i>	<i>Second order upwind</i>

Para os fatores de relaxação do método de cálculo da solução foram considerados os valores apresentados na Tabela 2.3.

Por fim, foi estabelecido que a solução só é atingida se todos os parâmetros atingirem um valor de resíduos inferior a $1 \cdot 10^{-10}$, um valor tão baixo que garante que os resultados convergem e a simulação não termina antes de ser atingido um patamar. Foi assumido sempre um número de iterações bastante elevado (superior a 10^4) de modo a só terminar a simulação quando todos os resíduos atingem um patamar, tendo ou não flutuações. Caso se verifique que o número de iterações definido é insuficiente, continua-se a simulação até ser atingido um patamar em todos os parâmetros dos resíduos.

Em modo de resumo, na Tabela 2.4 são apresentados todos os modelos do problema em estudo.

Tabela 2.3: Fatores de relaxação para o método de cálculo.

<i>Pressure</i>	1
<i>Density</i>	1
<i>Body Forces</i>	1
<i>Momentum</i>	0,7
<i>Turbulent Kinetic Energy</i>	0,8
<i>Turbulent Dissipation Rate</i>	0,8
<i>Turbulent Viscosity</i>	1
<i>Energy</i>	1
<i>Temperature</i>	1
<i>FGM Scalar Transport</i>	1
<i>Progress Variable</i>	0,9
<i>Mean Mixture Fraction</i>	1
<i>Mixture Fraction Variance</i>	0,9
<i>Progress Variable Variance</i>	0,8

Tabela 2.4: Resumo de parâmetros e modelos definidos para a construção do caso numérico.

Modelos de reação química	Gri-Mech 2.11
Tipo de modelação de combustão	<i>Partially premixed combustion</i>
Modelação química	<i>Flamelet Generated Manifold</i>
Modelo de interação química-turbulência	<i>Finite-Rate / Turbulent Flame Speed</i>
Estilo de modelo de pré-mistura	<i>C equation</i>
Modelo de pré-mistura	<i>Zimont</i>
Modelo de radiação	P1
Método de cálculo	<i>SIMPLEC</i>

APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

3.1 Comparação da condição de fronteira *pressure inlet* e *pressure outlet* para a lateral do domínio computacional

Como referido no Subcapítulo 2.2, foi necessário realizar um estudo comparativo entre duas condições de fronteira, *pressure inlet* e *pressure outlet*, para a condição lateral do domínio computacional.

De seguida, apresentam-se os resultados deste estudo, com uma malha com 898 mil nós tridimensional. Na do mesmo não foi considerado *swirl*, ou seja, apenas foi considerada a componente axial no *inlet outer slot*. Contudo, o mesmo não invalida o estudo comparativo entre as duas condições de fronteira. Neste estudo não foi implementada a reação dos elementos químicos, combustão, tendo existido apenas difusão dos elementos químicos. Não tendo sido por isso considerado um modelo para a combustão nem um modelo de radiação.

Para o estudo comparativo, foram considerados os seguintes parâmetros:

1. Ponto de estagnação sobre o eixo de revolução do domínio computacional;
2. Localização do ponto sobre o eixo de revolução do domínio computacional onde a velocidade axial é máxima;
3. Valor máximo da velocidade axial sobre o eixo de revolução do domínio computacional;
4. Ângulo entre a localização (raio) de pontos sobre linhas radiais a diferentes cotas, onde a fração mássica de CH_4 é metade do valor máximo sobre estas linhas, e a cota, z , das diferentes linhas radiais.

Para o primeiro parâmetro, foi representada a velocidade axial sobre o eixo de revolução do domínio computacional. O ponto de estagnação apresenta-se sempre antes dos 0,03

m tendo sido, por isso, truncada a linha até aos 30 mm. Ao obter uma linha discreta com 999 pontos, foi realizada uma interpolação linear de modo a determinar a cota, z , onde a velocidade axial é zero. Na Figura 3.1, é possível observar o gráfico da velocidade axial sobre o eixo de revolução do domínio computacional truncado a 30 mm.

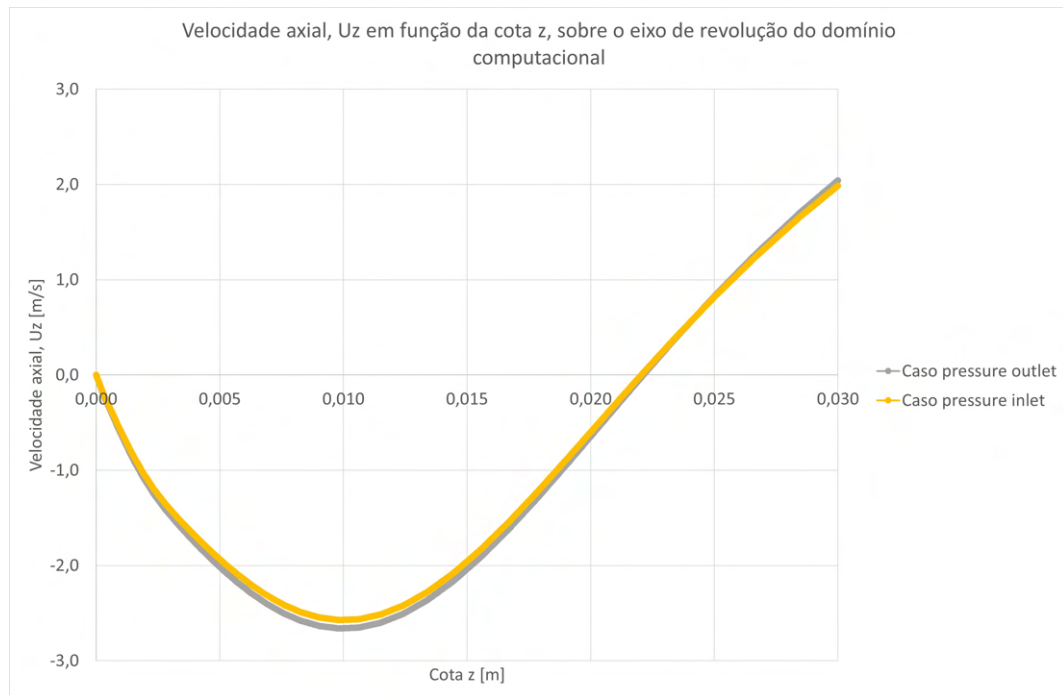


Figura 3.1: Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional truncado a 30 mm.

Conclui-se que, para o caso com a condição *pressure outlet*, a localização do ponto de estagnação é a 22,1 mm enquanto que para o caso com a condição *pressure inlet* é 22,0 mm. Ou seja, a diferença é apenas de 0,1 mm sendo em termos percentuais de apenas 0,23% ao considerar o valor médio como exato.

Para a definição do segundo e terceiro parâmetros, foi utilizado o eixo de revolução do domínio computacional na sua totalidade, 500 mm. Sobre esta linha, foi determinado o valor de velocidade axial máxima bem como a localização desse ponto.

Na Figura 3.2 é possível observar o gráfico da velocidade axial em função da distância (cota z), sobre o eixo de revolução do domínio computacional para o caso com a condição *pressure outlet* e com a condição *pressure inlet*.

3.1. COMPARAÇÃO DA CONDIÇÃO DE FRONTEIRA *PRESSURE INLET* E *PRESSURE OUTLET* PARA A LATERAL DO DOMÍNIO COMPUTACIONAL

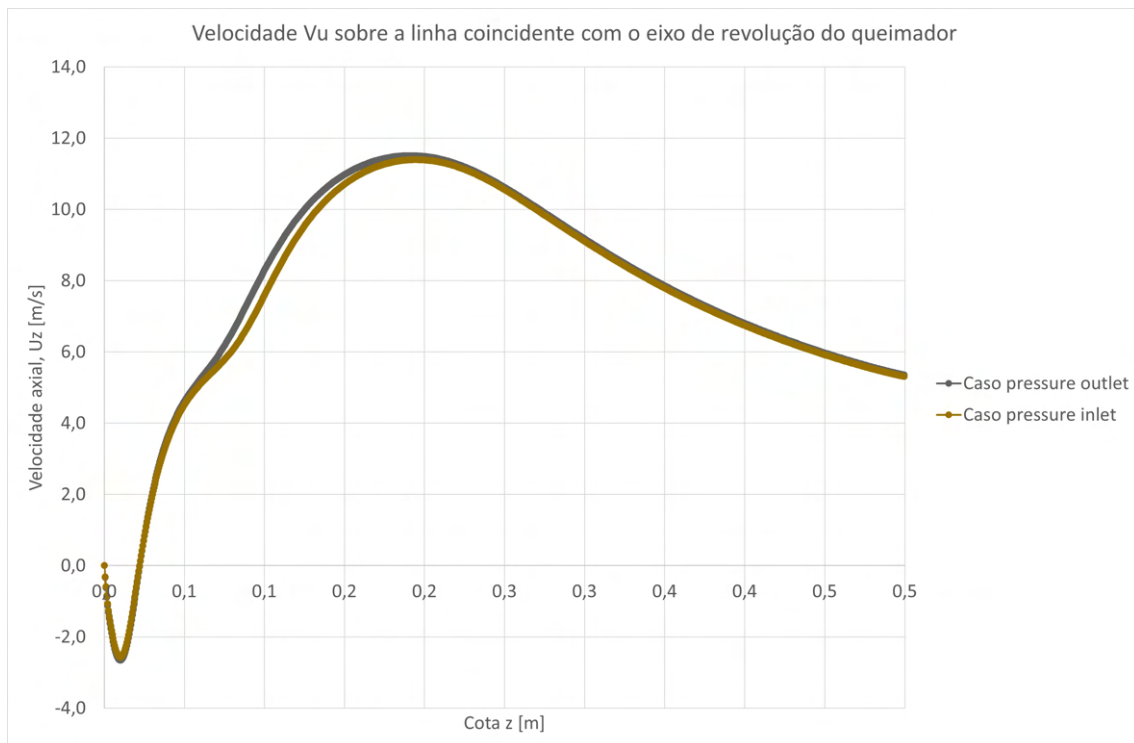


Figura 3.2: Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional para a comparação de condições de fronteira.

Conclui-se que, para o caso com a condição *pressure outlet*, o valor máximo da velocidade axial é de 11,5 m/s a 193,4 mm enquanto que para o caso com a condição *pressure inlet* o valor máximo da velocidade é de 11,4 m/s a 193,9 mm. Isto representa uma diferença na localização de 0,5 mm que se reflete em 0,1% tomando o valor médio como o valor exato. A velocidade máxima apresenta uma diferença de 0,1 m/s que se reflete em 0,4% considerando o valor médio como o valor real.

Para o cálculo do último parâmetro, foram traçadas linhas radiais entre o eixo de revolução e a parede exterior do domínio a diferentes cotas z . Sobre cada uma das linhas traçadas foram determinadas as coordenadas do ponto onde a fração mássica de CH_4 é metade do valor máximo dessa linha. De seguida, foi traçada uma reta onde nas abcissas tem a cota z da linha e nas ordenadas a localização, raio, do ponto determinado. Por fim foi calculada a inclinação (ângulo da reta). Concluiu-se que para o caso com a condição *pressure outlet*, a inclinação da reta foi de $8,2^\circ$, enquanto que, para o caso com a condição *pressure inlet* a inclinação da reta foi de $8,4^\circ$. A diferença em graus foi de $0,2^\circ$, que se reflete em 1,2% considerando o valor médio como o valor correto.

Por fim é apresentado na Tabela 3.1 um resumo dos resultados de cada caso para cada parâmetro considerado.

Conclui-se através dos quatro parâmetros considerados, que a definição da condição de fronteira lateral do domínio como *pressure outlet* ou *pressure inlet* não altera como esperado a definição do escoamento. Como por definição física do problema o jato, chama, terá de ser alimentado radialmente, o fluido deverá entrar no domínio pelas laterais, fazendo

Tabela 3.1: Resumo dos resultados do estudo comparativo das condições de fronteira para a lateral do domínio computacional.

	Ponto de estagnação sobre o eixo de revolução do domínio computacional [mm]	Localização sobre o eixo de revolução do domínio computacional onde a velocidade é máxima [mm]	Valor máximo de velocidade axial [m/s]	Ângulo entre a cota, z (de diferentes linhas radiais) e a localização de pontos (sobre estas linhas radiais) onde a fração mássica de CH ₄ é metade do valor máximo. [°]
Caso com <i>pressure outlet</i>	22,1	193,4	11,5	8,2
Caso com <i>pressure inlet</i>	22,0	193,9	11,4	8,4
Diferença	0,1	0,5	0,1	0,2
Erro relativo %	0,2%	0,1%	0,4%	1,2%

mais sentido esta fronteira do domínio estar definida como *pressure inlet*.

3.2 Estudo comparativo entre os modelos $K - \omega$, $K - \varepsilon$ e $K - \varepsilon$ *Realizable*

Tal como no estudo para a definição das condições de fronteira para o domínio computacional apresentado no Subcapítulo 3.1, foi utilizada uma malha com 898 mil nós tridimensional e foram analisados os mesmos 4 parâmetros:

1. Ponto de estagnação sobre o eixo de revolução do domínio computacional;
2. Localização sobre o eixo de revolução do domínio computacional, onde a velocidade axial é máxima;
3. Valor máximo da velocidade axial sobre o eixo de revolução do domínio computacional;
4. Ângulo entre a localização (raio) de pontos sobre linhas radiais a diferentes cotas, onde a fração mássica de CH₄ é metade do valor máximo sobre estas linhas, e a cota (z) das diferentes linhas radiais.

Na conceção deste estudo não foi considerado *swirl*, tal anteriormente. Contudo, dado ser um estudo comparativo, espera-se que o resultado não sejam influenciados. Neste estudo não foi considerada reação química, não tendo sido, por isso, considerados modelos de combustão, nem radiação.

3.2. ESTUDO COMPARATIVO ENTRE OS MODELOS $K - \omega$, $K - \epsilon$ E $K - \epsilon$ REALIZABLE

Para a definição do primeiro parâmetro, tal como anteriormente, foi definida uma linha coincidente com o eixo de revolução do queimador. Dado que foi verificado que o ponto de estagnação ocorre sempre antes dos 30 mm, foi truncada esta linha tendo sido desenhada uma linha com 999 pontos entre a saída do queimador e os 30 mm. Verificou-se que, para o caso em que foi utilizado o Modelo $K - \omega SST$ no qual o ponto de estagnação se situa a 22,0 mm, já no modelo Modelo $k - \epsilon$ apresenta-se a 18,3 mm e no Modelo $K - \epsilon$ *Realizable* a 22,2 mm. Considerando o valor médio dos 3 como exato, foi calculado o erro relativo de cada um, concluindo-se que para o Modelo $K - \omega SST$ o erro é de 5,6%, para o modelo Modelo $K - \epsilon$ é de 12,2% e para o Modelo $k - \epsilon$ *Realizable* é de 6,6%.

Na Figura 3.3 é possível observar o gráfico da velocidade axial sobre a linha coincidente com o eixo de revolução do queimador truncada a 30 mm, para os 3 casos.

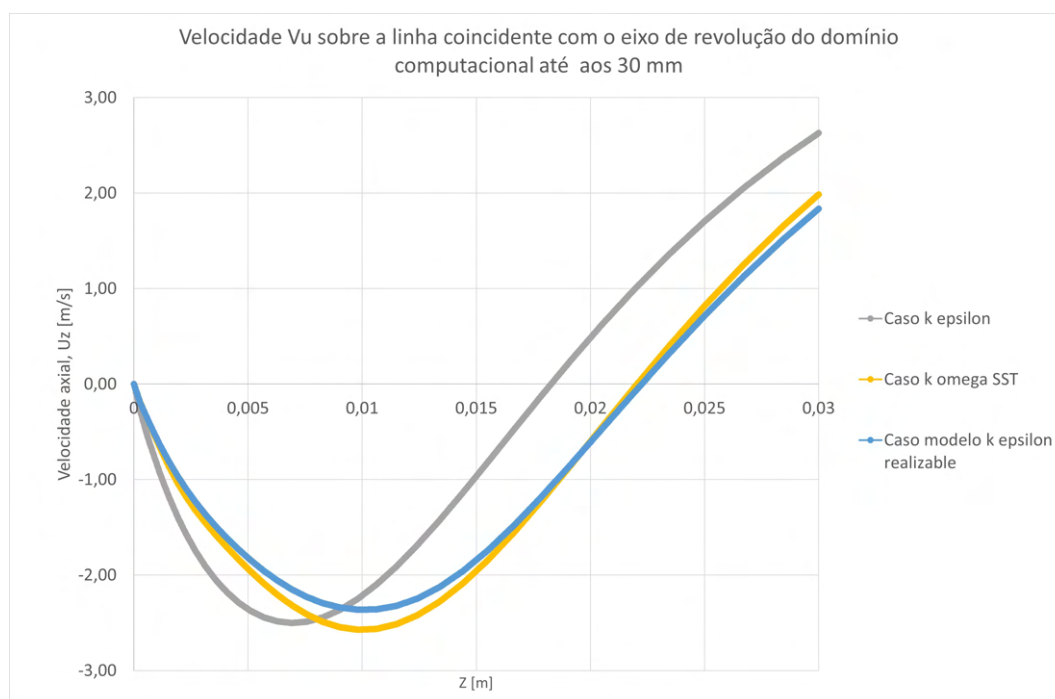


Figura 3.3: Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional truncada a 30 mm.

Para a definição do segundo parâmetro, foi utilizada a linha coincidente com o eixo de revolução na sua totalidade 500 mm e sobre esta, foi determinado, a localização do ponto onde a velocidade axial é máxima bem como o seu valor. Na Figura 3.4 é apresentado o gráfico da velocidade axial sobre a linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.

Conclui-se que o ponto sobre a linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional onde a velocidade axial é máxima corresponde a 181,4 mm para o Modelo $K - \epsilon$, 187,4 mm para o Modelo $K - \epsilon$ *Realizable* e 193,9 m para o Modelo $K - \omega SST$, sendo os valores máximos de velocidade axial, 11,3 m/s para o Modelo $K - \epsilon$, 11,3 m/s para o Modelo $K - \epsilon$ *Realizable* e 11,4 m/s para o Modelo $K - \omega SST$. Tomando o valor médio dos

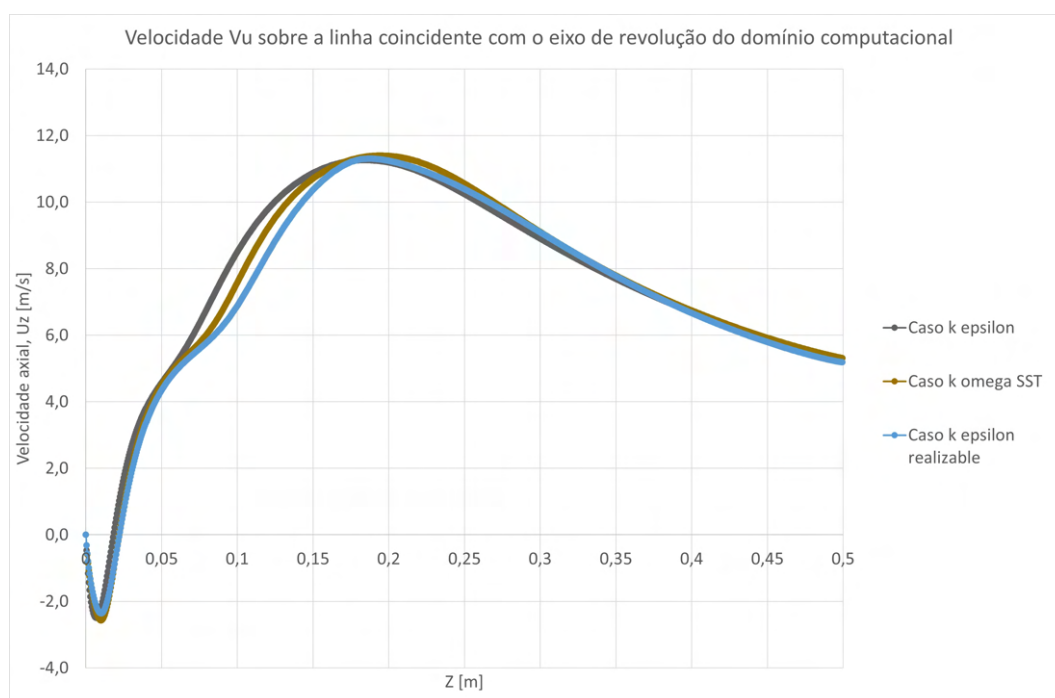


Figura 3.4: Gráfico de velocidade axial em função da distância sobre o eixo de revolução do domínio computacional para a comparação de modelos de turbulência.

3 modelos como o exato, conclui-se que o erro relativo para o parâmetro da localização do ponto de velocidade axial máxima é 3,3% para o Modelo $K - \epsilon$, 0,1% para o Modelo $K - \epsilon Realizable$ e 3,4% para o Modelo $K - \omega SST$. Quanto ao valor da velocidade axial máxima, o erro relativo é de 0,3% para o Modelo $K - \epsilon$, 0,3% para o $K - \epsilon Realizable$ e 0,6% para o Modelo $K - \omega SST$.

Como explicado anteriormente, para o cálculo do último parâmetro foi realizado a mesma metodologia que no Subcapítulo 3.1. Para o caso construído com o Modelo $K - \epsilon$, o ângulo obtido foi de $7,6^\circ$, para o Modelo $K - \epsilon Realizable$, foi de $7,0^\circ$ e para o Modelo $K - \omega SST$ foi de $8,4^\circ$. Considerando, novamente, que a média dos 3 valores é o valor exato, foi calculado o erro relativo de onde se conclui que para o Modelo $K - \epsilon$ o erro é de 0,9%, para o Modelo $K - \epsilon Realizable$ é de 8,7% e para o Modelo $K - \omega SST$ é de 9,6%.

Na Tabela 3.2 apresenta-se um resumo dos resultados de cada uma dos modelos para cada parâmetro considerado.

Conclui-se que o Modelo $K - \epsilon$ não resolve corretamente o escoamento de jatos axissimétricos em queimadores abertos não devendo ser utilizado para resolver este tipo de problemas. Entre os Modelos $K - \epsilon Realizable$ e $K - \omega SST$ conclui-se que para o Modelo $K - \epsilon Realizable$ os erros relativos são menores para o segundo terceiro e quarto parâmetro. Conclui-se que, os modelos $K - \epsilon Realizable$ e $K - \omega SST$ são capazes de modelar o presente estudo. Deste modo, na modelação da combustão da presente dissertação passará a ser aplicado por definição o Modelo $K - \epsilon Realizable$. No estudo de independência de malha apresentado em seguida, por ter sido realizado anteriormente ao estudo apresentado, foi

Tabela 3.2: Resumo dos resultados do estudo comparativo dos diferentes modelos de turbulência.

	Ponto de estagnação sobre o eixo de revolução do domínio computacional [mm]	Localização do ponto sobre o eixo de revolução do domínio computacional onde a velocidade é máxima [mm]	Valor máximo de velocidade axial [m/s]	Ângulo entre a cota, z (de diferentes linhas radiais) e a localização de pontos (sobre estas linhas radiais) onde a fração mássica de CH ₄ é metade do valor máximo. [°]
<i>K</i> – ϵ	18,3	181,4	11,3	7,6
Erro relativo %	12,2%	3,3%	0,3%	0,9%
<i>K</i> – ϵ <i>Realizable</i>	22,2	187,4	11,3	7,0
Erro relativo %	6,6%	0,1%	0,3%	8,7 %
<i>K</i> – ω <i>SST</i>	22,0	193,9	11,4	8,4
Erro relativo %	5,6%	3,4%	0,6%	9,6%

utilizado o Modelo *K* – ω *SST* que também apresenta bons resultados para este tipo de problemas. É de notar que, tanto o estudo de comparação de modelos de turbulência, como o estudo de independência de malha e o estudo de comparação das condições de fronteira foram realizados sem reação, ou seja sem combustão.

3.3 Estudo de independência de malha

Para este estudo, como foi descrito anteriormente, foi equacionada a possibilidade de usar uma ferramenta do programa *ANSYS FLUENT 18.2* que permite, a partir de uma malha a duas dimensões, simular um caso axissimétrico com ou sem *swirl*. Deste modo, foram consideradas sete malhas a duas dimensões, 2D. Foram ainda utilizadas cinco malhas tridimensionais, 3D que por terem todo o domínio modelado, sem a necessidade de utilizar ferramentas do programa, garante-se a resolução do problema sem aplicar simplificações, nomeadamente nos campos de velocidade e aceleração.

Na Tabela 3.3 são apresentados os casos construídos, bem como algumas informações relativas aos resíduos e ao tempo aproximado de simulação. De realçar que as primeiras cinco malhas para ambos os casos apresentam elementos de dimensões semelhantes, tendo sido construído mais dois casos com uma malha mais refinada em casos bidimensionais, provando que o tempo de simulação é demasiado dispendioso para estudos sem reação.

Como apresentado na Figura 2.3 o domínio computacional na direção longitudinal foi dividido em 7 partes. A primeira divisão ocorre a 50 mm do início dos *inlets*. Após a saída do queimador o domínio foi dividido em 5 partes iguais com 100 mm cada uma. Tal opção

Tabela 3.3: Casos para o estudo de independência de malha.

Tipo de caso	Nome do caso <i>ANSYS FLUENT</i> 18.2	Número de nós	Informações sobre os resíduos			Tempo aproximado de simulação
			Número de iterações	Continuidade	Flutuações	
2D	5000	4822	15 mil	10^{-1}	Muitas	10 minutos
	7500	7500	20 mil	10^{-2}	Muitas	10 minutos
	11578	11578	60 mil	10^{-2}	Muitas	45 minutos
	17591	17591	23 mil	10^{-2}	Poucas	20 minutos
	23416	23416	20 mil	10^{-2}	Poucas	40 minutos
	230000	231427	60 mil	10^{-2}	Estáveis	30 horas
	691000	691656	189 mil	10^{-3}	Estáveis	135 horas
3D	240000	240768	24 mil	10^{-3}	Estáveis	*
	400000	462669	5 mil	10^{-3}	Estáveis	*
	898000	898977	77 mil	10^{-3}	Estáveis	*
	1000000	1720796	120 mil	10^{-3}	Estáveis	*
	2600000	2619824	150 mil	10^{-3}	Estáveis	50 horas

*Não foi recolhido o tempo aproximado de simulação

prende-se com a necessidade de discretizar o domínio junto a saída do queimador, ou seja refinar os elementos na saída dos *inlets* e na primeira secção após a saída do queimador. Já que será uma zona com elevados gradientes de velocidade devido à geometria do domínio. Deste modo, os elementos na zona dos *inlets* com 100 mm apresentam elementos que decrescem de tamanho na direção da saída do queimador, com rácio de crescimento, *Bias*, de 30. De modo a garantir a concordância de tamanho dentro dos *inlets*, na zona inicial dos *inlets* os elementos tem um rácio de crescimento com um *Bias* de 16 onde estão mais pequenos no início e crescem até a secção de 100 mm. Novamente, para garantir que os elementos adjacentes às mudanças de secção têm aproximadamente a mesma dimensão, os elementos na primeira secção de 100 mm após a saída do queimador apresentam um fator de *Bias* de 20, sendo mais pequenos junto à face do queimador.

Como explicado anteriormente, para garantir elementos mais refinados junto do limite do domínio, na última secção axial de 100 mm os elementos estão mais refinados na direção da saída, *outlet* com um *Bias* de 5. Deste modo, tenta-se garantir uma melhor resolução do problema ao minimizar os impactos das condições de fronteira sobre o restante domínio.

Tal como na saída do queimador se pretende ter elementos com uma dimensão reduzida, nas zonas laterais do domínio há que ter esse mesmo cuidado, tendo sido o domínio computacional dividido para os casos tridimensionais radialmente e tangencialmente. Para garantir elementos reduzidos junto às zonas laterais, o *inlet coflow* foi dividido a 10 mm do final do domínio. Nesta zona, os elementos tendem a ficar mais pequenos ao aproximar da parede, tendo um *Bias* de 20. Foi garantido que os elementos na zona central do queimador têm todos uma dimensão reduzida, de modo a corretamente definir o problema de combustão que terá maior influência na zona central do domínio. O restante

inlet coflow apresenta um *Bias* de 15, onde os elementos crescem do centro do queimador para a secção mais exterior de 10 mm. Esta configuração permite que os elementos da zona do *inlet coflow* adjacentes às restantes secções tenham aproximadamente a mesma dimensão.

O domínio computacional na direção tangencial, para os casos tridimensionais, foi dividido em quatro zonas, de modo a definir os elementos como polígonos quadriláteros. Têm-se como preferência obter elementos cúbicos, de modo a garantir uma malha completamente estruturada. Não foram definidos rácios de crescimento para a direção tangencial, de modo a garantir que todo o domínio contém elementos da mesma dimensão ao longo desta direção.

Todos os rácios de crescimento apresentados são relativos aos casos tridimensionais, sendo os mesmos iguais para todos os casos. Para os casos bidimensionais, basta realizar um corte sobre um plano coincidente com o eixo de revolução para se obter as condições de fronteira bem como os rácios de crescimento. Para garantir a concordância do estudo comparativo entre os casos tridimensionais e bidimensionais foram definidos elementos de iguais dimensões nas mesmas zonas do domínio. Como referido, as primeiras cinco malhas para ambos os casos tridimensionais e bidimensionais, apresentadas na Tabela 3.3, têm elementos de iguais dimensões e rácios de crescimento.

Para o estudo de independência de malha foram utilizados três parâmetros que não dependem da geometria do queimador escolhido, mas sim do desenvolvimento do escoamento:

1. Localização do ponto de estagnação sobre o eixo de revolução do domínio computacional;
2. Primeiro ponto sobre o eixo de revolução onde a velocidade axial do escoamento é metade da velocidade máxima de injeção;
3. Ângulo entre a localização (raio) de pontos sobre linhas radiais a diferentes cotas, onde a fração mássica de CH_4 é metade do valor máximo sobre estas linhas, e a cota (z) das diferentes linhas radiais.

Há que ter em consideração que o estudo de independência de malha foi realizado sem contemplar *swirl* no *inlet outer slot*, tal como referido anteriormente. Neste estudo não foi considerada a reação e consequente combustão, não tendo sido utilizados modelos de combustão nem radiação. Apenas foi considerada a difusão das espécies químicas para o terceiro parâmetro do estudo.

Para a definição do primeiro parâmetro, foi traçado para cada um dos casos apresentados na Tabela 3.3, uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional. Dado que o caso em estudo não contém *swirl*, as velocidades tangenciais e radiais podem ser desprezadas. Deste modo, no presente estudo de independência de malha foi sempre utilizado a velocidade axial.

Sobre a linha traçada coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional foram retirados 999 pontos. Destes, por serem resultados discretos, foi realizado uma interpolação linear de modo a descobrir a cota(z) onde a velocidade axial é zero.

Na Figura 3.5 é apresentado o resultado da cota do ponto de estagnação em função do número de nós para os casos bidimensionais. É possível concluir da Figura 3.5 que aumentando o número de nós, os resultados mantêm a sua tendência para uma valor entre 22 mm e 23 mm.

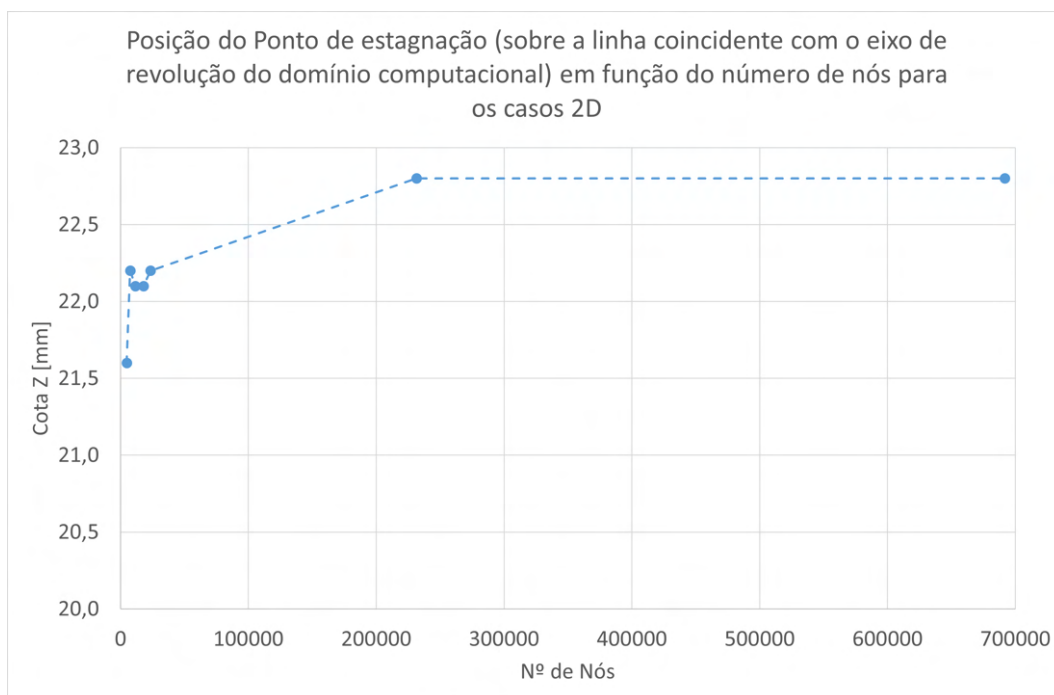


Figura 3.5: Localização do ponto de estagnação em função do número de nós para os casos bidimensionais.

De forma semelhante, para os casos tridimensionais, foi traçado um gráfico, representado na Figura 3.6 de onde se conclui que tal como para os casos bidimensionais a medida que se aumenta o número de nós os resultados tendem para um valor entre 22 e 22,5 mm.

Na Tabela 3.4 é apresentado um resumo dos resultados apresentados para o primeiro parâmetro. Conclui-se que para as primeiras cinco malhas bidimensionais, os resultados são idênticos aos das malhas tridimensionais. Esta conclusão era expectável dado que as mesmas apresentam a mesma discretização, ou seja, elementos das mesmas dimensões na direção axial e radial. Deste modo, decidiu-se utilizar o caso bidimensionais com 691656 nós, no qual os elementos estão mais discretizados e que de forma clara já se atingiu a independência de malha para calcular a diferença e o erro relativo, considerando este caso como o valor exato.

Conclui-se, da Tabela 3.4, que para o primeiro parâmetro, os resultados das malhas bidimensionais e tridimensionais são idênticos podendo, por este parâmetro ser considerada correta a utilização de modelos bidimensionais com as ferramentas de revolução

3.3. ESTUDO DE INDEPENDÊNCIA DE MALHA

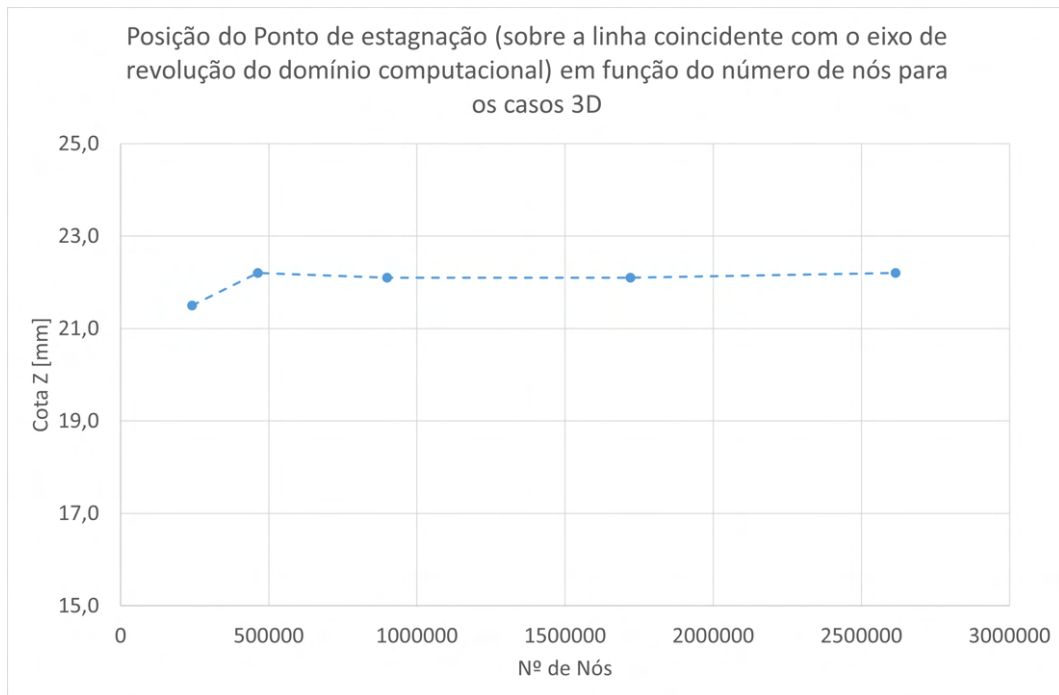


Figura 3.6: Localização do ponto de estagnação em função do número de nós para os casos tridimensionais.

Tabela 3.4: Resumo dos resultados do primeiro parâmetro do estudo de independência de malha.

Localização do ponto de estagnação					
Tipo de Caso	Número de nós	Cota z [mm]	Diferença [mm]	Erro relativo [%]	
2D	4822	21,6	1,2	5,3	
	7500	22,2	0,6	2,6	
	11578	22,1	0,7	3,1	
	17951	22,1	0,7	3,1	
	23416	22,2	0,6	2,6	
	231427	22,8	0,0	0,0	
	691656 *	22,8 *	0 *	0 *	
3D	240768	21,5	1,3	5,7	
	462669	22,2	0,6	2,6	
	898997	22,1	0,7	3,1	
	1720796	22,1	0,7	3,1	
	2614824	22,2	0,6	2,6	

* Caso considerado como exato

do programa *ANSYS FLUENT 18.2* para resolver um caso axissimétrico. Conclui-se dos gráficos, apresentados na Figura 3.6, que apesar de os casos tridimensionais aparentarem terem atingido um patamar o mesmo corresponde ao primeiro patamar que é visível no gráfico dos casos bidimensionais, Figura 3.5 no qual se percebe que ainda não foi atingida a independência de malha. É de realçar que, os resultados excetuando para a primeira

malha, tanto bidimensional como tridimensional, têm sempre um erro inferior a 4%, ou seja, apesar de não ter sido atingida a independência, os resultados são considerados aceitáveis.

Dado que para no primeiro parâmetro (localização do ponto de estagnação) estudou-se o escoamento logo próximo da saída do queimador, para o segundo parâmetro teve-se como objetivo estudar o escoamento mais a jusante no domínio computacional. Para se perceber como se desenvolveu o escoamento. Sabe-se que a velocidade máxima de injeção, apenas têm componente axial, uma vez que não foi considerado *swirl* logo, no *inlet outer slot* a velocidade de injeção é de 18,7 m/s. Sabe-se que o escoamento se vai desenvolver dentro do *inlet*, sendo expectável que a velocidade máxima dentro do *inlet* seja superior junto a saída do queimador. Contudo, como os *inlets* tem uma geometria anelar e sendo o queimador axissimétrico, existe mais interesse em estudar o escoamento sobre a linha central, eixo de revolução do domínio computacional, dado que o escoamento se irá desenvolver no centro do domínio.

Na Figura 3.7 é apresentado um gráfico da velocidade axial sobre a linha central, coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional, em função da cota, z do domínio. Da Figura 3.7 entende-se a importância da definição deste segundo parâmetro, ou seja, metade da velocidade máxima de injeção que corresponde a 9,35 m/s. Para todos os gráficos, o ponto onde a velocidade axial é 9,35 m/s situa-se entre os 50 mm e os 150 mm zona onde é perceptível a olho nu maiores diferenças de resultados.

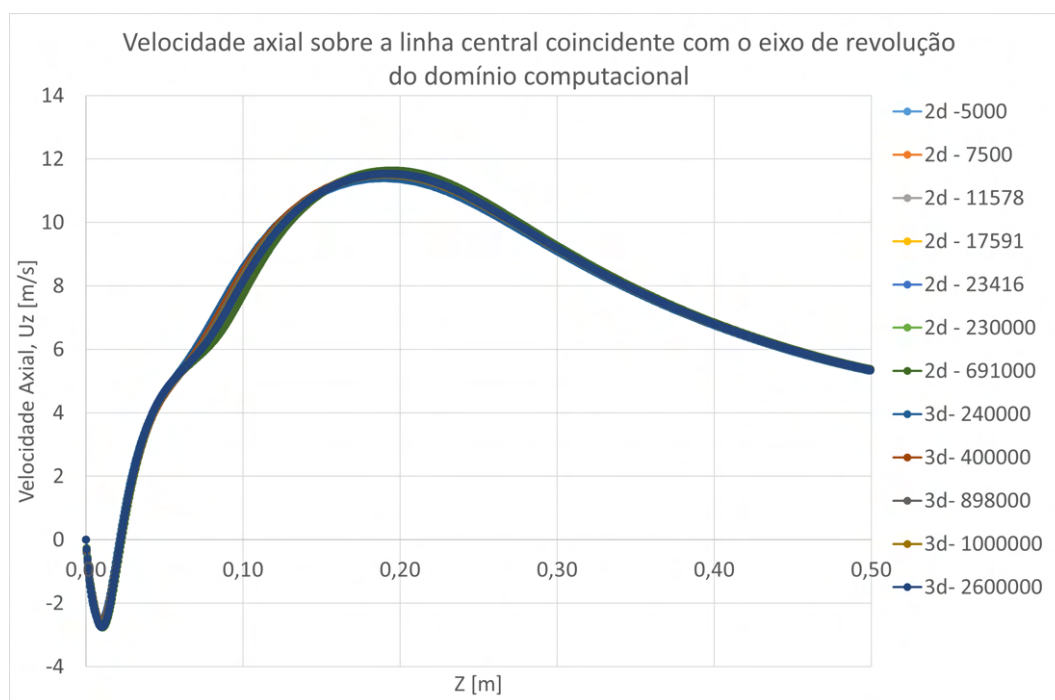


Figura 3.7: Velocidade axial sobre a linha central do domínio coincidente com o eixo de revolução.

Na Figura 3.8 são apresentados os resultados para o segundo parâmetro para os casos

bidimensionais. Na Figura 3.8, é de fácil visualização que os resultados, apesar de próximos, tendem para um patamar junto a 0,12 m nos três casos mais refinados.

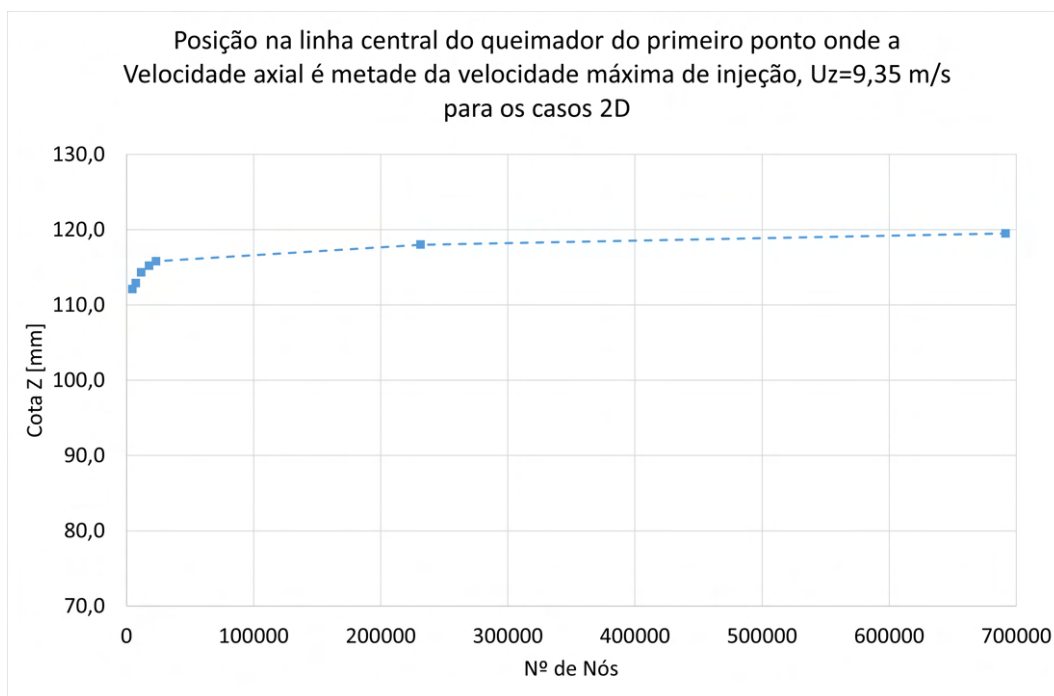


Figura 3.8: Gráfico da localização do ponto onde a velocidade axial é metade da velocidade máxima de injeção em função do número de nós para os casos bidimensionais.

Já nos casos tridimensionais, apresentados na Figura 3.9, os resultados tendem para um valor próximo de 115 mm, não aparentando ter um patamar tão evidente como nos casos bidimensionais. Percebe-se que o comportamento apresentado nos casos tridimensionais é em tudo semelhante às primeiras cinco malhas bidimensionais, tal como era expectável.

Na Tabela 3.5 são apresentados os resultados para o segundo parâmetro para cada um dos casos tanto bidimensionais como tridimensionais. Conclui-se que para as primeiras cinco malhas bidimensionais, os resultados são idênticos aos das malhas tridimensionais. Tal era expectável dado que as mesmas apresentam a mesma discretização, ou seja, elementos das mesmas dimensões na direção axial e radial. Deste modo, decidiu-se utilizar o caso bidimensionais com 691656 nós, no qual os elementos estão mais discretizados, e que de forma clara já atingiu a independência de malha para calcular a diferença e o erro relativo, considerando esse caso como o valor exato.

Da Tabela 3.5 é possível observar que, como descrito anteriormente, o erro relativo para ambos os casos bidimensionais e tridimensionais diminui com o aumento do número de nós. Sendo os resultados das primeiras cinco malhas bidimensionais semelhantes aos das respectivas malhas tridimensionais, o erro relativo é semelhante também. Conclui-se que o erro relativo é inferior a 5% a partir da terceira malha em cada caso inclusivé. Como descrito anteriormente, apenas na sexta malha bidimensionais aparenta ter-se atingido um patamar. Contudo, considera-se ainda como resultados aceites as malhas com menos

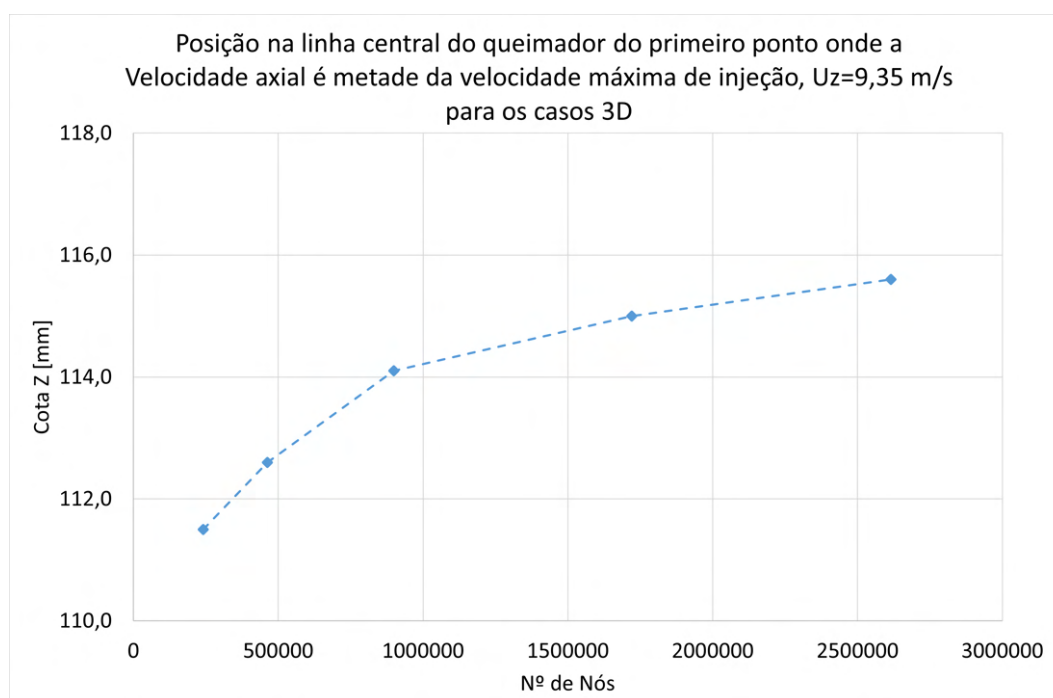


Figura 3.9: Gráfico da localização do ponto onde a velocidade axial é metade da velocidade máxima de injeção em função do número de nós para os casos tridimensionais.

Tabela 3.5: Resumo dos resultados do segundo parâmetro do estudo de independência de malha.

Localização do Ponto de velocidade igual a 9,35 m/s					
Tipo de Caso	Número de nós	Cota [mm]	z	Diferença [mm]	Erro relativo [%]
2D	4822	112,1	7,4	6,2	6,2
	7500	112,9	6,6	5,5	5,5
	11578	114,3	5,2	4,4	4,4
	17951	115,2	4,3	3,6	3,6
	23416	115,8	3,7	3,1	3,1
	231427	118,0	1,5	1,3	1,3
	691656 *	119,5 *	0 *	0 *	0 *
3D	240768	111,5	8,0	6,7	6,7
	462669	112,6	6,9	5,8	5,8
	898997	114,1	5,4	4,5	4,5
	1720796	115,0	4,5	3,8	3,8
	2614824	115,6	3,9	3,3	3,3

* Caso considerado como exato

nós e com um erro relativo inferior a 5%.

Por fim, será avaliado o terceiro parâmetro relativo à difusão das espécies químicas, nomeadamente de CH_4 . No estudo de independência de malha, bem como nos estudos apresentados nos Subcapítulos 3.1 e 3.2, foi apenas utilizado o mecanismo de reação química de uma equação descrito pela equação 2.1. É importante referir que não foi feita

a ignição, sendo estes estudos isotérmicos e apenas existe difusão das espécies sem reação química.

Para a construção do terceiro parâmetro, foram traçadas linhas radiais, entre raio, $r = 0$ mm e $r = 100$ mm nas seguintes cotas, z : 0,02 mm; 0,04 mm; 0,06 mm; 0,08 mm; 0,10 mm; 0,15 mm; 0,20 mm; 0,25 mm; 0,30 mm. Sobre cada uma das linhas, foi obtido um gráfico da fração mássica de CH_4 em função do raio. Foram determinadas as coordenadas do ponto onde a fração mássica é metade do valor máximo nessa mesma linha. Foi traçado um gráfico em que nas abcissas são apresentadas as cotas das linhas radiais, e nas ordenadas o raio do ponto onde a fração mássica é metade do valor máximo nessa mesma linha. Com o objetivo de obter uma regressão linear, concluiu-se que o ajuste linear é apenas possível utilizando as linhas localizadas nas seguintes cotas: 0,20 mm; 0,25 mm; 0,30 mm. Utilizando apenas estas linhas foi determinado a inclinação da reta e o respetivo ângulo que essa linha faz com o eixo de revolução.

Para os casos bidimensionais, o resultado do ângulo em função do número de nós é apresentado na Figura 3.10. Do gráfico da figura é possível observar que só nas duas malhas mais refinadas, é atingido um patamar.

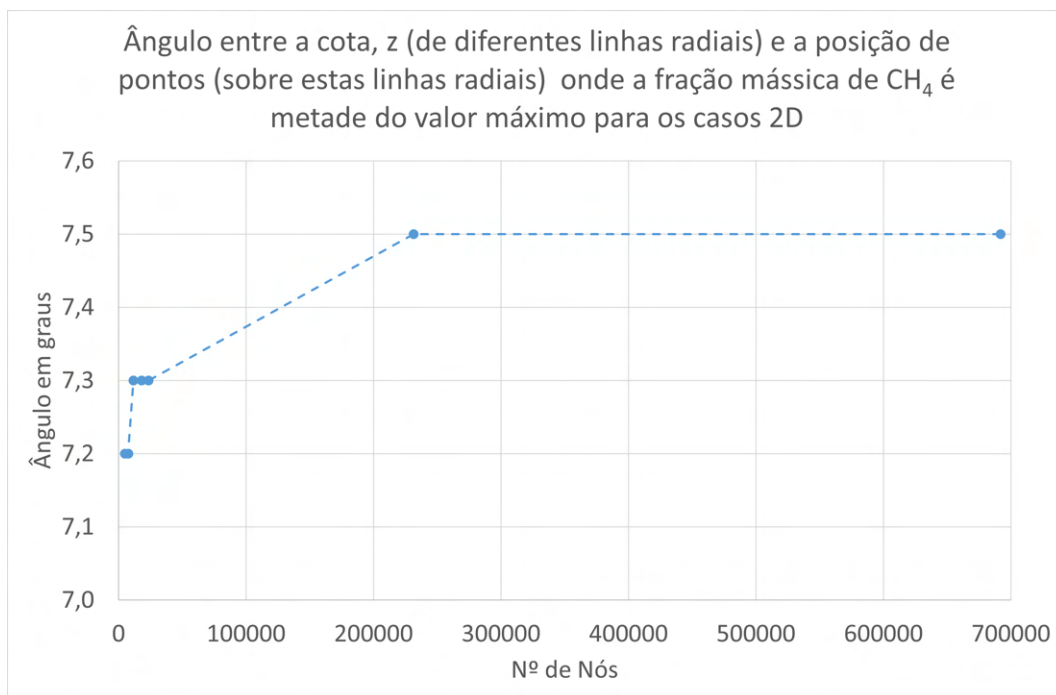


Figura 3.10: Gráfico do ângulo entre a cota, z (de diferentes linhas radiais) e a localização de pontos (sobre estas linhas radiais) onde a fração mássica de CH_4 é metade do valor máximo, para os casos bidimensionais.

Para os casos tridimensionais, o resultado do ângulo em função do número de nós é apresentado na Figura 3.11. Nestes, conclui-se que o patamar é obtido nas duas últimas malhas. Conclui-se ainda que os resultados para as malhas tridimensionais são em tudo semelhantes às malhas bidimensionais respetivas.

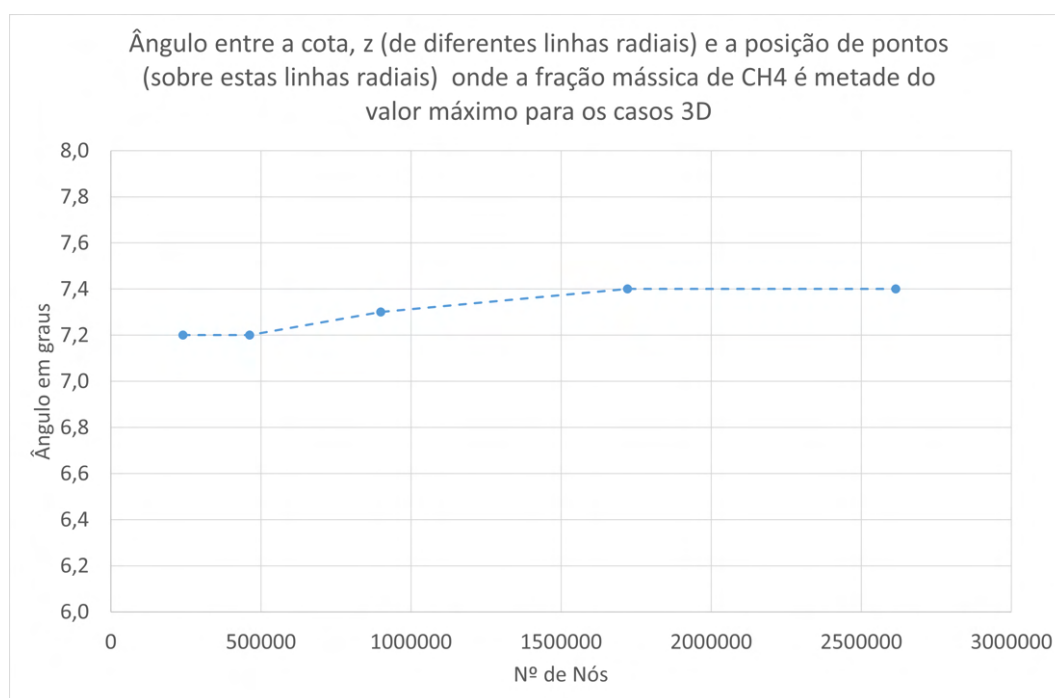


Figura 3.11: Gráfico do ângulo entre a cota, z (de diferentes linhas radiais) e a localização de pontos (sobre estas linhas radiais) onde a fração mássica de CH₄ é metade do valor máximo, para os casos tridimensionais.

Na Tabela 3.6 são apresentados os resultados para os casos bidimensionais e tridimensionais para o terceiro parâmetro. Conclui-se que para as primeiras cinco malhas bidimensionais, os resultados são idênticos aos das malhas tridimensionais. Deste modo, decidiu-se utilizar o caso bidimensionais com 691656 nós, no qual os elementos estão mais discretizados, e que de forma clara já se atingiu a independência de malha para calcular a diferença e o erro relativo, considerando esse caso como o valor exato.

Conclui-se então do terceiro parâmetro, que o erro relativo é sempre inferior a 5% sendo a partir da terceira malha de cada caso inclusive inferior, a 3%. Conclui-se no entanto que, apesar dos valores para os casos tridimensionais aparentarem ter atingido um patamar o mesmo não é real. Ao discretizar mais a malha, nos casos bidimensionais conclui-se que o patamar é atingido para um valor de ângulo superior, na sexta malha, bidimensional mais refinada.

Conclui-se do estudo de independência de malha que os resultados bidimensionais e tridimensionais são muito semelhantes para os três parâmetros. Na Tabela 3.7 são apresentados para cada um dos parâmetros do estudo de independência de malha os resultados comparativos entre as malhas bidimensionais e tridimensionais equivalentes, ou seja as primeiras cinco malhas bidimensionais, com a mesma discretização que as cinco malhas tridimensionais. São apresentados os valores de diferença e erro relativo entre cada malha bidimensional e tridimensional para cada parâmetro. Para o cálculo do erro foi considerado que o valor real será a média dos valores das duas malhas. Na Tabela 3.7, foi considerado a primeira malha como a malha menos refinada, e a quinta como a

Tabela 3.6: Resumo dos resultados do terceiro parâmetro do estudo de independência de malha.

Resultados do terceiro parâmetro				
Tipo de Caso	Número de nós	Ângulo [°]	Diferença [mm]	Erro relativo [%]
2D	4822	7,2	0,3	4,0
	7500	7,2	0,3	4,0
	11578	7,3	0,2	2,7
	17951	7,3	0,2	2,7
	23416	7,3	0,2	2,7
	231427	7,5	0,0	0,0
	691656 *	7,5 *	0 *	0 *
3D	240768	7,2	0,3	4,0
	462669	7,2	0,3	4,0
	898997	7,3	0,2	2,7
	1720796	7,4	0,1	1,3
	2614824	7,4	0,1	1,3

* Caso considerado como exato

malha mais refinada. A sexta e sétima malha bidimensionais foram desprezadas dado não existirem malhas equivalentes tridimensionais.

Tabela 3.7: Comparação entre os casos bidimensionais e tridimensionais.

Comparação malhas bidimensionais com tridimensionais para os 3 parâmetros						
Malha	1º Parâmetro		2º Parâmetro		3º Parâmetro	
	Diferença [mm]	Erro relativo [%]	Diferença [mm]	Erro relativo [%]	Diferença [mm]	Erro relativo [%]
1 ^a	0,1	0,2	0,6	0,3	0,0	0,0
2 ^a	0,0	0,0	0,3	0,1	0,0	0,0
3 ^a	0,0	0,0	0,2	0,1	0,0	0,0
4 ^a	0,0	0,0	0,2	0,1	0,1	0,7
5 ^a	0,0	0,0	0,2	0,1	0,1	0,7

Conclui-se da Tabela 3.7 que o erro é sempre inferior a 1%, ou seja, os resultados que se obtém são equivalentes ao utilizar um caso bidimensional, ou um caso tridimensional. Deste modo, as Tabelas, 3.4, 3.5 e 3.6 estão corretamente definidas e pode ser considerado o caso mais refinado bidimensionais, como o valor exato, como foi realizado.

Da Tabela 3.3 conclui-se que as primeiras três malhas bidimensionais tem resíduos com demasiadas flutuações para serem considerados casos aceitáveis. A quarta e quinta malha bidimensionais continuam a ter flutuações nos resíduos, mas apenas quando se refina mais a malha com quase 10 vezes mais nós se obtém resíduos estáveis passando os resultados a ser considerados aceitáveis. Contudo, como já referido, a sexta e sétima malha bidimensionais tem tempos de simulação elevados para o estudo em questão. Dado que a complexidade será bastante superior com modelos de reação química mais complexos

e quando for realizada a combustão, não devem ser utilizadas estas malhas devido ao elevado custo computacional. Quanto às malhas tridimensionais, os resíduos são sempre estáveis pelo que, qualquer um dos casos pode ser considerado como correto. Conclui-se que, a diferença nos resíduos, sendo os resultados semelhantes entre bidimensionais e tridimensionais e todas as condições de construção dos casos iguais, estas flutuações apenas se podem dever à maneira como o programa *ANSYS FLUENT 18.2* realiza a revolução do caso bidimensional para o caso axissimétrico. Dado o tempo de computação e as flutuações nos resíduos não será utilizada uma malha bidimensional. Considerando os valores dos erros, para as malhas tridimensionais, 898997, 1720796 e 2614824 estas poderão ser consideradas como dando valores bastante aproximados, com menos de 5% de erro. Deste modo a malha que fará mais sentido ser utilizada será a do caso 898997 tridimensional por apresentar resíduos estáveis e uma boa aproximação ao valor considerado exato, erro sempre inferior a 5%. Por fim, dado que esta malha apresenta uma boa relação entre tempo de simulação e discretização será esta a malha escolhida.

3.4 Parâmetros de qualidade da malha escolhida

Com as conclusões do estudo apresentado no Subcapítulo 3.3, foi escolhida a malha com a qual se prosseguirá o estudo, faltando apenas apresentar os parâmetros relativos à construção desta mesma. Como descrito no Subcapítulo 2.5, serão apresentados os seguintes parâmetros: ortogonalidade, distorção, e o rácio de crescimento dos elementos da malha.

Para o primeiro parâmetro, ortogonalidade dos elementos, há que ter em consideração que a malha escolhida é tridimensional, portanto para a obtenção de uma malha completamente estruturada, o ideal seria obter elementos cúbicos.

Na Figura 3.12, é apresentado o número de elementos em função da ortogonalidade que os mesmos apresentam. Destaca-se que a escala do número de elementos apresenta-se representada numa escala logarítmica de base 10.

Conclui-se, da Figura 3.12, que a malha escolhida apresenta sempre valores superiores a 0,8. Conclui-se ainda que, 97,3% dos elementos da malha tem um valor de 0,988 (muito próximo de 1) sendo este o valor ótimo, como explicado no Subcapítulo 2.5. Do gráfico é ainda possível concluir que 98,5% dos elementos tem um valor superior a 0,95 para o parâmetro ortogonalidade dos elementos, o que garante que a malha segundo este parâmetro pode ser considerada como aceite.

O segundo parâmetro, distorção dos elementos, avalia o desvio entre o vetor que liga os centroides de dois elementos adjacentes e o vetor que ligas as faces opostas dos mesmos elementos adjacentes. Se os elementos forem cúbicos e com as mesmas dimensões não ocorre distorção, pelo que o valor deste parâmetro deverá ser igual a zero. Este parâmetro adimensional toma valores entre 0 e 1.

Na Figura 3.13 é apresentado, para o segundo parâmetro, um gráfico com o número de elementos em função do valor de distorção que os mesmos apresentam. As ordenadas

3.4. PARÂMETROS DE QUALIDADE DA MALHA ESCOLHIDA

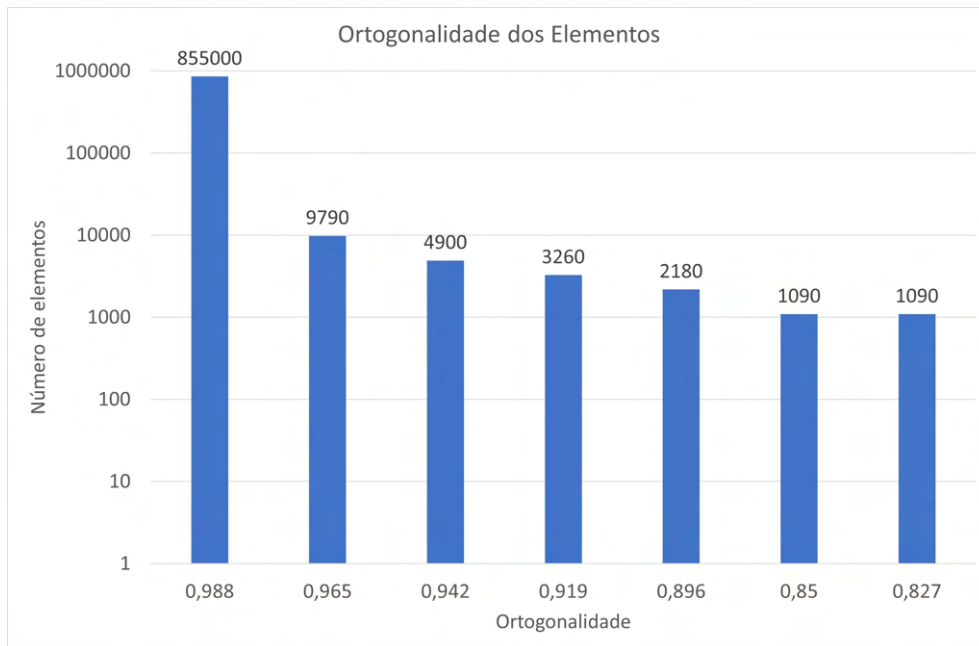


Figura 3.12: Histograma do parâmetro ortogonalidade dos elementos.

do gráfico, número de elementos, estão apresentadas numa escala logarítmica, de base 10.

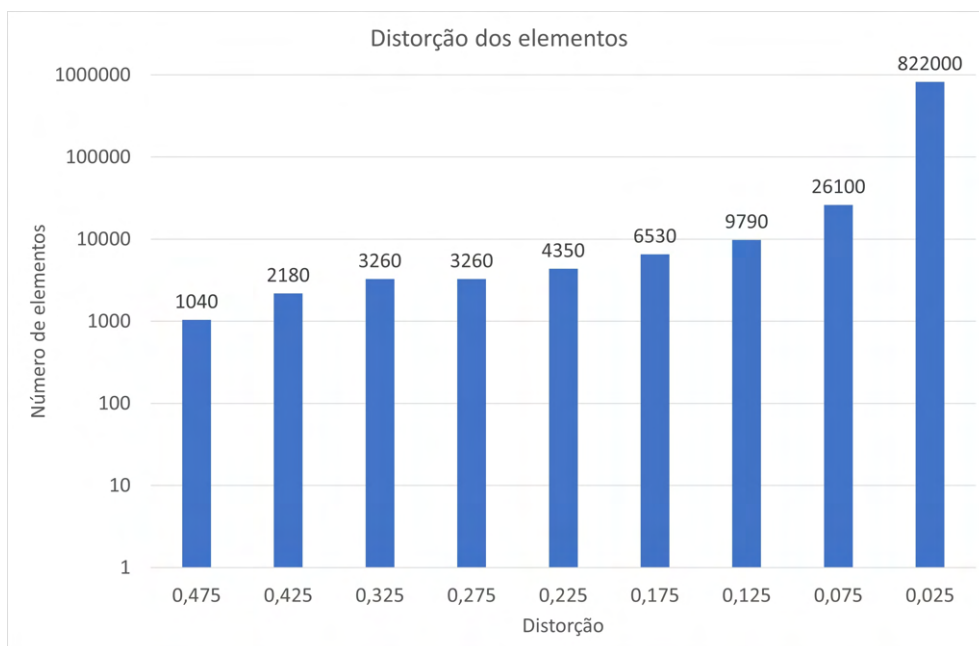


Figura 3.13: Histograma do parâmetro distorção dos elementos.

Do gráfico representado na Figura 3.13 é possível concluir que 93,6% dos elementos da malha apresentam um valor para a distorção de 0,025 e que 96,6% dos elementos apresentam um valor inferior a 0,1. O valor ótimo seria zero, como referido no Subcapítulo 2.5, pelo que se conclui que a malha poderá ser considerada como aceite segundo o parâmetro distorção dos elementos.

O terceiro e último parâmetro analisado para a qualidade da construção da malha escolhida é o rácio de crescimento dos elementos. Na Figura 3.14 é apresentado o número de elementos, numa escala logarítmica de base 10, em função do rácio de crescimento que os mesmos apresentam.

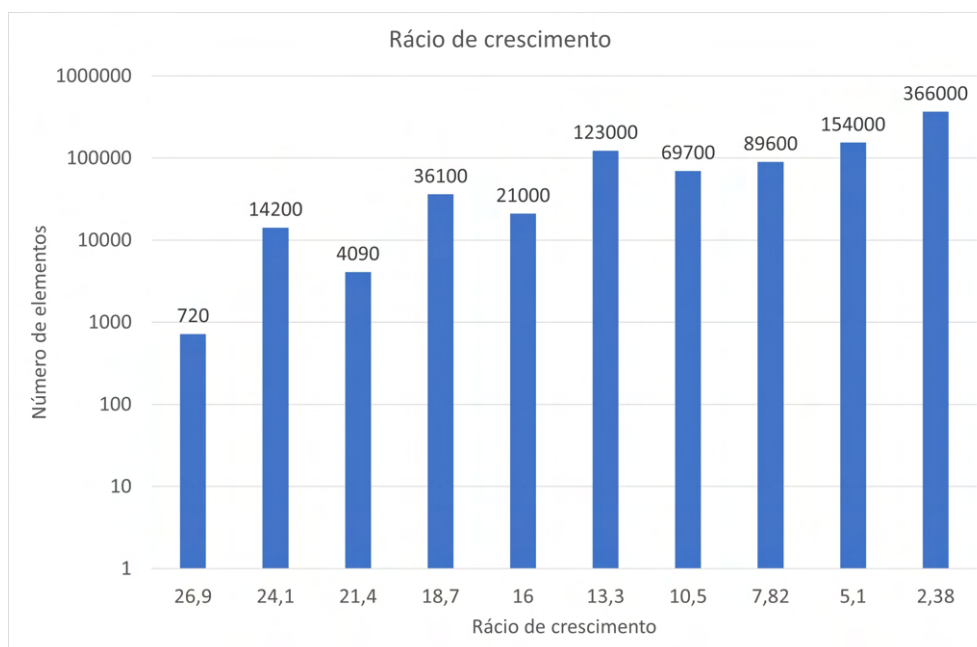


Figura 3.14: Histograma do parâmetro rácio de crescimento dos elementos.

Do gráfico da Figura 3.14 conclui-se que 41,7% dos elementos apresentam um rácio de crescimento de 2,38. Pode ainda concluir-se que 69,4% dos elementos apresentam um rácio de crescimento inferior a 10. Infelizmente, não é possível construir uma malha na qual todos os elementos tenham um rácio de crescimento de 1 (sendo este o valor ótimo para este parâmetro, como apresentado no Subcapítulo 2.5). Para todos os elementos terem um rácio de crescimento de 1 a descretização da malha teria de ser igual ao longo de todo o domínio, garantido então que todos os elementos teriam o mesmo tamanho nas três direções: radial, tangencial e axial. Tal não é possível dado ser um queimador cilíndrico, com *inlets* com uma configuração anelar sobre o eixo de revolução do mesmo. Ou seja, para que na direção radial e axial todos os elementos tenham a mesma dimensão os elementos tem de ser cúbicos, o que não é possível com esta geometria de queimador.

Como descrito anteriormente, para a construção da malha para garantir uma boa relação entre descretização em zonas importantes a serem estudadas e o tempo de simulação, foi aplicado um fator de *bias* (ou seja, um rácio de crescimento a várias zonas do queimador). Com isto, garantiu-se que as zonas de interesse de estudo, nomeadamente o centro do queimador, contém elementos mais refinados. Com o aumento do raio os elementos mais afastados do centro vão tendo dimensões superiores, sendo novamente refinados apenas junto dos limites do domínio, segundo a direção radial. Na direção axial foi também garantido que existe um maior refinamento na saída do queimador, tendo os

elementos depois uma dimensão superior ao longo do domínio computacional até aos 100 mm. Junto do topo do domínio computacional os elementos voltam a ficar mais refinados. Sem aplicar os rácios de crescimento mencionados não teria sido exequível a construção deste caso, e por consequente, uma boa discretização da zona que se pretende estudar.

Para a construção da malha tridimensional estruturada, foi necessário definir um quadrado centrado no domínio com os lados iguais a metade do diâmetro do círculo interior, ou seja, 6,35 mm. Esta zona quadrangular permite que sejam traçadas linhas radiais que dividem o domínio computacional tangencialmente em 4 zonas. Na Figura 3.15 é possível ver uma vista de topo da estrutura de linhas que foram utilizadas para definir o domínio computacional.

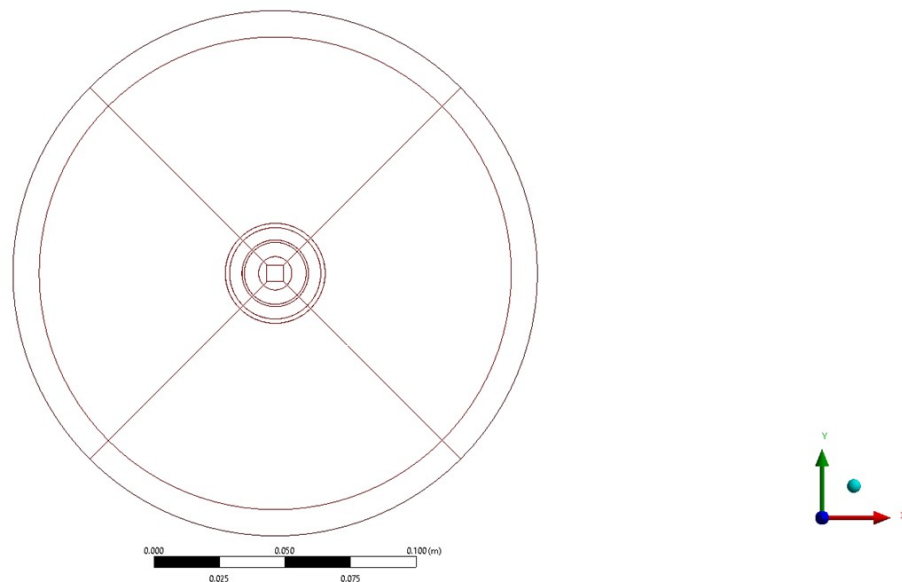


Figura 3.15: Linhas utilizadas para definir o topo do domínio computacional.

Na Figura 3.16 é apresentada uma vista de topo da malha construída com foco na zona central do domínio computacional, onde se destaca o quadrado construído para a definição de uma malha estruturada. Na Figura 3.16 deve ser ignorado os 2 semicírculos a verde pois devem-se a erros de grafismo na exportação da imagem do software que não são possíveis de eliminar.

Na Figura 3.17 é apresentada uma vista de topo completa da malha escolhida.

Na Figura 3.18 é apresentada uma vista lateral da malha escolhida.

Para ser possível visualizar o interior do domínio computacional construído, foi realizado um corte sobre o eixo de revolução do queimador como apresentado na Figura 3.19, onde há que ter em consideração que a zona central não está cortada não estando os elementos á escala. Na Figura 3.19 é possível visualizar duas linhas circulares e um prisma quadrangular a verde, que devem ser ignoradas devido a defeito do grafismo ao exportação as imagens do software *ANSYS FLUENT 18.2*.

Na Figura 3.20 são apresentados, em vista de corte, os *inlets inner slot* e *outer slot*.

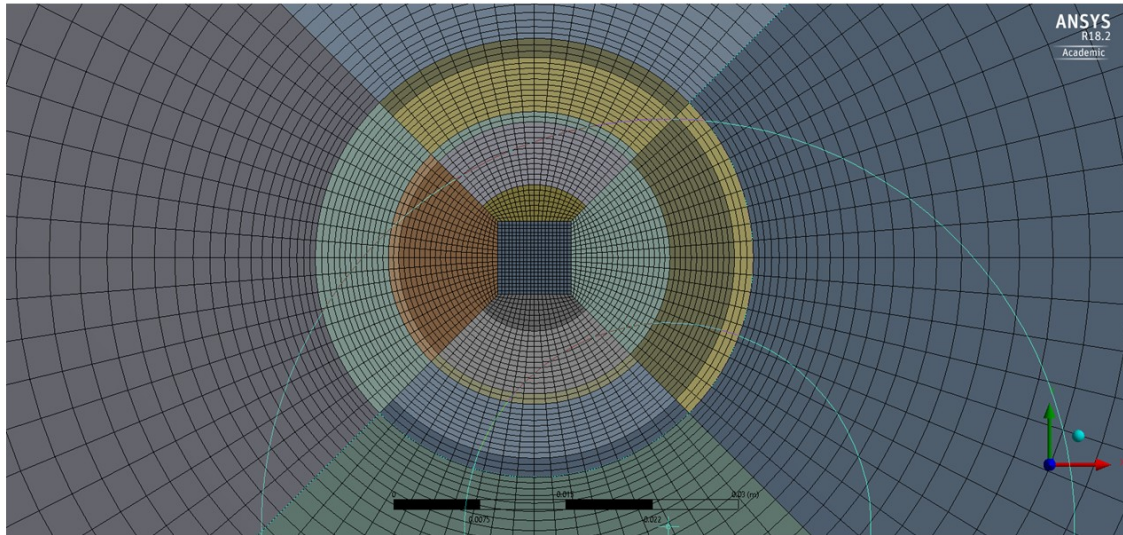


Figura 3.16: Vista de topo da zona central da malha escolhida.

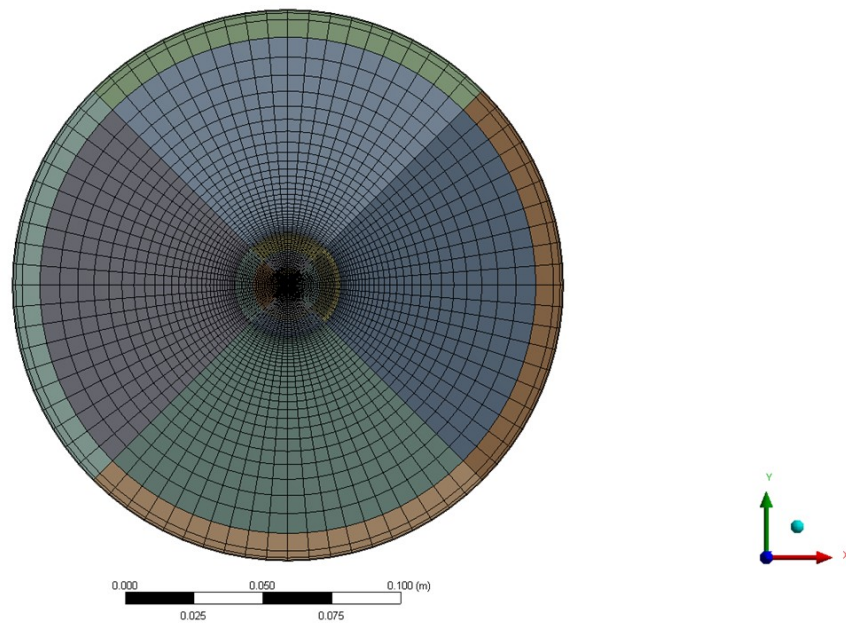


Figura 3.17: Vista de topo da malha escolhida.

Na Figura 3.21 é apresentada uma vista de corte da zona dos *inlets* e da zona a jusante da saída do queimador, na qual deve ser tido em conta as mesmas considerações que a Figura 3.20 em reação à zona central do domínio.

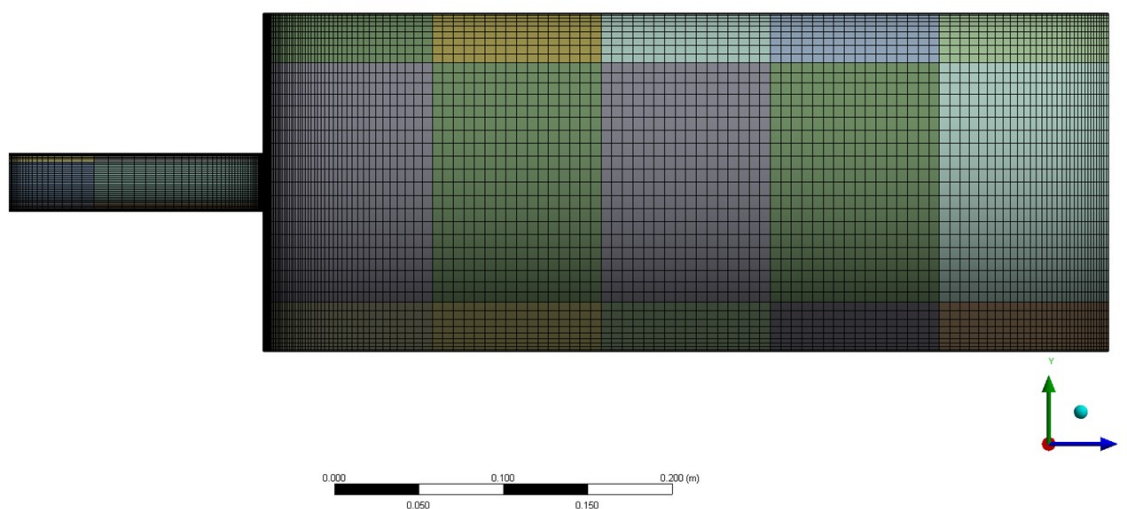


Figura 3.18: Vista lateral da malha escolhida.

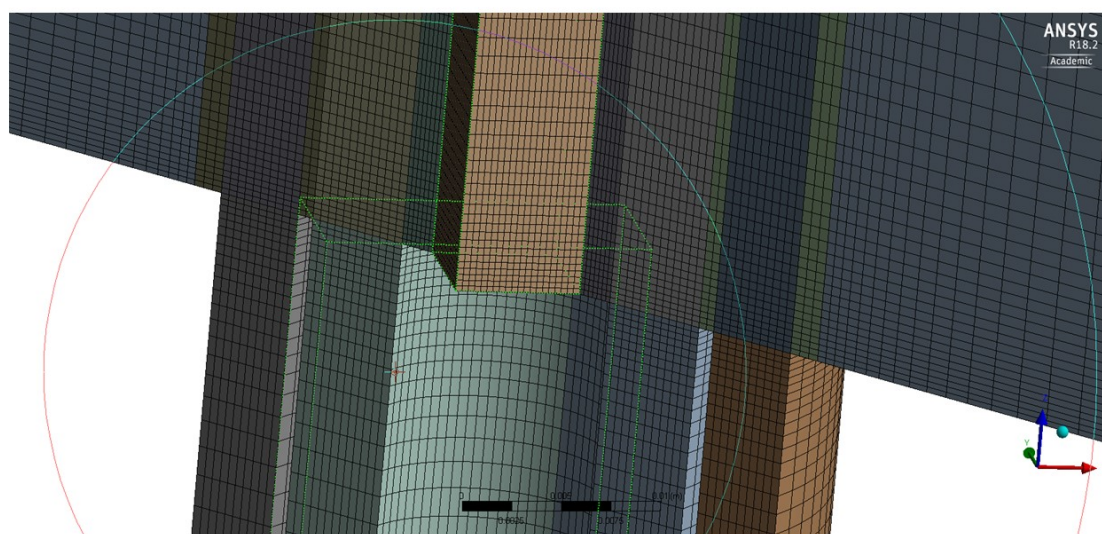


Figura 3.19: Interior do domínio computacional na zona de saída dos *inlets*. A figura não está a escala.

Por fim na Figura 3.22 é apresentada uma vista em corte da zona final do domínio computacional, com a mesma particularidade em relação à zona central que a Figura 3.20. Nesta figura é possível observar o refinamento para a zona do *outlet*. Na Figura 3.22 devem ser ignorado os círculos a verde e vermelho, dado se deverem a erros de grafismo na exportação da imagem do software *ANSYS FLUENT 18.2*.

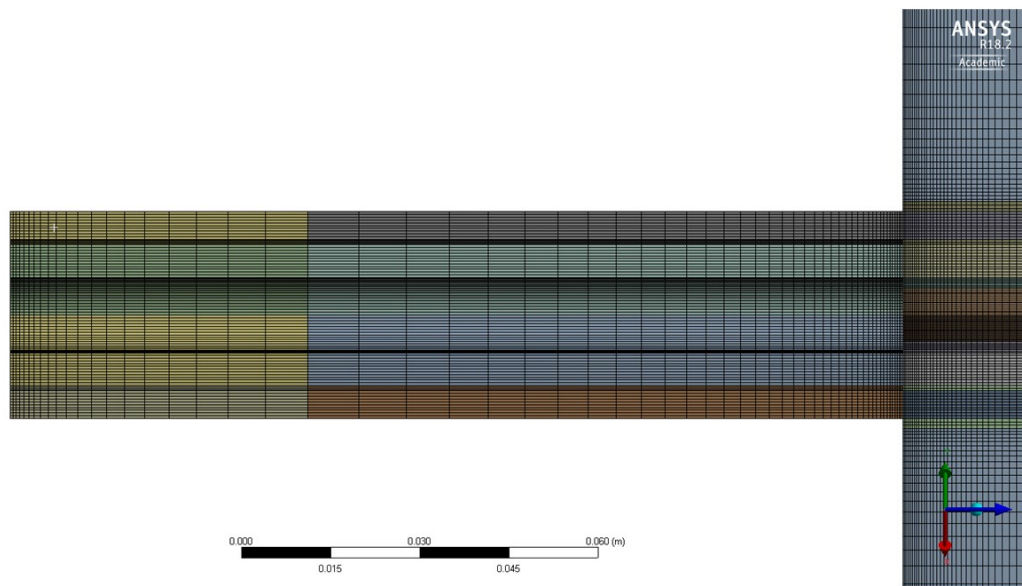


Figura 3.20: Vista em corte com destaque para os *inlets inner slot* e *outer slot*.

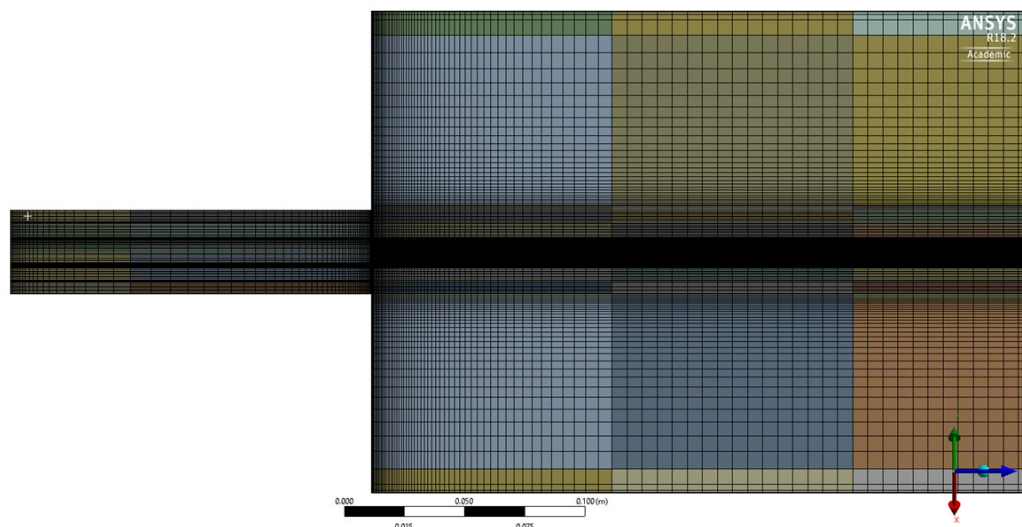


Figura 3.21: Vista em corte com destaque para a zona inicial do domínio.

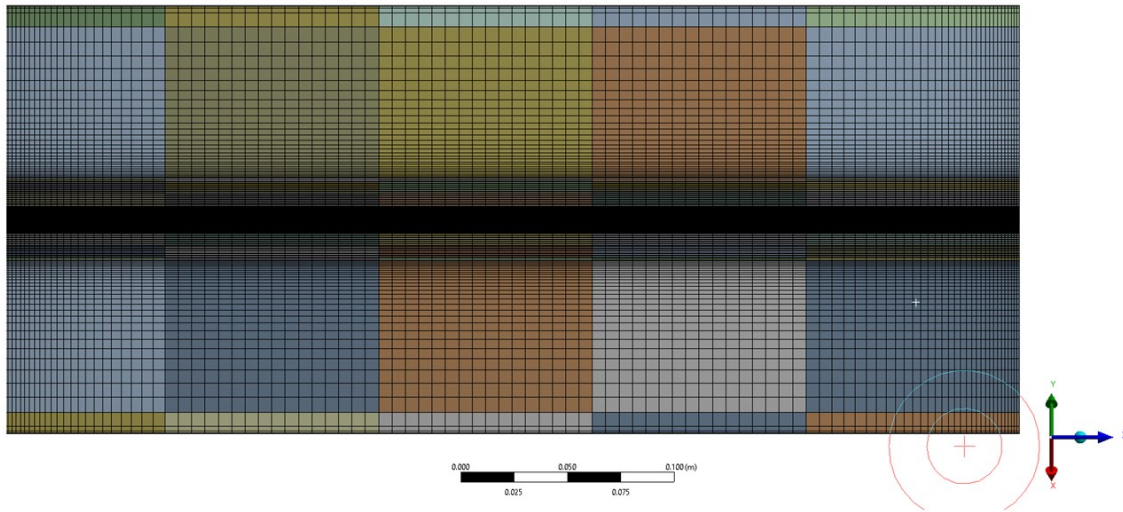


Figura 3.22: Vista em corte com destaque para a zona final do domínio.

3.5 Validação da dimensão do domínio computacional tendo por base a teoria de jato livre

Após selecionada a malha para o estudo do *retrofitting*, será realizada, como descrito no Subcapítulo 2.2.4, uma comparação entre a teoria de jatos axissimétricos apresentada por Vaz, 2007 com os resultados obtidos para um caso sem combustão utilizado para os estudos anteriores, e um caso com combustão utilizado para a queima de CH_4 com o objetivo de validar as condições de fronteira e tamanho do domínio computacional e consequentemente validar os resultados.

Deste modo, na Figura 3.23, são apresentadas as linhas de trajetórias de partículas virtuais, para um caso onde não foram implementados modelos de reação química, e portanto combustão, nem radiação. Foi considerada apenas a utilização do modelo de uma equação de CH_4 do programa *ANSYS FLUENT 18.2*, existindo apenas difusão dos elementos químicos.

Os resultados apresentados na Figura 3.23 em vista de topo, estão influenciados por um não ter sido considerado *swirl*.

Na Figura 3.24 são apresentadas, em vista de topo, as linhas tridimensionais correspondentes a trajetórias de partículas virtuais para o caso completo de combustão de CH_4 .

Como foi descrito no Subcapítulo 2.2.4, e observando a Figura 2.11 conclui-se que os jatos sem *swirl* apresentam as linhas de trajetórias de partículas virtuais que alimentam o mesmo perpendiculares ao seu eixo. Deste modo, quando as linhas deixam de estar perpendiculares, as condições de fronteira aplicadas poderão estar a influenciar os

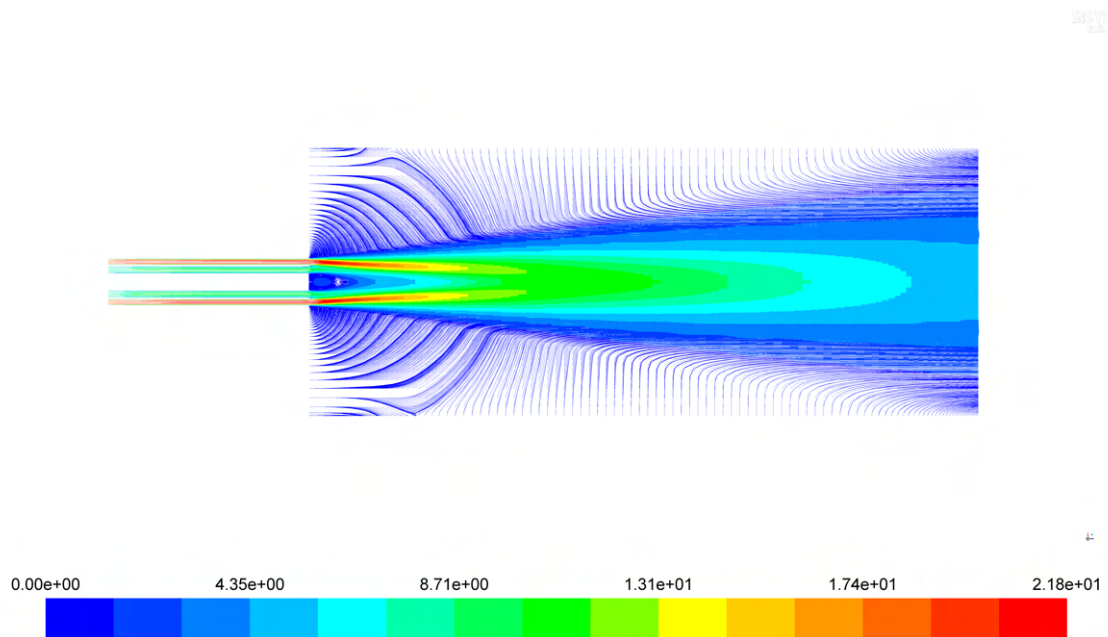


Figura 3.23: Trajetórias de partículas virtuais para o caso sem combustão coloridas pela magnitude de velocidade (m/s).

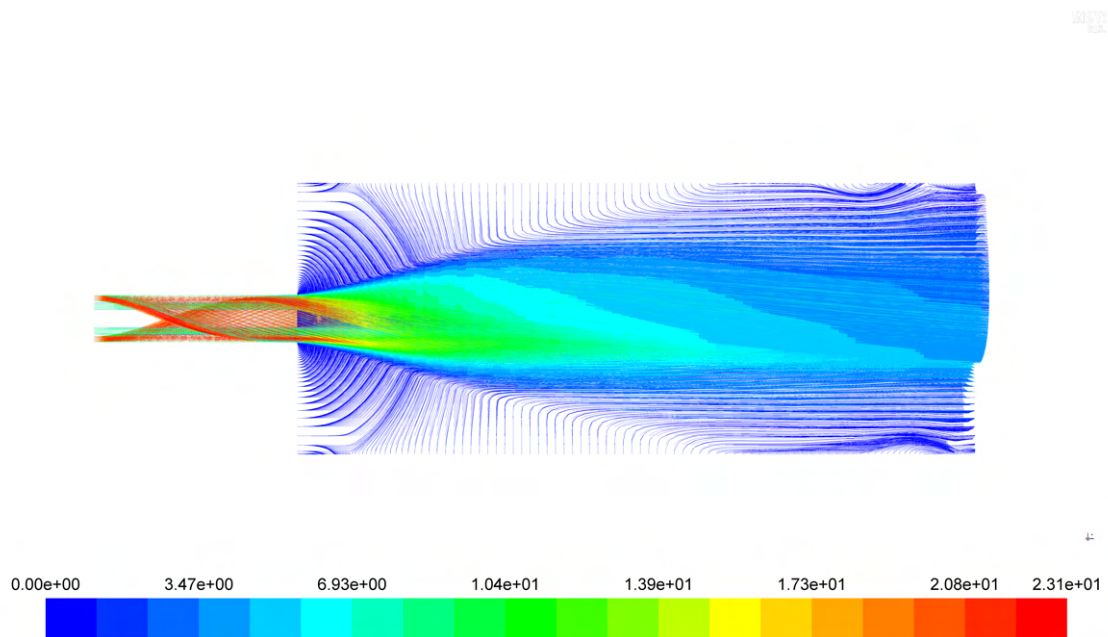


Figura 3.24: Trajetórias de partículas virtuais para o caso com combustão de CH₄ puro coloridas pela magnitude de velocidade (m/s).

resultados.

Da Figura 3.23 conclui-se que, sem entrar em consideração com a componente de *swirl*, deixa-se de sentir a influência do *inlet coflow* após 239 mm ficando as linhas perpendiculares ao eixo do jato até aos 377 mm. A partir de ai passa a ser sentida a condição de fronteira aplicada. Para eliminar a influência da condição de fronteira o domínio deverá

ser entendido na direção radial.

Contudo ao introduzir a componente *swirl*, conclui-se da Figura 3.24, que os limites do domínio na direção radial passam a influenciar os resultados a partir dos 260 mm. Rahimi et al., 2023 consideraram, para o mesmo caso, um domínio de 300 mm de comprimento pelo que os resultados que os mesmos apresentam poderão estar de igual forma influenciados pela condição de fronteira lateral do domínio.

Propõem-se uma extensão no domínio computacional para o dobro na direção radial passando a ter pelo menos 200 mm de raio, permitindo assim uma análise completa ao domínio de 500 mm de comprimento.

Dado o tempo disponível para a presente dissertação optou-se por não alterar o domínio. Para garantir que os resultados que são analisados são validos serão apenas retiradas conclusões até aos 260 mm.

3.6 Estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura *Zimont* e *Peters*

Para determinar as diferenças entre os modelos de pré-mistura *Zimont* e *Peters* foi realizado um estudo comparativo. Neste foi considerada a combustão de apenas metano, sem o modelo de radiação. Neste estudo já foi considerado a componente de *swirl* no *outer slot*.

Foram considerados os seguintes parâmetros para o estudo comparativo:

1. Localização do ponto metade da temperatura máxima numa linha radial entre 0 e 25 mm num plano z a 10 mm da saída do queimador;
2. Localização do ponto de velocidade axial máxima numa linha radial entre 0 e 25 mm num plano z a 10 mm da saída do queimador;
3. Localização sobre o eixo de revolução do domínio computacional do ponto onde a magnitude da velocidade é máxima;
4. Valor máximo da magnitude de velocidade sobre o eixo de revolução do domínio computacional;
5. Localização sobre o eixo de revolução do domínio computacional do ponto onde a magnitude da velocidade é mínima entre aos 10 e 20 mm;
6. Valor mínimo da magnitude de velocidade sobre o eixo de revolução do domínio computacional entre aos 10 e 20 mm;
7. Valor da fração mássica de CO₂ a 5 mm de raio e a uma distância de 10 mm da saída do queimador.

Para o primeiro parâmetro, localização do ponto de metade da temperatura máxima a 10 mm da saída do queimador, é apresentado, na Figura 3.25, um gráfico da temperatura

em função do raio até aos 25 mm num plano a 10 mm da saída do queimador. Este gráfico foi definido com base nos resultados de temperatura que Rahimi et al., 2023 apresentaram para o caso de combustão de CH₄, tendo o parâmetro, localização do ponto onde a temperatura é metade do valor máximo, sido definido de modo a avaliar o decaimento da temperatura com o aumento da distância ao centro.

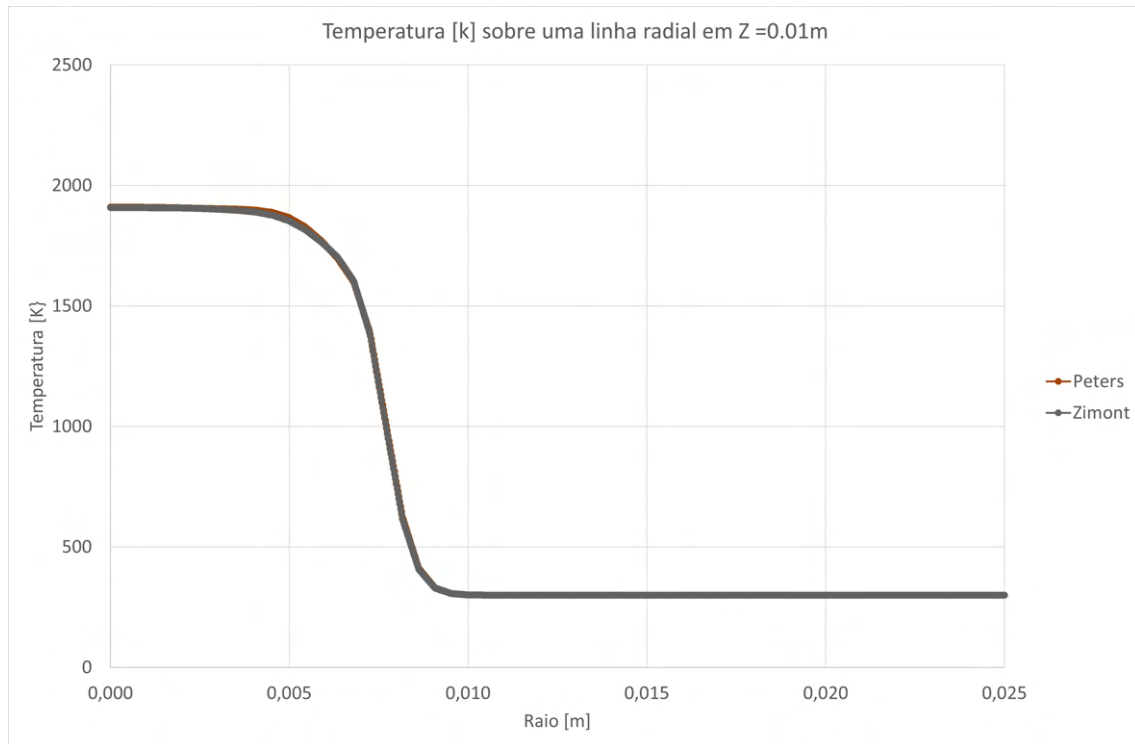


Figura 3.25: Temperatura sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.

Concluí-se que os decaimentos são idênticos. O valor de metade da temperatura máxima para o modelo *Peters* é 954,7 K, enquanto que para o modelo *Zimont* é 953,7 K. Ao interpolar os resultados conclui-se que o ponto de metade da temperatura máxima para o modelo *Peters* se situa a 7,77 mm e a 7,76 mm para o modelo *Zimont*. Na Tabela 3.8 é apresentado, a diferença e o erro relativo do parâmetro localização e temperatura em relação aos valores médios de cada um dos parâmetros.

Tabela 3.8: Resumo dos resultados para o primeiro parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura *Zimont* e *Peters*.

	<i>Peters</i>	<i>Zimont</i>
Metade Temperatura Máxima [K]	954,7	953,7
Diferença [K]		1,0
Erro relativo [%]		0,1
Localização [mm]	7,8	7,8
Diferença [mm]		0,0
Erro relativo [%]		0,0

Para a definição do segundo parâmetro, foram exportados os dados de velocidade

3.6. ESTUDO COMPARATIVO ENTRE OS MODELOS DE PRÉ-MISTURA ZIMONT
E PETERS

axial, sobre a mesma linha que para o primeiro parâmetro, sendo os mesmos apresentados na Figura 3.26.

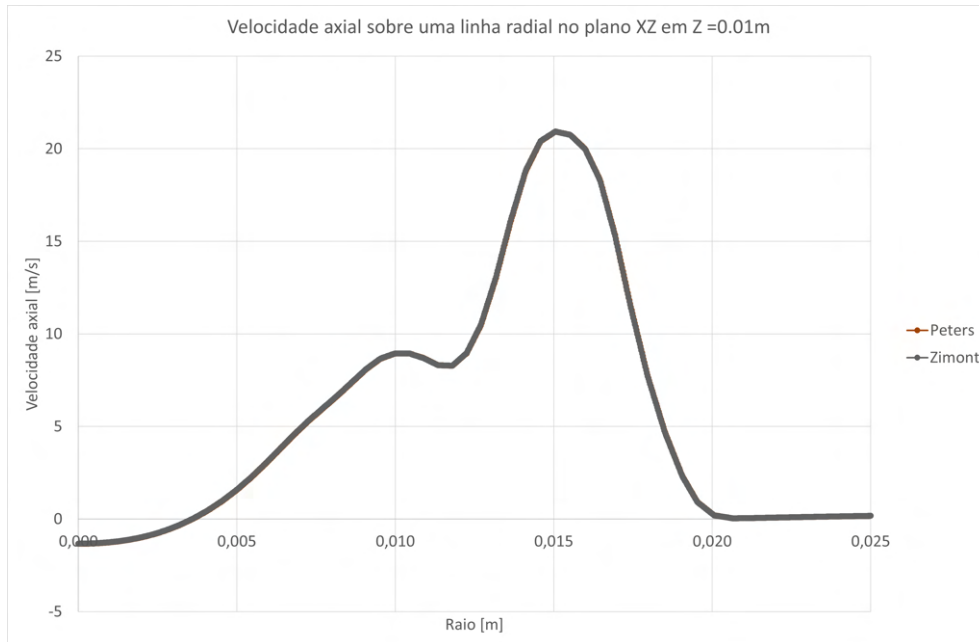


Figura 3.26: Velocidade axial sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.

Da Figura 3.26 conclui-se que o ponto de velocidade axial máxima para o modelo *Peters* sobre a linha radial a 10 mm é 20,9 m/s a 15,0 mm, já para o modelo *Zimont* a velocidade axial máxima é 20,9 m/s a 15,0 mm. Conclui-se da Figura 3.26 que ambos os modelos apresentam resultados muito semelhantes para o parâmetro definido.

Na Tabela 3.9 são apresentados os resultados do segundo parâmetro e apresenta-se também, a diferença entre os valores de velocidade e localização para cada um dos modelos. Conclui-se que para o segundo parâmetro, o valor de velocidade máxima localiza-se no mesmo sítio e tem o mesmo valor. Deste modo, para o segundo parâmetro, os resultados são idênticos usando qualquer um dos modelos, estando ambos a modelar corretamente a velocidade.

Tabela 3.9: Resumo dos resultados para o segundo parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura *Zimont* e *Peters*.

	<i>Peters</i>	<i>Zimont</i>
Velocidade axial máxima [m/s]	20,9	20,9
Diferença [m/s]		0,0
Erro relativo [%]		0,0
Localização [mm]	15,0	15,0
Diferença [mm]		0,0
Erro relativo [%]		0,0

Para a definição do terceiro, quarto, quinto e sexto parâmetros foi traçada uma linha sobre o eixo de revolução do domínio computacional. Sobre a mesma foi obtida a magnitude

de velocidade apresentada na Figura 3.27.

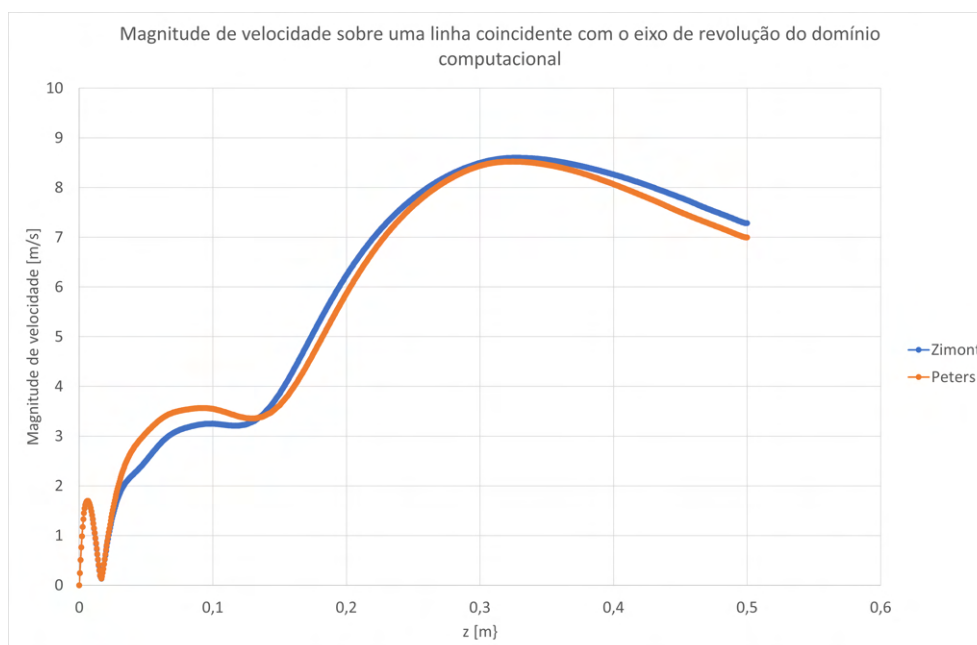


Figura 3.27: Magnitude de velocidade sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.

Da Figura 3.27 é possível observar diferenças no que diz respeito a velocidade sobre o eixo de revolução. Deste modo para o terceiro e quarto parâmetros avaliar-se-á a localização e valor de velocidade máxima. Já para o quinto e sexto parâmetros procura-se entender as diferenças localizadas a montante do domínio, entre 10 e 20 mm, pelo que se procurará o valor mínimo de magnitude de velocidade e a sua localização.

Para o segundo e terceiro parâmetros, para o modelo *Peters*, conclui-se que a velocidade máxima será de 8,5 m/s a 325,2 mm já no modelo *Zimont* a velocidade máxima é de 8,6 m/s também a 325,2 mm.

Para os quinto e sexto parâmetro conclui-se que para o modelo *Peters* o valor mínimo de velocidade entre os 10 e 20 mm é de 3,4 m/s a 131,3 mm, já para o modelo *Zimont* a velocidade mínima neste intervalo é de 3,3 m/s a 130,8 mm.

Na Tabela 3.10 são apresentados os resultados do terceiro ao sexto parâmetros. Foi calculada a diferença em módulo dos valores da velocidade e posição e foi ainda calculado o erro relativo ao valor médio de cada um dos parâmetros.

Conclui-se da Tabela 3.10 que, apesar das diferenças visuais no gráfico, a diferença entre os resultados não é significativamente importante uma vez que o erro ser sempre inferior a 2%.

Por fim, e seguindo os resultados de Rahimi et al., 2023, na Figura 3.28 é apresentada a fração mássica de CO_2 sobre uma linha radial entre 0 e 25 mm a uma distância de 10 mm da saída do queimador. Ao comparar os modelos de pré-mistura, para o caso de combustão de CH_4 , deve ser analisado um parâmetro relativo às reações químicas, que seja diretamente influenciado pelos modelos utilizados. Deste modo, o CO_2 por ser um

3.6. ESTUDO COMPARATIVO ENTRE OS MODELOS DE PRÉ-MISTURA ZIMONT
E PETERS

Tabela 3.10: Resumo dos resultados terceiro ao sexto parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura *Zimont* e *Peters*.

		<i>Peters</i>	<i>Zimont</i>
3º e 4º parâmetros	Velocidade axial máxima [m/s]	8,5	8,6
	Diferença [m/s]		0,1
	Erro relativo [%]		0,6
	Localização [mm]	325,2	325,2
	Diferença [mm]		0,0
	Erro relativo [%]		0,0
5º e 6º parâmetros	Velocidade axial máxima [m/s]	3,4	3,3
	Diferença [m/s]		0,1
	Erro relativo [%]		1,5
	Localização [mm]	131,3	130,8
	Diferença [mm]		0,5
	Erro relativo [%]		0,2

produto da reação da combustão de CH₄ o parâmetro escolhido para o sétimo e oitavo parâmetro.

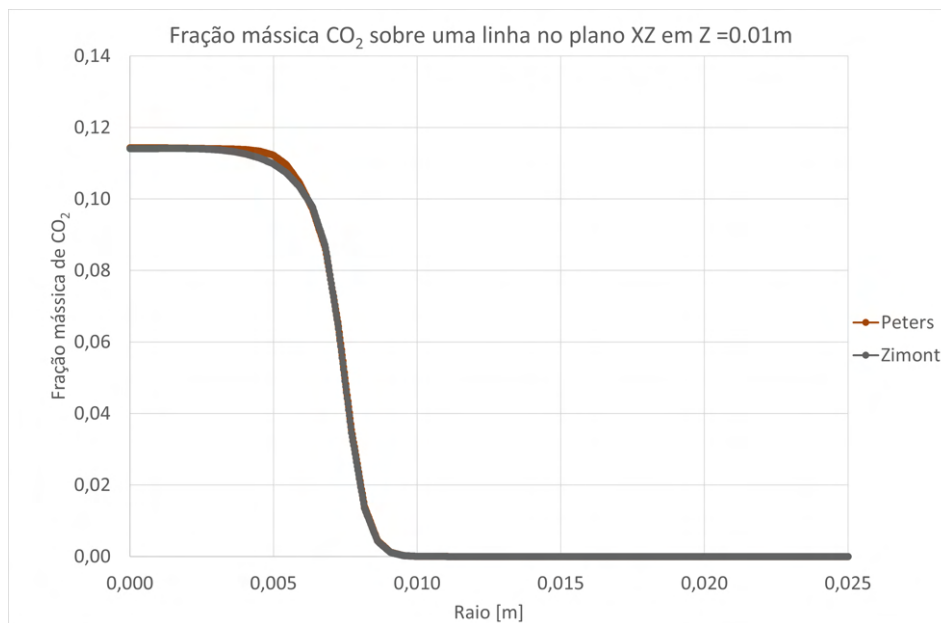


Figura 3.28: Fração mássica de CO₂ sobre uma linha radial entre 0 e 25 mm a 10 mm da saída do queimador.

Da Figura 3.28 conclui-se que a maior discrepância ocorre aos 5 mm, deste modo no sétimo parâmetro foi comparado o valor da fração mássica de CO₂ para ambos os modelos neste ponto. Para o modelo *Peters* a fração mássica de CO₂ é de 0,1 já para o modelo *Zimont* é de 0,1. Na Tabela 3.11 é apresentado os resultados para ambos os modelos bem como a diferença entre os valores e erro relativo em relação ao valor médio de ambos.

Conclui-se, da Tabela 3.11, que o erro relativo é nulo é para o sétimo parâmetro que é influenciado pela modelação química, conclui-se que os modelos de pré-mistura que se

Tabela 3.11: Resumo dos resultados para o sétimo parâmetro do estudo comparativo entre os modelos de pré-mistura *Zimont* e *Peters*.

	<i>Peters</i>	<i>Zimont</i>
Fração mássica	0,1	0,1
Diferença		0,0
Erro relativo [%]		0,0

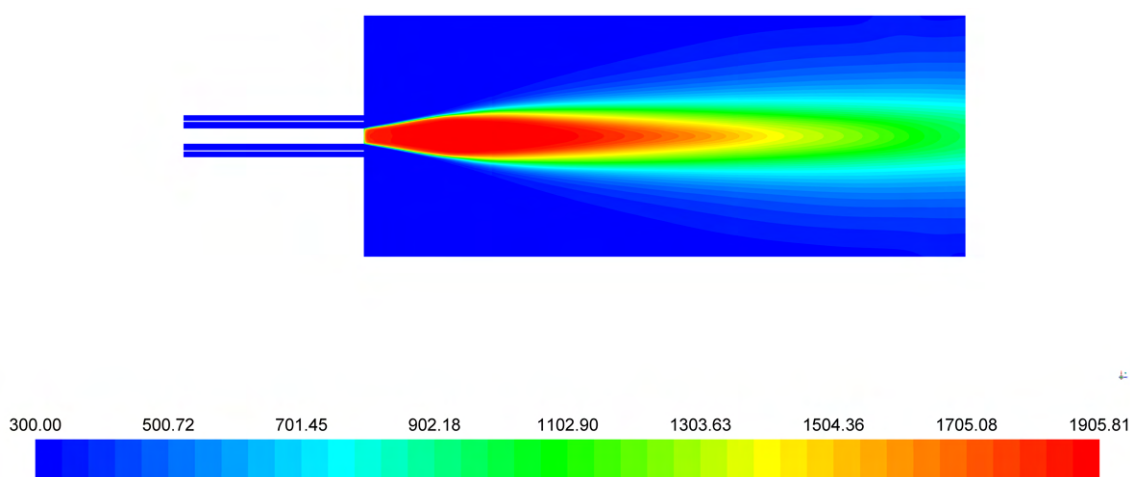
estão a comparar, são ambos adequados para o estudo da dissertação. Dado que o modelo *Zimont* apresentou um tempo de simulação ligeiramente inferior ao modelo *Peters* foi optado pelo uso do modelo *Zimont*.

3.7 Caso CH₄ puro

Após realizado o estudo de independência de malha e os diversos estudos comparativos, é possível construir o caso numérico para a queima de CH₄ puro. Este serve de base para o estudo do *retrofitting* utilizando todos os modelos referenciados no Capítulo 2.

3.7.1 Campos de temperatura

Na Figura 3.29 é apresentado o campo de temperaturas para o caso de combustão de apenas CH₄.

Figura 3.29: Campo de temperaturas, em Kelvin, para o caso de combustão de CH₄ puro.

Rahimi et al., 2023 apresentam resultados para os campos de temperatura, Figura 2.1, estes foram truncados a partir dos 1600 K. Realizou-se a adição de hidrogénio na presente dissertação apenas em ambos os *inlets*, Estes casos para Rahimi et al., 2023, são denominados na Figura 2.1 como "BS". Para o caso de apenas CH₄ puro Rahimi et al., 2023 apresentam este caso como "No H₂".

Dado que Rahimi et al., 2023 truncaram os resultados, o campo de temperaturas utilizando a mesma métrica foi apresentado na Figura 3.30.

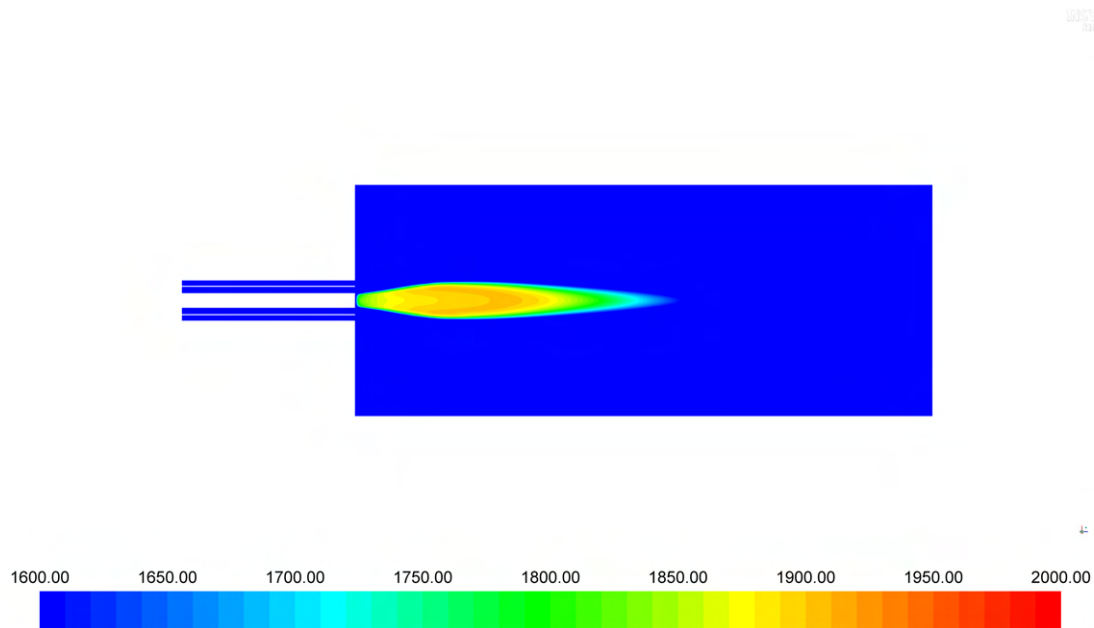


Figura 3.30: Campo de temperaturas, em Kelvin, truncada a partir de 1600 K para o caso de combustão de CH₄ puro.

Visualmente, são perceptíveis diferenças entre os resultados de Rahimi et al., 2023, Figura 2.1, e na presente dissertação, Figura 3.30. Os resultados de Rahimi et al., 2023 apresentam uma zona de destaque de temperatura mais elevada entre os 50 mm e os 100 mm, esta zona não é perceptível nos resultados obtidos na presente dissertação, Figura 3.30.

No Subcapítulo 3.7.4 serão comparados os resultados de temperatura sobre 3 linhas radiais a 10, 30 e 50 mm da saída do queimador, dado serem para estas que Rahimi et al., 2023 apresentam gráficos de temperatura em função do raio, e terem sido com estes que Rahimi et al., 2023 validaram as simulações numéricas de CH₄ puro.

Rahimi et al., 2023 não apresentam resultados para além dos campos de temperatura para a zona onde visualmente as diferenças são superiores entre os resultados da presente dissertação e os resultados de Rahimi et al., 2023, deste modo não é possível realizar uma comparação de resultados mais precisa nesta zona.

Estas diferenças podem dever-se a vários fatores tais como a discretização do domínio computacional, condições de fronteira, ou os modelos utilizados de turbulência, reação química ou interação química-turbulência. Contudo na presente dissertação através da literatura ou estudos comparativos, todos estes fatores foram tidos em conta e avaliados para a construção do caso de CH₄ puro. A grande diferença nos resultados poderá dever-se ao software utilizado, dado que, Rahimi et al., 2023 apresentam resultados obtidos através do programa *Openfoam* enquanto que, na presente dissertação, foi utilizado o programa *ANSYS FLUENT 18.2*.

3.7.2 Campos de velocidade

Para o caso da queima de apenas metano é apresentado, na Figura 3.31, um campo de magnitude de velocidade sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.

Foram ainda obtidos os campos de velocidade axial, radial e tangencial para o caso da queima de CH_4 puro, cujos resultados são apresentados nas Figuras 3.32, 3.33 e 3.34 respectivamente.

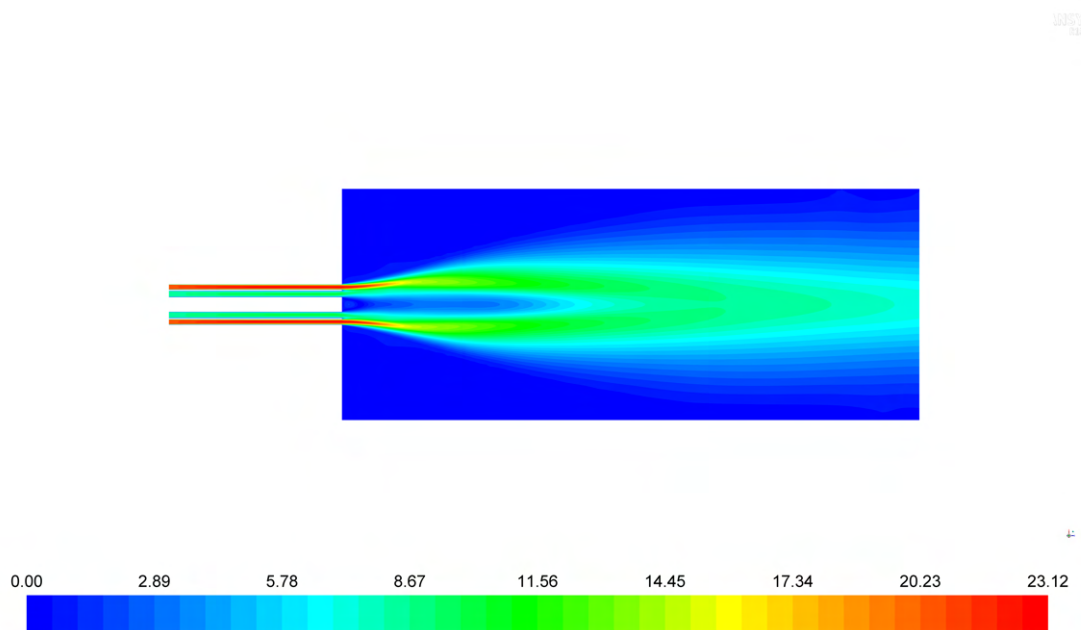


Figura 3.31: Campo da magnitude da velocidade, em m/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.

Conclui-se das Figuras 3.32, 3.33 e 3.34 que, a componente axial da velocidade é dominante sobre as outras. Dado que existe *swirl*, ou seja velocidade tangencial definida no *inlet outer slot* esta não pode ser desprezada. Contudo, apesar de não ter sido definida velocidade radial, na Figura 3.33 fica claro que esta existe e para maior rigor também não deve ser desprezada.

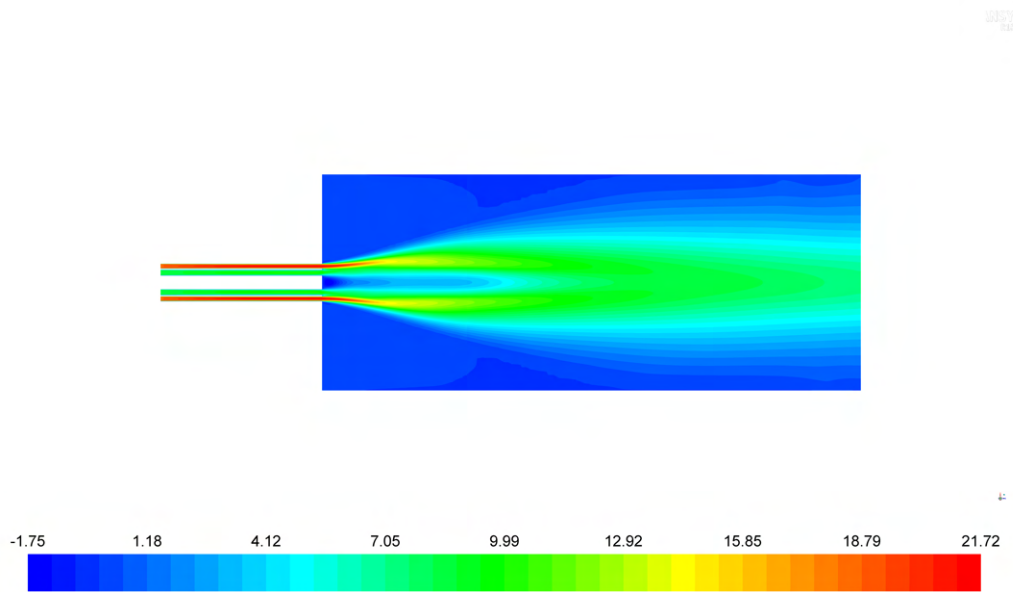


Figura 3.32: Campo de velocidade axial, em m/s, para o caso de combustão de CH₄ puro.

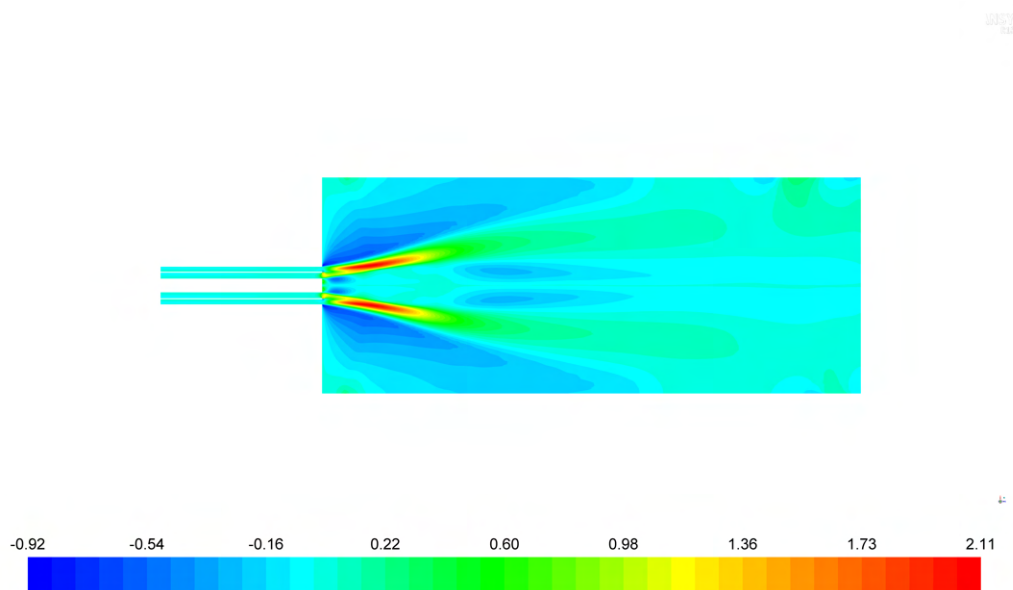


Figura 3.33: Campo de velocidade radial, em m/s, para o caso de combustão de CH₄ puro.

Em linha com o estudo do Subcapítulo 3.5 e das linhas de trajetória de partículas virtuais apresentadas na Figura 3.24 para o caso sem combustão, são apresentadas na Figura 3.35 as linhas de corrente coloridas pelo campo de temperaturas em Kelvin para o caso de combustão de CH₄ puro. Na Figura 3.36 são apresentadas as linhas de corrente coloridas pelo campo de temperatura na zona da saída do queimador. Pelo que, pela geometria do queimador com *bluff-body* é criada uma zona de recirculação localizada no centro do queimador que permite arrastar o combustível dos jatos que saem dos *inlets* para o centro e estabilizando a chama nesta zona.

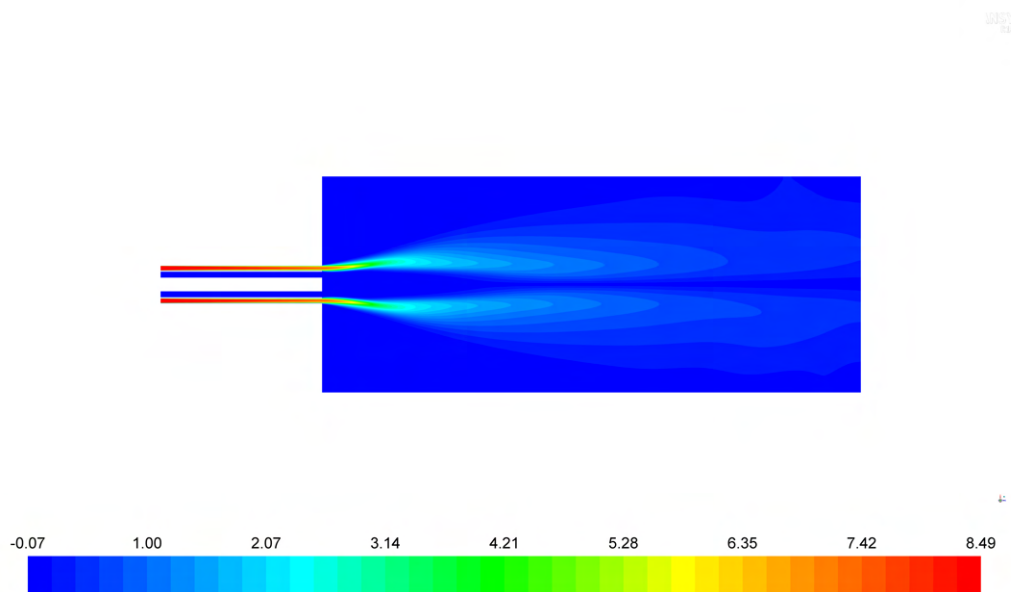


Figura 3.34: Campo de velocidade tangencial, em m/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.

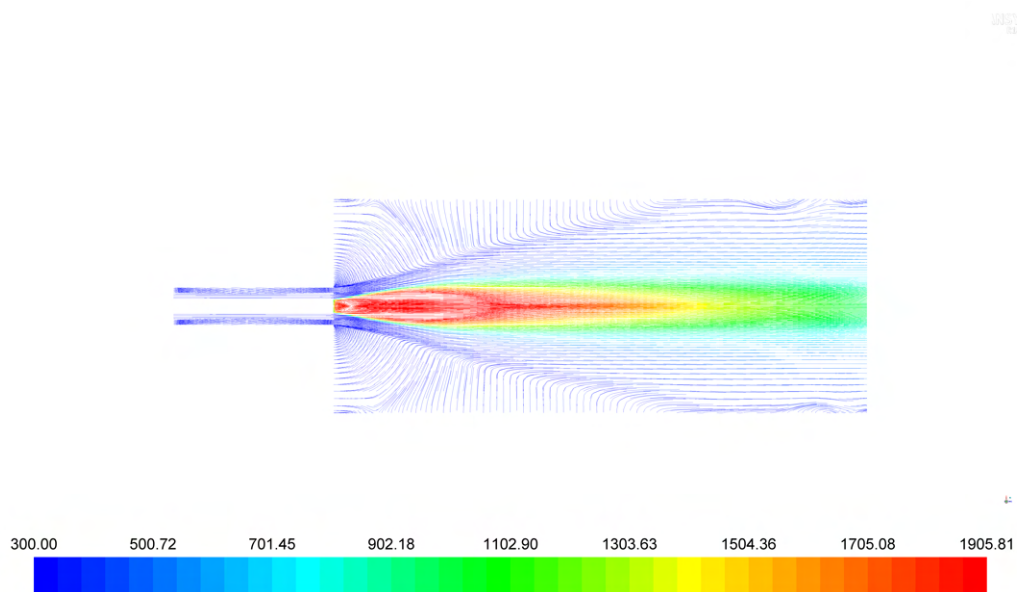


Figura 3.35: Trajetórias de partículas virtuais coloridas pela temperatura, em Kelvin, para o caso de combustão de CH_4 puro.

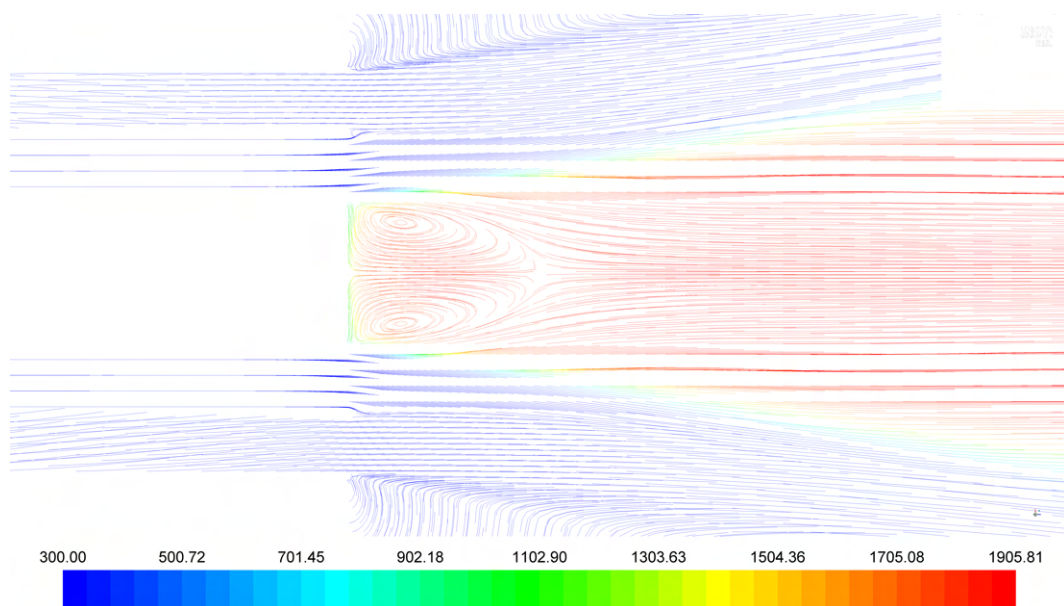


Figura 3.36: Trajetórias de partículas virtuais coloridas pela temperatura, em Kelvin, com destaque para a saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

3.7.3 Campos das taxas de deformação e formação de produtos de reação

Como descrito no Subcapítulo 2.7, foi utilizado um modelo para a modelação química do tipo *flamelet*. Estes tipos de modelos foram desenhados para garantir que a zona de início de formação dos produtos de reação, onde a taxa de formação dos produtos é superior, (zona de fronteira da chama) é corretamente modelada para zonas onde o escoamento tem uma alta taxa de deformação. Deste modo, apresenta-se na Figura 3.37 o campo de taxa de formação dos produtos, e na Figura 3.38, a zona de maior taxa de deformação.

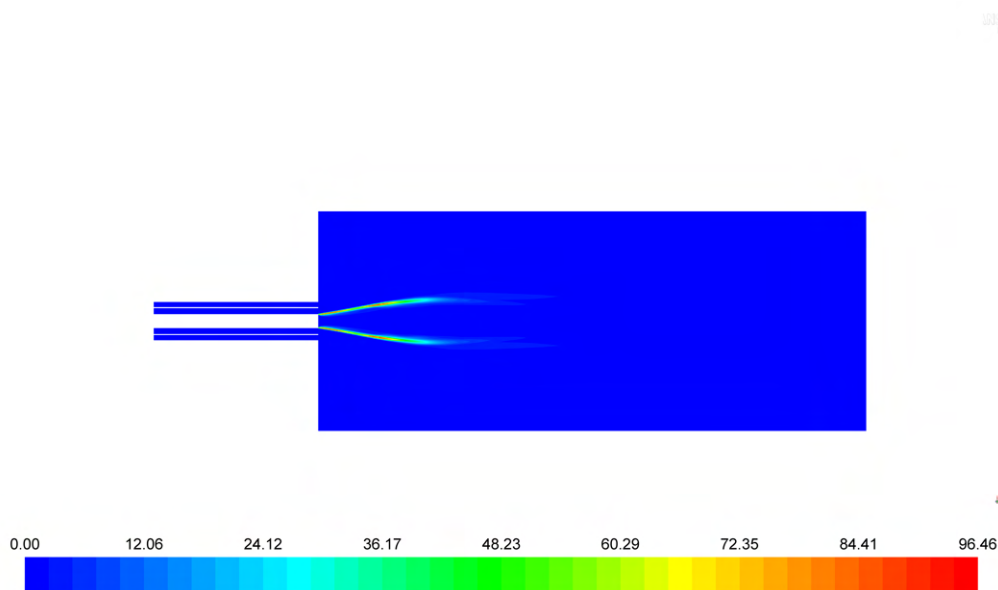


Figura 3.37: Campo da taxa de formação dos produtos de reação, 1/s, para o caso de combustão de CH₄ puro.

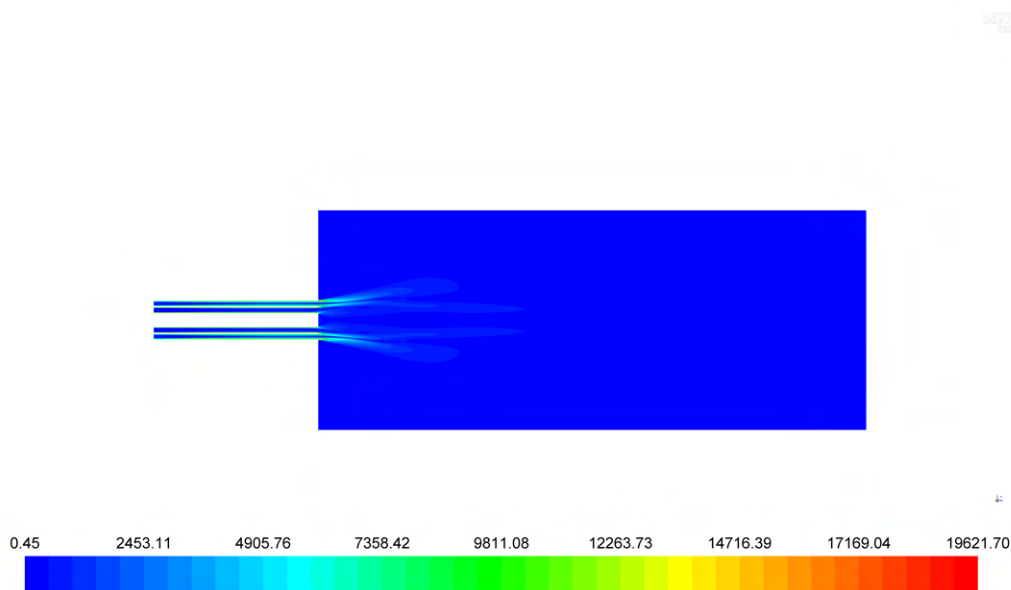


Figura 3.38: Campo da taxa de deformação, 1/s, para o caso de combustão de CH_4 puro.

Conclui-se das Figuras 3.37 e 3.38 que a zona de maior taxa de deformação não está localizada na zona onde a taxa de formação dos produtos de reação é maior, o que significa que o modelo não está a ser utilizado na zona onde este tipo de modelos foi desenhado para obter maior desempenho. Isto não implica que o modelo utilizado não seja válido.

No Subcapítulo 3.7.4 serão comparados os resultados obtidos na presente dissertação para o caso da queima de CH_4 puro, com os apresentados por Rahimi et al., 2023.

3.7.4 Comparação e validação de resultados

Rahimi et al., 2023 validam os seus resultados numéricos a partir de resultados experimentais de Fordoei et al., 2021 e Wang et al., 2018 e apresentam resultados para três linhas radiais entre 0 e 25 mm de raio, localizadas a 10, 30 e 50 mm da saída do queimador. Para estas linhas Rahimi et al., 2023 apresentam resultados numéricos e experimentais para a temperatura, velocidade axial, velocidade tangencial e para a fração mássica de CO_2 .

3.7.4.1 Temperatura

Nas Figuras 3.39, 3.40 e 3.41 são apresentados gráficos de temperatura em função do raio, sobre linhas radiais a 10, 30 e 50 mm respetivamente.

Dos gráficos apresentados nas Figuras 3.39, 3.40 e 3.41 é possível concluir que os resultados estão em concordância com os resultados numéricos e experimentais apresentados por Rahimi et al., 2023.

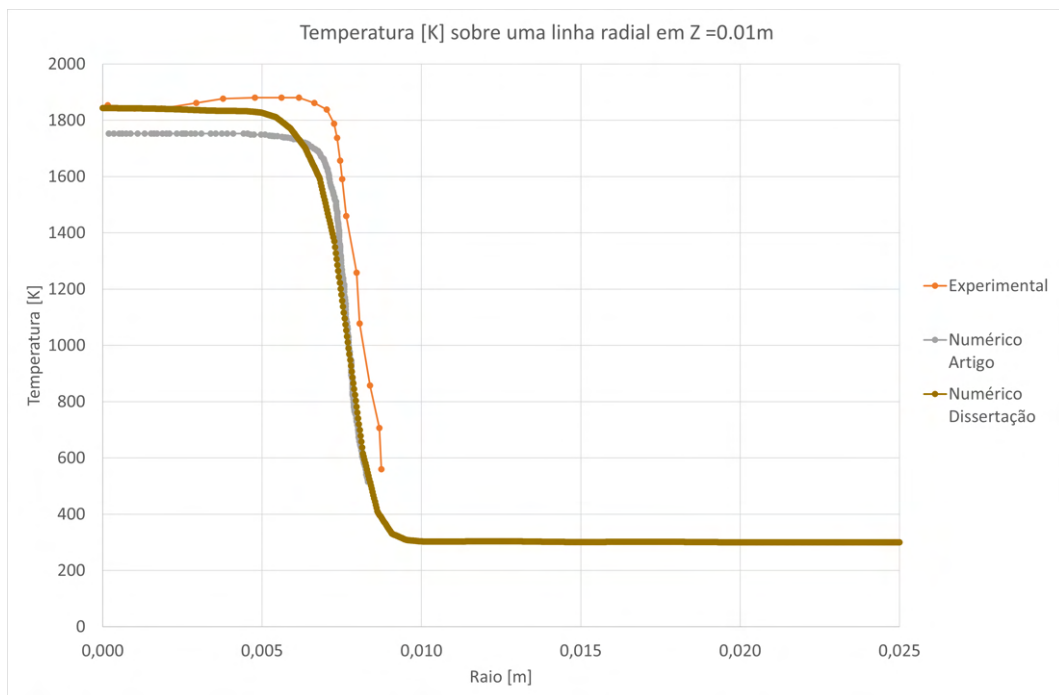


Figura 3.39: Gráfico de temperatura sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

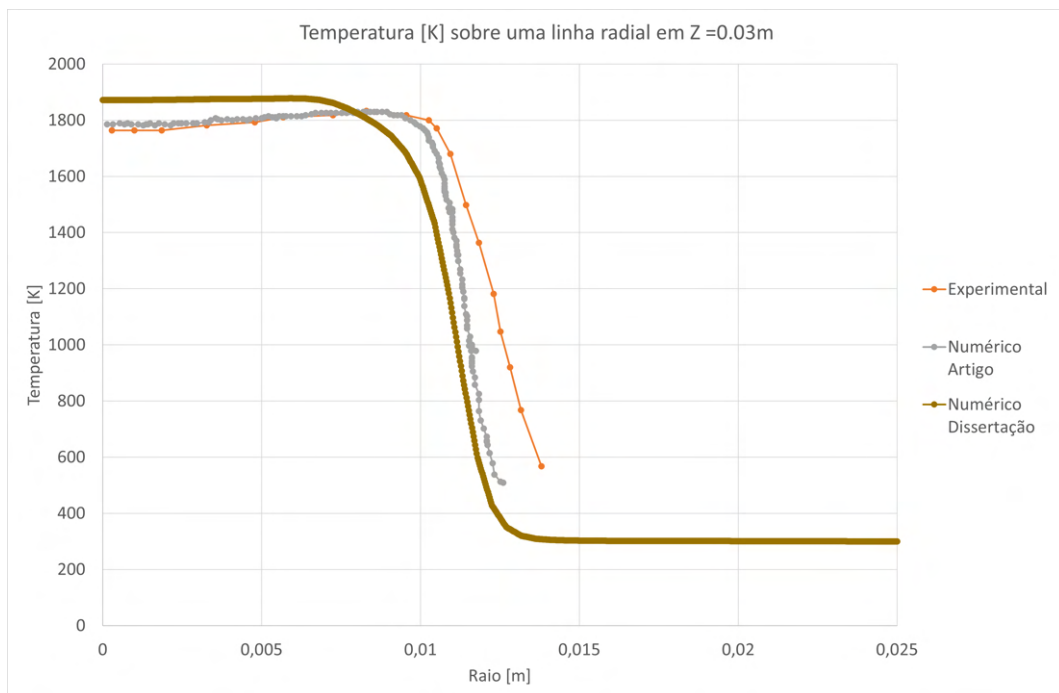


Figura 3.40: Gráfico de temperatura sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

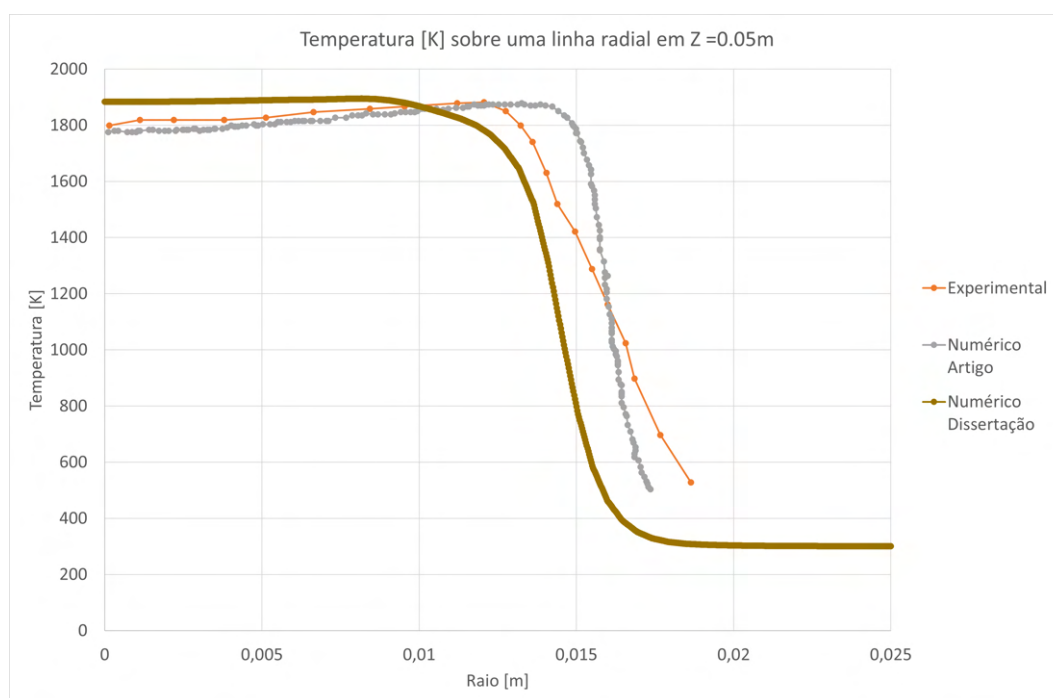


Figura 3.41: Gráfico de temperatura sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH_4 puro.

Das Figuras 3.39, 3.40 e 3.41 conclui-se que o decaimento da temperatura à medida que se afasta do queimador tem tendência a estar mais afastado da linha central, o que significa que a chama têm tendência a ficar mais larga pelo menos até aos 50 mm. Contudo, é evidente que os resultados de Rahimi et al., 2023 tanto experimentais como numéricos apresentam uma chama mais larga que os resultados da presente dissertação. Deste modo, estas diferenças podem ser justificadas pelos modelos de reação química ou de interação química-turbulência selecionados, como apresentado no Capítulo 2. Em alternativa teria de ser utilizado um modelo do módulo de *Species Transport* nomeadamente o *EDC*, que não foi selecionado devido ao elevado tempo computacional que o mesmo requer. Considera-se ainda assim que, apesar das ligeiras discrepâncias, os três resultados estão em concordância.

3.7.4.2 Velocidade axial

Nas Figuras 3.42, 3.43 e 3.44 são apresentados gráficos de velocidade axial em função do raio, sobre linhas radiais a 10, 30 e 50 mm respetivamente.

Das Figuras 3.42, 3.43 e 3.44 conclui-se que os resultados obtidos na presente dissertação estão em concordância com os resultados numéricos e experimentais apresentados por Rahimi et al., 2023.

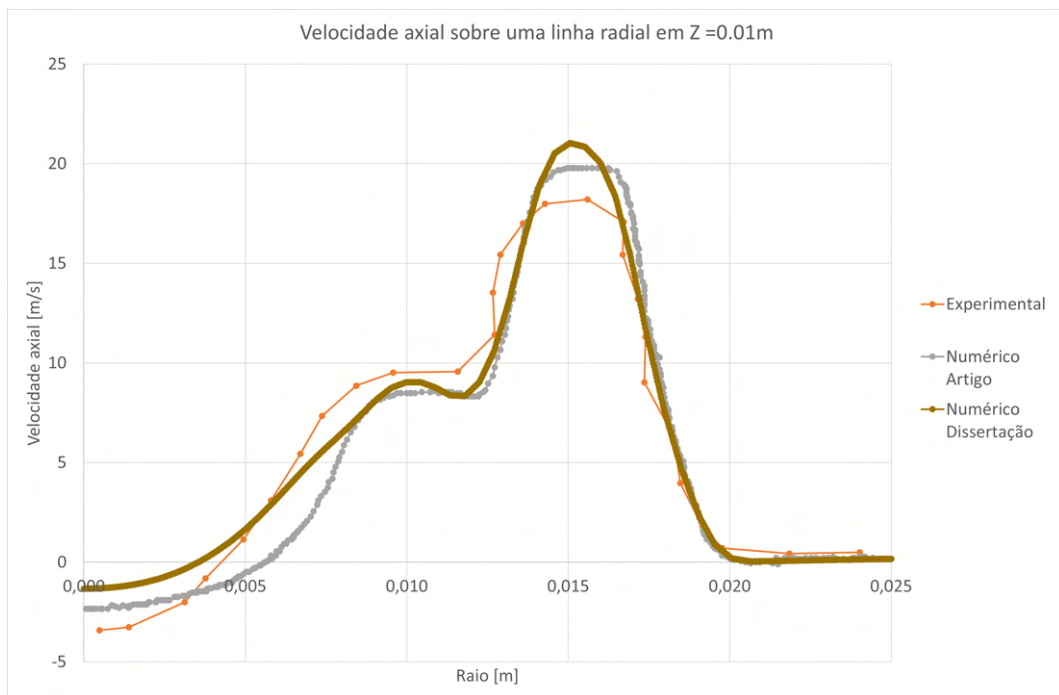


Figura 3.42: Gráfico de velocidade axial sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

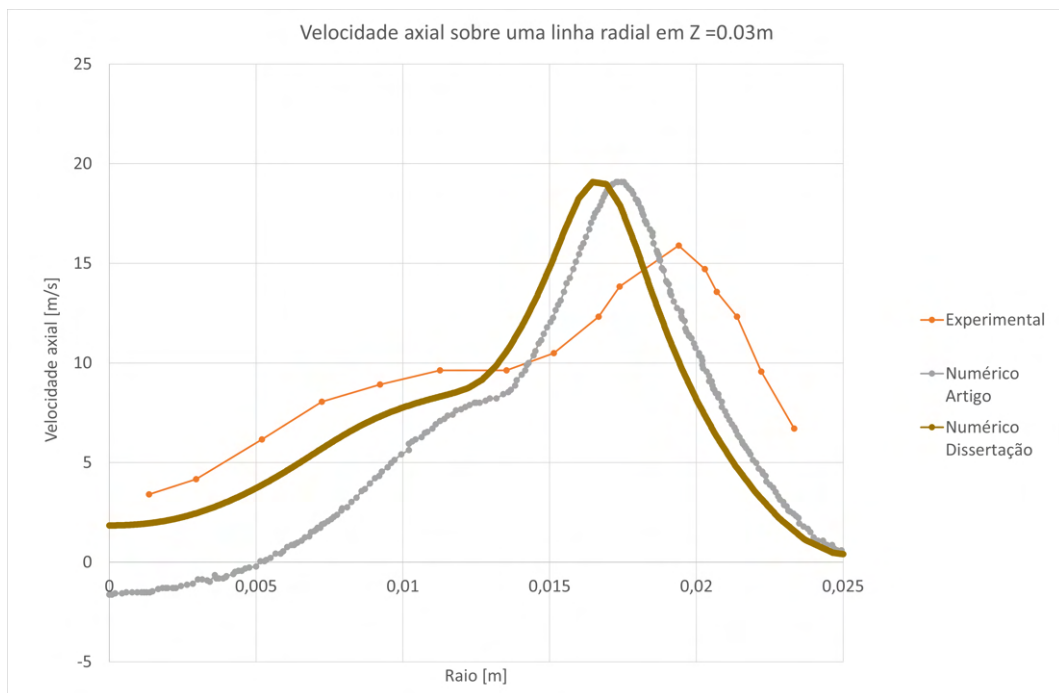


Figura 3.43: Gráfico de velocidade axial sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

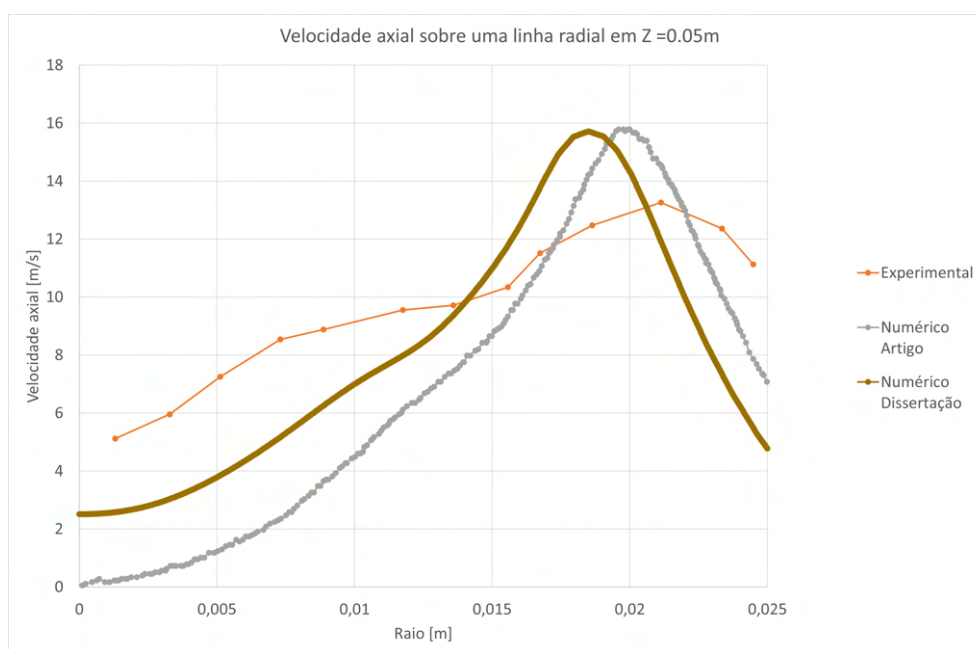


Figura 3.44: Gráfico de velocidade axial sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH_4 puro.

Conclui-se das Figuras 3.43 e 3.44 que à medida que se afasta da saída do queimador, o pico de velocidade máxima apresenta-se mais afastado da linha central para os casos de Rahimi et al., 2023. Para o caso da presente dissertação, o facto do pico se manter mais próximo da linha central apresenta-se coerente com os resultados apresentados para os gráficos da temperatura, onde o decaimento da mesma acontecia também mais próximo da linha central do nos os casos de Rahimi et al., 2023. Este fenómeno é justificado pelo facto da chama obtida na presente dissertação ser menos larga e mais comprida que as obtidas por Rahimi et al., 2023.

Conclui-se ainda que sobre a linha central, onde raio é 0 mm, os resultados numéricos de Rahimi et al., 2023 apresentam valores de velocidade axial igual a zero para os 50 mm, enquanto que os da presente dissertação junto aos 30 mm já se apresentam positivos, ou seja, a zona de recirculação apresentada na Figura 3.36 é inferior á de Rahimi et al., 2023. Para que este fenómeno aconteça têm de existir divergências nas velocidades que foram definidas, ou dado que no trabalho de Rahimi et al., 2023 é desconhecido o tamanho dos *inlets*, Rahimi et al., 2023 na definição deste tamanho poderão não ter definido um comprimento suficientemente para garantir que o escoamento estava completamente desenvolvido. Os resultados da dissertação apresentam-se mais próximos dos experimentais nesta zona inicial quando comparados com os numéricos de Rahimi et al., 2023, podendo ser o tamanho desconhecido dos *inlets* a razão para estas divergências.

3.7.4.3 Velocidade tangencial

Nas Figuras 3.45, 3.46 e 3.47 são apresentados gráficos de velocidade tangencial em função do raio sobre linhas radiais a 10, 30 e 50 mm, respetivamente.

Tal como acontece nos gráficos de velocidade axial, a componente tangencial de velocidade tem o seu pico máximo, no caso da presente dissertação, mais próximo do eixo de rotação do domínio computacional do que os restantes resultados de Rahimi et al., 2023, sendo mais clara a diferença à medida que se afasta da saída do queimador.

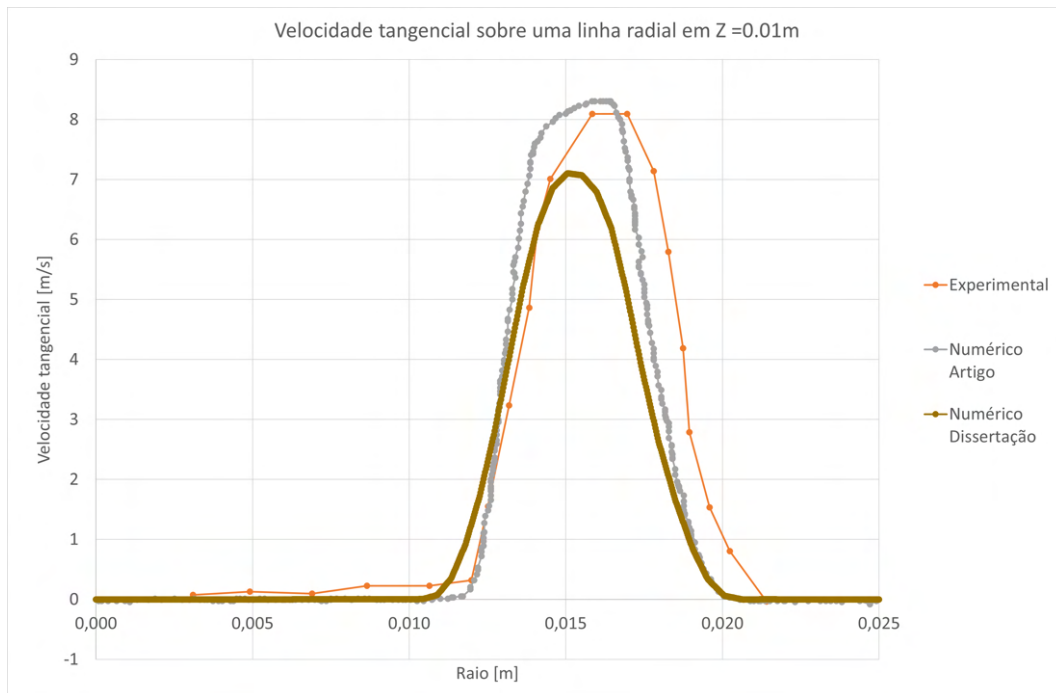


Figura 3.45: Gráfico de velocidade tangencial sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

Justifica-se, de igual forma, a deslocação do pico máximo com o facto da chama obtida ser mais estreita, ou seja, os jatos adjacentes à chama tem tendência a ficar mais paralelos ao eixo de rotação do domínio. Como referido anteriormente, analisou-se na presente dissertação, a influência das condições de fronteira, do tamanho do domínio computacional e do refinamento da malha e concluiu-se que não são fatores que devam estar a influenciar o jato nesta zona do domínio. Dado que o modelo de reação química, utilizado na presente dissertação é mais completo e complexo que o modelo de Rahimi et al., 2023 esta poderá ser a justificação para as diferenças dos resultados. Outra razão poderá prender-se com o modelo utilizado para a modelação da interação química-turbulência que, como descrito anteriormente, para ser utilizado outro, nomeadamente o EDC é necessário um maior poder computacional. Por fim, esta diferença no comportamento da chama pode ainda dever-se à diferença entre o modelo de turbulência utilizado. Realizou-se na presente dissertação um estudo comparativo entre os modelos, que não contemplou *swirl* no *inlet outer slot*, mas que permitiu concluir que, na presente dissertação poderia ser utilizado o modelo $k - \varepsilon$ *Realizable* por outro lado, Rahimi et al., 2023 utilizaram o modelo $K - \omega$ *SST*. Conclui-se no entanto que a diferença nos resultados do parâmetro da velocidade tangencial não é significativa para se poder descartar os resultados obtidos.

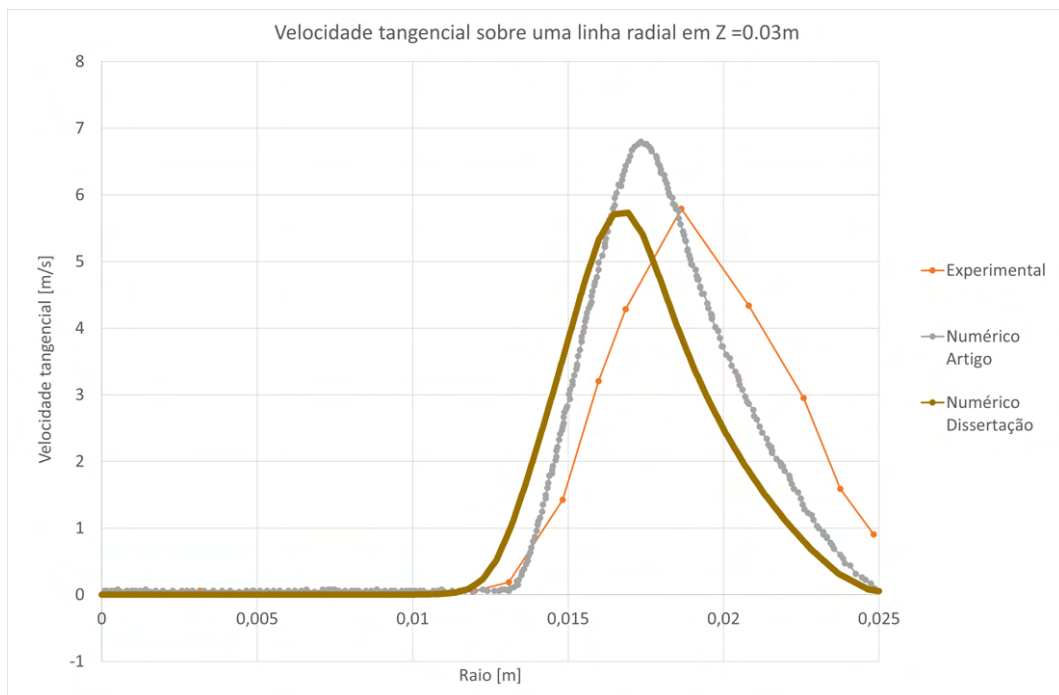


Figura 3.46: Gráfico de velocidade tangencial sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

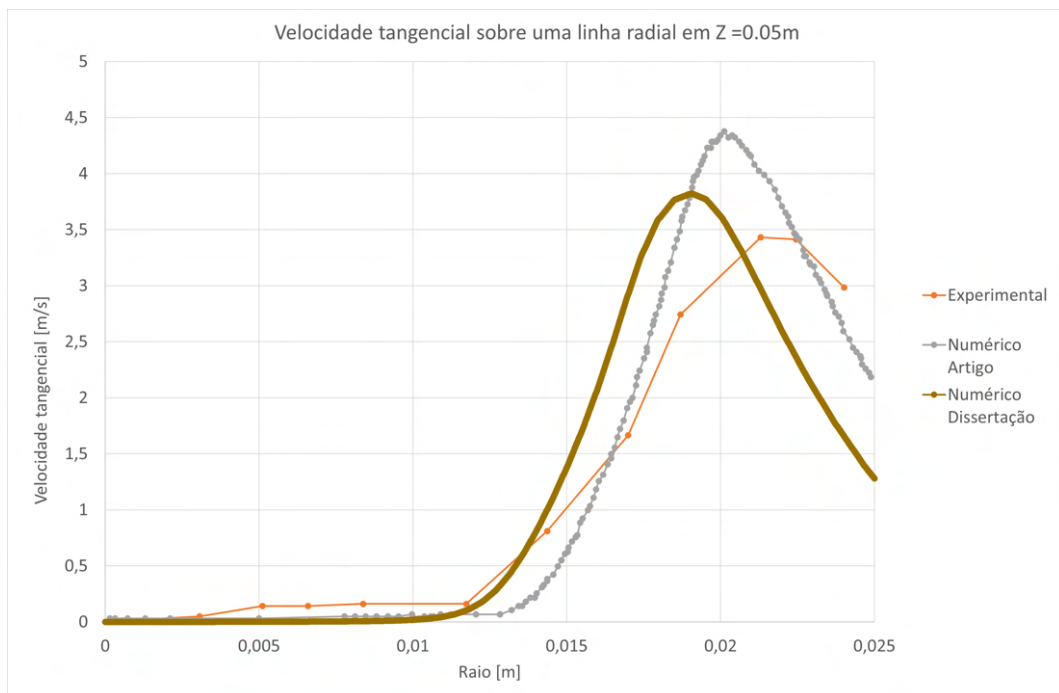


Figura 3.47: Gráfico de velocidade tangencial sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

3.7.4.4 Fração mássica de CO₂

Nas Figuras 3.48, 3.49 e 3.50 são apresentados gráficos de fração mássica de CO₂ em função do raio, sobre linhas radiais a 10, 30 e 50 mm, respetivamente.

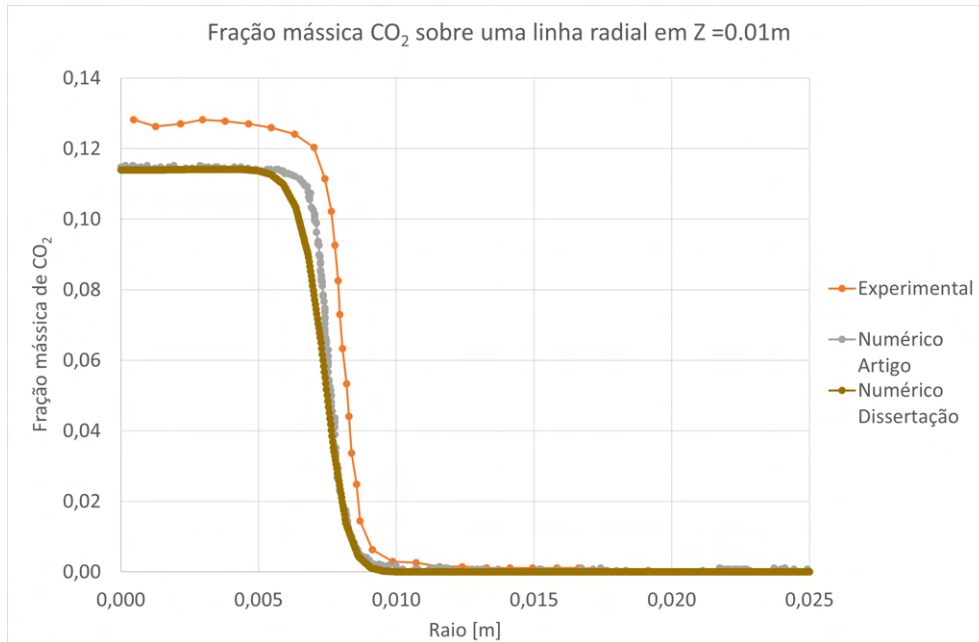


Figura 3.48: Gráfico da fração mássica de CO₂ sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

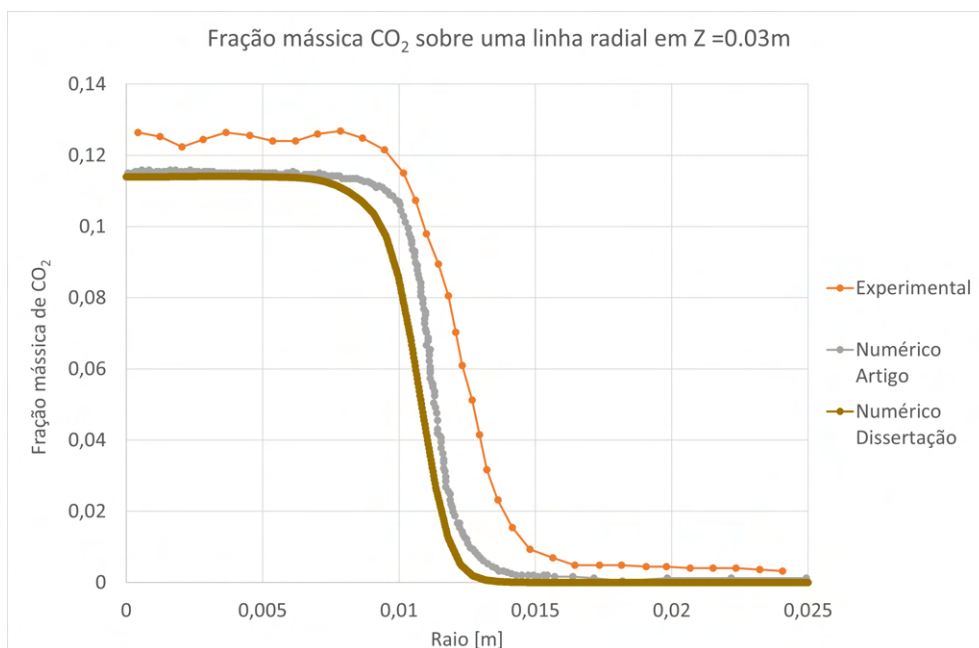


Figura 3.49: Gráfico da fração mássica de CO₂ sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

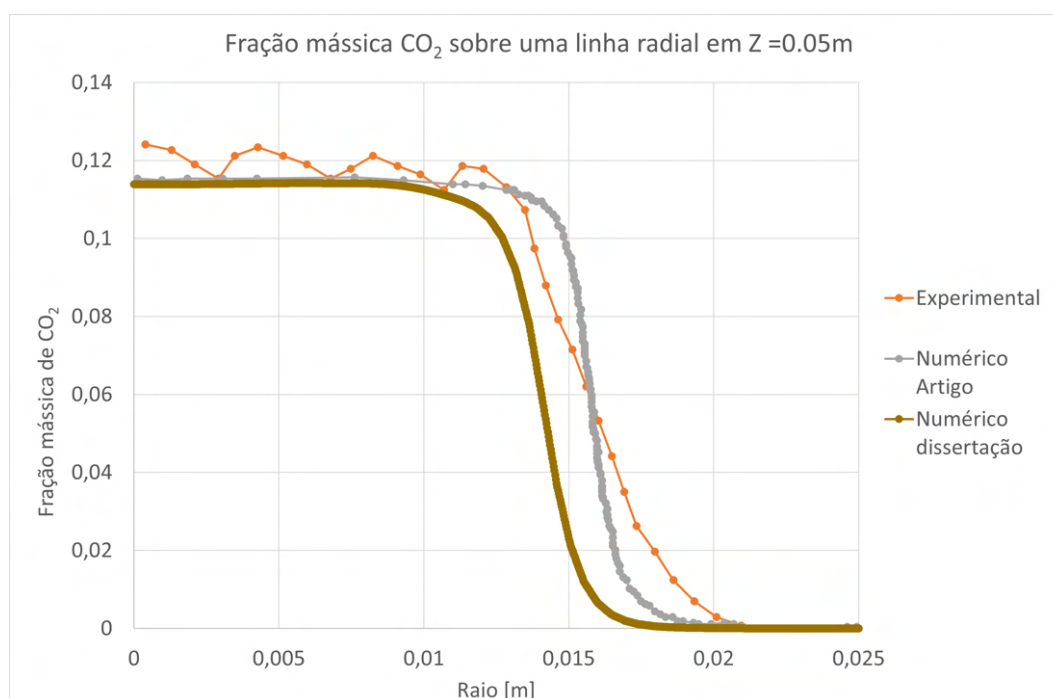


Figura 3.50: Gráfico da fração mássica de CO₂ sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o caso de combustão de CH₄ puro.

Das Figuras 3.48, 3.49 e 3.50 é possível concluir que a modelação da combustão de CH₄ está corretamente realizada dado que os resultados obtidos na presente dissertação estão alinhados com os resultados numéricos e experimentais de Rahimi et al., 2023. Tanto os resultados da presente dissertação como os resultados numéricos de Rahimi et al., 2023, estão um pouco divergentes dos resultados experimentais principalmente na linha a 10 mm. Contudo, acredita-se que esta diferença entre resultados numéricos e experimentais, e como os resultados experimentais apresentam mais flutuações, se deva a dificuldades de medição das frações mássicas de CO₂ em laboratório. Aos 50 mm passa a ser evidente que o decaimento da fração mássica de CO₂ ocorre mais próximo do eixo de revolução do domínio, que pode ser novamente justificado pelo estreitamento da chama.

Conclui-se que a modelação da queima de CH₄ puro está correta e que os resultados obtidos são coerentes e estão em concordância com os de Rahimi et al., 2023. Deste modo, considerando os resultados obtidos para a queima de CH₄ como válidos, o estudo prosseguirá com a introdução de hidrogénio.

3.8 Casos misturas de CH₄ e H₂

Após avaliada a combustão de CH₄ puro, tal como era proposto na presente dissertação, foi introduzido H₂ na queima. De seguida serão apresentados os resultados de temperatura, fração mássica de H, O, OH e CH₄ para os casos de queima de misturas de CH₄ e 2%, 5%, 10%, 20%, 40%, 60% e 80% de fração molar de hidrogénio. A queima de hidrogénio puro no presente queimador foi contemplada à parte no Capítulo 3.9.

3.8.1 Resultados para a temperatura

Como na presente dissertação se pretende comparar os resultados obtidos com os de Rahimi et al., 2023 para a queima de mistura, pretendem-se extrair os resultados tais como apresentados os de Rahimi et al., 2023. Assim, serão apresentados os campos de temperatura, Subcapítulo 3.8.1.1, e as temperaturas sobre linhas radiais a 50 e 150 mm da saída do queimador, Subcapítulo 3.8.1.2.

3.8.1.1 Campos de temperatura

Em primeiro lugar, apresentam-se os campos de temperatura sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional. Optou-se por apresentar dois campos diferentes de temperatura, um primeiro onde a temperatura varia dos 300 K até aos 2500 K, obtendo-se assim todo o espectro de temperaturas, e outro onde a temperatura varia dos 1600 K até aos 2500 K, já que as reações químicas e a queima ocorrem acima dos 1600 K. O restante campo de temperaturas inferiores a 1600 K, apenas corresponde à dissipação de calor. Rahimi et al., 2023 apresentam apenas os campos de temperaturas para meia chama, dos 1600 K aos 2000 K, Figura 2.1. Optou-se, na presente dissertação, por aumentar a gama de temperatura dos 2000 K (usada por Rahimi et al., 2023) para os 2500 K dado que se verificou que ao aumentar a percentagem de H₂ acima de 40 %, a temperatura máxima torna-se superior a 2000 K.

Na Figura 3.51 são apresentados os campos de temperatura dos 300 K aos 2500 K para os casos de combustão de CH₄ puro como referência, e de 2%, 5%, 10%, 20%, 40%, 60% e 80% de H₂.

Na Figura 3.52 são apresentados os campos de temperatura dos 1600 K aos 2500 K para os casos de combustão de CH₄ puro como referência, e de 2%, 5%, 10%, 20%, 40%, 60% e 80% de H₂.

Conclui-se, das Figuras 3.51 e 3.52 que a adição de hidrogénio aumenta a temperatura máxima da chama. É possível observar que o aumento da percentagem de H₂ faz com que a chama aumente de largura dos 45 mm para os 65 mm a cerca dos 100 mm da saída do queimador. Os resultados de Rahimi et al., 2023 são apresentados na Figura 2.1. Concluiu-se que o domínio computacional deveria ser estendido para além dos 300 mm, utilizado por Rahimi et al., 2023, para ser feita a adição de maiores percentagens de hidrogénio. Este aumento foi realizado para os 500 mm na presente dissertação. Contudo, das Figuras 3.51 e 3.52, recomenda-se que o domínio computacional se deva estender para além dos 500 mm, tendo por consequência o aumento também na largura do domínio segundo o concluído no Subcapítulo 3.5. Propõem-se que seja feita a extensão do domínio no comprimento para os 1000 mm e na largura para os 800 mm. Assim haverá a garantia que as condições de fronteira ao longo de todo o domínio não irão influenciar os resultados para os casos de estudo do presente queimador com as condições de funcionamento que foram realizadas na presente dissertação.

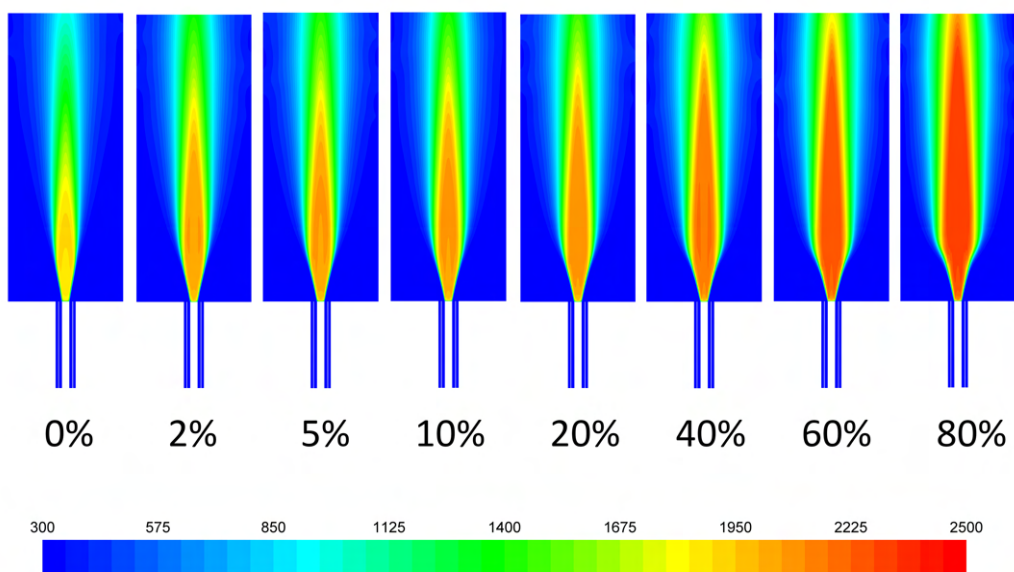


Figura 3.51: Campos de temperatura, em Kelvin, sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio.

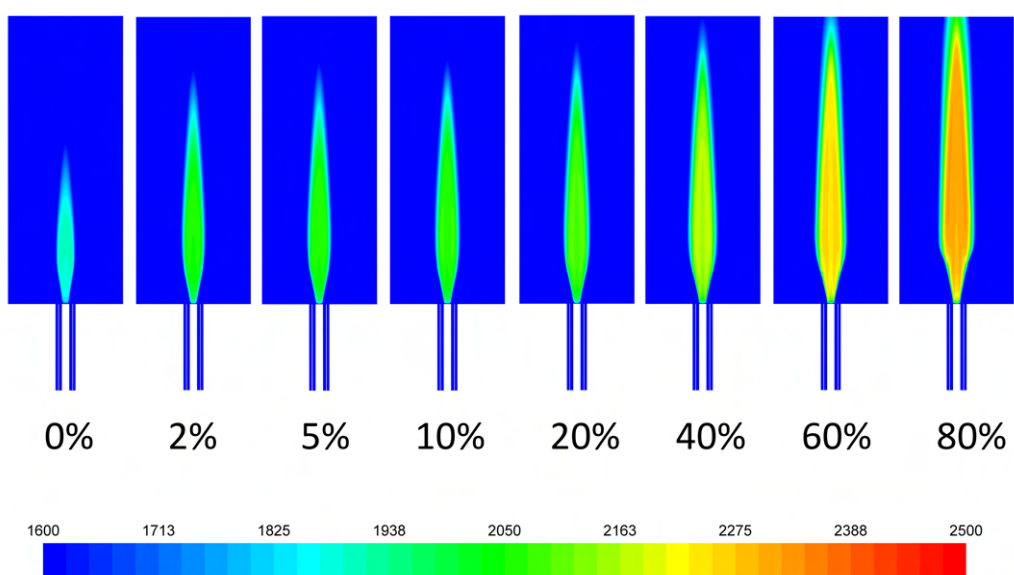


Figura 3.52: Campos de temperatura, em Kelvin, truncado a valores inferiores a 1600 K sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio.

Conclui-se das Figuras 3.51 e 3.52 que o aumento da percentagem de hidrogénio torna a chama mais comprida, mais larga e ocorre um aumento da temperatura máxima no interior da mesma.

Ao comparar os campos de temperatura de Rahimi et al., 2023 na Figura 2.1, com a Figura 3.52 da presente dissertação, conclui-se que, Rahimi et al., 2023 obtiveram campos

de temperatura onde é evidente um aumento localizado da temperatura, no interior da chama enquanto que, na presente dissertação, toda a chama apresenta o seu interior com uma temperatura mais uniforme. É importante recordar as diferenças entre o estudo de Rahimi et al., 2023 com a presente dissertação, no que diz respeito aos programas utilizados modelos de turbulência, e modelos de reação química e de interação química-turbulência, bem como as diferenças nos tamanhos dos domínios computacionais utilizados, podendo todos estes fatores terem contribuído para as diferenças obtidas. Destaca-se, destes fatores, o modelo de interação química-turbulência EDC, que na presente dissertação tornou-se inviável o uso deste modelo devido ao elevado tempo computacional, sendo este o único que poderia trazer resultados mais precisos.

3.8.1.2 Gráficos para a temperatura sobre uma linha radial a 50 mm e 150 mm da saída do queimador

Após apresentados os campos de temperatura, optou-se por apresentar em gráfico da temperatura sobre uma linha radial a 50 mm e a 150 mm da saída do queimador. É de relembrar que segundo as conclusões apresentadas no Subcapítulo 3.5 não devem ser retirados resultados a partir dos 260 mm. Sendo a zona inicial junto ao queimador de maior interesse optou-se por retirar resultados da linha aos 50 mm. A linha de 150 mm por se apresentar após a zona onde a largura da chama é máxima e, portanto, poderá ser avaliado o comportamento da chama após esta zona.

Na Figura 3.53 é apresentado um gráfico da temperatura sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador e na Figura 3.54 a 150 mm da saída do queimador.

Da Figura 3.53 conclui-se que 50 mm após a saída do queimador, a temperatura decai entre os 15 mm e os 20 mm de raio. À medida que foi realizada a adição do hidrogénio, é possível concluir que como descrito anteriormente, a chama têm tendência a ficar mais larga. Como o decaimento de temperatura, correspondente ao limite da chama este passa a ocorrer tendencialmente mais longe da linha central, eixo de revolução do domínio. O caso de 80 % apresenta um decaimento mais cedo contudo, este por estar mais próximo do limite de ocorrer combustão, poderá estar a ser influenciado por este fator. Conclui-se que na zona central como a temperatura é superior para este caso, e como descrito anteriormente, superior aos 2000 K. O caso da combustão de 80 % poderá estar também influenciado pela proximidade a uma combustão de H₂ puro, fazendo com que as reações que ocorrem na combustão de CH₄ possam já não estar a ocorrer com tanta frequência, alterando assim o comportamento da chama.

Da Figura 3.54 conclui-se que a chama, para todos os casos está na sua zona mais larga e que os 30 mm de raio escolhidos para a representação provam que ainda não ocorreu o decaimento da temperatura para os 300 K zona onde já não ocorre influência da chama. Da Figura 3.54 é também possível concluir que para todos os casos o decaimento da temperatura começa a ocorrer sempre mais afastado do eixo de revolução do domínio a medida que é adicionado mais hidrogénio.

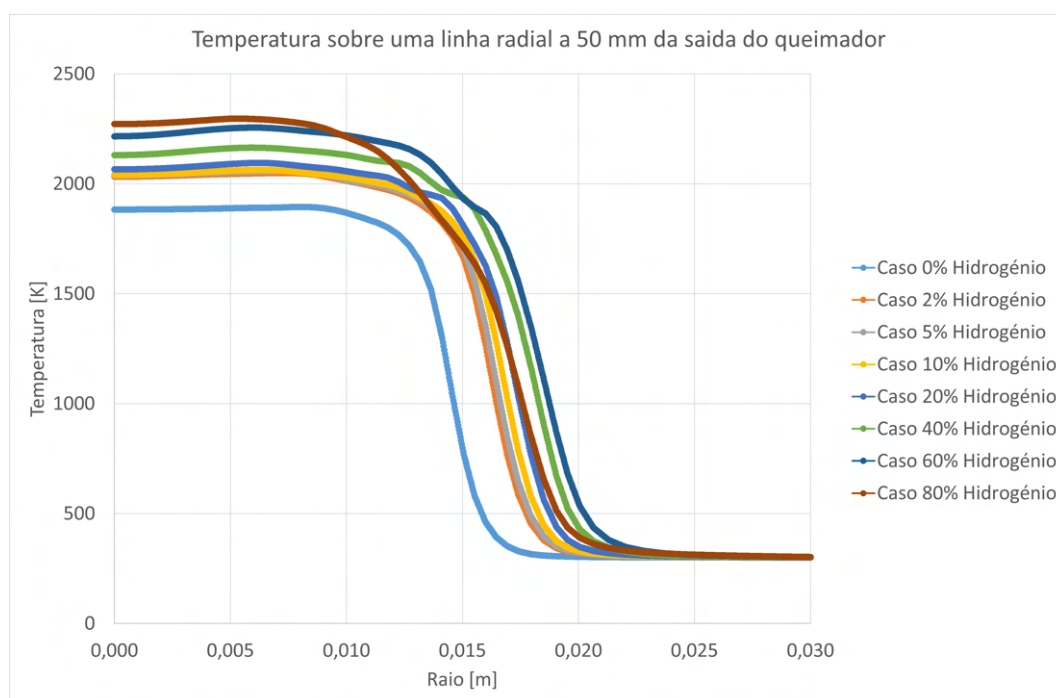


Figura 3.53: Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.

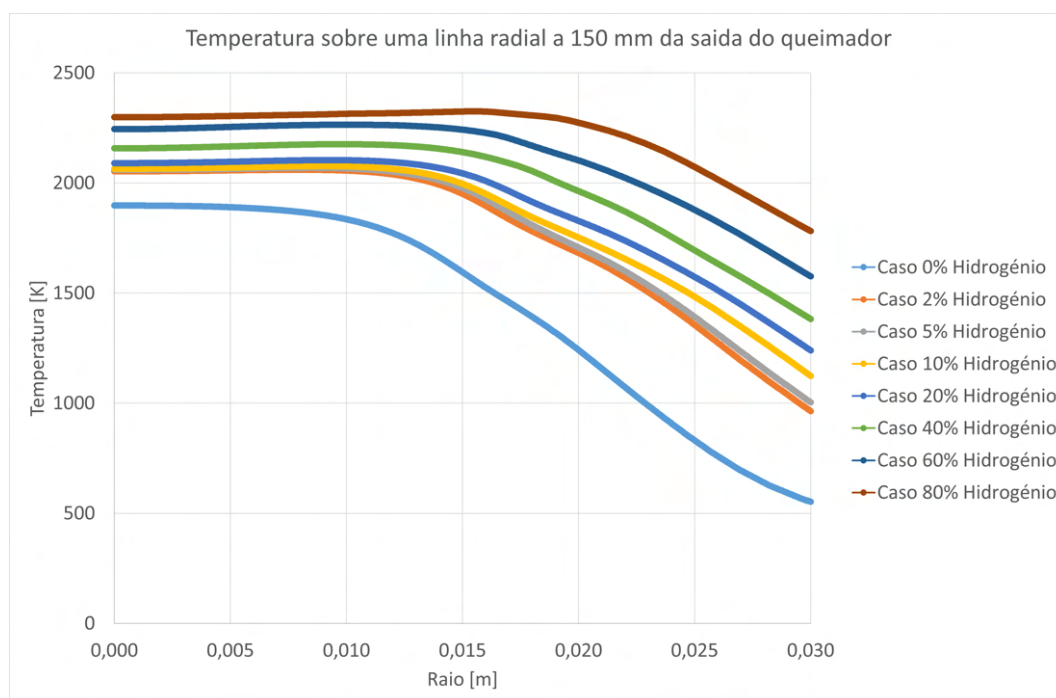


Figura 3.54: Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 150 mm da saída do queimador.

3.8.2 Resultados para a fração mássica de radicais livres: H, O e OH

De modo a avaliar como ocorre a reação química e como a adição de H₂ na queima de CH₄ influencia a reação química e a combustão, foram traçadas linhas a radiais a 10, 30 e 50 mm, da saída do queimador dado que nesta a zona ocorre mistura das espécies químicas. Os radicais livres, H, O e OH aparecem e reagem com o CH₄ e o H₂ sendo, portanto, interessante o estudo da fração mássica dos mesmos nesta zona do domínio.

Nas Figuras 3.55, 3.56 e 3.57 são apresentadas as frações mássicas de H sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

Nas Figuras 3.58, 3.59 e 3.60 são apresentadas as frações mássicas de O sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

Nas Figuras 3.61, 3.62 e 3.63 são apresentadas as frações mássicas de OH sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

Conclui-se, das Figuras 3.55, 3.56 e 3.57, que a adição de H₂ influencia a formação de radicais livres de H. É de notar que em todos os gráficos existem sempre radicais livres de H, mesmo no caso da combustão de CH₄ puro. O pico máximo da fração mássica de H ocorre, para o caso da combustão de CH₄ puro, a cerca de 7 mm do eixo de revolução para uma linha a 10 mm da saída do queimador.

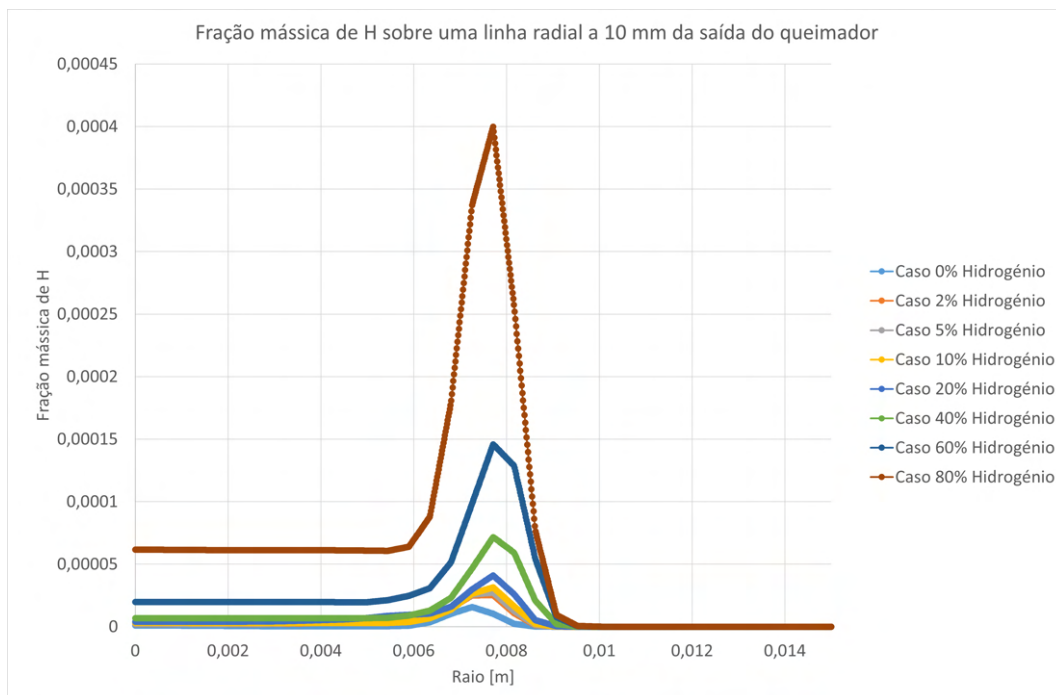


Figura 3.55: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.

É de notar que à medida que se adiciona mais hidrogénio na mistura este pico se desloca no sentido de se afastar do eixo de revolução, como tal, as reações de formação e decomposição de H seguem esta tendência. O mesmo se verifica a 30 mm e 50 mm onde os picos se tornam mais evidentes. É de notar que, no caso da queima de 80 %, o valor

máximo de H é bastante superior ao expectável dado que este caso se aproxima mais da queima de hidrogénio puro.

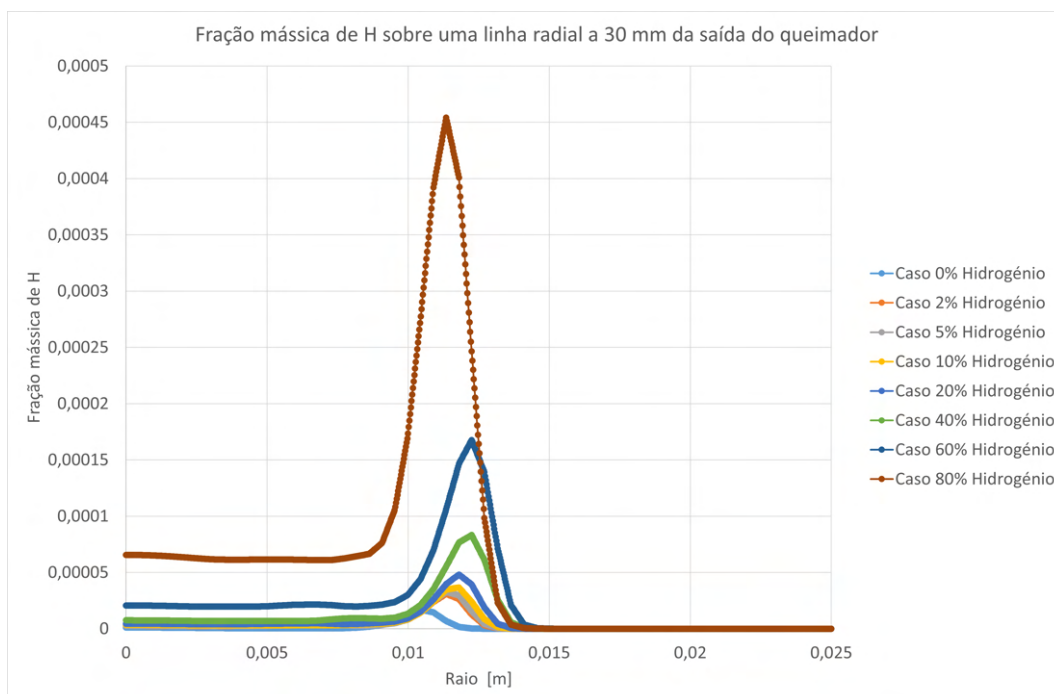


Figura 3.56: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador.

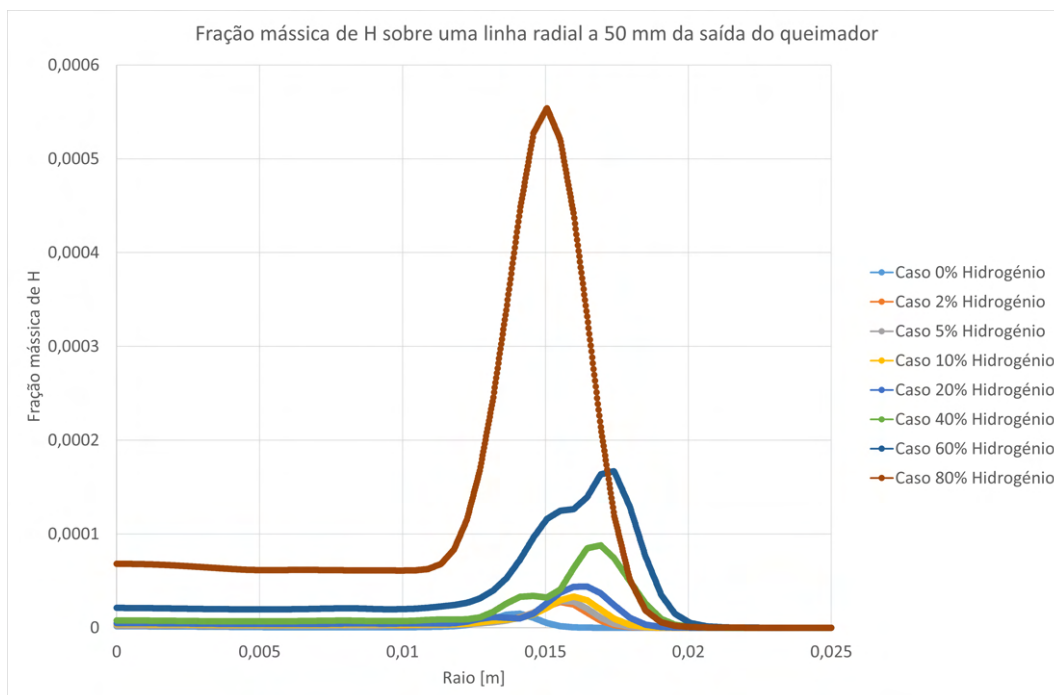


Figura 3.57: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.

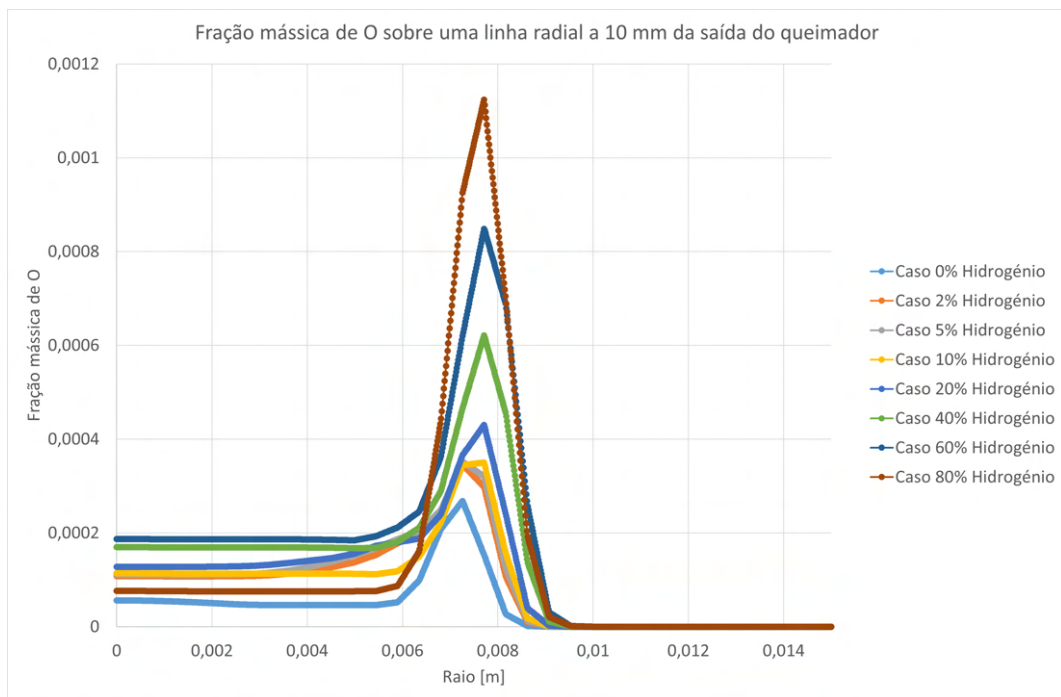


Figura 3.58: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.

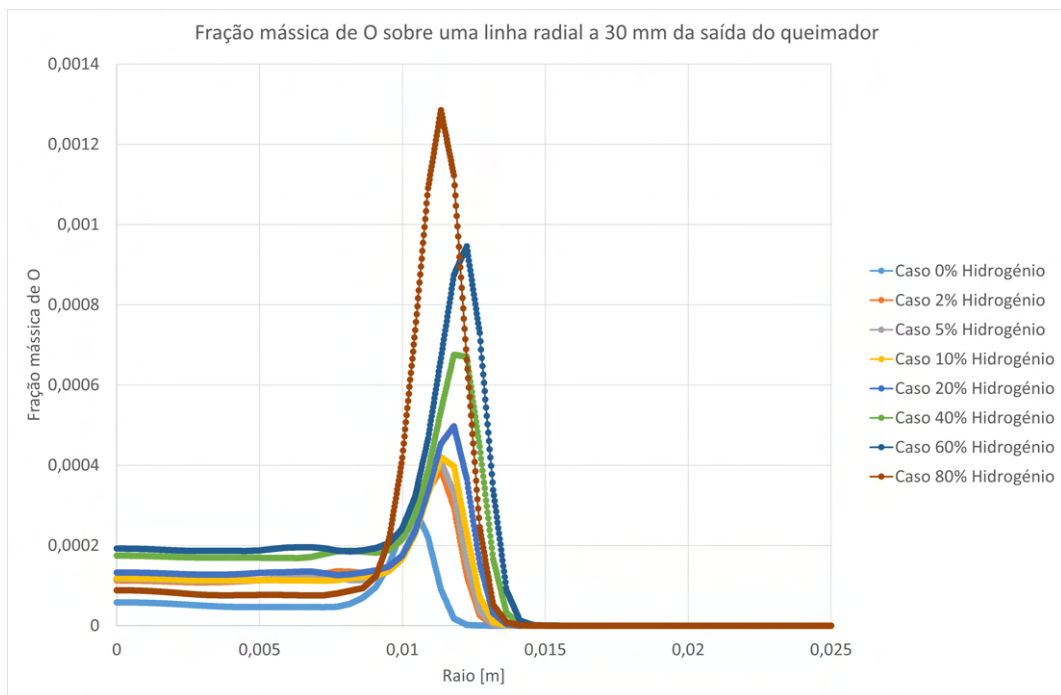


Figura 3.59: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador.

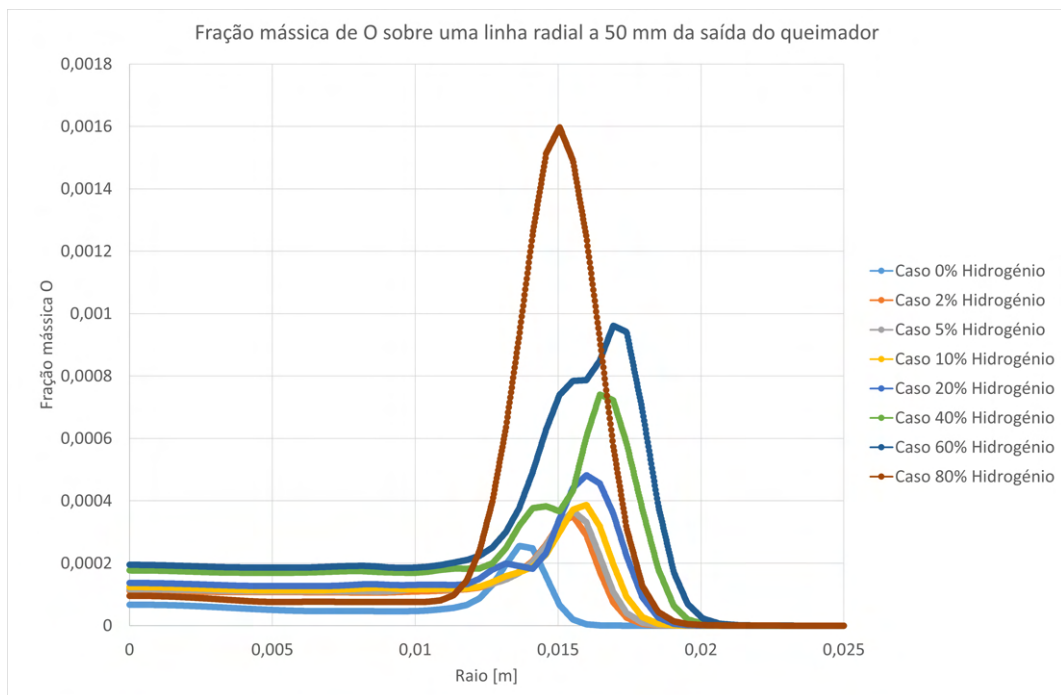


Figura 3.60: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.

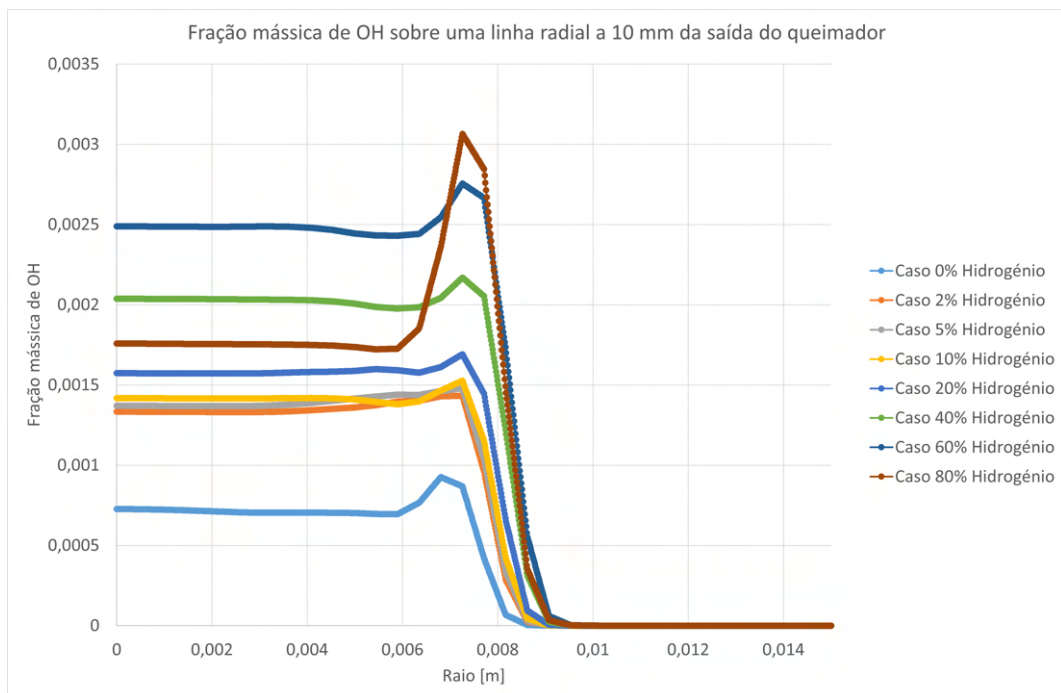


Figura 3.61: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador.

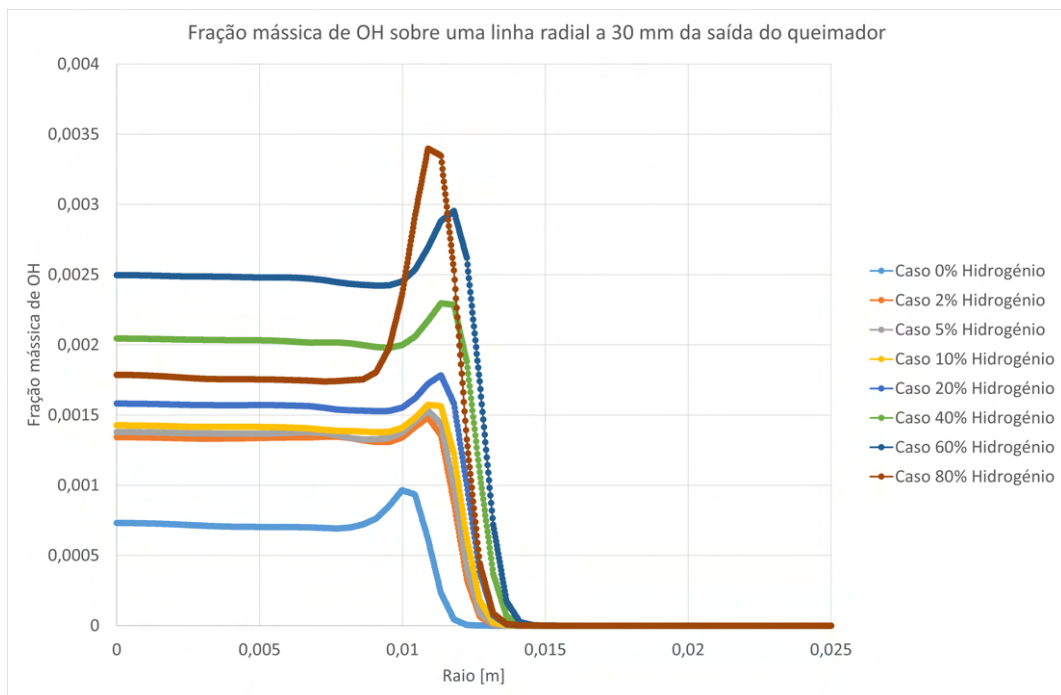


Figura 3.62: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador.

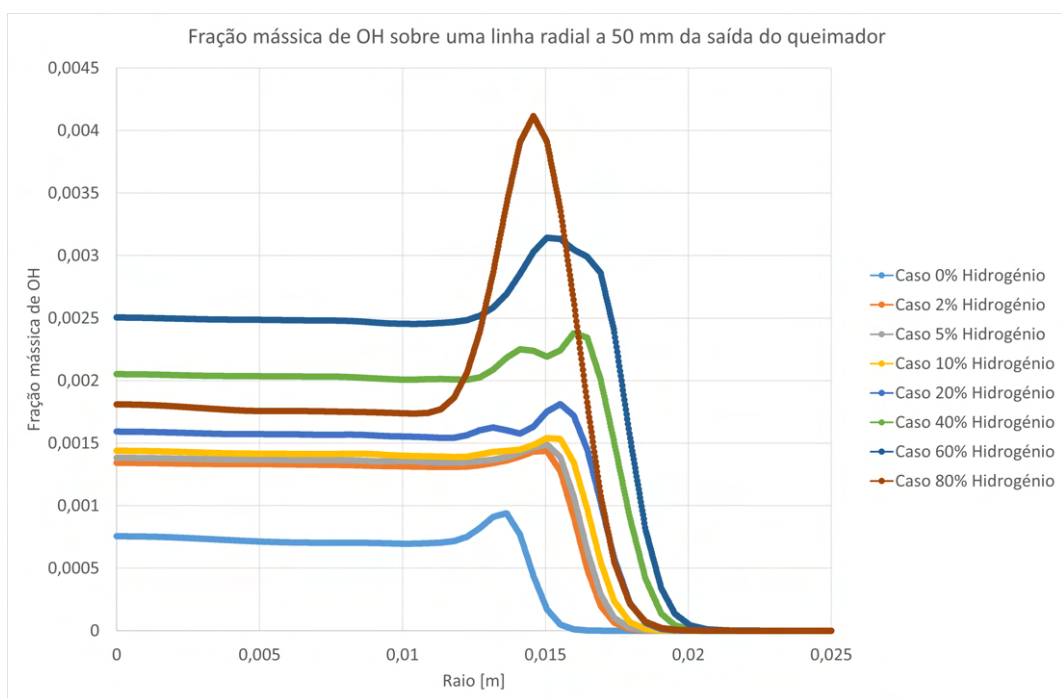


Figura 3.63: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.

A reação de H₂ com O₂ forma radicais livres de O e OH. Como tal é expectável que a adição de hidrogénio à queima de CH₄ contribua para o aparecimento destes radicais livres.

Das Figuras 3.58, 3.59 e 3.60 conclui-se que tal como para o caso de H os radicais livres de O têm uma fração mássica máxima entre os 6 mm e os 8 mm, zona onde ocorre a reação para o caso a 10 mm. De notar que, tal como para o H, o radical livre de O aparece logo à partida na queima de CH₄. Isto deve-se à reação de CH₄ que forma CO₂, e que se decompõem na formação de CO e liberta radicais de O. À medida que é adicionado hidrogénio à mistura, dado que este reage também com o oxigénio e liberta radicais de O, é expectável que com o aumento do hidrogénio introduzido aumente também a fração mássica de O. É de notar que o caso de 80% volta a ter o pico máximo mais deslocado e mais próximo do eixo de revolução que os restantes, mantendo a tendência da fração mássica de H no caso dos 80 %, provando que este caso se assemelha mais a queima de hidrogénio puro deixando-se assim de sentir tanta influência das reações da queima de CH₄.

Por fim, das Figuras 3.61, 3.62 e 3.63 conclui-se que a fração mássica de OH é dominante em relação às frações mássicas dos radicais de H e O. É possível observar que a fração mássica de OH se mantém constante no interior da chama, enquanto que as de H e O apenas têm valores dominantes na zona de reação, ou seja na zona próxima do limite da chama. Isto deve-se ao facto dos radicais livres de O e H serem altamente instáveis e rapidamente se transformarem novamente em moléculas de hidrogénio e oxigénio, a sua forma mais estável. Das Figuras 3.61, 3.62 e 3.63 conclui-se que o pico máximo da fração mássica de OH ocorre na zona de reação por existirem também mais radicais livres de O e H. O pico máximo para o caso do OH tende novamente a afastar-se do eixo de revolução à medida que é adicionado mais hidrogénio. No caso de combustão de 80% de hidrogénio, o pico volta a deslocar-se mais para o centro e o valor constante de OH no interior da chama diminui em relação aos casos de 40% e 60% de hidrogénio. Tal quer dizer que ao aproximarmos-nos dum caso de combustão de hidrogénio puro a fração mássica de OH tende a diminuir no interior da chama.

3.8.3 Fração massica de CO₂

A formação de CO₂ ocorre pela combustão de CH₄, visto ser um combustível que contém carbono. A queima de H₂, por não conter carbono, ao reagir não produz diretamente CO₂.

Segundo Rahimi et al., 2023, 95 % dos elementos poluentes, nomeadamente CO₂, saíem do domínio pelo seu topo, podendo ser desprezados os que saíem nas fronteiras laterais. Deste modo, foram traçados 2 gráficos da fração mássica de CO₂ em função do raio sobre uma linha radial a 500 mm do queimador, ou seja no topo, e outra a 250 mm. Os resultados no topo do domínio poderão estar a ser influenciados pelo tamanho do domínio computacional, mas a 250 mm, com o que se concluiu no Subcapítulo 3.5, ainda poderão ser obtidos resultados não influenciados pelo tamanho do domínio e condições de fronteira.

Nas Figuras 3.64 e 3.65 são apresentadas as frações mássicas de CO₂ em função do raio sobre uma linha radial a 250 e 500 mm respetivamente.

Das Figuras 3.64 e 3.65 é possível concluir que na zona interior da chama, a fração mássica de CO₂ é praticamente constante, começando a decair depois do limite da chama até à fronteira do domínio, onde toma valores próximos de zero. Segundo o gráfico da Figura 3.64, é possível perceber que aos 250 mm já se encontra fora da chama de CH₄ puro, mas que, para o caso de 60%, por exemplo, ainda se encontra dentro da mesma, não sendo por isso possível comparar a fração mássica para os diferentes casos a partir da Figura 3.64. De igual modo para os casos de 60% e 80% mesmo a 500 mm os resultados poderão não estar corretos dado que o final da chama está muito próximo do limite do domínio computacional. Conclui-se das Figuras 3.64 e 3.65 que, o valor de fração mássica máxima ocorre sobre o eixo do domínio computacional, raio 0, exceto para o caso de 80% de hidrogénio.

Na Figura 3.66 é apresentada sobre o eixo do domínio computacional, a fração mássica de CO₂.

Da Figura 3.66 é possível concluir que a adição de até 40% hidrogénio sobre a queima de CH₄, faz aumentar a fração mássica de CO₂, isto porque a queima de CH₄ deixa de ter as suas propriedades ideais, deixando até de ser uma queima completa. Conclui-se que a adição de 60 ou 80% de hidrogénio à queima de CH₄, reduz a fração mássica de CO₂ e tal acontece pois a queima dominante passa a ser de H₂ e não CH₄.

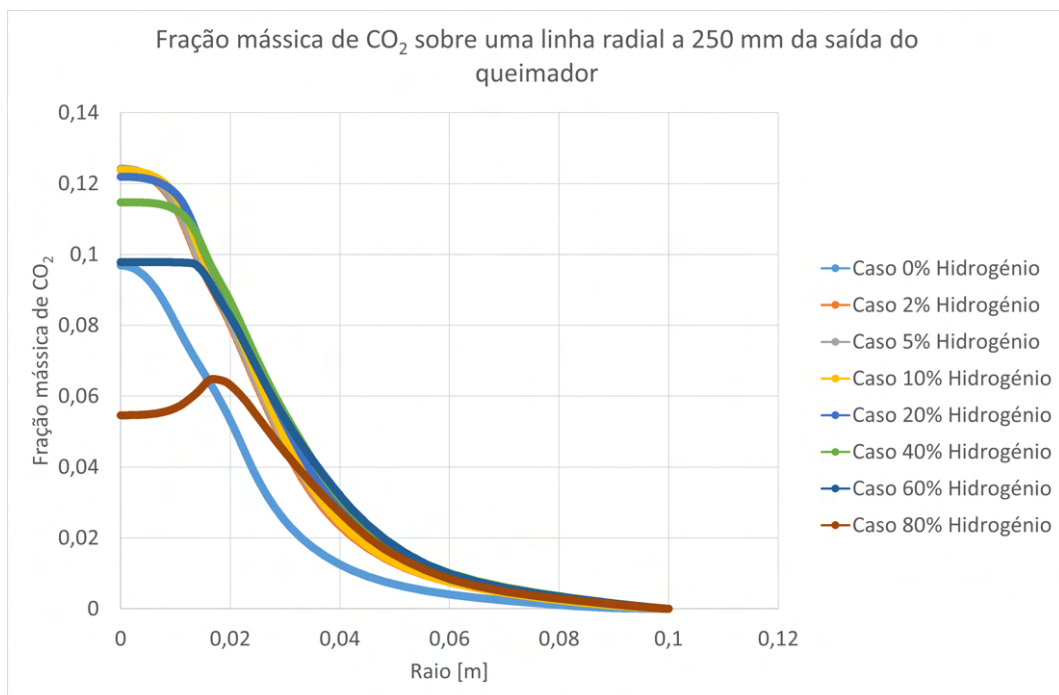


Figura 3.64: Gráfico da fração mássica de CO₂ em função do raio de uma linha radial a 250 mm da saída do queimador.

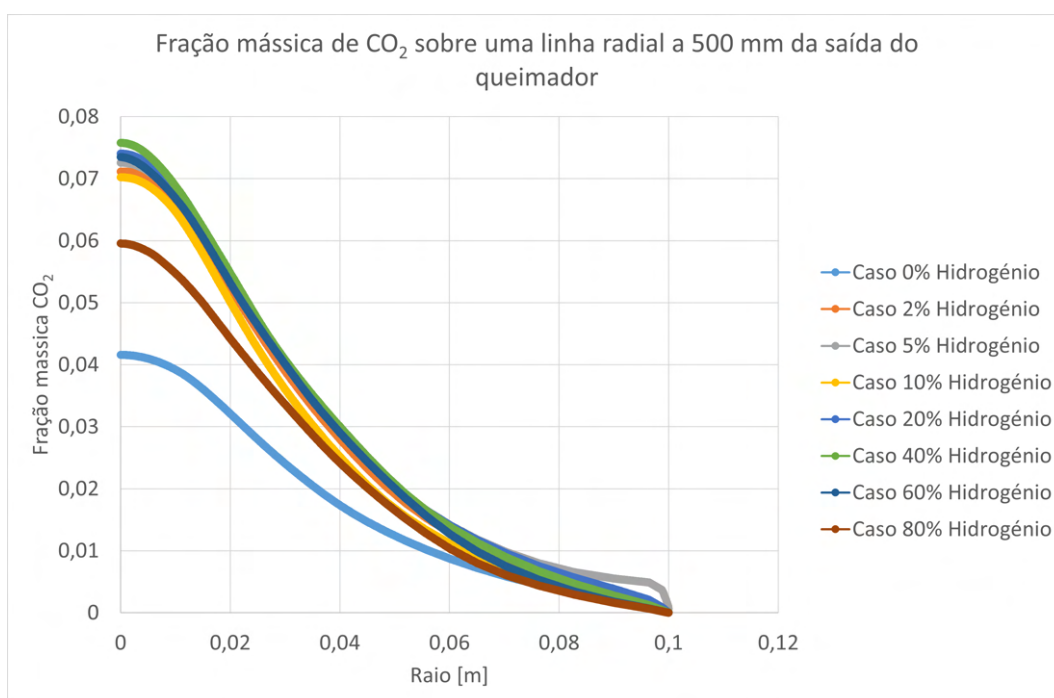


Figura 3.65: Gráfico da fração mássica de CO₂ em função do raio de uma linha radial a 500 mm da saída do queimador.

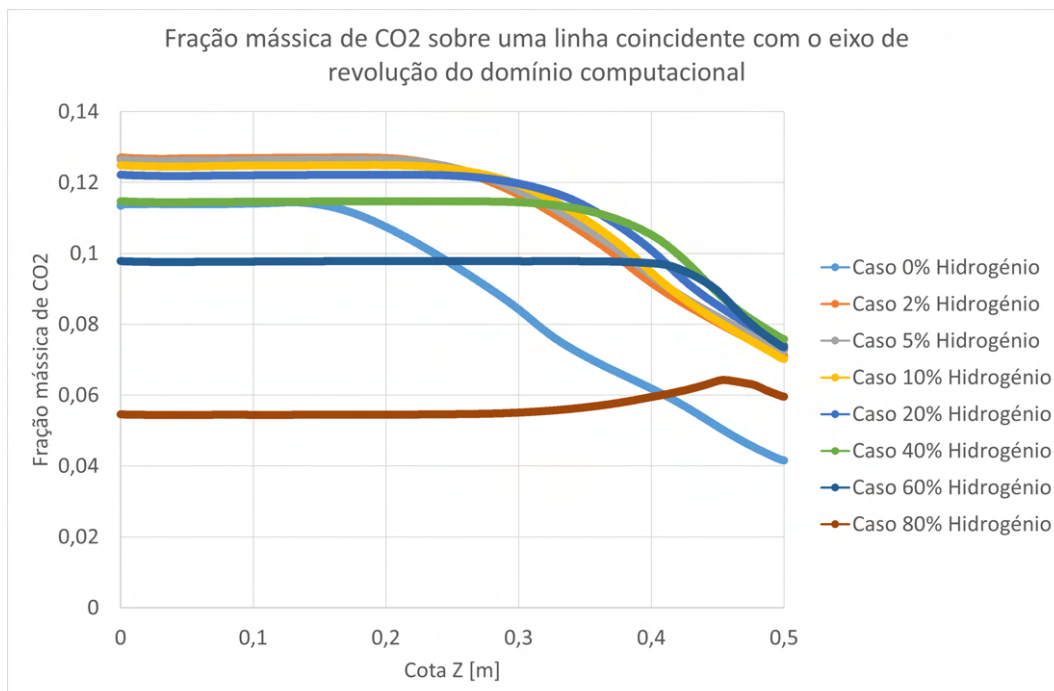


Figura 3.66: Gráfico da fração mássica de CO₂ sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.

Na Tabela 3.12 são apresentadas as frações mássicas máximas de CO₂ sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio.

Tabela 3.12: Fração mássica máxima de CO₂ sobre o eixo de revolução do domínio computacional.

Casos	CH ₄ puro	2%	5%	10%	20%	40%	60%	80%
Fração mássica de CO ₂	0,11	0,13	0,13	0,13	0,12	0,11	0,10	0,06
Cota z [mm]	131	175	181	191	206	219	202	454

Da Tabela 3.12 conclui-se que a localização do ponto de fração mássica máxima de CO₂ é cada vez mais distante da saída do queimador à medida que aumenta a percentagem de hidrogénio, apenas quando se passa a adicionar 60% esta tendência muda.

Conclui-se assim que em termos ambientais, para o presente queimador, de acordo com o parâmetro de emissões de CO₂ a queima de misturas de CH₄ e H₂ só passa a ser benéfica, ou seja, as emissões de CO₂ só diminuem, quando é introduzido mais de 40% de hidrogénio.

3.9 Caso H₂ puro

Dado ter sido possível atingir a queima de misturas de CH₄ e H₂ até aos 80% de hidrogénio, tinha-se como objetivo atingir a queima de hidrogénio puro. Caso a queima de hidrogénio puro fosse bem sucedida, este seria um bom sinal para o *retrofitting* do queimador para a queima de 100% de hidrogénio. Nas Figuras 3.67 e 3.68 é apresentado o campo de temperaturas sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio sendo que, para a primeira figura, a gama de temperaturas varia entre 300 K a 2500 K. Já na Figura 3.68 foi definido um valor base de 1600 K, onde todos os valores inferiores são apresentados na mesma cor. O máximo foi definido como 2500 K.

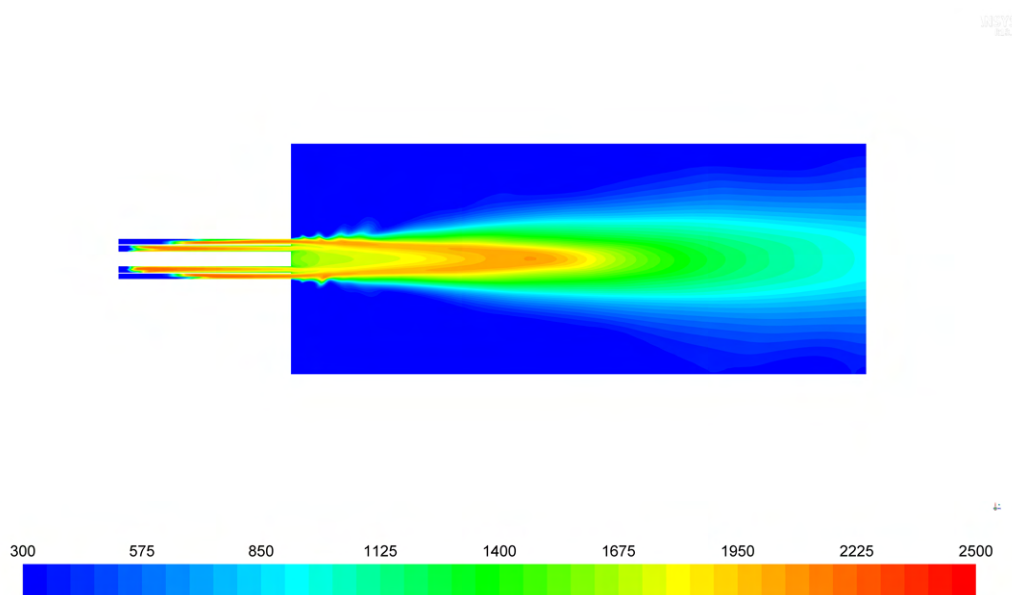


Figura 3.67: Localização de temperatura, em Kelvin, sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.

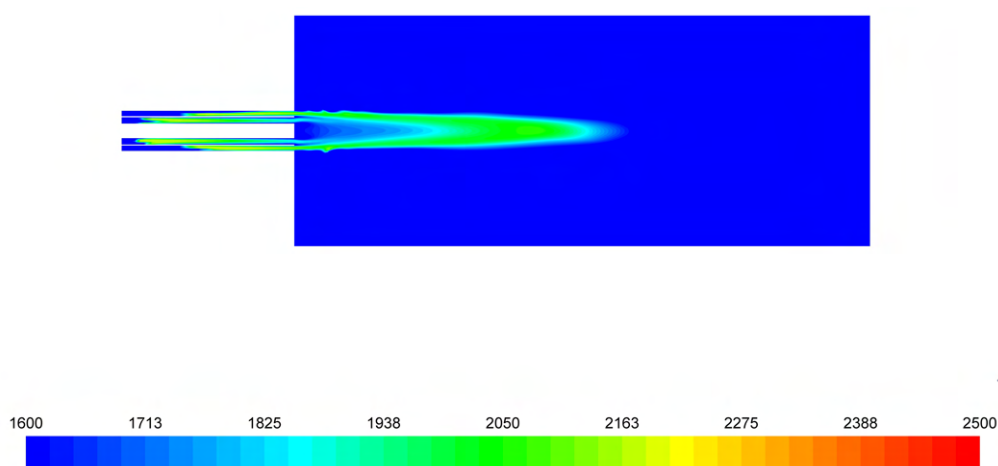


Figura 3.68: Campos de temperatura, em Kelvin, sobre um plano coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional, truncado a partir de 1600 K.

Conclui-se das Figuras 3.67 e 3.68 que passou a existir combustão dentro dos *inlets*, ou seja ocorreu um *far-field* da chama. Este fenómeno ocorre dado que dentro dos *inlets* é injetada uma mistura de ar com combustível e a velocidade de reação é superior à de injeção de material combustível, levando a que a chama progrida para montante nos *inlets*. Este fenómeno é altamente perigoso dado que rapidamente pode escalar para uma combustão na zona de armazenamento de combustível e, conseqüentemente, pode levar à explosão. Este tipo de queimador, denominado por queimador com pré mistura, possui este perigo e como tal o *retrofitting* para a queima de H_2 deve ser feito com cautela. Conclui-se que, com os parâmetros definidos para a queima de CH_4 puro ao converter para 100% de hidrogénio ocorre combustão. No entanto, a mesma já não se localiza a jusante da saída do queimador. Deste modo, não se considera válido este caso. Propõem-se que, num futuro, seja feito o estudo de alteração de parâmetros de injeção de modo a avaliar a possibilidade do queimador em estudo poder queimar de forma segura 100% de hidrogénio.

3.10 Linhas orientadoras para o *retrofitting* para o caso de 80 % H_2

Dado que não foi possível efetuar a correta combustão de 100% de hidrogénio, optou-se por selecionar o caso de 80% de hidrogénio para obter linhas orientadoras para o *retrofitting* do presente queimador, dado ser este o caso onde as frações mássicas de CO_2 são menores. Optou-se, na presente dissertação, por variar as velocidades de injeção do combustível, dado que é um parâmetro que pode ser facilmente alterado numa instalação real. Dado que o queimador em estudo contém dois *inlets* onde é injetado combustível, e dado que o *outer slot* contém *swirl*, optou-se por começar por variar a velocidade apenas no *inner slot*. Deste modo, na presente dissertação, será avaliada a influência do aumento e diminuição da velocidade axial do *inner slot* para a queima de 80% de hidrogénio. Deste modo, mantendo

todas as condições iguais às da queima de 80% apresentado anteriormente, construiu-se um caso onde a velocidade axial de injeção no *inner slot* é de 10 m/s e outro onde é de 6 m/s. A velocidade axial do caso original é de 8,31 m/s.

3.10.1 Resultados de temperatura

Tal como realizado para a comparação das diferentes percentagens de H_2 na queima de CH_4 , foram construídos dois gráficos sobre linhas radiais a 50 e 150 mm, para o estudo comparativo da variação da velocidade no *inner slot* mantendo assim a mesma métrica que no caso de CH_4 puro.

Na Figura 3.69 é apresentado um gráfico da temperatura, em Kelvin, em função do raio de uma linha radial a 50 mm da saída do queimador.

Conclui-se da Figura 3.69 que o aumento da velocidade axial aproxima a dimensão da chama de 80% de hidrogénio à chama original de apenas CH_4 . Conclui-se que no interior da chama, zona inicial de temperatura constante, a variação da velocidade não teve influência na temperatura.

Na Figura 3.70 é apresentado o gráfico da temperatura em Kelvin em função do raio de uma linha radial a 150 mm da saída do queimador.

Da Figura 3.70, após a zona onde a chama de 80% original era mais larga,(a cerca de 100 mm da saída do queimador) não é possível verificar diferenças no gráfico da temperatura com a variação da velocidade.

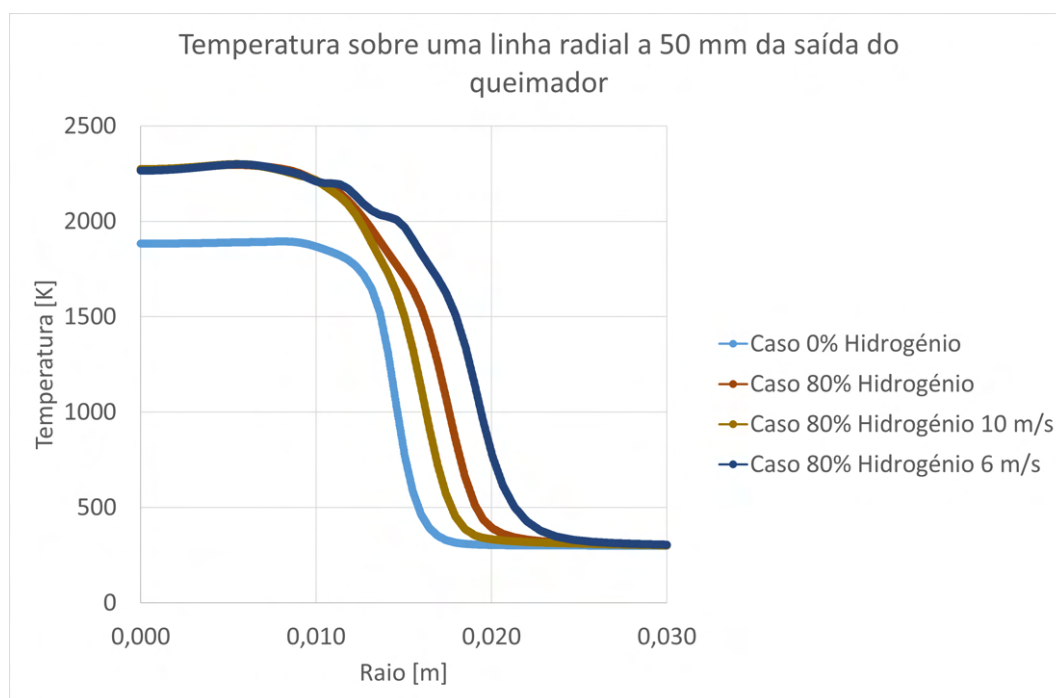


Figura 3.69: Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

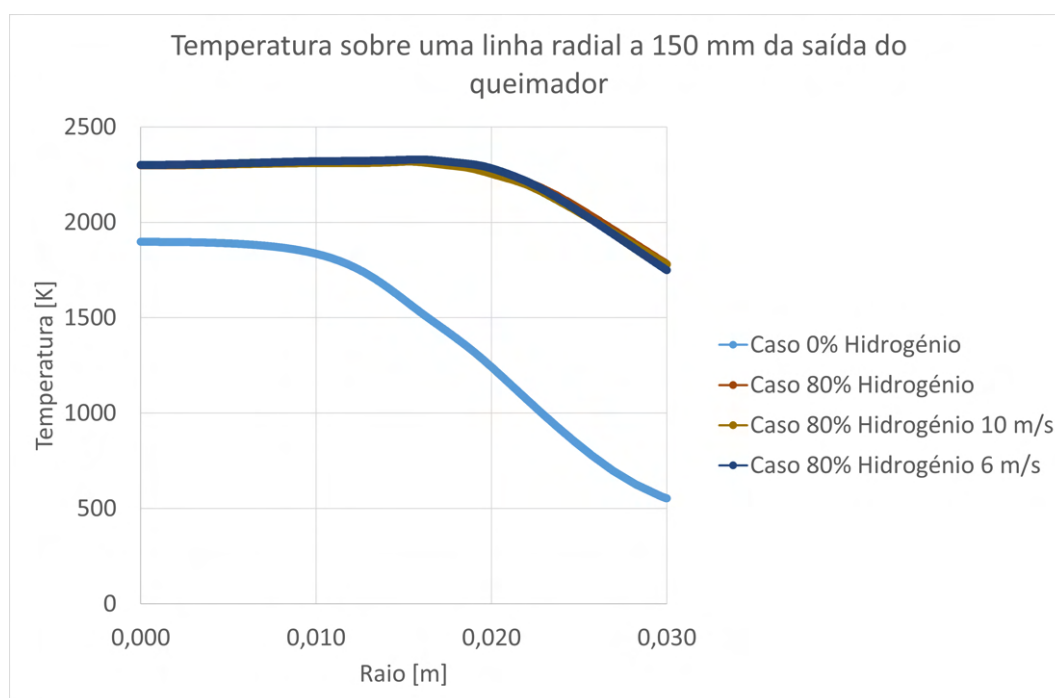


Figura 3.70: Gráfico da temperatura em função do raio de uma linha radial a 150 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

Conclui-se que o aumento da velocidade para 10 m/s fez apenas aproximar o caso de 80% de hidrogénio à chama de CH_4 puro na zona logo após a saída do queimador. Ao diminuir a velocidade, a chama afasta-se da chama original tornando-se mais larga na zona inicial até aos 150 mm, onde a diferença nas velocidades deixa de ser significativa. A variação da velocidade não teve influência na reação química e consequentemente na temperatura da chama obtida.

3.10.2 Resultados para a fração mássica de radicais livres: H, O e OH

Para avaliar o modo como a variação da velocidade influencia a reação química, foram traçados gráficos de fração mássica de H, O e OH. Tal como explicado anteriormente estes radicais livres permitem perceber como é influenciada a reação com a introdução do hidrogénio e espera-se, de igual forma, perceber como a variação da velocidade e portanto variação caudal de combustível fez alterar a reação química.

Nas Figuras 3.71, 3.72 e 3.73 são apresentadas as frações mássicas de H sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

Nas Figuras 3.74, 3.75 e 3.76 são apresentadas as frações mássicas de O sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

Nas Figuras 3.77, 3.78 e 3.79 são apresentadas as frações mássicas de OH sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

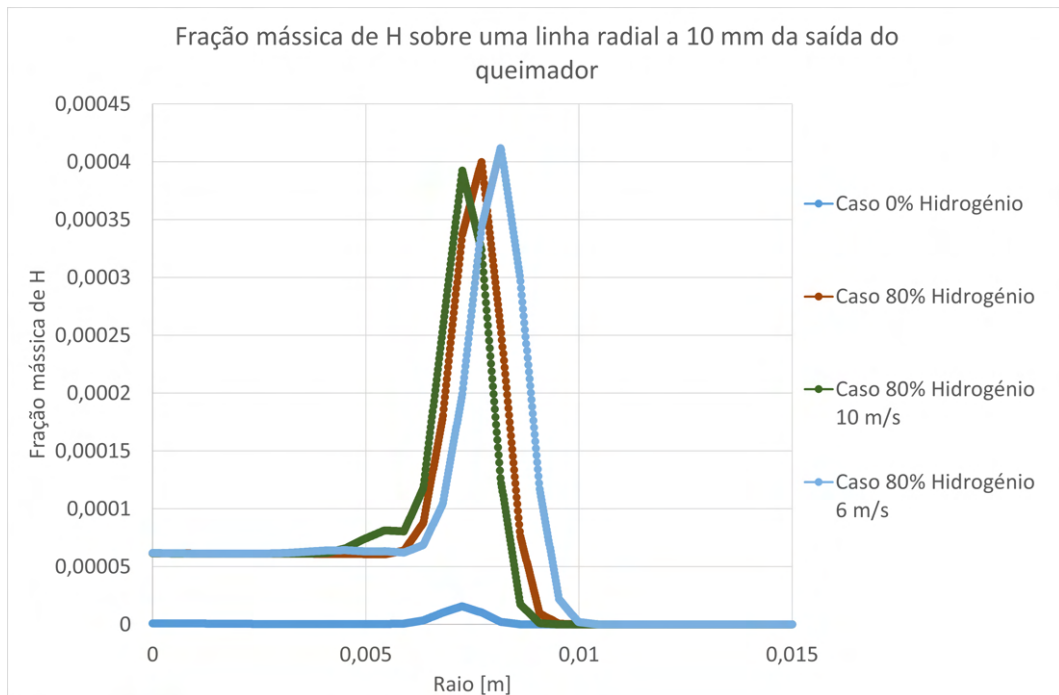


Figura 3.71: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

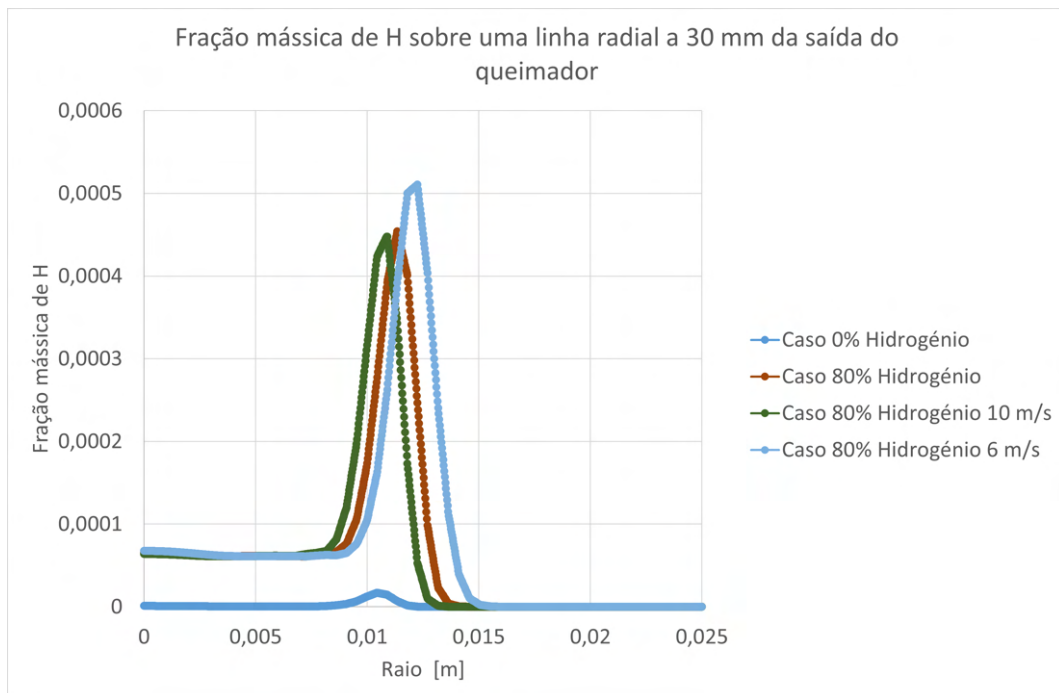


Figura 3.72: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

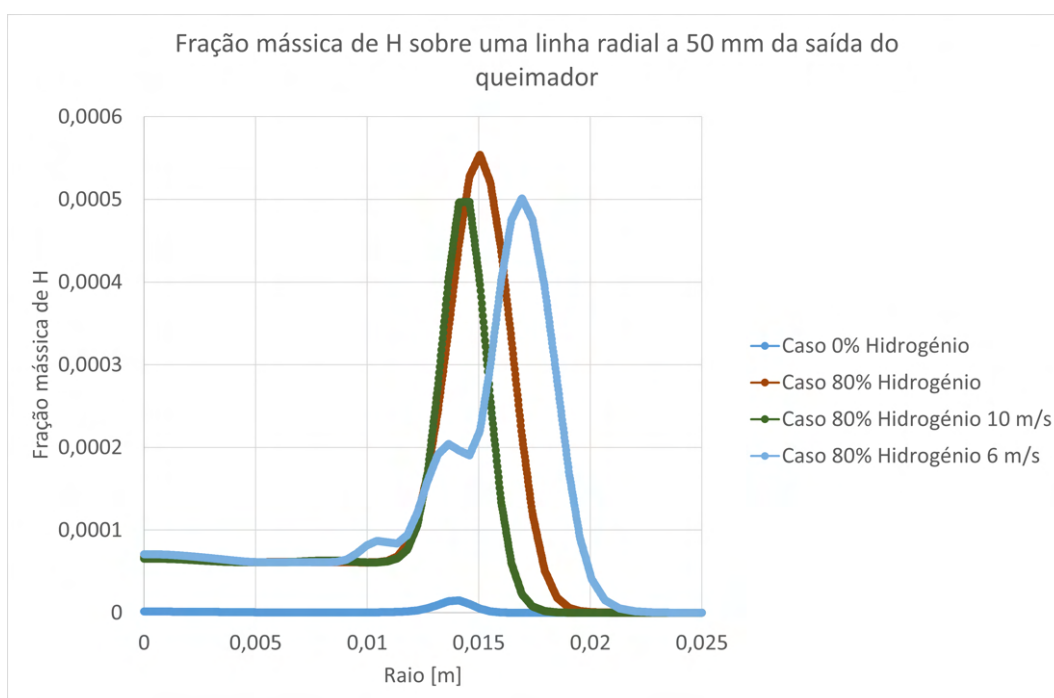


Figura 3.73: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

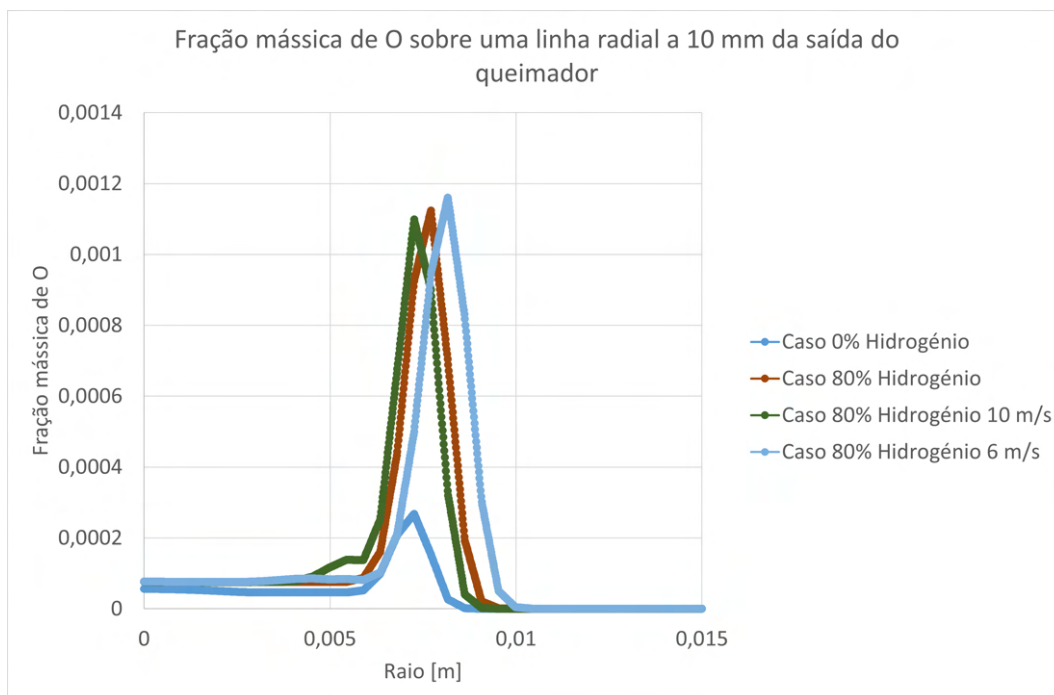


Figura 3.74: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

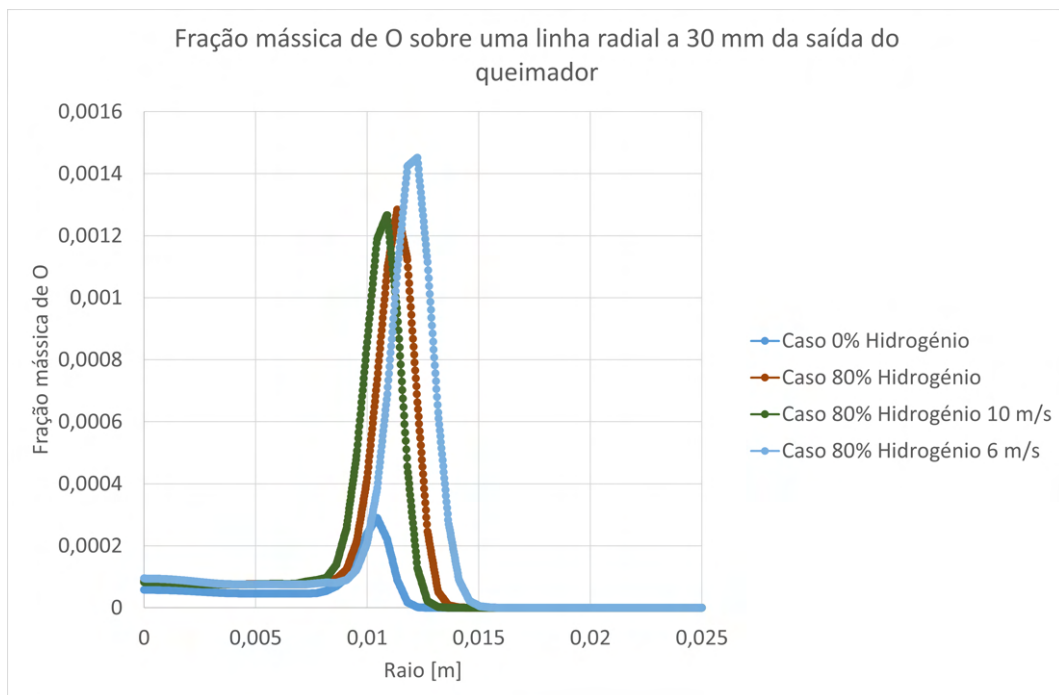


Figura 3.75: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

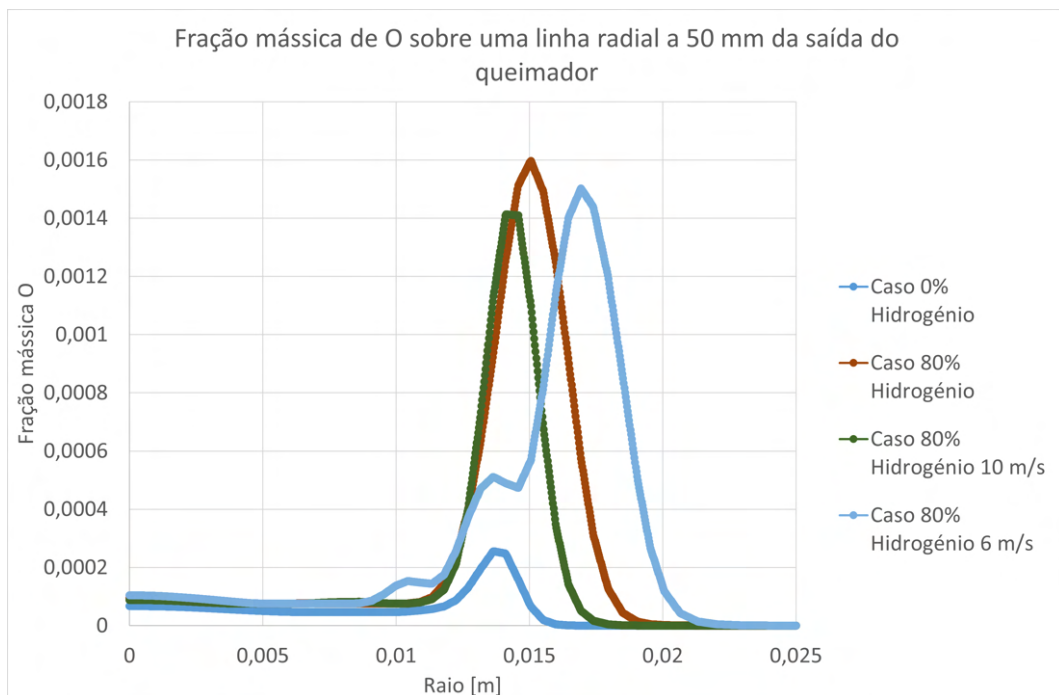


Figura 3.76: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

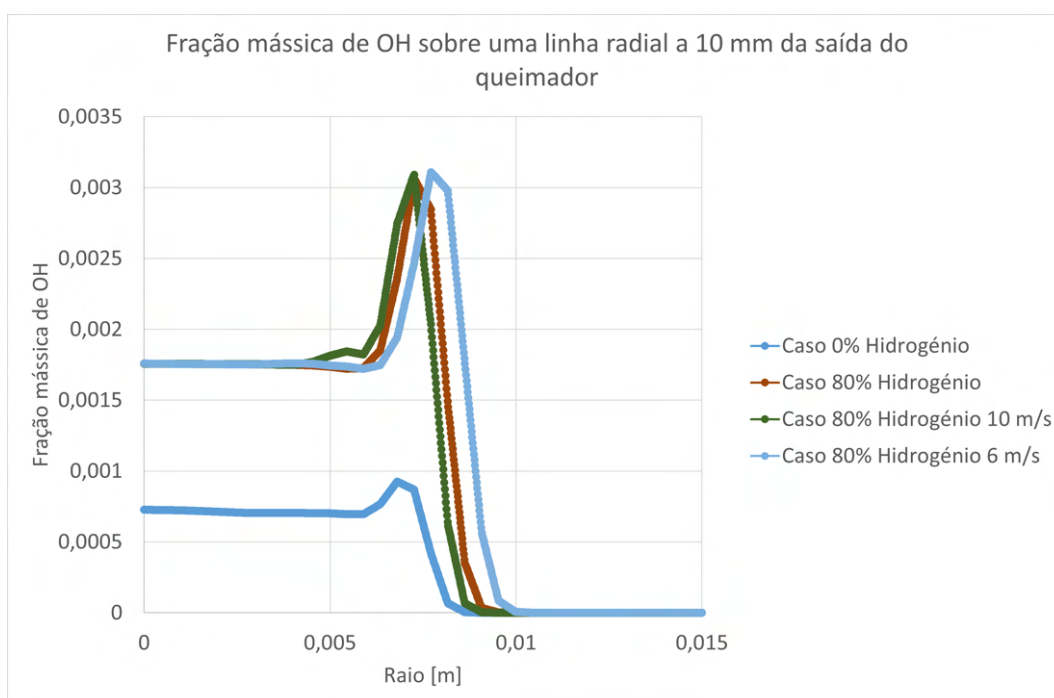


Figura 3.77: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

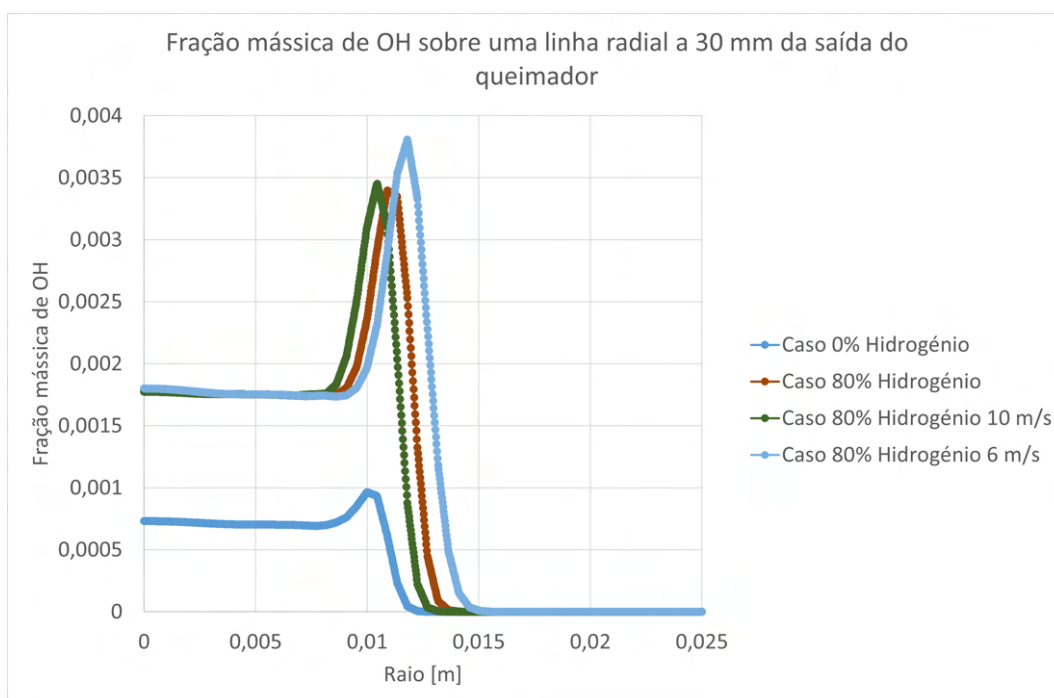


Figura 3.78: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

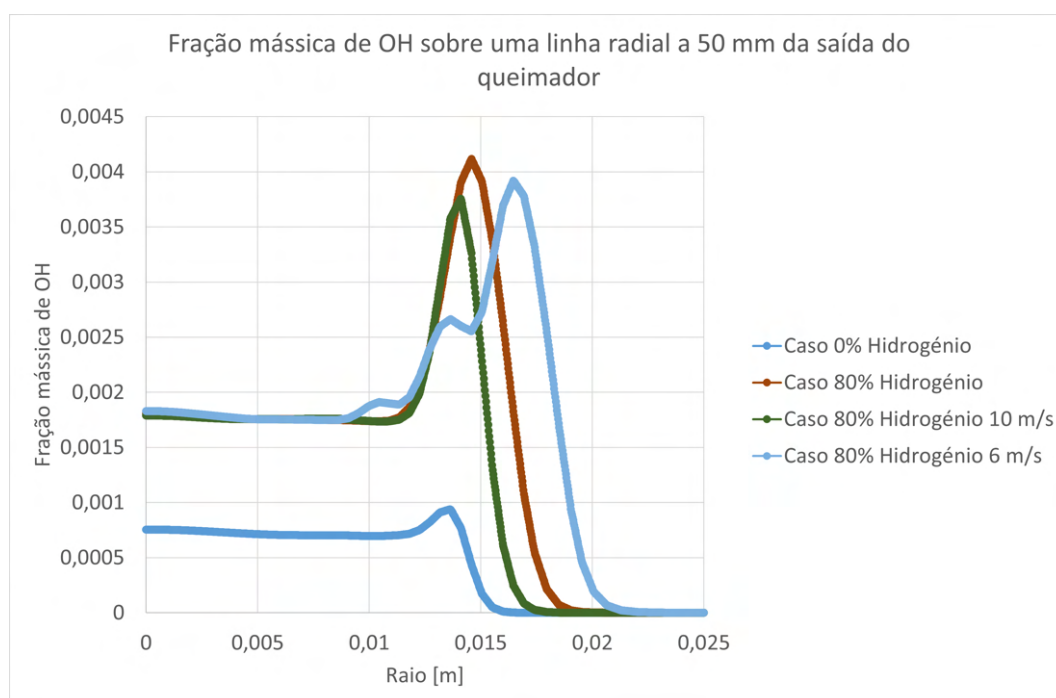


Figura 3.79: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

Conclui-se, das Figuras 3.71 à 3.79, que para todos os casos o aumento da velocidade aproximou à localização do pico de fração mássica máxima de cada um dos elementos à chama de CH_4 pura. O aumento da velocidade fez reduzir de forma ligeira a fração mássica de todos os radicais em relação à queima original de 80% de H_2 . A diminuição da velocidade promoveu o efeito contrário, tornando a chama mais larga e menos próxima da chama original de CH_4 . Com a diminuição da velocidade é possível concluir que os picos de fração mássica máxima de cada um dos radicais aumentaram, o que evidencia que ocorreu uma maior taxa de reação formando-se mais radicais livres desde a zona inicial até aos 50 mm para este caso.

3.10.3 Fração mássica de CO_2

Apesar da variação da velocidade apresentar poucas diferenças no valor máximo das frações mássicas de radicais livres, dada a importância da fração mássica de CO_2 foi avaliado o impacto que da alteração da velocidade neste parâmetro. Utilizando a mesma métrica, apresentam-se os resultados da fração mássica de CO_2 para duas linhas radiais uma a 250 mm e outra a 500 mm da saída do queimador. Por fim, apresenta-se ainda um gráfico da fração mássica de CO_2 sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional, dado ser sobre este que se verifica o valor máximo da fração mássica de CO_2 para o caso da combustão de CH_4 puro.

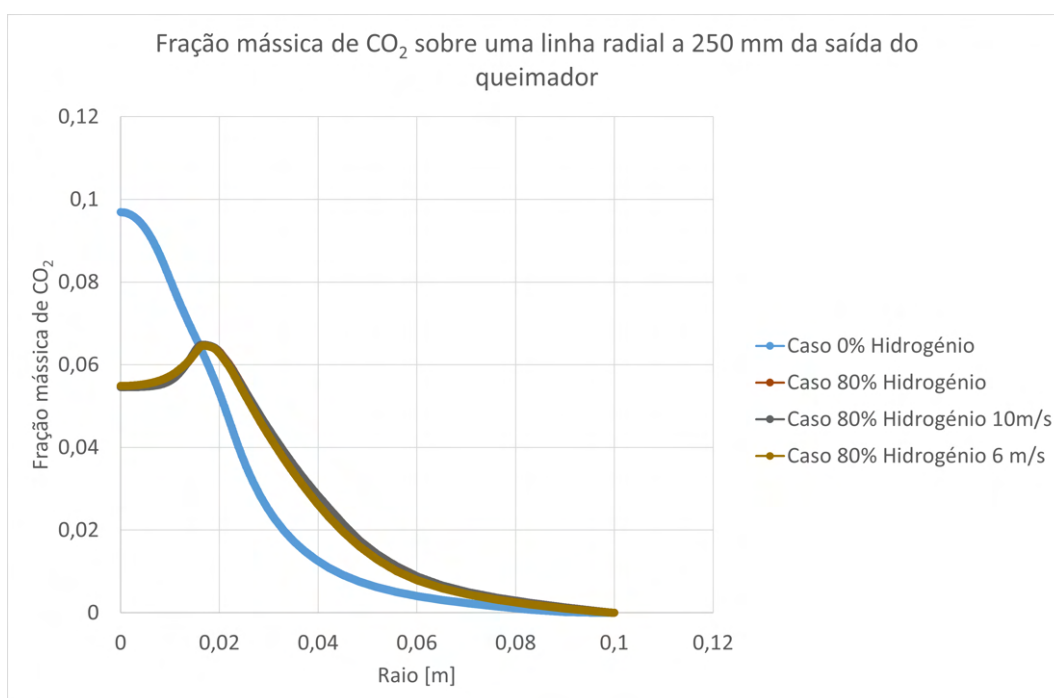


Figura 3.80: Gráfico da fração mássica de CO₂ em função do raio de uma linha radial a 250 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

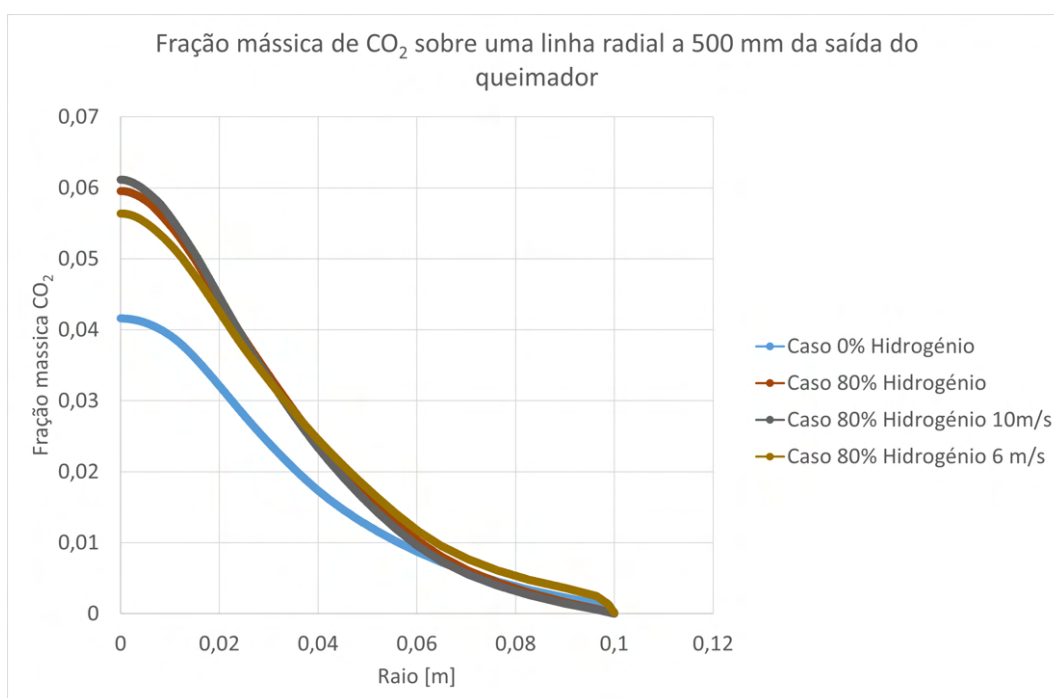


Figura 3.81: Gráfico da fração mássica de CO₂ em função do raio de uma linha radial a 500 mm da saída do queimador para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

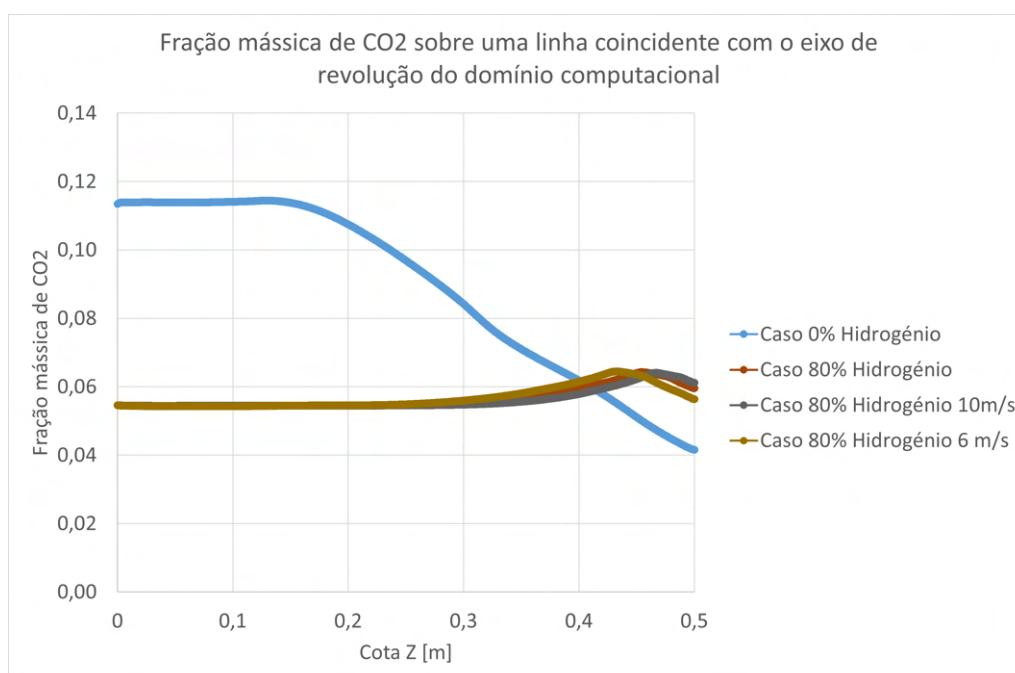


Figura 3.82: Gráfico da fração mássica de CO₂ sobre uma linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

Da Figura 3.80 é possível concluir que, aos 250 mm, a alteração da velocidade não apresenta diferenças significativas para a fração mássica de CO₂. Já na Figura 3.81 é possível concluir que a diminuição da velocidade fez diminuir a fração mássica de CO₂. Em sentido oposto, o aumento da velocidade fez aumentar a fração mássica de CO₂.

Na Tabela 3.13 são apresentadas as frações mássicas máximas de CO₂ para cada um dos casos de estudo sobre a linha coincidente com o eixo de revolução do domínio computacional.

Tabela 3.13: Fração mássica máxima de CO₂ sobre o eixo de revolução do domínio computacional para o estudo comparativo de variação de velocidades no *inner slot*.

Casos	CH ₄ puro	80%	80% com 10 m/s	80% com 6 m/s
Fração mássica de CO ₂	0,11	0,06	0,06	0,06
Cota z[mm]	131	454	467	433

Da Figura 3.82 e da Tabela 3.13 é possível concluir que a diminuição da velocidade desloca o pico de fração mássica de CO₂ sobre o eixo de revolução do domínio computacional para mais perto da saída do queimador. O aumento da velocidade provoca o efeito contrário, de onde se pode concluir que o aumento da velocidade tornou a chama mais estreita até aos 150 mm não se sentido mais a influência da variação da velocidade na largura da chama. No entanto, tornou a mesma mais comprida no final do domínio, deslocando o pico da fração mássica máxima de CO₂, para mais próximo do final do domínio computacional.

Conclui-se que o aumento da velocidade aproximou a largura da chama de 80% à chama de CH₄ puro no início do domínio, no entanto, tornou a chama ainda mais comprida no final do mesmo. Por outro lado, a variação da velocidade não alterou significativamente a reação química, por isso propõem-se que para o estudo do *retrofitting*, sejam realizados estudos para a variação das relações de ar e combustível para os diversos *inlets* de forma a tentar aproximar as chamas de misturas de H₂ à chama de CH₄ puro. O aumento da velocidade poderá ser considerado como um fator útil a ser considerado, pois como foi perceptível ajudou a aproximar a chama de 80% à chama de CH₄ na zona inicial à saída do queimador.

3.11 Comparação dos casos, 0 %, 20 % e 40 % de H₂ com os resultados numéricos de Rahimi et al., 2023

Rahimi et al., 2023 apresentam no seu trabalho resultados numéricos para a queima de CH₄ puro e misturas de 20% e 40% de H₂ obtidos com um programa de simulação numérica diferente do programa utilizado na presente dissertação. Uma vez que a zona inicial do domínio apresenta uma elevada importância na modelação da chama, pois possui uma bolha de recirculação criada pela geometria do queimador que ajuda a estabilizar a chama a jusante do mesmo, como é possível observar na Figura 3.36, serão comparadas as frações mássicas de H, O, OH sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador.

Nas Figuras 3.83, 3.84 e 3.85 são apresentadas as frações mássicas de H sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

3.11. COMPARAÇÃO DOS CASOS, 0 %, 20 % E 40 % DE H₂ COM OS RESULTADOS NUMÉRICOS DE RAHIMI ET AL., 2023

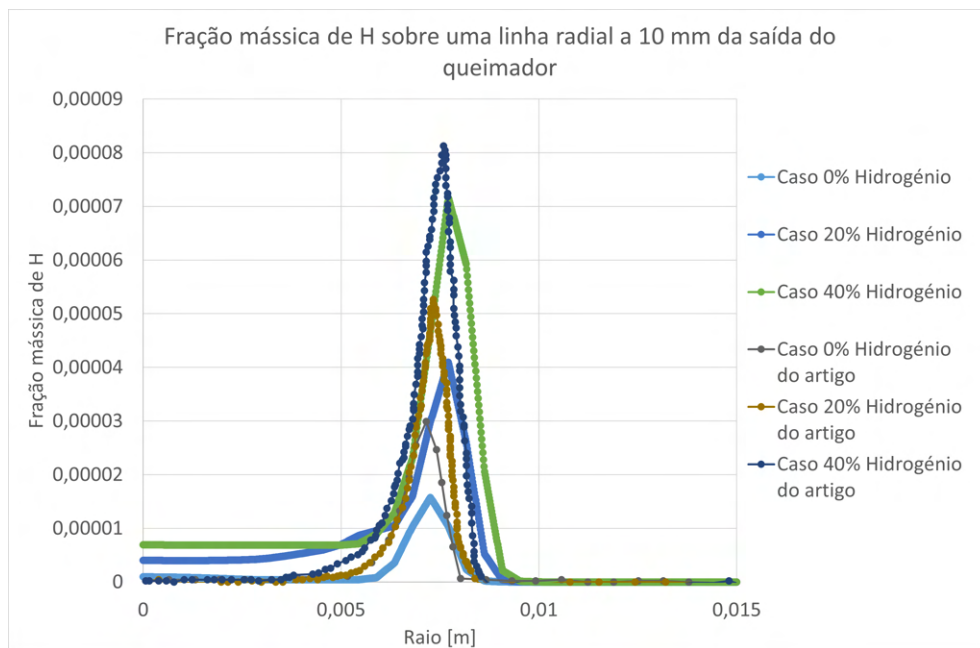


Figura 3.83: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

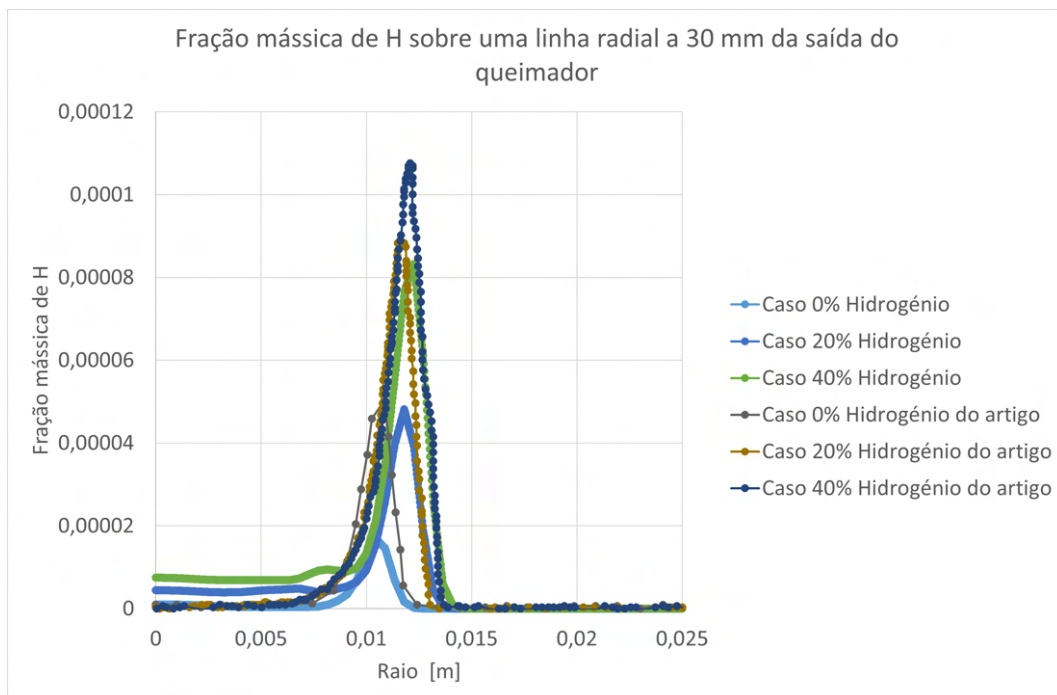


Figura 3.84: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

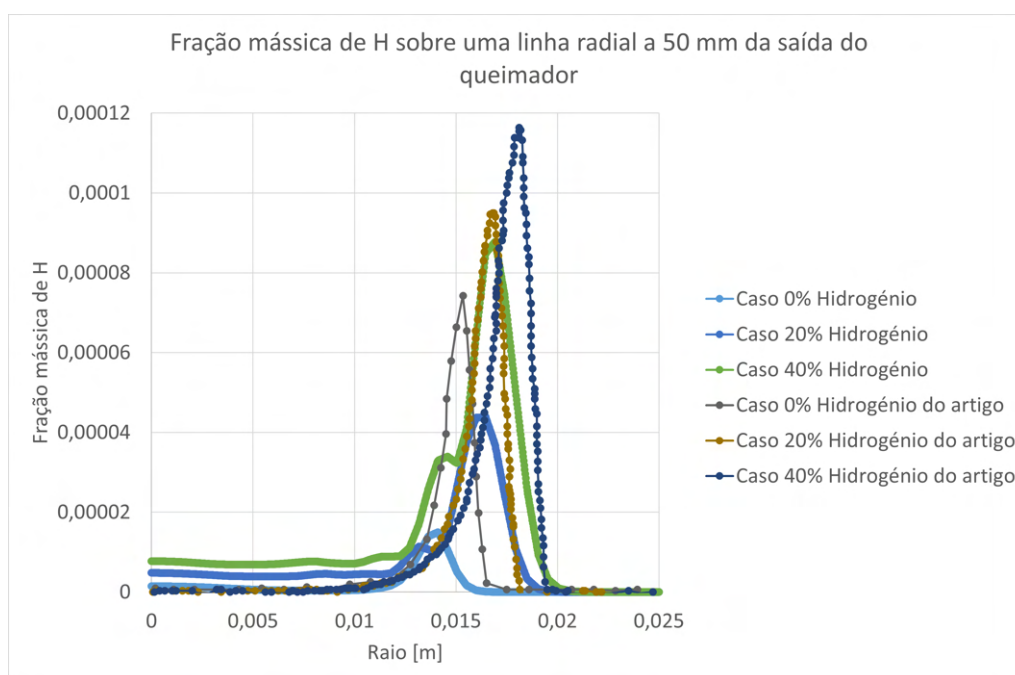


Figura 3.85: Gráfico da fração mássica de H sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

Nas Figuras 3.86, 3.87 e 3.88 são apresentadas as frações mássicas de O sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

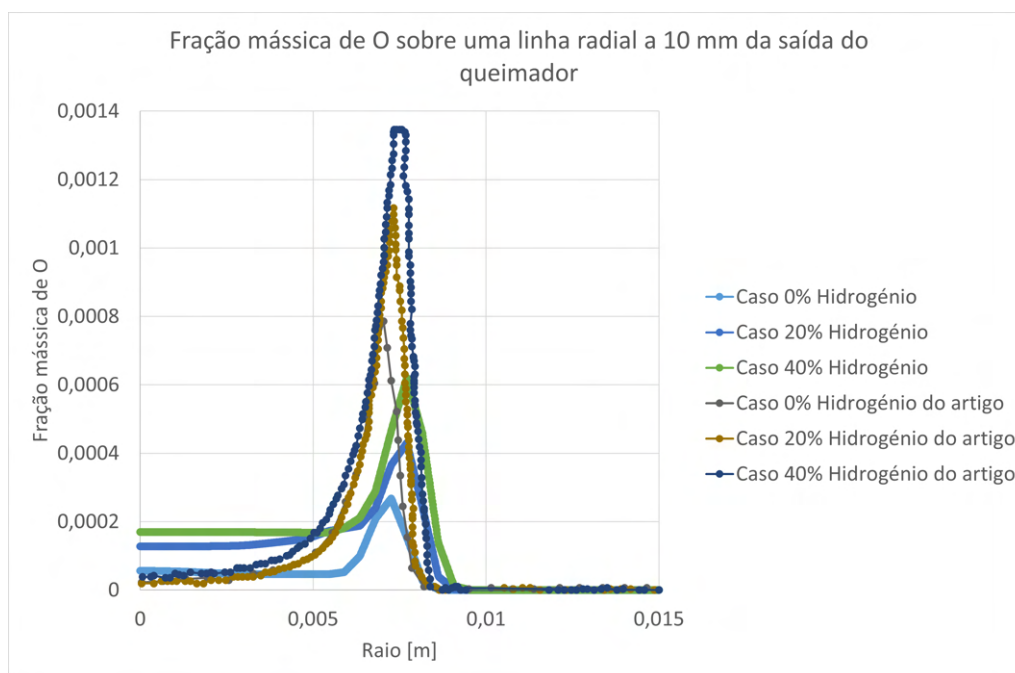


Figura 3.86: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

3.11. COMPARAÇÃO DOS CASOS, 0 %, 20 % E 40 % DE H₂ COM OS RESULTADOS NUMÉRICOS DE RAHIMI ET AL., 2023

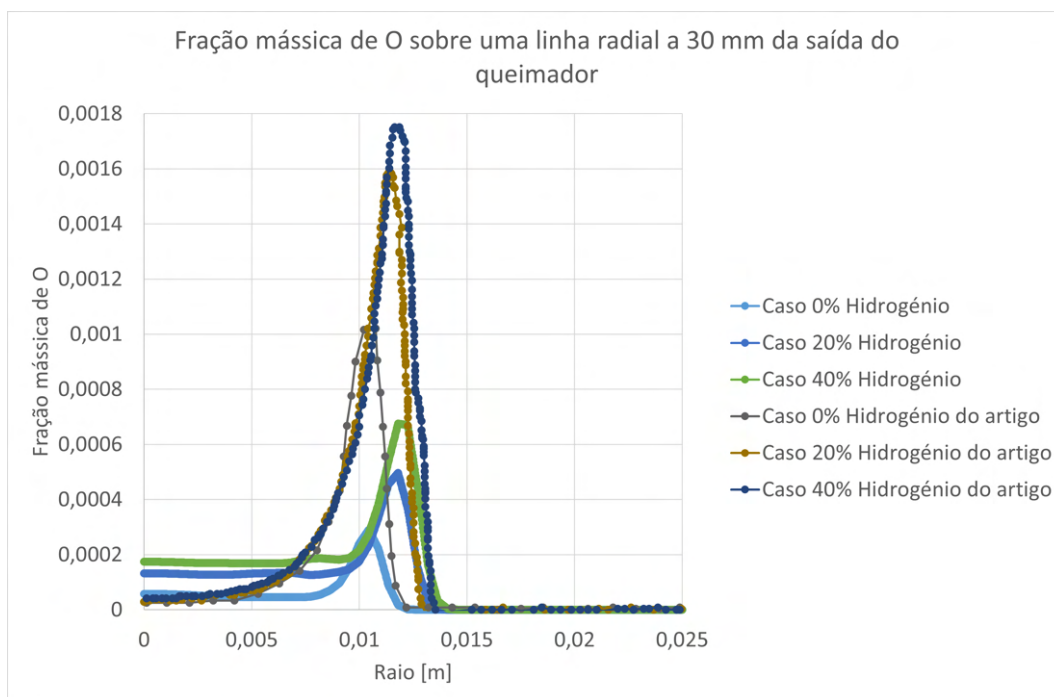


Figura 3.87: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

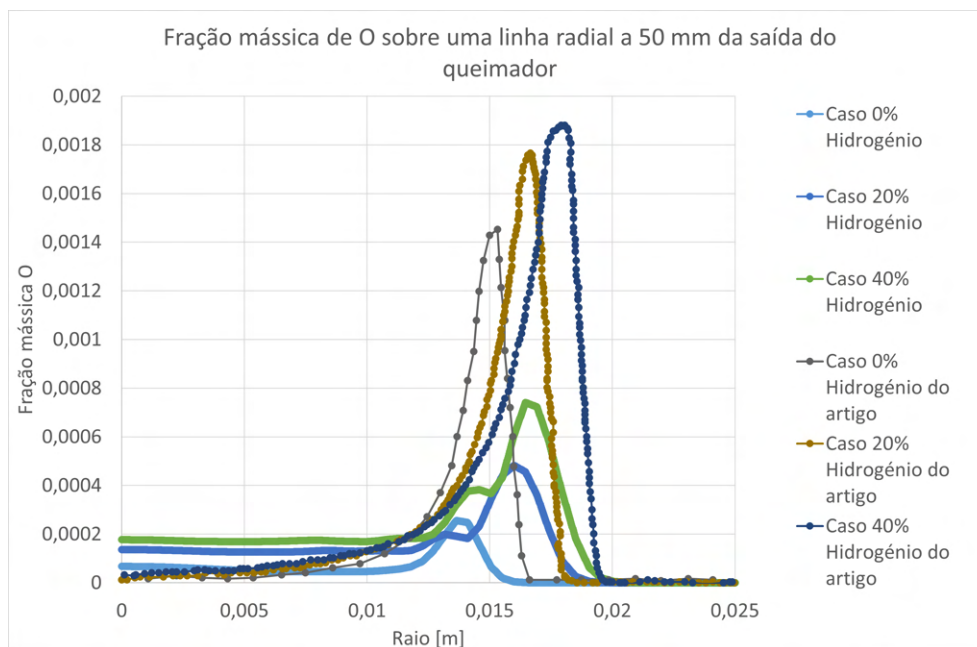


Figura 3.88: Gráfico da fração mássica de O sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

Nas Figuras 3.89, 3.90 e 3.91 são apresentadas as frações mássicas de OH sobre linhas radiais a 10 mm, 30 mm e 50 mm da saída do queimador, respetivamente.

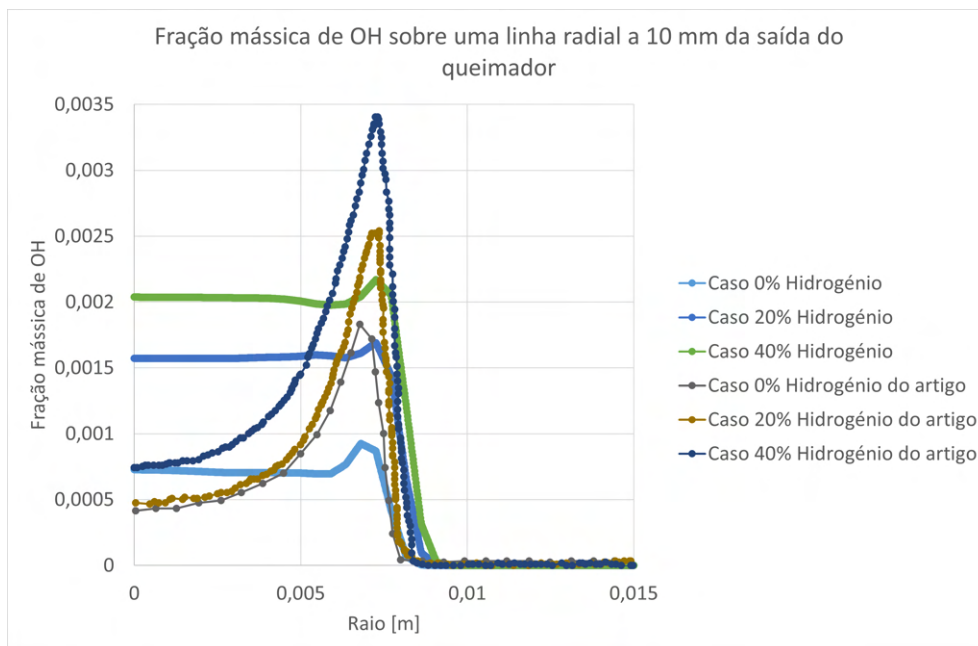


Figura 3.89: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 10 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

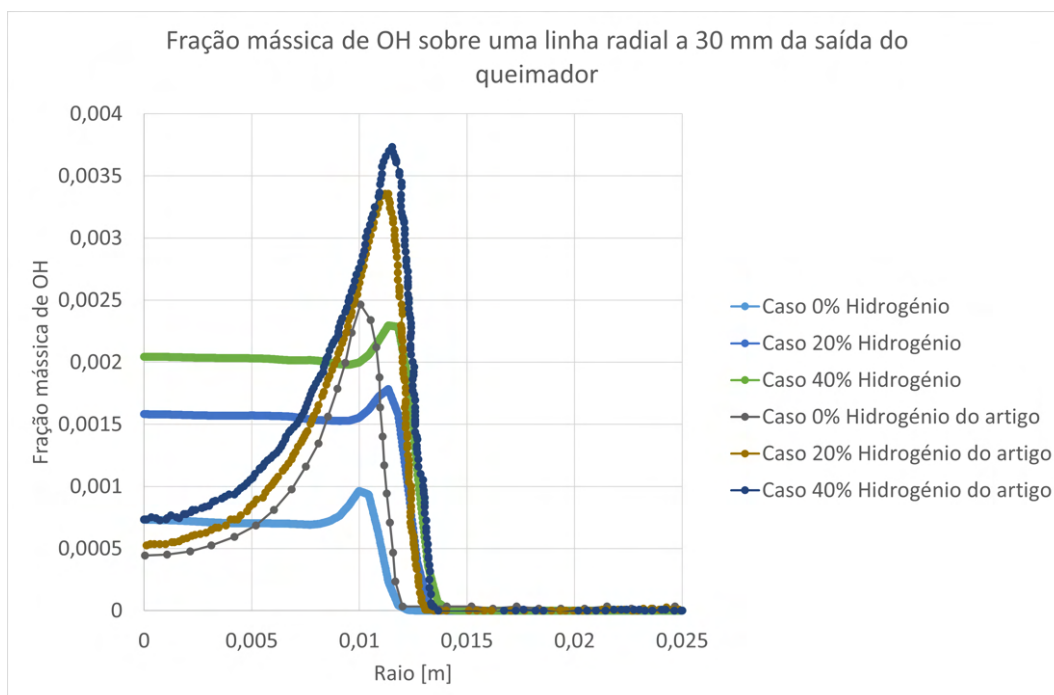


Figura 3.90: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 30 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

3.11. COMPARAÇÃO DOS CASOS, 0 %, 20 % E 40 % DE H₂ COM OS RESULTADOS NUMÉRICOS DE RAHIMI ET AL., 2023

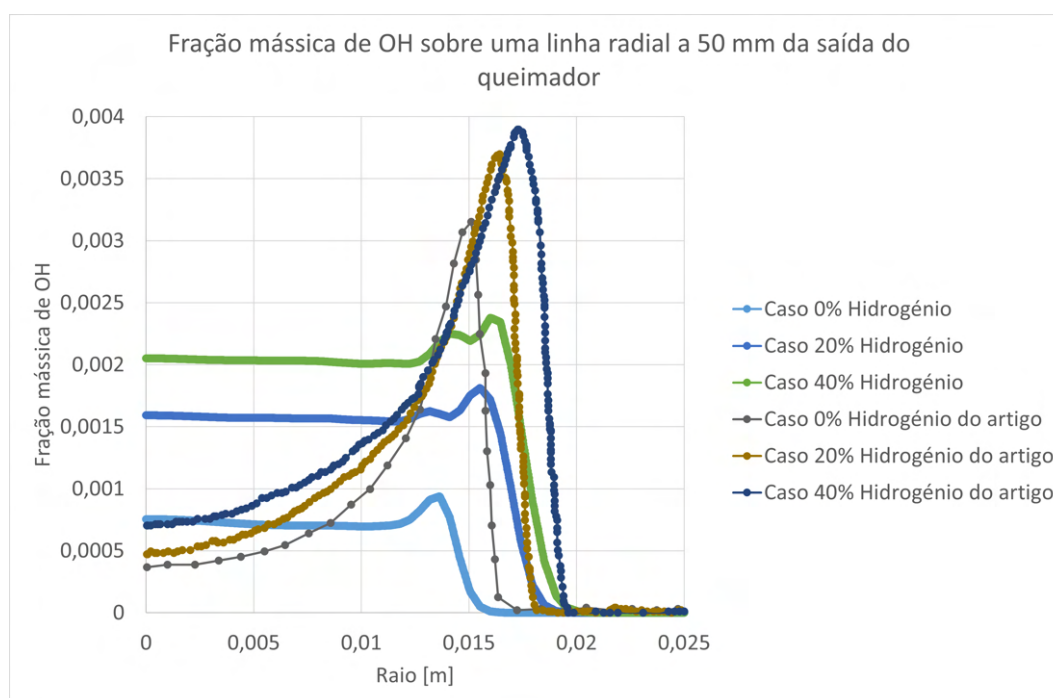


Figura 3.91: Gráfico da fração mássica de OH sobre uma linha radial a 50 mm da saída do queimador para o estudo comparativo dos resultados da presente dissertação com os de Rahimi et al., 2023.

Da Figura 3.83 à Figura 3.91 é possível concluir que a fração mássica dos radicais de H, O e OH é maior para todos os casos de Rahimi et al., 2023. Contudo, é possível concluir que a localização dos picos máximos de frações mássicas dos radicais se localizam aproximadamente no mesmo sitio, o que permite inferir que a modelação da chama, em termos geométricos, deverá estar correta. Excetuando para o caso do radical livre de OH todos outros gráficos apresentam curvas com formas idênticas para os casos de Rahimi et al., 2023 e da presente dissertação, o que mais uma vez permite concluir que a modelação da chama deverá estar correta.

Justifica-se que, para os casos de Rahimi et al., 2023, os gráficos de OH apresentem valores mais baixos de frações mássicas deste radical no interior da chama, (entre o eixo de revolução e o pico máximo deste radical) pois, como é possível observar dos campos de temperatura de Rahimi et al., 2023, na Figura 2.1, Rahimi et al., 2023 apresentam uma zona de temperaturas mais elevadas junto ao limite da chama, que não é tão evidente nos resultados da presente dissertação, onde a chama apresenta uma distribuição de temperaturas mais uniforme no seu interior.

A diferença encontrada nos gráficos de OH entre Rahimi et al., 2023 e a presente dissertação deverá ser justificada, por no caso de Rahimi et al., 2023 ser nesta zona mais localizada de temperaturas mais elevadas que ocorrerão a maioria das reações, o que leva a um pico mais elevado da fração mássica destes radicais. Para a mesma quantidade de combustível, por consequência, é expectável que no interior da malha exista uma menor fração mássica destes radicais. Pelo concluído, na presente dissertação, a chama obtida

apresenta uma distribuição de temperaturas mais uniforme no seu interior, o que justifica as diferenças encontradas, dado que nesta as reações ocorrerão de forma mais uniforme sendo então o pico de frações mássicas menor e existindo assim valores mais altos fora da zona do pico máximo. Este fenómeno é mais evidente nas Figuras 3.89, 3.90 e 3.91 para a fração mássica de OH, dado que, este elemento se forma da reação de radicais livres de O e H que têm os seus picos mais elevados na zona de maior taxa de reação.

Conclui-se da zona inicial até aos 50 mm após a saída do queimador, existem diferenças significativas entre a modelação da chama obtida na presente dissertação e na obtida por Rahimi et al., 2023. Estas diferenças poderão dever-se ao programa computacional utilizado. Outra razão poderá ser o modelo de reação química pois foram utilizados diferentes modelos entre a presente dissertação e o trabalho de Rahimi et al., 2023. Foram também utilizados diferentes modelos de turbulência. Na presente dissertação utilizou-se o modelo $k - \varepsilon$ *Realizable* e Rahimi et al., 2023 utilizaram o modelo $K - \omega$ *SST*. Contudo, foi realizado um estudo comparativo dentro destes modelos, no Subcapítulo 3.2 e das figuras obtidas para a trajetória de partículas virtuais no Subcapítulo 3.5 e no Subcapítulo 3.7.2 concluiu-se que o desenvolvimento do escoamento se comporta como seria esperado ao obter duas bolhas de recirculação no centro do domínio computacional à saída do queimador. Deste modo, é expectável que o escoamento esteja corretamente modelado, e portanto a diferença nos modelos de turbulência não deverá ser uma razão para as diferenças obtidas nesta zona do domínio. Outra razão para justificar que a chama deverá estar corretamente modelada prende-se com o facto de os picos de fração mássica dos radicais livres de H, O e OH ocorrerem na mesma localização para as linhas traçadas. De forma a tentar aproximar os resultados e concluir-se qual dos trabalhos está mais próximo do real, propõem-se que seja utilizado o modelo EDC para a modelação da interação química-turbulência e que, com a elevada complexidade deste, possam então ser validados os resultados.

Por fim, apesar das pequenas diferenças nos resultados, conclui-se que os resultados obtidos nos Subcapítulos 3.7, 3.8 e 3.10 são válidos e que as tendências de temperatura e fração mássica de radicais livres verificadas com a introdução do hidrogénio ocorrem da mesma forma na presente dissertação e no trabalho de Rahimi et al., 2023.

CONCLUSÃO

4.1 Conclusão

Contemplou-se, na presente dissertação, o estudo do queimador *Cambridge Stratified Swirl Burner*. Da literatura encontrada, este apresentou-se como o mais vantajoso para o estudo do *retrofitting*, pois contém uma geometria com estabilizador de chama do tipo *bluff-body*, e ainda, *swirl*. Com base na literatura, foram obtidos resultados numéricos e experimentais para a validação dos modelos utilizados para simular a operação do presente queimador.

Esta dissertação teve como primeiro objetivo obter resultados numéricos para a queima de CH₄ puro, misturas de CH₄ e H₂ nas seguintes percentagens volúmicas de H₂: 2%, 5%, 10%, 20%, 40%, 60% e 80%, e ainda investigar a queima de H₂ puro. Em todos os casos manteve-se as condições originais de funcionamento iguais à da queima de CH₄ puro. Estabeleceu-se ainda como objetivo, perceber como a alteração da velocidade axial da mistura numa das secções de entrada contribuiu para a aproximação das propriedades da chama de mistura de 80% de H₂ à chama de CH₄ puro, obtendo-se assim uma linha orientadora para o *retrofitting* do queimador em estudo.

Para a determinação dos modelos e condições de fronteira a aplicar recorreu-se à literatura e foram conduzidos estudos comparativos nomeadamente para a determinação das condições de fronteira sobre a lateral do domínio computacional, para a escolha do modelo de turbulência e pré mistura. Destes concluiu-se que deverá ser utilizada a condição *pressure-inlet* para a lateral do domínio computacional, e que os modelos *K – ε Realizable* e *K – ω SST* apresentam resultados semelhantes respondendo ambos corretamente à modelação do problema. Foi obtida a mesma conclusão para os modelos de pré-mistura, *Zimont* e *Peters*, tendo sido portanto utilizado o *K – ε Realizable* e o modelo *Zimont*.

O queimador em estudo não contém câmara de combustão, no entanto, recorrendo à teoria de jato livre, aos resultados da literatura e com os resultados da presente dissertação para a queima de 80% de H₂, foi possível concluir que, para a obtenção de resultados sobre todo o domínio computacional, o mesmo deverá ser entendido até 1 m de comprimento e 800 mm de largura, passando a permitir que as chamas com as condições de funcionamento

propostas não estejam influenciadas pela dimensão do domínio computacional.

Realizou-se um estudo comparativo entre o uso de um caso bidimensional ou tridimensional em paralelo com o estudo de independência de malha. Concluiu-se do estudo comparativo que na presente dissertação seria mais adequado o uso de um modelo tridimensional dada a ordem de grandeza dos resíduos dos casos bidimensional e o modo como o software *ANSYS FLUENT 18.2* modela os campos de velocidade e aceleração nas 3 direções. Do estudo de independência de malha foi possível definir que seria utilizada uma malha com 898977 nós. A análise dos parâmetros de qualidade para esta malha, permitiu concluir que, para a ortogonalidade, rácio de crescimento e distorção dos elementos a malha construída apresenta boas características.

A presente dissertação teve como um dos seus objetivos obter resultados para os campos de temperatura e velocidade para o caso de combustão de CH_4 puro, que sirvam de base à introdução de H_2 . Para validação do caso de CH_4 puro foram comparados os resultados de velocidade axial e tangencial, temperatura e fração mássica de CO_2 com os resultados de Rahimi et al., 2023.

Concluiu-se que os resultados obtidos para a queima de CH_4 estão em concordância com os numéricos e experimentais apresentados por Rahimi et al., 2023 no que diz respeito à modelação geométrica da chama. As principais diferenças encontradas encontram-se na distribuição de temperaturas no interior da chama, já que, os resultados numéricos de Rahimi et al., 2023 apresentam a zona de temperatura mais elevada junto da fronteira da chama. Tal não é possível observar nos resultados obtidos na presente dissertação, onde a temperatura no interior da chama está distribuída de forma mais uniforme. Uma justificação para as diferenças registadas poderá prender-se com os modelos de reação química utilizados. Outra poderá prender-se com o modelo de interação química-turbulência selecionados. Apesar das diferenças, os resultados obtidos para o caso de CH_4 puro apresentam-se como válidos, tendo sido este o caso utilizado para a introdução gradual do H_2 .

A queima de misturas de H_2 e CH_4 foi obtida com sucesso para todos os casos e concluiu-se que, com o aumento da percentagem de hidrogénio, a temperatura máxima da chama aumentou, bem como o seu comprimento e largura. Os resultados dos campos de temperatura para misturas de CH_4 e H_2 mostram a mesma tendência que a queima de CH_4 puro para a distribuição de temperaturas no interior da chama, sendo esta diferente dos resultados da literatura.

Da análise dos radicais livres de O, H e OH para os casos de misturas foi possível concluir que o aumento da percentagem de hidrogénio leva a que o pico máximo das frações mássicas destes elementos ocorra mais afastado da linha central, o está alinhado com os resultados de temperatura. Conclui-se assim que a zona onde correm mais reações, junto do limite lateral da chama, se desloca no sentido de se afastar do eixo de revolução, ou seja, a chama estará mais larga.

Da análise da fração mássica de CO_2 constata-se que esta aumenta com a introdução de hidrogénio até aos 40%, onde a fração mássica passa a igualar a da queima original

de CH_4 . Verifica-se que, para o presente queimador, a introdução de H_2 reduz a fração mássica de CO_2 em relação à da queima de CH_4 puro apenas para valores superiores a 40% de H_2 .

Contrariamente ao caso da queima de misturas, a queima de H_2 puro, com as mesmas condições que a queima de CH_4 puro, não foi bem sucedida. Apesar de existir chama, esta passou a ocorrer dentro dos *inlets*, ocorrendo *flashback* da chama.

De forma a obter-se uma linha orientadora para o *retrofitting*, na presente dissertação, estudou-se a influência da mudança de velocidade axial no *inlet inner slot* para o caso de 80% de H_2 , de onde se conclui que o aumento da velocidade aproxima a largura das chamas de misturas à chama original de CH_4 na zona inicial, mas torna as chamas mais compridas. Já o caso de velocidade mais baixo apresentou o comportamento oposto ao do aumento de velocidade. Por outro lado a variação da velocidade não altera significativamente a reação e como tal devem ser estudados outros fatores para se obter uma chama mais parecida à de CH_4 puro. Propõem-se assim estudar a influência de diferentes misturas de combustível-ar de forma a perceber o impacto que este fator tem na chama e na aproximação das chamas de mistura à chama de CH_4 puro.

Por último, foram comparados os resultados obtidos na presente dissertação com os resultados numéricos de Rahimi et al., 2023 para os casos de CH_4 puro e para as misturas de 20% e 40% de H_2 . Das frações mássicas de O, H e OH na zona inicial do domínio, até aos 50 mm, foi possível concluir que os resultados da presente dissertação estão em linha com os de Rahimi et al., 2023.

Dado que os resultados da presente dissertação estão em linha com os de Rahimi et al., 2023 para a modelação geométrica da chama, e como os resultados obtidos nos estudos da presente dissertação mantêm a coerência nas tendências observadas para a temperatura e frações mássicas podem dar-se como válidos os resultados obtidos na dissertação. De forma a validar ambos os estudos e para tentar aproximar mais os resultados propõem-se que seja utilizado o modelo EDC para a modelação da interação química-turbulência. Como foi referido anteriormente este estudo não foi conduzido na presente dissertação devido ao elevado custo computacional deste modelo.

Os objetivos propostos para a presente dissertação foram atingidos com sucesso, no entanto, e dado que o estudo de *retrofitting* é um assunto de elevada complexidade onde muitos parâmetros podem ser alterados de forma a aproximar as chamas de misturas à chama original, o estudo do *retrofitting* do presente queimador não pode ser dado como terminado. Espera-se que a presente dissertação possa servir de base para que futuros trabalhos possam obter mais linhas orientadoras para o *retrofitting* do presente queimador.

4.2 Sugestões para trabalho futuro

Da presente dissertação e devido às limitações temporais e de recursos computacionais deixam-se as seguintes sugestões para trabalho futuro.

- Revalidação do estudo comparativo entre os modelos $K-\varepsilon$, $K-\varepsilon$ *Realizable* e $K-\omega$ *SST* para contemplar *swirl* no *inlet outer slot*.
- Revalidação do estudo de independência de malha para contemplar *swirl* no *inlet outer slot*.
- Aumento do domínio computacional para 1 m de comprimento e 0,8 m de largura para garantir resultados válidos sobre todo o domínio computacional.
- Propõe-se o uso do modelo EDC para a interação química-turbulenta.
- Propõe-se um estudo comparativo entre os dois programas computacionais de *Computational Fluid Dynamics (CFD)*: *ANSYS FLUENT 18.2* e *Openfoam*. Pretende-se com este estudo avaliar se as diferenças obtidas na presente dissertação são devido ao uso de diferentes softwares.

Dado que, o estudo do *retrofitting* do presente queimador não pode ser dado como concluído com a presente dissertação deixam-se algumas sugestões de estudos futuros.

- Alteração de velocidade, temperatura ou razão de equivalência, ϕ de forma avaliar se é possível a queima correta de 100% de H_2 .
- Obtenção de resultados de NO_x para o estudo realizado.
- Comparação das temperaturas obtidas com a temperatura adiabática de chama.
- Análise da potencia fornecida pela chama para os diferentes casos.
- Alteração do razão de equivalência, ϕ em ambos os *inlets*.
- Estudo de diferentes razão de equivalência, ϕ em diferentes *inlets*.

BIBLIOGRAFIA

- Lourenço, J. M. (2021). *The NOVAthesis L^AT_EX Template User's Manual*. NOVA University Lisbon. <https://github.com/joaomlourenco/novathesis/raw/main/template.pdf> (ver p. ii).
- Nations, U. (2015). *ADOPTION OF THE PARIS AGREEMENT - Paris Agreement text English*. (Ver p. 1).
- Diário da República Despacho n 2768-A. (2022). (Ver p. 1).
- DR. (2020a, junho). *Diário da República, 1.ª série N.º 133 PRESIDÊNCIA DO CONSELHO DE MINISTROS Resolução do Conselho de Ministros n.º 53/2020*. (Ver p. 1).
- Burbano, H. J., Amell, A. A., & García, J. M. (2008). Effects of hydrogen addition to methane on the flame structure and CO emissions in atmospheric burners. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 3410–3415. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.04.020> (ver pp. 1, 19).
- Mayrhofer, M., Koller, M., Seemann, P., Prieler, R., & Hochenauer, C. (2021). Assessment of natural gas/hydrogen blends as an alternative fuel for industrial heat treatment furnaces. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46, 21672–21686. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.228> (ver pp. 1, 19).
- DGEG. (2023). *Consumo de gás natural Portugal*. <https://www.dgeg.gov.pt/pt/estatistica/energia/gas-natural/consumos/> (ver p. 2).
- DGEG. (2022, dezembro). *Potência instalada nas centrais produtoras de eletricidade (2021)*. <https://www.dgeg.gov.pt/pt/estatistica/energia/recentes/> (ver pp. 2, 4, 5).
- Wu, X., Zhang, H., Yang, M., Jia, W., Qiu, Y., & Lan, L. (2022, fevereiro). From the perspective of new technology of blending hydrogen into natural gas pipelines transmission: Mechanism, experimental study, and suggestions for further work of hydrogen embrittlement in high-strength pipeline steels. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.12.108> (ver p. 4).
- Floene. (2023). Um projeto pioneiro. <https://greenpipeline.pt/um-projeto-pioneiro/> (ver p. 4).
- Zhao, Y., McDonell, V., & Samuelsen, S. (2019). Influence of hydrogen addition to pipeline natural gas on the combustion performance of a cooktop burner. *International*

- Journal of Hydrogen Energy*, 44, 12239–12253. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.100> (ver pp. 4, 19).
- DR. (2020b, agosto). *Diário da República*, 1.^a série PRESIDÊNCIA DO CONSELHO DE MINISTROS Resolução do Conselho de Ministros n^o 63/2020. (Ver p. 5).
- Baukal, C. E. (2000). *Heat transfer in industrial combustion*. CRC Press. (Ver pp. 6, 7).
- Elbaz, A. M., Albalawi, A. M., Wang, S., & Roberts, W. L. (2022). Stability and characteristics of NH₃/CH₄/air flames in a combustor fired by a double swirl stabilized burner. *Proceedings of the Combustion Institute*. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.06.004> (ver pp. 7, 19).
- Yang, X., Yang, W., Dong, S., & Tan, H. (2020). Flame stability analysis of premixed hydrogen/air mixtures in a swirl micro-combustor. *Energy*, 209. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118495> (ver pp. 8, 17, 19).
- Marragou, S., Magnes, H., Poinot, T., Selle, L., & Schuller, T. (2022). Stabilization regimes and pollutant emissions from a dual fuel CH₄/H₂ and dual swirl low NO_x burner. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47, 19275–19288. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.04.033> (ver pp. 8, 19).
- Bagheri, G., Hosseini, S. E., & Wahid, M. A. (2014). Effects of bluff body shape on the flame stability in premixed micro-combustion of hydrogen-air mixture. *Applied Thermal Engineering*, 67, 266–272. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.03.040> (ver pp. 8, 19).
- Ibrahim, I. A., Shokry, A. H., Shabaan, M. M., & Gad, H. M. (2022). A comparative study of gaseous fuel flame characteristics for different bluff body geometries. *Case Studies in Thermal Engineering*, 34. <https://doi.org/10.1016/j.csite.2022.101951> (ver p. 8).
- Tong, Y., Chen, S., Li, M., Li, Z., & Klingmann, J. (2017). Experimental study on bluff-body stabilized premixed flame with a central air/fuel jet. *Energies*, 10. <https://doi.org/10.3390/en10122011> (ver pp. 8, 9, 19).
- Gee, A. J., Yin, Y., Foo, K. K., Chinnici, A., Smith, N., & Medwell, P. R. (2022). Toluene addition to turbulent H₂/natural gas flames in bluff-body burners. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47, 27733–27746. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.06.154> (ver pp. 10, 11, 13, 19).
- Schefer, R. W., Kulatilaka, W. D., Patterson, B. D., & Settersten, T. B. (2009). Visible emission of hydrogen flames. *Combustion and Flame*, 156, 1234–1241. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.01.011> (ver p. 11).
- Oriani, R. A., & Josephic, P. H. (1974). Equilibrium aspects of hydrogen-induced cracking of steels. *Acta Metallurgica*, 22, 1065–1074. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(74\)90061-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(74)90061-3) (ver p. 12).
- Lancaster, J. (1999). *Metallurgy of Welding* (6th Edition) (6th), 438. <http://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpMWE00002/metallurgy-welding-6th/metallurgy-welding-6th> (ver p. 12).
- Okuno, K., & Takai, K. (2023). Determination of hydrogen diffusibility and embrittlement susceptibility of high-strength steel evaluated at different temperatures based on

- the local equilibrium theory. *Acta Materialia*, 246, 118725. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.118725> (ver p. 12).
- L.M., M.-T. (1973). *Theoretical aerodynamics, by L.M. Milne-Thomson*. <https://www.worldcat.org/pt/title/theoretical-aerodynamics-by-lm-milne-thomson/oclc/859841764> (ver p. 14).
- Slotnick, J., Khodadoust, A., Alonso, J., Gropp, W., & Mavriplis, D. (2014). *CFD Vision 2030 Study: A Path to Revolutionary Computational Aerosciences*. <http://www.sti.nasa.gov> (ver p. 14).
- Ditaranto, M., Anantharaman, R., & Weydahl, T. Performance and NO_x emissions of refinery fired heaters retrofitted to hydrogen combustion. *Em*: 37. Elsevier Ltd, 2013, 7214–7220. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.06.659> (ver p. 14).
- Tigges, K. D., Klauke, F., Bergins, C., Busekrus, K., Niesbach, J., Ehmann, M., Kuhr, C., Hoffmeister, F., Vollmer, B., Buddenberg, T., Wu, S., & Kukoski, A. Conversion of existing coal-fired power plants to oxyfuel combustion: Case study with experimental results and CFD-simulations. *Em*: 1. 2009-02, 549–556. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.073> (ver p. 14).
- Gómez, H. O., Calleja, M. C., Fernández, L. A., Kiedrzyńska, A., & Lewtak, R. (2019). Application of the CFD simulation to the evaluation of natural gas replacement by syngas in burners of the ceramic sector. *Energy*, 185, 15–27. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.06.064> (ver pp. 14, 19).
- Menter, F., Lechner, R, Matyushenko, A. A. G. G., & Petersburg, S. (2021). *Best Practice: RANS Turbulence Modeling in Ansys CFD*. (Ver pp. 15, 16).
- ANSYS Fluent Users Guide. (2013). (Ver pp. 16, 17, 32, 34, 37, 42, 44, 45).
- Kiedrzyńska, A., Lewtak, R., Świątkowski, B., Józwiak, P., Hercog, J., & Badyda, K. (2020). Numerical study of natural gas and low-calorific syngas co-firing in a pilot scale burner. *Energy*, 211. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118552> (ver pp. 17, 19).
- Kore, R., Patil, S., Victor, V., Suresh, S., Bajaj, D. K., & Jain, S. (2023). CFD approach to predict the significance of the shape bluff body on flame stabilisation in lean premixed combustion of hydrogen-air mixtures. *Materials Today: Proceedings*, 72, 1181–1189. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.09.281> (ver pp. 17–19).
- Ferreira, A. P. (2021). *Simulação Numérica com Eddy-Dissipation Concept de Chamas de Hidrogénio sem pré-Mistura, Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica*. (Ver pp. 17, 18, 36, 43).
- Gameiro, A. L. (2020). *Simulação em ANSYS Fluent de um sistema de combustão industrial com metano e hidrogénio, Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica*. (Ver pp. 17, 36, 37, 43).
- Mueller, M. A., Kim, T. J., Yetter, R. A., & Dryer, F. L. (1999). Flow reactor studies and kinetic modeling of the H₂/O₂ reaction. *International Journal of Chemical Kinetics*, 31, 113–125. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-4601\(1999\)31:2<113::AID-KIN5>3.0.CO;2-0](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4601(1999)31:2<113::AID-KIN5>3.0.CO;2-0) (ver pp. 17, 18, 38).

- Boivin, P. (2011). *Reduced-Kinetic Mechanisms for Hydrogen and Syngas Combustion Including Autoignition*. (Ver pp. 17, 38).
- Lu, T., & Law, C. K. (2008). A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species: A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry. *Combustion and Flame*, 154(4), 761–774. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.04.025> (ver pp. 18, 37).
- Luca, S., Al-Khateeb, A. N., Attili, A., & Bisetti, F. (2017). Comprehensive Validation of Skeletal Mechanism for Turbulent Premixed Methane-Air Flame Simulations. <https://doi.org/10.2514/1.B36528> (ver pp. 18, 37).
- CERFACS. (2023). *Mechanisms list - CERFACS Chemistry*. <https://chemistry.cerfacs.fr/en/chemical-database/mechanisms-list/> (ver pp. 18, 38).
- Laurent, C. (2020). Low-Order Modeling and High-Fidelity Simulations for the Prediction of Combustion Instabilities in Liquid Rocket Engines and Gas Turbines (ver pp. 18, 37).
- Magnussen, B. F., & Hjertager, B. H. (1977). On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 16, 719–729. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(77\)80366-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(77)80366-4) (ver p. 18).
- Franco, M. C., Rocha, R. C., Costa, M., & Yehia, M. (2021). Characteristics of NH₃/H₂/air flames in a combustor fired by a swirl and bluff-body stabilized burner. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4), 5129–5138. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.141> (ver p. 19).
- İlbaş, M., Karyeyen, S., & İlker Yilmaz. (2016). Effect of swirl number on combustion characteristics of hydrogen-containing fuels in a combustor [Special Issue on 17th International Conference on Emerging Nuclear Energy Systems (ICENES'2015), 4-8 October 2015, Istanbul, Turkey]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(17), 7185–7191. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.12.107> (ver p. 19).
- Schefer, R. W., NAMAZIAN, M., KELLY, J., & PERRIN, M. (1996). Effect of Confinement on Bluff-Body Burner Recirculation Zone Characteristics and Flame Stability. *Combustion Science and Technology*, 120(1-6), 185–211. <https://doi.org/10.1080/00102209608935573> (ver p. 19).
- Massey, J. C., Langella, I., & Swaminathan, N. (2018). Large eddy simulation of a bluff body stabilised premixed flame using flamelets. *Flow, Turbulence and Combustion*, 101, 973–992 (ver p. 19).
- Hosseini, A. A., Ghodrat, M., Moghiman, M., & Pourhoseini, S. H. (2020). Numerical study of inlet air swirl intensity effect of a Methane-Air Diffusion Flame on its combustion characteristics. *Case Studies in Thermal Engineering*, 18, 100610 (ver p. 19).
- Karyeyen, S. (2018). Combustion characteristics of a non-premixed methane flame in a generated burner under distributed combustion conditions: A numerical study.

- Fuel*, 230, 163–171. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.05.052> (ver p. 19).
- Aravind, S., Gohiya, R., Prakash, R., & Sadanandan, R. (2021). Effects of CO₂ dilution on partially premixed CH₄-air flames in swirl and bluff body stabilized combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4), 5209–5217. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.153> (ver p. 19).
- Gough, A., Mobini, K., Chen, Y.-C., & Bilger, R. (1998). Measurements and predictions in a confined bluff-body burner modeled as an imperfectly stirred reactor. *Symposium (International) on Combustion*, 27(2), 3181–3188. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(98\)80181-1](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0082-0784(98)80181-1) (ver p. 19).
- Kalt, P. A., Al-Abdell, Y. M., Masri, A. R., & Barlow, R. S. (2002). Swirling turbulent non-premixed flames of methane: flow field and compositional structure. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2), 1913–1919 (ver p. 19).
- Rahimi, S., Mazaheri, K., Alipoor, A., & Mohammadpour, A. (2023). The effect of hydrogen addition on methane-air flame in a stratified swirl burner. *Energy*, 265, 126354 (ver pp. 19–26, 30, 34, 36–39, 43–45, 73, 74, 76, 78, 79, 84, 86, 88, 89, 92–95, 102, 116–122, 124, 125).
- Masri, A. (2015). Partial premixing and stratification in turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(2), 1115–1136. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.08.032> (ver p. 19).
- Sweeney, M. S., Hochgreb, S., Dunn, M. J., & Barlow, R. S. (2012). The structure of turbulent stratified and premixed methane/air flames II: Swirling flows. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.05.014> (ver pp. 20, 21).
- Schneider, S., Geyer, D., Magnotti, G., Dunn, M. J., Barlow, R. S., & Dreizler, A. (2019). Structure of a stratified CH₄ flame with H₂ addition. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37, 2307–2315. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.06.205> (ver p. 22).
- Wen, X., Dressler, L., Dreizler, A., Sadiki, A., Janicka, J., & Hasse, C. (2021). Flamelet LES of turbulent premixed/stratified flames with H₂ addition. *Combustion and Flame*, 230, 111428. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111428> (ver p. 22).
- Raghavan, V. (2016, julho). *Combustion Technology : Essentials of Flames and Burner*. <https://doi.org/10.1002/9781119241775> (ver p. 32).
- White, F. M. (2011). *Fluid mechanics* (7th ed). McGraw-Hill. (Ver p. 32).
- Speight, J. G. Chapter 10 - Combustion of hydrocarbons (J. G. Speight, Ed.; Second Edition). Em: *Handbook of Industrial Hydrocarbon Processes (Second Edition)* (J. G. Speight, Ed.; Second Edition). Ed. por Speight, J. G. Second Edition. Boston: Gulf Professional Publishing, 2020, pp. 421–463. ISBN: 978-0-12-809923-0. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809923-0.00010-2> (ver p. 33).
- Vaz, D. C. (2007). *Towards the application of flameless combustion to micro gas turbines*. (Ver pp. 35, 71).
- Reichardt, H. (1943). On a New Theory of free Turbulence. *The Aeronautical Journal*, 47(390), 167–176. <https://doi.org/10.1017/S0368393100106613> (ver p. 35).

- ANSYS Fluent Theory Guide. (2009). (Ver pp. 37–42, 44, 45).
- Sankaran, R., Hawkes, E. R., Chen, J. H., Lu, T., & Law, C. K. (2007). Structure of a spatially developing turbulent lean methane–air Bunsen flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1), 1291–1298. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.08.025> (ver p. 37).
- Cazères, Q., Pepiot, P., Riber, E., & Cuenot, B. (2021). A fully automatic procedure for the analytical reduction of chemical kinetics mechanisms for Computational Fluid Dynamics applications. *Fuel*, 303, 121247. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121247> (ver p. 37).
- Bowman, C., University, S., & Institute, G. R. (1997). *GRI-Mech 2.11, an Optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion and No Formation and Reburning: Topical Report (February 1, 1997)*. Gas Research Institute. <https://books.google.pt/books?id=bQUdHAAACAAJ> (ver p. 38).
- Smith, G. P., M. Golden, D., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eitenner, B., Goldenberg, M., Bowman, C., Hanson, R. K., Song, S., C. Gardiner, W., JR., Lissianski, V. V., & Qin, Z. (s.d.). *GRI-Mech 3.0*. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html> (ver p. 38).
- İlbas, M., İlker Yılmaz & Kaplan, Y. (2005). Investigations of hydrogen and hydrogen–hydrocarbon composite fuel combustion and NO_x emission characteristics in a model combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 30(10), 1139–1147. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2004.10.016> (ver pp. 43, 44).
- Fordoei, E. E., Mazaheri, K., & Mohammadpour, A. (2021). Effects of hydrogen addition to methane on the thermal and ignition delay characteristics of fuel-air, oxygen-enriched and oxy-fuel MILD combustion. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(68), 34002–34017. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.07.065> (ver p. 84).
- Wang, H., Hawkes, E. R., Savard, B., & Chen, J. H. (2018). Direct numerical simulation of a high Ka CH₄/air stratified premixed jet flame. *Combustion and Flame*, 193, 229–245. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.03.025> (ver p. 84).



Estudo para o retrofitting de linhas de gás natural para o hidrogénio: João Barbeiro

2023

CFD

para o

retrofitting

de

linhas

de

gás

natural

para o

hidrogénio:

João

Barbeiro



NOVA SCHOOL OF
SCIENCE & TECHNOLOGY