



M 2026



DESCARBONIZAÇÃO PARCIAL DA ENERGIA DOS FORNOS DA INDÚSTRIA CERÂMICA EM PORTUGAL

AFONSO SILVA RIBEIRO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA

À FACULDADE DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE DO PORTO EM
ENGENHARIA QUÍMICA

Mestrado em Engenharia Química

***DESCARBONIZAÇÃO PARCIAL DA ENERGIA DOS
FORNOS DA INDÚSTRIA CERÂMICA EM PORTUGAL***

Dissertação de Mestrado

de

Afonso Silva Ribeiro

Desenvolvida no âmbito da unidade curricular de Dissertação

realizado em

Hylab



Orientador na FEUP: Doutora Paula Manuela Monteiro Pereira Costa Dias

Coordenador no HyLab: Doutor Guilherme Gaspar

U.PORTO
FEUP FACULDADE DE ENGENHARIA
UNIVERSIDADE DO PORTO

DEPARTAMENTO DE
ENGENHARIA QUÍMICA E BIOLÓGICA

agosto de 2026

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de expressar a minha gratidão ao meu orientador Dr. Guilherme Gaspar, por me ter acolhido na HyLab, pela ajuda e pelos conhecimentos dados.

À minha orientadora, Dra. Paula Dias, agradeço a orientação nesta minha dissertação.

Aos amigos que o ISEP me deu , o grupo “ é só aparecer 4.4”, Marta, T9, Catarina, Cerejas, Diana, Gabi, Ana, Flash, Jackson, Sara, Nádia, Patrick, Salvador, Sorridente, Xone, Tri Turbo, Trash, o meu mais profundo obrigado. Fomos e somos mais do que colegas de faculdade; somos companheiros de lutas, de partilhas e de tantas festas que curaram o cansaço dos dias longos. Esta tese também tem um pouco de todos vós.

Aos meus companheiros de jornada na FEUP, Dias, Luana, David, o meu sincero reconhecimento pela camaradagem e por todo o apoio nesta reta final.

Aos meus amigos de sempre, Neves, Manim e Gui, agradeço. Por todas as conversas sem sentido, mas sempre com uma finalidade que tanto me ajudaram.

À Bia, minha companheira, um agradecimento profundamente especial pelo carinho, pela paciência sem limites, por ser o meu porto de abrigo e por me incentivar a ser melhor em todos os momentos.

Em último lugar, ainda que sempre em primeiro plano, deixo uma nota especial aos meus pais, aos meus irmãos Tomás e Rodrigo ao qual agradeço toda a ajuda no desenvolvimento dos modelos CAD, à minha prima Ana Maria e à minha família que são a minha força motriz. O vosso sacrifício fez com que me dessem as melhores ferramentas para o sucesso e, por isso, sou eternamente grato. Vocês são base sólida sobre a qual construí a minha vida académica e pessoal. Serão sempre o que me faz querer voltar e os que fazem tudo isto valer a pena.

“ *Veni, vidi, vici* “- Júlio César

Agradecimentos institucionais

A Dra. Paula Dias, orientadora desta dissertação, são membros integrados do LEPABE - Laboratório de Engenharia de Processos, Ambiente, Biotecnologia e Energia e do ALICE - Laboratório Associado em Engenharia Química, com apoio financeiro nacional através da FCT/MECI: LEPABE, UID/00511/2025 (<https://doi.org/10.54499/UID/00511/2025>) e UID/PRR/00511/2025 (<https://doi.org/10.54499/UID/PRR/00511/2025>) e ALiCE, LA/P/0045/2020 (<https://doi.org/10.54499/LA/P/0045/2020>).

Resumo

A indústria cerâmica portuguesa depende fortemente de gás natural para alimentar fornos de alta temperatura, sendo responsável por emissões significativas de CO_2 que comprometem o cumprimento das metas europeias de descarbonização para 2030 e 2050. Neste contexto, o hidrogénio (H_2) é amplamente reconhecido como um dos principais vetores energéticos para a descarbonização de processos industriais intensivos em energia, permitindo reduzir as emissões associadas à combustão. No entanto, a sua implementação enfrenta desafios relevantes, alterações nas características da chama, potenciais aumentos das emissões de NO_x e da produção de vapor de água, com impacto na operação e na durabilidade dos fornos. Como solução de transição, a clivagem catalítica do metano permite obter uma mistura combustível rica em H_2 (ca. 82 %) sem emissão direta de CO_2 na geração do combustível.

Este trabalho de dissertação teve como objetivo a avaliação da viabilidade técnica da utilização de misturas H_2/CH_4 em fornos cerâmicos através de simulações de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), recorrendo ao ANSYS Fluent. Foram desenvolvidos modelos tridimensionais de um queimador e de um forno industrial, analisando onze misturas combustíveis, desde 100 % CH_4 até 100 % H_2 , em incrementos de 10 %. Os resultados do queimador foram usados como condições de fronteira para o modelo do forno, garantindo coerência física entre ambos. A independência das malhas foi validada através do método *Grid Convergence Index* (GCI), sendo utilizados os modelos físicos *GRI-Mech 3.0*, *Eddy Dissipation*, *Discrete Ordinates*, $k-\varepsilon$ e mecanismos térmico de *Zeldovich* e *prompt* para a previsão de formação de NO_x .

Os resultados indicam que o aumento da fração de H_2 eleva a temperatura média dos gases à saída do forno, de 1068,9 K para 100 % CH_4 para 1257,3 K para 100 % H_2 . Este aumento é, contudo, acompanhado por uma redução do ganho térmico interno (de 388,5 K para 137,9 K) devido à maior temperatura de entrada das misturas ricas em H_2 . A eficiência térmica manteve-se entre 50,9 % e 58,4 %, evidenciando robustez operacional. As emissões de CO_2 diminuíram com o aumento de H_2 , com reduções de 23,8 % para 30 % H_2 e 33,5 % para 80 % H_2 . Contudo, as emissões de NO_x tiveram um aumento significativo acima de 80 % H_2 , atingindo no caso de H_2 puro valores cerca de 294 vezes superiores aos obtidos com CH_4 . A configuração de quatro queimadores em estrela revelou uma distribuição térmica mais homogénea e temperaturas médias de saída 270-290 K superiores às obtidas com um queimador central, sem penalizações relevantes na perda de carga ou nas emissões. Com base num Índice de Desempenho Combinado, a mistura 30 % H_2 /70 % CH_4 foi identificada como a solução de compromisso mais adequada, conciliando redução de CO_2 , controlo das emissões de NO_x e elevado desempenho térmico. Deste modo, a tecnologia de clivagem catalítica, sem exigir modificações substanciais na infraestrutura de gás existente, revela-se bastante promissora para este setor industrial.

Palavras Chave:

Descarbonização industrial; Hidrogénio; Misturas H_2/CH_4 ; Fornos cerâmicos; CFD

Abstract

The Portuguese ceramic industry relies heavily on natural gas to fuel high-temperature kilns, being responsible for significant CO₂ emissions that compromise the achievement of the European decarbonisation targets for 2030 and 2050. In this context, hydrogen (H₂) is widely recognised as one of the main energy vectors for the decarbonisation of energy-intensive industrial processes, enabling a reduction in combustion-related emissions. However, its implementation faces relevant challenges, including changes in flame characteristics, potential increases in NO_x emissions and water vapour production, with impacts on kiln operation and durability. As a transition solution, catalytic methane cracking enables the production of an H₂-rich fuel mixture, approximately 82 %, without direct CO₂ emissions during fuel generation.

This dissertation aimed to assess the technical feasibility of using H₂/CH₄ blends in ceramic kilns through Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations using ANSYS Fluent. Three-dimensional models of a burner and an industrial kiln were developed, analysing eleven fuel blends, from 100 % CH₄ to 100 % H₂, in 10 % increments. The burner results were used as boundary conditions for the kiln model, ensuring physical consistency between both domains. Mesh independence was validated using the Grid Convergence Index (GCI) method, and the physical models adopted included GRI-Mech 3.0, Eddy Dissipation, Discrete Ordinates, k-ε, and the thermal Zeldovich and prompt mechanisms for NO_x formation prediction.

The results indicate that increasing the H₂ fraction raises the mean gas temperature at the kiln outlet, from 1068.9 K for 100 % CH₄ to 1257.3 K for 100 % H₂, although it reduces the internal thermal gain from 388.5 K to 137.9 K due to the higher inlet temperature of H₂-rich blends. Thermal efficiency remained between 50.9 % and 58.4 %, indicating operational robustness. CO₂ emissions decreased with increasing H₂ content, with reductions of 23.8 % for 30 % H₂ and 33.5 % for 80 % H₂. However, NO_x emissions increased significantly above 80 % H₂, with pure H₂ reaching values around 294 times higher than those obtained with CH₄. The four-burner star configuration showed a more homogeneous thermal distribution and outlet mean temperatures 270-290 K higher than those obtained with a central burner, without relevant penalties in pressure drop or emissions. Based on a Combined Performance Index, the 30 % H₂/70 % CH₄ blend was identified as the most suitable compromise solution, combining CO₂ reduction, NO_x emissions control and high thermal performance. Thus, catalytic methane cracking, without requiring substantial modifications to the existing gas infrastructure, appears to be highly promising for this industrial sector.

Keywords:

Industrial decarbonisation; Hydrogen; H₂/CH₄ blends; Ceramic kilns; CFD

Declaração

Declara, sob compromisso de honra, que este trabalho é original e que todas as contribuições não originais foram devidamente referenciadas com identificação da fonte.

Assinar e datar

AFONSO RIBEIRO

28 de julho de 2026

Índice

<i>1.Introdução</i>	1
1.1. Enquadramento e Apresentação do Projeto	1
1.2. Contributos do autor para o Trabalho	2
1.3. Organização da Dissertação	3
<i>2.Contexto e Estado da Arte</i>	4
2.1. Fornos Cerâmicos	4
2.2. Combustíveis usados na indústria cerâmica	5
2.3. Adaptação de queimadores e controlo da injeção de combustível	8
2.4. Modelos CFD	8
<i>3.Materiais e Métodos</i>	12
3.1. Geometrias.....	12
3.1.1. Geometria do queimador	12
3.1.2. Geometria do forno.....	14
3.2. Malhas.....	16
3.2.1. Malha do queimador	16
3.2.2. Malha do forno	19
3.3. Modelos físicos e configuração numérica	23
3.4. Condições fronteira.....	24
3.4.1. Condições fronteira do queimador	24
3.4.2. Condições fronteira do forno	24
<i>4.Resultados e Discussão</i>	25
4.1. Simulação do queimador.....	25
4.2. Simulação do forno	32
4.3. Tentativa de simulação com peça cerâmica no interior do forno	42
<i>5.Conclusões</i>	43
<i>6.Avaliação do trabalho realizado</i>	46
6.1. Objetivos Realizados	46
6.2. Contribuição para os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável	46
6.3. Apreciação Final	47
<i>7.Referências</i>	48
<i>Apêndice A-Conteúdo em Apêndice</i>	52

Lista de Figuras

Figura 1-Vista isométrica do queimador modelado em SolidWorks (perspetiva geral).....	12
Figura 2-Vista isométrica do queimador modelado em SolidWorks (vista lateral).....	12
Figura 3-Geometria simplificada do queimador desenvolvida em ANSYS (vista em perspetiva)	13
Figura 4-geometria do forno inspirada a partir de [29] (vista geral) e pormenor da face frontal com as duas entradas e saída.....	15
Figura 5-Geometria do forno adaptada: face frontal com a entrada única de 90 mm e a saída.....	15
Figura 6- Geometria do forno adaptada com 4 entradas	16
Figura 7-Malha computacional do queimador gerada em ANSYS Meshing (1,75 milhões de células)	17
Figura 8- a) Malha computacional do queimador gerada em ANSYS Meshing (688 mil células); b) Malha computacional do queimador gerada em ANSYS Meshing (7,13 milhões de células).....	17
Figura 9- a) Malha grosseira da geometria simplificada (11 920 células) e respetivo pormenor da zona de entrada; b) Malha intermédia (198 356 células) da geometria simplificada; c) Malha refinada (407 165 células) da geometria simplificada	18
Figura 10- a) -Malha grossa do forno: vistas gerais e pormenor da zona de entrada; b)-Malha média do forno: vistas gerais e pormenor da zona de entrada; c)-Malha refinada do forno: vistas gerais e pormenor da zona de entrada	21
Figura 11- a)- Malha média do forno com 4 entradas; b)- Malha grossa do forno com 4 entradas; c)- Malha refinada do forno com 4 entradas	22
Figura 12- a)-Resíduos escalados para a malha média da geometria original do queimador; b)-Resíduos escalados para a malha refinada da geometria original do queimador; c)-Resíduos escalados para a malha grossa da geometria original do queimador	25
Figura 13- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação do queimador 100 % H_2	26
Figura 14- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura: a) 100 % CH_4 analisada; b)- 50 % CH_4 /50 % H_2 analisada; c)- 100 % H_2 analisada	27
Figura 15- Variação da temperatura para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	28
Figura 16- Diferença entre T_{max} e $T_{média}$ à saída em função das proporções de H_2 na mistura com CH_4	29
Figura 17- Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura: a) 100 % CH_4 ; b) 50 % CH_4 /50 % H_2 analisada; c) - 100 % H_2 analisada	29
Figura 18- Comprimento e posição da chama para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	30
Figura 19- Velocidade máxima e média à saída para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	31
Figura 20- Frações mássicas principais à saída para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	31
Figura 21- a)- NO à saída para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4 ; b)- Dispersão: NO_x vs H_2O à saída	32
Figura 22-Temperatura média de saída do forno e do queimador para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	34
Figura 23- Variação da queda de Pressão Total do Sistema em função da proporção de H_2 no combustível	35

Figura 24-Fração mássica de CO_2 à Saída Queimador e à Saída Forno para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	36
Figura 25- Fração mássica de H_2O à Saída Queimador e à Saída Forno para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	37
Figura 26- Fração mássica (em escala logarítmica) de NO à Saída Queimador e à Saída Forno para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	37
Figura 27- Índice de Desempenho Combinado (IDC)	39
Figura 28 - $T_{\text{méd}}$ à saída (K) para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	40
Figura 29- Queda de pressão (Pa) para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	41
Figura 30- Emissões de NO à saída (ppm) para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4	41
Figura 31-Geometria de forno com peça cerâmica	42
Figura A 1- Resíduos escalados para a malha grossa da geometria do Queimador	52
Figura A 2- Resíduos escalados para a malha média da geometria do Queimador	52
Figura A 3- Resíduos escalados para a malha refinada da geometria do Queimador	52
Figura A 4- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 100% CH_4 analisada	54
Figura A 5-Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 90% CH_4 / 10% H_2 analisada.....	55
Figura A 6-Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 80% CH_4 / 20% H_2 analisada.....	55
Figura A 7- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 70% CH_4 / 30% H_2 analisada.....	55
Figura A 8- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 60% CH_4 / 40% H_2 analisada.....	56
Figura A 9- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 50% CH_4 / 50% H_2 analisada.....	56
Figura A 10- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 40% CH_4 / 60% H_2 analisada.....	56
Figura A 11- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 30% CH_4 / 70% H_2 analisada.....	57
Figura A 12-Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 20% CH_4 / 80% H_2 analisada.....	57
Figura A 13-Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 10% CH_4 / 90% H_2 analisada.....	57
Figura A 14- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 100% H_2 analisada	58
Figura A 15- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 100% CH_4	58
Figura A 16- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 90% CH_4 / 10% H_2	58

Figura A 17- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 80% CH_4 /20% H_2	59
Figura A 18-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 70% CH_4 /30% H_2	59
Figura A 19-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 60% CH_4 /40% H_2	59
Figura A 20-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 50% CH_4 /50% H_2	60
Figura A 21-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 40% CH_4 /60% H_2	60
Figura A 22-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 30% CH_4 /70% H_2	60
Figura A 23-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 20% CH_4 /80% H_2	61
Figura A 24-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 10% CH_4 /90% H_2	61
Figura A 25-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 100% H_2	61
Figura A 26-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 100% CH_4 analisada	62
Figura A 27-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 90% CH_4 / 10% H_2 analisada.....	62
Figura A 28-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 80% CH_4 / 20% H_2 analisada.....	62
Figura A 29-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 70% CH_4 / 30% H_2 analisada.....	63
Figura A 30-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 60% CH_4 / 40% H_2 analisada.....	63
Figura A 31-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 50% CH_4 / 50% H_2 analisada.....	63
Figura A 32-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 40% CH_4 / 60% H_2 analisada.....	64
Figura A 33-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 30% CH_4 / 70% H_2 analisada.....	64
Figura A 34-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 20% CH_4 / 80% H_2 analisada.....	64
Figura A 35-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 10% CH_4 / 90% H_2 analisada.....	65
Figura A 36-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 100% H_2 analisada	65

Figura A 37- Distribuição de temperatura estática no domínio do forno para a mistura 100% CH_4 analisada	67
Figura A 38- Distribuição de temperatura estática no domínio do forno para a mistura 50% CH_4 /50% H_2 analisada	67
Figura A 39- Distribuição de temperatura estática no domínio do forno para a mistura 100% H_2 analisada	67
Figura A 40- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do forno 100% CH_4	68
Figura A 41- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do forno 50% CH_4 /50% H_2	68
Figura A 42- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do forno 100% H_2	68
Figura A 43- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido com 3,65m 100% CH_4	70
Figura A 44- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido com 3,65m 50% CH_4 /50% H_2	70
Figura A 45- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido com 3,65m 100% H_2	71
Figura A 46- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido com 3,65m para a mistura 100% CH_4 analisada	71
Figura A 47- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido com 3,65m para a mistura 50% CH_4 /50% H_2 analisada	71
Figura A 48- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido com 3,65m para a mistura 100% H_2 analisada	72
Figura A 49- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 100% H_2	73
Figura A 50- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 10% CH_4 /90% H_2	74
Figura A 51- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 20% CH_4 /80% H_2	74
Figura A 52- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 30% CH_4 /70% H_2	74
Figura A 53- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 40% CH_4 /60% H_2	75
Figura A 54- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 50% CH_4 /50% H_2	75
Figura A 55- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 60% CH_4 /40% H_2	75
Figura A 56- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 70% CH_4 /30% H_2	76
Figura A 57- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 80% CH_4 /20% H_2	76

Figura A 58- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 90% CH_4 /10% H_2	76
Figura A 59- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 100% CH_4	77
Figura A 60- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 100% H_2 analisada	77
Figura A 61- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 10% CH_4 /90% H_2 analisada	77
Figura A 62- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 20% CH_4 /80% H_2 analisada	78
Figura A 63- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 30% CH_4 /70% H_2 analisada	78
Figura A 64- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 40% CH_4 /60% H_2 analisada	78
Figura A 65- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 50% CH_4 /50% H_2 analisada	79
Figura A 66- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 60% CH_4 /40% H_2 analisada	79
Figura A 67- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 70% CH_4 /30% H_2 analisada	79
Figura A 68- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 80% CH_4 /20% H_2 analisada	80
Figura A 69- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 90% CH_4 /10% H_2 analisada	80
Figura A 70- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 100% CH_4 analisada	80
Figura A 71- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 100% CH_4	86
Figura A 72- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 90% CH_4 /10% H_2	86
Figura A 73- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 80% CH_4 /20% H_2	87
Figura A 74- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 70% CH_4 /30% H_2	87
Figura A 75- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 60% CH_4 /40% H_2	87
Figura A 76- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 50% CH_4 /50% H_2	87
Figura A 77- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 40% CH_4 /60% H_2	88

Figura A 78- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 30% CH ₄ /70% H ₂	88
Figura A 79- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 20% CH ₄ /80% H ₂	88
Figura A 80- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 10% CH ₄ /90% H ₂	89
Figura A 81- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 100% H ₂	89
Figura A 82- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 100% CH ₄ analisada	89
Figura A 83- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 90% CH ₄ / 10% H ₂ analisada	90
Figura A 84- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 80% CH ₄ /20% H ₂ analisada	90
Figura A 85- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 70% CH ₄ /30% H ₂ analisada	90
Figura A 86- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 60% CH ₄ /40% H ₂ analisada	91
Figura A 87- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 50% CH ₄ /50% H ₂ analisada	91
Figura A 88- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 40% CH ₄ /60% H ₂ analisada	91
Figura A 89- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 30% CH ₄ /70% H ₂ analisada	92
Figura A 90- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 20% CH ₄ /80% H ₂ analisada	92
Figura A 91- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 10% CH ₄ /90% H ₂ analisada	92
Figura A 92- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 100% H ₂ analisada	93

Lista de Tabelas

<i>Tabela 3-1-Resultados da análise de sensibilidade á malha para a geometria simplificada.....</i>	<i>19</i>
<i>Tabela 3-2- Resultados do estudo de independencia de malha para o forno</i>	<i>20</i>
<i>Tabela 3-3- Resultados do estudo de independencia de malha para o forno com 4 queimadores</i>	<i>22</i>
<i>Tabela A-1-Resultados CFD das simulações do queimador para as diferentes misturas H_2/CH_4</i>	<i>53</i>
<i>Tabela A-2-Resultados das simulações do forno (sem peça cerâmica) para as diferentes misturas H_2/CH_4</i>	<i>65</i>
<i>Tabela A-3- Resultados das simulações do fluido com 3,65m de comprimento para as diferentes misturas H_2/CH_4</i>	<i>68</i>
<i>Tabela A-4- Resultados das simulações do fluido para as diferentes misturas H_2/CH_4</i>	<i>72</i>
<i>Tabela A-5-Propagação Térmica: Queimador → Forno</i>	<i>80</i>
<i>Tabela A-6- Emissões: CO_2 e NO e respetiva acumulação no Sistema (fração mássica)</i>	<i>82</i>
<i>Tabela A-7- Índice de Desempenho Combinado do Sistema (IDC)</i>	<i>83</i>
<i>Tabela A-8- Resultados das simulações do fluido, forno com 4 queimadores para as diferentes misturas H_2/CH_4</i>	<i>85</i>

Notação e Glossário

EF	Eficiência térmica do sistema	%
h	Tamanho representativo da célula de malha	m
k	Energia cinética turbulenta	m^2/s^2
N	Número total de células da malha	
p	Ordem aparente de precisão (método GCI)	
r	Fator de refinamento de malha	
T	Temperatura	K
T_{max}	Temperatura máxima no domínio	K
T_{med}	Temperatura média na secção de saída	K
V	Velocidade	m/s
Y_i	Fração mássica da espécie i	
ΔP	Queda de pressão	Pa
ΔT	Ganho térmico no forno	K
ΔV_i	Volume da célula i	m^3
K	Kelvin	

Letras gregas

$\mathcal{E}$	Taxa de dissipação	m^2/s^3
μ	Viscosidade dinâmica	Pa·s
ρ	Massa volúmica	kg/m^3
σ	Constante de Stefan-Boltzmann	$W/m^2 \cdot K^4$

Índices

$1,2,3$	Variável adimensional
ext	Valor extrapolado (método GCI)
F	Forno
Q	Queimador
i	Índice genérico de célula ou espécie

Lista de Siglas

BC	Boundary Conditions – Condições de Fronteira
CFD	Computational Fluid Dynamics – Dinâmica de Fluidos Computacional
DO	Discrete Ordinates – Modelo de Radiação por Ordenadas Discretas
ED	Eddy Dissipation – Modelo de Dissipação por Turbilhões
GCI	Grid Convergence Index – Índice de Convergência de Malha
IDC	Índice de Desempenho Combinado
PIB	Produto Interno Bruto
RE	Extrapolação de Richardson (Richardson Extrapolation)
UE	União Europeia

1. Introdução

1.1. Enquadramento e Apresentação do Projeto

A indústria cerâmica portuguesa enfrenta um desafio crítico na transição energética global, impulsionada pelas metas ambiciosas da União Europeia para reduzir as emissões de gases com efeito de estufa em 55 % até 2030 (pacote *Fit for 55*) e alcançar a neutralidade carbónica em 2050 (REPowerEU e European Green Deal [1]). Neste contexto, o hidrogénio (H_2) surge como fator energético estratégico, com destaque para o H_2 verde (produzido por eletrólise da água através fontes renováveis) e o H_2 turquesa (obtido por pirólise ou clivagem catalítica do metano sem emissões diretas de CO_2). Os setores industriais intensivos em energia e difíceis de eletrificar, conhecidos como *hard-to-abate*, entre os quais a cerâmica e o vidro, representam cerca de 20-25 % das emissões industriais europeias, exigem soluções de descarbonização parciais ou híbridas para manter a competitividade económica [1].

Em Portugal, a indústria cerâmica e do vidro contribui com ca. 1,4 % do PIB nacional e depende quase exclusivamente de gás natural como combustível principal para os fornos de alta temperatura (tipicamente $> 1473-1773$ K). A energia representa entre 15 % e 30 % dos custos de produção, pelo que a substituição direta por H_2 verde implicaria aumentos de custo de 2 a 3 vezes, colocando em risco a viabilidade do setor face à concorrência internacional. Além disso, a queima convencional de gás natural gera emissões significativas de CO_2 , incompatíveis com as exigências europeias [2].

Perante este cenário, surge a oportunidade de adotar uma solução de transição tecnológica: a clivagem catalítica do metano a temperatura intermédia (cerca de 1023 K - 1073 K), que converte o gás natural em uma mistura de hidrogénio (~82 %) e metano residual, sem produzir CO_2 na etapa de geração do combustível. Ao queimar esta mistura nos fornos, obtém-se uma descarbonização parcial superior a 55 %, cumprindo os requisitos europeus para 2030, sem alterar o caudal global de combustível nem exigir modificações profundas na infraestrutura industrial [3].

O presente trabalho avalia a viabilidade técnica desta abordagem através de simulações de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) no software ANSYS Fluent para modelização de um sistema integrado queimador-forno cerâmico para onze composições de combustível distintas, desde o metano puro (100 % CH_4) até ao hidrogénio puro (100 % H_2), em incrementos de 10 %. A análise abrange o comportamento térmico, fluidodinâmico e de emissões do sistema, com o objetivo de identificar a mistura de compromisso que maximiza a descarbonização mantendo a operacionalidade e a viabilidade técnica dos fornos cerâmicos portugueses.

Para atingir este objetivo, definem-se os seguintes objetivos específicos:

1. Modelar em CFD um queimador cerâmico de referência alimentado exclusivamente a gás natural (caso base);
2. Modelar o mesmo queimador alimentado com a mistura H_2-CH_4 em estudo, desde 10 % até 100 % H_2 ;
3. Modelar em CFD um forno cerâmico de referência alimentado exclusivamente a gás natural (caso base);
4. Modelar o mesmo forno alimentado com a mistura H_2-CH_4 , utilizando os resultados do queimador como condições de fronteira;
5. Comparar os cenários em termos de perfis de temperatura, uniformidade térmica, emissões de CO_2 e outras espécies, eficiência de transferência de calor e estabilidade da chama;
6. Avaliar, se houver disponibilidade, o comportamento numa peça cerâmica dentro do forno.

A originalidade deste projeto reside na integração direta da clivagem catalítica do metano em fornos cerâmicos reais, numa abordagem de sistema integrado queimador-forno que permite avaliar em simultâneo os impactos térmicos, fluidodinâmicos e ambientais da substituição progressiva do gás natural por hidrogénio, no contexto específico da indústria cerâmica portuguesa.

1.2. Contributos do autor para o Trabalho

Ao longo desta dissertação, o autor foi responsável pelo desenvolvimento integral do trabalho computacional e analítico realizado. Especificamente, o autor desenvolveu de forma autónoma as geometrias tridimensionais do queimador e do forno em SolidWorks e ANSYS, incluindo a adaptação da geometria original do queimador para uma versão simplificada numericamente estável, e a adaptação da geometria do forno a partir de referências para as condições específicas deste trabalho. A geração, avaliação e refinamento das malhas computacionais, bem como a realização e análise de independência de malha pelo método GCI, foram igualmente da responsabilidade do autor.

A configuração, execução e pós-processamento das 22 simulações CFD finais de produção, onze para o queimador e onze para o forno, correspondendo às onze composições de combustível estudadas foram realizadas integralmente no software ANSYS Fluent, incluindo a seleção e configuração dos modelos físicos (ED, GRI-mech 3.0, DO, $k-\epsilon$, NO_x), a definição das condições de fronteira e a análise dos resultados, com base na construção do Índice de Desempenho Combinado.

O trabalho foi desenvolvido no âmbito da parceria com o HyLab, tendo o coordenador na empresa, Doutor Guilherme Gaspar, contribuído com orientação estratégica sobre o contexto industrial. A orientação académica foi assegurada pela Doutora Paula Dias do LEPABE.

1.3. Organização da Dissertação

A presente dissertação encontra-se organizada em cinco capítulos principais, complementados por secções de avaliação, referências bibliográficas e anexos.

O Capítulo 1 — Introdução — contextualiza o problema em estudo no quadro da transição energética europeia e da especificidade da indústria cerâmica portuguesa.

O Capítulo 2 — Contexto e Estado da Arte — apresenta o enquadramento técnico e científico do trabalho, abordando a alimentação convencional e alternativa dos fornos cerâmicos, as propriedades e comportamento de combustão das misturas H_2/CH_4 , os fundamentos da modelação CFD aplicada a fornos industriais, a utilização de hidrogénio em contextos cerâmicos e as estratégias de adaptação de queimadores para combustíveis ricos em hidrogénio.

O Capítulo 3 — Materiais e Métodos — descreve as geometrias desenvolvidas para o queimador e para o forno, os procedimentos de geração e validação das malhas computacionais, incluindo o estudo de independência de malha baseado no método GCI, e os modelos físicos e condições de fronteira adotados nas simulações CFD realizadas no ANSYS Fluent.

O Capítulo 4 — Resultados e Discussão — apresenta e analisa os resultados obtidos nas simulações do queimador e do forno para as onze misturas H_2/CH_4 estudadas. A análise integra a propagação térmica e química entre os dois domínios, a evolução das emissões de CO_2 , NO_x e H_2O ao longo do sistema, e uma análise de desempenho combinado que suporta a identificação da mistura de compromisso para a aplicação industrial.

O Capítulo 5 — Conclusões — sintetiza os principais resultados obtidos, discute o cumprimento dos objetivos definidos e aponta direções para trabalho futuro.

O Capítulo 6 — Avaliação do Trabalho Realizado — avalia o grau de concretização dos objetivos específicos, analisa o alinhamento do trabalho com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável das Nações Unidas e apresenta uma apreciação crítica do trabalho desenvolvido.

2. Contexto e Estado da Arte

2.1. Fornos Cerâmicos

Na situação atual, a indústria cerâmica portuguesa depende quase exclusivamente de gás natural para a cozedura em fornos de túnel, de rolos e de câmara, com o metano (CH_4) como componente dominante. O documento BREF [4] da indústria cerâmica europeia confirma esta tendência, destacando que o gás natural substituiu progressivamente fuel-óleo e carvão nas últimas décadas devido a vantagens ambientais, facilidade de controlo do processo e menor emissão de partículas e enxofre. Esta predominância resulta de elevado poder calorífico, disponibilidade via rede de distribuição, combustão limpa e elevada flexibilidade na modulação de caudal permitindo acompanhar ciclos térmicos complexos. Contudo, esta dependência expõe fortemente o setor a choques de preço do gás e a políticas de precificação do carbono, uma vez que a combustão de metano nos fornos constitui a principal fonte de emissões diretas de CO_2 [5].

Trabalhos sobre combustão em fornos cerâmicos de pavimento e revestimento [6] descrevem em detalhe como a razão ar/combustível é ajustada para controlar a atmosfera ao longo do forno, alternando zonas com ligeiro excesso de ar (atmosfera oxidante) e zonas mais ricas em combustível (atmosfera neutra ou ligeiramente redutora). Estes ajustes influenciam diretamente a eficiência térmica (excesso de ar reduz a temperatura de chama e aumenta perdas pela chaminé), a formação de fases cristalinas e a cor final dos vidrados. Do ponto de vista de emissões, atmosferas levemente redutoras podem aumentar CO e hidrocarbonetos não queimados, enquanto atmosferas com muito excesso de ar tendem a baixar a eficiência e, para a mesma carga térmica, favorece a formação de NO_x devido a maiores volumes de gás quente e a zonas localizadas de alta temperatura, sendo esta entre os 1473-1773 K [6].

O estudo sobre *Resource and Energy Efficiency* na cerâmica portuguesa quantifica consumos específicos de energia da ordem de algumas centenas de kWh por tonelada de produto, com a fração maioritária dessa energia proveniente de gás natural. A partir do poder calorífico do metano, isso traduz-se em emissões específicas de CO_2 que podem ultrapassar 200 kg_{CO_2} por MWh térmico, tornando os fornos o principal contributo para a pegada de carbono do setor. O BREF cerâmico e relatórios técnicos sobre queimadores industriais destacam que, em combustíveis gasosos sem azoto ligado ao combustível, a contribuição do mecanismo fuel- NO_x para a formação total de NO_x é bastante inferior à do mecanismo térmico [4].

Estudos no âmbito da descarbonização da indústria cerâmica identificam o uso intensivo de gás natural como o principal obstáculo ao alinhamento do setor com as metas europeias. Os cenários de transição analisados apontam que a mera melhoria de eficiência energética (melhor isolamento, otimização de ciclos, recuperação de calor) não é suficiente para atingir reduções de emissões superiores a 50 %, tornando necessária a substituição parcial ou total do

combustível fóssil por alternativas de baixo carbono [5]. Entre as opções consideradas estão a introdução de hidrogénio (H_2) como combustível ou a oxidação.

Uma via de descarbonização incremental consiste em enriquecer o gás natural com hidrogénio, reduzindo a fração de energia proveniente do carbono fóssil sem alterar radicalmente a infraestrutura de fornos e redes de gás. Como o H_2 não contém carbono, a substituição parcial do CH_4 permite reduzir proporcionalmente as emissões diretas de CO_2 , desde que o hidrogénio seja produzido por rotas de baixa emissão.

Num passo mais estruturante, a oxidação substitui o ar por oxigénio quase puro. Ao eliminar o azoto do comburente, reduz-se o volume de gases de exaustão e aumenta-se a fração de CO_2 e H_2O na corrente, o que melhora a transferência radiativa de calor e facilita estratégias de captura ou concentração de CO_2 . Estudos em fornos de alta temperatura reportam ganhos de eficiência térmica e, em muitos casos, reduções do consumo de combustível e das emissões de NO_x quando a oxidação é adequadamente implementada [7].

2.2. Combustíveis usados na indústria cerâmica

A utilização de hidrogénio em fornos cerâmicos tem sido apontada como uma das alternativas mais relevantes para a descarbonização de processos térmicos de alta temperatura, especialmente em setores industriais onde a eletrificação direta apresenta limitações técnicas, económicas ou operacionais [8]. Em fornos cerâmicos, a substituição total ou parcial do gás natural por hidrogénio permite reduzir as emissões diretas de CO_2 associadas à combustão. No entanto, esta substituição não pode ser analisada apenas do ponto de vista da ausência de carbono no combustível, uma vez que o hidrogénio altera significativamente a cinética de combustão, a estrutura da chama, a distribuição de temperatura e a formação de NO_x [9].

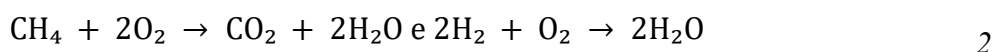
A tecnologia disruptiva de clivagem catalítica do metano a temperatura intermédia, 1023 K a 1073 K, ($\Delta H_0 = 75.3 \text{ kJ/mol}$):



produz hidrogénio descarbonizado e carbono grafítico, cerca de 3 kg de carbono por quilograma de hidrogénio. De referir que permite a produção de uma mistura de hidrogénio e metano (>55 % descarbonizado) a um custo muito baixo, pelo que é bastante interessante para utilização nos fornos cerâmicos. Além disso, o carbono grafítico tem um valor de mercado superior a 3 €/kg, se de origem no gás natural, e ainda superior se de origem no biometano. Dada a reação ser endotérmica, 15 % da energia contida no hidrogénio produzido deverá ter origem em energia elétrica verde. Estima-se que a reação tenha uma eficiência energética de 85 %; o hidrogénio produzido incorpora 70 % de energia do metano clivado e 30 % de energia elétrica. Se a alimentação do reator de clivagem catalítica for alimentado com biometano, o carbono produzido é “verde”; a biomassa usada para produzir o biogás, e depois o biometano, cresceu capturando CO_2 atmosférico, incorporado no biometano. Após a clivagem deste

biometano, o CO₂ inicialmente presente na atmosfera, transforma-se em carbono grafítico; este processo remove ativamente CO₂ da atmosfera. Deste modo, prevê-se uma descarbonização parcial superior a 55 %, alinhada aos objetivos da União Europeia para 2030, ao substituir gradualmente o gás natural puro nos fornos cerâmicos sem exigir alterações radicais na infraestrutura de queimadores ou no caudal global de combustível.

As propriedades físicas e químicas da mistura CH₄-H₂ influenciam diretamente o seu comportamento em fornos de alta temperatura. O metano apresenta densidade de cerca de 0,717 kg/m³ e poder calorífico de aproximadamente 50 MJ/kg, enquanto o hidrogénio tem densidade muito baixa (~0,089 kg/m³) e poder calorífico elevado (~120 MJ/kg). Na mistura, o poder calorífico aumenta com a fração de H₂, mas a densidade global diminui, exigindo ajustes no caudal volumétrico para manter a potência térmica equivalente. A temperatura de ignição do H₂ (~858 K) é ligeiramente superior à do CH₄ (~540 °C), mas a sua difusividade é cerca de 8 vezes maior, promovendo mistura mais rápida. A velocidade de chama laminar sobe substancialmente com o enriquecimento em H₂ (de 0,37 m/s para metano puro para valores superiores a 1 m/s em misturas de 20 %), melhorando a estabilidade da chama em condições industriais. Estas propriedades facilitam a integração da mistura de gás combustível produzida pela clivagem catalítica do metano, mantendo transferência de calor radiativa dominante acima de 773 K e compensando a baixa irradiância do H₂ puro com o CO₂ residual do CH₄ [10]. As características de combustão da mistura destacam-se pela aceleração cinética e dinâmica da chama. As reações principais são



com o H₂ favorecendo radicais OH e acelerando a oxidação. A velocidade de chama laminar aumenta significativamente com a fração de H₂, reduzindo extinções locais e melhorando a estabilidade em fornos turbulentos. Em *blends* de 10-20 %, a temperatura de pico da chama eleva-se (~5,2 % maior que metano puro). No entanto, o aumento da temperatura intensifica vias térmicas de formação de NO_x (Zeldovich). Em fornos cerâmicos, blends moderados (10 % - 15 % de H₂) otimizam a uniformidade térmica (~0,6 % melhor) e a transferência de calor, mantendo estabilidade da chama sem hotspots excessivos [11].

Do ponto de vista químico, a principal vantagem da introdução de H₂ resulta do facto de a sua combustão produzir apenas vapor de água. Assim, o aumento da fração de hidrogénio numa mistura H₂-CH₄ conduz, em princípio, a uma redução progressiva das emissões de CO₂, proporcional à diminuição da fração de carbono no combustível. Contudo, esta relação não é necessariamente linear quando analisada num forno real, uma vez que a conversão do combustível, o excesso de ar, o tempo de residência e a transferência de calor influenciam a composição final dos gases de exaustão. Estudos numéricos recentes em queimadores e fornos industriais mostram que a substituição parcial de metano por hidrogénio pode reduzir as emissões de CO₂ sem comprometer de forma significativa o desempenho térmico, mas apenas

até determinados níveis de enriquecimento [11] [12]. Em particular, foi estudado um queimador industrial de 150 kW alimentado com misturas de gás natural e hidrogénio entre 0 % e 20 % de H_2 , considerando coeficientes de excesso de ar entre 1,2 e 1,4. [11] Para uma mistura com 20 % de H_2 , os autores reportaram uma redução de CO_2 de aproximadamente 5,8 %, acompanhada por aumento da temperatura dos gases de exaustão e das emissões de NO . Este resultado mostra que a redução de CO_2 obtida por enriquecimento com H_2 pode ser tecnicamente relevante, mas tende a ser acompanhada por penalizações em NO_x , exigindo ajuste das condições de operação.

O trabalho do autor Kubilay Bayramoğlu [13] é particularmente relevante para este enquadramento, uma vez que avaliou, por CFD, o impacto de misturas H_2 - CH_4 na uniformidade térmica e nas emissões em fornos cerâmicos industriais. Foi reportado que o enriquecimento com hidrogénio permite reduzir as emissões de CO_2 e melhorar a uniformidade térmica no interior do forno, mas também se observou um aumento da temperatura de chama, associado a maior tendência para formação de NO_x . Para uma mistura com 20 % de H_2 , foi reportada uma redução de CO_2 até cerca de 26,4 % relativamente à combustão com metano puro, acompanhada por um aumento da temperatura máxima da chama de aproximadamente 5,2 %. No entanto, os autores identificaram frações de H_2 mais moderadas, na gama de 10-15 %, como o intervalo de operação mais equilibrado, por permitirem ganhos ambientais e térmicos sem agravamento excessivo das emissões de NO_x [13].

Esta conclusão é consistente com outros estudos sobre combustão de misturas metano-hidrogénio, nos quais se verifica que pequenas adições de H_2 podem melhorar a estabilidade da chama e a eficiência de combustão, devido à maior difusividade, maior velocidade de chama e maior reatividade do hidrogénio [10]. Em frações moderadas, normalmente entre 10 % e 30 % de H_2 , observa-se frequentemente um compromisso favorável entre redução de CO_2 , manutenção da estabilidade da chama e controlo das emissões de NO_x [13] [12]. Contudo, quando a fração de H_2 aumenta para valores superiores a 50 %, a chama tende a tornar-se mais curta, intensa e próxima da zona de injeção, aumentando o risco de gradientes térmicos acentuados, hotspots e instabilidades operacionais [12], num estudo CFD de um forno quasi-industrial de 20 kW em regime flameless, mostraram que, para uma configuração coaxial típica de injeção, uma mistura equimolar H_2 - CH_4 representa o limite prático de enriquecimento antes de serem necessárias alterações adicionais na geometria de injeção ou estratégias de diluição com CO_2 - H_2O para manter condições flameless. Este resultado é importante porque demonstra que a introdução de hidrogénio não depende apenas da composição do combustível, mas também da configuração do queimador, do regime de mistura e das condições aerodinâmicas do forno. Em condições de temperatura elevada, este comportamento favorece o mecanismo térmico de Zeldovich, justificando o aumento de NO_x reportado na literatura para misturas ricas em hidrogénio [12] [14].

No contexto da indústria cerâmica, esta análise é particularmente importante porque a qualidade do produto depende não apenas da temperatura máxima atingida, mas também da uniformidade térmica, da atmosfera no interior do forno e da estabilidade do ciclo de cozedura [6]. Um aumento excessivo da temperatura local pode originar defeitos no produto, enquanto alterações na composição dos gases, nomeadamente o aumento de H_2O e a redução de CO_2 , podem modificar as trocas radiativas e a atmosfera de cozedura [13] [15]. Assim, a utilização de hidrogénio em fornos cerâmicos deve ser encarada como uma solução de transição que exige otimização da fração de H_2 , e não como uma substituição direta e simples do metano por hidrogénio puro.

2.3. Adaptação de queimadores e controlo da injeção de combustível

Do ponto de vista do controlo, a operação com hidrogénio exige uma regulação mais rigorosa da razão ar/combustível, uma vez que pequenas variações podem provocar alterações significativas na temperatura e nas emissões. O aumento da temperatura de chama intensifica a formação de NO_x via mecanismo térmico, sendo frequentemente necessário recorrer a estratégias de operação em regime pobre (razão de ar/combustível é entre 1,1 - 1,3) [14].

Em síntese, a literatura demonstra que a adaptação de queimadores para misturas H_2/CH_4 exige uma análise conjunta da geometria, da razão ar/combustível, da estabilidade da chama e da formação de NO_x . No entanto, muitos estudos abordam estes fatores de forma isolada, avaliando apenas o queimador, apenas o forno ou apenas uma gama limitada de misturas combustível-comburente. Permanecem, assim, lacunas na avaliação integrada do sistema queimador-forno, sobretudo em condições representativas da indústria cerâmica e considerando simultaneamente desempenho térmico, composição dos gases de combustão, emissões de CO_2 e NO_x , formação de H_2O , perda de carga e estabilidade operacional. Esta limitação é particularmente relevante para misturas H_2-CH_4 provenientes da clivagem catalítica do metano, uma vez que a sua aplicação industrial não depende apenas da redução potencial de CO_2 , mas também da capacidade de manter condições térmicas compatíveis com o processo cerâmico.

2.4. Modelos CFD

O Computational Fluid Dynamics (CFD) surge como uma ferramenta fundamental para modelar processos complexos, como por exemplo, fornos industriais particularmente em contextos onde experimentos físicos são dispendiosos e demorados, permitindo a simulação detalhada da transição de combustíveis fósseis para misturas de hidrogénio e metano em fornos cerâmicos [13].

A investigação CFD sobre queimadores industriais para fornos de rolos cerâmicos demonstra que pequenas alterações geométricas, como a modificação dos orifícios de entrada, da câmara de

mistura ou do diâmetro do bocal de saída, exercem uma influência determinante na qualidade da mistura combustível-comburente e na distribuição da chama. Estudos numéricos mostram que a otimização do design do queimador pode reduzir significativamente a emissão de CO e melhorar a uniformidade térmica no interior do forno. Esta sensibilidade geométrica torna-se ainda mais crítica na combustão de misturas ricas em hidrogénio, devido à elevada difusividade e velocidade de chama do H₂. Trabalhos experimentais demonstram que a presença de hidrogénio aumenta significativamente a taxa de reação, conduzindo a chamas mais curtas e intensas, com maior concentração de calor próximo do queimador [16].

Estas características aumentam o risco de fenómenos como o fenómeno de flashback que está associado à situação em que a velocidade de chama excede a velocidade local do escoamento, sendo mais provável em misturas com elevada fração de hidrogénio, mas também importante a instabilidade da chama assim como hotspots locais. Para mitigar este efeito, a literatura propõe o aumento da velocidade do escoamento, injeção coaxial e otimização da turbulência local [17]. Os fundamentos teóricos do CFD baseiam-se nas equações de Navier-Stokes para o fluxo, conservação de massa e energia, complementadas por modelos de turbulência como o k- ϵ realizável, e adaptações específicas para altas temperaturas (~1773 K), incluindo modelagem de combustão via *Eddy Dissipation* (ED) para interações turbulência-química [18], radiação através do modelo *Discrete Ordinates* (DO) [19] dominante acima de 773 K conforme a lei de Stefan-Boltzmann, transporte de espécies e *gri-mech* 3.0 (mecanismo cinético) para H₂, CH₄, CO₂ entre muitas outras espécies.

Lei de Stefan-Boltzmann (Radiação Térmica) - [15]

$$q = \varepsilon * \sigma * (T^4 - T_{\text{sur}}^4) \quad 3$$

Onde:

- q = fluxo de calor radiativo (W/m²)
- ε = emissividade da superfície (adimensional, $0 \leq \varepsilon \leq 1$)
- σ = constante de Stefan-Boltzmann = $5,67 \times 10^{-8}$ W/(m²·K⁴)
- T = temperatura absoluta da superfície (K)
- T_{sur} = temperatura absoluta das vizinhanças (K)

Equação de Conservação de Massa (Continuidade) - [20]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad 4$$

Onde:

- ρ = densidade do fluido (kg/m³)
- t = tempo (s)
- $\mathbf{v}$ = vetor velocidade (m/s)
- ∇ = operador divergência

Equações de Navier-Stokes (Conservação de Momento) - [21]

$$\partial(\rho v) + \nabla \cdot (\rho v v) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g + F \quad 5$$

Onde:

- ρ = massa volúmica do fluido;
- v = vetor velocidade;
- t = tempo;
- p = pressão estática;
- τ = tensor das tensões viscosas;
- g = aceleração gravítica;
- F = forças externas por unidade de volume.

Equação de Conservação de Energia - [22]

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + S_{\text{rad}} + S_{\text{chem}} \quad 6$$

Onde:

- c_p = calor específico a pressão constante (J/(kg·K))
- k = condutividade térmica (W/(m·K))
- Φ = dissipação viscosa (W/m³)
- S_{rad} = termo fonte de radiação (W/m³)
- S_{chem} = termo fonte de reações químicas (W/m³)

Modelo k - ε (Energia Cinética Turbulenta e Dissipação) - [23]

Equação k :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k v) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad 7$$

Equação ε :

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega U) = \alpha \left(\frac{P_k}{v_t} \right) - \beta \rho \omega^2 + \nabla \cdot [(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \nabla \omega] + 2(1 - F^1) \rho \frac{\sigma_\omega^2}{\omega (\nabla k \cdot \nabla \omega)} \quad 8$$

Onde:

- $\mu_t = \rho k / \omega$ (viscosidade turbulenta)
- F_1 = função de blending entre k - ω e k - ε
- P_k = produção de energia cinética turbulenta (kg/(m·s³))
- Constantes: $\beta^* = 0.09$, $a \approx 0.55$, $\beta \approx 0.075$, $\sigma_k \approx 0.85$, $\sigma_\omega \approx 0.5$

Transporte de Espécies Químicas [24]

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v Y_i) = -\nabla \cdot J_i + R_i + S_i \quad 9$$

Onde:

- Y_i = fração mássica da espécie i (adimensional)
- J_i = fluxo difusivo da espécie i (kg/(m²·s))

- R_i = taxa de produção/consumo por reação química ($\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$)
- S_i = termo fonte adicional ($\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$)

Gri - mech 3.0 [25]

$$k_r = A_r * T_r^\beta * \exp\left(\frac{-E_a}{(R * T)}\right) \quad 10$$

Onde:

- k_r = constante de velocidade da reação
- A_r = fator pré-exponencial
- β_r = expoente de temperatura
- E_a = energia de ativação
- R = constante dos gases
- T = temperatura absoluta

Eddy Dissipation - [26]

$$R_F = -A \cdot \bar{\rho} \cdot \left(\frac{\varepsilon}{k}\right) \cdot \min\left(Y_F, \frac{Y_{Ox}}{\nu}\right) \quad 11$$

Onde:

- R_F = taxa de consumo do combustível ($\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$) – valor negativo
- A = constante empírica do modelo (tipicamente $A = 4$)
- $\bar{\rho}$ = densidade média do gás (kg/m^3)
- ε = taxa de dissipação turbulenta (m^2/s^3) – do modelo $k-\varepsilon$
- k = energia cinética turbulenta (m^2/s^2) – do modelo $k-\varepsilon$
- Y_F = fração mássica do combustível (mistura CH_4/H_2)
- Y_{Ox} = fração mássica do oxidante (O_2)
- ν = razão estequiométrica mássica oxidante/combustível

Em simulações de fornos industriais, o modelo DO captura adequadamente a transferência radiativa predominante (~96 % do calor entregue às cargas), enquanto modelos de turbulência como o $k-\varepsilon$ realizável rastreiam interações em zonas de chama.

No projeto, a metodologia de implementação no Ansys Fluent envolve a definição da geometria do forno com queimador operando a cerca de 1773 K, malha estruturada refinada nas zonas de chama para capturar gradientes, e condições de contorno como inlet da mistura $\text{H}_2\text{-CH}_4$.

3. Materiais e Métodos

3.1. Geometrias

3.1.1. Geometria do queimador

A geometria do queimador (Figura 1 e 2) utilizada neste trabalho foi baseada e adaptada a partir do modelo apresentado em [16]. Este modelo foi selecionado devido à sua relevância industrial e à sua adequação à simulação de processos de combustão em fornos de rolos, permitindo uma análise detalhada dos fenómenos de mistura, reação e transferência de calor.

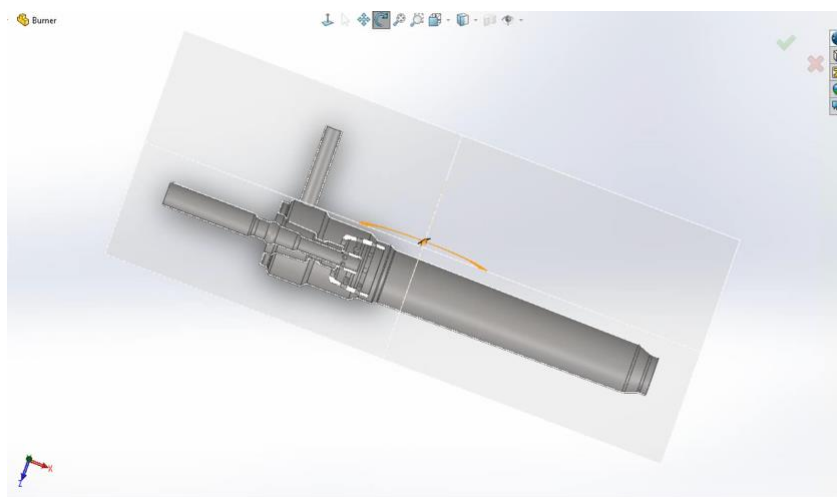


Figura 1-Vista isométrica do queimador modelado em SolidWorks (perspetiva geral)

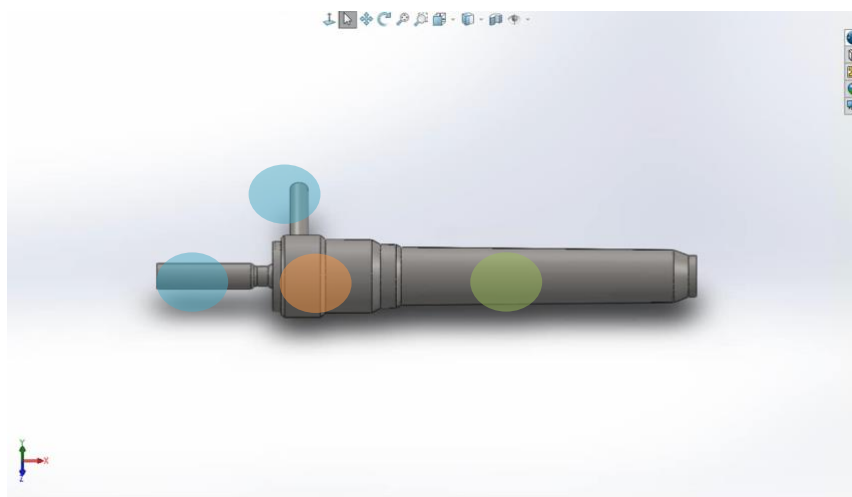


Figura 2-Vista isométrica do queimador modelado em SolidWorks (vista lateral)

Na Figura 2 o queimador modelado apresenta uma configuração composta por três zonas principais: uma região de alimentação de combustível (zona azul), uma câmara de mistura (zona laranja) e um tubo de combustão (zona verde), onde ocorre a reação e o desenvolvimento da chama. A alimentação de combustível é realizada através de um tubo central, enquanto o comburente (ar) é introduzido lateralmente, escoando no espaço anular entre o tubo interno e

o corpo do queimador. A mistura entre combustível e oxidante ocorre numa zona intermédia do tipo *mixing cup*, caracterizada pela presença de múltiplos orifícios, de 2 mm de diâmetro, que promovem a turbulência e intensificam o contacto entre as correntes fluídas.

A geometria total do queimador apresenta um comprimento de aproximadamente 568 mm, valor retirado diretamente do modelo original descrito na literatura [16]. No presente trabalho, a geometria foi recriada em ambiente CAD (SolidWorks), mantendo as principais características estruturais do modelo de referência, mas com algumas dimensões adaptadas de forma a garantir compatibilidade com as condições de simulação definidas.

Em particular, o diâmetro da saída do queimador foi definido como 40 mm, em concordância com uma das configurações analisadas no estudo original, onde se verificou uma influência significativa do diâmetro do bocal na velocidade dos gases e na estabilidade da chama. As entradas de combustível e comburente foram modeladas com um diâmetro de 10 mm, permitindo um controlo adequado da razão ar/combustível.

A escolha destas dimensões está diretamente relacionada com o comportamento fluidodinâmico e reacional do sistema. Estudos numéricos demonstram que o diâmetro do bocal influencia fortemente o campo de velocidades e a extensão da chama, ao passo que a geometria da zona de mistura condiciona a eficiência de mistura e, consequentemente, o grau de conversão do combustível [16].

Numa segunda fase do trabalho, foi desenvolvida uma nova geometria do queimador com base na configuração apresentada na referência [27] - Figura 3. Esta alteração teve como objetivo obter uma geometria mais simples e adequada à implementação em CFD, permitindo controlar a geração da malha e a definição das condições de fronteira associadas à combustão de misturas metano-hidrogénio. A justificação detalhada para esta decisão, bem como a comparação entre as duas abordagens, é apresentada no Capítulo 4.

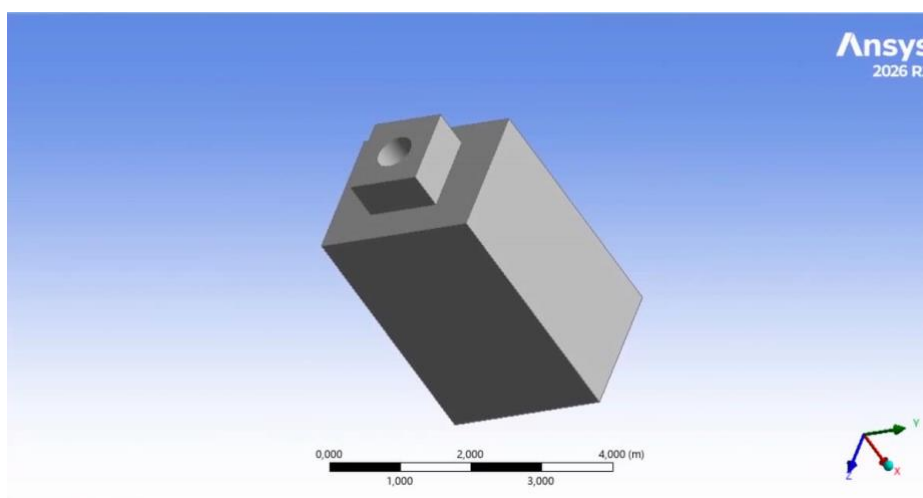


Figura 3-Geometria simplificada do queimador desenvolvida em ANSYS (vista em perspetiva)

A geometria desenvolvida nesta segunda fase é constituída por uma região principal correspondente à zona de mistura, com comprimento de 2,2 m, e por duas entradas

independentes para a alimentação do ar e de combustível. A entrada de ar apresenta um comprimento de 0,2 m enquanto a entrada de gás apresenta cerca de 0,6 m no sentido contrário, permitindo separar fisicamente a admissão do oxidante e do combustível antes da sua interação na região principal do domínio. Esta configuração representa um sistema de combustão não pré-misturada, no qual a mistura dos reagentes ocorre no interior do domínio computacional, sendo controlada pelo escoamento e pela difusão turbulenta.

A região de mistura com 2,0 m foi dimensionada de forma a permitir o desenvolvimento do escoamento, a interação entre as correntes de ar e combustível e a evolução da zona reativa ao longo do domínio. Esta extensão é importante para mapear a formação da chama, os gradientes de temperatura e a distribuição das espécies químicas resultantes da combustão. Do ponto de vista numérico, a geometria simplificada favorece a obtenção de uma malha mais controlada, minimizando elementos de baixa qualidade. Adicionalmente, esta abordagem facilita o refinamento localizado nas zonas de admissão, onde se preveem elevados gradientes de velocidade, temperatura e concentração de espécies [28].

A geometria final implementada nesta fase do trabalho mantém, assim, os princípios fundamentais do queimador estudado na literatura, permitindo uma análise representativa do comportamento de sistemas reais de combustão em fornos cerâmicos. Simultaneamente, garante flexibilidade para a avaliação de diferentes misturas combustível-comburente, em particular misturas ricas em hidrogénio, cujos resultados das simulações servirão como condições de fronteira para o forno.

3.1.2. Geometria do forno

Para o desenvolvimento das simulações do forno de rolos, foram consideradas duas geometrias distintas. A primeira baseia-se na geometria reportada na literatura [29], sendo utilizada para a validação do modelo numérico. A segunda consiste numa adaptação dessa configuração preliminar, modificada para garantir a compatibilidade com as condições fronteira extraídas das simulações do queimador, detalhada no subcapítulo anterior.

A geometria de referência, baseada no artigo [29], consiste numa cavidade de forma aproximadamente retangular com as dimensões principais de 1,8 m de largura, 1,05 m de altura e 3,65 m de comprimento. As paredes do forno foram consideradas superfícies participantes. A entrada de combustível e comburente é representada por duas aberturas circulares posicionadas na face frontal da cavidade, ao longo da sua linha central. A abertura superior, com 30 mm de diâmetro, serve de entrada para o combustível e para uma fração do oxigénio, enquanto a abertura inferior, com 60 mm de diâmetro, admite o restante caudal de oxigénio. Os centros das duas aberturas encontram-se a 755 mm e 610 mm do plano inferior, respetivamente, e separados entre si por 145 mm na direção vertical. A saída dos gases de combustão é efetuada através de uma abertura retangular de 100 × 150 mm, localizada na face lateral esquerda da cavidade. Esta geometria foi realizada em ambiente CAD e implementada no ANSYS, mantendo fielmente a base da literatura com algumas alterações, Figura 4.

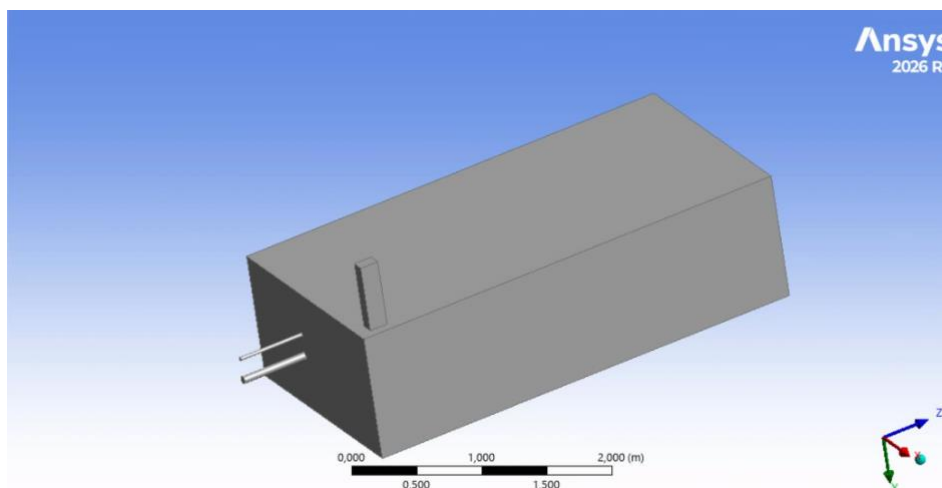


Figura 4-geometria do forno inspirada a partir de [29] (vista geral) e pormenor da face frontal com as duas entradas e saída

A segunda geometria foi desenvolvida com base na mesma cavidade, mantendo todas as dimensões externas e internas. A única alteração introduzida diz respeito à configuração da entrada de gases: as duas aberturas circulares originais foram substituídas por uma única entrada circular com 90 mm de diâmetro, posicionada na face frontal da cavidade. Esta modificação foi necessária para garantir a compatibilidade com as condições de fronteira provenientes das simulações do queimador, onde os gases de combustão resultantes de cada *blend* entram no domínio do forno como um escoamento único, com temperatura, velocidade e composição definidas pelos resultados apresentados na Secção 3.4.2. O diâmetro de 90 mm foi escolhido de forma a assegurar condições de escoamento coerentes com as velocidades e caudais mássicos obtidos à saída do queimador para as diferentes misturas simuladas, Figura 5.

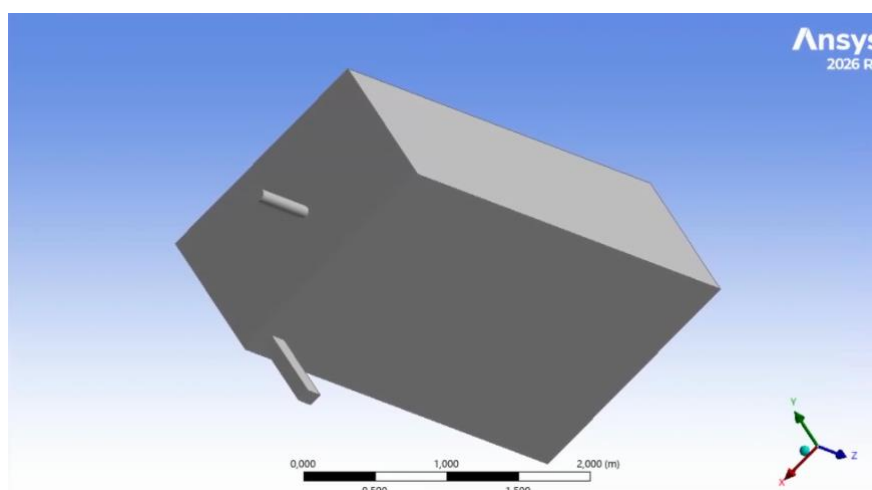


Figura 5-Geometria do forno adaptada: face frontal com a entrada única de 90 mm e a saída

A comparação entre as duas geometrias permite, por um lado, validar o modelo numérico implementado por referência a resultados publicados na literatura e, por outro, garantir que a geometria utilizada nas simulações com os diferentes blends H_2/CH_4 é fisicamente

representativa de um forno cerâmico real, com apenas a adaptação mínima necessária à integração dos resultados do queimador.

Foi ainda desenvolvido um forno com 4 entradas em estrela, no canto superior direito e inferior esquerdo dum lado e no outro canto superior esquerdo e canto inferior direito, com o objetivo de aumentar a homogeneizar a temperatura no interior do forno (Figura 6).

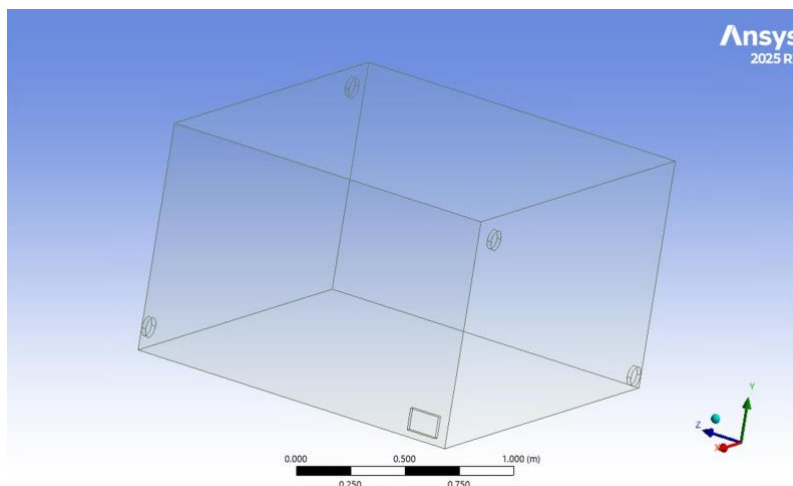


Figura 6- Geometria do forno adaptada com 4 entradas

3.2. Malhas

3.2.1. Malha do queimador

A geometria do queimador, previamente desenvolvida em ambiente CAD (SolidWorks), foi posteriormente exportada para o software ANSYS Meshing, onde se procedeu à discretização do domínio computacional - Figura 7. Esta etapa é crítica na modelação de simulações de CFD, pois a qualidade da malha influencia a precisão dos resultados numéricos, especialmente em problemas envolvendo escoamentos reativos e fenómenos de combustão [30] .

Dada a complexidade geométrica do queimador, com zonas de mistura, entradas múltiplas e variações de secção transversal, foi adotada uma malha predominantemente não estruturada, permitindo uma melhor adaptação às superfícies curvas e às regiões internas de difícil discretização. A malha gerada apresenta um total de aproximadamente 1,75 milhões de células do tipo polihexagonal, valor da mesma ordem de grandeza do reportado noutros estudos da literatura para queimadores industriais [16].

A ausência de células isoladas confirma a integridade topológica da malha, garantindo que todo o domínio computacional se encontra corretamente conectado [31]. No que diz respeito à qualidade ortogonal, o valor mínimo de 0,162 indica a presença de algumas células com distorção geométrica, embora ainda dentro dos limites aceitáveis para simulações industriais complexas, valores superiores a 0,10 são geralmente considerados utilizáveis neste contexto, como referido na literatura [32]. A razão de aspeto máxima elevada (≈ 91) está associada a células alongadas, tipicamente localizadas em regiões próximas de paredes ou em zonas de transição geométrica. Embora valores elevados possam afetar a precisão numérica, este tipo

de células é frequentemente inevitável em geometrias alongadas como queimadores, sendo aceitável desde que não coincidam com regiões de forte gradiente de propriedades, como a zona de chama [32].

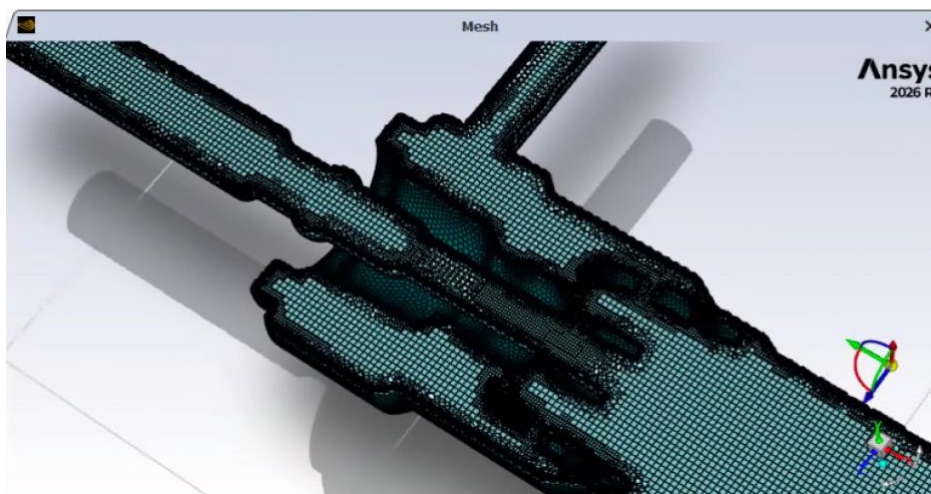
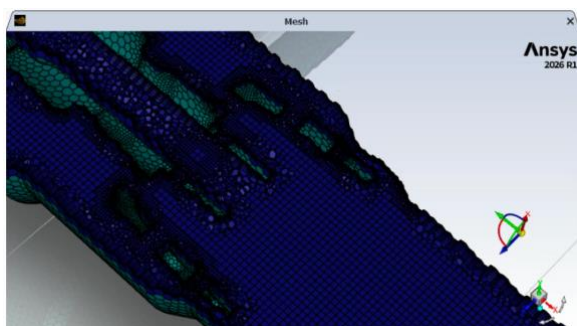


Figura 7-Malha computacional do queimador gerada em ANSYS Meshing (1,75 milhões de células)

De forma a avaliar a independência da solução relativamente à discretização espacial, foi realizado um estudo de validação da malha computacional utilizando três níveis distintos de refinamento. Foram geradas três malhas tridimensionais não estruturadas: uma malha grossa com aproximadamente 688 mil células, uma malha intermédia com cerca de 1,75 milhões de células e uma malha refinada com aproximadamente 7,13 milhões de células. O refinamento foi aplicado principalmente nas regiões próximas das entradas de combustível e oxidante e na zona de mistura, onde se verificam os maiores gradientes de velocidade, temperatura e composição química.

A malha refinada apresentou um valor mínimo de *Orthogonal Quality* de 0,21 e um *Maximum Aspect Ratio* de 67,24, enquanto a malha grosseira apresentou valores de 0,21 e 56,70, respetivamente. Em ambos os casos não foram identificadas células isoladas, o que confirma a boa conectividade do domínio computacional, Figura 8.

a)



b)

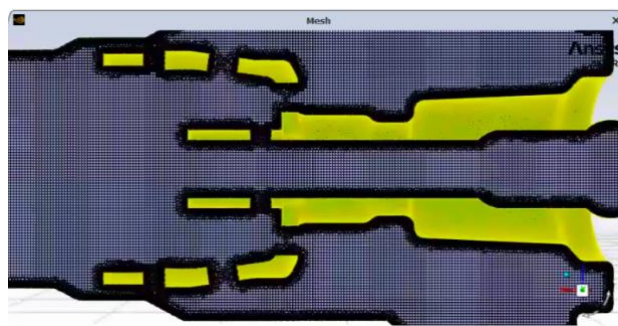


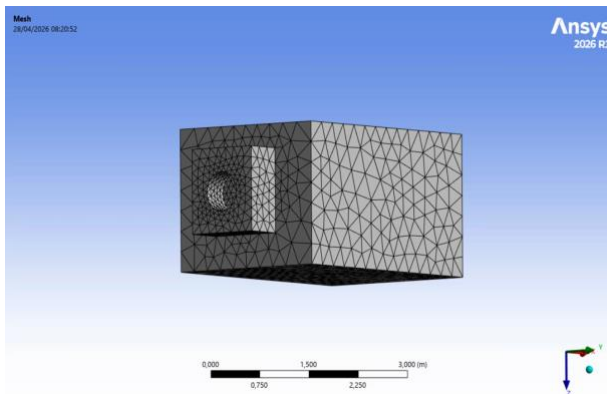
Figura 8- a) Malha computacional do queimador gerada em ANSYS Meshing (688 mil células); b) Malha computacional do queimador gerada em ANSYS Meshing (7,13 milhões de células)

Estas três malhas tinham como objetivo analisar a convergência dos resultados numéricos. Esta geometria não foi, no entanto, adotada devido aos valores residuais elevados, conforme descrito na Secção 4.1. Foi então necessário mudar para uma geometria simplificada, tendo sido adotada a mesma metodologia de validação de malha, recorrendo igualmente à referência [33] para validação da malha.

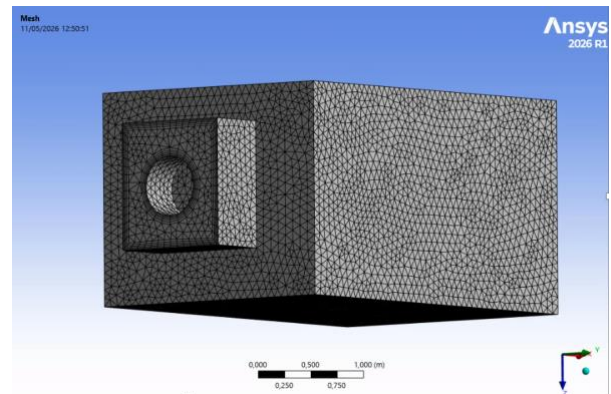
A primeira malha corresponde à discretização mais grossa, com 11 920 elementos e 2 521 nós, Figura 9 a). Esta malha foi utilizada como ponto de partida, permitindo obter uma solução inicial com menor custo computacional. Contudo, dado o reduzido número de elementos, espera-se que apresente menor capacidade para resolver os gradientes de velocidade, temperatura e composição nas regiões próximas das entradas de ar e combustível.

A segunda malha apresenta um nível intermédio de refinamento, com 198 356 elementos e 59 688 nós (Figura 9 b). O refinamento é mais evidente na região de entrada e na zona de mistura, permitindo uma melhor representação dos gradientes locais sem aumentar excessivamente o custo computacional, servindo como referência para avaliar a convergência dos resultados obtidos com as malhas anteriores. Por fim, a malha mais refinada possui 407 165 elementos e 132 563 nós (Figura 9c), apresentando uma maior densidade de elementos nas regiões críticas do domínio. Esta malha permite uma descrição mais detalhada do escoamento e da combustão.

a)



b)



c)

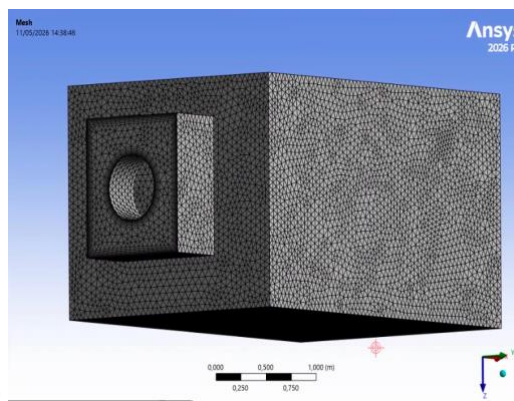


Figura 9- a) Malha grosseira da geometria simplificada (11 920 células) e respetivo pormenor da zona de entrada; b) Malha intermédia (198 356 células) da geometria simplificada; c) Malha refinada (407 165 células) da geometria simplificada

Assim, as três malhas correspondentes a 11 920, 198 356 e 407 165 elementos permitem assim realizar uma análise de sensibilidade à malha, verificando se as principais variáveis de interesse, como temperatura, velocidade e pressão, deixam de apresentar alterações significativas com o aumento do refinamento. Na tabela 3.1 abaixo é possível verificar estes valores.

Tabela 3-1-Resultados da análise de sensibilidade à malha para a geometria simplificada

Malha	Elementos	$T_{\max}$ (K)	$V_{\max}$ (m/s)	$T_{\text{med saída}}$ (K)	ΔP (Pa)
Grossa	11 920	1998	4,75	729	0,33
Média	198 356	2053	4,50	713	0,23
Refinada	407 165	1921	4,45	704	0,098

A comparação dos resultados mostra que o refinamento da malha influencia os campos térmicos e hidrodinâmicos, particularmente entre a malha grossa e as restantes. No entanto, entre a malha intermédia e a malha refinada as diferenças nas variáveis globais representativas do escoamento e da combustão são consideravelmente menores. A velocidade máxima variou, passando de 4.50 m/s para 4.45 m/s, enquanto a temperatura média à saída variou de 713 K para 704.3 K, correspondendo a diferenças inferiores a 2 %.

Estes resultados indicam uma diminuição da dependência da solução relativamente ao refinamento espacial, sugerindo que a malha média apresenta um nível de discretização adequado para a análise pretendida. A temperatura máxima continua a apresentar alguma sensibilidade ao refinamento o que é esperado, uma vez que se trata de um pico local altamente dependente da discretização espacial e menos representativo da convergência global da solução do que variáveis médias ou integrais. Assim, considerou-se que a malha intermédia constitui um compromisso adequado entre precisão numérica e custo computacional, sendo esta a malha adotada nas simulações seguintes.

3.2.2. Malha do forno

A geometria do forno foi igualmente discretizada em ambiente ANSYS Meshing, seguindo uma abordagem semelhante à descrita para o queimador. Dado que o domínio do forno apresenta uma geometria mais compacta e de menor complexidade geométrica do que o queimador, foi possível gerar malhas com características de qualidade globalmente adequadas para simulações CFD de escoamentos reativos em fornos industriais. Note-se que esta geometria tem um comprimento de 1,65 m, inferior ao da geometria de referência (3,65 m), devido ao redimensionamento descrito na Secção 4.2.

Para avaliar a independência da solução numérica relativamente à discretização espacial, foi realizado um estudo de convergência de malha com base no método GCI (*Grid Convergence Index*) [33]. Foram geradas três malhas não estruturadas com níveis crescentes de refinamento: uma malha grosseira com 61077 elementos, Figura 10 a), uma malha média com 148904 elementos, figura 10 b), e uma malha refinada com 274244 elementos, Figura 10 c). Os

tamanhos representativos de célula, calculados segundo a expressão recomendada para domínios tridimensionais [33].

$$r = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta V_i \right)^{1/3} \quad 12$$

Conduziram a fatores de refinamento de $r_{21} = 1,32$ (entre malha refinada e média) e $r_{32} = 1,47$ (entre malha média e grosseira). Note-se que todos os fatores são superiores ao valor mínimo de 1,3 recomendado por [33] permitindo aplicar de forma mais consistente a análise de refinamento de malha.

No que respeita à qualidade das malhas geradas, os valores de Minimum Orthogonal Quality obtidos foram de 0,201 para a malha grosseira, 0,253 para a malha média e 0,251 para a malha refinada. Estes valores situam-se acima do limiar mínimo aceitável de 0,1 para simulações industriais, indicando que nenhuma das malhas apresenta células com distorção geométrica severa capazes de comprometer significativamente a estabilidade da solução. Assim, considerou-se que as três malhas apresentam qualidade geométrica adequada para a realização das simulações CFD e para a posterior análise de independência da malha.

Os valores de Maximum Aspect Ratio foram de 13,43 para a malha grosseira, 13,13 para a malha média e 12,34 para a malha refinada, refletindo a presença de células alongadas nas regiões de transição geométrica e nas proximidades das paredes, o que é esperado e aceitável neste tipo de geometria desde que estas células não coincidam com zonas de forte gradiente de propriedades.

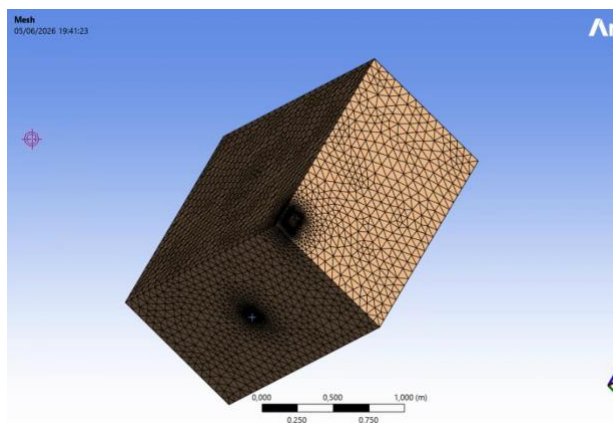
Os resultados das simulações para as três malhas são apresentados na Tabela 3.2, onde se incluem a temperatura máxima ($T_{\max}$), a velocidade máxima ($V_{\max}$), a temperatura média à saída ($T_{\text{med saída}}$) e a queda de pressão (ΔP).

Tabela 3-2- Resultados do estudo de independencia de malha para o forno

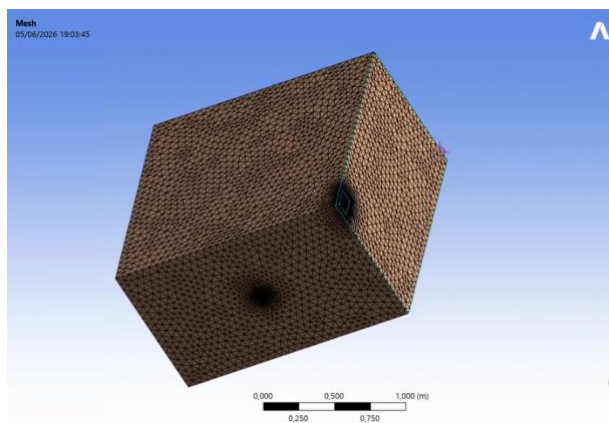
Malha	Elementos	$T_{\max}$ (K)	$V_{\max}$ (m/s)	$T_{\text{med saída}}$ (K)	ΔP (Pa)
Grossa	61 077	2285.58	2.02	1246.64	0.25
Média	148 904	2259.47	2.04	1254.43	0.25
Refinada	274 244	2241.29	2.06	1257.31	0.25

A análise segundo o método GCI revelou um comportamento de convergência não monotónico para as principais variáveis analisadas, nomeadamente a temperatura máxima e a temperatura média à saída. Este comportamento, caracterizado por convergência oscilatória entre os diferentes níveis de refinamento, é admissível em escoamentos reativos complexos e encontra-se descrito na literatura para simulações CFD industriais [33].

a)



b)



c)

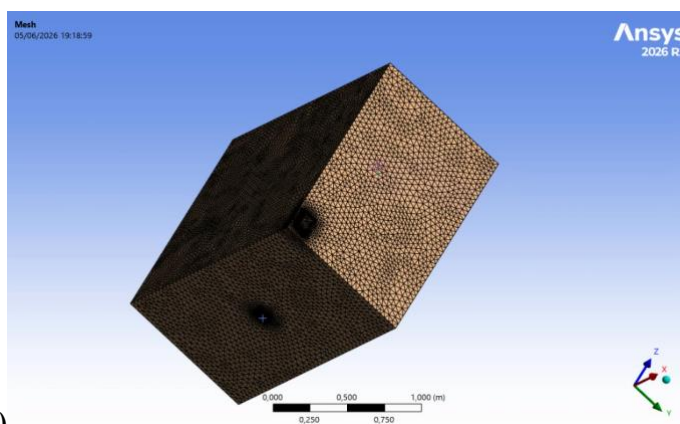


Figura 10- a) -Malha grossa do forno: vistas gerais e pormenor da zona de entrada; b) -Malha média do forno: vistas gerais e pormenor da zona de entrada; c) -Malha refinada do forno: vistas gerais e pormenor da zona de entrada

Os erros relativos entre a malha refinada e a malha média foram de *ca.* 0,63 % para a temperatura máxima, 1,02 % para a temperatura média à saída e 1,85 % para a velocidade máxima. A maior sensibilidade observada na velocidade máxima está associada aos elevados gradientes locais presentes na região de entrada dos gases, fortemente dependentes da resolução da malha nessa zona, assim como considerando todos os valores de saída do queimador, que são os da entrada no forno.

Tendo em conta o compromisso entre precisão numérica, selecionou-se a malha refinada, com 274 244 elementos, para a realização das simulações do forno. Apesar de não se verificar uma independência total da malha no sentido estrito do método GCI, os erros obtidos para as variáveis térmicas globais mantiveram-se inferiores a 2 %, sendo considerados aceitáveis para simulações CFD de escoamentos reativos industriais [33].

Foram geradas três malhas com diferentes níveis de refinamento para o domínio computacional do forno: uma malha grossa, Figura 11 b), (152 709 elementos), uma malha média, Figura 11 a), (366 392 elementos) e uma malha refinada, Figura 11 c), (745 986 elementos).

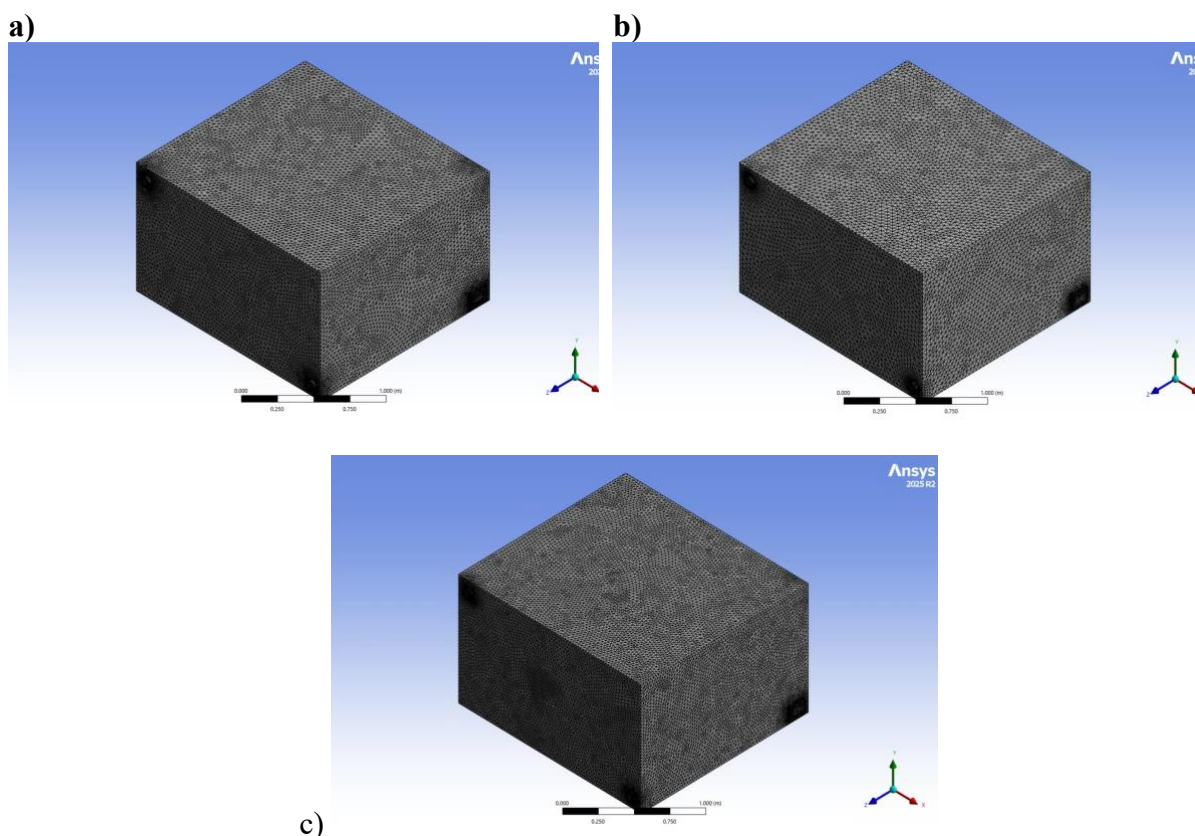


Figura 11- a)- Malha média do forno com 4 entradas; b)- Malha grossa do forno com 4 entradas; c)- Malha refinada do forno com 4 entradas

As simulações foram executadas para cada uma das malhas com as mesmas condições de fronteira e modelos de turbulência, tendo sido registados os valores de quatro variáveis de interesse: temperatura máxima no domínio ($T_{\max}$), velocidade máxima ($V_{\max}$), temperatura média na saída ($T_{\text{med, saída}}$) e queda de pressão (ΔP). Os resultados obtidos são apresentados na Tabela 3-3.

Tabela 3-3- Resultados do estudo de independencia de malha para o forno com 4 queimadores

Malha	Elementos	$T_{\max}$ (K)	$V_{\max}$ (m/s)	$T_{\text{med, saída}}$ (K)	ΔP (Pa)
Grossa	152 709	1751,89	4,73	1354,73	2,64
Média	366 392	1750,16	4,76	1350,70	2,62
Refinada	745 986	1753,81	4,79	1356,17	2,65

Através da equação 12 os fatores de refinamento entre malhas, definidos como $r = h_{\text{grosso}}/h_{\text{fino}}$, assumiram os valores $r_{32} = 1,40$ e $r_{21} = 1,27$. O artigo recomenda um valor mínimo de $r = 1,3$; o fator r_{21} está ligeiramente abaixo deste limiar, o que implica que a extrapolação de Richardson é menos precisa para esse par de malhas. Ainda assim, os valores de GCI obtidos permitem uma avaliação robusta da convergência.

Para além da análise de independência de malha, foi também avaliada a qualidade geométrica de cada malha através de dois indicadores: a qualidade ortogonal mínima (Minimum Orthogonal Quality, OQ) e o rácio de aspeto máximo (Maximum Aspect Ratio, AR).

A malha grossa apresenta a pior qualidade ortogonal mínima ($OQ = 0,20$), estando no limiar crítico aceitável, e o rácio de aspeto mais elevado ($AR = 17,15$), o que pode comprometer a precisão local das soluções. A malha refinada apresenta valores intermédios ($OQ = 0,24$; $AR = 13,45$). A malha média destaca-se por apresentar a melhor qualidade ortogonal ($OQ = 0,25$) e o rácio de aspeto mais baixo ($AR = 12,97$), indicando uma distribuição geométrica mais equilibrada das células.

Considerando em conjunto os resultados do estudo de independência de malha e a avaliação da qualidade geométrica, optou-se por utilizar a malha média (366 392 elementos) nas simulações numéricas. Esta malha apresenta valores de GCI abaixo de 5 % para as variáveis de temperatura e velocidade, indicando que a solução se encontra próxima da zona assintótica de convergência. Adicionalmente, é a malha com melhor qualidade geométrica, o que contribui para a estabilidade e precisão da solução numérica.

3.3. Modelos físicos e configuração numérica

No âmbito da descarbonização parcial via clivagem catalítica do metano, o CFD facilita a avaliação do impacto da substituição parcial do gás natural por misturas H_2-CH_4 na eficiência térmica, uniformidade de temperatura e controlo de emissões, sem necessidade de alterações drásticas na infraestrutura existente. As simulações foram realizadas no ANSYS Fluent, adotando um conjunto de modelos físicos adequado à natureza do escoamento reativo e às condições de temperatura características de cada domínio. Para a modelação da combustão no queimador foi utilizado o modelo GRI-mech 3.0, composto por 325 reações elementares e 53 espécies químicas. Este mecanismo é amplamente reconhecido na literatura como adequado para a simulação de combustão de misturas metano-hidrogénio, por incluir as vias cinéticas relevantes para ambos os combustíveis e para a formação de NO_x [37]. No forno, dado o maior volume do domínio, foi adotado o modelo *Eddy Dissipation* sendo as equações de reação global apresentadas na secção 2.3 e as equações da mistura *methane-air*, definida na base de dados Ansys fluent *database*.

A transferência de calor por radiação foi modelada no forno com o modelo *Discrete Ordinates* (DO), adequado a meios participantes com gradientes térmicos elevados como os presentes num forno de alta temperatura, permitindo resolver a equação de transferência radiativa para um número finito de direções discretas. O escoamento turbulento foi descrito pelo modelo $k-\epsilon$ standard, com funções de parede adiabática no queimador e participante no forno. Para a previsão das emissões de óxidos de azoto, o modelo de formação de NO_x *thermal* foi ativado na simulação do forno, considerando simultaneamente o mecanismo térmico de Zeldovich

dominante a altas temperaturas e o mecanismo *prompt*, de forma a capturar as contribuições de ambas as vias de formação de NO_x nos gases de combustão.

3.4. Condições fronteira

3.4.1. Condições fronteira do queimador

As condições de fronteira do queimador foram definidas com base nos dados geométricos e operacionais do artigo de referência [29], nomeadamente os caudais mássicos e as velocidades de entrada do combustível (1 ms^{-1}) e do comburente (2 ms^{-1}), ambos a 300 K. A velocidade de entrada do escoamento foi imposta de acordo com os valores reportados na referência, tendo sido mantida constante para todas as misturas simuladas de forma a isolar o efeito da composição do combustível.

A composição do combustível foi variada progressivamente entre as onze misturas estudadas, desde 100 % CH_4 até 100 % H_2 , em incrementos de 10 % em fração volúmica de H_2 . Para cada mistura, a fração mássica de cada espécie foi calculada com base na composição molar da mistura e nas massas moleculares correspondentes, sendo estas frações impostas diretamente como condição fronteira na entrada de combustível. A entrada de ar foi definida com composição de ar seco padrão. As paredes do queimador foram tratadas como superfícies adiabáticas, condição pelo facto de o corpo do queimador se encontrar instalado através das paredes do forno e envolvido por material refratário de baixa condutividade térmica. Assim, numa primeira aproximação, as perdas térmicas através das paredes do queimador podem ser desprezadas face à energia libertada pela combustão. Além disso, como o objetivo principal era comparar o efeito da composição H_2/CH_4 que servirá como condição fronteira, e a pressão na saída foi definida como pressão manométrica nula.

3.4.2. Condições fronteira do forno

As condições fronteira impostas nas simulações do forno foram obtidas diretamente dos resultados das simulações do queimador para cada mistura, garantindo a coerência física do sistema integrado queimador-forno. Para cada uma das onze composições estudadas, os valores médios de temperatura, velocidade, pressão e fração mássica das espécies químicas à saída do queimador foram extraídos e aplicados como condições de entrada no forno, conforme resumido na Tabela A-1, apresentada em detalhe no Anexo A. Esta abordagem assegura que o forno recebe exatamente os gases que o queimador produziria em operação real para cada mistura, sem simplificações na composição química dos produtos de combustão.

As paredes do forno foram tratadas como superfícies participantes e emissividade com um valor de 1. A pressão na saída do forno foi definida como pressão manométrica nula.

4. Resultados e Discussão

4.1. Simulação do queimador

Numa fase inicial do trabalho foi utilizada uma geometria original do queimador já referenciada na literatura [16]. No entanto, verificaram-se dificuldades significativas de convergência numérica para todas as malhas estudadas (média, refinada e grossa) respetivamente, mesmo após a alteração dos fatores de *under-relaxation*, redução do *timestep* e ajuste dos parâmetros numéricos do *solver*.

A Figura 12 mostra que os resíduos escalados apresentaram comportamento oscilatório persistente, particularmente na equação da continuidade, sem redução monotónica ao longo das iterações, indicando ausência de convergência estável da solução.

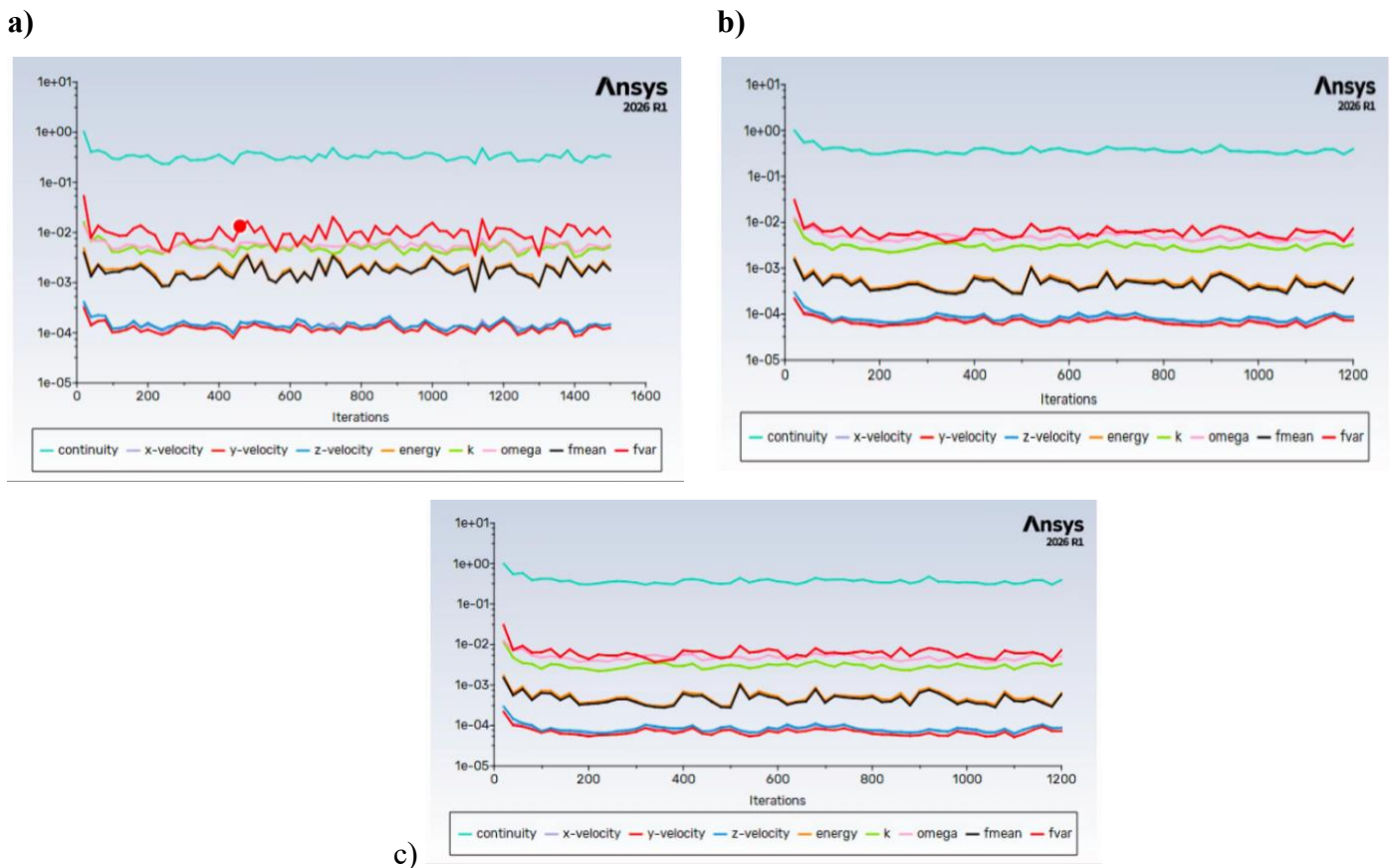


Figura 12- a)-Resíduos escalados para a malha média da geometria original do queimador; b)-Resíduos escalados para a malha refinada da geometria original do queimador; c)-Resíduos escalados para a malha grossa da geometria original do queimador

Segundo as recomendações da ASME para verificação e validação em CFD, os resíduos devem apresentar uma redução de pelo menos três a quatro ordens de grandeza para garantir convergência iterativa adequada [33]. No presente caso, este critério não foi atingido, sugerindo que as dificuldades observadas estavam associadas não apenas à discretização espacial, mas também à elevada complexidade geométrica, às fortes instabilidades do

escoamento reativo e às condições fronteiras apresentadas ($0,76 \text{ g s}^{-1}$ de gás e $14,41 \text{ g s}^{-1}$ de ar com uma Temperatura de 273 K).

A geometria original incluía regiões com mudanças bruscas de secção e zonas de mistura intensas próximas da região de combustão, aumentando a sensibilidade numérica do modelo. Este tipo de comportamento é frequentemente observado em simulações CFD de combustão turbulenta, especialmente em queimadores com recirculações intensas e elevados gradientes térmicos. [34] Foi então decidido que a melhor geometria seria a simplificada onde os valores residuais encontram-se representados na Figura 13 e nas Figuras A-15 a A-25 em anexo.

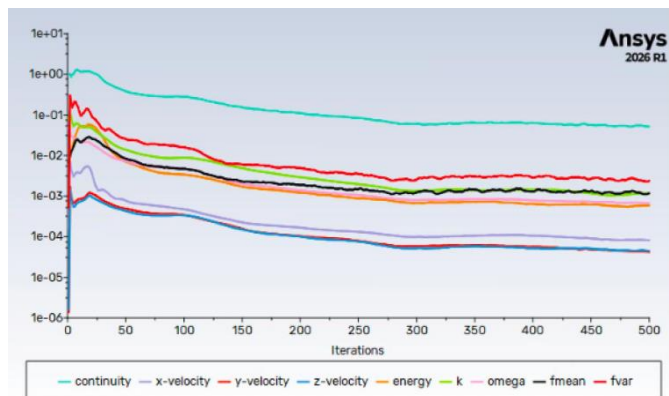
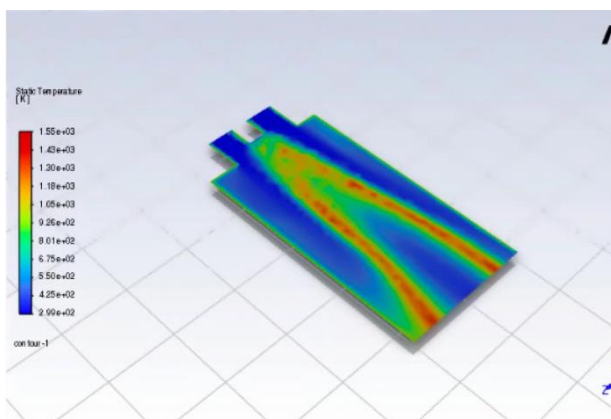


Figura 13- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação do queimador 100 % H_2

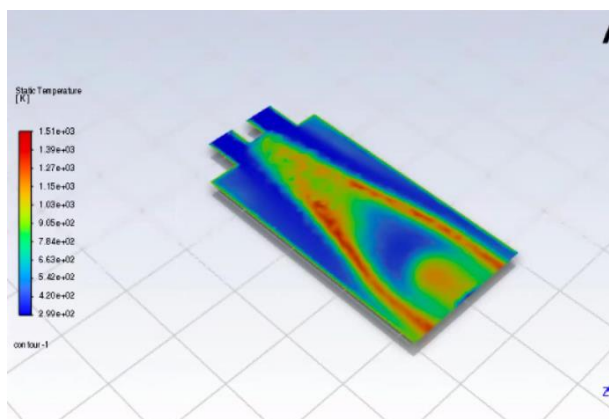
Embora os resíduos escalados não apresentem uma redução de três a quatro ordens de grandeza, conforme recomendado por [33], a solução foi considerada suficientemente convergida com base na estabilização dos monitores de variáveis de interesse, nomeadamente a temperatura média e a velocidade média na saída, que deixaram de apresentar variações superiores a $0,1 \%$ entre iterações consecutivas ao longo das últimas 500 iterações de cada simulação. Este critério de estabilização de monitores constitui, na prática, um indicador de convergência mais relevante do que os resíduos globais em escoamentos reativos com forte acoplamento turbulência-química, onde os resíduos da equação da continuidade tendem a estabilizar em valores mais elevados devido às não-linearidades associadas à libertação de calor [34]. Os valores residuais da ordem de 10^{-1} a 10^{-2} são da mesma ordem de grandeza dos reportados na referência de base [27] para geometrias e condições similares, reforçando a aceitabilidade da solução obtida.

As simulações CFD foram realizadas para onze composições de combustível distintas, desde o metano puro (100% CH_4) até ao hidrogénio puro (100% H_2), em incrementos de 10% , com o objetivo de caracterizar o comportamento da chama e dos gases de combustão ao longo desta transição. Os resultados completos encontram-se sintetizados na Tabela A.1 em anexo assim como todos os contornos de temperatura, de OH e valores residuais (Figura A 4 - A 36). Na Figura 14 podemos observar 3 contornos de temperatura das misturas 100% H_2 , 50% $\text{H}_2/50 \%$ CH_4 e 100% CH_4 .

a)



b)



c)

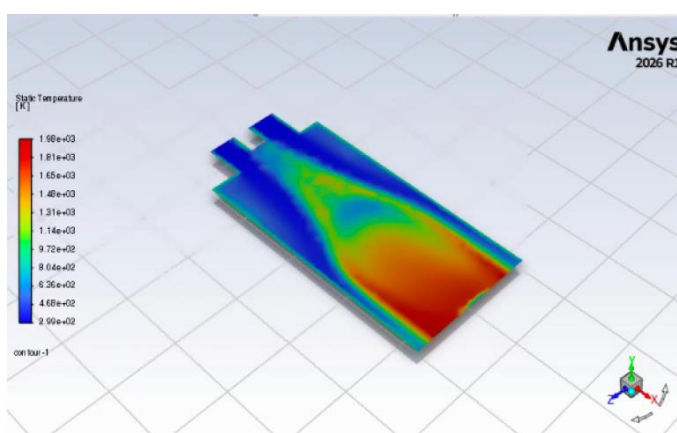


Figura 14- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura: a) 100 % CH_4 analisada; b)- 50 % CH_4 /50 % H_2 analisada; c)- 100 % H_2 analisada

Os contornos da Figura 14 c) permitem desde logo identificar as alterações estruturais da chama com o enriquecimento em H_2 . A zona de temperatura máxima concentra-se progressivamente numa região mais compacta e próxima da secção de entrada, reflexo da maior velocidade de chama laminar do hidrogénio, como será quantificado adiante.

O caso de referência (100 % CH_4) serve de base para toda a análise comparativa. A temperatura máxima é de 1961,7 K e a temperatura média à saída de 680,5 K uma diferença de cerca de 1281 K que evidencia a forte concentração da libertação de calor na zona de reação e a significativa perda de temperatura ao longo do domínio, visível na Figura 14 a). Os gases à saída são dominados pelo O_2 em excesso e pelo CH_4 não reagido, com CO_2 de 0,026 e H_2O de 0,034 em fração mássica, e um nível de NO_x de $5,7 \times 10^{-5}$. A chama tem cerca de 0,40 m de comprimento e está posicionada a cerca de 1,50 m da entrada.

A evolução térmica ao longo das onze misturas está representada na Figura 15.

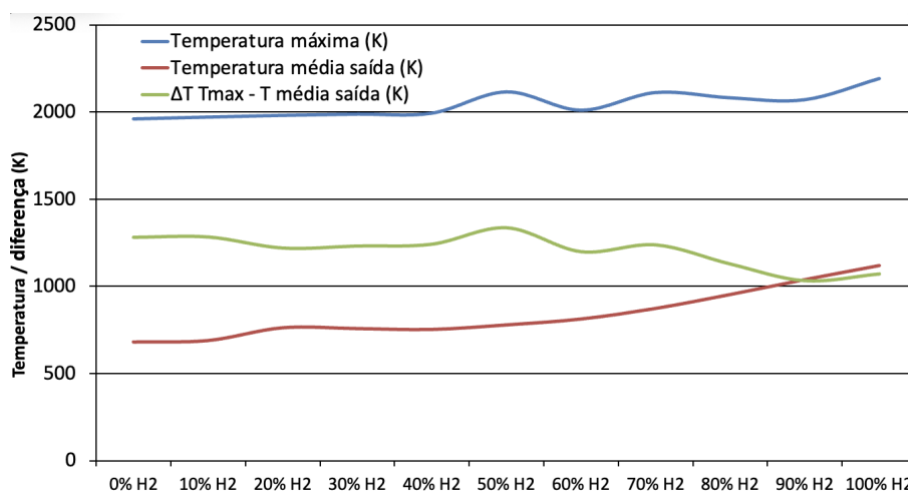


Figura 15- Variação da temperatura para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

A temperatura máxima não segue uma tendência monotónica. Sobe gradualmente de 1961,7 K (100 % CH₄) para 1994,1 K (40 % H₂), regista um salto abrupto para 2114,5 K na mistura equimolar (50 % H₂). Verifica-se uma diminuição ligeira nas misturas seguintes e retoma a subida até atingir o máximo da série com 2190,0 K para 100 % H₂, onde a separação crescente entre as duas temperaturas nas misturas intermédias evidencia o aumento dos gradientes térmicos internos associado à maior reatividade do H₂ [35]. A temperatura média à saída, pelo contrário, cresce de forma contínua e acelerada, passando de 680,5 K (100 % CH₄) para 1119,4 K (100 % H₂), um aumento de 65 %, refletindo diretamente o maior poder calorífico mássico do hidrogénio e a menor massa de produtos de combustão por unidade de energia libertada.

A Figura 16 quantifica esta separação crescente, que aumenta de ~1280 K para o CH₄ puro para valores superiores nas misturas intermédias antes de estabilizar no caso de H₂ puro. As misturas de 10 % H₂ e 20 % H₂ comportam-se de forma muito próxima do caso de referência, com temperaturas médias à saída abaixo dos 770 K. A partir de 30-40 % H₂ a temperatura média começa a subir de forma mais expressiva, e a mistura de 50 % H₂ representa uma inflexão clara, a temperatura máxima salta para 2114,5 K e a ΔP atinge o pico de toda a série (0,097 Pa), sugerindo um regime de escoamento mais turbulento gerado pela coexistência das duas espécies em proporções iguais, que gera condições de mistura menos homogêneas.

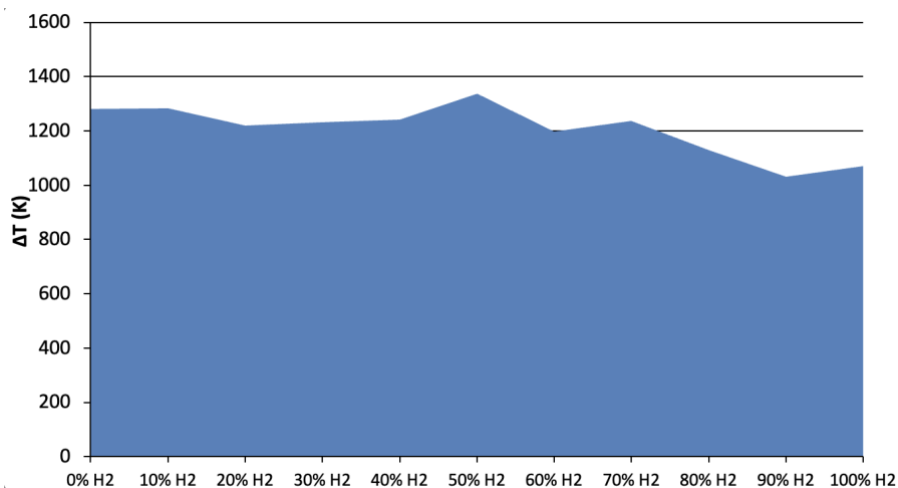
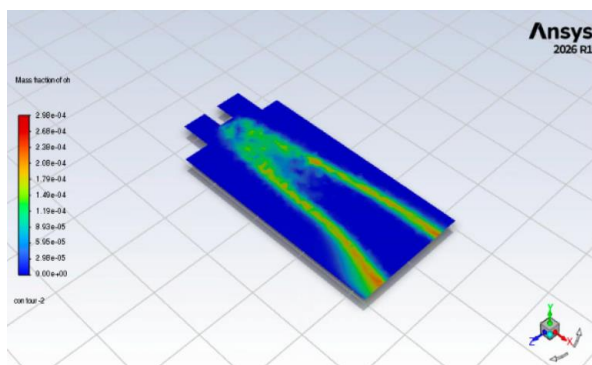


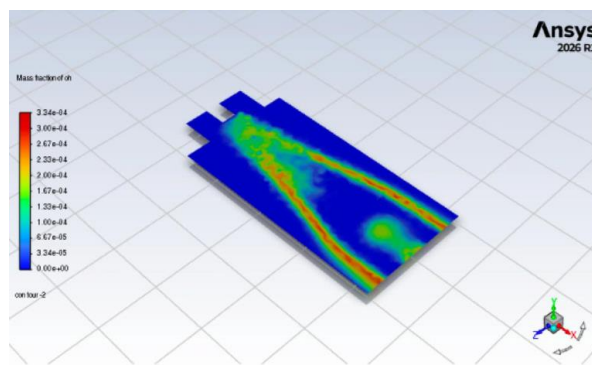
Figura 16- Diferença entre $T_{\max}$ e $T_{\text{média}}$ à saída em função das proporções de H_2 na mistura com CH_4

Os contornos de OH da Figura 17 complementam esta leitura, a zona de reação ativa concentra-se progressivamente e desloca-se para mais perto da entrada com o aumento de H_2 , coerente com o encurtamento da chama observado nos dados e representado na figura 18. Onde é possível retirar que a chama tem 0,40 m de comprimento e 1,50 m de posição no caso do CH_4 puro, a chama passa para ~0,20 m e ~1,00 m no caso do H_2 puro, reduções de 50 % e 33 %, respetivamente consequência direta da velocidade de chama laminar muito superior do H_2 (>3 m/s face a 0,37 m/s do CH_4 puro e >1 m/s já em misturas de 20% H_2).

a)



b)



c)

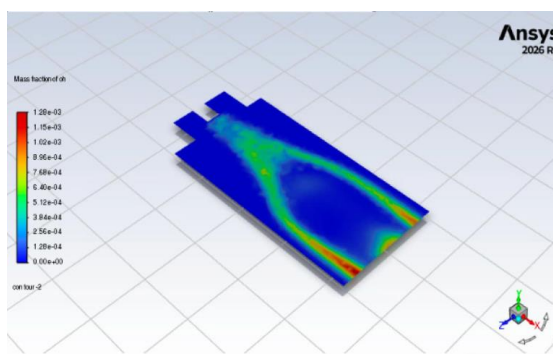


Figura 17- Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura: a) 100 % CH_4 ; b) 50 % CH_4 /50 % H_2 analisada; c) - 100 % H_2 analisada

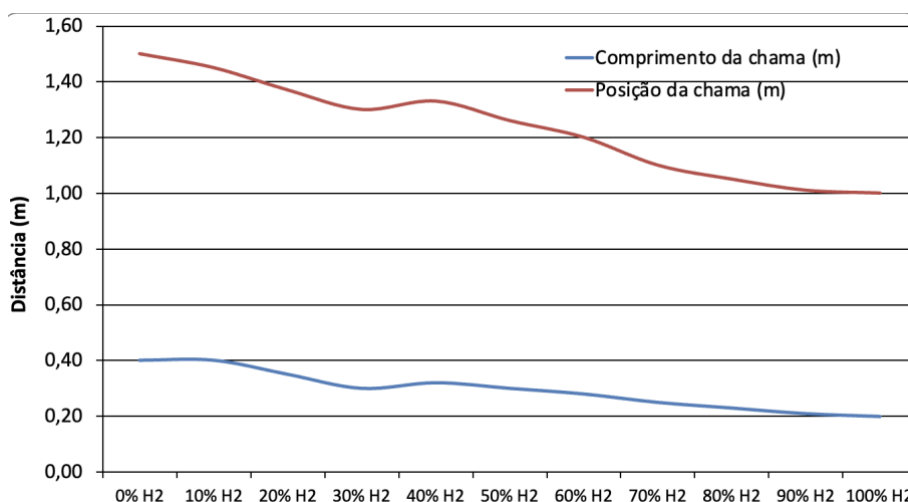


Figura 18- Comprimento e posição da chama para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

Na Figura 19 a velocidade média na saída cresce monotonicamente de 0,985 m/s (100 % CH₄) para 1,217 m/s (100 % H₂), acompanhando o aumento da temperatura e a consequente expansão volumétrica dos gases.

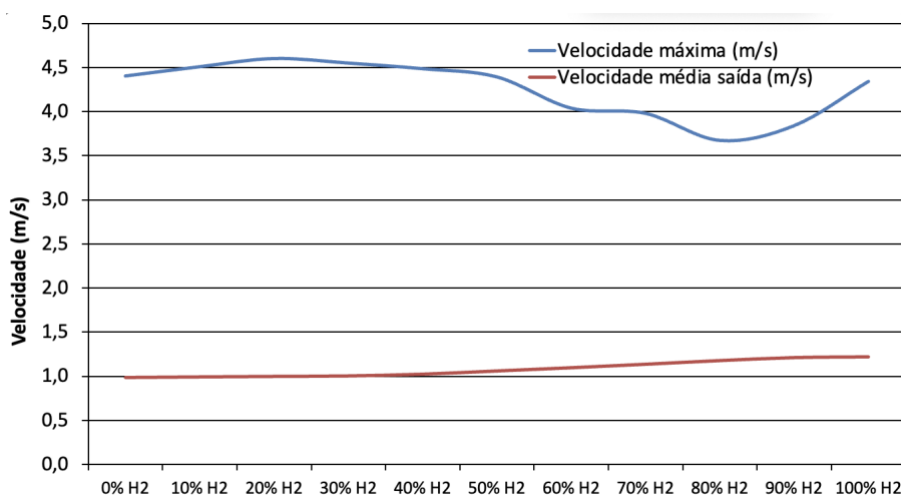


Figura 19- Velocidade máxima e média à saída para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

A queda de pressão apresenta o comportamento mais irregular de toda a série após uma subida até ao pico de 0,097 Pa para 50 % H₂, desce para valores inferiores ao de referência nas misturas seguintes, atingindo o mínimo de 0,048 Pa para 100 % H₂, possível observar na Tabela A-1. A irregularidade em torno da mistura equimolar está associada às perturbações no campo de escoamento provocadas pela coexistência de dois combustíveis com propriedades de mistura e reatividade muito distintas [36].

A evolução da composição química à saída é apresentada na Figura 20 permite visualizar de forma intuitiva a substituição progressiva do CO₂ pelo H₂O nos produtos de combustão.

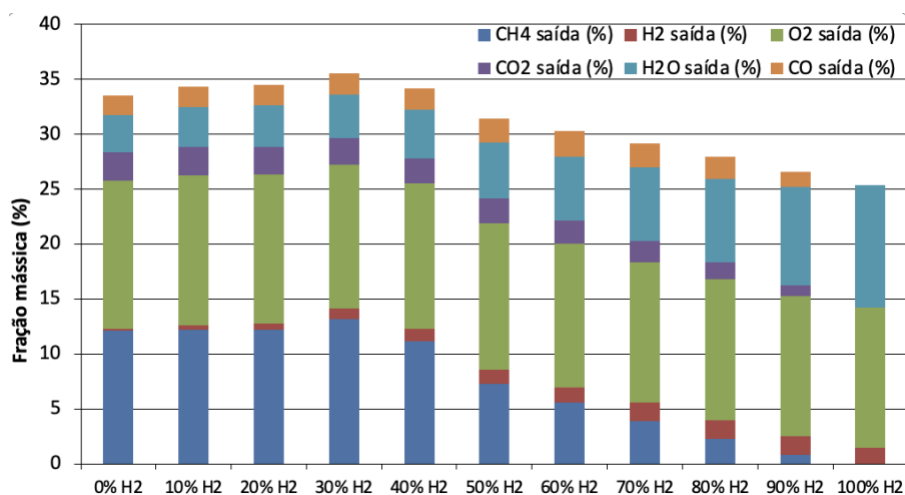


Figura 20- Frações mássicas principais à saída para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

O CO₂ reduz-se continuamente de 0,026 para valores praticamente nulos no caso do H₂ puro, enquanto o H₂O cresce de 0,034 para 0,111. Esta substituição é quimicamente obrigatória porque cada mol de CH₄ substituído por H₂ elimina uma mol de CO₂ nos produtos e acrescenta duas moles de H₂O.

O CO à saída atinge o seu máximo para 60 % H₂ (0,023), o que pode refletir condições de oxidação do carbono menos favoráveis nesta faixa com o H₂ a consumir preferencialmente o O₂ disponível pela sua maior velocidade de reação, o CH₄ residual encontra menos oxidante para completar a combustão. A partir daí, com o CH₄ residual a tornar-se vestigial, o CO volta a cair. É de notar que o valor que falta para perfazer os 100 % é a quantidade de N₂.

O NO_x apresenta um comportamento distinto, representado isoladamente na Figura 21, que relaciona estas duas variáveis mostrando que crescem em paralelo com o aumento de H₂ mas com ritmos diferentes, a H₂O cresce de forma gradual enquanto o NO acelera marcadamente a partir de 70-80 % H₂. De $5,7 \times 10^{-5}$ (100 % CH₄), o NO atinge $2,43 \times 10^{-4}$ para 100 % H₂, um aumento de 326 % face ao caso base, valor referente exclusivamente à saída do queimador (distinto do fator de 294× reportado para a saída do forno na Secção 4.2), diretamente associado às temperaturas de chama mais elevadas que intensificam o mecanismo térmico de Zeldovich [38]. Os valores do balanço de massa na Tabela A-1 confirmam a boa qualidade numérica das simulações, com erros de massa muito inferiores ao caudal de referência para todas as misturas.

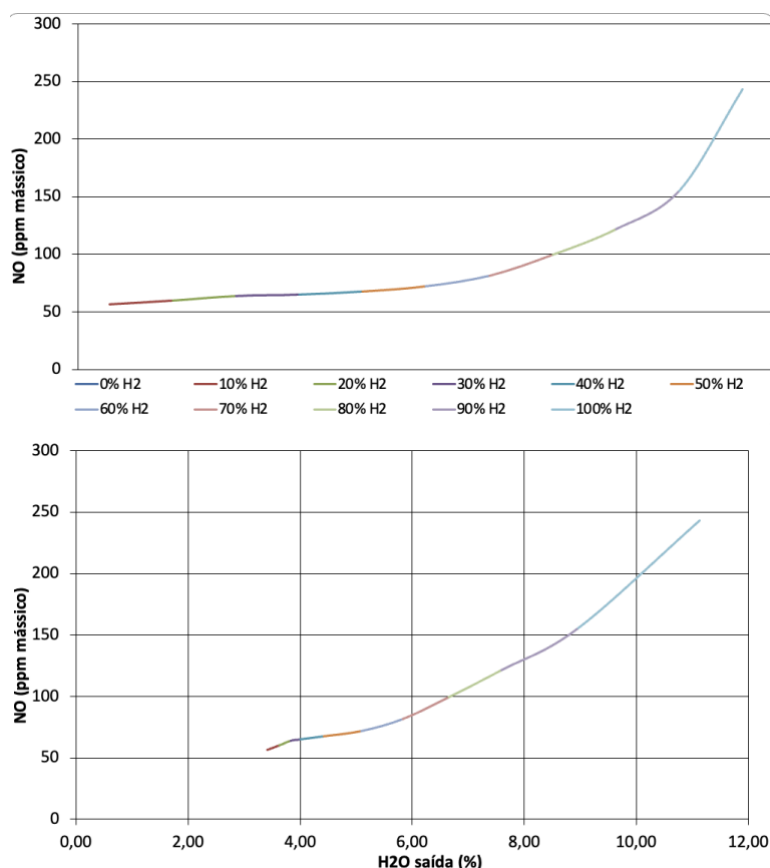


Figura 21- a)- NO à saída para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄; b)- Dispersão: NO_x vs H₂O à saída

De forma geral, a análise comparativa dos onze blends, suportada pelos gráficos apresentados e pela Tabela A-1 e Figuras (A 4 - A 36), permite identificar três zonas de comportamento distintas: uma zona de transição suave entre 0 % e 40 % H₂, onde os parâmetros evoluem de forma gradual e as condições de operação se mantêm próximas do caso de referência; uma zona de inflexão entre 40 % e 60 % H₂, marcada pela irregularidade da ΔP e pelo pico de temperatura máxima, que requer atenção particular na aplicação como condição de fronteira do forno [39] [40]; e uma zona de domínio do H₂ acima de 60 %, caracterizada pelo crescimento acelerado do NO_x e pela eliminação progressiva do carbono nos produtos. Todos estes parâmetros são transferidos diretamente como condições de fronteira para as simulações do forno.

4.2. Simulação do forno

As simulações do forno foram realizadas segundo os modelos físicos, condições de fronteira e critérios numéricos descritos nas Secções 3.3 e 3.4. Nesta secção apresentam-se e discutem-se os resultados obtidos para as onze misturas H₂/CH₄ estudadas.

Antes de apresentar os resultados finais, importa referir que o processo de simulação do forno envolveu iterações sucessivas na configuração do domínio computacional. Numa primeira fase,

realizou-se uma simulação considerando apenas o domínio sólido do forno, sem modelação do escoamento de fluido no seu interior. Esta abordagem revelou-se insuficiente para capturar os fenómenos térmicos relevantes como é possível observar nas Figuras A 37 - A 39, tendo sido necessário introduzir o fluido no domínio de cálculo, todos os valores encontram-se nos anexos. Numa segunda fase, verificou-se que as dimensões inicialmente adotadas para o forno resultavam num volume excessivo face ao caudal mássico de entrada proveniente do queimador, conduzindo a temperaturas médias na saída da ordem dos 1060-1280 K, mas com gradientes térmicos axiais muito elevados indicativos de uma transferência de calor insuficiente para homogeneizar termicamente todo o volume do forno, assim como no primeiro caso todos os valores encontram-se nos anexos e Figuras A 46 - A 48. Foi assim necessário redimensionar o domínio, reduzindo o comprimento do forno para 1,65 m de forma a garantir uma distribuição térmica fisicamente consistente com as condições de fronteira impostas.

Os resultados apresentados correspondem à configuração final do forno, após os ajustes referidos, utilizando como condições de fronteira na entrada os valores obtidos nas simulações do queimador para cada mistura H_2 - CH_4 . A Tabela A-4 e as Figuras A 49 - A 70 sintetiza os principais parâmetros termodinâmicos, de escoamento e de valores reais obtidos para as onze misturas estudadas, desde o caso de referência de 100 % CH_4 até ao caso de 100 % H_2 .

No que respeita à temperatura máxima no interior do forno, observa-se uma tendência crescente com o aumento da fração de H_2 , passando de 1753,8 K para a mistura de 100 % CH_4 até 2241,3 K para o caso de 100 % H_2 . Este comportamento é coerente com o poder calorífico volumétrico superior do hidrogénio e com as temperaturas de chama mais elevadas associadas à sua combustão [40, 31]. Contudo, ao analisar o ganho térmico efetivamente promovido pelo forno na Figura 22 observa-se uma tendência decrescente com fração de H_2 , o caso de 100 % CH_4 apresenta o maior ganho térmico ($\Delta T = 388,5$ K) enquanto o de 100 % H_2 regista o menor ($\Delta T = 137,9$ K). Esta diferença entre a temperatura média à saída do queimador e a temperatura média à saída do forno resulta do facto de o forno constituir um domínio adicional de transferência de calor, mistura e, quando ainda existem espécies reagentes disponíveis, possível combustão residual. Assim, embora o queimador apresente temperaturas locais elevadas na zona de chama, a sua temperatura média de saída pode ser inferior devido à mistura com gases mais frios e à elevada heterogeneidade térmica nessa secção. Ao longo do forno, o maior tempo de residência, a recirculação, a radiação e a homogeneização do escoamento promovem o aumento da temperatura média dos gases até à saída. Esta aparente contradição explica-se pelo facto de as misturas ricas em H_2 entrarem no forno já com temperaturas muito mais elevadas, onde as duas curvas (saída do queimador e saída do forno) convergem progressivamente com o aumento da fração de H_2 reduzindo o diferencial térmico disponível para transferência de calor no volume do forno. A transição mais abrupta ocorre entre 10 % e 20 % de H_2 , onde o ΔT cai cerca de 20 % num único incremento, associado ao aumento significativo da temperatura média à saída do queimador de 680,5 K para 762,2 K.

A temperatura média na saída do forno apresenta igualmente uma tendência crescente com a fração de H_2 , variando entre 1068,9 K (100% CH_4) e 1257,3 K (100 % H_2). Este aumento de aproximadamente 18 % entre os casos extremos é relevante do ponto de vista do aproveitamento energético do forno, sugerindo que a substituição progressiva do metano pelo hidrogénio melhora a temperatura absoluta disponível para o processamento do produto. A eficiência térmica do sistema, calculada como:

$$E_f = \frac{T_{méd\,saída\,forno}}{T_{max\,queimador}} \quad 13$$

Apresentada na Tabela A-5, mantém-se notavelmente estável entre 50,9 % e 58,4 % para todas as misturas, o que indica que o forno opera com um grau de rendimento consistente independentemente da composição do combustível. Importa notar que a eficiência térmica aqui definida é uma métrica operacional desenvolvida especificamente para este trabalho, com o objetivo de quantificar a capacidade do forno de converter a energia disponível à entrada (caracterizada pela temperatura máxima do queimador) em calor útil na saída (caracterizado pela temperatura média do fluido). Esta definição não corresponde a uma eficiência térmica no sentido termodinâmico clássico, baseada em balanços entálpicos, mas constitui um indicador comparativo entre misturas que é consistente e aplicável dentro do contexto deste estudo. Resultado relevante para a operacionalidade industrial, pois sugere que a substituição de CH_4 por H_2 não compromete o rendimento térmico global do sistema.

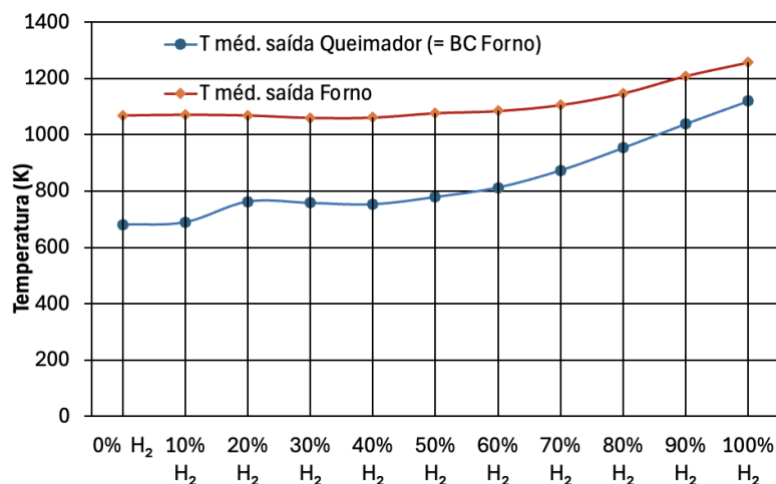


Figura 22-Temperatura média de saída do forno e do queimador para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4

Relativamente às velocidades, a velocidade máxima no interior do forno situa-se entre 2,04 m/s e 2,30 m/s, sem uma tendência clara, o que reflete a influência da variação das propriedades termofísicas das misturas na estrutura do escoamento. A velocidade média na saída diminui ligeiramente com a fração de H_2 , passando de 0,658 m/s para 0,555 m/s, refletindo a menor densidade dos gases ricos em H_2 à temperatura de saída e o efeito de expansão térmica associado. Estes valores são significativamente inferiores às velocidades observadas no

queimador (entre 0,985 m/s e 1,217 m/s), o que é expectável dado o maior volume do forno e a consequente redução das velocidades médias do escoamento.

A queda de pressão no forno, definida como a diferença entre a pressão de entrada e a de saída, situa-se entre 0,247 Pa (100 % H₂) e 0,455 Pa (100 % CH₄), decrescendo com o aumento da fração de hidrogénio. Considerando a queda de pressão total do sistema, soma das contribuições do queimador e do forno, apresentada na Tabela A-5 e na Figura 23, a tendência decrescente mantém-se, passando de 0,704 Pa para 0,498 Pa entre os casos extremos, uma redução de cerca de 29 %. Esta redução é consistente com a menor viscosidade dinâmica do H₂ relativamente ao CH₄ e com as modificações no perfil de escoamento induzidas pela alteração da composição da mistura [41], constituindo um fator favorável do ponto de vista operacional pois indica que a substituição de CH₄ por H₂ reduz as perdas de carga no sistema.

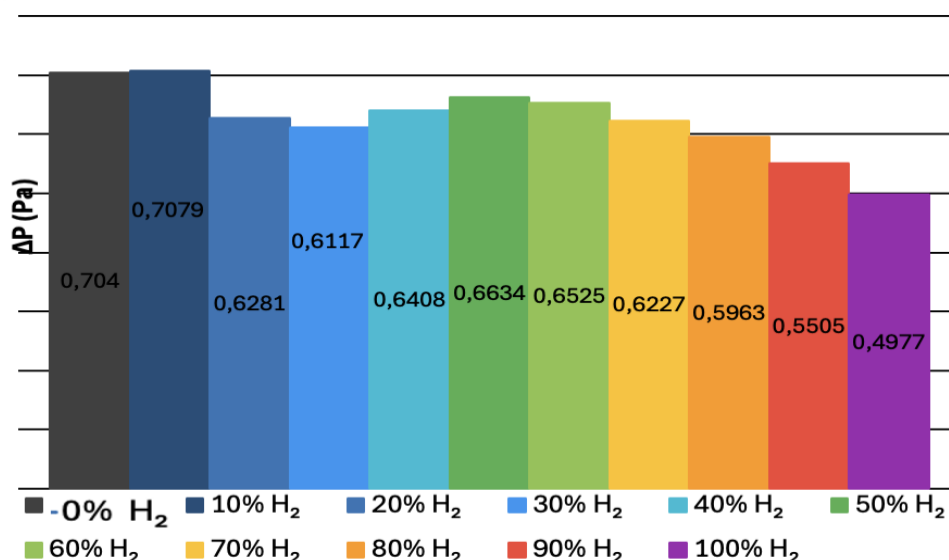


Figura 23- Variação da queda de Pressão Total do Sistema em função da proporção de H₂ no combustível

Em termos de composição química na saída do forno, verifica-se uma combustão substancialmente mais completa do que à saída do queimador, como se observa na Tabela A-6. As frações mássicas de CH₄ residual à saída do forno são inferiores às do queimador para todas as misturas, sendo a conversão adicional de CH₄ no forno particularmente expressiva nas misturas mais ricas em H₂ 68,8 % para 80 % H₂ e 98,5 % para 90 % H₂ indicando que o tempo de residência e a temperatura no forno são suficientes para praticamente completar a combustão do metano residual. Para as misturas com baixa fração de H₂, esta conversão adicional é mais modesta (16-26 %), sugerindo que nestas condições a combustão está mais concentrada no queimador. A fração mássica de CO₂ decresce com o aumento de H₂, de 0,124 (100 % CH₄) para valores praticamente nulos (100 % H₂), conforme evidenciado na figura 24, sendo esta tendência fisicamente esperada dada a ausência progressiva de carbono na mistura combustível. A redução de CO₂ face ao caso de referência não é linear: entre 30 % e 60 % H₂ estabiliza numa

gama de 22,7 % a 24,1 %, com um salto mais expressivo acima de 80 % H_2 onde passa de 33,5 % para 58,5 %.

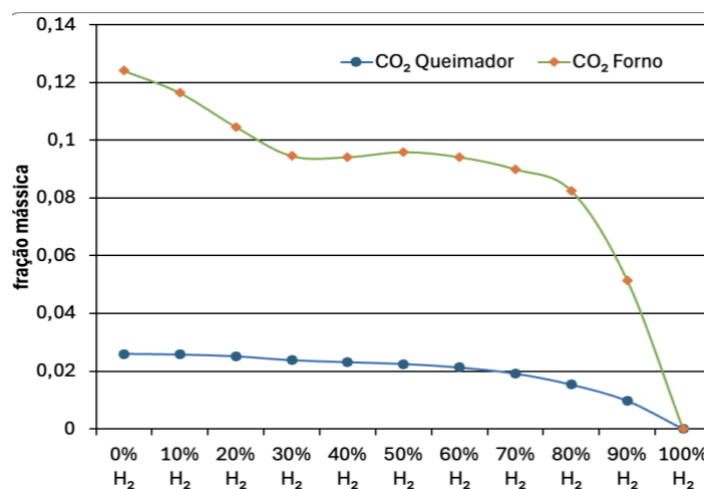


Figura 24-Fração mássica de CO_2 à Saída Queimador e à Saída Forno para diferentes proporções de H_2 na mistura com CH_4

A Figura 25 apresenta a evolução da fração mássica de H_2O calculada em duas secções distintas do domínio: a saída do queimador e a saída do forno. Estes valores correspondem à fração mássica de vapor de água presente nos gases de combustão, não à presença de água líquida. Para todas as composições analisadas, a fração mássica de H_2O é superior à saída do forno relativamente à saída do queimador, indicando que a corrente gasosa continua a evoluir quimicamente e termicamente ao longo do volume do forno.

Esta diferença entre as duas curvas resulta do facto de os gases à saída do queimador ainda poderem conter espécies reagentes, nomeadamente H_2 , CH_4 e O_2 , que continuam a oxidar no interior do forno. O maior tempo de residência, a recirculação, a mistura entre gases quentes e frios e as temperaturas elevadas do forno favorecem a continuação das reações de combustão, promovendo a formação adicional de vapor de água. Assim, a curva correspondente ao forno representa não apenas a água formada no queimador, mas também a água adicional produzida durante a passagem dos gases pelo forno.

O aumento da fração de H_2 no combustível intensifica este efeito, uma vez que a oxidação do hidrogénio conduz diretamente à formação de H_2O . Por esse motivo, a diferença entre a saída do queimador e a saída do forno aumenta com o teor de H_2 no caso de 100 % CH_4 , a fração mássica de H_2O passa de 0,034 no queimador para 0,107 no forno, enquanto no caso de 100 % H_2 aumenta de 0,111 para 0,232. Este comportamento confirma que as misturas mais ricas em hidrogénio originam uma atmosfera de combustão mais rica em vapor de água, o que é relevante para a análise da atmosfera interna do forno e do seu impacto potencial no processamento cerâmico.

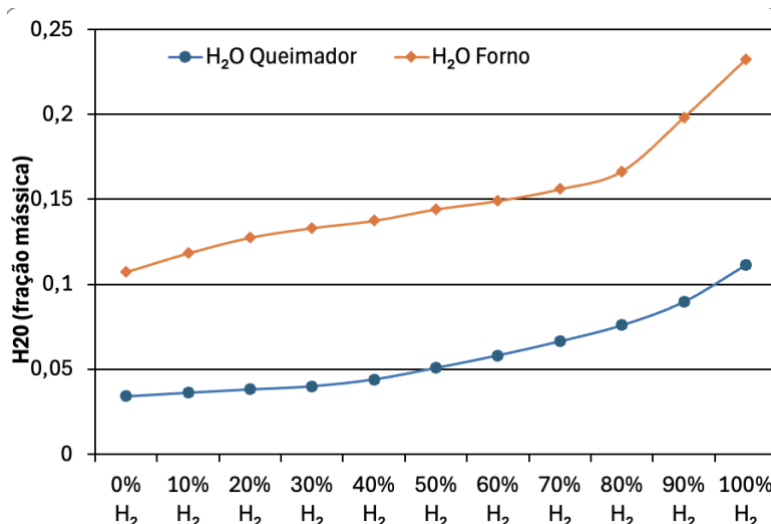


Figura 25- Fração mássica de H₂O à Saída Queimador e à Saída Forno para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

As emissões de NO à saída do forno crescem de forma acentuada com a fração de H₂, passando de $1,50 \times 10^{-6}$ (100 % CH₄) para $4,40 \times 10^{-4}$ (100 % H₂). Este comportamento é consistente com as temperaturas de chama mais elevadas características da combustão de H₂, que favorecem o mecanismo térmico de Zeldovich para a formação de óxidos de azoto [42], como se observa na Figura 26. Importa salientar que, para as misturas até 80 % H₂, a razão NO_{forno} / NO_{queimador} se mantém muito próximo de 0, indicando que o forno promove decomposição líquida de NO nestas condições. A inversão ocorre apenas para 90 % e 100% H₂, onde as temperaturas muito elevadas no interior do forno ativam de forma significativa a formação de NO, tornando o forno uma fonte líquida de emissões. Em termos absolutos, o NO à saída do forno para 100 % H₂ é cerca de 294 vezes superior ao caso de referência, o que representa uma penalização ambiental severa a ponderar na seleção da mistura para aplicação industrial.

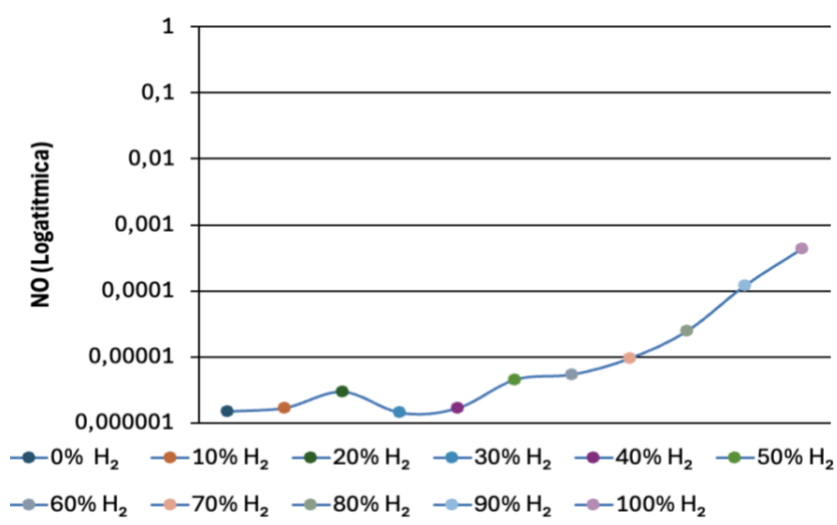


Figura 26- Fração mássica (em escala logarítmica) de NO à Saída Queimador e à Saída Forno para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

O desequilíbrio mássico registado em todas as simulações finais do forno é da ordem de 10^{-5} kg/s. Considerando que o caudal mássico total de entrada no forno varia entre aproximadamente $1,2 \times 10^{-3}$ kg/s (100 % CH₄) e $8,5 \times 10^{-4}$ kg/s (100% H₂), o desequilíbrio representa menos de 0,8 - 1,2% do caudal de referência. Este valor é significativamente inferior ao observado na primeira configuração do forno (da ordem de 10^{-3} kg/s, correspondendo a uma fração superior a 50% do caudal de entrada), o que atesta a melhoria substancial da qualidade numérica das simulações finais face às configurações intermédias descartadas.

A análise integrada de todos estes critérios é sintetizada no Índice de Desempenho Combinado (IDC), apresentado na Tabela A-7 e na Figura 27, pelo método da soma ponderada normalizada o ganho térmico no forno (30 %), as emissões de NO (30 %), as emissões de CO₂ (25 %) e a queda de pressão total (15 %). A construção do IDC requereu a definição de pesos para cada critério, refletindo a relevância relativa de cada variável no contexto específico da indústria cerâmica portuguesa e dos objetivos deste trabalho. O ganho térmico no forno e as emissões de NO receberam cada um um peso de 30%, por representarem os dois principais compromissos operacionais do sistema o primeiro determina a capacidade do forno de processar o produto cerâmico nas condições térmicas adequadas; o segundo constitui a principal penalização ambiental do uso de H₂ a frações elevadas, com impacto direto no cumprimento dos limites de emissão regulamentares aplicáveis à indústria cerâmica. As emissões de CO₂ receberam um peso de 25 % apesar de serem o motor central da descarbonização, a sua redução é em grande medida proporcional à fração de H₂ e correlacionada com as outras variáveis, pelo que um peso ligeiramente inferior evita uma dupla penalização das misturas com muito H₂ que já são favorecidas pelo critério de temperatura. A queda de pressão total recebeu o menor peso (15 %), por ter impacto sobretudo nos custos operacionais de ventilação, sem comprometer a viabilidade técnica do processo. Para verificar a robustez desta escolha, avaliou-se o efeito de variações de ± 5 pontos percentuais nos pesos de cada critério em todas as configurações testadas, a mistura de 30 % H₂/70 % CH₄ manteve-se entre as três mais bem classificadas, confirmando que a conclusão não é sensível a ajustes razoáveis da ponderação adotada.

Importa enquadrar estes resultados face à literatura existente. No estudo CFD mais próximo do presente trabalho [13], identificaram a gama de 10-15 % H₂ como o intervalo de operação mais equilibrado num forno cerâmico multi-queimador. O presente trabalho identifica 30 % H₂ como solução de compromisso, uma fração superior. Esta diferença resulta de vários fatores no artigo de referência utilizou-se um forno multi-queimador com geometria e condições de operação diferentes, onde a uniformidade térmica é o critério dominante e a formação de NO_x se distribui por múltiplos queimadores. O IDC aqui proposto pondera explicitamente o ganho térmico no forno, métrica que não foi considerada naquele estudo, o que favorece misturas que mantêm um diferencial térmico elevado entre entrada e saída do forno e a abordagem integrada queimador-forno adotada neste trabalho captura a evolução das emissões de NO ao longo de todo o sistema, mostrando que para misturas até 80 % H₂ o forno promove decomposição líquida

de NO, o que altera a avaliação ambiental global face a uma análise isolada do queimador. Por outro lado, num estudo de queimadores industriais com H₂ até 20 % [11], reportaram que a redução de CO₂ de 5,8 % para 20 % H₂ vem já acompanhada de um aumento mensurável de NO_x e temperatura de exaustão, o que é consistente com os resultados aqui obtidos para esta faixa de misturas. A eficiência térmica do sistema obtida neste trabalho, estável entre 50,9% e 58,4 %, é coerente com os valores típicos reportados na literatura para fornos cerâmicos industriais de rolos alimentados a gás natural, onde perdas de mais de 50 % da energia de entrada são correntes [9], confirmando a representatividade física do modelo desenvolvido.

Os resultados identificam a mistura de 30 % H₂/70 % CH₄ como a recomendação de compromisso para a indústria cerâmica portuguesa, com o IDC mais elevado (0,6255): combina uma redução de CO₂ de 23,8 %, emissões de NO ainda muito reduzidas, um ganho térmico no forno de 302,7 K próximo dos valores do CH₄ puro, e a menor queda de pressão total do sistema entre as misturas estudadas.

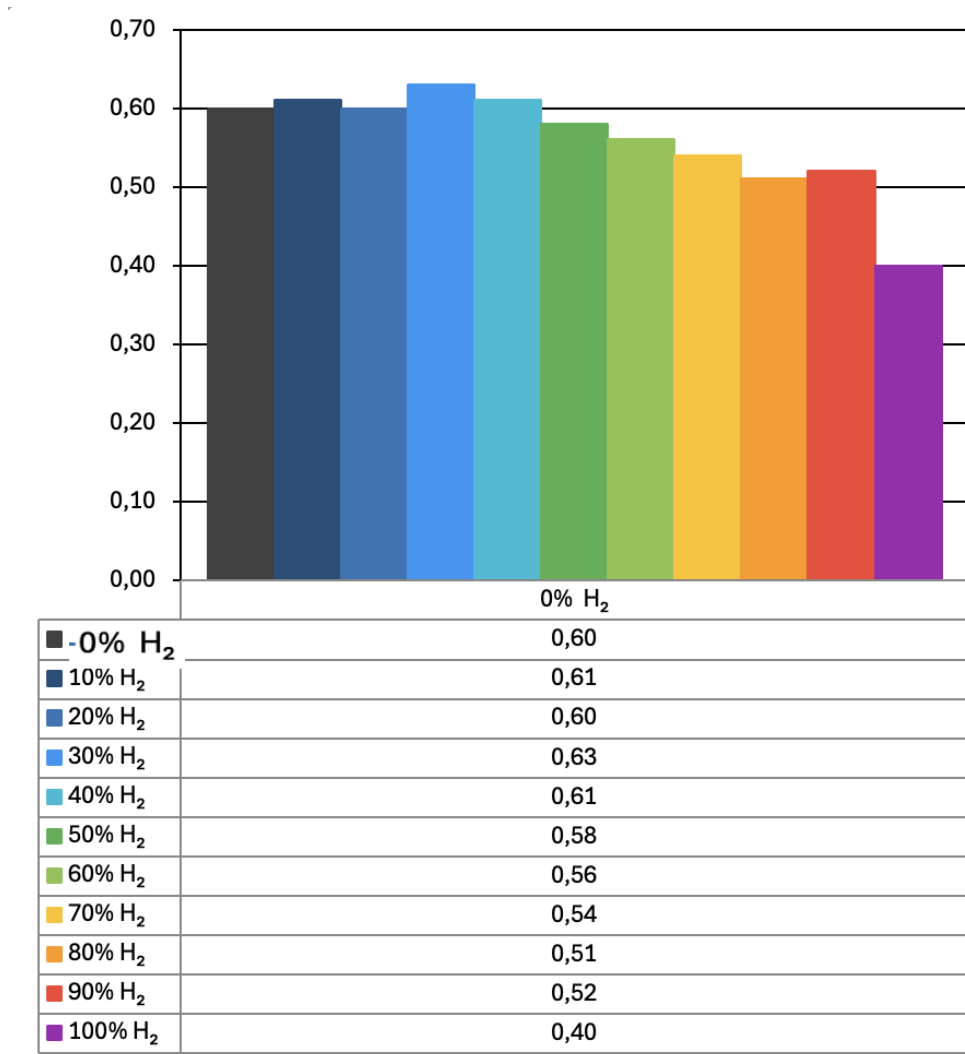


Figura 27- Índice de Desempenho Combinado (IDC)

Foram realizadas simulações para as onze composições de combustível estudadas (100 % CH₄ a 100% H₂) no forno de 4 queimadores. A principal vantagem da configuração de 4 queimadores em estrela, e a mais relevante para a aplicação industrial em análise, reside na temperatura média dos gases na saída do forno, Figura 28. Para todas as composições de combustível, esta é superior em 270 K a 290 K relativamente à configuração de 1 queimador, um incremento de aproximadamente 25 %. Esta diferença resulta da distribuição mais homogênea do campo térmico no interior do forno proporcionada pela injeção múltipla, que aumenta a área de contacto entre a chama e os gases de processo e melhora a transferência de calor global. Em termos práticos, uma temperatura de saída mais elevada traduz-se numa maior eficiência energética do processo de aquecimento.

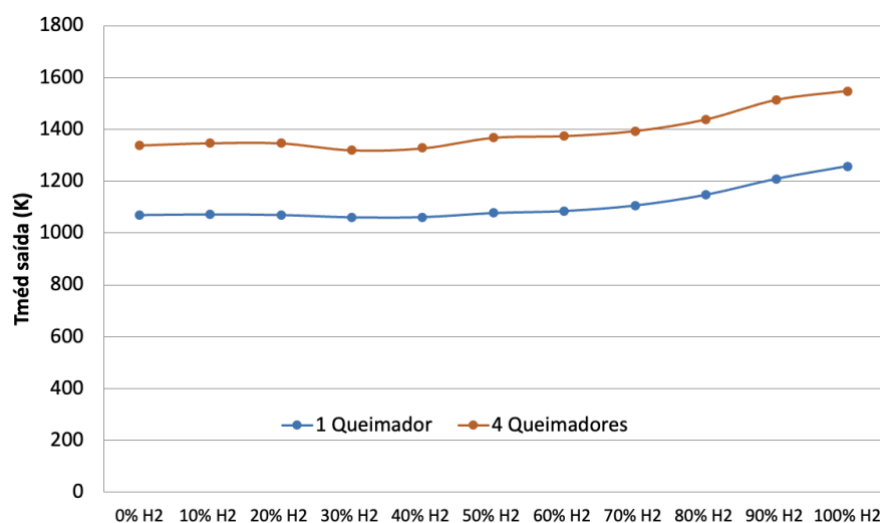


Figura 28 - $T_{\text{méd}}$ à saída (K) para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

Em contraste, a temperatura máxima no domínio tabela A-8 é praticamente idêntica nas duas configurações, com diferenças inferiores a 25 K para todos os blends. Este resultado demonstra que o pico de temperatura é governado pelas propriedades termoquímicas do combustível não pela geometria dos queimadores.

A queda de pressão ΔP , Figura 29, é cerca de 5 a 6 vezes superior na configuração de 4 queimadores para todos os blends, reflexo das maiores velocidades de injeção e do maior número de entradas.

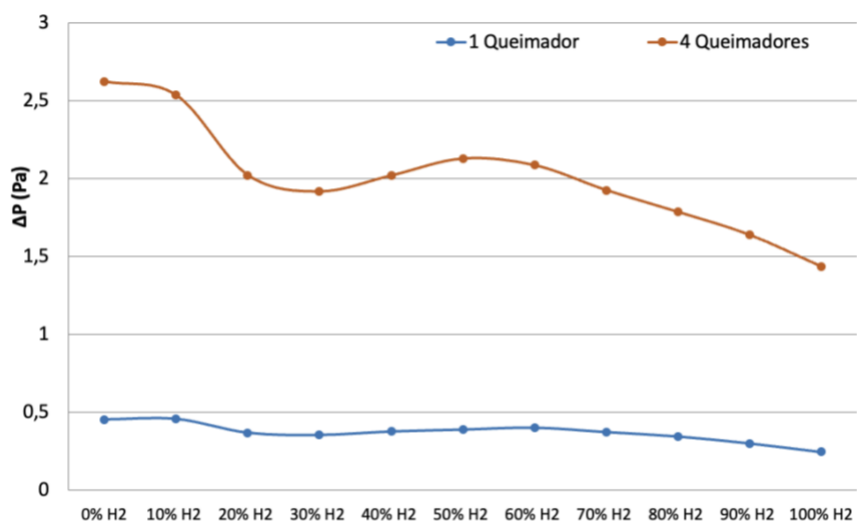


Figura 29- Queda de pressão (Pa) para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

As emissões de NO_x Figura 30 crescem acentuadamente para frações de H₂ superiores a 70 % em ambas as configurações, reflexo da formação de NO térmico pelo mecanismo de Zeldovich, que é exponencialmente dependente da temperatura. A configuração de 4 queimadores apresenta emissões de NO_x ligeiramente superiores (≈ 51 % para 100 % H₂), consistentes com as temperaturas máximas marginalmente mais elevadas. A composição dos produtos de combustão tabela A-8 é, como esperado, praticamente idêntica nas duas configurações, uma vez que é determinada pela estequiometria da reação a fracção de CO₂ decresce monotonicamente com o teor de H₂, anulando-se para combustível puro, enquanto a de H₂O aumenta na mesma proporção.

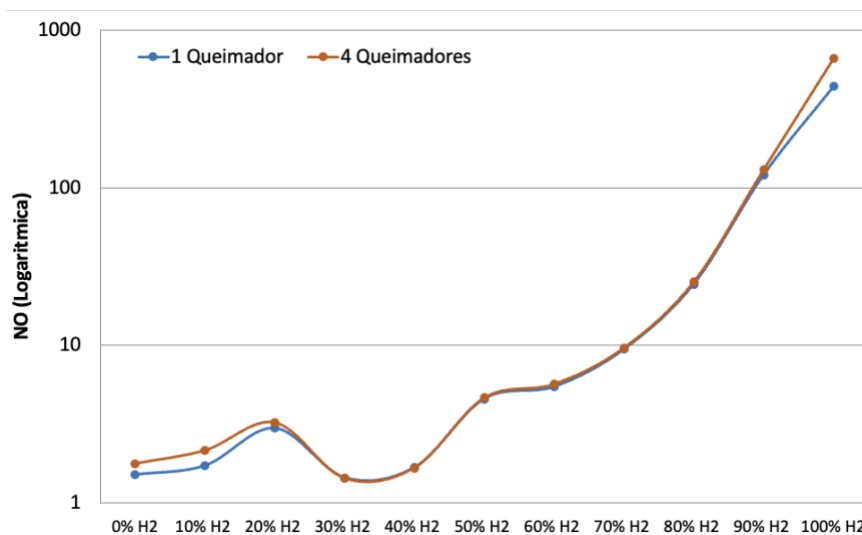


Figura 30- Emissões de NO à saída (ppm) para diferentes proporções de H₂ na mistura com CH₄

Em síntese, a configuração de 4 queimadores em estrela apresenta vantagens operacionais e energéticas claras maior temperatura de saída, chama mais compacta e campo térmico mais uniforme sem penalização significativa em termos de emissões ou queda de pressão.

4.3. Tentativa de simulação com peça cerâmica no interior do forno

Foi ainda desenvolvida uma geometria adicional do forno que incluía uma peça cerâmica no interior do domínio computacional, Figura 31, com o objetivo de avaliar o impacto das diferentes misturas H_2/CH_4 na transferência de calor para o produto durante o processo de cozedura.

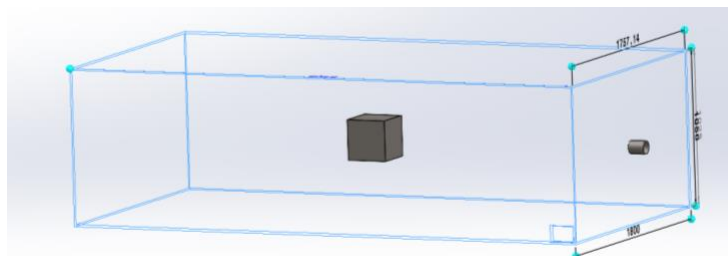


Figura 31-Geometria de forno com peça cerâmica

A peça cerâmica foi modelada como um sólido de geometria paralelepípedica, representativo de uma peça de revestimento cerâmico típica, posicionada na zona central do forno de forma a maximizar a sua exposição ao escoamento de gases quentes. A sua inclusão no domínio implicou a criação de uma interface fluido-sólido e a ativação do modelo de condução de calor no sólido.

A malha gerada para esta configuração apresentou uma complexidade significativamente superior à do forno sem peça, aumentando de aproximadamente 274 244 elementos para cerca de 2 190 000 elementos. Esta diferença resultou sobretudo da presença da peça cerâmica, que introduziu interfaces fluido-sólido adicionais e canais de escoamento confinados entre a peça e as paredes do forno. Apesar de cerca de 96% das células apresentarem qualidade ortogonal superior ao limiar aceitável de 0,1, foram identificadas zonas localizadas com valores mínimos entre 0,045 e 0,070, principalmente nas regiões de transição geométrica junto à peça. Nessas mesmas regiões, a razão de aspeto máxima atingiu valores da ordem de 80, evidenciando a presença de células alongadas nos canais estreitos de escoamento. Mesmo após refinamento localizado, com tamanhos mínimos de célula próximos de 0,5 mm, a densidade de células nestas zonas críticas permaneceu limitada para resolver adequadamente os gradientes locais de temperatura e velocidade.

5. Conclusões

O presente trabalho permitiu avaliar, recorrendo à utilização de modelos tridimensionais em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), o impacto técnico e fluidodinâmico da incorporação progressiva de hidrogénio no gás de alimentação de queimadores industriais, contribuindo para a descarbonização parcial dos fornos da indústria cerâmica.

No que respeita ao queimador modelado, verificou-se que a substituição gradual do CH_4 por H_2 promove um aumento contínuo da temperatura e da velocidade dos gases à saída, acompanhado por uma redução de comprimento da chama e pela sua aproximação ao queimador. A chama evoluiu de aproximadamente 0,40 m, localizada a cerca de 1,50 m da entrada para metano puro, para cerca de 0,20 m e 1,00 m quando alimentada exclusivamente com hidrogénio. Paralelamente, observou-se uma alteração significativa na composição dos produtos, com redução de CO_2 e um aumento acentuado de NO_x para frações de hidrogénio superiores a 60 %. Entre os casos extremos, a temperatura média dos gases à saída do queimador aumentou *ca.* 65 %, constituindo estas condições de escoamento as fronteiras de entrada utilizadas na simulação do forno.

A análise integrada do forno demonstrou que, embora a temperatura absoluta dos gases aumente com a incorporação de hidrogénio, o ganho térmico efetivamente promovido pelo volume do forno não é favorecido com o aumento da fração de H_2 , passando de 388,5 K para metano puro para 137,9 K no caso de hidrogénio puro. Este comportamento evidencia que gases mais quentes à entrada reduzem a capacidade do forno para acrescentar energia térmica ao processo, constituindo um contributo original deste trabalho e um indicador mais representativo do desempenho industrial do que a simples temperatura de saída. Apesar desta tendência, a eficiência térmica global manteve-se praticamente constante, variando apenas entre 50,9 % e 58,4 %, o que demonstra a robustez operacional do sistema para todas as misturas estudadas.

Do ponto de vista ambiental, verificou-se uma redução progressiva das emissões de CO_2 à saída do forno, atingindo 23,8 % para a mistura com 30 % H_2 e eliminando completamente estas emissões no cenário de 100 % H_2 . Contudo, esta redução revelou um comportamento não linear, apresentando rendimentos decrescentes entre 30 % e 60 % de hidrogénio. Em contrapartida, as emissões de NO_x permaneceram reduzidas para baixas frações de H_2 , aumentando de forma significativa apenas para misturas superiores a 80 %, evidenciando o compromisso existente entre descarbonização e formação de óxidos de azoto.

A comparação entre as configurações de um queimador e quatro queimadores dispostos em estrela demonstrou que a injeção múltipla melhora significativamente a transferência de calor para os gases de processo, proporcionando temperaturas médias de saída superiores em cerca de 270-290 K, correspondentes a um aumento aproximado de 25 % para todas as composições de combustível. Em contraste, a temperatura máxima no interior do forno apresentou

diferenças inferiores a 25 K, indicando que o pico térmico é predominantemente controlado pela termoquímica do combustível e não pela configuração geométrica dos queimadores. Embora a queda de pressão seja cinco a seis vezes superior na configuração com quatro queimadores, os valores absolutos permanecem inferiores a 3 Pa, não representando limitações operacionais. As emissões de NO revelaram apenas um ligeiro aumento para misturas mais ricas em hidrogénio.

A avaliação conjunta dos critérios térmicos, ambientais e fluidodinâmicos, sintetizados através do Índice de Desempenho Combinado (IDC), permitiu identificar a mistura composta por 30 % H_2 / 70 % CH_4 como a solução de compromisso para a indústria cerâmica. Esta mistura proporciona uma redução de CO_2 de 23,8 % face ao metano puro, mantém emissões de NO reduzidas, preserva um ganho térmico no forno próximo do caso de referência e apresenta a menor queda de pressão total do sistema. Acresce que esta composição é diretamente compatível com o produto da clivagem catalítica do metano, podendo ser implementada sem modificações significativas nos queimadores nem na infraestrutura da rede existente. A configuração de quatro queimadores em estrela reforça esta recomendação, uma vez que potencia a transferência de calor para os gases de processo e torna o sistema ainda menos sensível à variação de composição do combustível ao longo do tempo.

Em síntese, este trabalho demonstra que a incorporação moderada de hidrogénio constitui uma estratégia tecnicamente viável para reduzir a pegada carbónica dos fornos cerâmicos sem comprometer o desempenho térmico do processo. Os resultados obtidos fornecem critérios quantitativos para apoiar a transição energética da indústria cerâmica e evidenciam que a otimização da fração de hidrogénio deve resultar do equilíbrio entre eficiência térmica, redução de emissões e viabilidade operacional, em detrimento da maximização isolada da substituição do metano.

Não obstante os resultados obtidos e as conclusões apresentadas, importa reconhecer de forma crítica um conjunto de limitações inerentes ao trabalho desenvolvido. Em primeiro lugar, o modelo de queimador não dispõe de validação experimental direta a geometria foi baseada numa referência bibliográfica e a consistência física dos resultados foi avaliada por comparação qualitativa com tendências reportadas na literatura para geometrias similares, mas não foi possível comparar com dados experimentais do queimador específico simulado. Em segundo lugar, os critérios de convergência das simulações CFD não cumpriram integralmente a recomendação de redução de quatro ordens de grandeza nos resíduos normalizados [33], tendo a solução sido aceite com base na estabilização dos monitores de variáveis de interesse critério que, embora prático e amplamente adotado em escoamentos reativos de elevada complexidade, introduz uma incerteza adicional nos resultados que não é quantificável pelo método GCI. Em terceiro lugar, todas as simulações foram realizadas em regime estacionário, o que não captura os efeitos transientes associados ao ciclo real de cozedura cerâmica, onde as temperaturas de entrada variam ao longo do tempo. Em quarto lugar, o forno foi simulado

sem peça cerâmica no interior a tentativa de incluir o sólido cerâmico não convergiu dentro do prazo disponível, como descrito na secção 4.4, o que limita a extrapolação direta dos resultados para condições de operação industrial real. Por fim, o Índice de Desempenho Combinado (IDC), embora metodologicamente coerente e testado quanto à sensibilidade dos pesos, é uma ferramenta criada especificamente para este trabalho e não validada experimentalmente, sendo a sua utilidade dependente da representatividade dos pesos escolhidos para o contexto da indústria cerâmica portuguesa.

Como perspetivas de trabalho futuro, recomenda-se a validação experimental dos resultados numéricos junto de um forno industrial real, o estudo do impacto do aumento da fração mássica de água no interior do forno sobre a qualidade do produto cerâmico em processos sensíveis à humidade, a análise completa com peça cerâmica no interior do forno para todas as misturas estudadas e a avaliação do sistema em regime de oxidação como via de descarbonização mais profunda com captura facilitada de CO_2 .

6. Avaliação do trabalho realizado

6.1. Objetivos Realizados

Objetivo 1 – Modelar em CFD um queimador cerâmico de referência alimentado a gás natural, totalmente cumprido. Foi desenvolvida uma geometria de queimador baseada na referência [16], posteriormente simplificada para garantir estabilidade numérica, e realizada a simulação para 100 % CH_4 com convergência adequada e resultados fisicamente consistentes.

Objetivo 2 – Modelar o mesmo queimador alimentado com as misturas H_2/CH_4 , totalmente cumprido e expandido. Foram simuladas onze composições distintas, desde 10 % H_2 até 100 % H_2 em incrementos de 10 %, cobrindo um intervalo mais abrangente do que o inicialmente previsto e permitindo uma caracterização sistemática do comportamento do queimador ao longo de toda a gama de transição $\text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2$.

Objetivo 3 – Modelar em CFD um forno cerâmico de referência, totalmente cumprido. Foi desenvolvida e validada uma geometria de forno adaptada de [29], e realizadas as simulações para o caso base, após o processo iterativo de ajuste do domínio descrito no Capítulo 4.

Objetivo 4 – Modelar o mesmo forno alimentado com as misturas H_2/CH_4 , totalmente cumprido. As simulações do forno foram realizadas para todas as onze misturas, utilizando como condições de fronteira os resultados do queimador, garantindo a coerência física do sistema integrado.

Objetivo 5 – Comparar os cenários em termos de temperatura, emissões e eficiência, totalmente cumprido. A análise comparativa foi realizada de forma sistemática para todas as misturas, com recurso a tabelas, gráficos e ao Índice de Desempenho Combinado, identificando a mistura de compromisso recomendada.

Objetivo 6 – Avaliar o comportamento de uma peça cerâmica no interior do forno, iniciado. A geometria com peça cerâmica foi desenvolvida, em ambiente CAD mas não foi possível continuar no software Ansys devido a inconsistências na malha.

6.2. Contribuição para os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável

O trabalho alinha-se com pelo menos três dos ODS da Agenda 2030 das Nações Unidas. O contributo mais direto é para o ODS 7 (Energia Limpa e Acessível), ao avaliar uma rota de descarbonização parcial que preserva a viabilidade económica do setor cerâmico sem exigir a substituição total da infraestrutura existente. A mistura de 30 % H_2 identificada como solução de compromisso representa uma redução de 23,8 % de CO_2 com custos operacionais próximos dos atuais. Em paralelo, verifica-se alinhamento com o ODS 13 (Ação Climática), com a redução de emissões de CO_2 em linha com os objetivos do Pacote Fit for 55 e do European Green Deal como motor central da investigação. O trabalho contribui também para o ODS 9 (Indústria, Inovação e Infraestrutura), ao desenvolver uma metodologia CFD integrada queimador-forno

aplicável como ferramenta de suporte à decisão de engenharia para a transição energética do setor cerâmico.

6.3. Apreciação Final

O trabalho desenvolvido ao longo desta dissertação permitiu adquirir competências aprofundadas em modelação CFD de sistemas de combustão industrial, desde a construção e validação de geometrias complexas até à interpretação física de resultados em escoamentos reativos de alta temperatura. A utilização do ANSYS Fluent como plataforma de simulação revelou-se tecnicamente exigente, em particular na gestão da convergência numérica em geometrias com zonas de mistura intensas e na implementação de mecanismos cinéticos detalhados como o GRI-mech 3.0. A necessidade de iterar sobre as geometrias do queimador e do forno ao longo do projeto, embora inicialmente frustrante, revelou-se um processo de aprendizagem valioso, a capacidade de identificar as causas de instabilidade numérica e de as resolver de forma fundamentada constitui uma competência de engenharia que dificilmente se adquire fora de um contexto de projeto real.

Do ponto de vista do impacto industrial, os resultados obtidos fornecem uma base técnica sólida para apoiar decisões de investimento na descarbonização parcial dos fornos cerâmicos portugueses, em particular através da introdução de misturas H_2/CH_4 produzidas por clivagem catalítica. A identificação da mistura de 30 % H_2 como solução de compromisso, combinando redução significativa de CO_2 com viabilidade operacional e emissões de NO controladas, representa uma contribuição concreta e aplicável ao contexto industrial nacional, alinhada com os objetivos do Plano Nacional para o Hidrogénio e com as metas climáticas da União Europeia para 2030.

7. Referências

- [1] European Commission. (2023, 9 de outubro). Commission welcomes completion of key 'Fit for 55' legislation, putting EU on track to exceed 2030 targets. Acedido em março de 2026. https://cyprus.representation.ec.europa.eu/news/commission-welcomes-completion-key-fit-55-legislation-putting-eu-track-exceed-2030-targets-2023-10-09_en
- [2] COMPETE 2030. (2024, 29 de abril). Indústria cerâmica portuguesa: Uma evolução sustentável. Acedido em março de 2026. <https://www.compete2030.gov.pt/comunicacao/industria-ceramica-portuguesa-uma-evolucao-sustentavel/>
- [3] Moghaddam, A. L., Hejazi, S., Fattahi, M., Kibria, M. G., Thomson, M. J., AlEisa, R., & Khan, M. A. (2025). Methane pyrolysis for hydrogen production: Navigating the path to a net zero future. *Energy & Environmental Science*, 18, 2747-2790. <https://doi.org/10.1039/D4EE06191H>
- [4] Bureau, European Commission / European IPPC. (2007). Reference document on best available techniques in the ceramic manufacturing industry. European Commission. https://eippcb.jrc.ec.europa.eu/sites/default/files/2019-11/cer_bref_0807.pdf
- [5] Reaney, I. M., Walsh, B., & Vilarinho, P. M. (2023). Resource efficiency and energy efficiency (REEE) in the Portuguese ceramic industry: Towards net zero carbon production. *Open Ceramics*, 15, 100390. <https://doi.org/10.1016/j.oceram.2023.100390>
- [6] Gargori, C., Granel, R., Vaquer, E., Morós, G., Mallol Gasch, G., Mezquita, A., & Monfort, E. (2010). Study of combustion in industrial ceramic tile manufacturing kilns. In *Qualicer 2010: World Congress on Ceramic Tile Quality*. Castellón de la Plana, Spain. <https://www.qualicer.org/recopilatorio/ponencias/descargar.php?anyo=2010&idfile=2010263&lang=eng>
- [7] Fan, G., Chen, M., Wang, C., Feng, Q., Sun, Y., Xu, J., Du, Y., & Che, D. (2024). Numerical study on oxy-fuel combustion characteristics of industrial furnace firing coking dry gas. *Energy*, 286, 129643. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.129643>
- [8] International Energy Agency. (2019). The future of hydrogen: Seizing today's opportunities. International Energy Agency. <https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen>
- [9] British Ceramic Confederation. (2022). Hydrogen for the ceramics sector: IFS feasibility report. British Ceramic Confederation.
- [10] Çeper, B. A. (2012). Use of hydrogen-methane blends in internal combustion engines. In D. M. Minić (Ed.), *Hydrogen energy: Challenges and perspectives*. IntechOpen. <https://doi.org/10.5772/50597>
- [11] Salcı, O., & Öztuna, S. (2025). Modeling of hydrogen blending natural gas combustion characteristics and emission analyses in industrial burners. *International Journal of Hydrogen Energy*, 144, 782-797. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.03.310>
- [12] Amaduzzi, R., Ferrarotti, M., & Parente, A. (2021). Strategies for hydrogen-enriched methane flameless combustion in a quasi-industrial furnace. *Frontiers in Energy Research*, 8, 590300. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2020.590300>
- [13] Bayramoğlu, K., Yılmaz, S., Bayramoğlu, T., Özarslan, A., Akbay, A., & Zarslan, A. Ö. (2026). CFD-based evaluation of hydrogen-methane blends on temperature uniformity and emission control in ceramic furnaces. *International Journal of Hydrogen Energy*, 203, 153176. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.153176>
- [14] Aliyu, M., Nemitallah, M. A., & Habib, M. A. (2024). Impact of excess air factor on performance and NOx emissions of an industrial water tube boiler with hydrogen enrichment. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 18(1), 2431102. <https://doi.org/10.1080/19942060.2024.2431102>
- [15] Modest, M. F. (2013). Fundamentals of thermal radiation. In *Radiative heat transfer* (3rd ed., pp. 1-30). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-386944-9.50001-7>

- [16] Cavazzuti, M., Corticelli, M. A., Nuccio, A., & Zauli, B. (2013). CFD analysis of a syngas-fired burner for ceramic industrial roller kiln. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 227(11), 2600-2609. <https://doi.org/10.1177/0954406213477340>
- [17] Mastorakos, E. (2009). Ignition of turbulent non-premixed flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(1), 57-97. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2008.07.002>
- [18] Gran, I. R., & Magnussen, B. F. (1996). A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 2: Influence of combustion modeling and finite-rate chemistry. *Combustion Science and Technology*, 119(1-6), 191-217. <https://doi.org/10.1080/00102209608951999>
- [19] Malalasekera, W., Versteeg, H. K., Henson, J. C., & Jones, J. C. (2002). Calculation of radiative heat transfer in combustion systems. *Clean Air: International Journal*, 3(1). <https://doi.org/10.1080/15614410211849>
- [20] ANSYS, Inc. (2024). Conservation equations. ANSYS Fluent Theory Guide. Acedido em março de 2026. https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v242/en/flu_th/x1-110002.2.html?q=conservation%20equations
- [21] ANSYS, Inc. (2025). Ansys Fluent Theory Guide. Acedido em março de 2026. https://ansyshelp.ansys.com/public/Views/Secured/corp/v261/en/pdf/Ansys_Fluent_Theory_Guide.pdf
- [22] ANSYS, Inc. (2025). Dynamic mesh conservation equations. ANSYS Fluent Theory Guide. Acedido em março de 2026. https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v242/en/flu_th/flu_th_dynam_mesh_cons_eqns.html?q=conservation%20equations
- [23] ANSYS, Inc. (2009). 4.5.2 Shear-Stress Transport (SST) $k-\omega$ model. In ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide. ANSYS, Inc.
- [24] CERFACS CFD Group. (2004). Combustion. CERFACS. <https://www.cerfacs.fr>
- [25] Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner Jr., Vitali V. Lissianski, & Zhiwei Qin. (n.d.). GRI-Mech 3.0. Acedido em abril de 2026. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [26] Lignell, D. (2013). EDM/EDC combustion models. Brigham Young University, Department of Chemical Engineering. Acedido em março de 2026. https://ignite.byu.edu/che641/lectures/edm_edc/
- [27] Rückert, F. (2020, dezembro). Simulation of a natural gas burner using additional hydrogen - ANSYS Fluent [Video]. YouTube. Acedido em maio de 2026. <https://www.youtube.com/watch?v=NyaxpnWSo7M>
- [28] Lu, Z., Li, X., & Tang, Z. (2025). Natural gas combustion furnaces with air and flue gas mixing: Numerical study and industrial application. *Case Studies in Thermal Engineering*, 73, 106638. <https://doi.org/10.1016/j.csite.2025.106638>
- [29] Possamai, T. S., Oliveira, R. O. V. P. N., & colleagues. (2009). Numerical simulation of a ceramic kiln used in frits production. In *Proceedings of the 20th International Congress of Mechanical Engineering*, Gramado, RS, Brazil.
- [30] Kazemian, M. (2024, outubro). Aplicação análise CFD: Malha computacional e simplificação do modelo. Dlubal Software. Acedido em maio de 2026. <https://www.dlubal.com/pt/download-e-informacao/documentos/manuais-online/aplicacao-analise-cfd/005838>
- [31] Dlubal. (2024). Malha computacional e simplificação do modelo. In RWIND 3. Dlubal Software. <https://www.dlubal.com>
- [32] L. F. (2016, julho). Avaliação da qualidade da malha. Notas em CFD. Acedido em abril de 2026. <http://notasemcfd.blogspot.com/2015/07/avaliacao-da-qualidade-da-malha.html>

- [33] Celik, I. B., Ghia, U., Roache, P. J., Freitas, C. J., Coleman, H., & Raad, P. E. (2008). Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. *Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME*, 130(7), 078001. <https://doi.org/10.1115/1.2960953>
- [34] Kapucu, M., & Kok, J. B. W. (2023). CFD-based prediction of combustion dynamics and nonlinear flame transfer functions for a swirl-stabilized high-pressure combustor. *Energies*, 16(6), 2515. <https://doi.org/10.3390/en16062515>
- [35] Xiao, J., Liu, Q., He, S., Wang, S., & Zhang, Z. (2024). Prediction and optimization of combustion performance and emissions for lean methane-hydrogen non-premixed flame using RSM-PSO methodology. *International Journal of Hydrogen Energy*, 85, 242-251. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.08.234>
- [36] Combustion Engineering Association. (2024). Proposed emission limit values for hydrogen and non-conventional fuels. Combustion Engineering Association. <https://cea.org.uk/wp-content/uploads/2024/02/Proposed-Emission-Limit-Values-for-Hydrogen-and-Non-Conventional-Fuels.pdf>
- [37] Sun, Y., Zhang, Y., Huang, M., Li, Q., Wang, W., Zhao, D., Cheng, S., Deng, H., Du, J., Song, Y., Li, H., & Xu, H. (2022). Effect of hydrogen addition on the combustion and emission characteristics of methane under gas turbine relevant operating condition. *Fuel*, 324, 124707. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.124707>
- [38] Douglas, C. M., Emerson, B. L., Lieuwen, T. C., Martz, T., Steele, R., & Noble, B. (2022). NOx emissions from hydrogen-methane fuel blends. Georgia Institute of Technology, Strategic Energy Institute, and Electric Power Research Institute. <https://doi.org/10.35090/GATECH/65963>
- [39] Leicher, J., Schaffert, J., Carpentier, S., Albus, R., & Görner, K. (2020). Impact of hydrogen admixture on combustion processes: Part I: Theory. THyGA Project, Deliverable D2.2. <https://thyga-project.eu/deliverable-d2-2-impact-of-hydrogen-admixture-on-combustion-processes-part-i-theory/>
- [40] Lima, A. (2024). Geração de energia elétrica: Combustíveis. Acedido em junho de 2026. <https://www.antoniolima.web.br.com/arquivos/combustiveis.htm>
- [41] Engineering ToolBox. (2023). Gases: Absolute dynamic viscosity. Acedido em junho de 2026. https://www.engineeringtoolbox.com/gases-absolute-dynamic-viscosity-d_1888.html
- [42] Rodrigues, M. S. P., & Rodrigues, T. S. (2024). A influência do hidrogênio em motores a combustão interna com etanol: Um estudo compreensivo. Universidade Federal do Paraná, Repositório Acervo Digital.
- [43] Brahmasakh, C. (2021). Forno gás cerâmico utilizando numa fábrica de demonstração [Fotografia]. Dreamstime. Acedido em março de 2026. <https://pt.dreamstime.com/forno-gás-cerâmico-utilizando-numa-fábrica-de-demonstração-uma-escola-design-industrial-médio-porte-que-utiliza-image197210806>
- [44] HyLab. (2021). HyLab: Green Hydrogen Collaborative Laboratory. Acedido em março de 2026. <https://www.hylab.pt>
- [45] HyLab. (2021). Colab. HyLab: Green Hydrogen Collaborative Laboratory. Acedido em março de 2026. <https://www.hylab.pt/colab/>
- [46] Presidência do Conselho de Ministros. (2020, agosto). Resolução do Conselho de Ministros n.º 63/2020. Diário da República Eletrónico. Acedido em março de 2026. <https://diariodarepublica.pt/dr/detalhe/resolucao-conselho-ministros/63-2020-140346286>
- [47] Hu, D., Hou, W., Hu, L., Yang, L., Yang, Q., & Zhou, J. (2021). Optimal operation region of super-high-speed electrical air compressor in fuel cell system for working stability under multiple-time scale excitation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(38), 20054-20064. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.123>

- [48] Butkowska, K., Mikucka, W., & Pokój, T. (2022). Enhancement of biogas production from cattle manure using glycerine phase as a co-substrate in anaerobic digestion. *Fuel*, 317, 123456. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.123456>
- [49] Wu, Y., Zhang, Y., Li, G., Shen, J., Chen, Z., & Liu, Y. (2020). A predictive energy management strategy for multi-mode plug-in hybrid electric vehicles based on multi neural networks. *Energy*, 208, 118366. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118366>
- [50] Wang, T., Zhang, Y., Zhang, H., & Lyu, J. (2024). Stability and emissions of hydrogen-enriched methane flames on metal fiber surface burners. *International Journal of Hydrogen Energy*, 72, 1308-1320. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.05.465>
- [51] Reis, J. C. D. (2012). Medidas do coeficiente de transferência de calor em fornos combinados. São Caetano do Sul, SP, Brasil.
- [52] Agostinho, J. E. V. (2015). Caracterização e modelação de um forno de produção de cal [Dissertação de mestrado, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa].

Apêndice A-Conteúdo em Apêndice

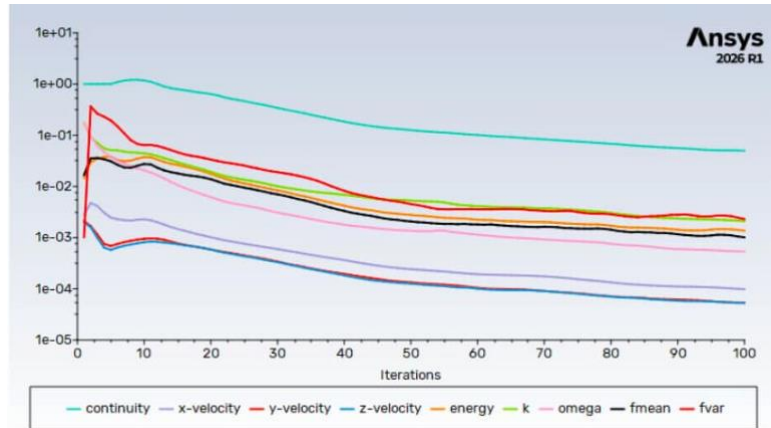


Figura A 1- Resíduos escalados para a malha grossa da geometria do Queimador

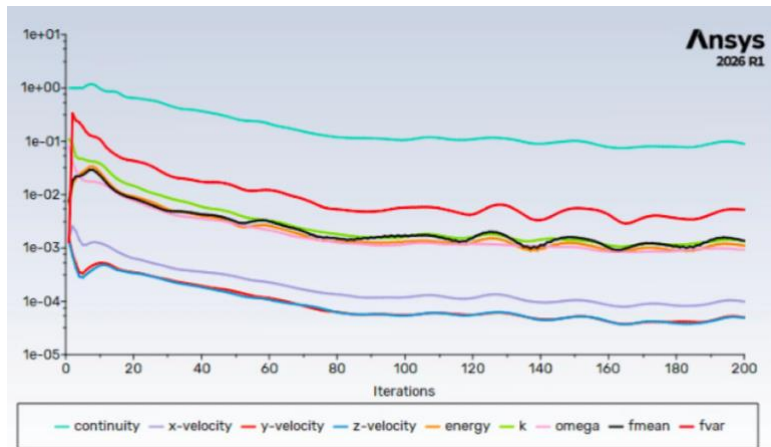


Figura A 2- Resíduos escalados para a malha média da geometria do Queimador

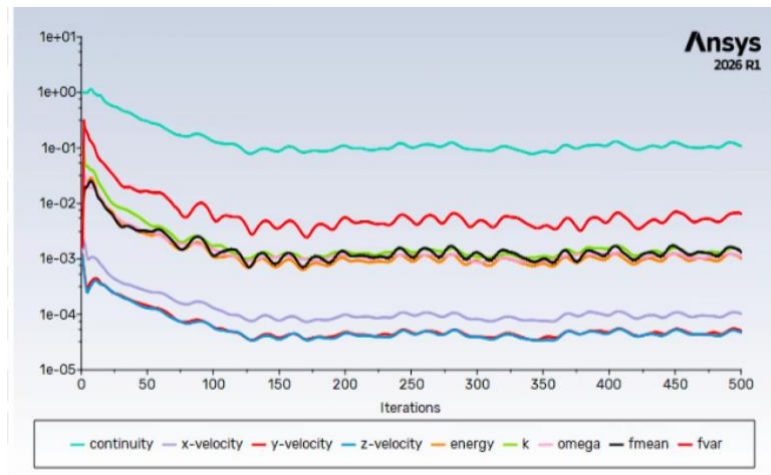


Figura A 3- Resíduos escalados para a malha refinada da geometria do Queimador

Tabela A-1-Resultados CFD das simulações do queimador para as diferentes misturas H₂/CH₄

Parâmetro / Espécie	100% CH ₄	10% H ₂ / 90% CH ₄	20% H ₂ / 80% CH ₄	30% H ₂ / 70% CH ₄	40% H ₂ / 60% CH ₄	50% H ₂ / 50% CH ₄
Temperatura máxima (K)	1961,657	1971,968	1981,771	1988,784	1994,090	2114,548
Temperatura média saída (K)	680,453	688,849	762,177	757,485	752,614	778,537
Velocidade máxima (m/s)	4,402	4,507	4,600	4,549	4,485	4,392
Velocidade média saída (m/s)	0,985	0,992	0,998	1,003	1,023	1,059
Pressão média entrada (Pa)	0,060	0,061	0,058	0,055	0,063	0,097
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	0,060	0,061	0,058	0,055	0,063	0,097
Fração mássica CH ₄ saída	0,121	0,122	0,122	0,132	0,111	0,073
Fração mássica H ₂ saída	0,002	0,004	0,006	0,009	0,012	0,012
Fração mássica O ₂ saída	0,135	0,137	0,135	0,131	0,132	0,133
Fração mássica CO ₂ saída	0,026	0,026	0,025	0,024	0,023	0,022
Fração mássica H ₂ O saída	0,034	0,036	0,038	0,040	0,044	0,051
Fração mássica CO saída	0,018	0,018	0,019	0,019	0,019	0,022
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Comprimento da chama (m)	~0,4	~0,4	~0,35	~0,3	~0,32	~0,3
Posição da chama (m)	~1,5	~1,45	~1,37	~1,3	~1,33	~1,26
Mass imbalance (Kg/s)	0,000	0,003	0,001	0,000	-0,001	-0,002
Parâmetro / Espécie	60% H ₂ / 40% CH ₄	70% H ₂ / 30% CH ₄	80% H ₂ / 20% CH ₄	90% H ₂ / 10% CH ₄	100% H ₂	
Temperatura máxima (K)	2010,945	2110,917	2081,020	2070,219	2189,965	
Temperatura média saída (K)	812,357	873,119	953,026	1038,449	1119,399	
Velocidade máxima (m/s)	4,038	3,979	3,672	3,839	4,341	

Velocidade média saída (m/s)	1,095	1,134	1,175	1,209	1,217
Pressão média entrada (Pa)	0,092	0,073	0,075	0,066	0,048
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	0,092	0,073	0,075	0,066	0,048
Fração mássica CH_4 saída	0,055	0,039	0,022	0,008	0,000
Fração mássica H_2 saída	0,014	0,016	0,017	0,017	0,015
Fração mássica O_2 saída	0,130	0,128	0,128	0,128	0,127
Fração mássica CO_2 saída	0,021	0,019	0,015	0,010	0,000
Fração mássica H_2O saída	0,058	0,067	0,076	0,090	0,111
Fração mássica CO saída	0,023	0,023	0,020	0,014	0,000
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Comprimento da chama (m)	~0,28	~0,25	~0,23	~0,21	~0,2
Posição da chama (m)	~1,2	~1,1	~1,05	~1,01	~1
Mass imbalance (Kg/s)	0,002	-0,002	0,003	0,000	-0,002

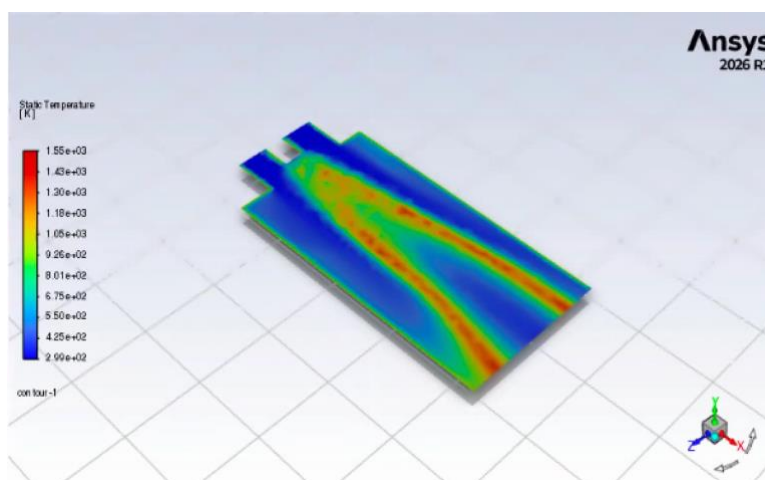


Figura A 4- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 100% CH_4 analisada

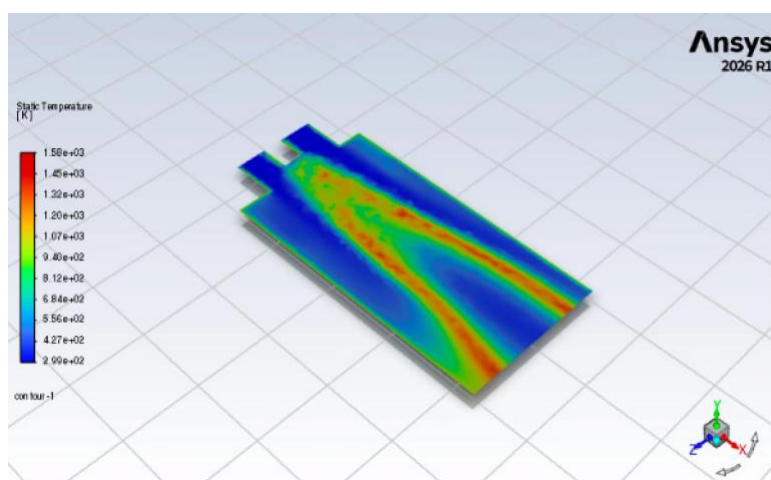


Figura A 5-Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 90% CH_4 /10% H_2 analisada

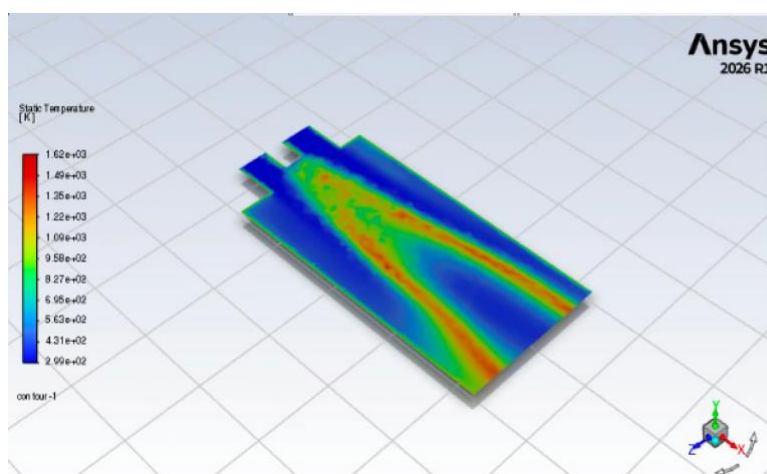


Figura A 6-Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 80% CH_4 /20% H_2 analisada

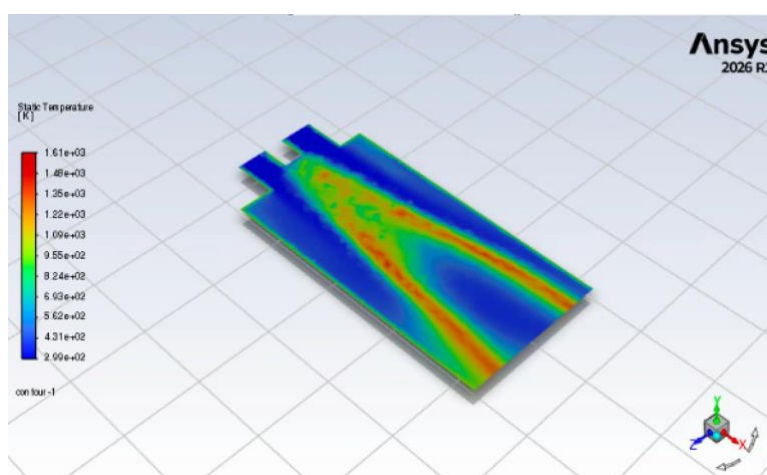


Figura A 7- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 70% CH_4 /30% H_2 analisada

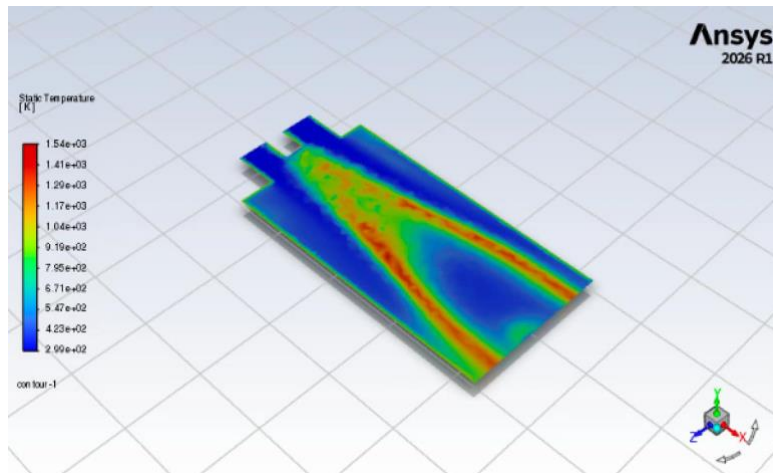


Figura A 8- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 60% CH_4 /40% H_2 analisada

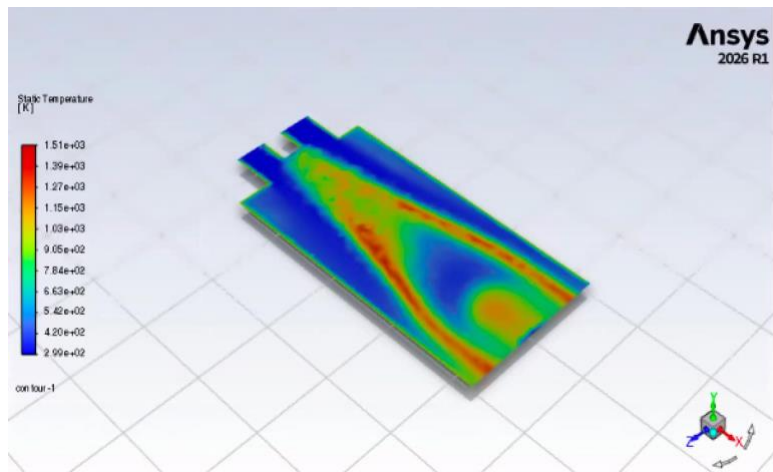


Figura A 9- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 50% CH_4 /50% H_2 analisada

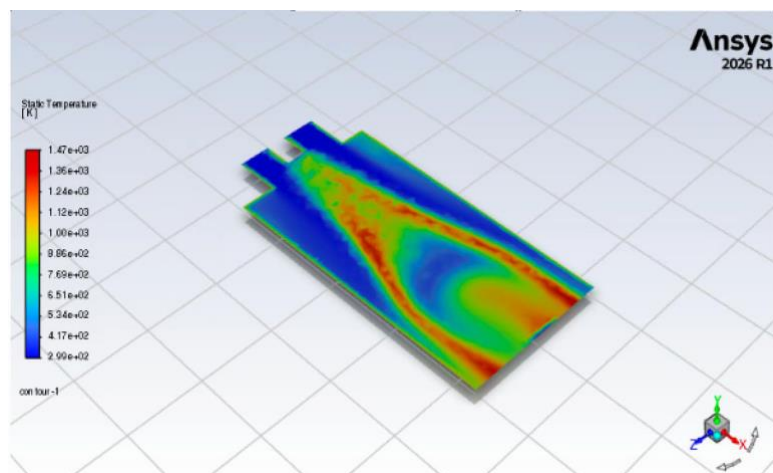


Figura A 10- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 40% CH_4 /60% H_2 analisada

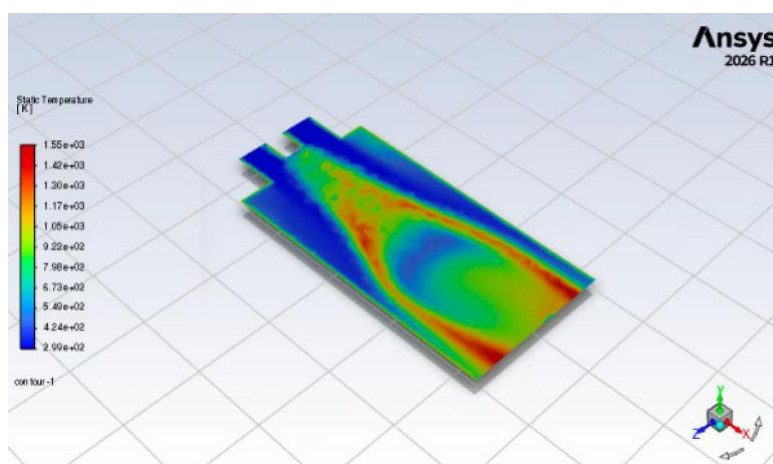


Figura A 11- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 30% CH_4 /70% H_2 analisada

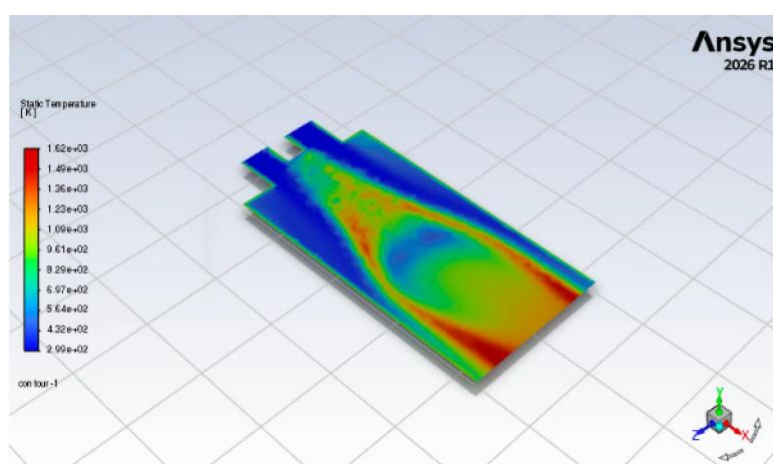


Figura A 12- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 20% CH_4 /80% H_2 analisada

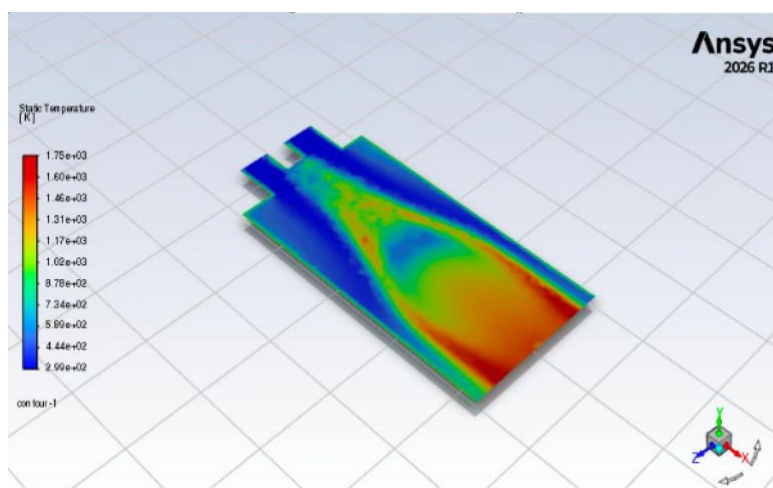


Figura A 13- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 10% CH_4 /90% H_2 analisada

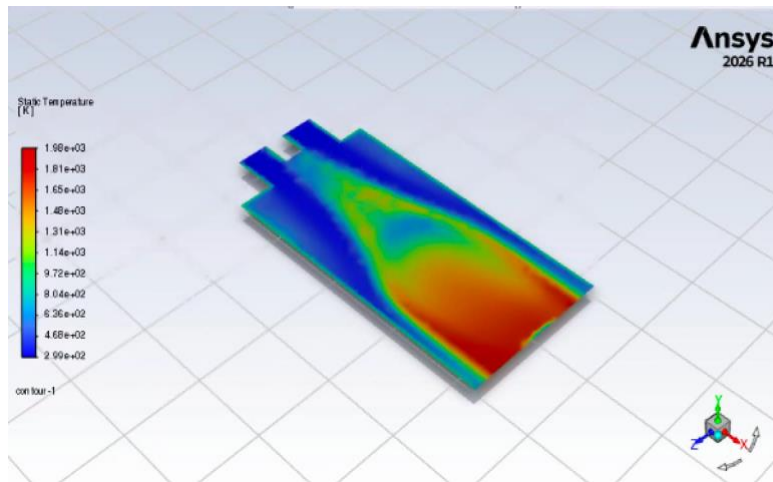


Figura A 14- Distribuição de temperatura estática no domínio do queimador para a mistura 100% H_2 analisada

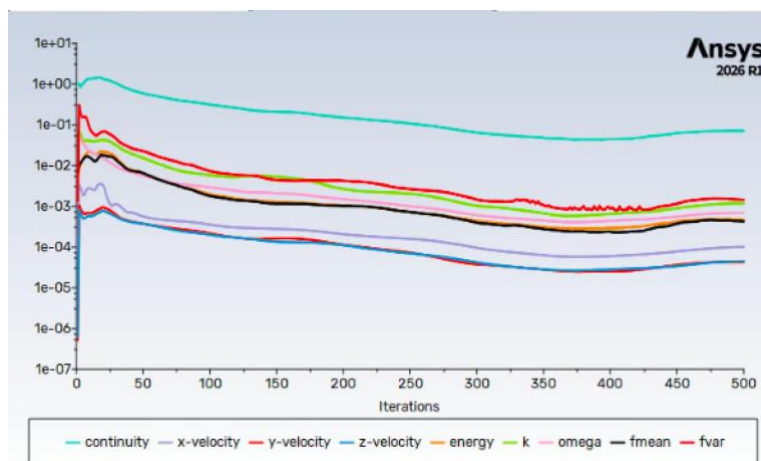


Figura A 15- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 100% CH_4

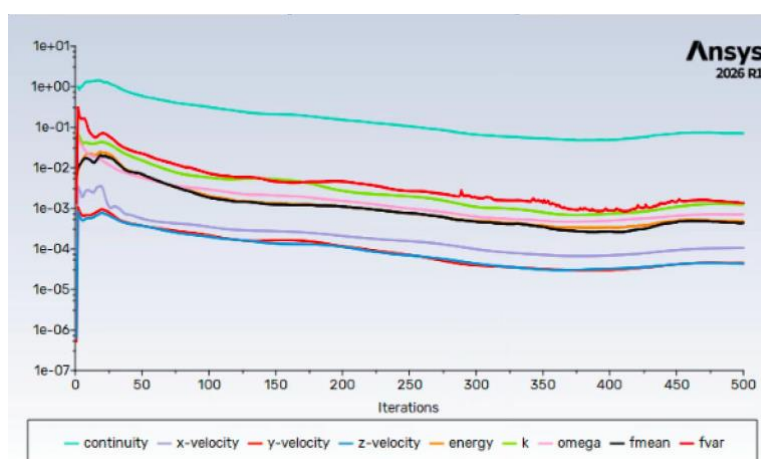


Figura A 16- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 90% CH_4 / 10% H_2

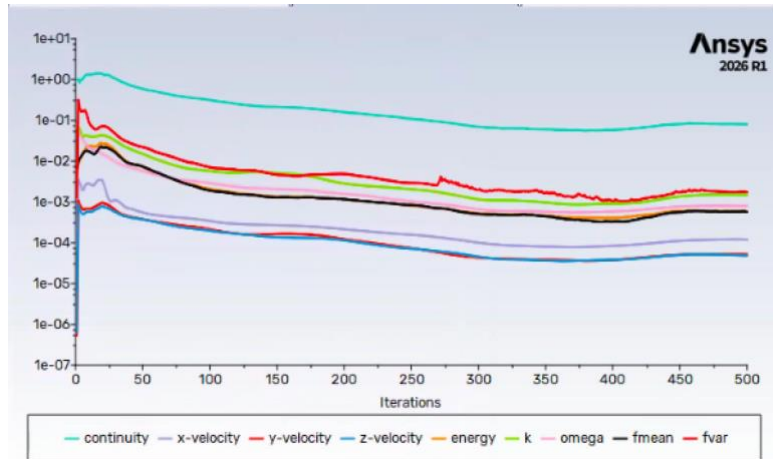


Figura A 17- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 80% $\text{CH}_4/20\% \text{H}_2$

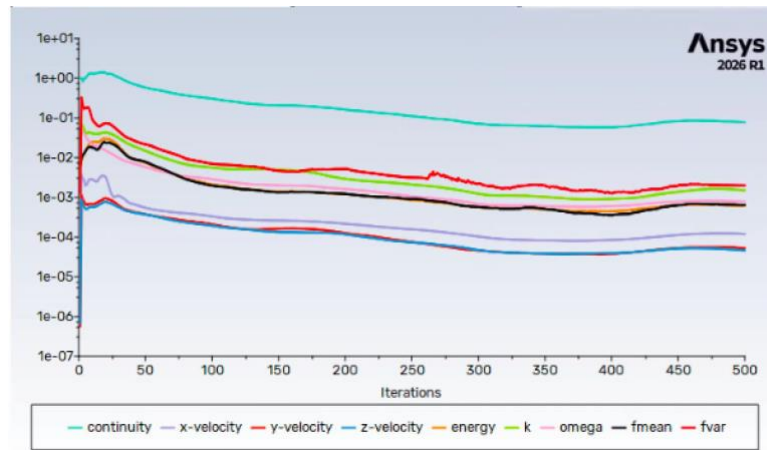


Figura A 18- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 70% $\text{CH}_4/30\% \text{H}_2$

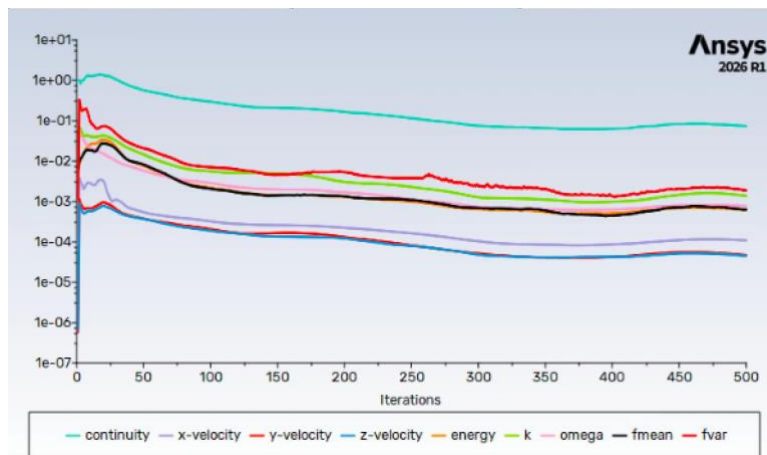


Figura A 19- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 60% $\text{CH}_4/40\% \text{H}_2$

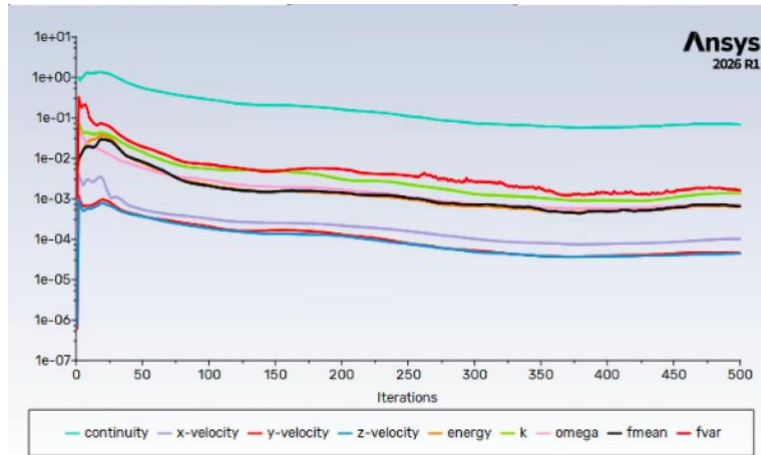


Figura A 20-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 50% CH_4 /50% H_2

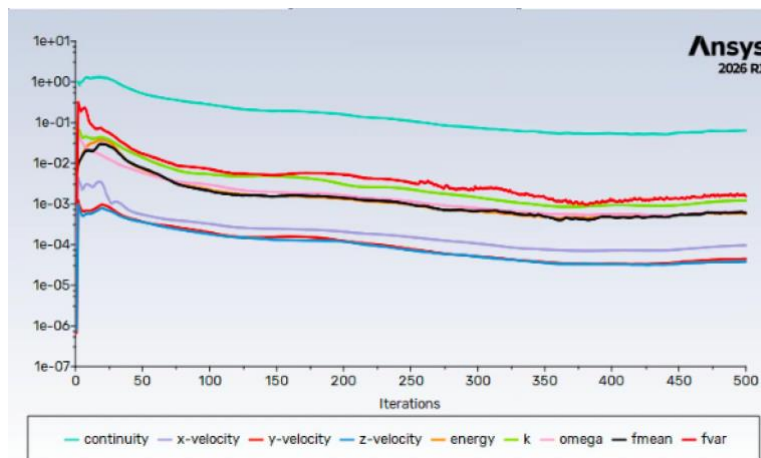


Figura A 21-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 40% CH_4 /60% H_2

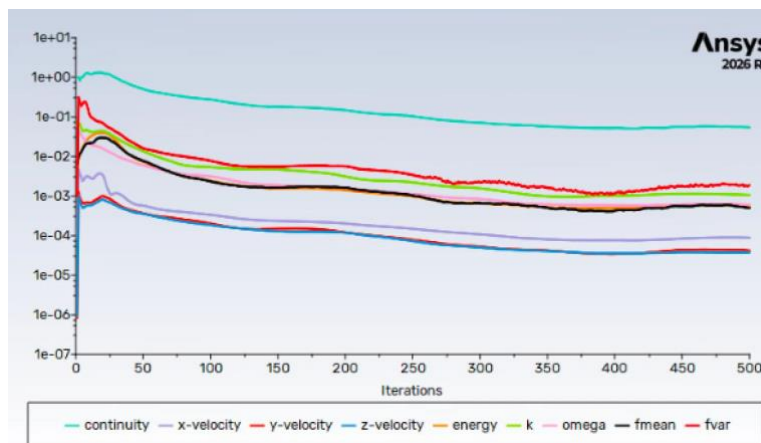


Figura A 22-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 30% CH_4 /70% H_2

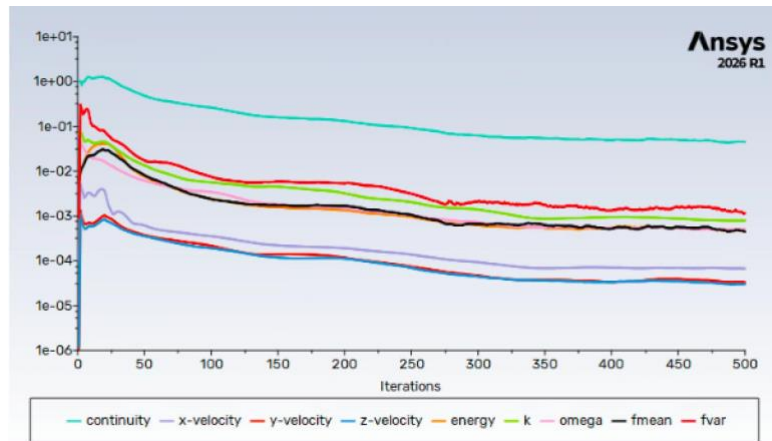


Figura A 23-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 20% $\text{CH}_4/80\% \text{H}_2$

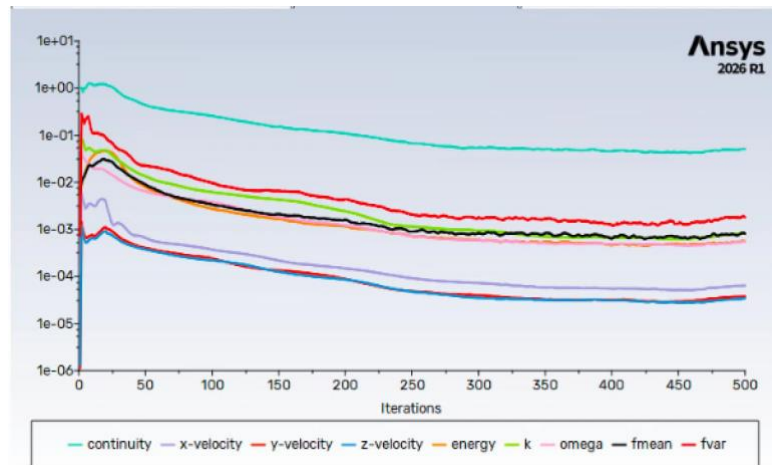


Figura A 24-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 10% $\text{CH}_4/90\% \text{H}_2$

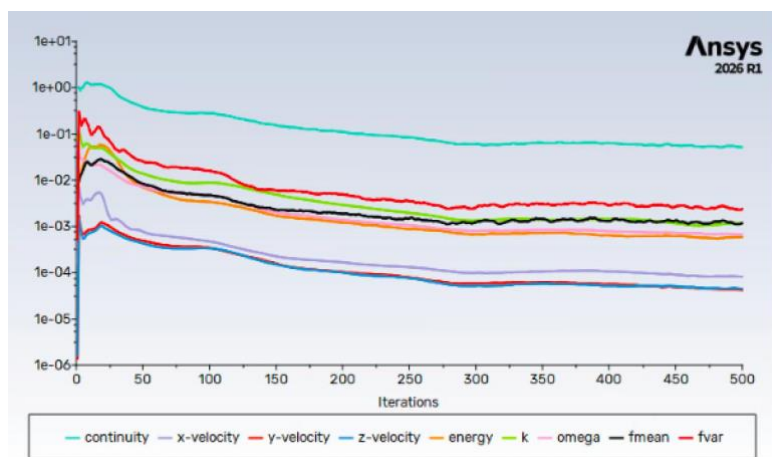


Figura A 25-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do queimador 100% H_2

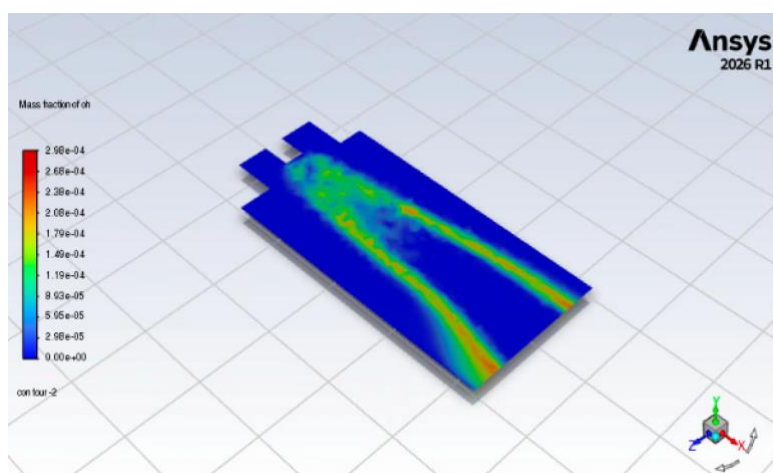


Figura A 26-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 100% CH₄ analisada

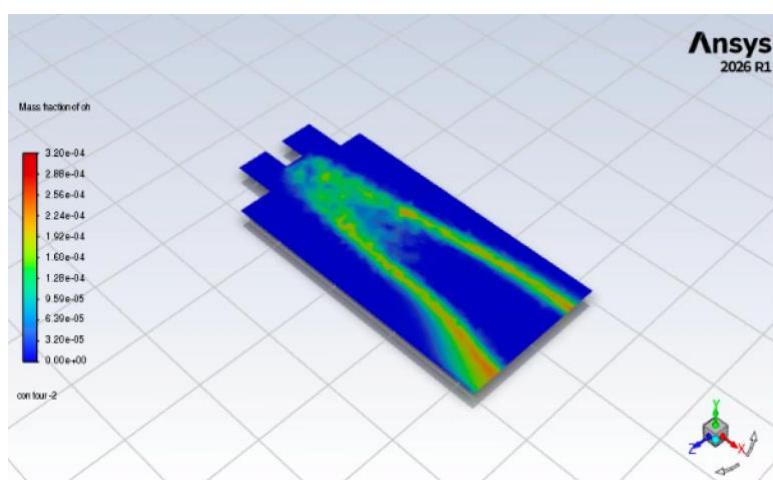


Figura A 27-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 90% CH₄ / 10% H₂ analisada

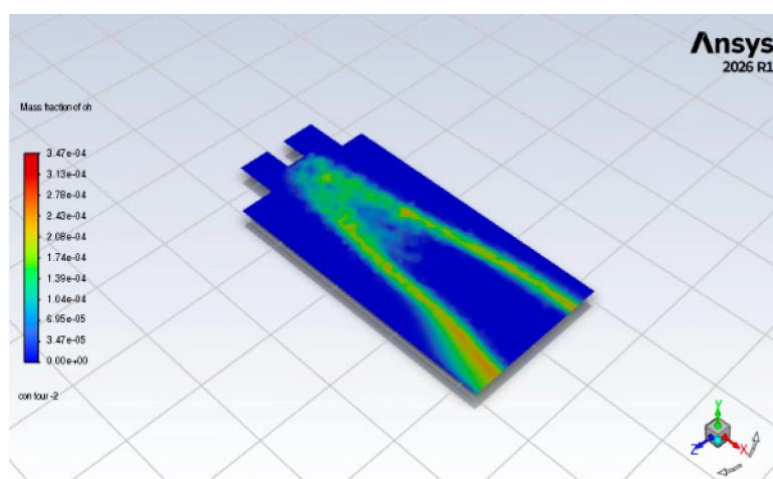


Figura A 28-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 80% CH₄ / 20% H₂ analisada

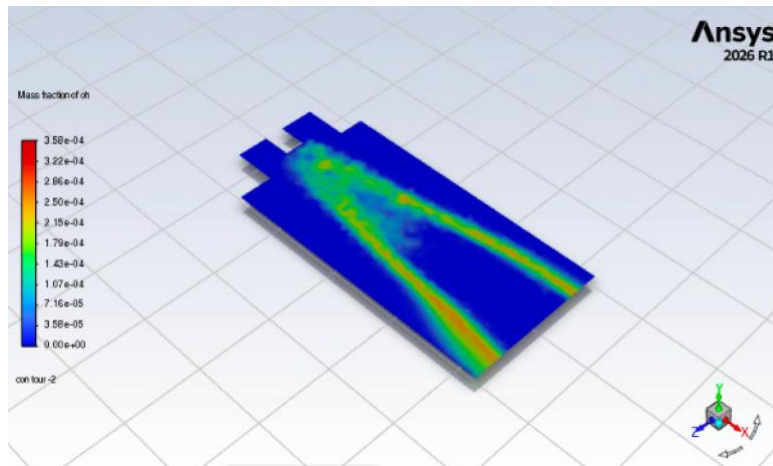


Figura A 29-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 70% CH_4 /30% H_2 analisada

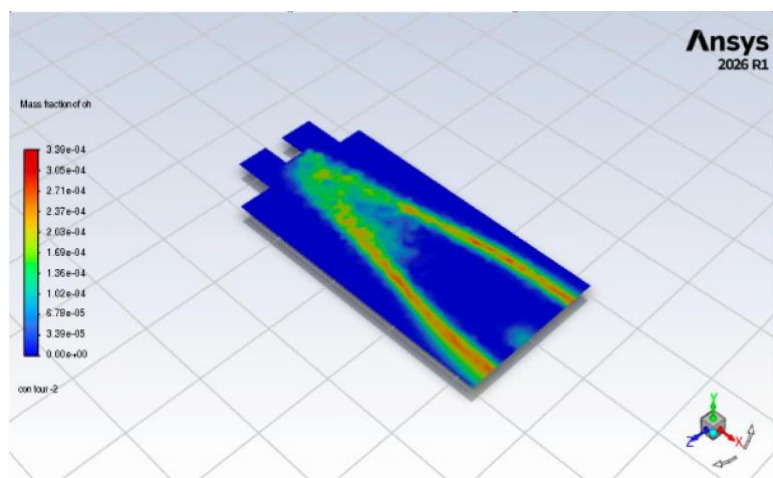


Figura A 30-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 60% CH_4 /40% H_2 analisada

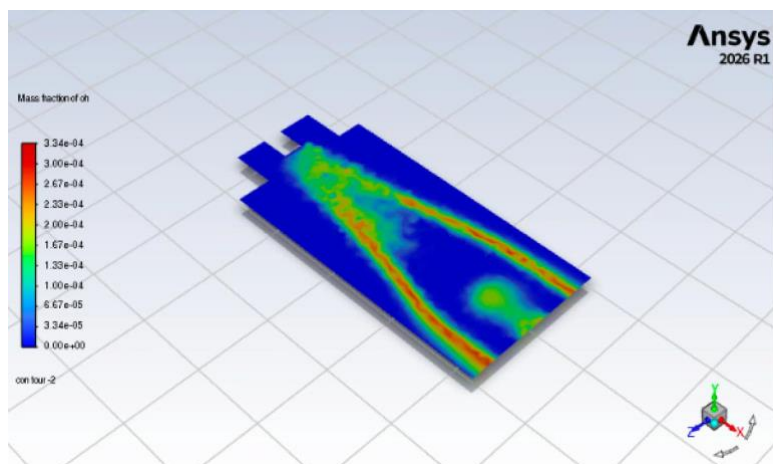


Figura A 31-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 50% CH_4 /50% H_2 analisada

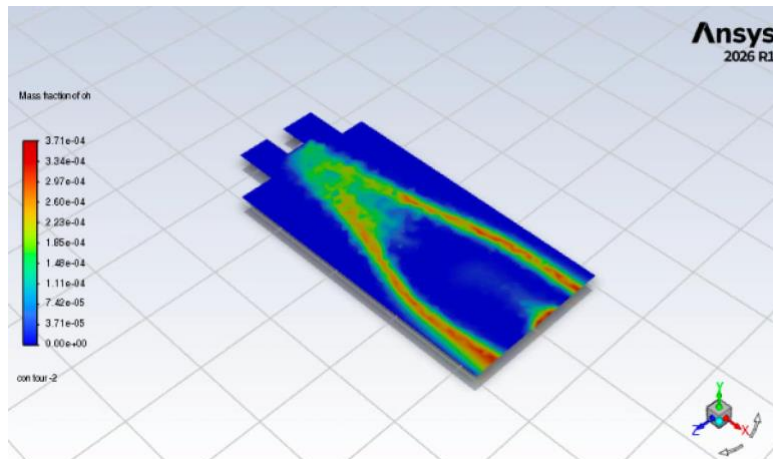


Figura A 32-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 40% CH₄/60% H₂ analisada

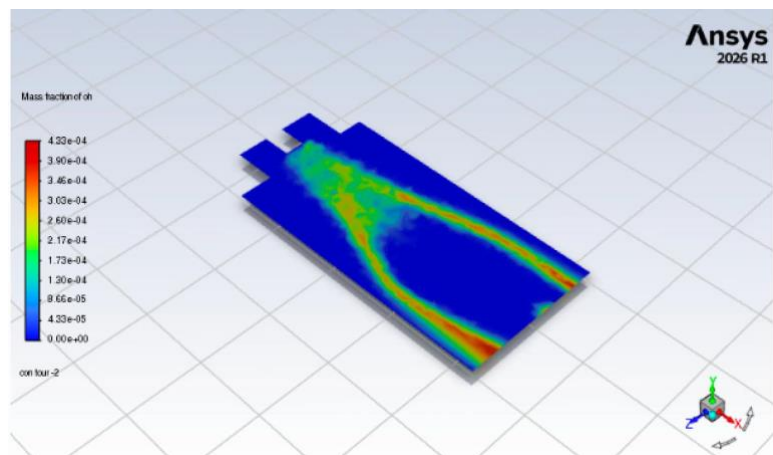


Figura A 33-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 30% CH₄/70% H₂ analisada

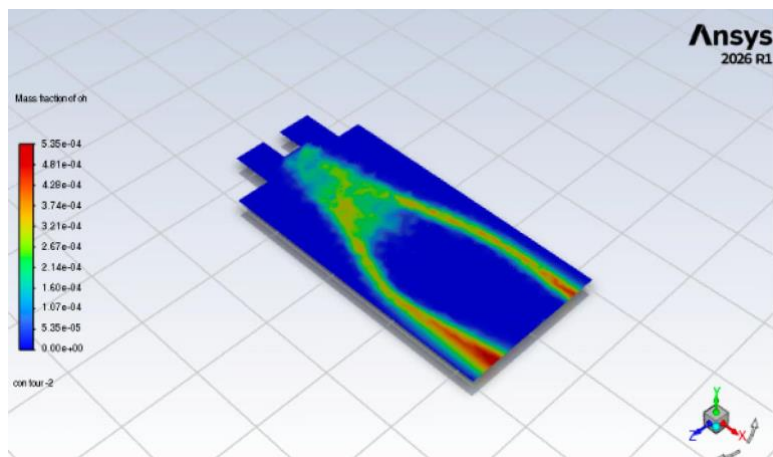


Figura A 34-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 20% CH₄/80% H₂ analisada

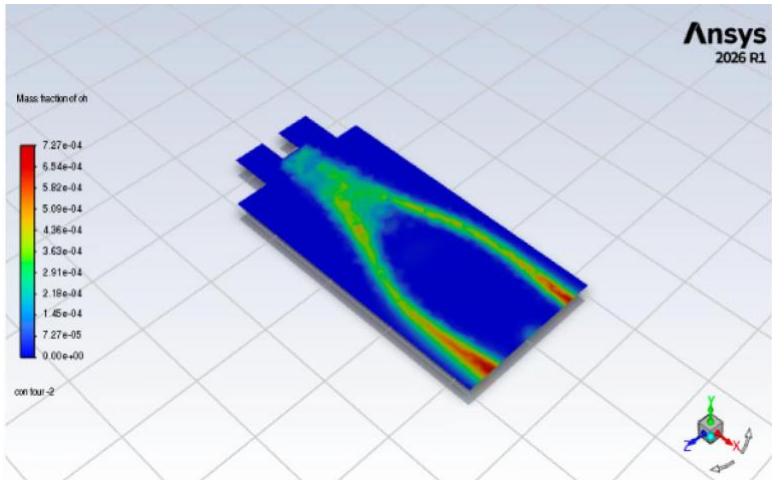


Figura A 35-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 10% CH₄/90% H₂ analisada

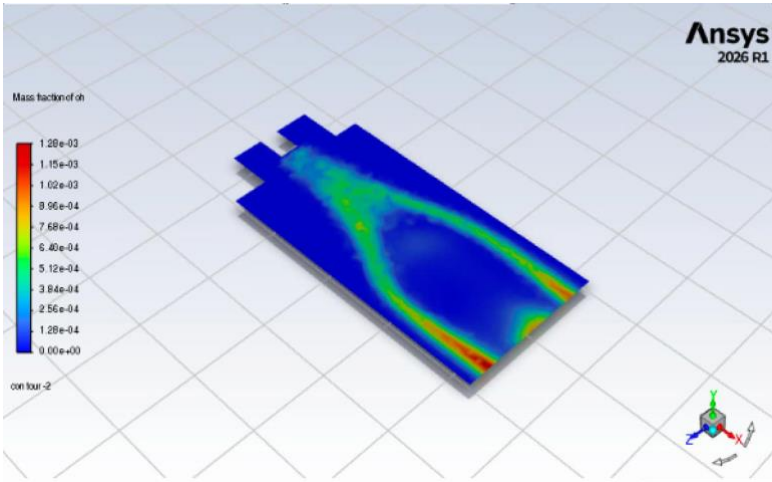


Figura A 36-Distribuição da fração mássica de OH no domínio do queimador para a mistura 100% H₂ analisada

Tabela A-2-Resultados das simulações do forno (sem peça cerâmica) para as diferentes misturas H₂/CH₄

Parâmetro / Espécie	100% CH ₄	10% H ₂ / 90% CH ₄	20% H ₂ / 80% CH ₄	30% H ₂ / 70% CH ₄	40% H ₂ / 60% CH ₄
Temperatura máxima (K)	1760,206	1763,088	1793,563	1718,307	1736,555
Temperatura média saída (K)	358,743	339,181	357,302	354,639	355,837
Velocidade máxima (m/s)	24,929	24,948	25,053	24,859	24,847
Velocidade média saída (m/s)	8,617	9,000	9,045	8,741	8,817
Pressão média entrada (Pa)	-146,378	-127,701	-199,754	-61,903	-134,372
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	-146,378	-127,701	-199,754	-61,903	-134,372
Fração mássica CH ₄ saída	0,004	0,003	0,004	0,005	0,004
Fração mássica H ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica O ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica CO ₂ saída	0,005	0,003	0,004	0,003	0,003
Fração mássica H ₂ O saída	0,005	0,004	0,006	0,006	0,007
Fração mássica CO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass imbalance (Kg/s)	-0,003	-0,001	-0,003	-0,003	-0,003	-0,004

Parâmetro / Espécie	50% H ₂ / 50% CH ₄	60% H ₂ / 40% CH ₄	70% H ₂ / 30% CH ₄	80% H ₂ / 20% CH ₄	90% H ₂ / 10% CH ₄	100% H ₂
Temperatura máxima (K)	1847,902	1871,179	1922,390	2013,353	2228,831	2333,842
Temperatura média saída (K)	340,468	349,061	334,652	320,108	312,738	309,008
Velocidade máxima (m/s)	24,843	24,932	24,746	24,711	25,258	25,532
Velocidade média saída (m/s)	9,471	9,355	9,467	9,555	10,899	10,303
Pressão média entrada (Pa)	-58,033	-166,600	-44,111	-258,580	-519,014	-592,893
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	-58,033	-166,600	-44,111	-258,580	-519,014	-592,893
Fração mássica CH ₄ saída	0,002	0,002	0,001	0,000	0,000	0,000
Fração mássica H ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica O ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica CO ₂ saída	0,002	0,003	0,002	0,001	0,000	0,000
Fração mássica H ₂ O saída	0,005	0,006	0,005	0,003	0,001	0,001
Fração mássica CO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass imbalance (Kg/s)	-0,003	-0,003	-0,003	-0,001	0,001	0,002

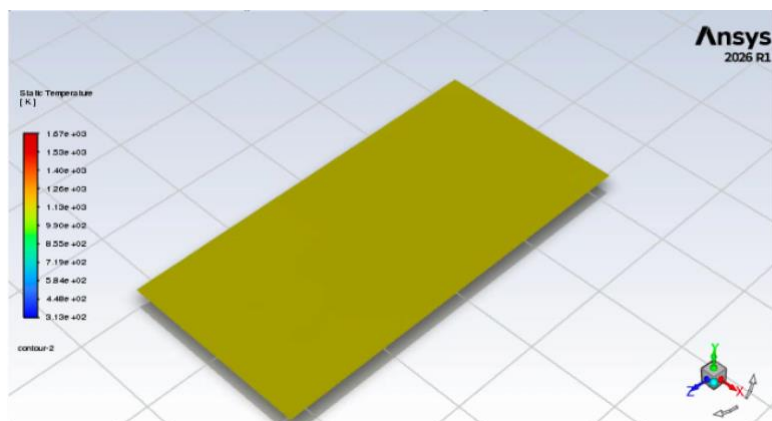


Figura A 37- Distribuição de temperatura estática no domínio do forno para a mistura 100% CH₄ analisada

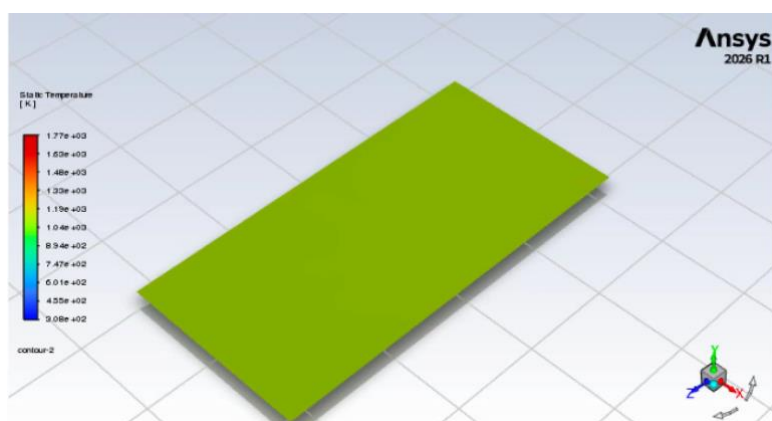


Figura A 38-Distribuição de temperatura estática no domínio do forno para a mistura 50% CH₄/50% H₂ analisada

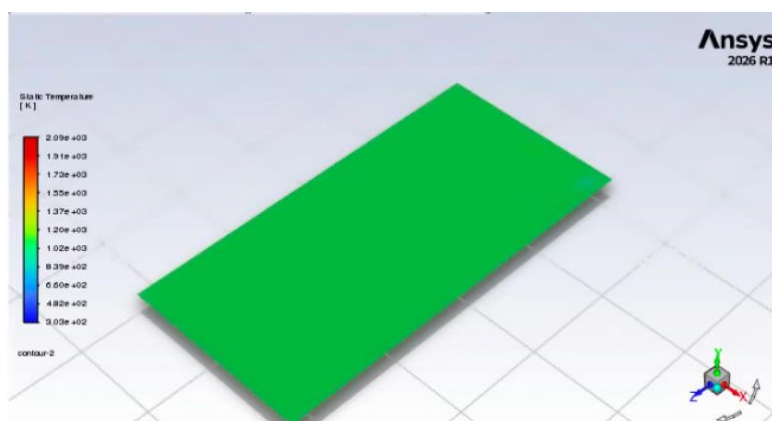


Figura A 39-Distribuição de temperatura estática no domínio do forno para a mistura 100% H₂ analisada

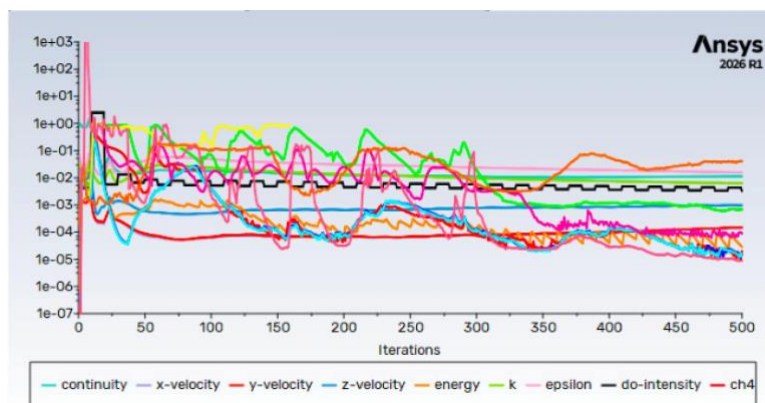


Figura A 40-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do forno 100% CH₄

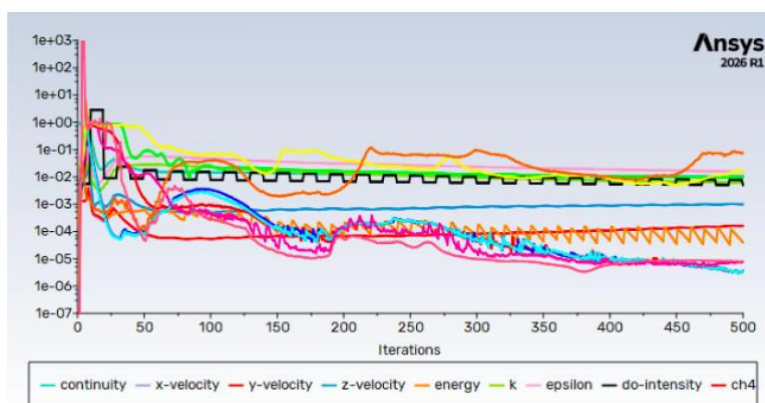


Figura A 41-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do forno 50% CH₄/50% H₂

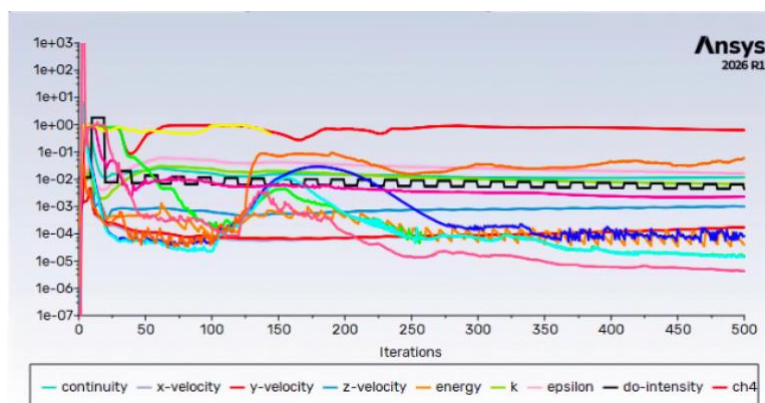


Figura A 42-Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do forno 100% H₂

Tabela A-3- Resultados das simulações do fluido com 3,65m de comprimento para as diferentes misturas H₂/CH₄

Parâmetro / Espécie	100% CH ₄	10% H ₂ / 90% CH ₄	20% H ₂ / 80% CH ₄	30% H ₂ / 70% CH ₄	40% H ₂ / 60% CH ₄
Temperatura máxima (K)	1754,614	1780,801	1833,304	1775,603	1795,761
Temperatura média saída (K)	1067,261	1069,642	1072,420	1059,203	1060,896
Velocidade máxima (m/s)	2,551	2,587	2,420	2,383	2,474
Velocidade média saída (m/s)	0,585	0,577	0,528	0,524	0,538

Pressão média entrada (Pa)	0,768	0,755	0,587	0,574	0,609
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	0,768	0,755	0,587	0,574	0,609
Fração mássica CH ₄ saída	0,093	0,098	0,102	0,115	0,094
Fração mássica H ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,003	0,005
Fração mássica O ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica CO ₂ saída	0,130	0,122	0,109	0,099	0,098
Fração mássica H ₂ O saída	0,112	0,124	0,133	0,139	0,143
Fração mássica CO saída	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass imbalance (Kg/s)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Comprimento da chama (m)	2,400	2,350	2,300	2,250	2,200
Posição da chama (m)	0,600	0,550	0,500	0,500	0,450

Parâmetro / Espécie	50% H ₂ / 50% CH ₄	60% H ₂ / 40% CH ₄	70% H ₂ / 30% CH ₄	80% H ₂ / 20% CH ₄	90% H ₂ / 10% CH ₄	100% H ₂
Temperatura máxima (K)	1904,132	1928,115	1976,540	2068,388	2227,612	2267,726
Temperatura média saída (K)	1082,359	1092,566	1118,260	1166,114	1231,787	1284,478
Velocidade máxima (m/s)	2,613	2,625	2,593	2,575	2,521	2,338
Velocidade média saída (m/s)	0,551	0,556	0,553	0,553	0,543	0,523
Pressão média entrada (Pa)	0,648	0,619	0,565	0,511	0,455	0,380
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	0,648	0,619	0,565	0,511	0,455	0,380
Fração mássica CH ₄ saída	0,056	0,040	0,024	0,007	0,000	0,000
Fração mássica H ₂ saída	0,005	0,007	0,009	0,010	0,006	0,000
Fração mássica O ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011
Fração mássica CO ₂ saída	0,100	0,098	0,094	0,086	0,054	0,000
Fração mássica H ₂ O saída	0,151	0,156	0,163	0,174	0,206	0,242

Fração mássica CO saída	0,001	0,002	0,002	0,001	0,000	0,000
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
Mass imbalance (Kg/s)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Comprimento da chama (m)	2,150	2,100	2,050	2,000	1,950	1,900
Posição da chama (m)	0,450	0,400	0,400	0,400	0,400	0,350

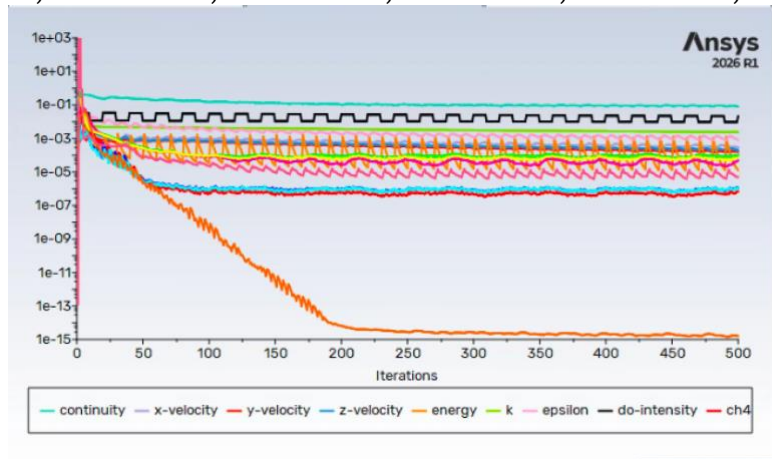


Figura A 43- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido com 3,65m 100% CH₄

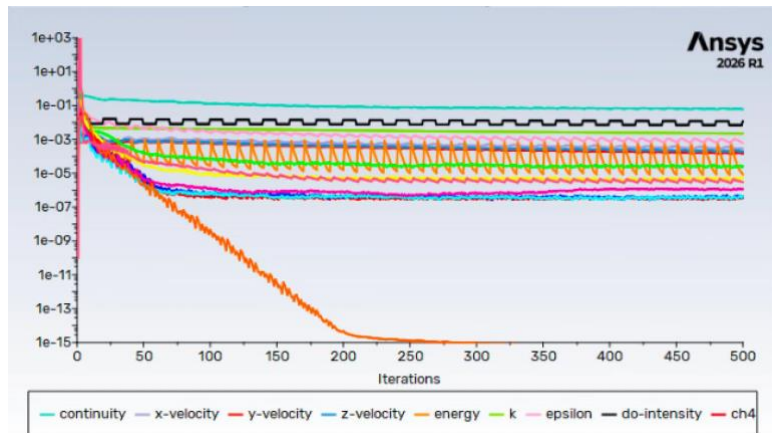


Figura A 44- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido com 3,65m 50% CH₄/50% H₂

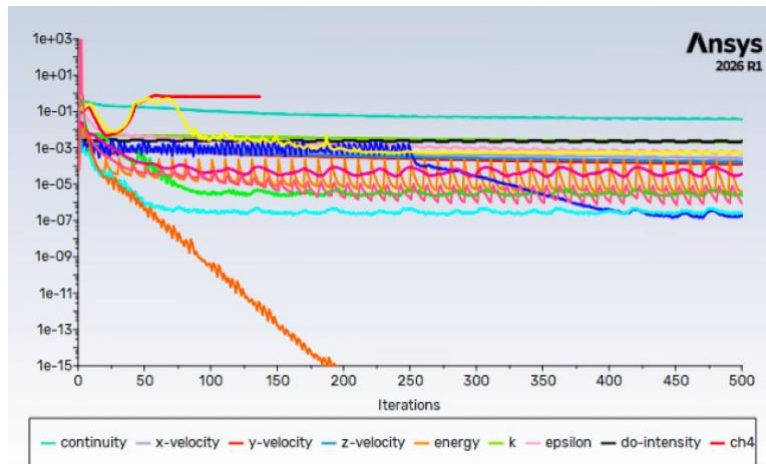


Figura A 45- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido com 3,65m 100% H₂

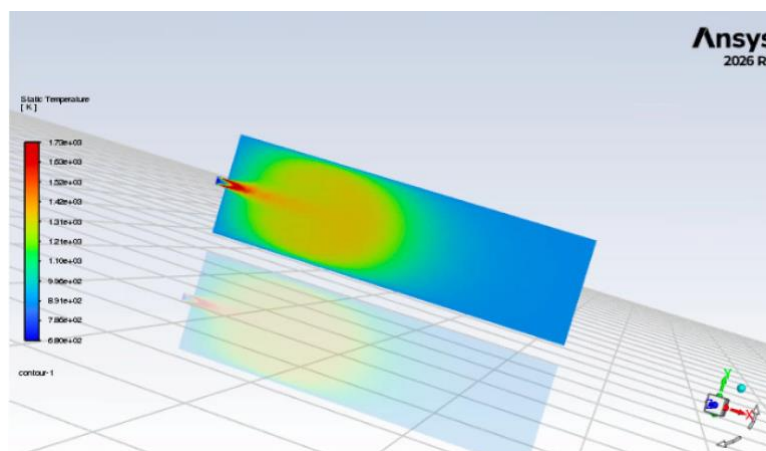


Figura A 46- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido com 3,65m para a mistura 100% CH₄ analisada

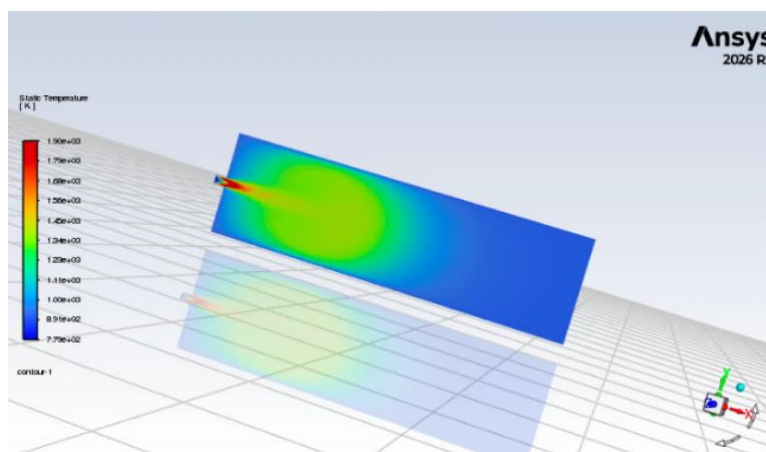


Figura A 47- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido com 3,65m para a mistura 50% CH₄/50% H₂ analisada

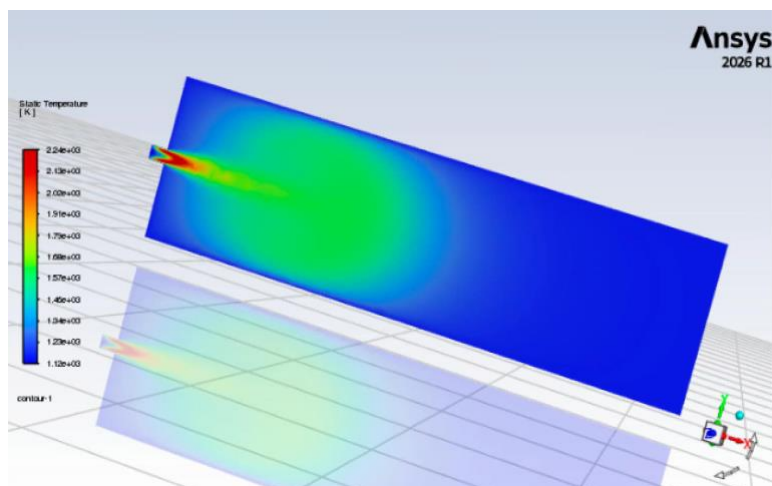


Figura A 48- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido com 3,65m para a mistura 100% H₂ analisada

Tabela A-4- Resultados das simulações do fluido para as diferentes misturas H₂/CH₄

Parâmetro / Espécie	100% CH ₄	10% H ₂ / 90% CH ₄	20% H ₂ / 80% CH ₄	30% H ₂ / 70% CH ₄	40% H ₂ / 60% CH ₄
Temperatura máxima (K)	1753,826	1782,035	1825,075	1769,065	1788,580
Temperatura média saída (K)	1068,920	1071,477	1069,033	1060,231	1061,059
Velocidade máxima (m/s)	2,058	2,108	2,060	2,041	2,121
Velocidade média saída (m/s)	0,658	0,649	0,570	0,580	0,596
Pressão média entrada (Pa)	0,455	0,458	0,370	0,356	0,378
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	0,455	0,458	0,370	0,356	0,378
Fração mássica CH ₄ saída	0,089	0,093	0,097	0,110	0,091
Fração mássica H ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,002	0,005
Fração mássica O ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica CO ₂ saída	0,124	0,116	0,105	0,095	0,094
Fração mássica H ₂ O saída	0,107	0,118	0,128	0,133	0,138
Fração mássica CO saída	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass imbalance (Kg/s)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Comprimento da chama (m)	0,850	0,830	0,800	0,780	0,750
Posição da chama (m)	0,100	0,120	0,130	0,140	0,150

Parâmetro / Espécie	50% H ₂ / 50% CH ₄	60% H ₂ / 40% CH ₄	70% H ₂ / 30% CH ₄	80% H ₂ / 20% CH ₄	90% H ₂ / 10% CH ₄	100% H ₂
Temperatura máxima (K)	1895,929	1920,447	1969,575	2063,874	2214,830	2241,292
Temperatura média saída (K)	1076,780	1084,262	1105,698	1146,996	1208,931	1257,308
Velocidade máxima (m/s)	2,241	2,281	2,287	2,300	2,217	2,056

Velocidade média saída (m/s)	0,607	0,607	0,600	0,594	0,580	0,555
Pressão média entrada (Pa)	0,390	0,402	0,374	0,346	0,302	0,247
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	0,390	0,402	0,374	0,346	0,302	0,247
Fração mássica CH ₄ saída	0,054	0,038	0,023	0,007	0,000	0,000
Fração mássica H ₂ saída	0,005	0,007	0,009	0,010	0,005	0,000
Fração mássica O ₂ saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011
Fração mássica CO ₂ saída	0,096	0,094	0,090	0,082	0,052	0,000
Fração mássica H ₂ O saída	0,144	0,149	0,156	0,166	0,198	0,232
Fração mássica CO saída	0,001	0,001	0,002	0,001	0,000	0,000
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass imbalance (Kg/s)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Comprimento da chama (m)	0,730	0,700	0,680	0,650	0,630	0,600
Posição da chama (m)	0,160	0,170	0,180	0,190	0,200	0,210

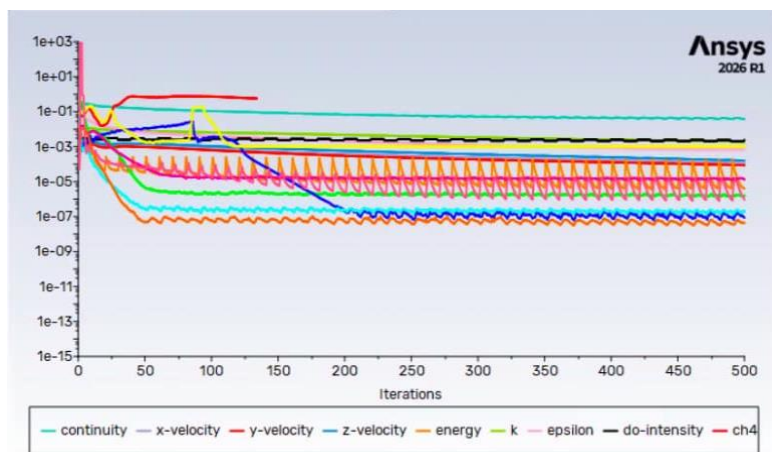


Figura A 49- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 100% H₂

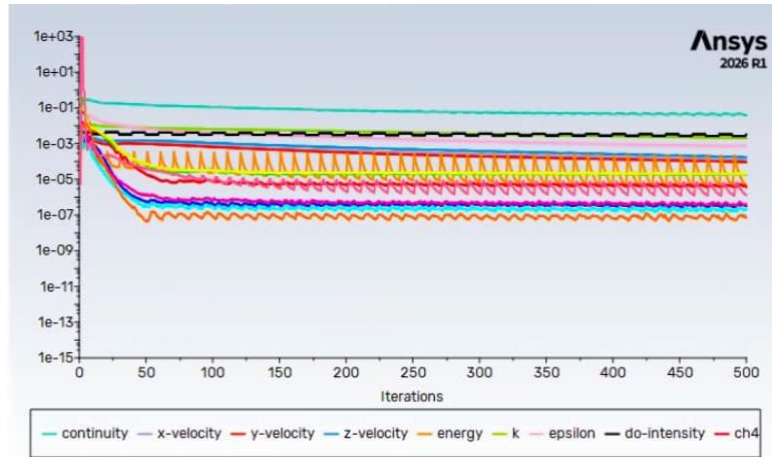


Figura A 50- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 10% CH₄/90% H₂

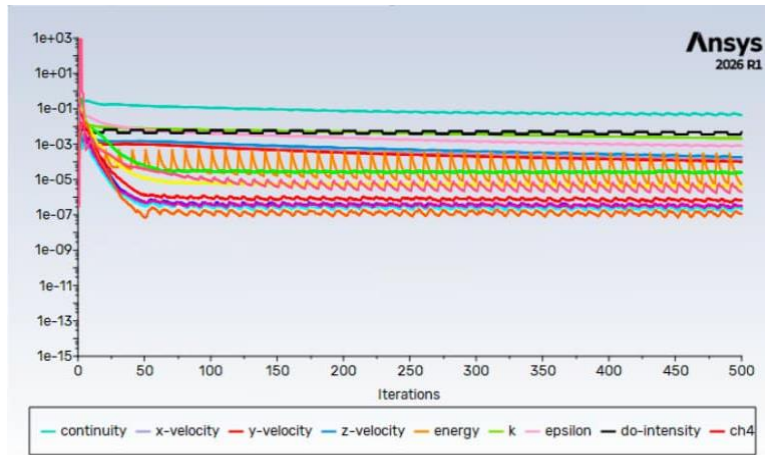


Figura A 51- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 20% CH₄/80% H₂

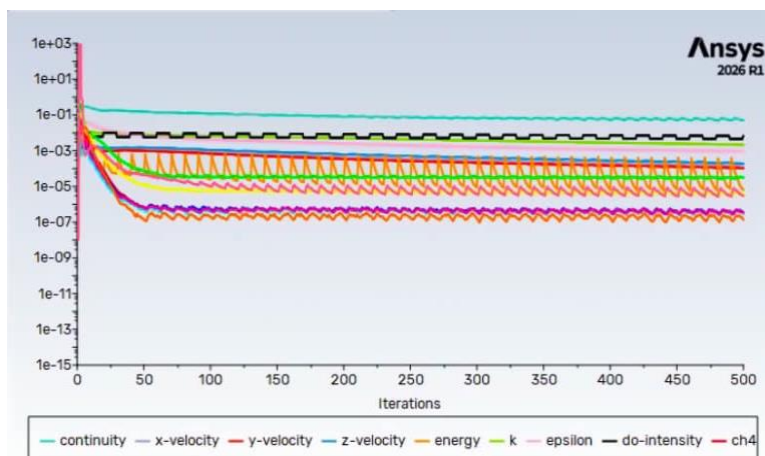


Figura A 52- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 30% CH₄/70% H₂

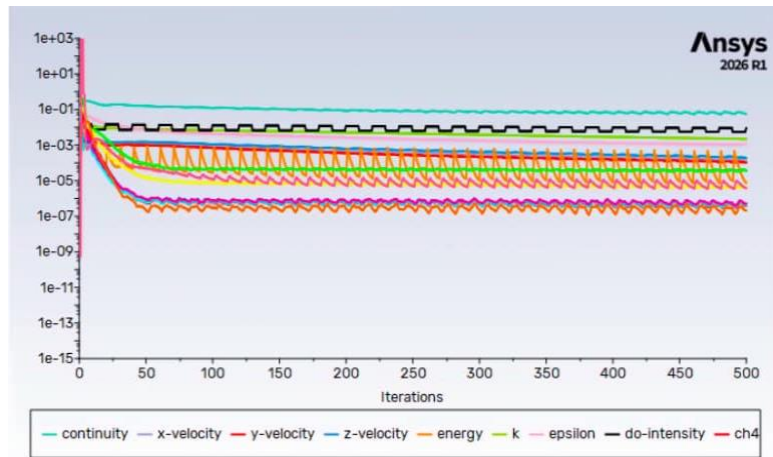


Figura A 53- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 40% CH₄/60% H₂

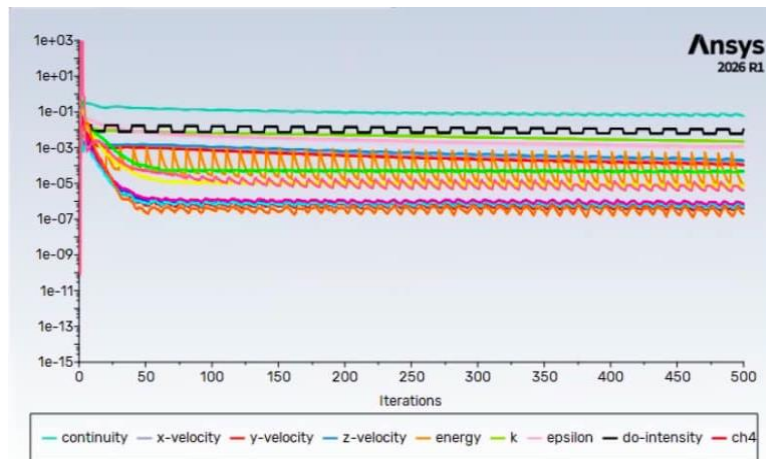


Figura A 54- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 50% CH₄/50% H₂

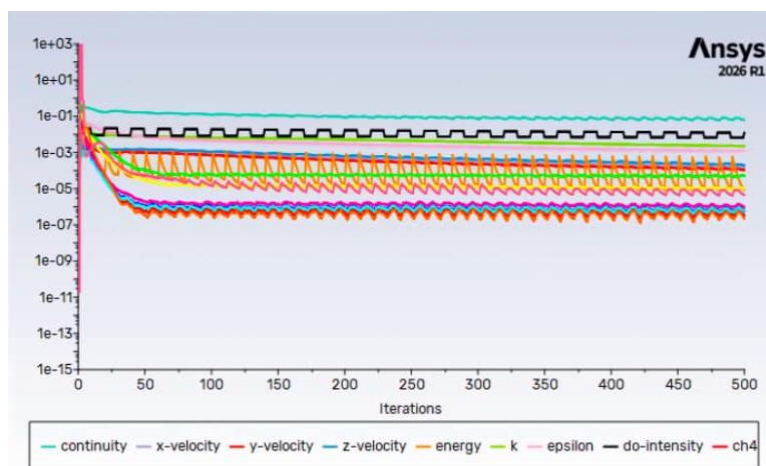


Figura A 55- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 60% CH₄/40% H₂

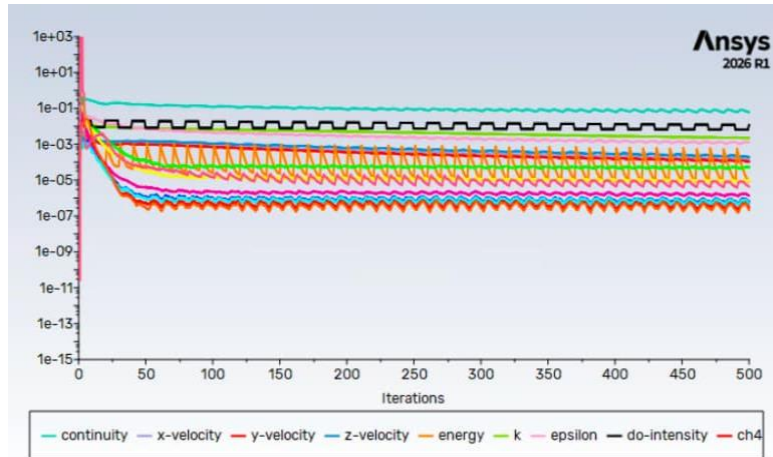


Figura A 56- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 70% CH_4 /30% H_2

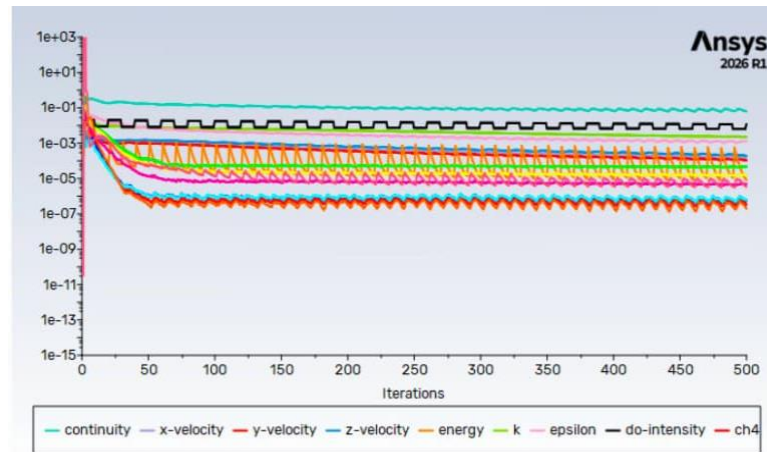


Figura A 57- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 80% CH_4 /20% H_2

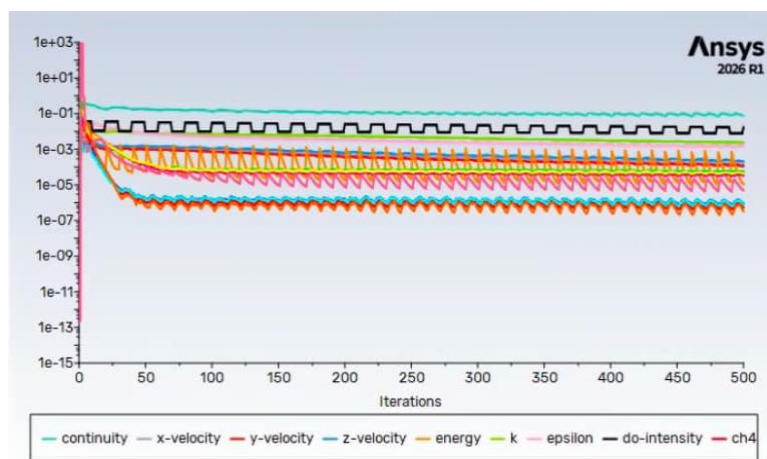


Figura A 58- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 90% CH_4 /10% H_2

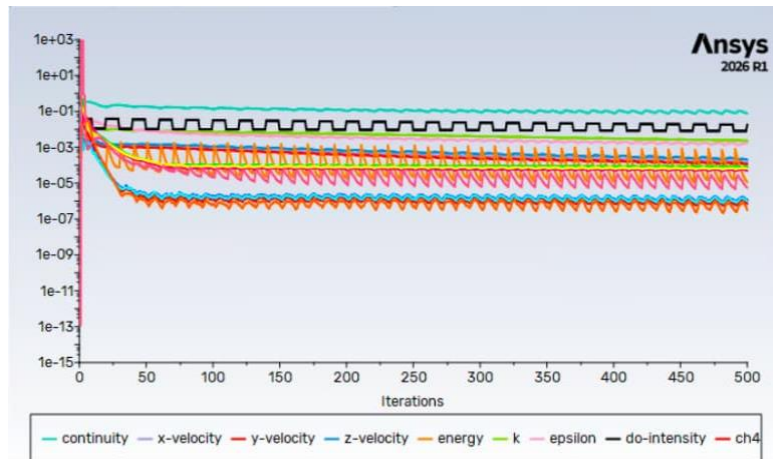


Figura A 59- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido 100% CH₄

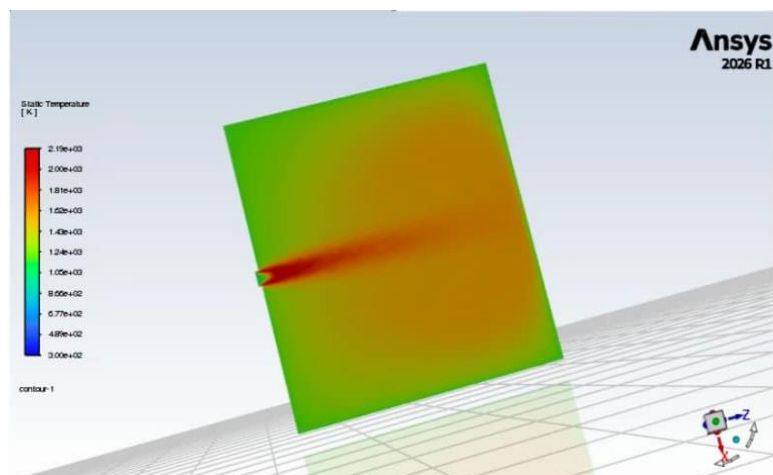


Figura A 60- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 100% H₂ analisada

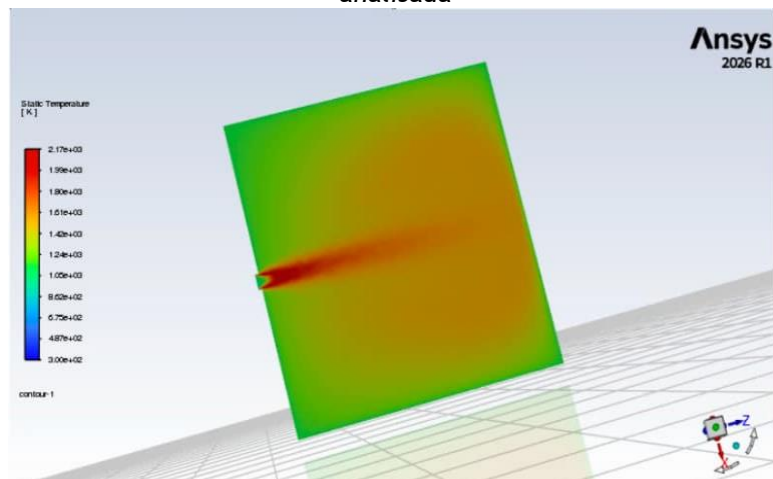


Figura A 61- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 10% CH₄/90% H₂ analisada

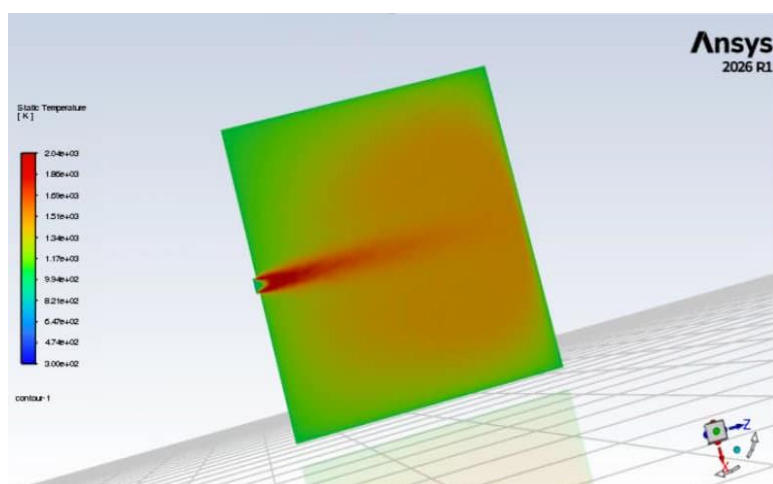


Figura A 62- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 20% CH_4 /80% H_2 analisada

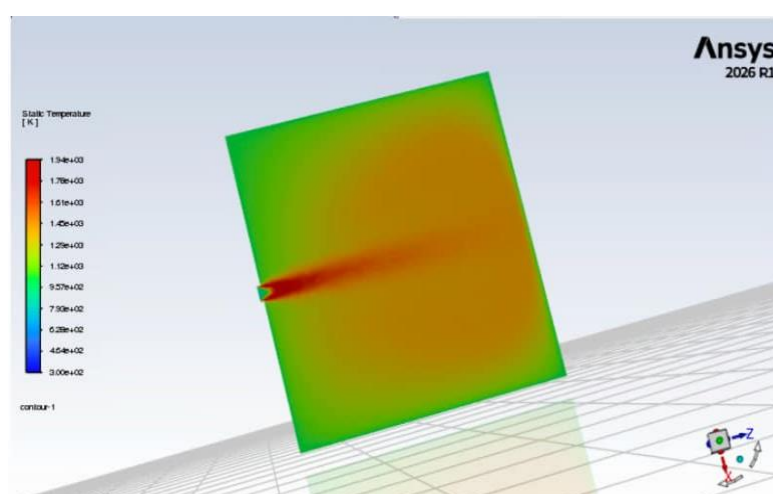


Figura A 63- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 30% CH_4 /70% H_2 analisada

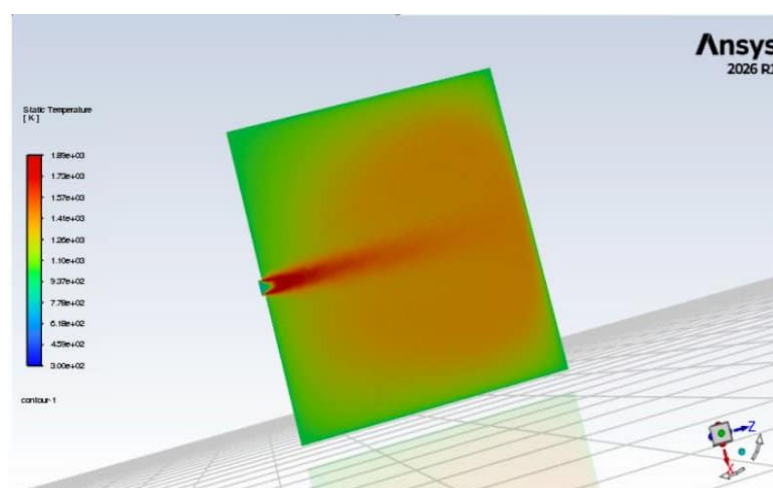


Figura A 64- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 40% CH_4 /60% H_2 analisada

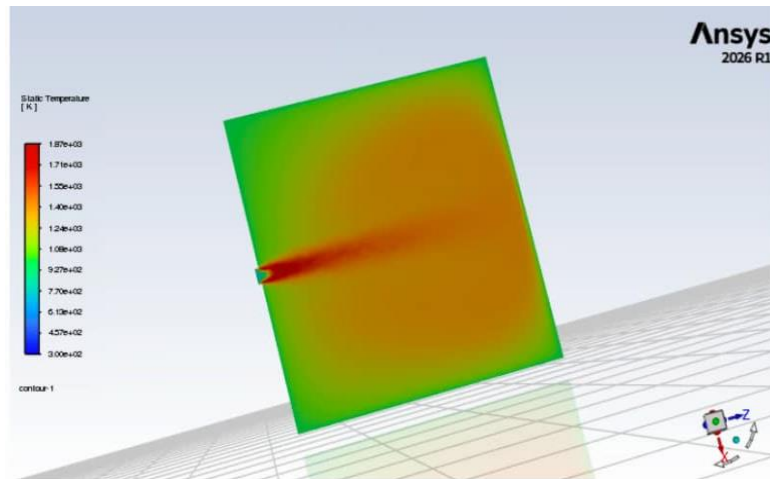


Figura A 65- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 50% CH_4 / 50% H_2 analisada

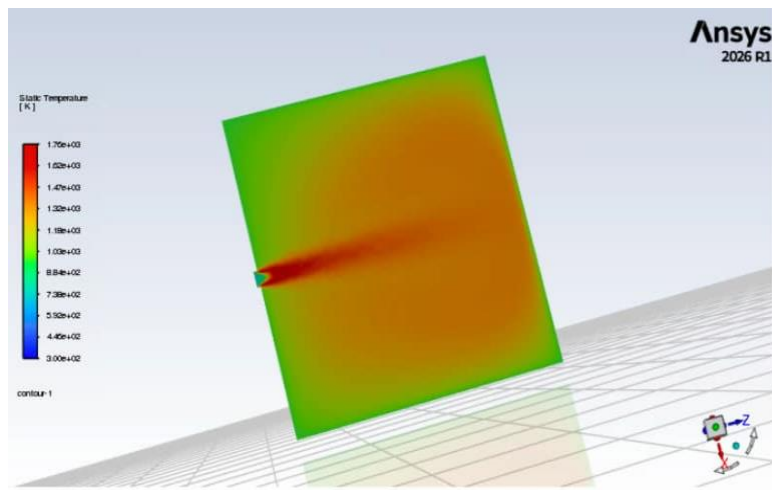


Figura A 66- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 60% CH_4 / 40% H_2 analisada

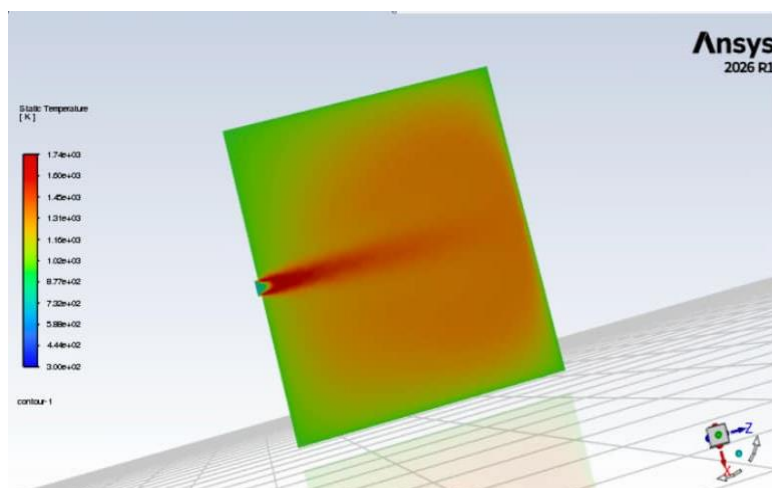


Figura A 67- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 70% CH_4 / 30% H_2 analisada

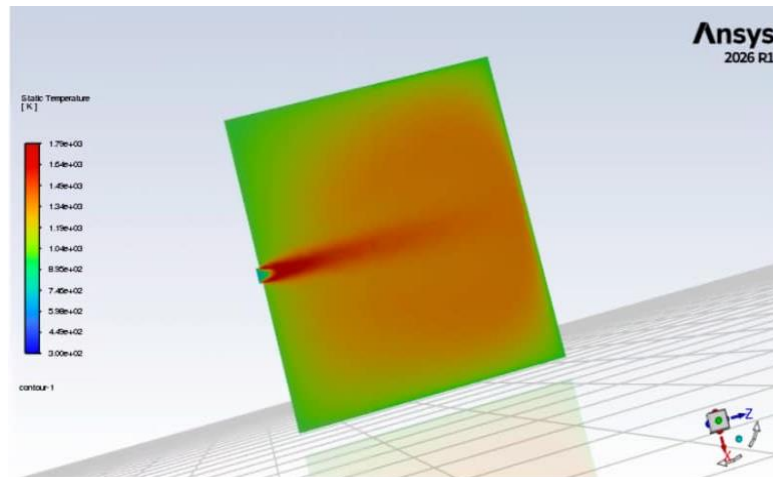


Figura A 68- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 80% CH₄ / 20% H₂ analisada

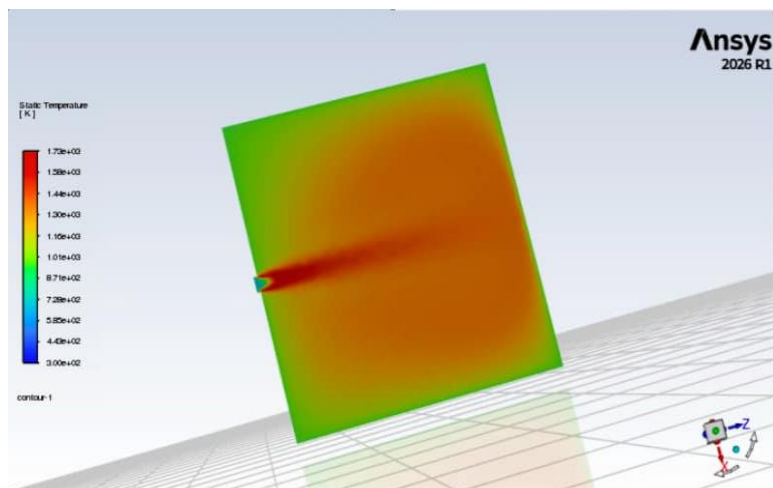


Figura A 69- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 90% CH₄ / 10% H₂ analisada

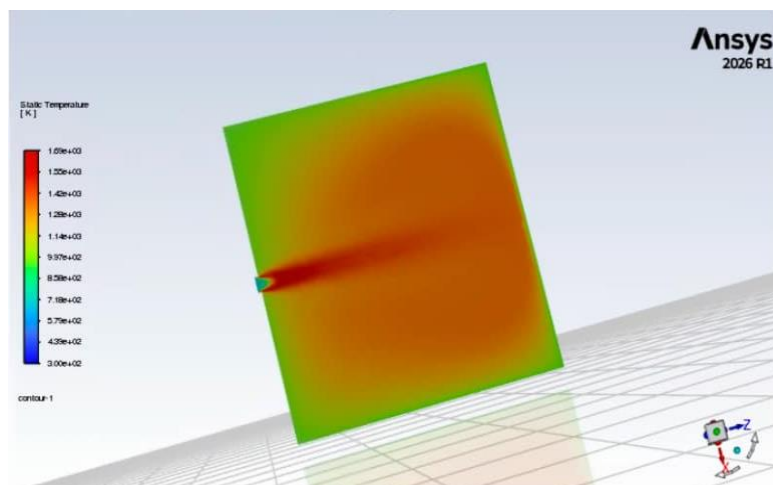


Figura A 70- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido para a mistura 100% CH₄ analisada

Tabela A-5-Propagação Térmica: Queimador → Forno

← SAÍDA QUEIMADOR
(= Entrada Forno)

Mistura	H ₂ (%vol)	T _{max Q} (K)	T _{méd Q} (K) [→ BC Forno]	V _{méd Q} (m/s) [→ BC Forno]
100% CH ₄	0	1961,66	680,45	0,986
10% H ₂	10	1971,97	688,85	0,992
20% H ₂	20	1981,77	762,18	0,998
30% H ₂	30	1988,78	757,49	1,003
40% H ₂	40	1994,09	752,61	1,023
50% H ₂	50	2114,55	778,54	1,059
60% H ₂	60	2010,94	812,36	1,095
70% H ₂	70	2110,92	873,12	1,134
80% H ₂	80	2081,02	953,03	1,176
90% H ₂	90	2070,22	1038,45	1,209
100% H ₂	100	2189,97	1119,40	1,217

SAÍDA FORNO →

Mistura	T _{max F} (K)	T _{méd F} (K)	V _{méd F} (m/s)	ΔP _{Forno} (Pa)
100% CH ₄	1753,83	1068,92	0,658	0,4549
10% H ₂	1782,04	1071,48	0,649	0,4576
20% H ₂	1825,08	1069,03	0,570	0,3701
30% H ₂	1769,07	1060,23	0,580	0,3564
40% H ₂	1788,58	1061,06	0,596	0,3782
50% H ₂	1895,93	1076,78	0,607	0,3901
60% H ₂	1920,45	1084,26	0,607	0,4022
70% H ₂	1969,58	1105,70	0,600	0,3743
80% H ₂	2063,87	1147,00	0,594	0,3460
90% H ₂	2214,83	1208,93	0,580	0,3021
100% H ₂	2241,29	1257,31	0,555	0,2474

GANHO SISTEMA

Mistura	$\Delta T_{\text{sistema}} = T_{\text{méd}_F} - T_{\text{méd}_Q}$ (K)	ΔP _{total sistema} (Pa)	Efic. Térmica $= T_{\text{méd}_F} / T_{\text{max}_Q}$ (%)	Fórmula ΔT	Fórmula Ef.
100% CH ₄	388,5	0,7040	54,5%	388,47	54,49058
10% H ₂	382,6	0,7079	54,3%	382,63	54,33551
20% H ₂	306,9	0,6281	53,9%	306,85	53,94319
30% H ₂	302,7	0,6117	53,3%	302,74	53,31057
40% H ₂	308,5	0,6408	53,2%	308,45	53,21024
50% H ₂	298,2	0,6634	50,9%	298,24	50,92242
60% H ₂	271,9	0,6525	53,9%	271,9	53,91807

70% H ₂	232,6	0,6227	52,4%	232,58	52,38
80% H ₂	194,0	0,5963	55,1%	193,97	55,1172
90% H ₂	170,5	0,5505	58,4%	170,48	58,39621
100% H ₂	137,9	0,4977	57,4%	137,91	57,4122

Tabela A-6- Emissões: CO₂ e NO e respetiva acumulação no Sistema (fração mássica)

	← SAÍDA QUEIMADOR (= Entrada Forno)				
Mistura	CO ₂ _Q (frac.m.)	NO _Q (frac.m.)	H ₂ O _Q (frac.m.)		
100% CH ₄	0,02596	5,67E-05	0,03415		
10% H ₂	0,02574	6,00E-05	0,03630		
20% H ₂	0,02512	6,40E-05	0,03825		
30% H ₂	0,02377	6,49E-05	0,04009		
40% H ₂	0,02309	6,77E-05	0,04414		
50% H ₂	0,02246	7,20E-05	0,05090		
60% H ₂	0,02125	8,16E-05	0,05824		
70% H ₂	0,01913	9,93E-05	0,06651		
80% H ₂	0,01533	1,22E-04	0,07593		
90% H ₂	0,00972	1,55E-04	0,08964		
100% H ₂	0,00000	2,43E-04	0,11128		
	SAÍDA FORNO →				
Mistura	CO ₂ _F (frac.m.)	NO _F (frac.m.)	H ₂ O _F (frac.m.)		
100% CH ₄	0,12403	1,50E-06	0,10739		
10% H ₂	0,11637	1,71E-06	0,11841		
20% H ₂	0,10462	2,96E-06	0,12761		
30% H ₂	0,09451	1,43E-06	0,13323		
40% H ₂	0,09409	1,67E-06	0,13751		
50% H ₂	0,09588	4,55E-06	0,14425		
60% H ₂	0,09411	5,43E-06	0,14913		
70% H ₂	0,08991	9,40E-06	0,15608		
80% H ₂	0,08247	2,44E-05	0,16648		
90% H ₂	0,05153	1,21E-04	0,19810		
100% H ₂	0,00000	4,40E-04	0,23231		
	BALANÇO SISTEMA				
Mistura	Redução CO ₂ vs 100%CH ₄ (%) [Forno]	Razão NO Forno/Queimador = NO _F /NO _Q	ΔH ₂ O sistema = H ₂ O _F -H ₂ O _Q (frac.m.)	Conv. adicional CH ₄ no forno (%)	Fórmula NO ratio

100% CH ₄	0,0%	0,03	0,07324	26,3%	0,026415
10% H ₂	6,2%	0,03	0,08211	23,6%	0,028501
20% H ₂	15,6%	0,05	0,08936	20,1%	0,046261
30% H ₂	23,8%	0,02	0,09314	16,2%	0,022088
40% H ₂	24,1%	0,02	0,09337	18,4%	0,024613
50% H ₂	22,7%	0,06	0,09335	25,9%	0,063202
60% H ₂	24,1%	0,07	0,09089	31,6%	0,06656
70% H ₂	27,5%	0,09	0,08957	41,7%	0,094678
80% H ₂	33,5%	0,20	0,09055	68,8%	0,200954
90% H ₂	58,5%	0,78	0,10846	98,5%	0,777942
100% H ₂	100,0%	1,81	0,12103	100,0%	1,807046

Tabela A-7- Índice de Desempenho Combinado do Sistema (IDC)

Mistura	ΔT sistema (K)	NO _{Forno} (frac.m.)	CO _{2 Forno} (frac.m.)	ΔP _{total} (Pa)
100% CH ₄	388,5	1,50E-06	0,12403	0,7040
10% H ₂	382,6	1,71E-06	0,11637	0,7079
20% H ₂	306,9	2,96E-06	0,10462	0,6281
30% H ₂	302,7	1,43E-06	0,09451	0,6117
40% H ₂	308,5	1,67E-06	0,09409	0,6408
50% H ₂	298,2	4,55E-06	0,09588	0,6634
60% H ₂	271,9	5,43E-06	0,09411	0,6525
70% H ₂	232,6	9,40E-06	0,08991	0,6227
80% H ₂	194,0	2,44E-05	0,08247	0,5963
90% H ₂	170,5	1,21E-04	0,05153	0,5505
100% H ₂	137,9	4,40E-04	0,00000	0,4977
Mistura	ΔT norm	NO 1-norm	CO ₂ 1-norm	ΔP 1-norm
100% CH ₄	1,0000	0,9999	0,0000	0,0186
10% H ₂	0,9767	0,9994	0,0618	0,0000
20% H ₂	0,6742	0,9965	0,1565	0,3796
30% H ₂	0,6578	1,0000	0,2380	0,4577
40% H ₂	0,6806	0,9995	0,2414	0,3192
50% H ₂	0,6399	0,9929	0,2270	0,2117
60% H ₂	0,5348	0,9909	0,2412	0,2636
70% H ₂	0,3778	0,9818	0,2751	0,4053
80% H ₂	0,2237	0,9475	0,3351	0,5309
90% H ₂	0,1300	0,7273	0,5845	0,7488
100% H ₂	0,0000	0,0000	1,0000	1,0000
Mistura	IDC Final	Rank	Recomendação	

100% CH ₄	0,6027	#4	Referência (CH ₄ puro)
10% H ₂	0,6083	#3	Ganho marginal
20% H ₂	0,5973	#5	Descarbonização moderada
30% H ₂	0,6255	#1	Descarbonização moderada
40% H ₂	0,6123	#2	Descarbonização moderada
50% H ₂	0,5783	#6	Descarbonização moderada
60% H ₂	0,5575	#7	Bom compromisso
70% H ₂	0,5375	#8	Bom compromisso
80% H ₂	0,5148	#10	Muito bom – recomendado
90% H ₂	0,5157	#9	Ótimo – elevado NO
100% H ₂	0,4000	#11	Máx. descarboniz. – NO crítico

Tabela A-8- Resultados das simulações do fluido, forno com 4 queimadores para as diferentes misturas H_2/CH_4

Parâmetro / Espécie	100% CH_4	10% H_2 / 90% CH_4	20% H_2 / 80% CH_4	30% H_2 / 70% CH_4	40% H_2 / 60% CH_4
Temperatura máxima (K)	1751,765	1779,173	1848,804	1783,712	1804,172
Temperatura média saída (K)	1338,668	1347,167	1346,454	1319,911	1327,564
Velocidade máxima (m/s)	4,782	4,724	4,216	4,147	4,282
Velocidade média saída (m/s)	3,274	3,241	2,922	2,871	2,967
Pressão média entrada (Pa)	2,624	2,537	2,023	1,918	2,020
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	2,624	2,537	2,023	1,918	2,020
Fração mássica CH_4 saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica H_2 saída	0,093	0,098	0,102	0,115	0,094
Fração mássica O_2 saída	0,000	0,000	0,000	0,003	0,005
Fração mássica CO_2 saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica H_2O saída	0,130	0,122	0,109	0,098	0,098
Fração mássica CO saída	0,112	0,124	0,133	0,139	0,143
Fração mássica NO saída	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001
Mass imbalance (Kg/s)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Comprimento da chama (m)	0,150	0,130	0,110	0,100	0,080
Posição da chama (m)	1,200	1,150	1,100	1,050	0,980

Parâmetro / Espécie	50% H_2 / 50% CH_4	60% H_2 / 40% CH_4	70% H_2 / 30% CH_4	80% H_2 / 20% CH_4	90% H_2 / 10% CH_4	100% H_2
Temperatura máxima (K)	1911,551	1946,091	2000,591	2094,973	2237,359	2261,748
Temperatura média saída (K)	1367,832	1374,208	1393,503	1437,704	1512,919	1546,805
Velocidade máxima (m/s)	4,404	4,399	4,287	4,201	4,082	3,840
Velocidade média saída (m/s)	3,065	3,066	2,994	2,943	2,872	2,700
Pressão média entrada (Pa)	2,129	2,087	1,927	1,787	1,640	1,437
Pressão média saída (Pa)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
ΔP (Pa)	2,129	2,087	1,927	1,787	1,640	1,437
Fração mássica CH_4 saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Fração mássica H_2 saída	0,056	0,040	0,024	0,007	0,000	0,000
Fração mássica O_2 saída	0,005	0,007	0,009	0,010	0,006	0,000
Fração mássica CO_2 saída	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,011
Fração mássica H_2O saída	0,100	0,098	0,094	0,086	0,054	0,000

Fração mássica						
CO saída	0,151	0,156	0,163	0,174	0,206	0,242
Fração mássica						
NO saída	0,001	0,002	0,002	0,001	0,000	0,000
Mass imbalance						
(Kg/s)	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,001
Comprimento						
da chama (m)	0,060	0,050	0,040	0,030	0,010	0,000
Posição da						
chama (m)	0,900	0,820	0,750	0,650	0,500	0,350

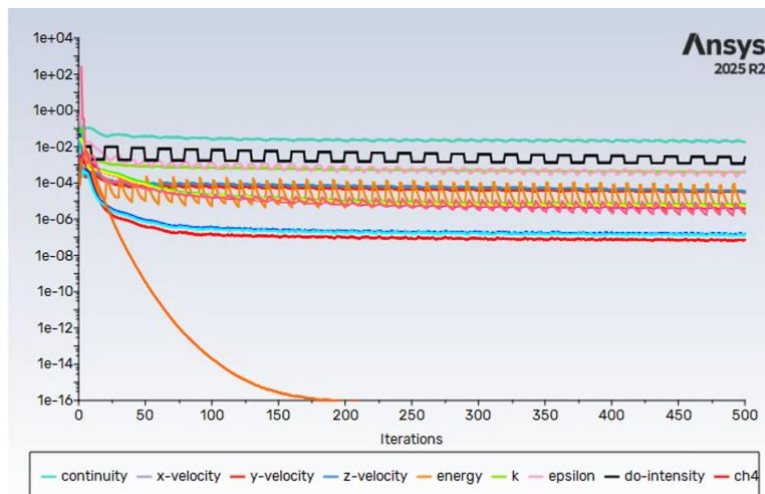


Figura A 71- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 100% CH₄

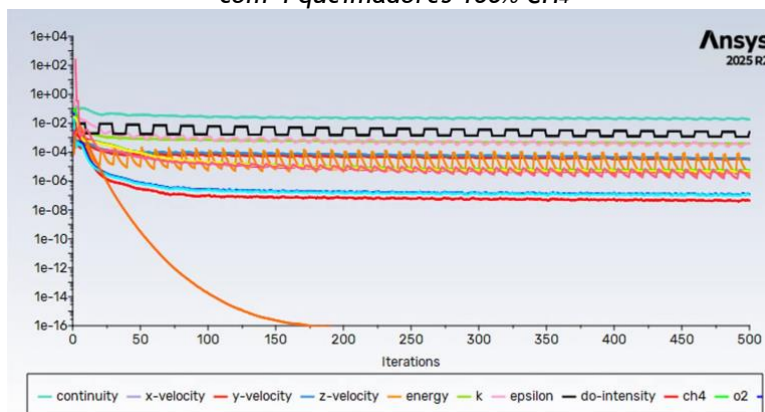


Figura A 72- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 90% CH₄/ 10% H₂

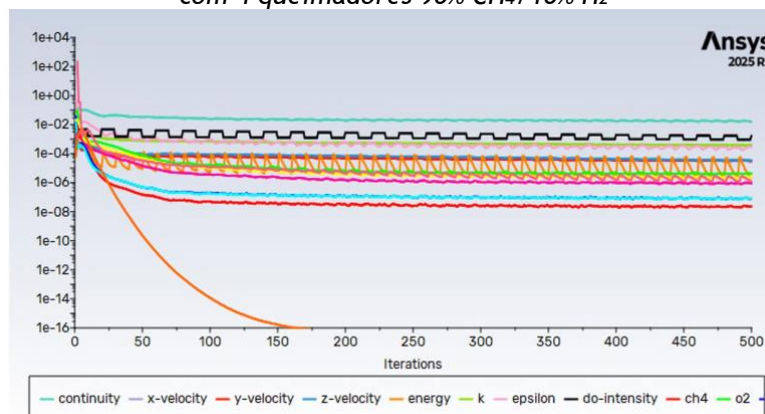


Figura A 73- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 80% CH₄/20% H₂

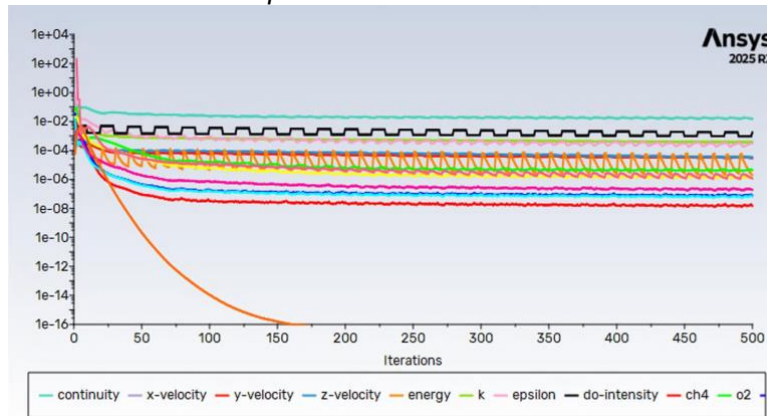


Figura A 74- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 70% CH₄/30% H₂

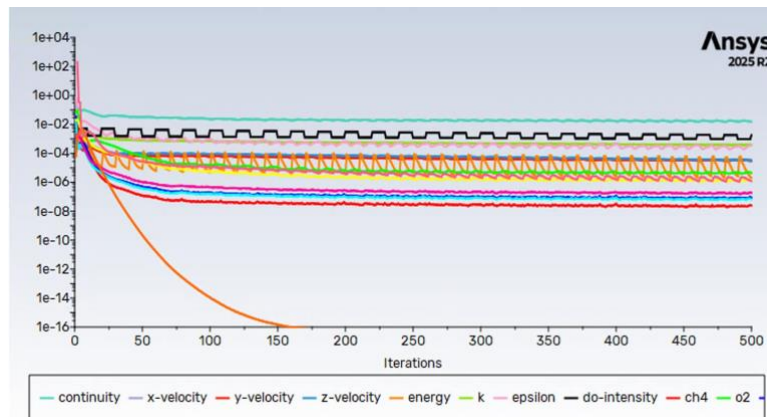


Figura A 75- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 60% CH₄/40% H₂

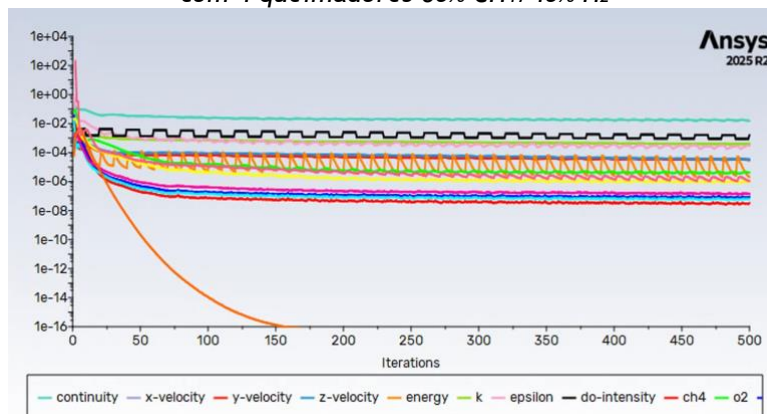


Figura A 76- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 50% CH₄/50% H₂

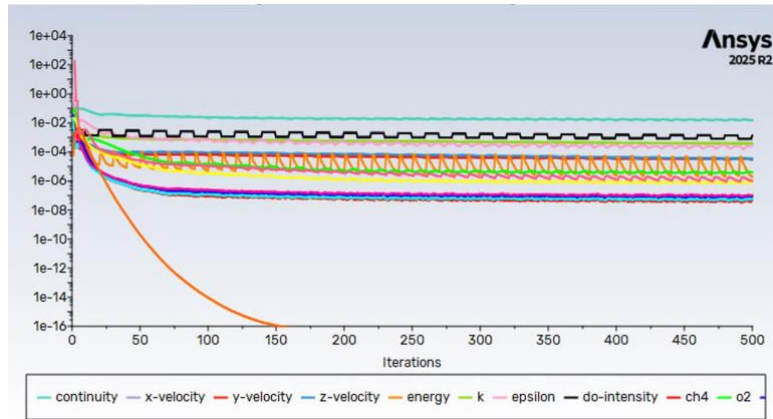


Figura A 77- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 40% CH_4 /60% H_2

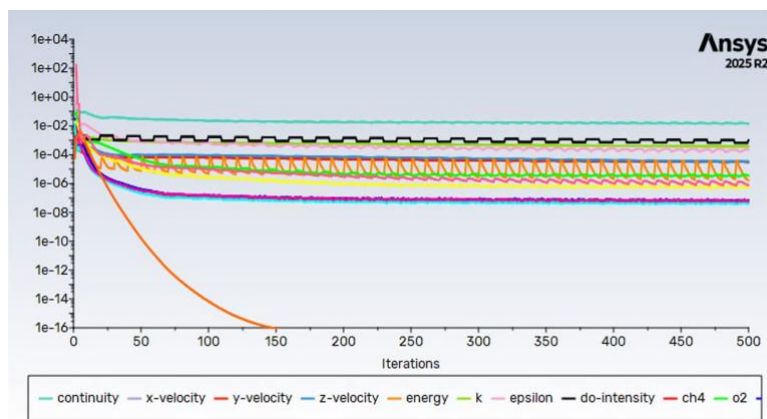


Figura A 78- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 30% CH_4 /70% H_2

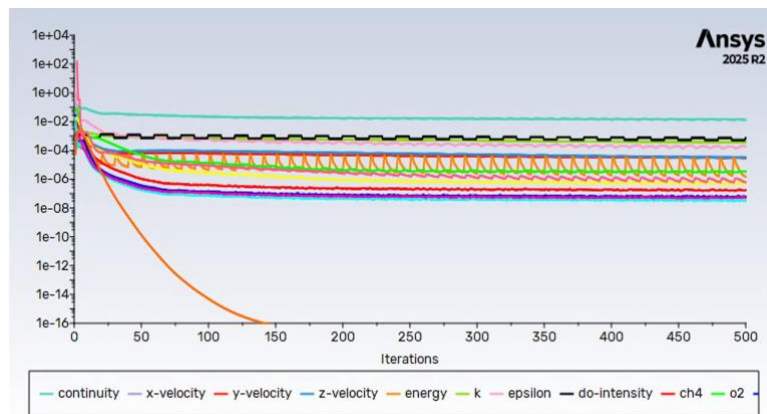


Figura A 79- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 20% CH_4 /80% H_2

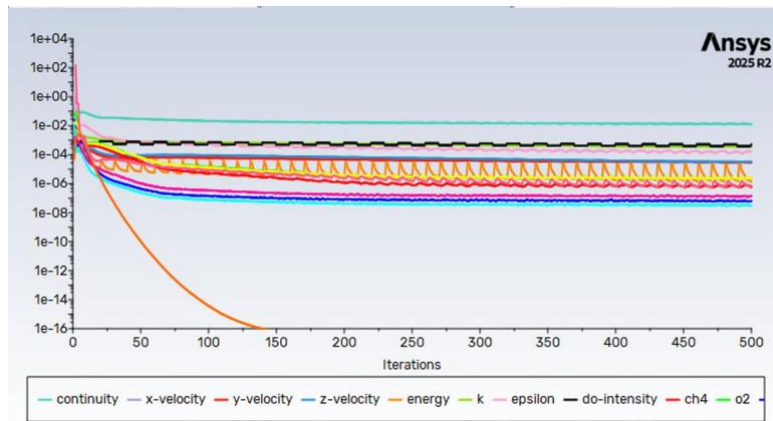


Figura A 80- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 10% CH₄/90% H₂

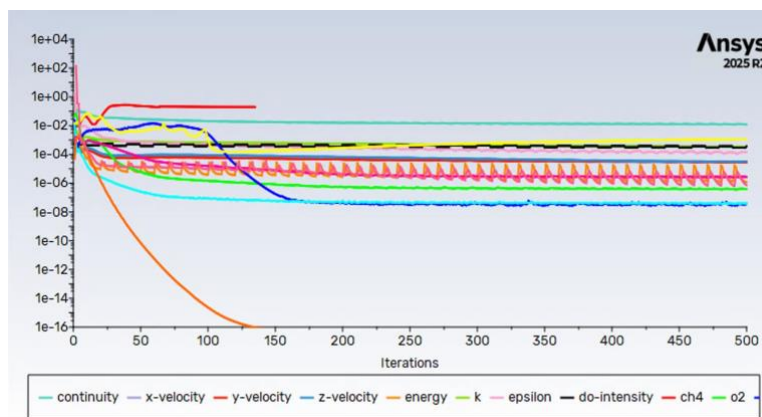


Figura A 81- Histórico de convergência dos resíduos normalizados da simulação CFD do fluido, forno com 4 queimadores 100% H₂

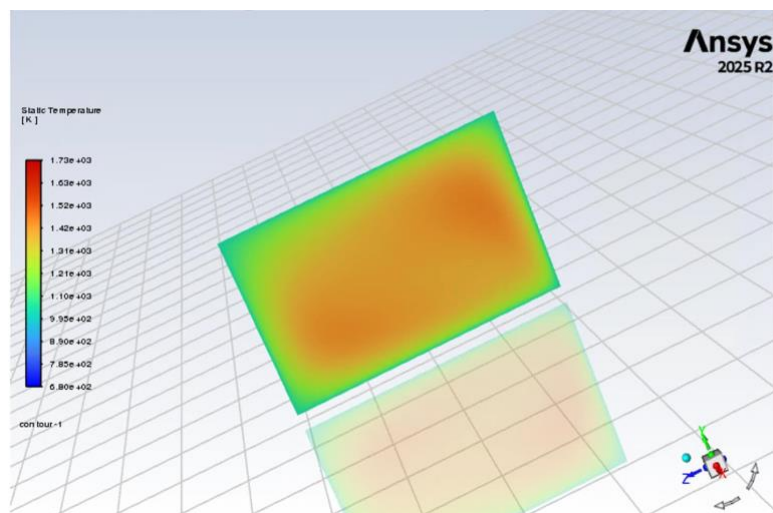


Figura A 82- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 100% CH₄ analisada

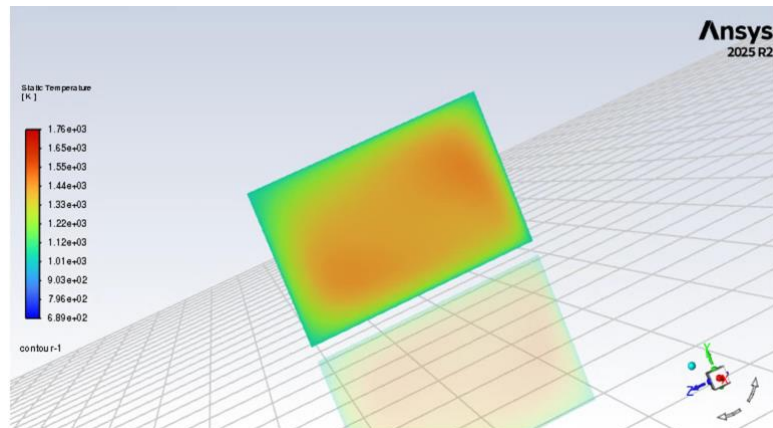


Figura A 83- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 90% CH_4 / 10% H_2 analisada

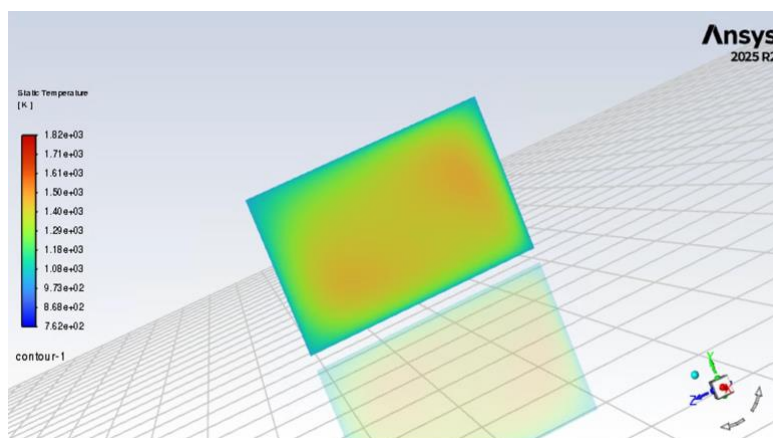


Figura A 84- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 80% CH_4 / 20% H_2 analisada

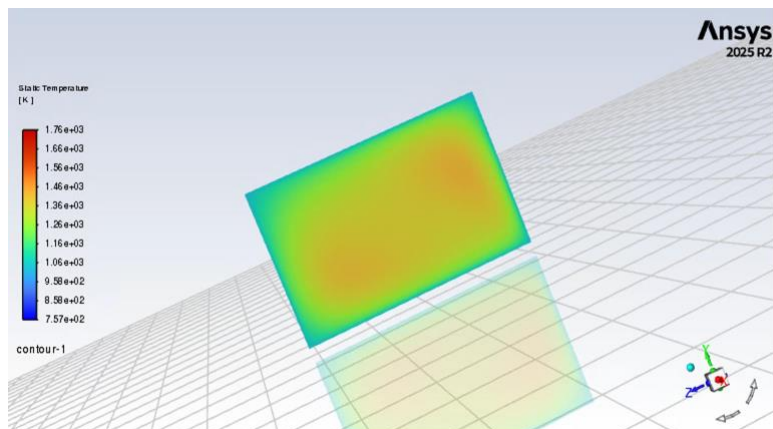


Figura A 85- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 70% CH_4 / 30% H_2 analisada

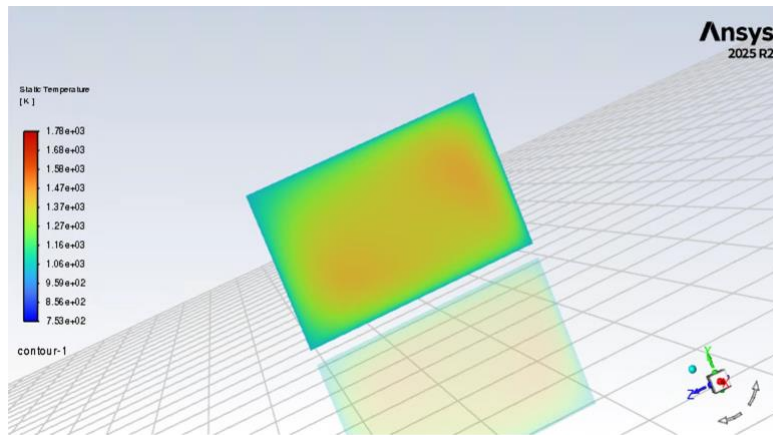


Figura A 86- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 60% CH_4 /40% H_2 analisada

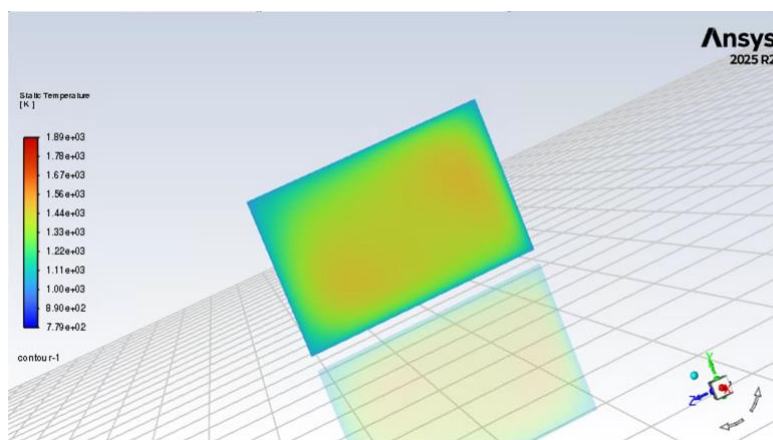


Figura A 87- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 50% CH_4 /50% H_2 analisada

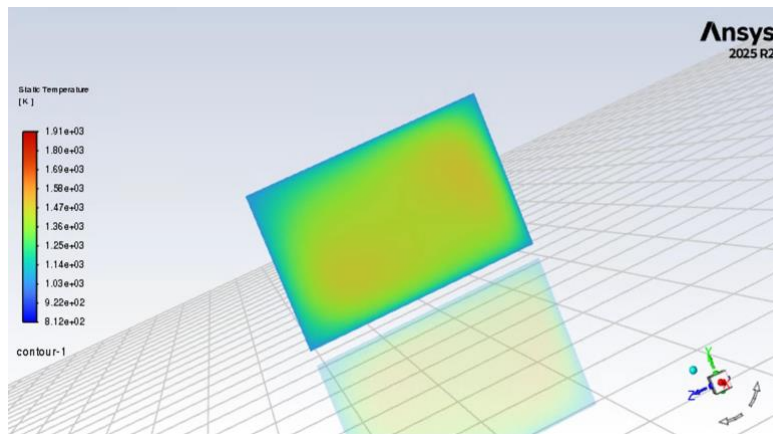


Figura A 88- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 40% CH_4 /60% H_2 analisada

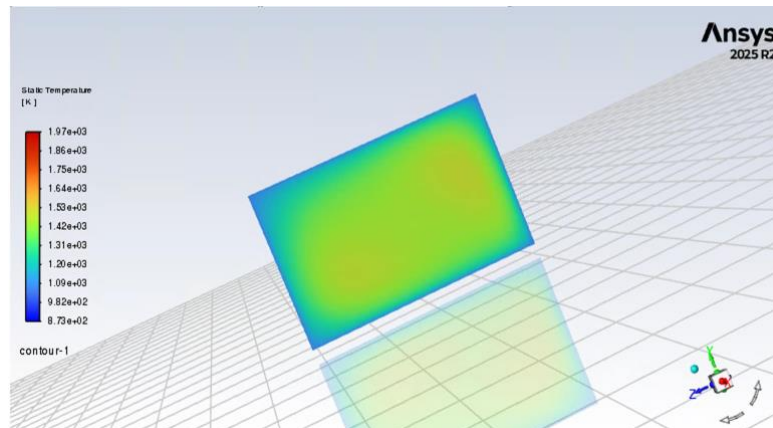


Figura A 89- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 30% CH_4 /70% H_2 analisada

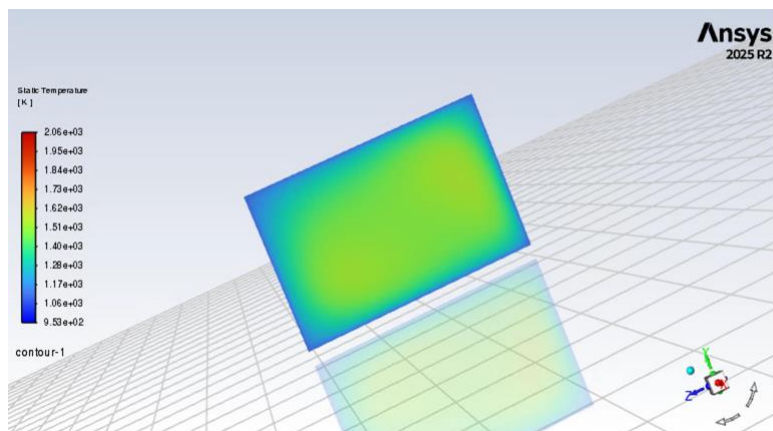


Figura A 90- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 20% CH_4 /80% H_2 analisada

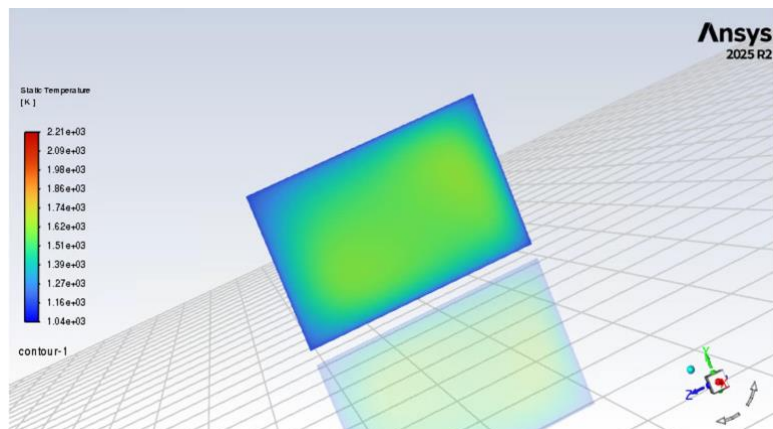


Figura A 91- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 10% CH_4 /90% H_2 analisada

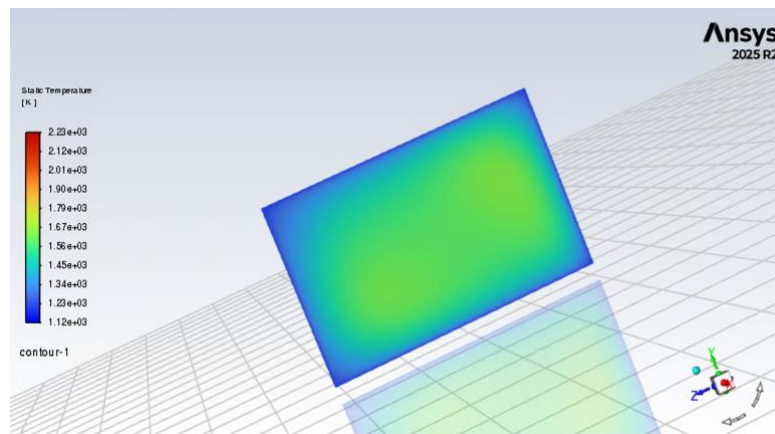


Figura A 92- Distribuição de temperatura estática no domínio do fluido, forno com 4 queimadores para a mistura 100% H_2 analisada