

• CHyTec – Development of Competences in Hydrogen Technology

Daniel C. Vaz, Prof. Auxiliar

DEMI: Departamento de Engenharia Mecânica e Industrial

UNIDEMI: Unidade de Investigação e Desenvolvimento em
Engenharia Mecânica e Industrial



Enquadramento e motivação



Projeto CHyTeC



Objetivos e metodologia

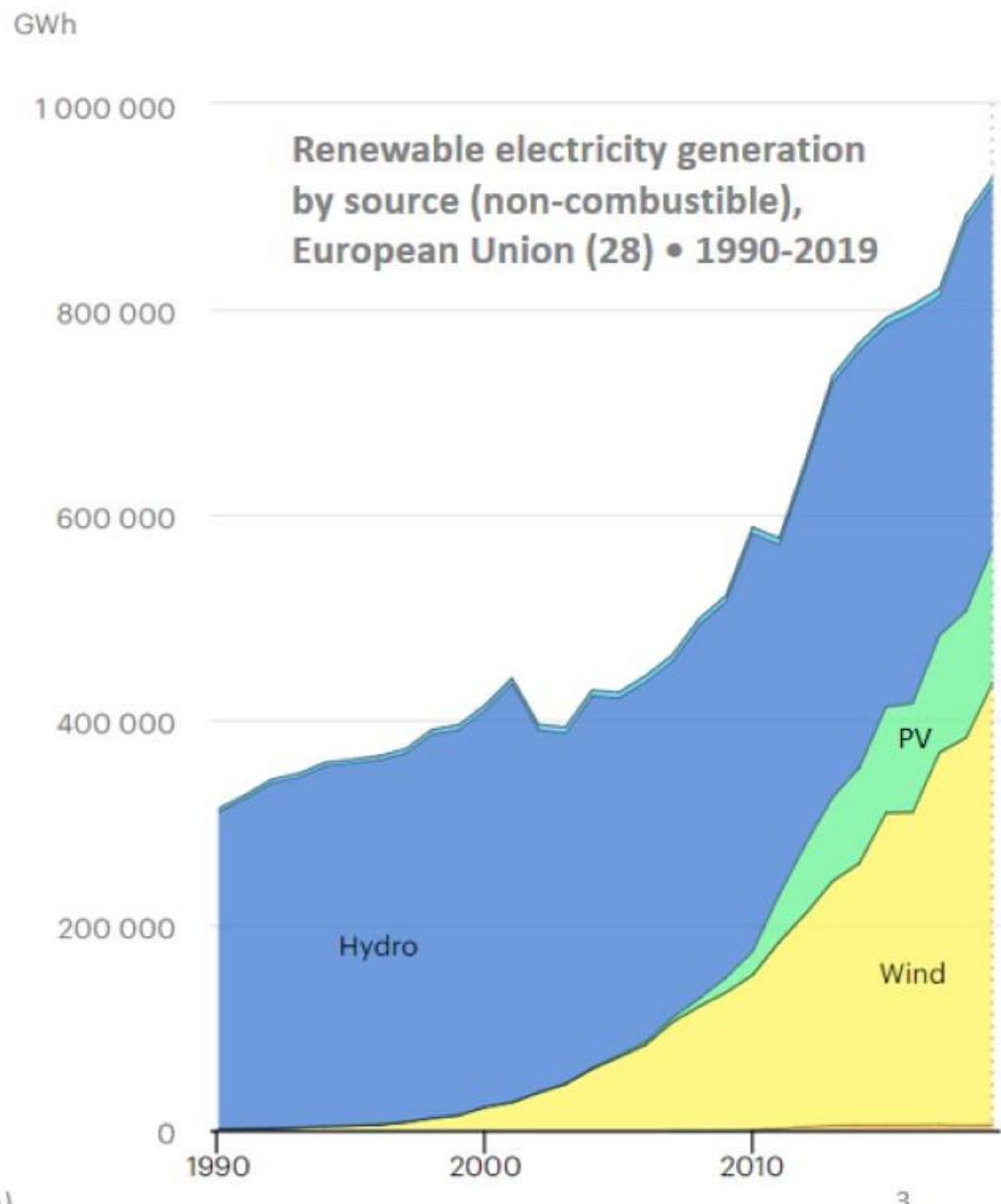
Porquê H₂?

A eletricidade é produzida cada vez mais a partir de fonte renovável: em 2019, na Europa-28 as renováveis representaram **34,1%** do consumo final bruto de eletricidade (European Environment Agency, 2021).

Energias eólica e solar fotovoltaica cresceram muito. Porém, apresentam intermitência.

Na gestão de qualquer sistema com fornecimentos e consumos com caráter não determinístico é necessário equacionar o armazenamento.

O H₂ pode ser parte da solução e competir com outras estratégias de armazenamento de energia. O papel do H₂ na descarbonização será enquanto transportador de energia.

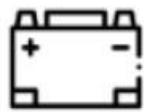


Armazenamento de energia

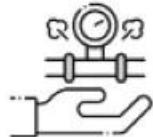
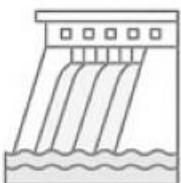


- A biomassa (e combustíveis dela derivados) é uma forma de conversão de energia solar em energia química!

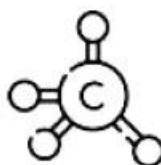
Pensando em armazenamento de energia elétrica noutras formas de energia:



- Electroquímica:
baterias



- Mecânica:
pumped hydroelectric storage, ar comprimido



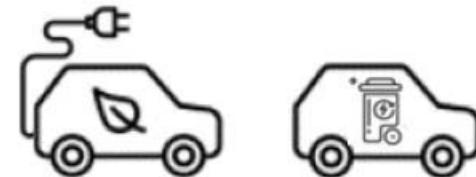
- Química:
síntese de combustíveis (H₂: *power-to-gas*; CH₄, outros: *two-stage P2G*)
- Outras

E depois do armazenamento do H₂?

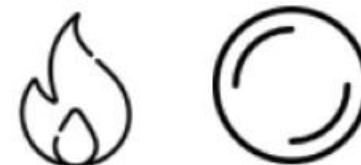
Conversão em calor para posterior produção de eletricidade?
(rendimento das máquinas térmicas!)



Conversão em electricidade (veículo elétrico, pilhas de combustível)?



Conversão em calor para uso direto (queima direta, superfície catalítica)?



Conversão em calor



O conceito de exergia, da termodinâmica, indica que a temperatura da fonte de calor deve estar ajustada à temperatura do uso final. Pelo que a conversão da energia química contida no H₂ em calor, por via da combustão, deve ser em aplicações de elevada temperatura:

- indústria do cimento
- alguma indústria do vidro e da cerâmica



Acontece que os processos industriais de elevada temperatura são também aqueles em que é mais difícil concretizar a eletrificação:

Aqui, o H₂ pode providenciar uma via para a descarbonização (substituição do atuais combustíveis fósseis) que vale a pena considerar e estudar.

Algumas propriedades do hidrogénio

O H₂ tem propriedades distintas das do gás natural o que significa que não é imediata e direta a conversão de equipamentos deste para H₂ ou misturas com elevadas % de H₂.



Diversas fontes e cálculos do autor.

| Propriedade | CH ₄ | H ₂ | ratio |
|---|-----------------|----------------|-------|
| Poder calorífico inferior, PCI (MJ/m ³ [@0 °C, 1 atm]) | 33 | 9,6 | 3,4x |
| Velocidade de chama laminar, S _L (m/s) | 0,38 | 3,51 | 9x |
| Difusividade molecular (cm ² /s) (@20 °C, 1 atm) | 0,16 | 0,61 | 3,8x |
| Índice de Wobbe (PCS, MJ/m ³) | 52,71 | 47,73 | 0,9 |
| requisito específico de ar estequiométrico (kg _{ar} /MJ) | 0,346 | 0,288 | 0,83x |
| mol de produtos por unidade de energia (mol/kJ) | 13,1 | 12,0 | 0,92x |



Flashback

Differential diffusion



semelhantes

Reducido fluxo radiativo das chamas de hidrogénio

No visível.

Contudo emitem no infravermelho
(produto da combustão é vapor de água)

Hydrogen Flame
($\phi = 0.4$)



Propane Flame
($\phi = 0.4$)

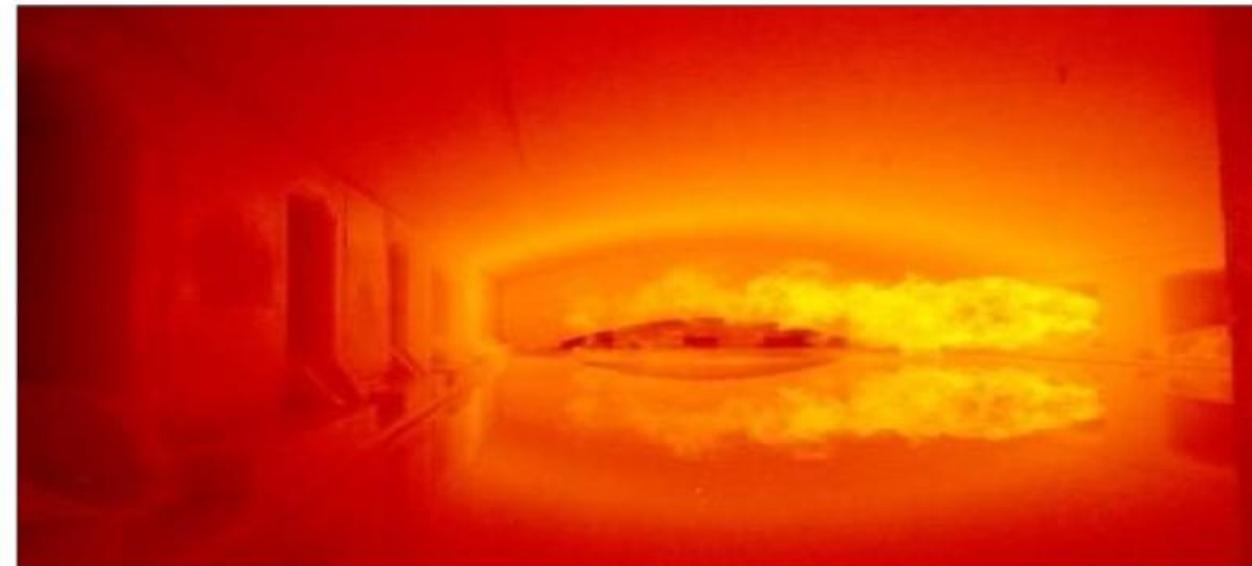


Akhyarsi et al., J. Environ. Eng. 5(1), 2010.

Importância da radiação num forno de vidro

"O principal mecanismo de transferência de calor (para o vidro) num forno de altas temperaturas é o calor radiativo, que normalmente representa mais de **95%** do fluxo total de calor."

(Hoogendoorn et al, 1994)



Adaptação de sistemas industriais

Nos equipamentos industriais é dispendiosa uma abordagem do tipo tentativa e erro.
Daí o interesse da simulação numérica.

As ferramentas numéricas devem ser validadas experimentalmente.

Antes de o fazer à escala industrial, o que também é necessário, há que começar à escala laboratorial, em condições bem controladas.



Bibliografia científica

Há ainda relativamente poucos estudos publicados de simulação numérica de chamas de hidrogénio.

Numerical simulation on hydrogen combustion and flow characteristics of a jet-stabilized combustor,
Sun et al., *Int J Hydrogen Energy*, 45, 12604-12615 (2020).

Comparison between numerical and experimental data of the radiative heat transfer in a natural gas/CO₂/H₂ turbulent flame,
Lemos et al., *Fuel*, 281, 118740 (2020).

Best practice guidelines in numerical simulations and CFD benchmarking for hydrogen safety applications,
Tolias et al., *Int J Hydrogen Energy*, 44, 9050-9062 (2019).

...

Interesse de investigação

Desenvolver mais conhecimento para suportar a adaptação dos atuais equipamentos industriais a gás natural para hidrogénio ou para misturas gasosas contendo hidrogénio.

Alcançar boa capacidade preditiva por simulação numérica.

Projeto CHyTec



É um projeto financiado internamente pelo UNIDEMI
(Unidade de Investigação e Desenvolvimento em Engenharia Mecânica e Industrial).

10 k€, 10 meses de duração, a concluir em setembro de 2021.

Equipa:

Daniel Vaz (UNIDEMI/NOVA SST)

Edgar Fernandes (IN+/IST/UL)

Aneesh Zutshi (UNIDEMI/NOVA SST)

Bolseiro (BI) (UNIDEMI/NOVA SST)



Projeto CHyTec: objetivos

- Desenvolver, nos centros de investigação, competência na área do hidrogénio, em particular na simulação numérica, para posicionamento favorável para a captação de financiamento na temática da transição para a economia do H2.
- Criar sinergia com o grupo de trabalho do IN+, IST/UL, em cujo laboratório de combustão (Prof. Edgar Fernandes) se fará o diagnóstico de chamas de misturas com H2, para providenciar dados para a validação dos modelos numéricos.
- Estudar uma situação bem controlada, portanto ainda sem as complexidades típicas de sistemas industriais.

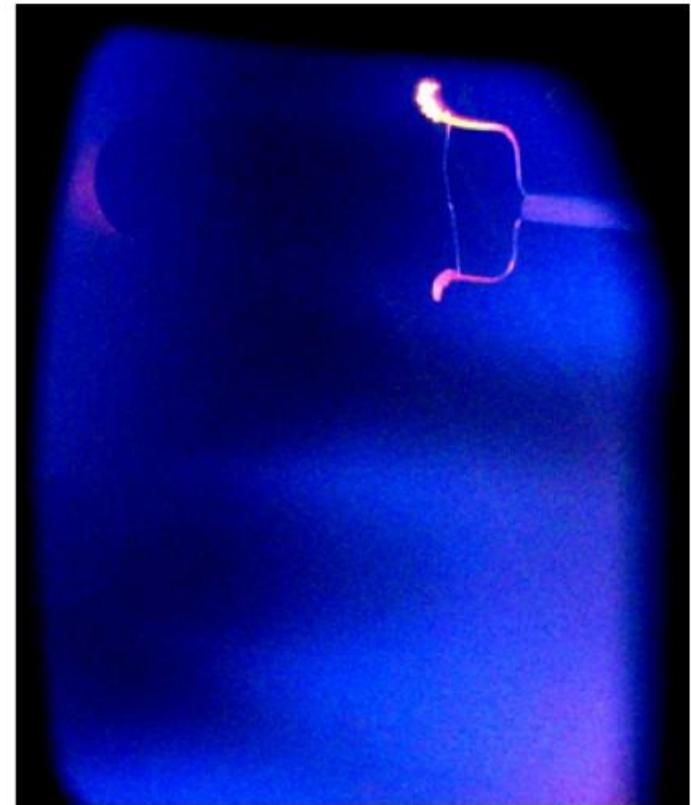
Chama laboratorial estabilizada por *bluff-body*



Estabilizada por bluff-body

De pré-mistura

Potência à escala laboratorial



Bluff-body stabilized flame. Sydney University
in: Barlow, R. (CRF/Sandia Nat'l Lab.),
Perspectives from the TNF Workshop.

Vaz, D.C., Tese Doutoramento, FCT/UNL, 2008.

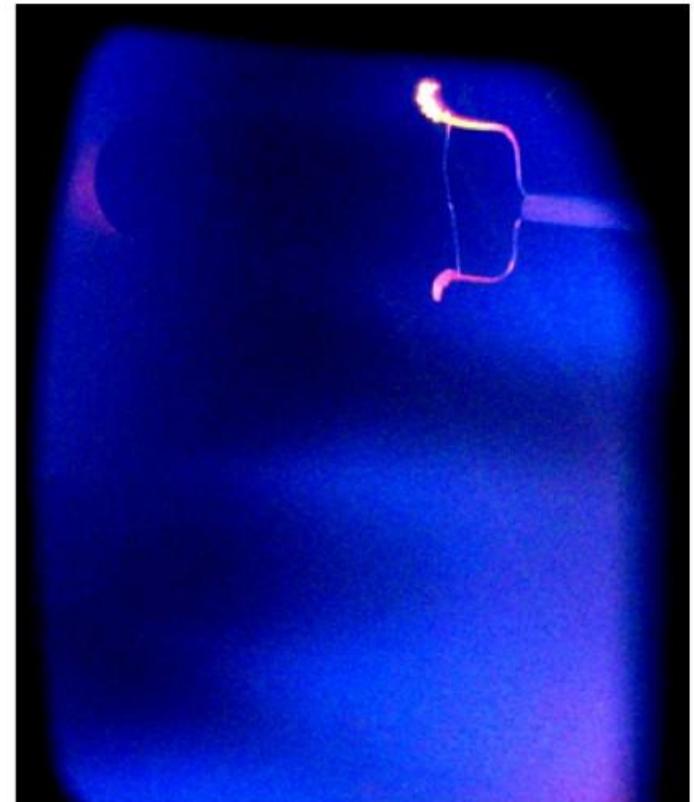
Técnicas de diagnóstico

Temperaturas na chama

Medição do fluxo radiativo



HFS01 High heat-flux sensor
Hukseflux Thermal Sensors B.V.



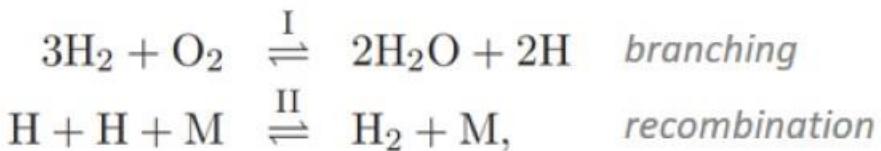
Vaz, D.C., Tese Doutoramento, FCT/UNL, 2008.

Simulação numérica: mecanismos de reação

Reacção global (1 passo)

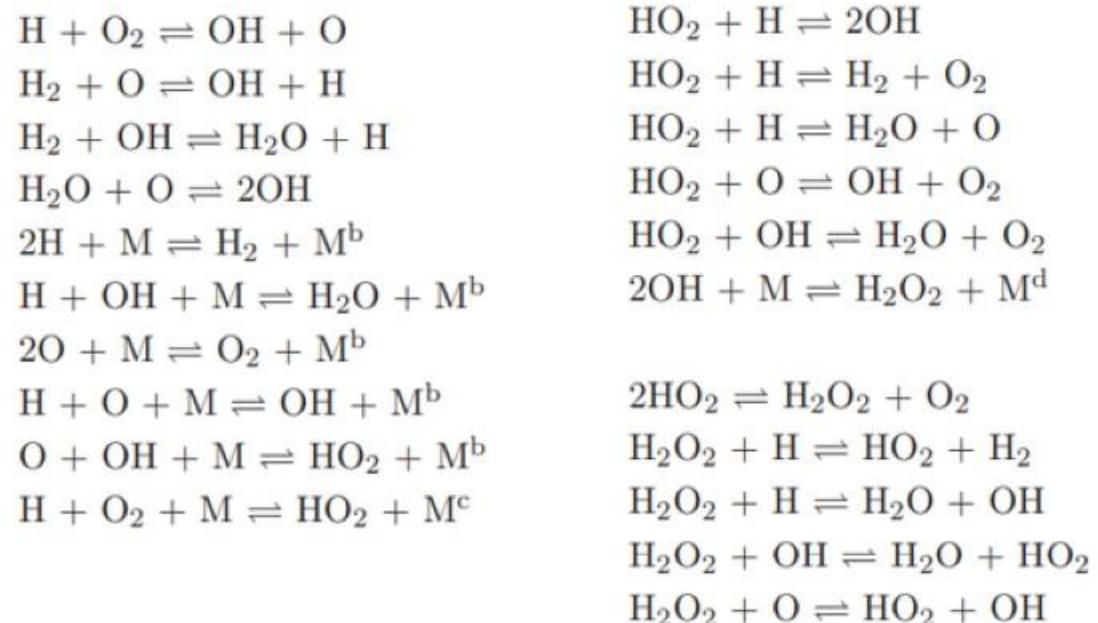


Mecanismo reduzido (2 passos)



(Boivin, P., Tese Doutoramento,
Universidade Carlos III de Madrid, 2011)

Mecanismo de reacção mais completo (San Diego, 21 reacções, 8 espécies)



Simulação numérica

Ferramenta comercial de CFD: ANSYS-Fluent

Modelos de combustão (chamas pré-mistura):



Premixed combustion model



Generalized finite-rate model (combines Eddy Dissipation Model and Eddy Dissipation Concept (EDC))

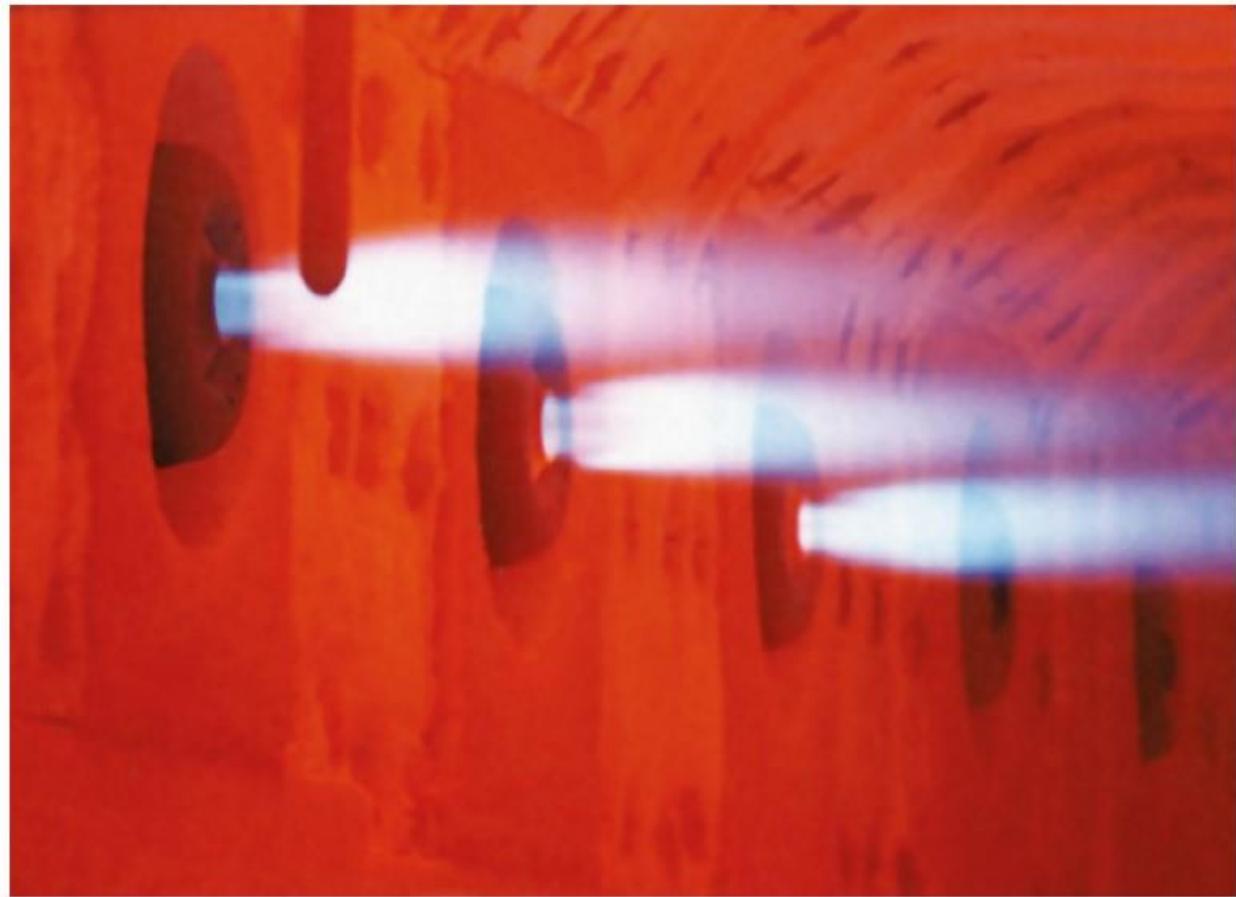


Composition PDF transport model

Desenvolvimentos futuros

Chamas de maior complexidade:

- com estabilização por rotação;
- sem pré-mistura;
- percentagens (ainda) mais elevadas de H₂



S. R. Mickey, Thermal Processing, January 20, 2017



Daniel C. Vaz

Professor auxiliar no
Departamento de Engenharia Mecânica e Industrial
Faculdade de Ciências e Tecnologia
dv@fct.unl.pt

Agradecimentos

Professora Júlia Seixas (DCEA, Cense) e equipa
Professor António Mourão (DEMI)
Mestre André Gameiro (MIEMc)
Marcelo Amaral (MEER)

Financiamento

UNIDEMI