Encontro Nacional do Programa de Formação de Recursos Humanos da ANP - 2026

ANÁLISE NUMÉRICA DE PARÂMETROS DE SEGURANÇA DE CHAMAS DE JATO TURBULENTAS DE MISTURAS AMONIA-HIDROGÊNIO VIA CFD

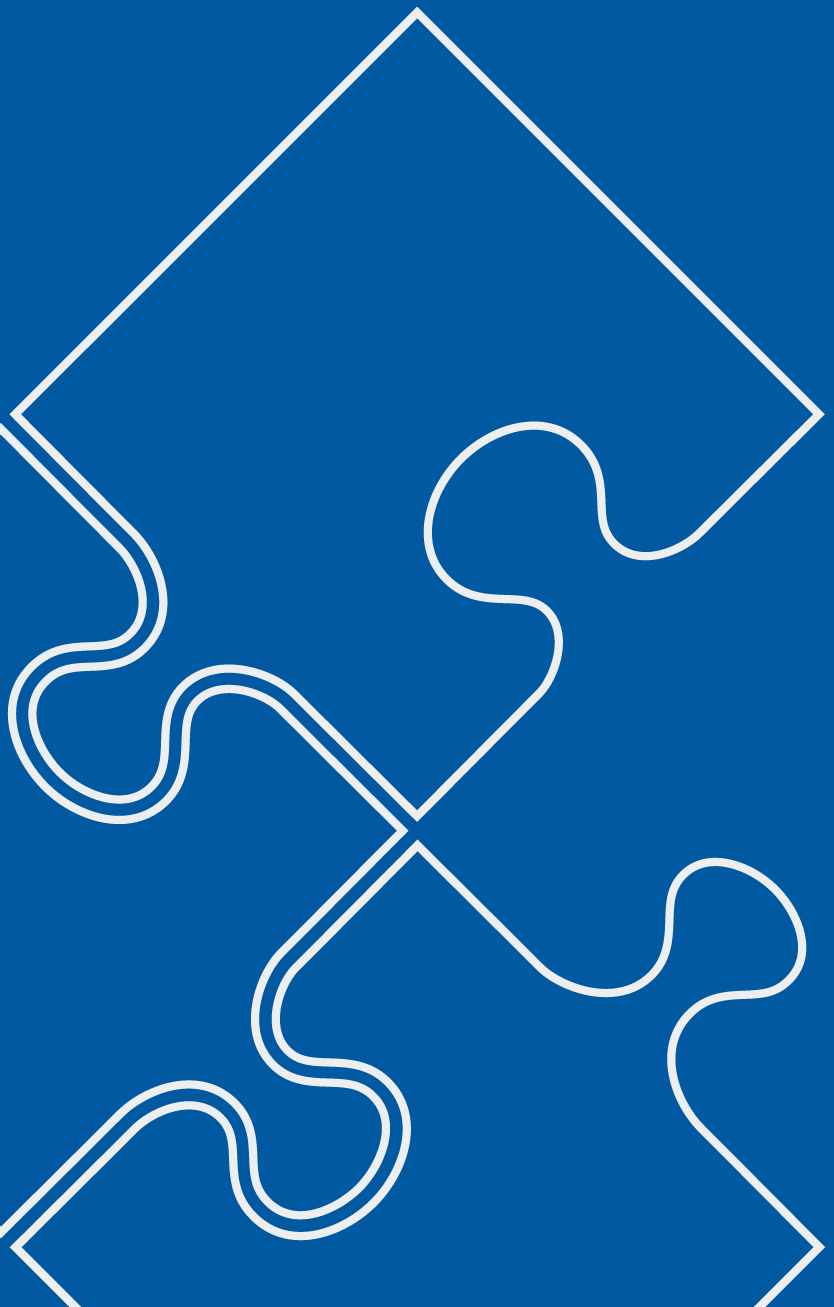
Matheus Klein; Savio Souza Venancio Vianna; Marcelo Castier

PRH 29.1/UNICAMP

Tipo de bolsa: Mestrado

Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Gestão:



#1

Introdução

Contextualização

- **Transição Energética e H_2:** Um combustível limpo e altamente reativo, porém limitado por desafios no armazenamento criogênico e no transporte.
- **Amônia (NH_3) como Vetor Energético:** Oferece alta densidade de hidrogênio e conta com uma infraestrutura bem estabelecida.
- **Misturas de NH_3-H_2:** O enriquecimento com hidrogênio aumenta a reatividade e estabiliza a combustão, tornando a mistura uma alternativa de combustível viável.
- **Escassez de Dados Preditivos para Vazamentos Acidentais:** Apresenta uma combinação complexa de perigos — contrastando a alta reatividade e velocidade de descarga do H_2 com a toxicidade aguda e a densidade da amônia.
- **Termo Fonte:** Imprecisões no cálculo da taxa de descarga inicial podem distorcer severamente as previsões de dispersão de nuvens inflamáveis e da radiação térmica de jatos de fogo.

Objetivos

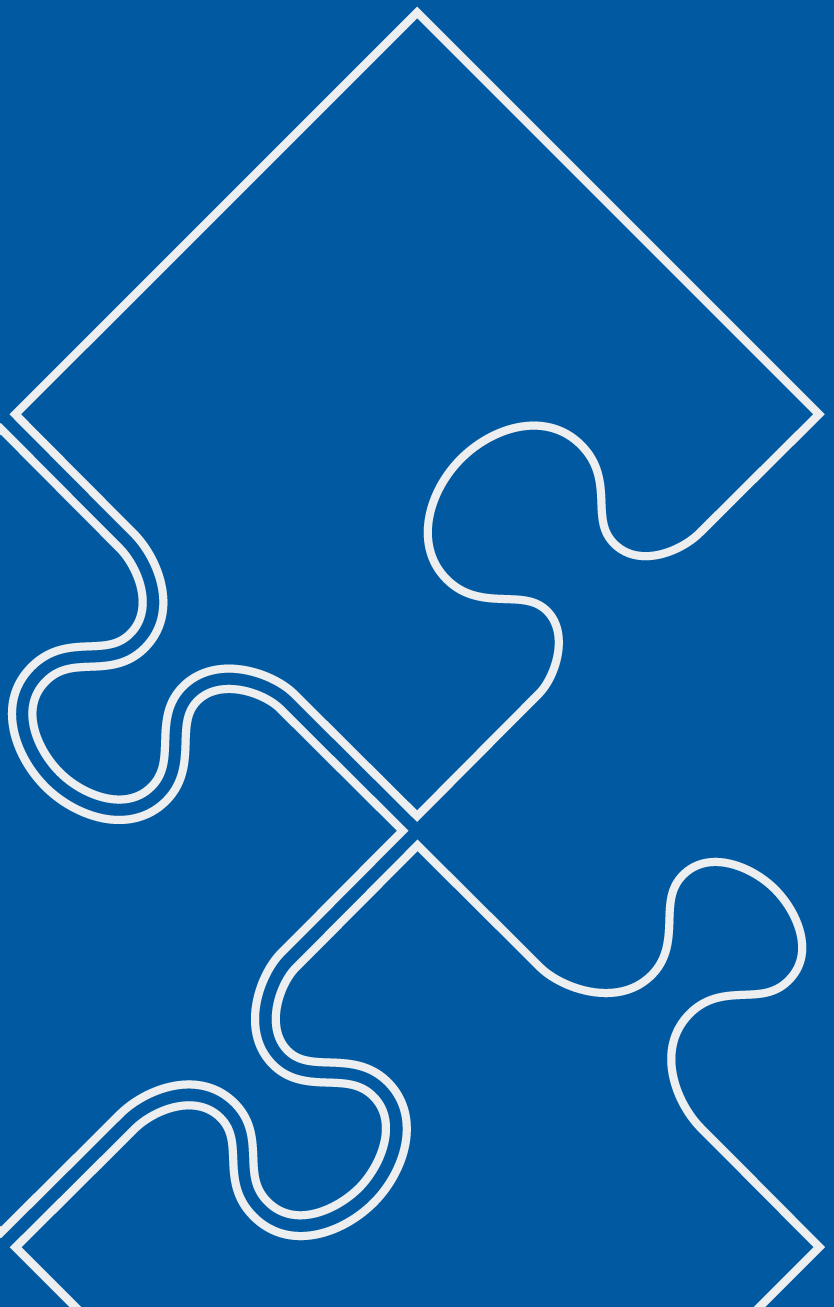
Modelagem Termodinâmica

Modelar a despressurização transiente (blowdown) para avaliar os impactos de abordagens simplificadas (gás ideal) em relação à termodinâmica de gás real.

Análise de Consequências

Avaliar as consequências de perda de contenção de misturas de NH_3-H_2 por meio de simulações CFD de dispersão atmosférica e jato de fogo.

Matheus Klein - Mestrado
PRH 29.1/UNICAMP



#2

Metodologia

Metodologia

Termo fonte

Case – Modelo de gás ideal

$$\dot{m}_{choked} = C_D A P_1 \sqrt{\frac{kM}{R_g T_1}\left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k+1}{k-1}}}$$

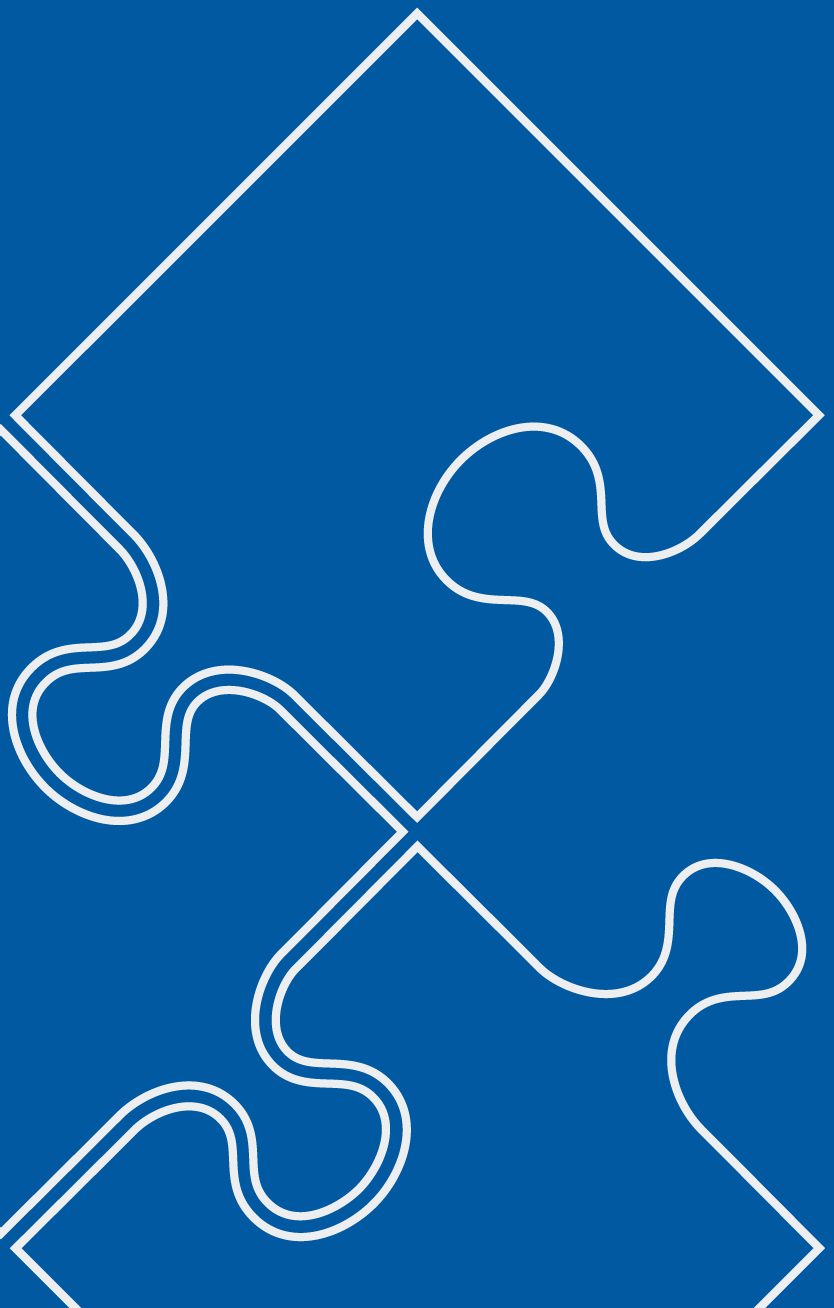
Ventop – Termodinâmica avançada
EDOs (conservação de massa e energia)
Dividido em três flashs principais:
Flash TVn – Estado inicial do tanque
Flash Uvn – Novo estado pela maximazação de entropia
Flash $H_{st}Sn$ – Condições no bocal e Velocidade do som

Bocal Virtual - Molkov

Modelagem CFD

Softwares – OpenFOAM e FLACS
Solver – reactingFoam
Turbulência –
RANS – k-ε *realizable*
LES – WALE
Modelo de Combustão – EDC
Esquemas – Linear Upwind (2ª ordem)
CFL_{max} = 1

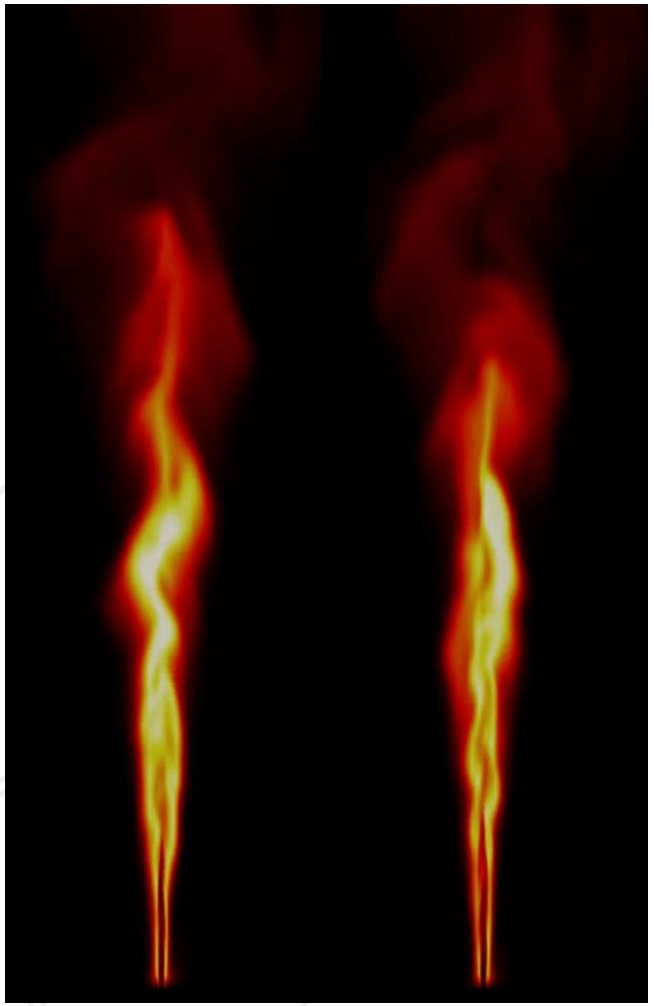
Matheus Klein - Mestrado
PRH 29.1/UNICAMP

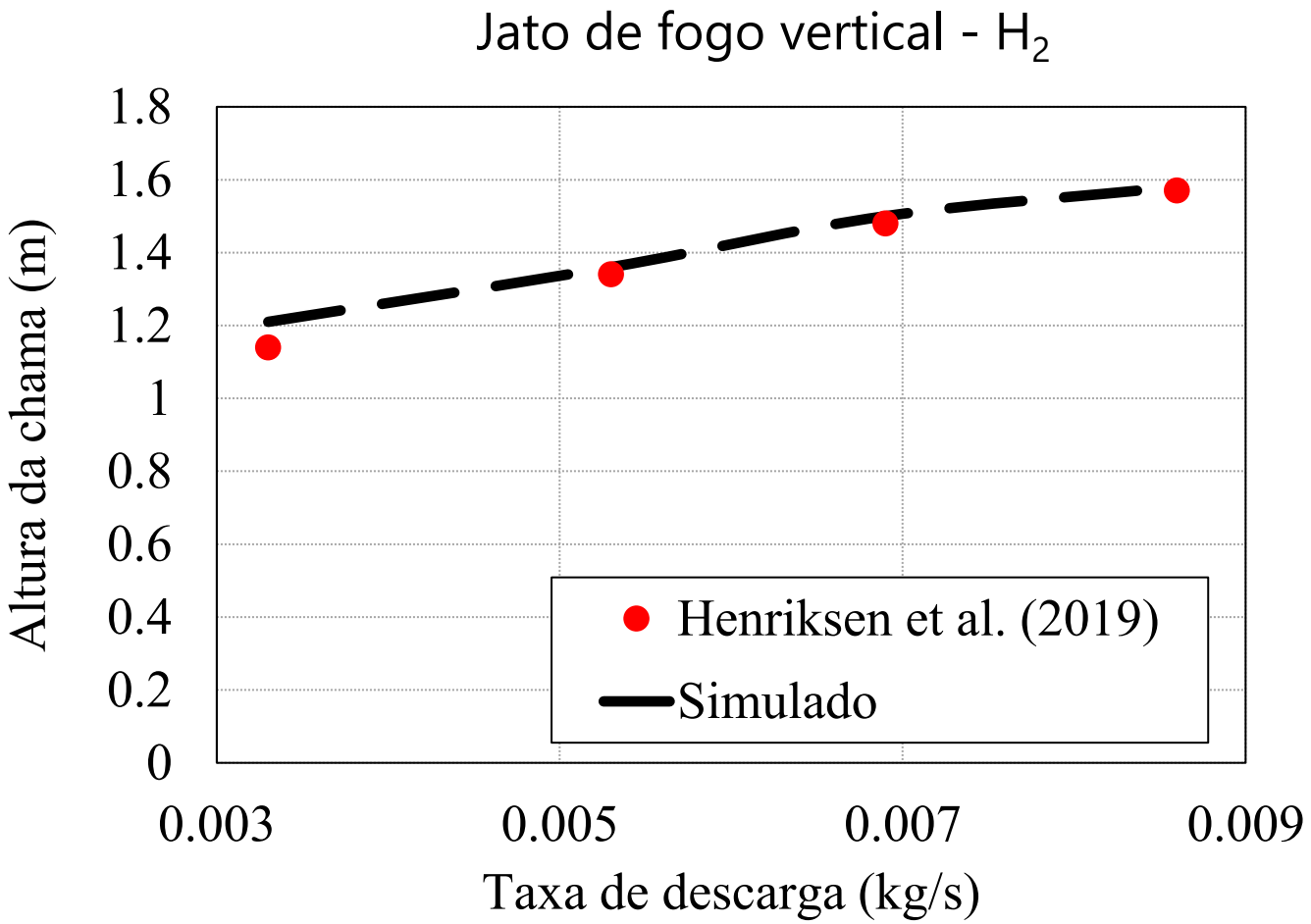


#3

Resultados

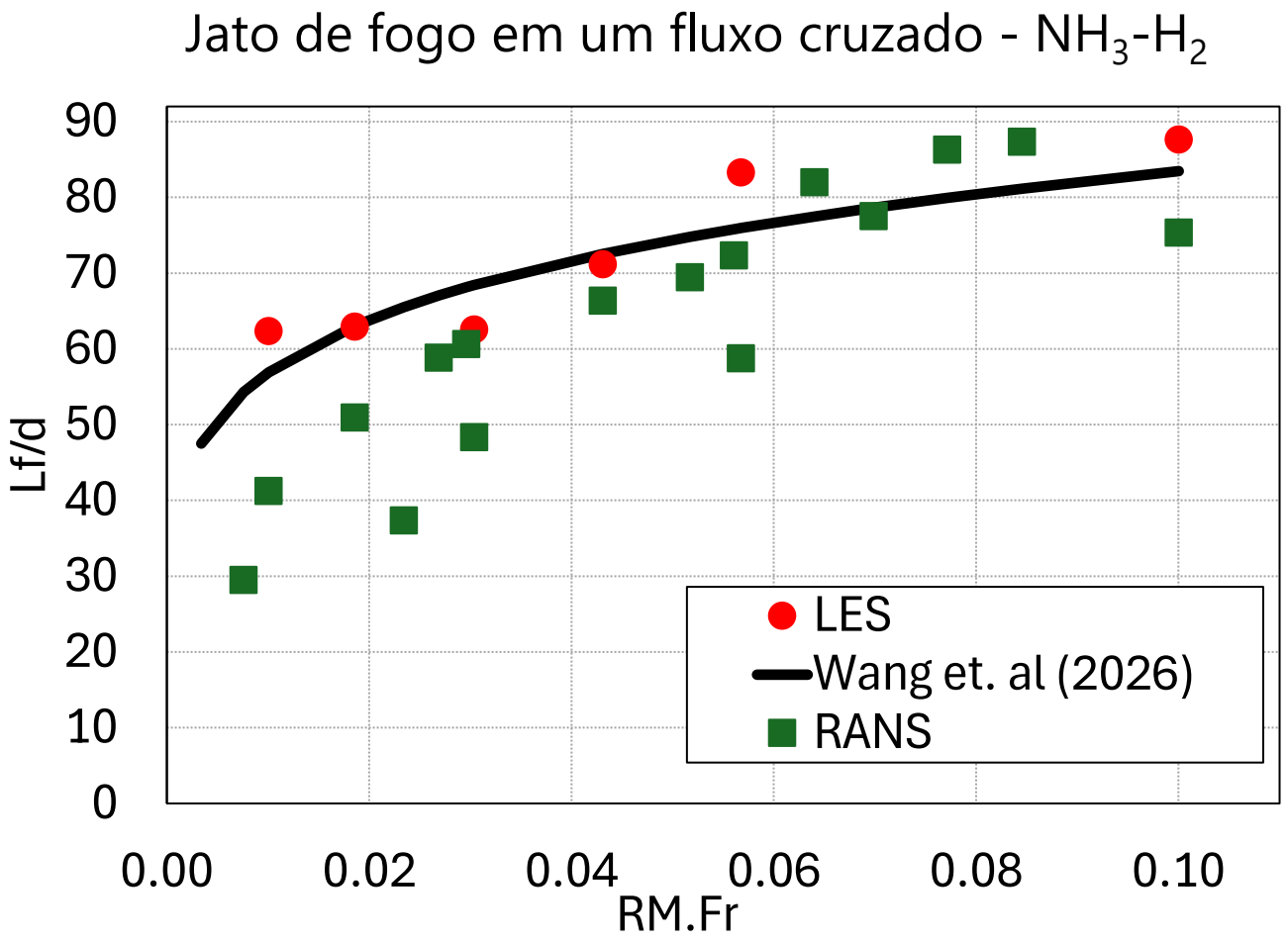
Validação Hidrogênio





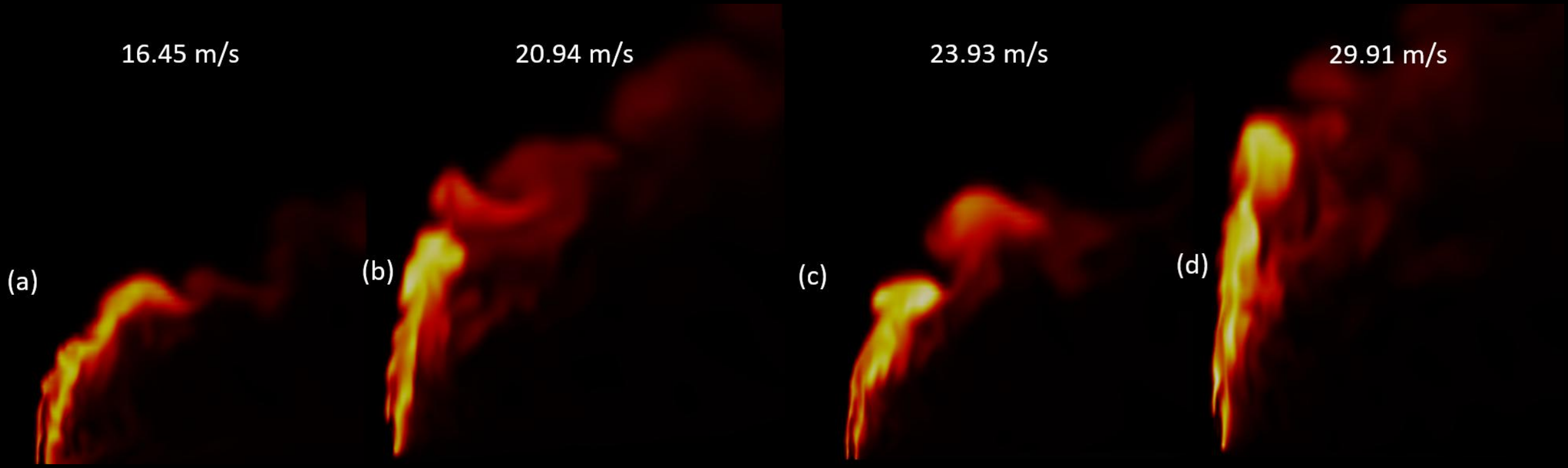
HENRIKSEN, M.; GAATHAUG, A.; LUNDBERG, J. Determination of underexpanded hydrogen jet flame length with a complex nozzle geometry. International Journal of Hydrogen **Energy**, v. 44, n. 17, 2019.

Validação da mistura NH_3-H_2



WANG, S.; LUO, Z.; LIU, L.; SU, B.; SHEN, J.; ZHANG, X.; WANG, Y.; TAN yunsong. Study on thermal radiation of h2-nh3 jet flames in crossflow: Experimental analysis andpredictive modeling. **Fuel**, v. 412, p. 138171, 2026.

Validação da mistura NH_3-H_2

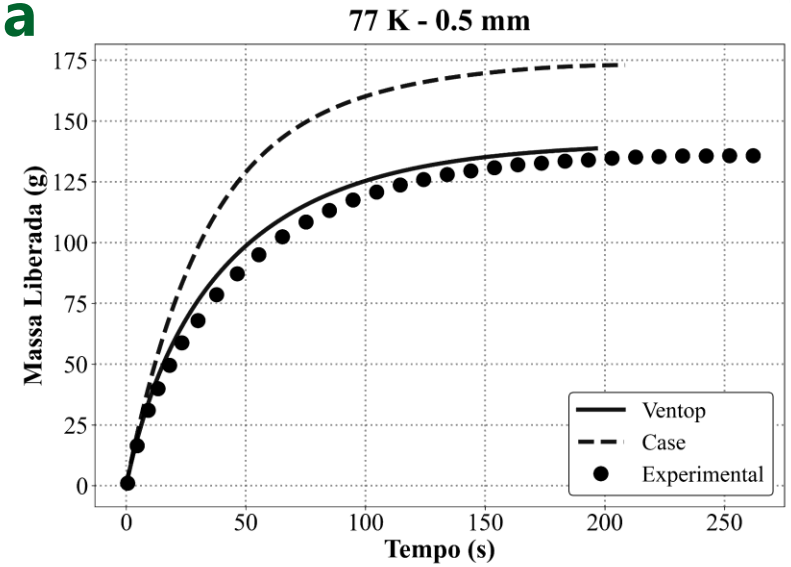


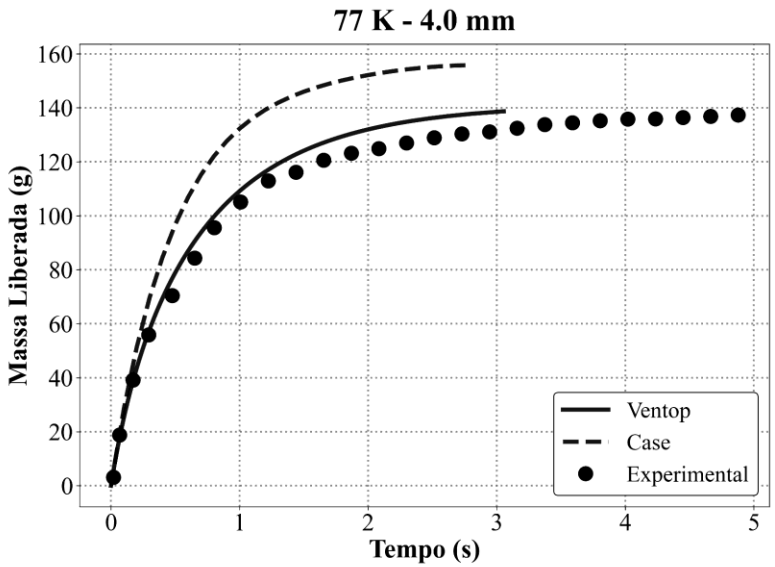
(a) 10L/min H2 and 1 L/min NH3; (b) 10 L/min H2 and 4 L/min NH3; (c) 15 L/min H2 and 1 L/min NH3 e (d) 15 L/minH2 and 5 L/min NH3

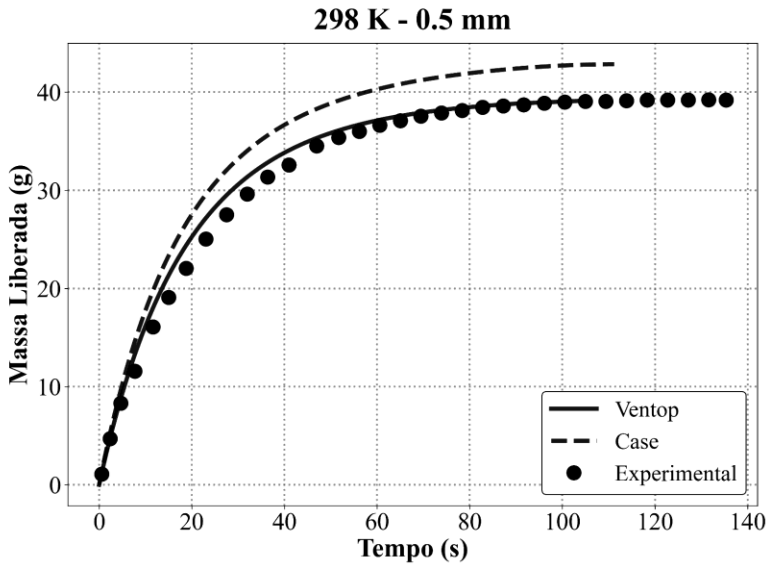
Matheus Klein - Mestrado
PRH 29.1/UNICAMP

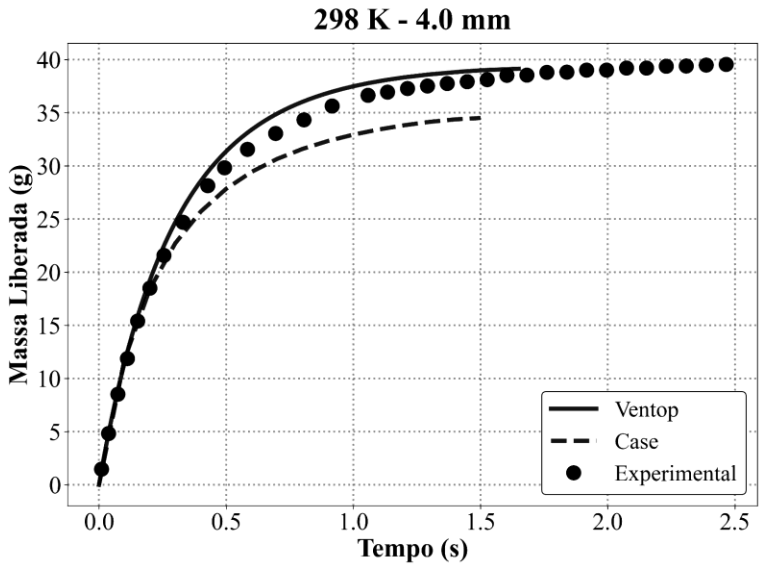
Validação - Descarga

Hidrogênio
Volume: 2.81 L
Altura: 0.183 m
Diâmetro: 0.13 m









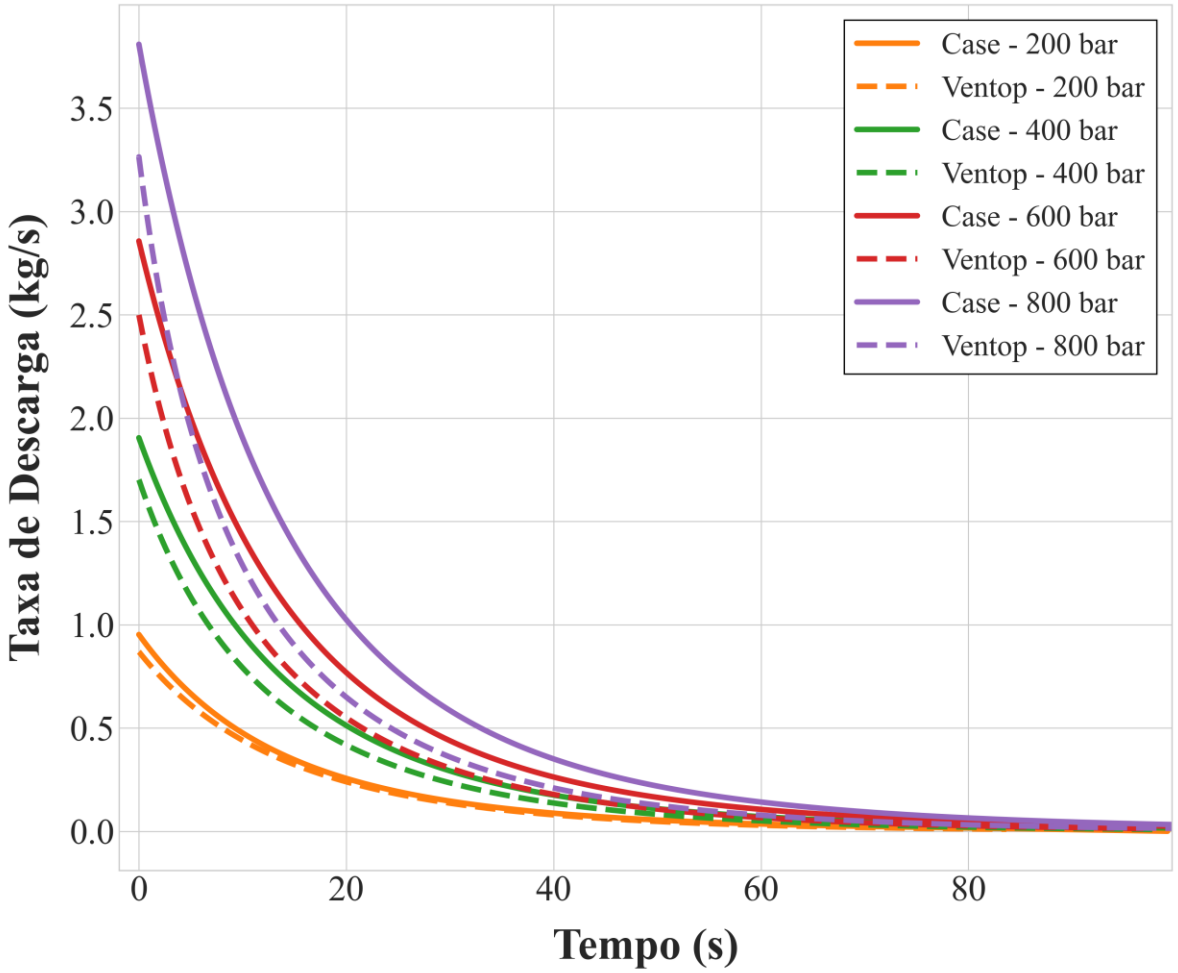
VENETSANOS, A. G.; GIANNISSI, S.; TOLIAS, I.; FRIEDRICH, A.; KUZNETSOV, M. Cryogenic and ambient gaseous hydrogen blowdown with discharge line effects. In: 9th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS 2021). Edinburgh, UK, 2021.

Matheus Klein - Mestrado
PRH 29.1/UNICAMP

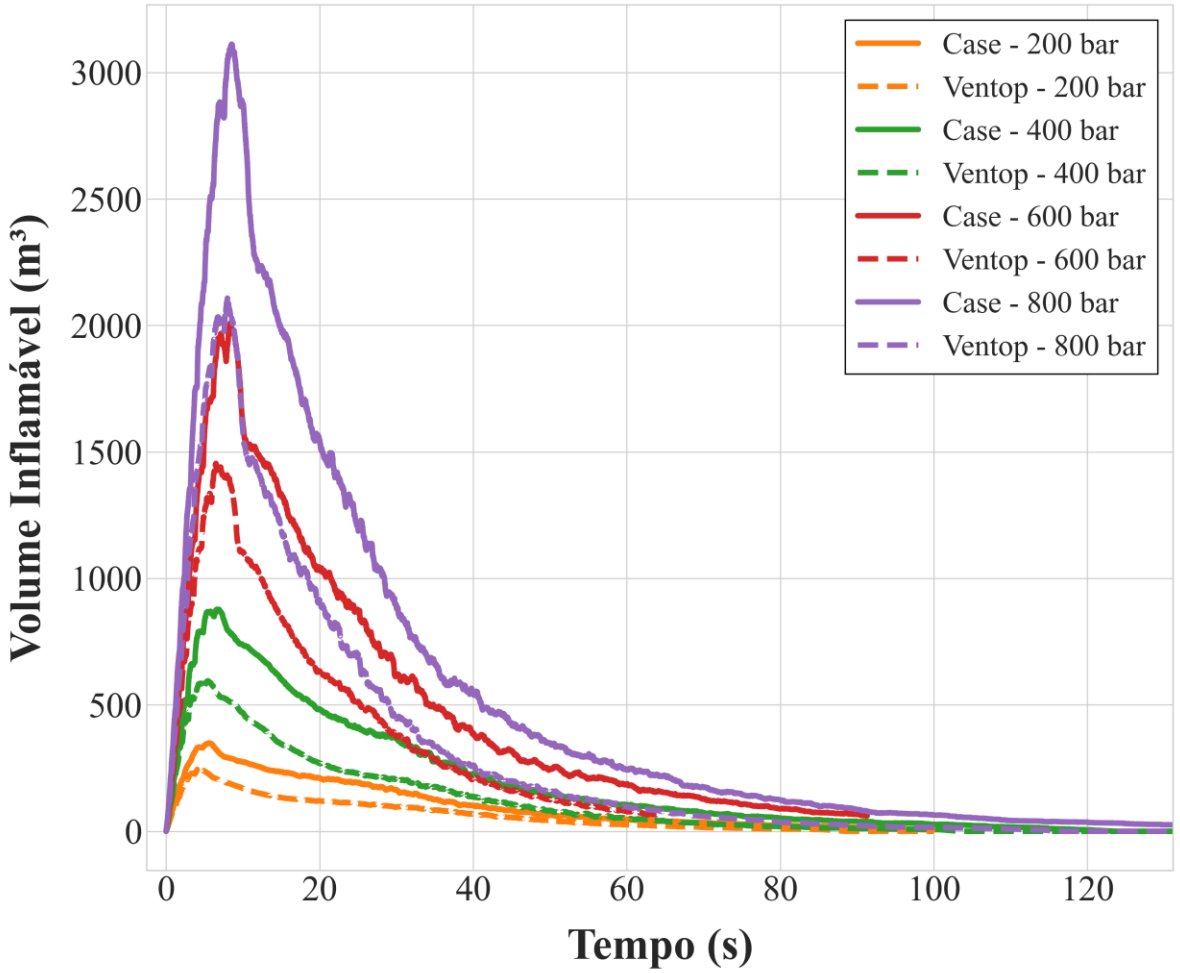
Dispersão

310 K

Diferença relativa máxima: 16.7%



Diferença relativa máxima: 47.9%

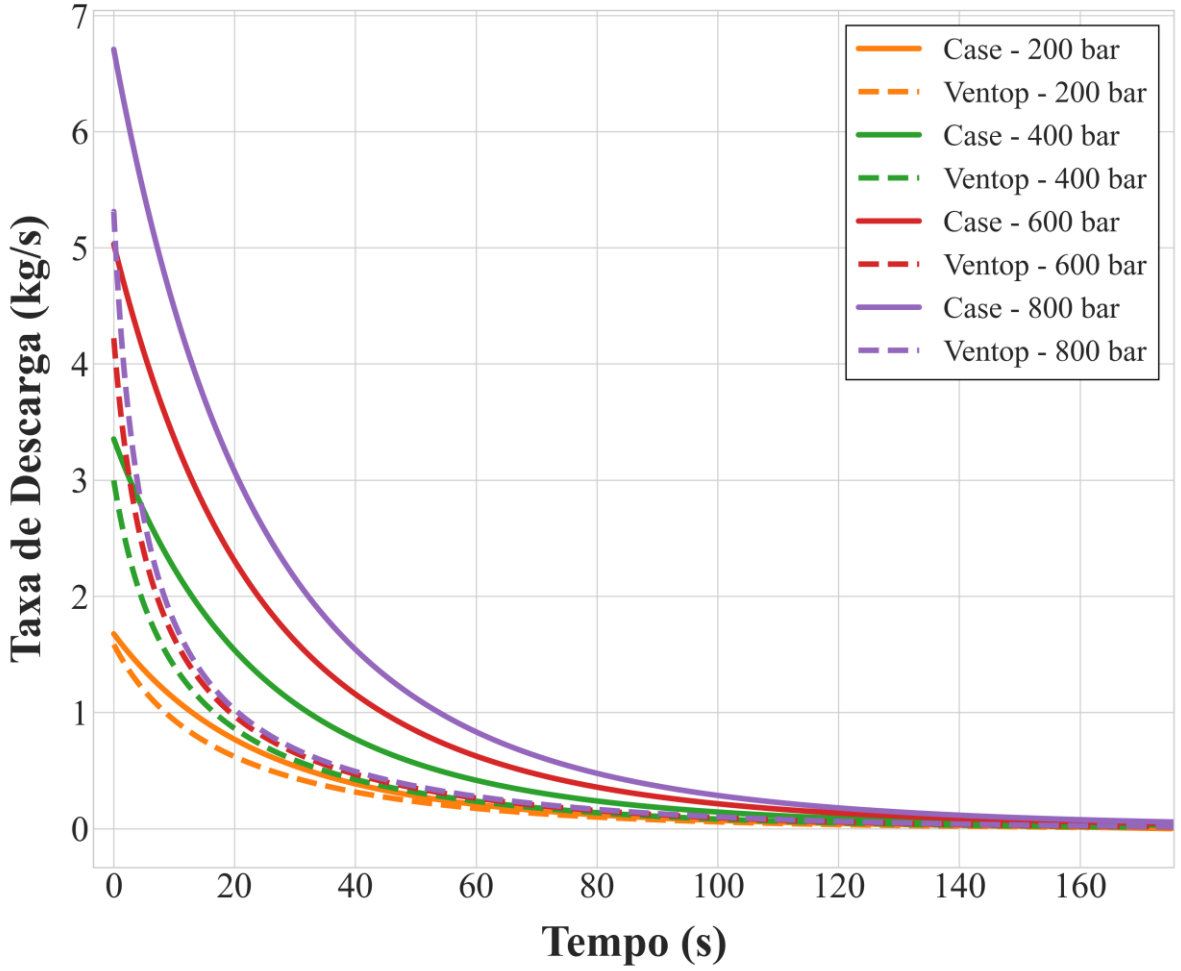


Matheus Klein - Mestrado
PRH 29.1/UNICAMP

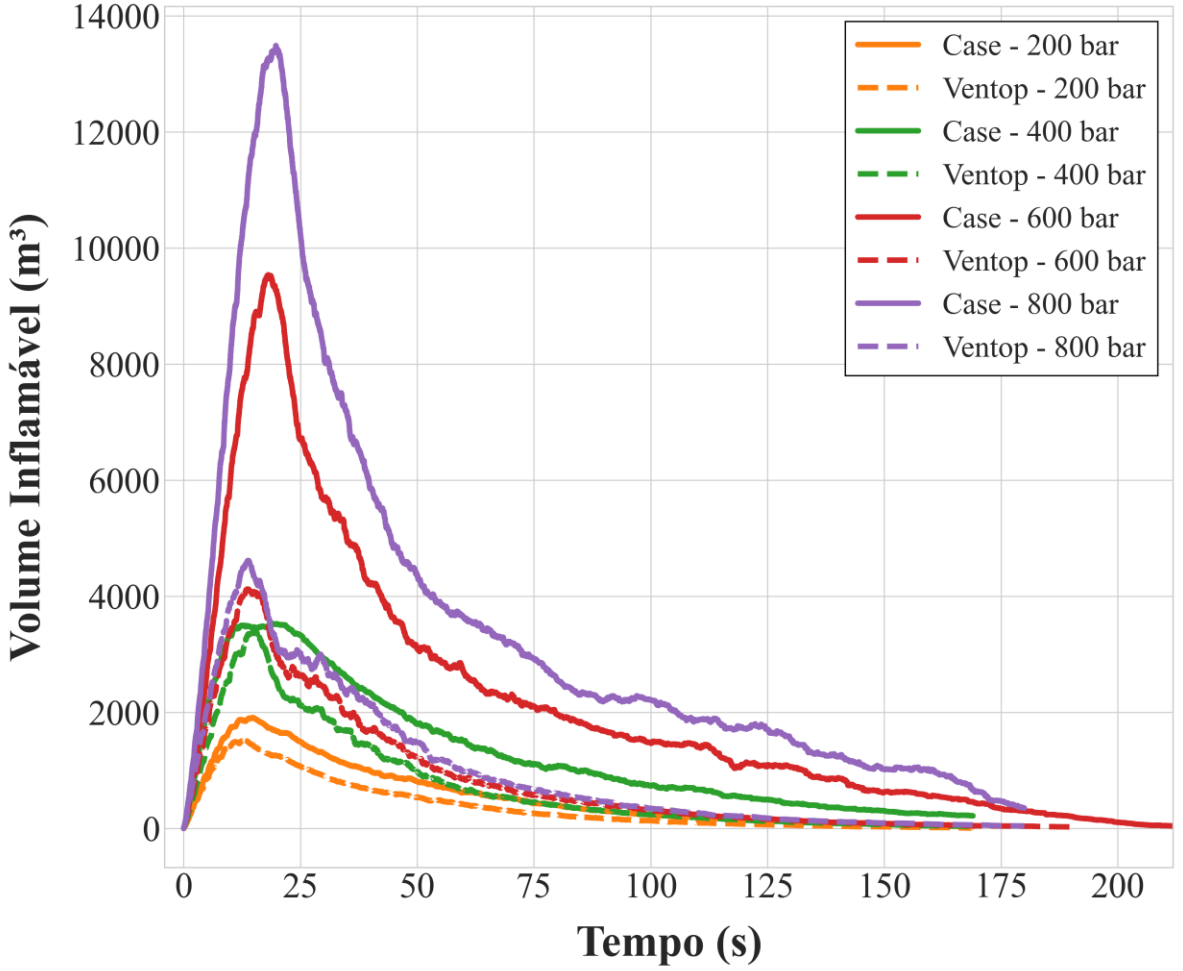
Dispersão

100 K

Diferença relativa máxima: 26.9%



Diferença relativa máxima: 192%



Matheus Klein - Mestrado
PRH 29.1/UNICAMP

Conclusão

Validação das simulações de jato de fogo de H_2 and NH_3-H_2 jet foram consideradas validadas em alto momento do jato

Modelo de gás ideal superestima a taxa de descarga em até 26.9%.

Esta discrepância superestima o volume da nuvem inflamável em até 192% se comparado ao modelo de gás real.

Próximos passos envolvem a análise do impacto do termo fonte na combustão de misturas de NH_3-H_2.

Matheus Klein - Mestrado
PRH 29.1/UNICAMP



Matheus Klein

Dados para contato

Email: m270083@dac.unicamp.br

Linkedin: linkedin.com/in/matheus-af-klein


prh anp


anp
Gestão:
FAPESP