



SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ABASTECIMENTO DE UM TANQUE A HIDROGÉNIO A CAUDAL CONSTANTE

JOSÉ MIGUEL TEIXEIRA MONTEIRO

Setembro de 2023

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ABASTECIMENTO DE UM TANQUE A HIDROGÉNIO A CAUDAL CONSTANTE

José Miguel Teixeira Monteiro

2023

Instituto Superior de Engenharia do Porto

Departamento de Engenharia Mecânica

isen

P.PORTO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ABASTECIMENTO DE UM TANQUE DE HIDROGÉNIO A CAUDAL CONSTANTE

José Miguel Teixeira Monteiro

1170674

Dissertação apresentada ao Instituto Superior de Engenharia do Porto para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, realizada sob a orientação do Professor Doutor Leonardo Ribeiro e sob coorientação do Engenheiro Gustavo Pinto.

2023

Instituto Superior de Engenharia do Porto

Departamento de Engenharia Mecânica

isen

P.PORTO

AGRADECIMENTOS

Aos amigos e familiares pelo apoio que sempre me prestaram e a todos os docentes que, de uma forma direta ou indireta, tornaram este capítulo da minha vida possível.

Um agradecimento especial ao Eng.^o Leonardo Ribeiro e Eng.^o Gustavo Pinto pelo apoio e disponibilidade durante a realização deste trabalho.

página propositadamente em branco

RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo a análise do escoamento de hidrogénio gasoso, a caudal mássico constante, em um tanque a alta pressão através de simulações numéricas. Para tal realizou-se um estudo intensivo do estado da arte sobre abastecimento de hidrogénio e ainda de simulações computacionais de fluidos. Através desse estudo foi possível um melhor entendimento dos fenómenos que ocorrem durante o abastecimento bem como os parâmetros importantes para a simulação atual. Dos resultados foi possível retirar-se que o modelo construído para a simulação apresentava bons resultados com o artigo de base para validação. Concluiu-se também que existe uma relação linear de aumento de temperatura em casos com o mesmo caudal mássico e não adiabáticos. As velocidades encontradas no tubo de *Inlet* podem levar a drásticas mudanças na temperatura estática do fluido nessa zona, devido ao seu efeito compressível. Tanto a consideração de paredes adiabáticas como a escolha de um polímero para o forro do tanque levam a aumentos de temperatura elevados. Concluiu-se ainda que o aquecimento do hidrogénio devido ao efeito *Joule-Thomson* foi negligenciável.

PALAVRAS-CHAVE

Hidrogénio; abastecimento de hidrogénio; armazenamento de hidrogénio; simulação CFD; caudal mássico constante.

página propositadamente em branco

ABSTRACT

The present work aims to analyze the flow of hydrogen gas, at constant mass flow rate, in a high-pressure tank through numerical simulations. To this end, an intensive study of the state of the art on hydrogen supply and computational fluid simulations was carried out. Through this study it was possible to better understand the phenomena that occur during fueling as well as the important parameters for the current simulation. From the results it was possible to conclude that the model built for the simulation presented good results with the base article for validation. It was also concluded that there is a linear relationship of temperature increase in cases with the same mass flow rate and non-adiabatic. The velocities found in the Inlet tube can lead to drastic changes in the static temperature of the fluid in this zone, due to its compressible effect. Both the consideration of adiabatic walls and the choice of a polymer for the tank lining led to high temperature increases. It was also concluded that the heating of hydrogen due to the Joule-Thomson effect was negligible.

KEYWORDS

Hydrogen; hydrogen filling; hydrogen storage; CFD simulation; constant mass flow rate.

página propositadamente em branco

ÍNDICE

ÍNDICE DE FIGURAS	IX
ÍNDICE DE TABELAS	XIII
LISTAS DE SIGLAS E SÍMBOLOS.....	XV
1. INTRODUÇÃO	19
1.1. Enquadramento e motivação.....	19
1.2. Objetivos de investigação.....	19
1.3. Opções de metodologia	19
1.4. Estrutura do trabalho	19
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	21
2.1. Hidrogénio.....	21
2.2. Sustentabilidade.....	22
2.3. Formas de utilização e armazenamento de hidrogénio.....	24
2.3.1. Células de Combustível.....	25
2.3.2. Armazenamento.....	27
2.4. Processo de enchimento do tanque.....	28
2.4.1. Fases de Enchimento	29
2.4.2. Tipos de compressores	31
2.5. Protocolos para abastecimento de veículos leves.....	32
2.6. Fatores que influenciam aumento de temperatura durante abastecimento.....	35
2.6.1. Revestimento	35
2.6.2. Taxa de aumento da pressão	36
2.6.3. Condições iniciais e adiabáticas	37
2.6.4. Velocidade e diâmetro.....	38
2.6.5. Tanques longos	40
2.6.6. Pré-arrefecimento.....	40
2.6.7. Efeito <i>Joule-Thomson</i>	41
2.7. Simulação CFD.....	42
2.7.1. Pré-Processamento.....	44
2.7.1.1. Geometria e malha.....	44
2.7.1.2. Zonas, materiais e estado.....	45
2.7.1.3. Condições de fronteira.....	46
2.7.1.4. Tratamento na parede	47
2.7.1.5. Modelos de turbulência	50
2.7.2. <i>Solver</i>	54
2.7.2.1. <i>Solver</i> e algoritmo de acoplamento pressão-velocidade	54
2.7.2.2. Métodos de discretização	56
2.7.2.3. Convergência.....	59
2.7.2.4. Inicialização e cálculos.....	59

2.7.3. Pós-processamento.....	60
3. MÉTODOS E APLICAÇÃO	61
3.1. Validação e verificação	61
3.2. Simulações a realizar	62
3.3. Escolha de parâmetros para Pré-processamento	64
3.3.1. Geometria	64
3.3.2. Malha	65
3.3.3. Zonas e propriedades físicas	66
3.3.4. Condições de fronteira aplicadas.....	67
3.3.5. Escolha do modelo de turbulência.....	68
3.4. Configuração do <i>Solver</i>	68
3.4.1. Escolha do <i>Solver</i> e método de acoplamento.....	68
3.4.2. Discretização	68
3.4.3. Convergência, inicialização e cálculos.....	69
3.5. Pós-processamento	69
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	71
4.1. Resultados da validação e verificação	71
4.2. Comparação entre o modelo Standard e Realizable.....	77
4.3. Aumento de temperaturas em equilíbrio total com o ambiente.....	77
4.4. Aumento da temperatura de <i>Inlet</i> em condições de temperatura de equilíbrio fixa.....	78
4.5. Influência da variação do caudal mássico na velocidade e temperatura	79
4.6. Tanque adiabático	82
4.7. Tanque tipo 4	84
4.8. Verificação do impacto do efeito Joule-Thomson.....	86
5. CONCLUSÃO	89
5.1. Conclusões finais	89
5.2. Limitações e trabalhos futuros.....	89
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	91
APÊNDICE A	97
ANEXO A	99

página propositadamente em branco

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1- Previsão da geração de eletricidade mundial por combustível e renovável [11].....	23
Figura 2- Esquema de célula de combustível [18].....	25
Figura 3- Componentes de automóvel a células de combustível [19].....	27
Figura 4- Equipamento de medição à entrada do tanque [25].....	29
Figura 5- Influência da mudança de fase nas pressões e temperaturas (a) e taxas de temperatura (b) [23].....	30
Figura 6- Sistema de abastecimento <i>Multi-Bank Dispensing</i> [25].....	30
Figura 7- Compressor a pistão (a); Compressor de diafragma (b); Compressor linear (c); Compressor líquido iónico (d) [26].....	31
Figura 8- Conector [30].....	32
Figura 9- Densidade alvo em função da pressão e temperatura [30].....	33
Figura 10- Tabela SAE para enchimento de tanque [30].....	34
Figura 11- Diferença entre temperatura alumínio e hidrogénio para tempos de abastecimento diferentes [32].....	35
Figura 12- Padrões de aumento de pressão [32].....	36
Figura 13- Diferença entre temperaturas iniciais e finais do hidrogénio no centro do tanque [32]	37
Figura 14- Diferença entre temperaturas máximas e iniciais no centro do tanque [32].....	37
Figura 15- Variação da temperatura do hidrogénio na parte superior em função do diâmetro e taxa aumento de pressão [32].....	39
Figura 16- Estratificação em tanques longos [42].....	40
Figura 17- Curva de isentálpica do coeficiente <i>Joule-Thomson</i> [48].....	42
Figura 18- Fluxograma etapas em uma simulação [49].....	43
Figura 19- Tipos de células e Estruturas da malha [51].....	44
Figura 20- Classificação dos valores de Skewness [52].....	45
Figura 21- Ortogonalidade entre duas células [52].....	45
Figura 22- Classificação dos valores de ortogonalidade [52].....	45
Figura 23- Perfil de velocidade e distância da parede adimensionais [52].....	47
Figura 24- Tratamento para resolução da malha (a) e <i>Wall Functions</i> (b) [56].....	48
Figura 25- Zonas de escoamento [56].....	49
Figura 26- Gradientes em caso de separação da superfície pelo fluido [57].....	50
Figura 27- Modelos para cálculo numérico de escoamentos turbulentos [58].....	51
Figura 28- Componentes da velocidade em escoamento turbulento [58].....	52
Figura 29- Modelos turbulentos <i>RANS</i>	52
Figura 30- Custo computacional de alguns modelos <i>RANS</i>	52
Figura 31- Tipos de <i>Solvers</i> [62].....	55
Figura 32- Pontos de discretização [63].....	56
Figura 33- Interpolação [65].....	57
Figura 34- Esquema da geometria.....	64
Figura 35- Malha 1.....	65
Figura 36- Malha 4.....	66
Figura 37- Condições de fronteira definidas pelo utilizador.....	67
Figura 38- Distribuição do Y^* pelo tubo <i>Inlet</i>	72

Figura 39- Validação (Temperatura hidrogénio).....	73
Figura 40- Validação (Temperatura alumínio)	74
Figura 41- Temperatura estática.....	74
Figura 42- Temperatura no alumínio (a), Temperatura na fibra de carbono (b).....	75
Figura 43- Velocidade máxima	75
Figura 44- Velocidade aos 50 segundos (a), Velocidade aos 50 segundos com limite de 5 m.s ⁻¹ (b)	76
Figura 45- Resíduos	76
Figura 46- Aumento de temperaturas médias do Caso 3	77
Figura 47- Aumento de temperaturas do alumínio do Caso 3.....	78
Figura 48- Aumento de temperaturas médias do Caso 4	79
Figura 49- Aumento de temperaturas médias com o aumento de caudal mássico	79
Figura 50- Variação da velocidade com o caudal mássico	80
Figura 51- Variação no número de <i>Mach</i> com o caudal mássico	81
Figura 52- Variação da temperatura máxima de <i>Inlet</i> com o caudal mássico	81
Figura 53- Temperatura estática no <i>Inlet</i> aos 0,04 segundos de escoamento real	82
Figura 54- Velocidade <i>Inlet</i> aos 0,04 segundos de escoamento real	82
Figura 55- Aumento temperatura média no Caso 5	83
Figura 56- Aumento temperatura média Caso 7.....	83
Figura 57- Tanque adiabático.....	84
Figura 58- Aumento de temperaturas em um tanque 3 (Caso 4) e 4 (Caso 8)	85
Figura 59- Variação da pressão em um tanque tipo 3 (Caso 4) e 4 (Caso 8).....	85
Figura 60- Variação da velocidade em um tanque tipo 3 (Caso 4) e 4 (Caso 8).....	86
Figura 61- Diferença de pressão máxima e mínima no tanque	86

página propositadamente em branco

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades físicas de gases [5]	21
Tabela 2 – Classificação hidrogénio por cores [14] adaptado.....	24
Tabela 3 – Tipos de tanques de hidrogénio [20].....	27
Tabela 4 – Influência de condições iniciais e adiabáticas	38
Tabela 5 – Exemplo de tabela	39
Tabela 6 – Pré-arrefecimento	41
Tabela 7 – Condições de fronteira típicas.....	46
Tabela 8 – Modelos turbulentos em simulações <i>CFD</i> de abastecimento de tanque com hidrogénio	53
Tabela 9 – Simulações realizadas	63
Tabela 10 – Dimensões	64
Tabela 11 – Dimensões das malhas	65
Tabela 12 – Propriedades físicas	66
Tabela 13 – Parâmetros temporais da simulação.....	69
Tabela 14 – Pontos de medição da temperatura.....	69
Tabela 15 – Exemplo de tabela	72
Tabela 16 – Independência temporal	73
Tabela 17 – Exemplo de tabela	77
Tabela 18 – Pressões e velocidades Caso 3.....	78
Tabela 19 – Diferença de temperatura média entre Caso 5 e 3	83
Tabela 20 – Diferença de temperatura média entre Caso 7 e 4	84

página propositadamente em branco

LISTAS DE SIGLAS E SÍMBOLOS

Lista de Siglas

Inlet	Entrada computacional do fluido
CFD	Computational Fluid Dynamics
H ₂	Molécula de hidrogénio
VED	Densidade energética por unidade de volume
GED	Densidade energética por unidade de massa
UE	União Europeia
NOX	Óxido nitroso
EV	Electric vehicle
PEMFC	Proton-exchange membrane fuel cell
H ⁺	Protão de hidrogénio
e ⁻	Elétron
H ₂ O	Molécula água
H ₂	Molécula oxigénio
DC	Direct current
AC	Alternating current
M	Metal
JRC-IET	Joint Research Centre-Institute for Energy and Transport
SOC	State of Charge
SAE	society of automotive engineers
NWP	Normal working pressure
APRR	Average pressure ramp rate
Outlet	Saída computacional do fluido
Log-Law	Região logaritmica
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RSM	Reynolds Stress Model
UDF	User Defined Function
HDPE	High-density polyethylene
Inlet	Entrada computacional do fluido
CFD	Computational Fluid Dynamics
H ₂	Molécula de hidrogénio
VED	Densidade energética por unidade de volume
GED	Densidade energética por unidade de massa
UE	União Europeia
NOX	Óxido nitroso

Lista de Símbolos

m	massa	kg
ρ_{REF}	densidade de referência	kg.m ⁻³
ρ	densidade	kg.m ⁻³
P	pressão	Pa
T	temperatura	°C ou K
μ_{JT}	coeficiente Joule-Thomson	K.Pa ⁻¹
T_0	temperatura total	°C ou K
M	mach	-
γ	razão entre calor específico a pressão constante	-
Z	fator de compressibilidade	-
R	constante universal dos gases ideais	J.mol ⁻¹ .K ⁻¹
U^+	velocidade adimensional parede	-
y^+	distancia adimensional parede	-
$U\tau$	velocidade de cisalhamento	-
μ	viscosidade dinâmica	Pa.s
τ_w	tensão cisalhamento	-
C_f	coeficiente de fricção	-
∂	derivada	-
u	velocidade	m.s ⁻¹
k_P	energia cinética turbulenta	-
y^*	distancia adimensional parede utilizada pelo Ansys Fluent	-
U^*	velocidade adimensional parede utilizada pelo Ansys Fluent	-
g	gravidade	m.s ⁻²
u'_i	componente flutuante da velocidade	m.s ⁻¹
δ_{ij}	Kronecker delta	-
μ_t	viscosidade turbulenta	Pa.s
e	taxa de dissipação turbulenta	-
Y_M	contribuição da dilatação flutuante na taxa de dissipação	-
M_t	mach turbulento	-
P_{OP}	pressão operativa	Pa
M_W	massa molar	Kg.mol ⁻¹
t	tempo	s
V	volume	m ³
ϕ	variável	-
A	área	m ²
F	função	-
C_p	calor específico a pressão constante	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹

k	condutibilidade térmica	$W.m^{-1}.K^{-1}$
m	massa	kg
ρ_{REF}	densidade de referência	$kg.m^{-3}$

página propositadamente em branco

1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo será feita uma breve introdução da motivação e objetivos deste trabalho, bem como a metodologia escolhida e a sua estrutura.

1.1. Enquadramento e motivação

O hidrogénio como fonte de energia é um tema incontornável no cenário internacional para um desenvolvimento mais sustentável.

As suas propriedades físicas possibilitam a sua utilização em um grande leque de aplicações e é esperado que seja uma das tecnologias principais na transição energética. Mas para que tal aconteça, ainda é necessário mais desenvolvimento e investigação para que seja competitiva com os combustíveis fósseis e veículos a elétricos a baterias.

1.2. Objetivos de investigação

O presente trabalho tem como objetivo a realização de simulações numéricas, para estudar o comportamento do escoamento de hidrogénio em um tanque a alta pressão.

Ao contrário da maioria dos estudos atuais que se focam em uma condição de *Inlet* de pressão variável, o presente estudo utiliza uma condição de caudal mássico constante de modo a representar um enchimento total através de um compressor.

1.3. Opções de metodologia

A metodologia utilizada para realização das simulações passou por, primeiramente, realizar testes de verificação e validação em relação a um artigo base, sendo que as suas dimensões e resultados dessas duas etapas foram utilizados nos restantes casos.

As simulações posteriores serviram para avaliar propriedades como a temperatura, pressão e velocidade em diferentes condições de escoamento e de tanque.

1.4. Estrutura do trabalho

O presente trabalho divide-se em seis grandes grupos. O primeiro, onde serão expostos os seus objetivos e motivação, bem como um breve resumo da metodologia e estrutura que foi utilizada.

No segundo grupo será apresentado o estado da arte sobre o hidrogénio como vetor energético: as suas características, utilização como combustível, métodos de armazenamento, entre outros.

No terceiro grupo será feita uma introdução ao mundo das simulações computacionais.

Na quarta secção será discutido o processo de desenvolvimento das simulações, os seus objetivos e características.

Por último são apresentadas as conclusões dos resultados obtidos.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta secção são apresentadas as características do hidrogénio bem como o seu papel como energia para o desenvolvimento sustentável.

Para além disso, discute-se os métodos de produção, armazenamento e protocolos utilizados atualmente para esta tecnologia.

É apresentado um resumo do estado da arte, sobre as variáveis que influenciam o abastecimento de hidrogénio em tanques a pressões elevadas.

Por último um sumário do tema de simulações CFD é apresentado, uma vez que é o objetivo primordial do presente trabalho.

2.1. Hidrogénio

O hidrogénio, molécula H_2 , é um gás a condições de temperatura e pressão normais e não apresenta coloração, odor e sabor. O seu átomo é o elemento mais leve e simples da tabela periódica, tendo apenas um protão e um eletrão. É também o elemento mais abundante no Universo e na Terra compõe 75% de toda a sua massa. A temperaturas muito baixas e/ou pressões elevadas pode tornar-se líquido ou até mesmo sólido [1]. No planeta Terra é encontrado quase na sua totalidade na água, sendo apenas presente na atmosfera em quantidades menores que uma parte por milhão em volume [2].

A Tabela 1 apresenta algumas das propriedades do hidrogénio bem como de outros combustíveis comuns. Nela é possível verificar de que entre todos o hidrogénio é o que apresenta a massa volúmica mais baixa, tanto no seu estado líquido como gasoso. A baixa densidade aliada com a sua baixa temperatura de liquefação, $-252.9^{\circ}C$ [3]. tem como desvantagem a necessidade de se utilizar bastante energia para o seu armazenamento gasoso ou líquido [4].

Tabela 1 – Propriedades físicas de gases [5]

	H_2	CH_4	CH_3OH	C_2H_5OH
Peso molecular (g mol ⁻¹)	2,016	16,043	32,04	46,06
Massa volúmica em estado gasoso (kg m ⁻³)	0,084	0,65	-	-
Limite de inflamabilidade no ar (% volume)	4-77	4-16	6-36	4-19
Energia mínima de ignição no ar (MJ)	0,02	0,3	0,14	1,25

Devido a esses fatores apresenta uma baixa densidade energética por unidade de volume, VED. Em sentido contrário a densidade energética por unidade de massa, GED, é bastante elevada sendo por isso uma opção apetecível para a indústria espacial. Devido ao seu baixo VED, essencial para veículos, o hidrogénio ainda tem dificuldade em competir com combustíveis fósseis.

O hidrogénio é ainda altamente inflamável e possui uma amplitude de concentração no ar para queima de 4 a 77%. Como é um gás muito leve (mais leve que o ar) e as suas moléculas movem-se rapidamente, em caso de fuga tem tendência de se dispersar mais fácil e rapidamente, diminuído a possibilidade de atingir os 4% de consideração e tornando-o assim mais seguro de que, por exemplo, gasolina e metano [6].

Comparado com outros gases, o hidrogénio tem maior facilidade de se difundir em materiais, podendo afetar assim as suas propriedades mecânicas. Por essa razão aquando do teste de sistemas de armazenamento e/ou transporte testes de permeação são necessários realizar [7].

2.2. Sustentabilidade

A crescente necessidade de cumprir com os objetivos climáticos e uma sociedade neutra em carbono levou a uma corrida para encontrar “o novo petróleo”, uma tecnologia com capacidade de fornecer grande quantidade de energia e a preços competitivos com os de combustíveis fósseis.

Alterações climáticas, a expressão habitualmente utilizada para mudanças climáticas atuais médias em relação ao que era normal no passado [8], pode ser causada pela variação de fatores naturais como erupções vulcânicas, radiação solar, processos bióticos, entre outros.

Mas as alterações climáticas atuais, por outro lado, são causadas essencialmente pela atividade humana, como desflorestação e queima de combustíveis fósseis, nesse caso é comum chamar-se aquecimento global [9]. Tanto desflorestação como queima de combustíveis fósseis libertam gases efeito de estufa que causam um aumento o calor devido ao maior absorvimento de radiação pelo planeta na baixa atmosfera.

Ao ritmo de uso atual de combustíveis fósseis é espetável que em 2050 estes se esgotem em algumas regiões ou não seja economicamente viável a sua extração, impactando fortemente a economia mundial [10]. Para obter energia livre de combustíveis fósseis o desenvolvimento de energia renovável deveria aumentar seis vezes relativamente ao nível atual.

No período de 2018 a 2050 espera-se um aumento de 20% na geração de energia elétrica renovável representando quase metade da gerada e um aumento anual de 1,8% na geração de eletricidade mundial [11]. A Figura 1 demonstra uma projeção da geração de eletricidade mundial por método de produção.

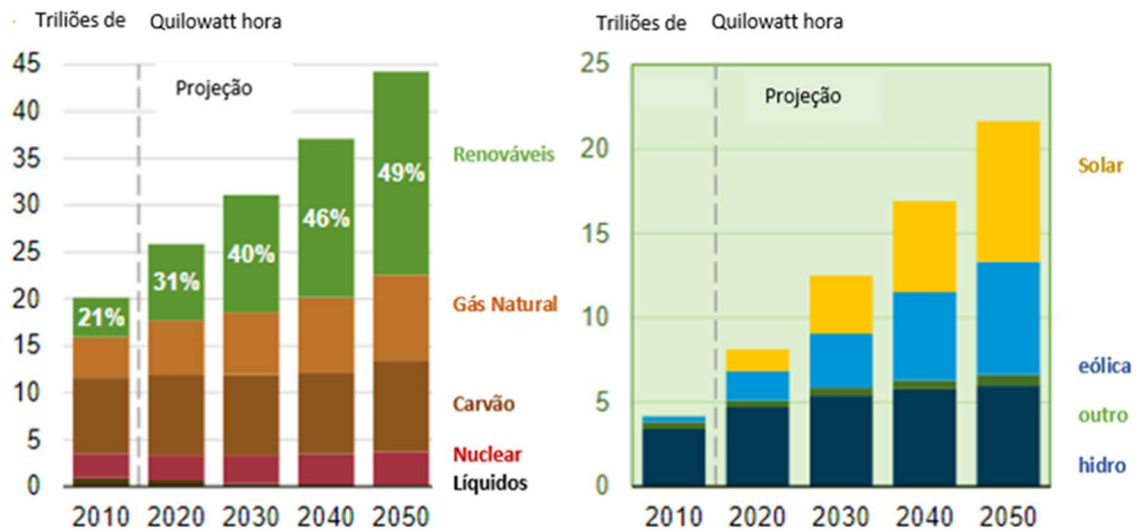


Figura 1- Previsão da geração de eletricidade mundial por combustível e renovável [11]

Por outro lado, o consumo de energia também é esperado subir 50% entre 2018 e 2050 e o maior contribuidor ser a região da Ásia, uma vez que tem sentido um grande crescimento económico e melhoria da qualidade de vida. A energia renovável é esperada aumentar 3,1% ao ano, o petróleo 0,6% e 1,1% em gás natural.

Recentes desenvolvimentos geopolíticos, ambientais e sociais podem oferecer novas oportunidades para uma mais rápida transição da matriz energética de países e do mundo.

A guerra na Ucrânia veio abalar a indústria energética europeia e consequentemente todas as indústrias em geral com o corte total ou parcial de produtos energéticos vindos da Rússia, que até então era o maior fornecedor de energia para países europeus [12]. Preços elevados de petróleo, gás natural e carvão devido ao corte e sanções impostas, expôs a fragilidade de muitos países no seu setor energético. Estes fatores levaram à procura de novos parceiros comerciais, mas também uma maior independência energética, que passava essencialmente por mais financiamento e desenvolvimento nas energias renováveis.

Temperaturas recorde, mínimas e máximas, bem como maior frequência de fenómenos climatológicos extremos trouxeram novas realidades em muitas partes do globo e que cresceram o sentimento de urgência da alteração da produção energética e de necessidade de ação política.

A união Europeia aumentou as suas ambições para metas de descarbonização e em 2023 lançou propostas de atualizações à legislação do seu plano para combate às alterações climáticas com o pacote Objetivo 55, que define orientações gerais relativas às reduções das emissões e aos seus impactos sociais. O Objetivo 55 tem como meta redução de pelo menos 55% as emissões líquidas de gases com efeito de estufa até 2030, com aspiração de 62%. De 2005 a 2023 as emissões da UE diminuíram 41% [13]

Atualmente o hidrogénio é visto como uma alternativa viável para se armazenar e transportar energia. Mas para este ser comercialmente competitivo tem de cumprir 3 objetivos principais:

- Tempo de abastecimento baixo;
- Alta capacidade de abastecimento;
- Segurança elevada.

A distância de condução e tempo de carregamento pesam imenso na escolha do consumidor para adoção de determinada tecnologia bem como os aspetos ligados à segurança, isso implica regulamentação para produção, transporte e armazenamento.

A acrescenta á complexidade da adoção desta tecnologia está o facto de existir grande pressão para que seja combinada com a utilização de energias renováveis na sua produção.

O hidrogénio pode ser produzido de diferentes fontes e assim ser considerado mais ou menos ecológico, por essa razão foram desenvolvidos códigos de cores para a sua distinção [14] Este tipo de classificação pode variar de autor para autor, uma dessas variações encontra-se na Tabela 2.

Tabela 2 – Classificação hidrogénio por cores [14] adaptado

Cinzento	Produção através de reformação a vapor e a partir de combustíveis fósseis. Causam emissões de dióxido de carbono no processo.
Azul	Produção através de reformação a vapor e a partir de combustíveis fósseis. Existe captura, utilização e armazenamento de carbono reduzindo as emissões.
Azul-Turquesa	Produção através de pirólise e a partir de combustíveis fósseis. Obtém como resíduo carbono sólido.
Verde	Produção através de eletrólise a partir de água. A eletricidade usada vem de fontes renováveis.
Roxo	Produção através de eletrólise a partir de água. A eletricidade usada vem de reatores nucleares.
Amarelo	Produção através de eletrólise a partir de água. A eletricidade usada vem da rede.

O tipo de hidrogénio com mais interesse atualmente é o verde, chamado também hidrogénio limpo/renovável, uma vez que não produz dióxido de carbono e os meios de produção são também de baixo carbono ou zero carbono. Apesar das vantagens que este apresenta ainda possui baixa relevância na quantidade total de hidrogénio produzido, cerca de 0,03% da produção mundial.

Na europa o consumo de hidrogénio representa apenas 2% do total de energia, com 0,1% de origem renovável. Na sua maioria é usado em processos industriais para, por exemplo, produção de amoníaco [15].

2.3. Formas de utilização e armazenamento de hidrogénio

O hidrogénio pode ser usado em veículos como combustível de duas maneiras distintas: queima em motores de combustão interna ou reação química com oxigénio em célula de combustível.

Em motores de combustão interna a queima pode ocorrer só com o hidrogénio gasoso ou adicionado em complementaridade com um combustível normal, como diesel ou gasolina. Apesar de vantajoso para redução na emissão de dióxido de carbono ainda assim produz outros poluentes em reação com o azoto do ar, os óxidos de azoto NO_x [16].

As células de combustível por outro lado não produzem NO_x e apresentam muito maior eficiência, devido em grande parte por menores perdas térmicas.

A eficiência é de elevada importância porque se considerarmos todas as etapas, desde a produção ao consumo, em comparação com outras tecnologias o hidrogénio pode ficar em desvantagem se o preço final para o consumidor não for competitivo.

Utilizando como referência energia 100% renovável como fonte de energia, desde a produção ao consumo, um veículo elétrico (EV) tem o dobro da eficiência global em comparação com um movido a células de combustível [17]. Isso deve-se a uma maior quantidade de componentes extra que são necessários para transformar e armazenar o hidrogénio, como o eletrolisador, compressor, célula de combustível.

2.3.1. Células de Combustível

As células de combustível são dispositivos que convertem energia química de um combustível (hidrogénio) e um oxidante (oxigénio) em energia elétrica. A mais comercializada atualmente é a célula de combustível com eletrólito de membrana de polímero (PEMFC). Tem como vantagens o baixa peso e volume e ainda grande densidade de potência.

Como representado na Figura 2, utilizam um eletrólito de polímero sólido como membrana de separação entre o ânodo (elétrodo negativo) e o cátodo (elétrodo positivo).

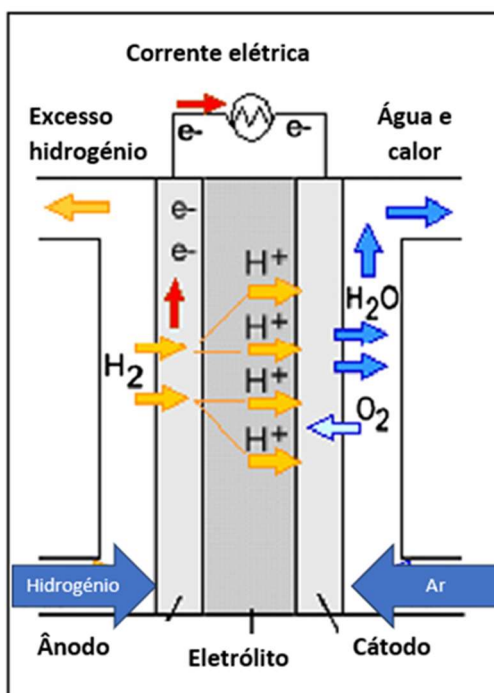


Figura 2- Esquema de célula de combustível [18]

O hidrogénio é fornecido ao ânodo e o oxigénio do ar ao cátodo, isto resulta em um fluxo de prótons, H⁺, através da membrana e consecutivamente um fluxo de eletrões, e⁻, pelo circuito externo. Um conjunto de ligações em série entre células gera energia suficiente para alimentar o veículo.

As reações químicas podem ser resumem-se a uma reação de oxidação no ânodo e uma redução no cátodo, descritas respetivamente pela equação (1) e (2).



Em conjunto formam a reação global exotérmica de oxidação-redução, equação (3), em que só tem como produto água.



Na Figura 3 estão representados os principais componentes que constituem um automóvel a células de combustível são:

- Motor elétrico - semelhante ao de um carro elétrico usa eletricidade em corrente alternada (AC) para mover o veículo, mas neste caso é fornecida pela célula de combustível;
- Bateria - a bateria principal de alta voltagem para armazenar energia gerada ao travar e fornece energia suplementar ao motor;
- Bateria auxiliar - fornece eletricidade de baixa voltagem para o arranque do carro e ainda acessórios do mesmo;
- Conversor DC/DC - converte corrente contínua de voltagem alta para baixa;
- Sistema de arrefecimento - mantém uma temperatura adequada para célula de combustível, motor elétrico, componentes eletrónicos, entre outros;
- Controlador elétrico de potência - controla a quantidade de energia entregue pela célula de combustível ao motor e bateria, logo controlando o torque que produz;
- Tanque de hidrogénio – armazenam o hidrogénio. Para veículos leves tipo 3 e 4 são os mais comuns;
- Conversor DC/AC – converte corrente contínua da célula de combustível em corrente alternada usada no motor.

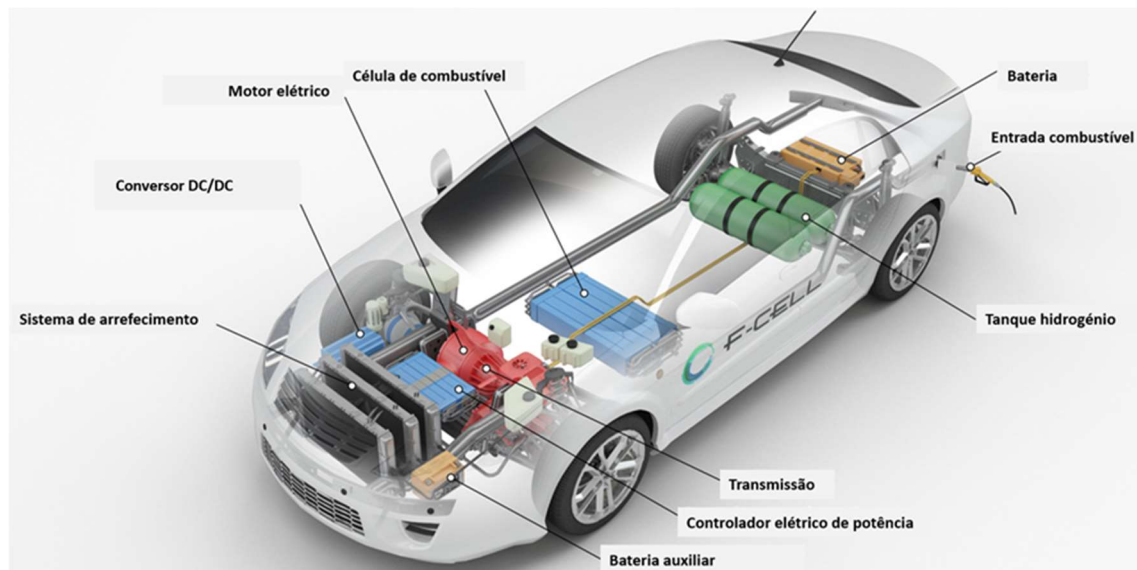


Figura 3- Componentes de automóvel a células de combustível [19]

2.3.2. Armazenamento

O hidrogénio pode ser armazenado no seu estado sólido, líquido ou gasoso.

A forma mais comum, principalmente para veículos, é armazenamento em tanques no seu estado gasoso. Devido á sua baixa densidade é necessário comprimir o hidrogénio a pressões elevadas. Existe uma ampla gama de pressões de armazenamento, que dependem da função e aplicação para que o hidrogénio será utilizado. A **Erro! A origem da referência não foi encontrada.** apresenta os tipos de tanques disponíveis atualmente, bem como os seus materiais de construção, vantagens e desvantagens.

Tabela 3 – Tipos de tanques de hidrogénio [20]

Tipo	Construção	Leveza (%)	Custo	Propriedades
Tipo 1	Todo de metal, normalmente aço.	100	Baixo	- Pesado - Corrosão interna
Tipo 3	Forro metálico, normalmente alumínio e revestimento total em fibra de carbono.	60-40	Alto	- Leve - Permeação muito baixa - Corrosão entre forro e revestimento - Pressão de rotura alta
Tipo 4	Forro com polímero e revestimento total com fibra de carbono (pode ainda existir fibra de vidro na camada exterior).	60-40	Alto	- Leve - Elevada durabilidade - Permeação elevada - Pressão de rotura relativamente baixa

Os mais comuns para utilização em veículos são os de tipo de 3 e 4 devido sustentarem pressões elevadas e serem relativamente leves [21]

Para se armazenar hidrogénio em estado líquido é necessário proceder-se á sua liquefação. Esta é feita arrefento o hidrogénio até -252.9°C e por essa razão reservatório criogénicos são necessários bem como uma boa isolação.

Existem vários métodos de liquefação, o mais simples é o ciclo de *Linde*, também denominado de ciclo de expansão *Joule-Thomson*. Neste inicialmente o gás é comprimido utilizando um compressor e arrefecido com um trocador de calor, de seguida passa por uma válvula de estrangulamento e experiência consecutivo arrefecimento devido ao efeito de expansão *Joule-Thomson*. Algum líquido é produzido e armazenado enquanto o gás retorna ao compressor.

A liquefação, em comparação com o armazenamento em estado gasoso tem um custo económico e energético muito elevado. Como é armazenado no seu ponto de ebulição qualquer transferência de calor causa a sua evaporação o que pode resultar na libertação intencional ou não de hidrogénio para o exterior [3].

O armazenamento de hidrogénio em estado sólido advém da sua capacidade de reagir com certas ligas metálicas como titânio, manganês, crómio, níquel e ferro por exemplo, formando um hidreto metálico. Esta reação, equação (4), onde hidrogénio é absorvido pela liga metálica caracteriza-se por ser reversível, onde M é a liga, H_2 o hidrogénio e MH_2 o hidreto metálico.



Este tipo de armazenamento resolve as desvantagens no peso e segurança de tanques a alta pressão para hidrogénio gasoso, bem como da elevada necessidade energética e perdas por evaporação do armazenamento em estado líquido [22].

As suas próprias desvantagens são de maneira geral relacionadas os grandes volumes de reservatório, tempos de abastecimento elevados, de quase uma hora para 5 kg de hidrogénio, necessidade de arrefecimento e aquecimento durante o enchimento e esvaziamento respetivamente e ainda elevada pureza do hidrogénio [4].

2.4. Processo de enchimento do tanque

Devido aos perigos associados com testes de tanques de hidrogénio, nomeadamente a alta pressão e o facto de ser combustível, são necessárias instalações apropriadas para realização das experiências. Utilizando como exemplo as instalações do JRC-IET (GasTef) [23] estas consistem em um bunker parcialmente enterrado, com ligação à zona de armazenamento do gás em estudo. Numa primeira etapa faz-se circular um gás inerte (hélio ou azoto) para verificar possíveis fugas no tanque ou tubagem, bem como uma estimativa inicial de permeabilidade do tanque.

Após esta preparação a concentração de oxigénio dentro do bunker é reduzido a 1% para prevenir ignição e consecutiva explosão. Testes cíclicos onde o tanque é abastecido rapidamente com hidrogénio e esvaziado lentamente pelo menos 1000 vezes são efetuados para cumprimento das regulações da União Europeia. As temperaturas e pressões dentro e fora do tanque são monitorizadas bem como fugas e permeação de hidrogénio pelas paredes do tanque (tipo 3 e 4). Estes testes são essenciais para avaliar a resistência à fadiga, que tem uma ligação importante com a variação de temperaturas e pressões dentro do tanque [24].

É essencial o uso de válvulas e sensores tanto nos testes como no abastecimento nas estações para garantir a segurança dos operadores, condutores e instalações.

A Figura 4 seguinte é referente a um tanque a ser testado em laboratório, demonstra alguns dos principais componentes usados para monitorar a entrada e saída do fluido.

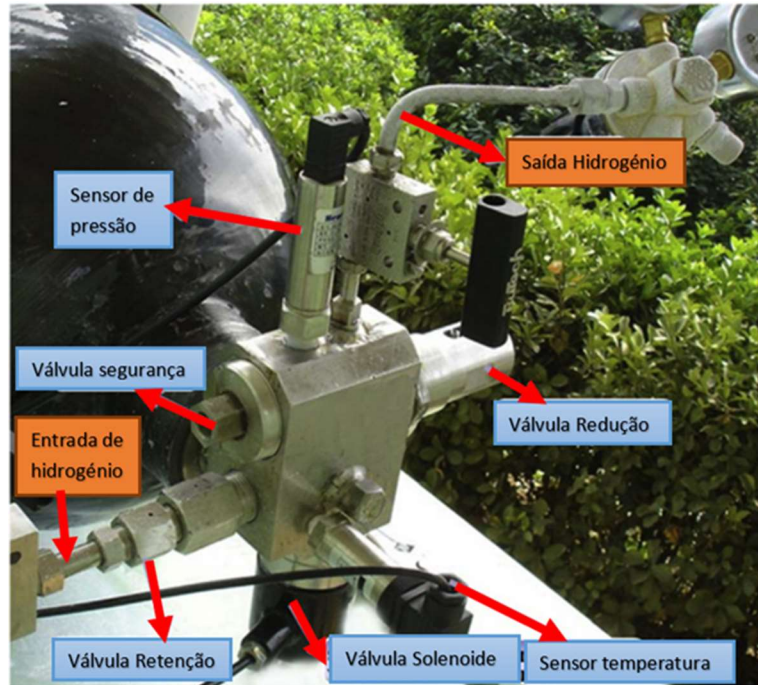


Figura 4- Equipamento de medição à entrada do tanque [25]

Esses componentes consistem em:

- Válvula de segurança - liberta gás para o exterior quando se atinge a pressão máxima para determinado tanque;
- Válvula de Retenção - impede o fluxo de hidrogénio no sentido contrário do enchimento, neste caso do tanque de teste/veículo para os estacionários;
- Válvula Solenoide – responsável pela regulação do caudal mássico de hidrogénio de forma a seguir uma certa taxa de aumento de pressão bem como um padrão específico da mesma;
- Válvula Redutora de Pressão – Reduz a pressão para determinado valor fixo. Garante que o tanque não está sujeito a pressões superiores ao limite;
- Sensores de Pressão e Temperatura – sensores eletrónicos de recolha de dados para posterior partilha com estação ou instalação de teste.

2.4.1. Fases de Enchimento

Tal como acontece nas estações de abastecimento, também nas instalações de teste podem existir duas fases de carga dos tanques.

Numa primeira fase o gás flui para o tanque de teste pela diferença de pressão, até se encontrar em equilíbrio e de seguida é ativado um compressor para continuar o abastecimento elevando assim a pressão até à desejada.

Os pistões do compressor trabalham a velocidade constante que resulta em caudal mássico aproximadamente constante [23]. Existe em muitos casos, no início do enchimento, um atraso de aproximadamente 5 segundos até se atingir o caudal mássico máximo devido à abertura da válvula. Na Figura 5 pode ser visto a variação de pressão e temperatura com a mudança de fase.

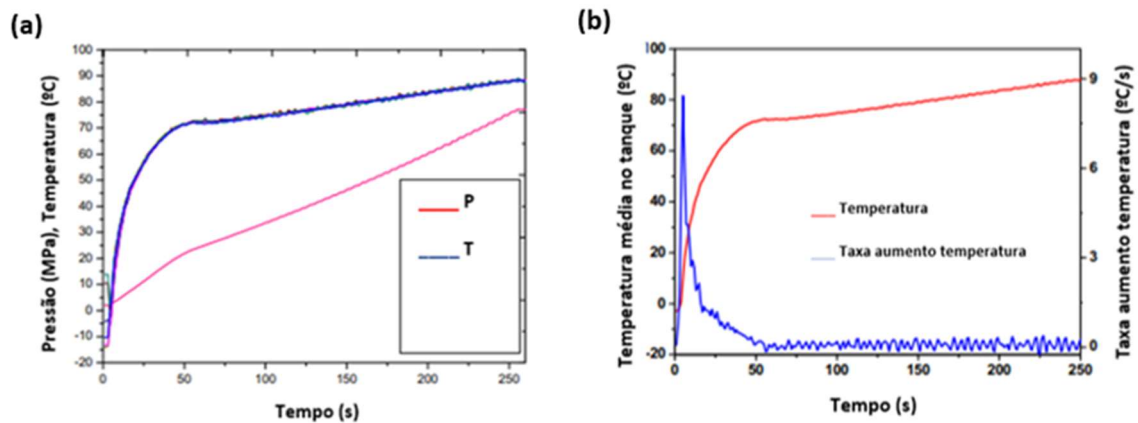


Figura 5- Influência da mudança de fase nas pressões e temperaturas (a) e taxas de temperatura (b) [23]

Nem sempre se encontra este padrão de dupla compressão (equilíbrio entre tanques e compressor), em certas situações o completo abastecimento sem uso de compressor ou com uso total de compressor é utilizado. O não uso de compressor requer tanques estacionários de pressão superior à final pretendida, como no caso da Figura 6.

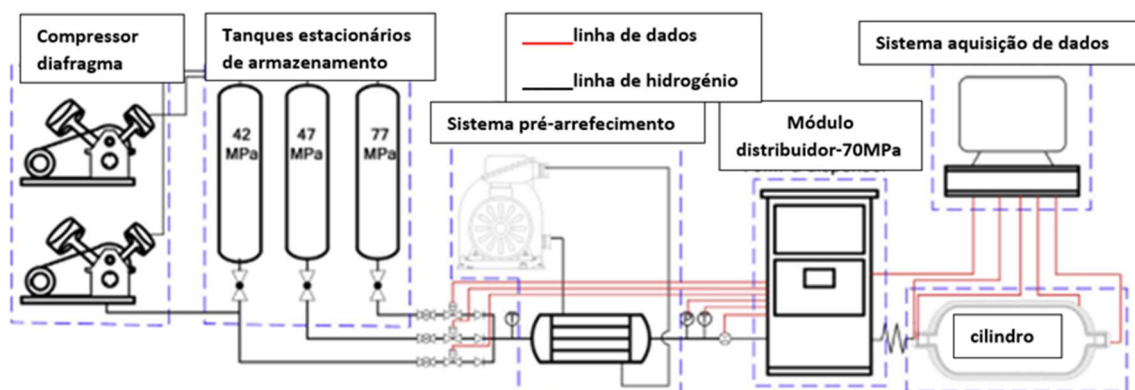


Figura 6- Sistema de abastecimento *Multi-Bank Dispensing* [25]

A pressão dos tanques estacionários bem como a sua quantidade e ainda o método como são usados difere de estação para estação. No exemplo da figura anterior foram utilizados três tanques de diferentes pressões, método *Multi-Bank Dispensing*, caracterizados por baixa, média e alta pressão. Durante o abastecimento os três são usados em série por ordem ascendente de pressão.

Note-se que caso fosse ultrapassada a temperatura de 85°C e não existisse pré-arrefecimento, o valor final de pressão a atingir seria de 88 MPa uma vez que é o equivalente em termos de

densidade com os 70 MPa de NWP a 15°C, logo o tanque de 77 MPa seria insuficiente e seria necessário ativar o compressor.

2.4.2. Tipos de compressores

Nas ocasiões onde não existe hidrogénio suficiente nos tanques estacionários o compressor pode ser acionado para enchimento dos tanques estacionários ou do tanque do veículo ou ainda de ambos em simultâneo, dependendo da estação e situação.

Os compressores mecânicos são os mais utilizados de forma geral e estão divididos em quatro categorias, como mostra a Figura 7.

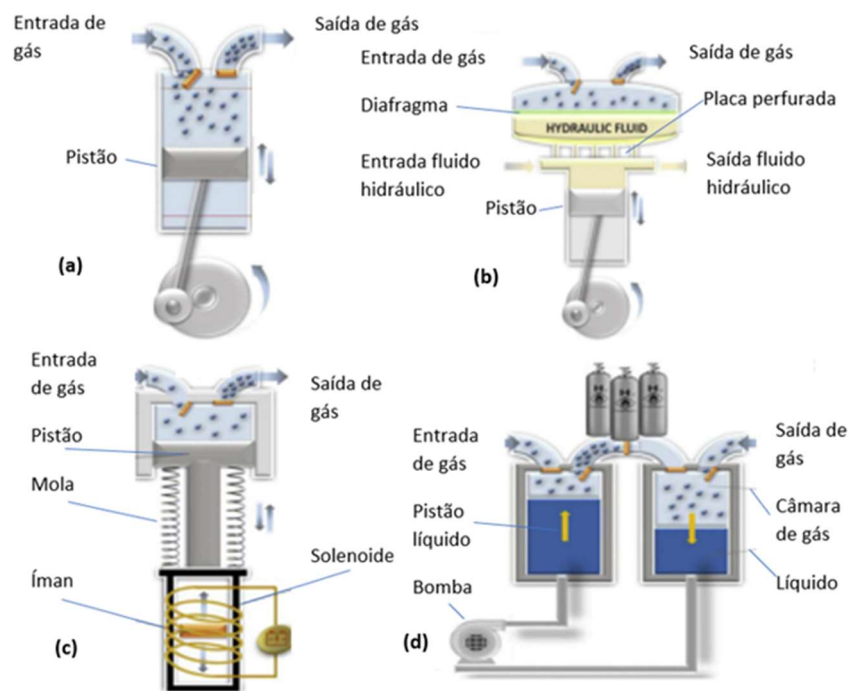


Figura 7- Compressor a pistão (a); Compressor de diafragma (b); Compressor linear (c); Compressor líquido iónico (d) [26]

Os compressores a pistão são uma tecnologia madura e de baixo custo [27]. Têm grande caudal e por isso são aconselhados para estações com grande atividade. O pistão está em contacto com o hidrogénio o que pode levar a alguma contaminação por lubrificantes.

Compressores de diafragma consiste em um pistão, que comprime e empurra um óleo hidráulico através de uma membrana perfurada para fazer mover o diafragma [28]. Estes tipos de compressores apresentam várias vantagens em relação aos compressores de pistão como grande pureza do hidrogénio aquando libertado, devido ao óleo hidráulico não estar em contacto com o hidrogénio, boa dissipação de calor e grandes rácios de compressão. São preferíveis em estações com pouca atividade devido a menor caudal movimentado.

Os compressores lineares utilizam motores elétricos lineares em conjunto com molas para fazer mover o pistão [29]. Como tem menos partes móveis e é de modo geral um sistema mais simples torna-se mais económico em comparação com os anteriores. Acrescenta às suas vantagens o facto de não ter o problema de contaminação por lubrificante, eficiência alta e serem mais compactos.

Um compressor de líquido iónico utiliza o líquido iónico como pistão e em contacto direto com o hidrogénio. Este tipo de líquido é caracterizado por baixa solubilidade com o hidrogénio, extremamente baixa libertação de vapores e ampla gama de temperaturas para a sua fase líquida. Duas grandes vantagens destes compressores é o eficiente arrefecimento do hidrogénio e baixa consumo energético.

Exceto para o compressor de líquido iónico é comum existir refrigeração do gás ao ser comprimido. No compressor de pistão isto acontece entre estágios, que também é por si uma forma de manter o hidrogénio com menores temperaturas e a compressão com o melhor rendimento possível (isentrópico). Para o compressor de diafragma o próprio diafragma bem como o óleo hidráulico que costumam ser arrefecidos.

2.5. Protocolos para abastecimento de veículos leves

SAE e ISO formaram em conjunto protocolos standard para ligação a veículos a hidrogénio, o SAE J2600, e em qualidade do gás hidrogénio para veículos a células de combustível, SAE J2719.

E ainda para comunicação entre estação de abastecimento e veículo, o SAE J2799, e um protocolo para veículos leves e pesados respetivamente, o SAE J2601 e J2601-2.

O objetivo do SAE J2799 é standardizar o envio de dados através de comunicação wireless entre o veículo e a estação de abastecimento. O envio é opcional e realizado através dos recetor e emissores infravermelhos esquematizados na Figura 8. No entanto o seu uso possibilita ver o estado de abastecimento, que pode ajudar a otimizar o mesmo para um maior SOC 95-100% (estado de carga), bem como a opção de parar abastecimento a partir do próprio veículo.

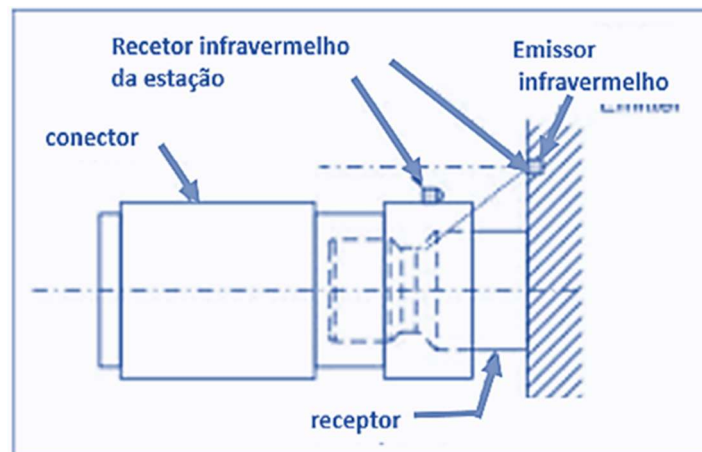


Figura 8- Conector [30]

O SAE J2601 tem como objetivo standardizar todos os tipos de sistemas (35 e 70 MPa) de rápido armazenamento de hidrogénio até um alto estado de carga SOC para veículos leves, sem violar os limites do sistema, principalmente temperatura e pressão. Este possibilita uma consistência no abastecimento para consumidores e produtores de automóveis.

O SOC, equação (5), tem como definição estado de carga do tanque e é na sua essência um rácio entre densidade média do gás ρ no final do enchimento e a densidade ideal ρ_{REF} de $40,2 \text{ kg.m}^{-3}$ para 100% SOC a 15°C e 70 MPa de NWP.

$$SOC = \frac{\rho(P, T)}{\rho_{REF}} \times 100 \quad (5)$$

Limites para segurança do sistema:

- Temperaturas hidrogénio dentro do tanque são: mínimo de -40 e máximo de 85°C;
- Pressão máxima distribuída de 25% acima da pressão nominal de trabalho: 87.5 MPa (70 MPa NWP) e 43.8 MPa (35 MPa NWP). NWP baseado em 15°C;
- Caudal mássico máximo de 0,060 kg.s⁻¹.

Estes limites ajudam a proteger a integridade dos materiais que compõem o tanque (pressão e temperatura) bem como a válvula (caudal).

Estes protocolos servem também para alcançar um tempo de abastecimento de 3 a 5 minutos e consistência de 90 a 100% de SOC. Comunicações entre veículo e estação sobre o armazenamento, bem como a opção de não fornecer essa informação, sendo neste caso apenas transmitida a pressão no tanque.

Também são abordados parâmetros importantes da estação como a temperatura do hidrogénio antes de abastecimento e a taxa média de aumento da pressão e pressão/densidade final.

A Figura 9 apresenta para um tanque de 70 MPa a linha de densidade constante para a qual se obtém SOC de 100% com determinada temperatura e pressão interior.

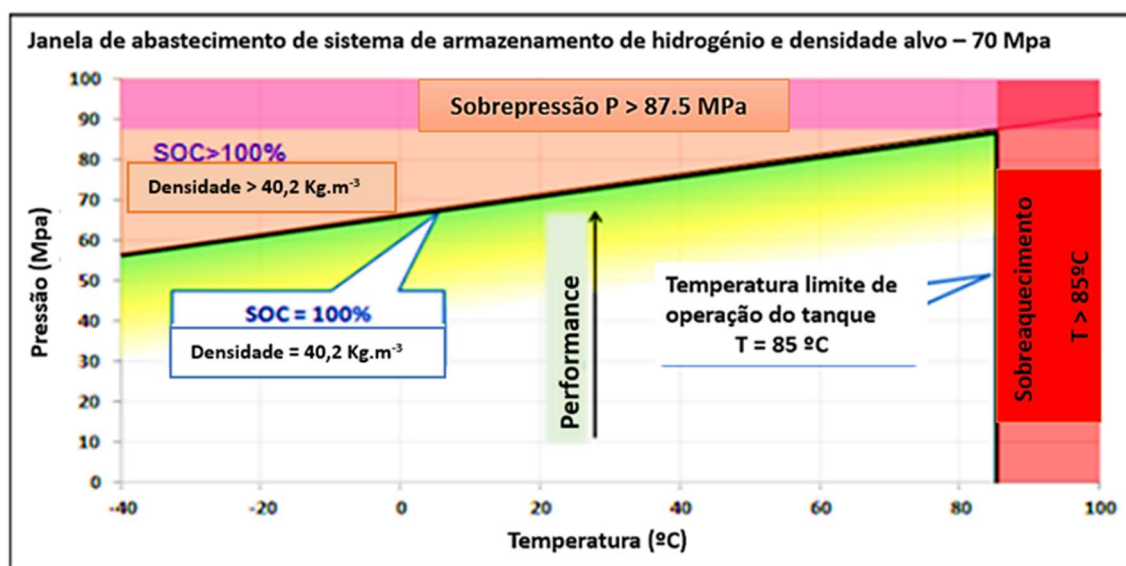


Figura 9- Densidade alvo em função da pressão e temperatura [30]

Aquando do enchimento do tanque, o hidrogénio no interior pode chegar a temperaturas altas, mas quando este termina, a temperatura desce e por consequência a pressão. Para convergir para um SOC de 100% a ligação (conector) tem de ser programada para que a densidade final dentro do tanque seja de 40,2 kg.m⁻³ (70 MPa NWP a 15°C) [31]

Caracterização através do tipo de ligação baseada na temperatura do hidrogénio (pré-arrefecido) à entrada da conexão:

- T40 (-40 a -33°C);

- T30 (-33 a -26°C);
- T20 (-26 a -17.5°C);
- T0 (-17.5 a 2.5°C), disponível apenas para tanques de 35 Mpa.

Existem cinco categorias para capacidade dos tanques [31]:

- 70 MPa (3 categorias) – 2 a 4 kg, 4 a 7 kg e 7 a 10 kg;
- 35 MPa (2 categorias) – 2.4 a 4.2 kg e 4.2 a 6 kg.

A massa é calculada pela equação (6):

$$m = \rho \times v \quad (6)$$

Onde m é a massa em kg, v o volume do tanque em m^3 e ρ a densidade a NWP de $40,2 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$.

Foram criadas tabelas para as estações de modo a simplificar o processo de carregamento e garantir o cumprimento dos limites de pressão e temperatura. Estas variam com o tipo de ligação, NWP e capacidade do tanque. No caso de o tanque ser de valor inferior a 2 kg a tabela a escolher é a de 2 a 4 kg.

Uma vez selecionada a tabela, como por exemplo a da Figura 10 com 70 MPa de NWP , 4 a 7 kg de massa e T40, escolhe-se a Temperatura Ambiente em conjunto com a Pressão Inicial como dados de entrada e retiramos como dados de saída a Pressão final (pressão na qual terminará o abastecimento) bem como a Taxa Média de Aumento de Pressão (APRR). As obtenções destes dois últimos ajudam a estimar o tempo de carregamento.

H70-T40 4-7kg comm		Taxa Média Aumento Pressão APRR MPa/min	Pressão Final MPa	Pressão Final Top-Off MPa	Top-Off APRR MPa/min	Pressão Final MPa									
						Pressão Inicial MPa									
						0,5 – 5 (Sem interpolação)									
						0,5	2	5	10	15	20	30	40		
Temperatura Ambiente °C	> 50	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fu	
	50	5,1	78,2	87,5	2,6	see Top-Off	see Top-Off	80,8	85,7	86,8	86,5	85,8	85		
	45	8,1	76,3	87,5	4,0	see Top-Off	see Top-Off	81,1	86,9	86,6	86,2	85,3	84		
	40	11,6	73,2	87,5	5,4	see Top-Off	see Top-Off	81,1	86,9	86,4	85,9	84,7	83		
	35	12,4	72,9	87,5	5,6	see Top-Off	see Top-Off	81,2	86,9	86,4	85,9	84,7	83		
	30	15,3	70,6	87,5	6,6	see Top-Off	see Top-Off	81,0	86,8	86,3	85,6	84,3	82		
	25		69,0	87,4	7,2	see Top-Off	see Top-Off	81,0		86,1	85,4	83,8	82		
	20	21,8	67,9	87,4	7,6	see Top-Off	see Top-Off	81,2	86,8	85,9	85,1	83,3	81		
	15		66,3	87,4	9,0	see Top-Off	see Top-Off	81,2		85,7	84,7	82,6	80		
	10														
	0	23,5	no Top-Off	no Top-Off	no Top-Off		78,4	84,6	86,8	85,6	84,4	83,1	80,6	78	
	-10	23,5	no Top-Off	no Top-Off	no Top-Off		82,2	87,1	86,4	85,2	84,0	82,8	80,4	77	
-20	23,5	no Top-Off	no Top-Off	no Top-Off		86,0	86,8	86,1	84,9	83,7	82,4	80,0	77		
-30	23,5	no Top-Off	no Top-Off	no Top-Off		86,8	86,5	85,7	84,5	83,3	82,1	79,6	77		
-40	23,5	no Top-Off	no Top-Off	no Top-Off		86,5	86,2	85,4	84,2	83,0	81,8	79,3	77		
< -40	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling		no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fueling	no fu		

Abastecimento de 4 minutos

Figura 10- Tabela SAE para enchimento de tanque [30]

Como podemos ver pelo exemplo, para um tanque de 70 MPa (4-7 kg) e conexão T40 (pré-arrefecimento), começando com uma pressão inicial no tanque de 10 MPa e temperatura ambiente de 20°C obtemos um APRR de 21.8 MPa/minuto e pressão final de 86.8 MPa, o que resulta num tempo estimado de 4 minutos de carregamento. Também se pode constatar os limites de temperatura ambiente a partir dos quais não existe abastecimento ($-40 \leq T_{amb} \leq 50$).

Se houver uma temperatura ambiente mais baixa ou houver pré-arrefecimento, isso resultará em uma Pressão Final mais baixa e APRR mais alto e consequentemente menor tempo de

abastecimento. Pode, em algumas situações, haver uma ou mais paragens rápidas no abastecimento para verificação de fugas, razão pela qual o APRR ser um valor médio.

O método *Top-Off* tem como objetivo elevar o SOC final se a pressão inicial for menor que 5 MPa.

Testes em laboratórios foram realizados para tanques de 35 e 70 MPa, com diferentes veículos e diferentes temperaturas ambiente bem como com estações funcionais para validação das tabelas e da sua aplicabilidade em situações reais.

2.6. Fatores que influenciam aumento de temperatura durante abastecimento

2.6.1. Revestimento

As configurações atuais mais comuns são tipo 3 e 4, tanto para veículos ligeiros como pesados. Existem diversos volumes, formas e espessura de forro/revestimento, pelo que é necessário saber como se comporta a temperatura na generalidade dos casos.

Para as mesmas condições térmicas iniciais e de abastecimento, um tanque tipo 4 atinge temperaturas máximas e médias do gás maiores que um tanque tipo 3 [32].

Isto é explicado pelo facto de o alumínio possuir coeficiente de condutibilidade térmica e difusão térmica superiores ao polímero o que leva a uma maior transferência de calor para o ambiente.

O hidrogénio atinge a sua temperatura máxima sempre durante o enchimento, salvo casos especiais como de estratificação ou enchimento muito prolongado onde essa temperatura é atingida no final. Já o revestimento do tanque atinge o seu máximo após o final do abastecimento, levando minutos até ficar em equilíbrio térmico com o ambiente. Verifica-se ainda que a diferença de temperaturas entre o gás e alumínio diminui com tempos de abastecimento mais rápidos, Figura 11.

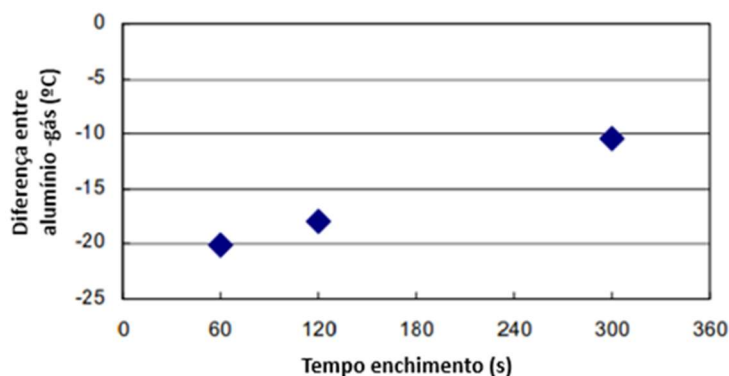


Figura 11- Diferença entre temperatura alumínio e hidrogénio para tempos de abastecimento diferentes [32]

Em situações onde a zona central (cilíndrica) sólida do tanque for mais espessa que a parte concava, existe uma maior diferença de temperatura entre a superfície interior e exterior do tanque, proveniente da maior resistência térmica [33].

Baixa transferência de calor para exterior ou para os próprios materiais do tanque, bem como tempos longos de enchimento dos quais resultam baixas velocidades, podem levar à ocorrência de estratificação. Este fenómeno é mais frequente em tanques do tipo 4 devido á menor condutibilidade térmica do polímero. Vários estudos verificaram que existe um brusco aumento da temperatura máxima do gás em caso de estratificação, pelo que é essencial sempre que possível mitigar este problema [34].

2.6.2. Taxa de aumento da pressão

Diferentes padrões para taxa de aumento de pressão conduzem a diferentes de padrões de temperatura bem como diferentes valores máximos e finais. O controlo do pico máximo de temperatura é importante para garantir que o limite de 85°C não é ultrapassado e o controlo dos valores finais para garantir o melhor SOC possível.

Na Figura 12 estão representados 4 estilos diferentes de aumento de pressão.

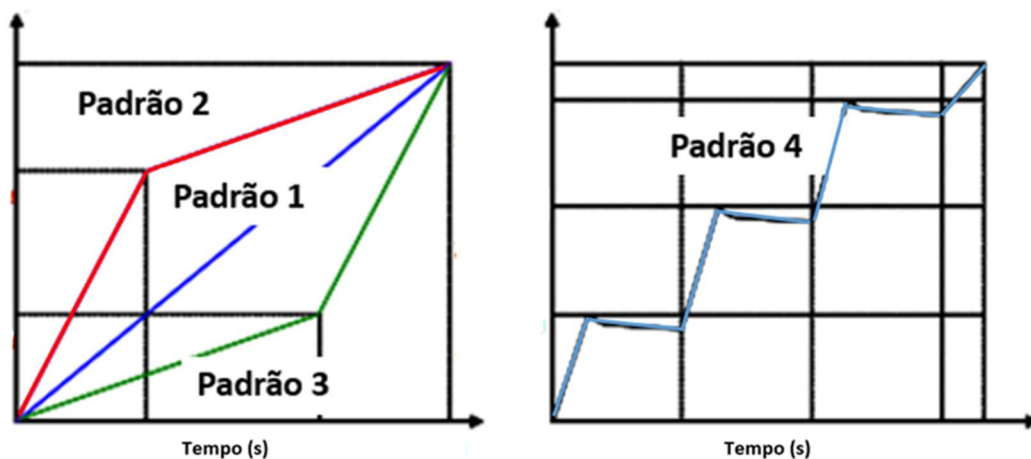


Figura 12- Padrões de aumento de pressão [32]

Como mostra a Figura 13, os padrões 1 e 2 apresentam de forma geral os valores mais baixos de temperatura final. Isto deve-se ao facto de estes implementarem a maior taxa de aumento de pressão, logo de temperaturas mais altas, mais cedo que o padrão 3 e 4, existindo dessa forma mais tempo para diminuir a temperatura do gás por transferência de calor para o ambiente.

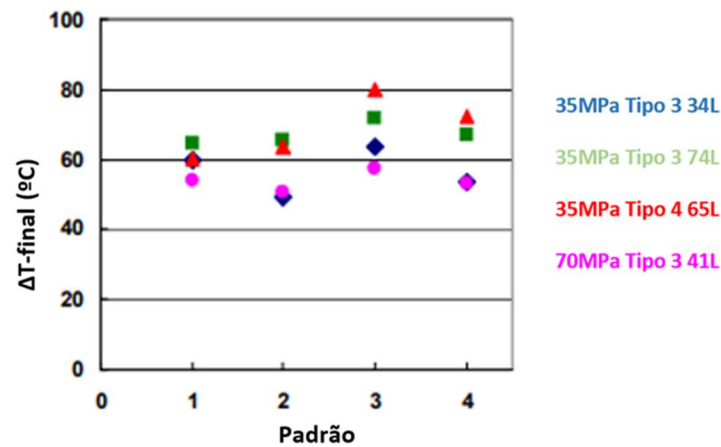


Figura 13- Diferença entre temperaturas iniciais e finais do hidrogênio no centro do tanque [32]

No que diz respeito ao pico de temperatura máxima, Figura 14, os mesmos resultados confirmam-se à exceção do padrão 2 que apresenta valores máximos próximos do padrão 3. A razão está ligada à elevada taxa de aumento de pressão da primeira fase tal como acontece na segunda fase do padrão 3.

O padrão 1, linear, possui os resultados mais baixos de forma geral. De notar ainda que tanques tipo 4 mostram ser muito mais influenciados pelo tipo de padrão.

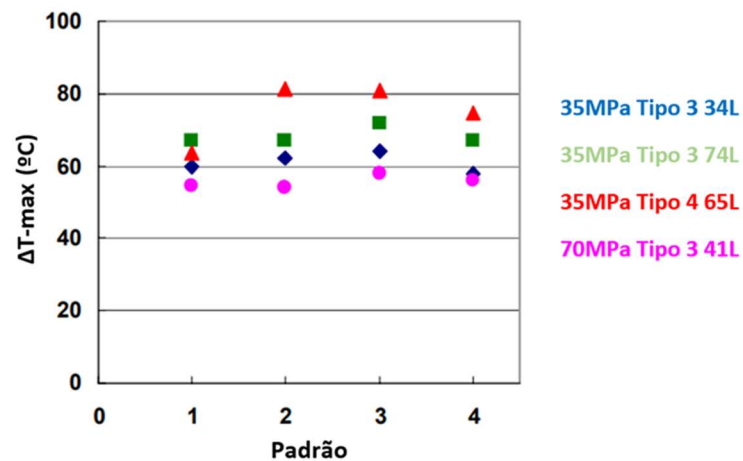


Figura 14- Diferença entre temperaturas máximas e iniciais no centro do tanque [32]

2.6.3. Condições iniciais e adiabáticas

As condições iniciais dentro do tanque, como pressão, temperatura inicial e considerações adiabáticas podem influenciar bastante a evolução da temperatura ao longo do enchimento.

Em uma simulação *CFD* é possível considerar-se uma ou mais paredes adiabáticas de modo a diminuir o custo computacional. Mas essa escolha acarreta erros, mais ou menos graves dependendo da superfície escolhida.

Na Tabela 4 é apresentado um resumo de condições iniciais e adiabáticas e a sua influência nas temperaturas.

Tabela 4 – Influência de condições iniciais e adiabáticas

[35]	Em um estudo experimental concluiu que para a mesma taxa de aumento de pressão, se no tanque existir alguma quantidade de hidrogénio, logo com uma certa pressão inicial, a temperatura máxima será maior quanto menor a pressão inicial, uma vez que é mais moroso o seu enchimento.
[25]	Em um estudo experimental verificou que a temperatura máxima desce quase linearmente com o aumento em pressão inicial. Concluiu ainda que no caso de um tanque em equilíbrio térmico com o ambiente, uma variação linear da temperatura de equilíbrio, logo de todo o tanque inicialmente, obtém-se um aumento de temperatura e também de massa final no tanque aproximadamente linear.
[36]	Em um estudo <i>CFD</i> verificou-se que se for utilizada superfície exterior adiabática, logo não existe transferência de calor para o ar exterior, a diferença não é significativa para enchimento rápido (por volta de 3 minutos ou inferior) nos valores da temperatura do gás porque o calor transferido é essencialmente para os materiais do tanque. A partir do final do enchimento a transferência de calor para o ambiente torna-se mais relevante e equilíbrio térmico com o exterior pode chegar em certos casos às várias dezenas de minutos.
[37]	Em um estudo <i>CFD</i> concluiu-se que no caso de enchimento completamente adiabático, logo não existe transferência de calor para qualquer uma das paredes do tanque e conseqüentemente para o ar exterior, a temperatura do gás apresentou uma subida notável logo nos primeiros segundos. Como resultado das altas temperaturas a densidade diminui o que levou a um decréscimo da quantidade de massa de hidrogénio e um estado de <i>SOC</i> 10% menor que o de referência.

2.6.4. Velocidade e diâmetro

Para se resolver o excesso de temperatura gerado pela estratificação podem ser utilizadas duas estratégias: maiores taxas de aumento de pressão ou diminuir o diâmetro, ambas com a finalidade aumentar a velocidade.

O aumento da taxa de pressão é indesejado porque acarreta maiores temperaturas, por essa razão foram testados vários autores os efeitos da redução do diâmetro na temperatura e sua homogeneidade no tanque. Como é demonstrado na Figura 15, para a mesma taxa aumento de pressão, a redução do diâmetro leva a uma redução na temperatura do gás, mesmo em casos sem ocorrência de estratificação (efeitos muito menores nesse caso), permitindo assim que em algumas situações não se ultrapassasse o limite.

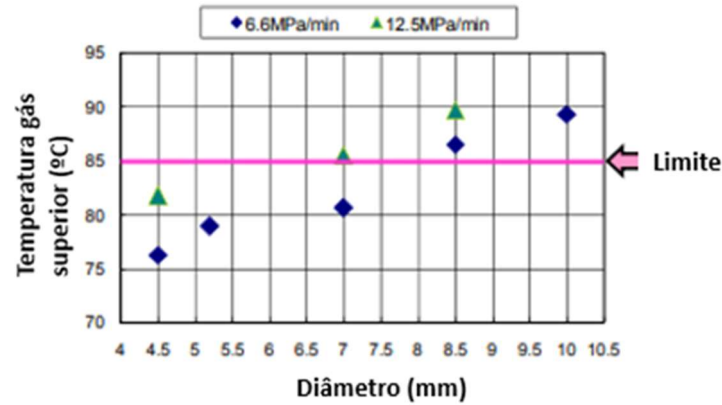


Figura 15- Variação da temperatura do hidrogênio na parte superior em função do diâmetro e taxa aumento de pressão [32]

As maiores taxas de pressão levam a maiores temperaturas devido à existência de um maior caudal mássico de hidrogênio a escoar e conseqüentemente comprimir. Por outro lado, maiores velocidades provocam maior mistura/agitação do gás e maior coeficiente de transferência de calor, que resulta em maior homogeneidade e transferência de calor respectivamente.

Na Tabela 5 é apresentado um resumo de outros efeitos e considerações a ter com a escolha do diâmetro do tubo de Inlet.

Tabela 5 – Exemplo de tabela

[38]	Em um estudo experimental testou-se a influência de uma configuração de injetor com quatro aberturas e concluiu-se que tinha pior performance que um injetor com o mesmo diâmetro em uma só abertura. Como o caudal era distribuído pelas quatro aberturas a velocidade descia drasticamente e como consequência ocorria estratificação nessa configuração em comparação com um orifício só.
[39]	Experiências com a variação do ângulo do jato na entrada demonstraram que este não impõe diferença significativa na temperatura do gás final e máxima, no entanto a temperatura do revestimento foi afetada no local onde o jato atingiu.
[36]	Em um estudo experimental complementado com <i>CFD</i> concluiu-se que em tanques de pequenos volumes (normalmente usados em veículos leves) pode-se considerar a densidade uniforme.
[37]	Em um estudo experimental verificou-se que existe uma ocasião em que a densidade não é uniforme. Em alguns cenários onde a velocidade é supersônica, uma onda de choque, disco <i>Mach</i> , é formada na frente do <i>Inlet</i> . Os efeitos desta onda apenas são sentidos por volta dos primeiros 4 segundos. Devido à sua localização espacial e temporal limitada podemos concluir que é negligenciável o seu efeito.

Uma válvula solenoide tem como objetivo primário controle da taxa de aumento de pressão através da regulação da quantidade de hidrogênio que deixa fluir bem como limitar esse caudal para que não ultrapasse o limite de 60 g.s-1.

Na prática, em situações que se verifique velocidades supersônicas, as estações controlam o caudal mássico de hidrogênio que entra no cilindro através de ajustamento da válvula (solenoide) de modo que essas velocidades e conseqüentes ondas de choque não ocorram[40]

As maiores velocidades e caudais mássicos encontram-se no início do enchimento, uma vez que é a altura onde a diferença de pressões entre o tanque da estação e o tanque do veículo é máxima. Com o decorrer do abastecimento a diferença entre os dois começa a diminuir e por sua vez a velocidade e caudal mássico também.

2.6.5. Tanques longos

Tanques longos são tanques que apresentam uma maior razão comprimento-diâmetro de forma a aumentar o volume de hidrogénio que podem transportar/armazenar. O uso deste tipo de tanques é encontrado em veículos pesados [41] e embarcações marítimas [42].

Devido à sua natureza geométrica apresentam distribuição de temperaturas diferentes dos tanques normais, como estratificação do gás no final do enchimento, Figura 16, mesmo para tempos curtos e durante o enchimento gradientes elevados de temperatura longitudinalmente [25] Estes dois fatores contribuem para temperaturas máximas mais elevadas.

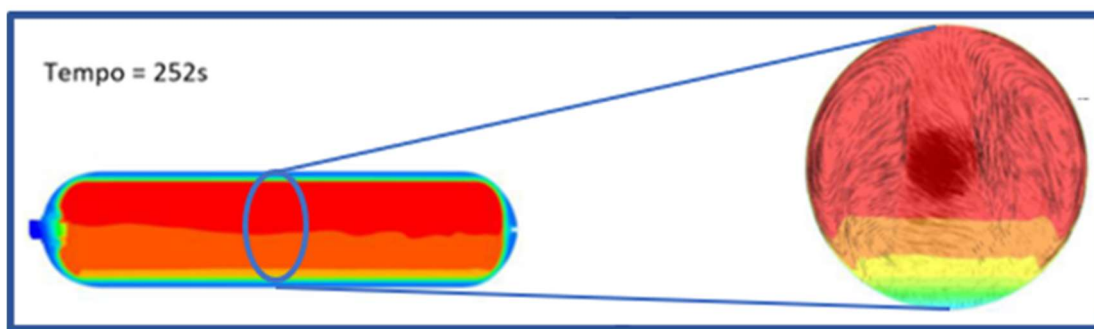


Figura 16- Estratificação em tanques longos [42]

2.6.6. Pré-arrefecimento

De modo a manter os tanques de seguros é necessário realizar-se o pré-arrefecimento do hidrogénio.

A desvantagem de pré-arrefecer é o custo energético e conseqüentemente o económico, que pode tornar esta tecnologia menos atrativa e economicamente viável.

No entanto a norma SAE J2601 obriga o uso de pré-arrefecimento durante rápido abastecimento do tanque, para que as temperaturas máximas do gás e valor *SOC* sejam aceitáveis em um tempo de carregamento de 3 a 5 minutos.

Na Tabela 6 encontra-se um resumo das conseqüências do pré-arrefecimento do gás.

Tabela 6 – Pré-arrefecimento

[43]	Em um estudo <i>CFD</i> verificou-se a descida em temperatura final é aproximadamente igual em magnitude à mesma descida em temperatura do gás pré-arrefecido. Temperaturas mais baixas levam a uma maior massa de hidrogénio e <i>SOC</i> no tanque devido à sua maior densidade. Habilita ainda o uso de taxas de aumento de pressão superiores, logo menos tempo de carregamento.
[44]	Em um estudo experimental comparou-se um caso normal de pré-arrefecimento até -20°C e um caso de duplo estágio, onde o gás durante 75 segundos é arrefecido até 0°C e logo de seguida é levado para os -40°C. Constatou-se que nas temperaturas finais do hidrogénio a diferença entre os dois padrões era pequena.

Usualmente é alcançada a temperatura desejada de pré-arrefecimento por volta dos 30 segundos, a partir do quais permanece constante [45]

2.6.7. Efeito *Joule-Thomson*

Durante o enchimento de um tanque com hidrogénio existem quatro fatores responsáveis pela variação da temperatura [46]

- Aumento de temperatura devido à conversão da energia cinética do gás que entra em energia interna;
- Aumento de temperatura pelo efeito *Joule-Thomson*;
- Aumento de temperatura pela compressão do gás;
- Diminuição de temperatura pela condução e absorção de calor pelas paredes e consecutivamente o exterior.

O efeito *Joule-Thomson* refere-se ao aumento ou diminuição na temperatura de um líquido ou gás (com comportamento real) ou de um líquido na influência de elevada diferença de pressões entre montante e jusante, de um escoamento adiabático e isentrópico.

É bastante utilizado na indústria de refrigeração, como frigoríficos e ar condicionados, em conjunto com gases refrigerantes.

No abastecimento do tanque com hidrogénio aparece após válvulas onde a diferença de pressão seja elevada e provoca um aumento de temperatura do gás. Esse aumento é máximo no início, uma vez que é a altura de maior diferença de pressão entre tanque os dois tanques e diminui com o tempo [47]

O arrefecimento ou aquecimento do gás dependerá da sua pressão e temperatura. Isso deve-se ao facto de o coeficiente *Joule-Thomson*, apresentado na equação (7), poder tomar valores positivos, negativos ou nulos.

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_H \quad (7)$$

Onde μ_{JT} é o coeficiente *Joule-Thomson* e é calculado através da derivada parcial da temperatura, T , em respeito á pressão, p , a entalpia constante.

Para as pressões e temperaturas encontradas durante o abastecimento de tanques a hidrogénio μ_{JT} é negativo, o que resulta em um aumento de temperatura do gás a montante. No entanto dependendo da sua pressão e temperatura, como mostra a Figura 17, pode assumir valores positivos e nesse caso existe arrefecimento.

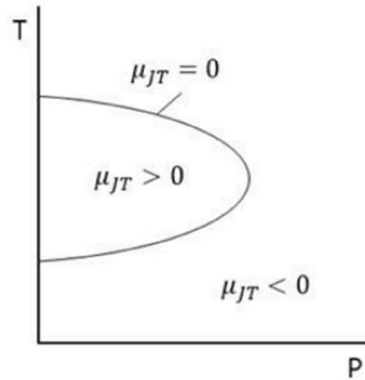


Figura 17- Curva de isentálica do coeficiente *Joule-Thomson* [48]

Este efeito atinge o seu pico no início do abastecimento uma vez que é a altura de maior diferença de pressões e vai descendo até o tanque atingir o equilíbrio.

Para gases ideais o coeficiente é nulo logo não existe efeito *Joule-Thomson*.

2.7. Simulação CFD

Para analisar numericamente o escoamento de hidrogénio dentro do tanque será empregue o *Ansys Fluent*, versão estudante 2022 e 2023. O *Ansys* é utilizado amplamente como software de simulação na indústria, não só para fluidos, mas também comportamentos mecânicos, elétricos etc.

Uma simulação *CFD* é constituída por diversas etapas, Figura 18, desde a definição do objetivo até ao documento com os resultados.

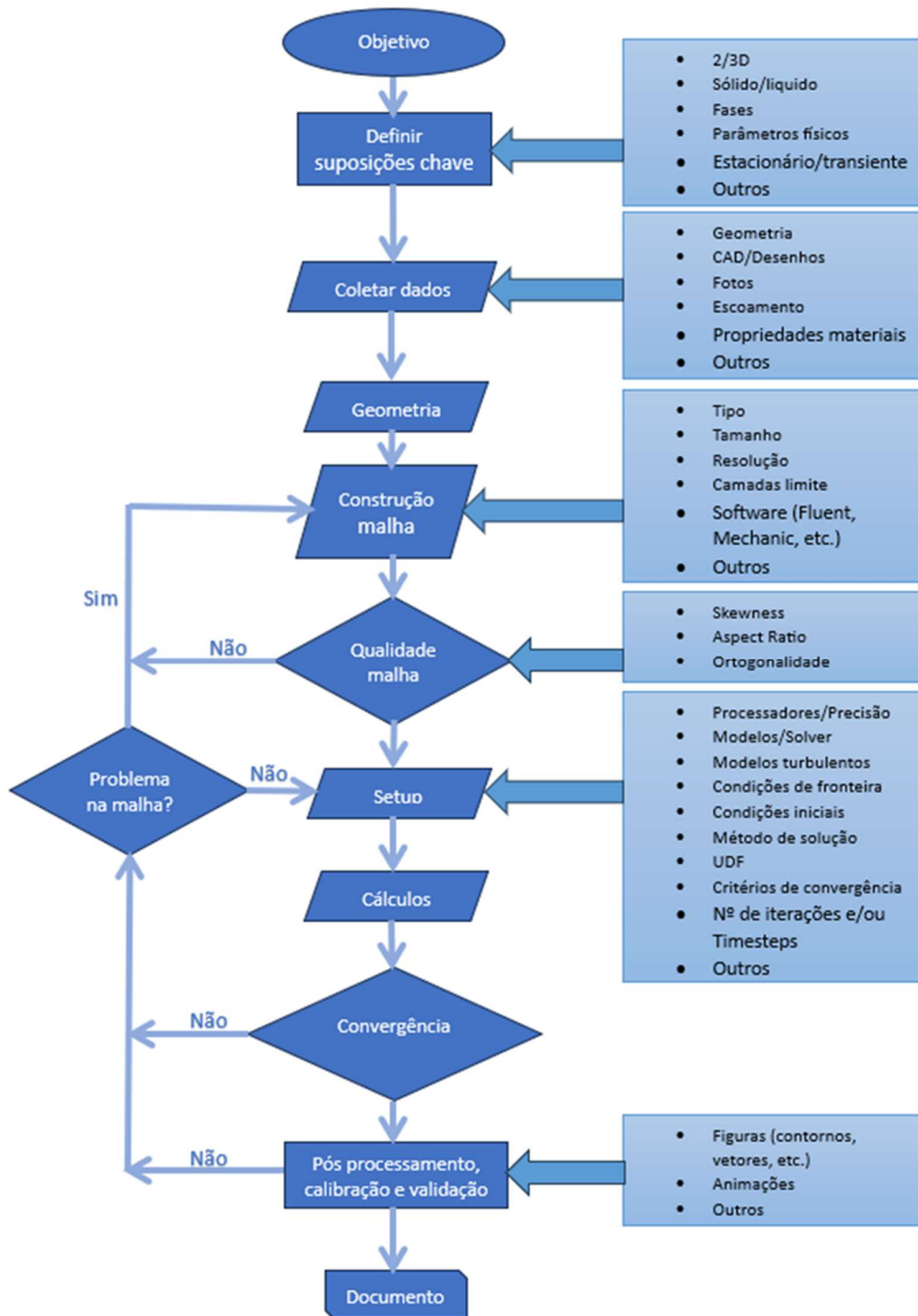


Figura 18- Fluxograma etapas em uma simulação [49]

Estas etapas podem ser divididas em três grandes grupos[50]:

- Pré-processamento
- *Solver*
- Pós-processamento

2.7.1. Pré-Processamento

O pré-processamento compreende as etapas mais importantes pois neste são introduzidos os dados que definem todo o problema, como:

- Definição da geometria;
- Criação da malha;
- Introdução das zonas sólidas e de fluido;
- Definição dos materiais do sólido/fluido;
- Estado;
- Condições fronteira;
- Tratamento na parede;
- Modelos turbulentos.

2.7.1.1. Geometria e malha

A geometria pode ser importada ou construída em 2/3D e assumir condições de simetria em um eixo ou plano.

A malha corresponde á divisão do domínio computacional em subdomínios que podem tomar várias formas e estruturas, Figura 19.

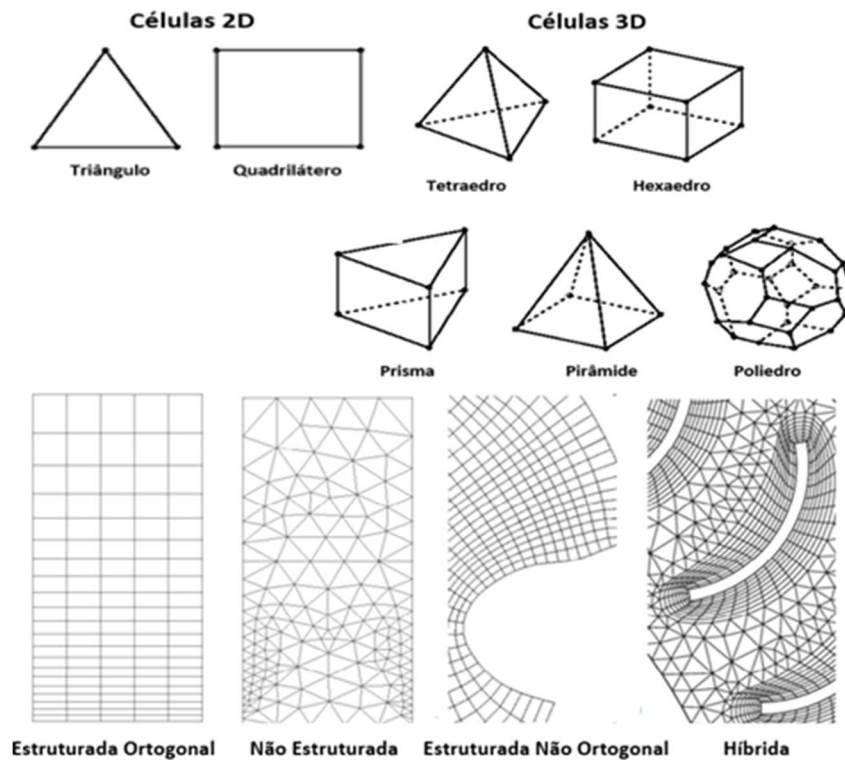


Figura 19- Tipos de células e Estruturas da malha [51]

A construção de uma malha adequada é essencial para uma correta simulação numérica, por essa razão é necessário efetuar uma avaliação da sua qualidade através de certas quantidades, como a *Skewness*, *Aspect ratio* e Ortogonalidade.

Skewness, Figura 20, avalia a perfeição geométrica de um elemento e o seu valor máximo não deve ultrapassar 0,95 e médios de 0,33.

0-0.25	0.25-0.50	0.50-0.80	0.80-0.95	0.95-0.98	0.98-1.00*
Excelente	Muito Bom	Bom	Aceitável	Mau	Inaceitável

Figura 20- Classificação dos valores de Skewness [52]

Ortogonalidade, FIG, é o desvio angular do vetor S em relação ao vetor de que conecta os centroides das duas células, P e N. Valores médios devem ser mantidos acima de 0,1, Figura 22.

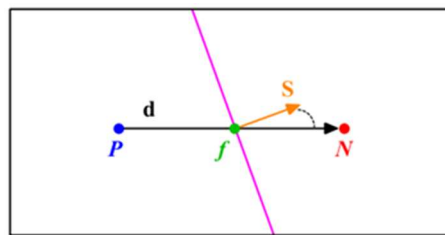


Figura 21- Ortogonalidade entre duas células [52]

Inaceitável	Mau	Aceitável	Bom	Muito Bom	Excelente
0-0.001	0.001-0.14	0.15-0.20	0.20-0.69	0.70-0.95	0.95-1.00

Figura 22- Classificação dos valores de ortogonalidade [52]

O *Aspect Ratio* para triângulos e quadrados é uma função da razão entre o lado mais longo e curto. Longe de superfícies é aconselhável manter as razões abaixo de 5:1 e na camada limite 10:1, com máximo de 35:1 para não ocorrer instabilidades.

Deve ser ainda verificado se existe uma resolução apropriada em zonas de interesse como superfícies.

2.7.1.2. Zonas, materiais e estado

Materiais devem ser atribuídos às zonas a que são constituintes. Propriedades como densidade, calor específico a pressão constante e condutibilidade térmica são introduzidos pelo utilizador ou retirados da base de dados do *Fluent*. Para fluidos deve-se ainda escolher a equação de estado ainda escolher outras propriedades como viscosidade e mudar o seu comportamento para linear, polinomial, etc.

O estado do escoamento refere-se à existência ou não de variação temporal nas propriedades do fluido no tempo. Se a variação for pequena o suficiente que se possa considerar estático o sistema então estamos na presença de Estado Estacionário, caso contrário se variar ao longo do tempo considera-se transiente.

2.7.1.3. Condições de fronteira

As Condições de Fronteira/Contorno são restrições nas equações diferenciais parciais. No caso de utilização da equação da energia, condições para a temperatura serão necessárias para paredes, *Inlet* e/ou *Outlet*.

Em problemas com contacto de um fluido e sólidos com transferência de calor entre ambos será aplicado pelo software uma condição de acoplamento entre a equação do fluido e sólido.

O *Fluent* oferece vários tipos de Condições de Fronteira as condições mais comuns são apresentadas na Tabela 7

Tabela 7 – Condições de fronteira típicas

<i>Inlet/outlet</i>	Pressão, Velocidade, Caudal mássico e Temperatura
Paredes	Escorregamento, Movimento/Rotação, Simetria, periódicas, porosidade e Temperatura

Para *Inlet* de caudal mássico ou pressão a temperatura a especificar é a total, já para o de velocidade é a estática.

A temperatura total/estagnação é a soma da temperatura estática e dinâmica e é a temperatura medida se o escoamento parasse isentropicamente. A temperatura estática é a temperatura se o gás não tivesse movimento e a mais comum de se medir, já a dinâmica está relacionada com a energia cinética do escoamento [53].

Para um escoamento incompressível, a temperatura estática T e total T_0 assumem o mesmo valor. Em escoamentos compressíveis isso já não acontece e o valor da temperatura estática é afetado pela velocidade na relação apresentada pela equação (8)

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \quad (8)$$

Onde γ é a razão entre calor específico a pressão constante C_p e volume constante C_v . O número de Mach, M , é calculado a partir da equação (9)

$$M = \frac{V}{a} \quad (9)$$

Com V a velocidade local e a a velocidade do som [54]. A velocidade do som é essencialmente a velocidade de transmissão de pequenos distúrbios e varia, como mostra a equação (10), com γ , constante gás universal dos gases ideais R e temperatura absoluta T .

$$a = \sqrt{Z\gamma RT} \quad (10)$$

Se o comportamento do gás se desviar do real, como para escoamentos compressivos, o fator de compressibilidade Z deve ser adicionado.

2.7.1.4. Tratamento na parede

A maioria dos softwares atuais de *CFD*, como *Ansys Fluent*, usam o método de volumes finitos. Neste as variáveis do escoamento como pressão, temperatura e velocidade variam linearmente através da célula e são armazenadas no seu centro.

Junto á parede esta suposição linear pode causar problemas se a célula for demasiado grande, uma vez que, em um escoamento real, a variação da velocidade é não linear na camada limite.

A partir de dados experimentais da velocidade verificou-se que ao ser adimensionalizada a velocidade (U^+) e distância normal da parede ao centroide da sua célula adjacente (Y^+) obtinha-se um perfil previsível de resultados para uma ampla variedade de escoamentos e geometrias.

Esse perfil, Figura 23, pode ser dividido em três zonas e assume valores típicos de Y^+ variam entre:

- $Y^+ < 5$ para subcamada viscosa;
- $5 < Y^+ < 30$ para região *Buffer*;
- $30 < Y^+ < 500$ para região *Log-Law* [55].

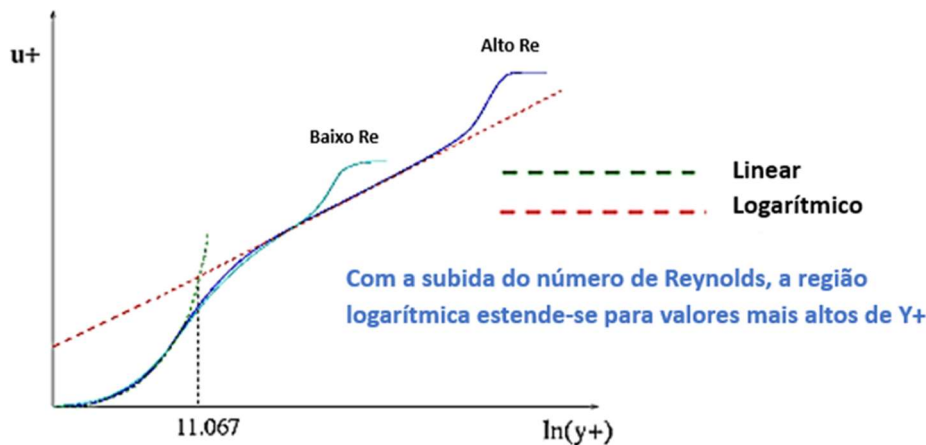


Figura 23- Perfil de velocidade e distância da parede adimensionais [52]

Para solucionar o problema da não linearidade junto á parede existem duas opções:

- Resolução da camada viscosa, que significa colocar o centroide da célula adjacente á parede na subcamada viscosa e usar um número suficiente de células para capturar os gradientes na camada limite. Normalmente implica que o $Y^+ \approx 1$ para bons resultados;
- O uso de *Wall Functions*. Estas funções seguem os perfis das propriedades obtidos experimentalmente. Célula adjacente à superfície deve estar na região logarítmica *Log-Law*;

Wall Functions são, como o nome sugere, funções ajustadas ao comportamento do escoamento afetado por uma superfície, Figura 24.

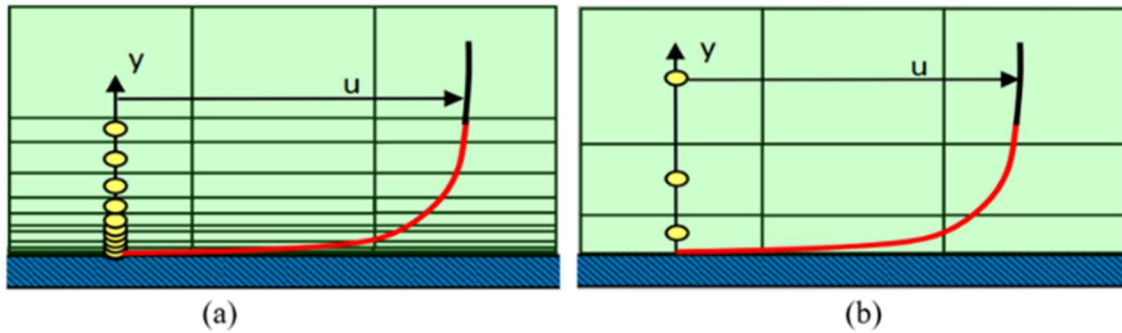


Figura 24- Tratamento para resolução da malha (a) e *Wall Functions* (b) [56]

A equação para a camada viscosa tem como pressuposto tensão de cisalhamento aproximadamente constante e equivalente à tensão de cisalhamento na parede τ_w . Uma relação linear entre velocidade e distancia da parede pode ser então obtida através da equação (11)

$$U^+ = y^+ \quad (11)$$

Na região *Log-Law* os efeitos da viscosidade turbulenta são mais pronunciados e uma relação logarítmica é empregue equação (12)

$$U^+ = \frac{1}{k} \ln(Ey^+) \quad (12)$$

Onde k e E são coeficientes empíricos de valor 0.4187 e 9.793 respetivamente.

As equações para U^+ e y^+ são respetivamente (13) e (14)

$$U^+ = \frac{U}{U_\tau} \quad (13)$$

$$y^+ = \frac{\rho U \tau y}{\mu} \quad (14)$$

A distância normal à parede y é a distância entre a superfície e o centroide da célula, μ é a viscosidade dinâmica, U a no centroide e U_τ a velocidade de cisalhamento, que pode ser calculada pela tensão de cisalhamento na parede τ_w e densidade ρ com a equação (15)

$$U_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (15)$$

Onde τ_w , dado pela equação (16) é função do coeficiente de fricção C_f , densidade e o quadrado da velocidade de escoamento livre U_∞^2

$$\tau_w = \frac{1}{2} C_f \rho U_\infty^2 \quad (16)$$

O coeficiente de fricção varia com o regime e geometria do problema e pode ser encontrado a sua fórmula na literatura.

A subcamada viscosa é uma zona onde o escoamento é laminar devido à condição de não escorregamento na parede (velocidade nula de fluido). A região *Log-Law* é a zona dentro da camada limite onde se encontra o escoamento totalmente turbulento. Existe uma terceira região, *Buffer*, alusiva à transição das duas regiões anteriores e onde se encontra a interceção da equação linear

e logarítmica. É frequentemente aconselhado não se colocar o centroide nesta região devido à imprevisibilidade de resultados.

Na Figura 25 é possível ver essas três camadas.

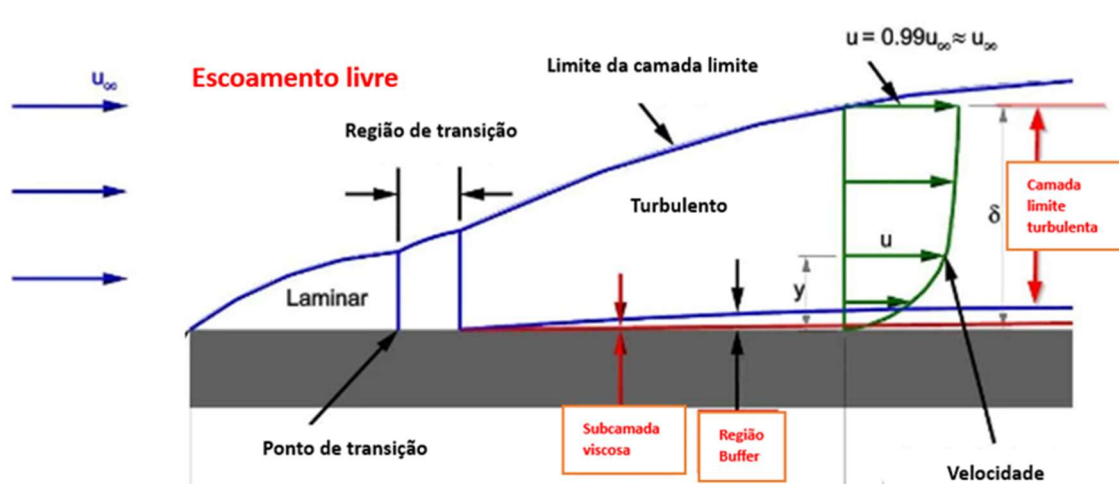


Figura 25- Zonas de escoamento [56]

A estratégia a escolher dependerá de vários fatores, como tempo disponível para simulação, propriedades de interesse, limitações do software, entre outros. A escolha da resolução da subcamada viscosa implica modelos de maior custo computacional, devido em grande parte, mas não só, à necessidade de uma malha muito refinada especialmente junto da superfície. A utilização de tais modelos é comum para boa avaliação da ocorrência de separação de fluido ou geração e transferência de calor. Também devem ser usados se se pretende determinação precisa de certas quantidades dependentes dos gradientes junto da parede, como forças e coeficientes de arrastos e fricção entre outros.

O utilizador deve saber de antemão qual dos dois métodos se adequa à sua situação para construir uma malha adaptada ao modelo que pretende utilizar. Ao escolher por exemplo o modelo Standard ou *Realizable K-Epsilon*, estes utilizarão *Wall Functions*, no caso de *K-Omega* e *K-Omega SST* será necessária resolução da subcamada viscosa.

Na realidade o *Ansys Fluent* utiliza como distância adimensional da parede y^* . Apesar de definição e resultados muito parecidos com y^+ , apresenta vantagens aquando da ocorrência de separação.

A separação é um fenómeno que ocorre na existência de gradientes de pressão adversos, equação (17). A certo ponto a variação da velocidade junto à parede será nula e nesse local a tensão de cisalhamento da parede também será nula equação (18) e conseqüentemente começará a ocorrer separação do fluido da superfície.

$$\frac{\partial P}{\partial x} > 0 \quad (17)$$

$$\tau_w = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \quad (18)$$

A Figura 26 demonstra o fenómeno de separação.

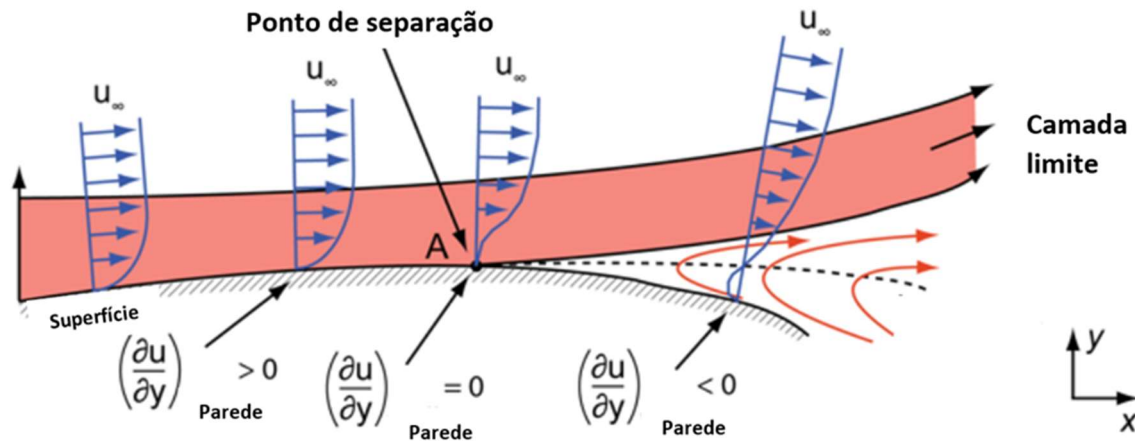


Figura 26- Gradientes em caso de separação da superfície pelo fluido [57]

Nessas condições U_τ e y^+ seriam zero. Para contornar esse problema y^* calcula a velocidade de cisalhamento U_τ baseado na energia cinética turbulenta k_P , como mostra a equação (19).

$$U_\tau = \sqrt{C_\mu^{1/4} k_P} \quad (19)$$

Disto resulta novas equações para distancia e velocidade adimensional, respetivamente equação (20) e equação (21).

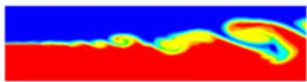
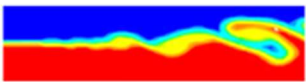
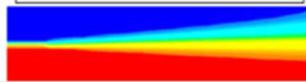
$$y^* = \frac{\rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/2} y}{\mu} \quad (20)$$

$$U^* = \frac{U C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{\tau / \rho} \quad (21)$$

A utilização de y^* tem ainda a vantagem de ser computacionalmente menos dispendioso, uma vez que no cálculo de y^+ existe a necessidade de se calcular iterativamente a cada passo o seu valor juntamente com o de τ_w , uma vez que são duas incógnitas a duas equações. Já com y^* o cálculo é direto pois sabemos a energia cinética turbulenta da iteração anterior.

2.7.1.5. Modelos de turbulência

O cálculo numérico de escoamentos turbulentos pode ser feito de três maneiras distintas, Figura 27, de acordo com o tipo de equações que serão resolvidas.

DNS (Direct Numerical Simulation)	LES (Large Eddy Simulation)	RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation)
		
Resolve numericamente as equações completas de Navier-Stokes. Resolve um grande espectro de escalas. Não é necessária modelação. Custo computacional muito alto, razão pelo qual não é pratico para problemas industriais.	Resolve equações filtradas N-S. Alguma turbulência é resolvida diretamente. Menor custo computacional que a DNS, mas ainda demasiado grande para utilização prática em maior parte das aplicações.	Resolve equações de N-S médias temporais. Todo o comportamento turbulento é modelado. Muitos modelos disponíveis. O mais usado para problemas industriais devido ao seu relativo baixo custo computacional comparado com DNS e LES e com bons resultados de forma geral.

Nota: o Fluent apenas utiliza LES e RANS.

Figura 27- Modelos para cálculo numérico de escoamentos turbulentos [58]

A precisão dos métodos acompanha o seu custo computacional, o presente trabalho, bem como a maioria dos problemas industriais, utilizam modelos *RANS* devido às razões acima mencionadas.

O escoamento de hidrogénio para o tanque é turbulento [40] compressível e inerentemente transiente, logo as equações *RANS* de conservação de massa e quantidade de movimento linear são equação (22) e (23) equação respetivamente [59]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_m}{\partial x_m} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) + \rho g \quad (23)$$

Onde ρ é a densidade, t o tempo, g a gravidade, u a velocidade, i indica a direção e $i = 1,2,3$ representa as direções x, y, z . Com m e j assumindo o mesmo significado que i .

O símbolo δ_{ij} toma os valores da equação (24):

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (24)$$

Estas equações não estão fechadas devido à presença do tensor de *Reynolds* $-\rho \overline{u'_i u'_j}$. Este tensor resulta da decomposição das equações nas suas componentes flutuantes e médias temporais, Figura 28.

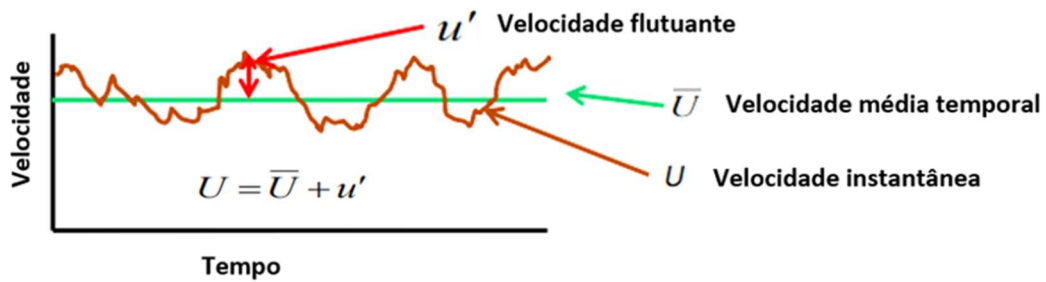


Figura 28- Componentes da velocidade em escoamento turbulento [58]

O cálculo deste tensor pode ser feito de diversas formas, dependendo do modelo de turbulência que o utilizador escolher.

Os modelos mais populares na indústria são os de duas equações da classe *Eddy Viscosity* linear, Figura 29, e serão os de maior destaque neste trabalho.

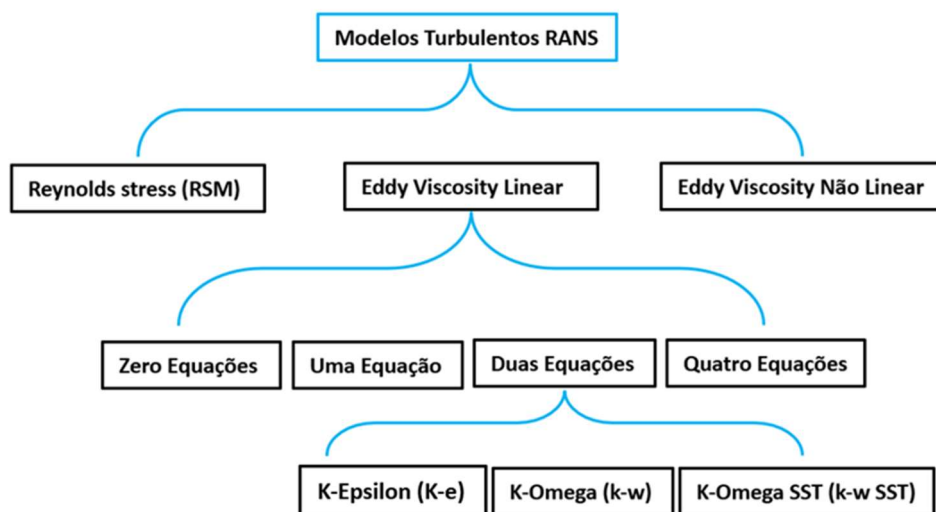


Figura 29- Modelos turbulentos RANS

São robustos e apresentam de forma geral bons resultados para um amplo leque de condições de escoamento e com um custo computacional relativamente baixo. O custo computacional varia também de modelo para modelo, como pode ser visto pela Figura 30.

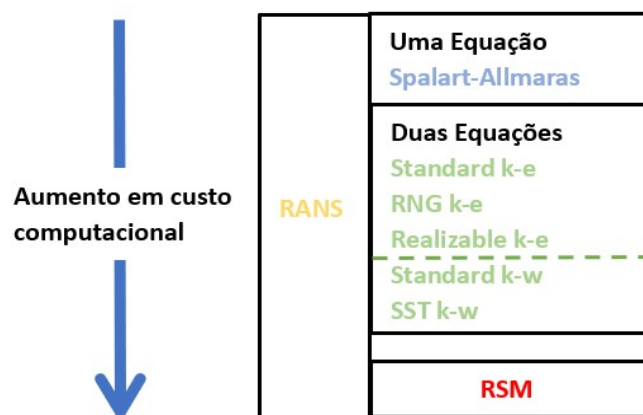


Figura 30- Custo computacional de alguns modelos RANS

A diferença entre a classe *Eddy Viscosity* e *Reynolds Stress (RSM)* está na forma como é calculado o Tensor de Stress de *Reynolds*. Tomando como exemplo classe *Eddy*, esta utiliza a hipótese de *Boussinesq*, que resulta na equação (25)

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_m}{\partial x_m} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (25)$$

Com energia cinética turbulenta k e viscosidade turbulenta μ_t . A viscosidade turbulenta substituirá o Tensor de *Reynolds* como incógnita na equação da conservação de quantidade de movimento linear e o seu cálculo varia com o modelo, $K - e$ ou $K - \omega$. Tomando como exemplo o modelo $K - e$ resulta a equação (26)

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho k^2}{e} \quad (26)$$

Onde e é a taxa de dissipação turbulenta e C_μ uma constante de valor 0.09. Para se calcular a viscosidade turbulenta serão necessárias duas equações extra, uma para K e outra para e , como pode ser visto respetivamente pela equação (27) e equação (28), desconsiderada termos fonte e gravidade (*Buoyancy*).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \left(-\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \rho e - Y_M \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho e u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_e} \right) \frac{\partial e}{\partial x_j} \right] + \left(-\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) C_{1e} \frac{e}{k} - \rho C_{2e} \frac{e^2}{k} \quad (28)$$

Onde σ_e , σ_k , C_{1e} , C_{2e} são constantes de valor 1.3, 1.0, 1.44 e 1.92 respetivamente. Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante na taxa de dissipação em casos de turbulência compressiva e calcula-se pela equação (29)

$$Y_M = 2\rho e M_t^2 \quad (29)$$

e número de Mach turbulento M_t em função da velocidade do som a como descrito pela equação (30)

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}} \quad (30)$$

Os modelos mais populares para simular o escoamento de abastecimento de um tanque a hidrogénio são *SST K - ω* (*SST KW*) e *Standard K - e* (*SKE*) [36]. De forma geral com uma malha adequada, os resultados não diferem muito uns dos outros, como pode ser visto pela Tabela 8.

Tabela 8 – Modelos turbulentos em simulações *CFD* de abastecimento de tanque com hidrogénio

[59]	O modelo <i>SKE</i> apresentou bons resultados quando comparado com experiências.
[47]	O modelo <i>SST KW</i> apresentou bons resultados, mas com custo computacional elevado comparativamente ao <i>SKE</i> .
[46]	Neste estudo o modelo <i>Realizable KE</i> apresentou os melhores resultados e com menor custo computacional quando comparado com <i>SST KW</i> , <i>RSM</i> e <i>RNG KE</i>

Uma equação para energia será resolvida sempre que haja necessidade de calcular a temperatura, logo escoamento não é isotérmico, como em compressibilidade e transferência de calor.

Dependendo do Solver, *Pressure-Based* ou *Density-Based* pode tomar a forma de equação de energia interna ou total respetivamente. A energia total é a soma da energia interna mais uma componente cinética e outra potencial.

Sempre que densidade seja função da temperatura, para fechar a equação da energia é necessária uma equação de estado que relacionará a densidade com a temperatura e pressão. A equação mais comum é a dos gases ideais, equação (31).

$$\rho = \frac{P_{OP} + P}{\frac{R}{M_W} T} \quad (31)$$

Onde ρ é a densidade, P é a pressão manométrica (zero se incompressível), P_{OP} é a pressão operativa (normalmente atmosférica), M_W a massa molar, R constante universal dos gases com valor $8.314 \text{ j.mol}^{-1}.\text{k}^{-1}$ e T a temperatura.

No caso de o gás não se comportar de forma ideal, deve ser escolhido uma equação mais complexa de gás real.

Isso é o que acontece durante o enchimento do tanque com hidrogénio, uma vez que às pressões verificadas a suposição de gás ideal já não se confirma[60].

O *Fluent* possui várias equações de estado para gás real como: *Redliche Kwong*, modificação *Soave's* de *Redliche Kwong*, modificação *Aungier's* de *Redliche Kwong* entre outras. Vários estudos foram realizados para avaliar qual a equação mais precisa para este problema, com o resultado sendo sempre *Redliche Kwong*[61].

2.7.2. Solver

O grupo *Solver* é constituído pelas etapas relacionadas com o *Solver* em si e este é responsável pelo modo como são resolvidas as equações diferenciais parciais. As várias etapas desta fase são:

- Escolha do *Solver*;
- Seleção do algoritmo de acoplamento pressão-velocidade;
- Métodos de discretização;
- Convergência;
- Inicialização;
- Iniciar cálculos.

2.7.2.1. Solver e algoritmo de acoplamento pressão-velocidade

O *Ansys Fluent* oferece duas escolhas para solver: *Pressure-Based* e *Density-Based*.

A diferença entre estes dois solver encontra-se na sequência em que os dois resolvem as equações de conservação (e outras) e como calculam a pressão. No caso de *Pressure-Based* a pressão é obtida com combinação da equação da Conservação da massa e Quantidade de Movimento Linear para derivar uma equação para pressão (ou correção de pressão). Já no *Density-Based* a densidade é calculada diretamente da equação da Conservação de Massa e a equação de estado é usada para se obter a pressão.

Existem ainda dois algoritmos para *Pressure-Based* (*Segregated* e *Coupled*) e duas formulações para *Density-Based* (implícita e explícita). A diferença entre eles encontra-se na sequência em que resolvem as equações de conservação, como mostra o esquema da Figura 31.

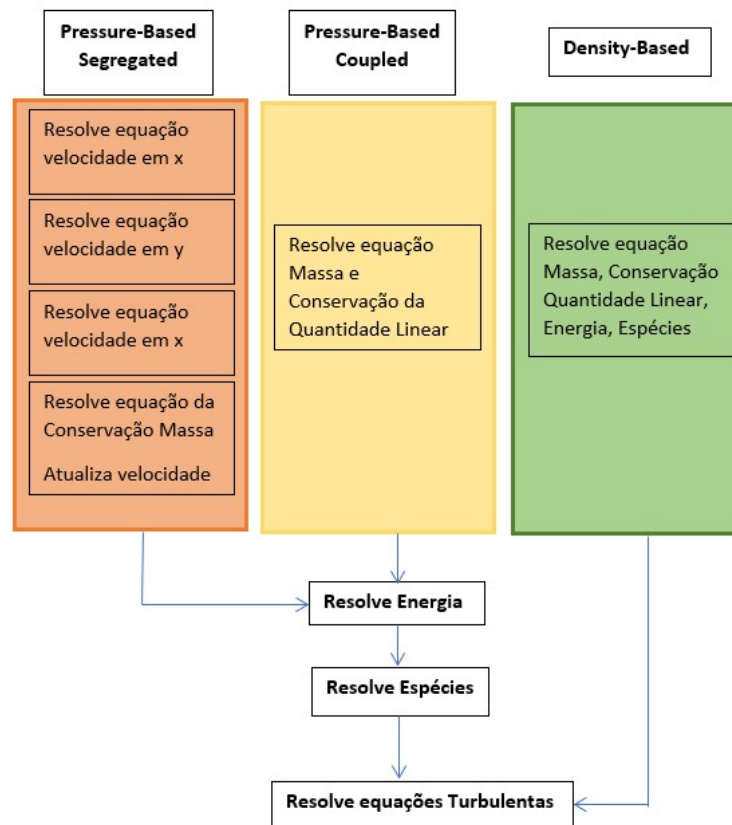


Figura 31- Tipos de Solvers [62]

Apesar de inicialmente o *Solver Pressure-Based* ser usado essencialmente para resolver problemas incompressíveis ou pouco compressíveis e o *Density-Based* para escoamentos compressíveis de alta velocidade, atualmente ambos são aplicáveis para um amplo leque de escoamentos.

No entanto existem ocasiões em que é comprovado maior precisão de um em relação ao outro. Em escoamentos incompressíveis é melhor usar *Pressure-Based* e em casos de velocidades altas, como em escoamentos supersônicos, grandes gradientes de pressão e/ou densidade e para uma boa resolução de ondas de choque *Density-Based* é mais indicado.

Os dois Solvers para *Pressure-Based* são implícitos, requerem menos memória e são mais flexíveis.

O acoplamento pressão-velocidade refere-se ao algoritmo numérico que usa uma combinação da equação da Conservação da massa e Quantidade de Movimento Linear para derivar uma equação para pressão (ou correção de pressão) aquando do uso de um solver *Pressure-Based*.

Se o solver for o *Coupled* então o algoritmo será o *Coupled*, já para *Segregated* o *Fluent* tem disponível quatro algoritmos:

- SIMPLE;
- SIMPLER;
- PISO;
- FSM.

O algoritmo default é o *SIMPLE* e também o mais comum. A existência destes algoritmos vem do facto de não existir uma equação para a pressão e que a equação da Conservação de Massa não é resolvida pelo solver, mas será na realidade uma restrição para as equações de Conservação da Quantidade de Movimento Linear.

Por essa razão é necessário arranjar uma nova equação para a pressão, que será a combinação das duas equações já mencionadas.

Utilizando o *SIMPLE* como exemplo, o primeiro passo é resolver a equação da Quantidade de Movimento para obter um campo de velocidades iniciais, mas que não satisfaz a Equação de Conservação de Massa.

De seguida combina-se as equações da Massa e Quantidade de Movimento em uma nova equação, denominada de *Poisson*, que ao ser resolvida fornece uma pressão de correção para o campo de velocidades, de modo que este campo satisfaça a equação da Conservação de Massa.

Este campo de velocidades pode ou não satisfazer a equação da Conservação da Quantidade de Movimento Linear, é então necessário um processo iterativo, um ciclo, até que sejam satisfeitas ambas as equações.

Se existirem ainda equações adicionais como para energia, turbulência, entre outras, estas serão resolvidas após a correção da velocidade e dentro do ciclo.

2.7.2.2. Métodos de discretização

Os *Solvers* do *Ansys Fluent* são baseados no método de volumes finitos. Para qualquer tipo de célula os valores das suas variáveis são armazenados no ponto central P, Figura 32.

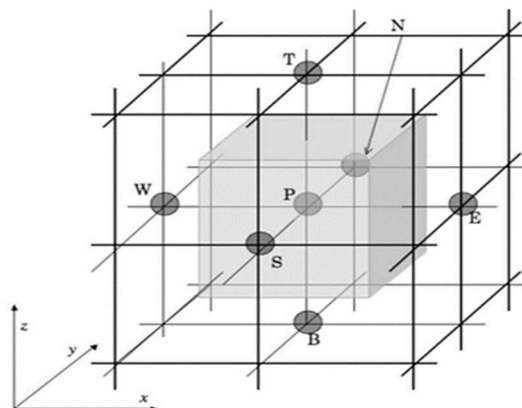


Figura 32- Pontos de discretização [63]

Neste método as equações de conservação são transformadas para a sua forma geral e integradas [64] em cada célula com a equação (32).

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \int_A \rho \phi V dA = \int_A \Gamma_\phi \nabla_\phi \cdot dA + \int_V S_\phi dV \quad (32)$$

Onde ϕ é uma variável que dependendo da quantidade que substitui, transforma a equação na respetiva equação de conservação. Os termos são integrais volumétricas V e de superfície (área) A . São definidos respetivamente e em ordem por termo transiente, convectivo, difusivo e fonte/sumidouro.

As equações integrais são discretizadas em cada volume de controlo e formam um sistema de equações algébricas que serão resolvidas para obter a solução de ϕ .

Estas variáveis têm de ser interpoladas entre o centroide da célula e a sua face, para o efeito existem vários métodos de interpolação, tanto para a discretização espacial como temporal.

Os esquemas de interpolação para o termo convectivo são:

- Primeira Ordem *Upwind*;
- Segunda Ordem *Upwind*;
- *Power Law*;
- *QUICK*;
- *MUSCL*.

A escolha depende do tipo de escoamento e condições, bem como o interesse em uma convergência mais rápida ou mais precisão.

Um dos mais populares é o Segunda Ordem *Upwind*, que apesar de ser mais lento e difícil de convergir que o de Primeira Ordem *Upwind*, oferece mais precisão na solução devido ao facto de existir uma variação linear entre o centroide P e a face, ao contrário da de primeira ordem que é constante, como representado na Fig.

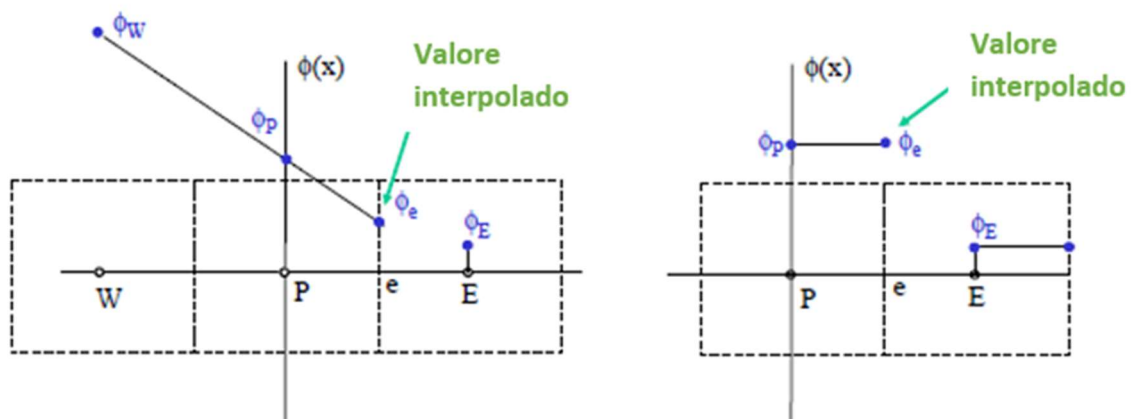


Figura 33- Interpolação [65]

Esquema *Upwind* são caracterizadas por serem estáveis e darem mais valor ao ponto a montante do escoamento. A formulação *Upwind* de Segunda Ordem é dado pela equação (33).

$$\phi_f = \phi + \nabla\phi \cdot \vec{r} \quad (33)$$

Com ϕ_f e ϕ como valor da face e do ponto central da célula respetivamente, $\nabla\phi$ o gradiente na célula a montante e \vec{r} o vetor de deslocamento da célula a montante.

Por vezes é necessário saber os gradientes das variáveis, como em esquemas de discretização de ordem elevada, por exemplo Segunda Ordem *Upwind*, ou ainda para termos fonte/sumidouro. Esses gradientes podem ser obtidos de três formas:

- *Green-Gauss Cell-Based*;
- *Green-Gauss Node-Based*;
- *Least-Squares Cell-Based*.

O método *Green-Gauss Node-Based* e *Least-Squares Cell-Based* são os mais precisos.

Aquando do uso do *Solver Segregated Pressure-Based* é necessário também um esquema de interpolação para a pressão. As opções disponíveis são:

- *Standard*;
- *PRESTO*;
- *Linear*;
- *Segunda Ordem*;
- *Body Force Weighted*

Os esquemas *Standard* e *Linear* são os de menor precisão, mas melhor convergência, o *Body Force* é indicado para escoamento com grandes forças convectivas e remoinhos, o *PRESTO* preferível quando existem ventoinhas e porosidade e o de Segunda Ordem para escoamentos compressíveis.

Por último existe ainda métodos para interpolação das variáveis no tempo, necessário para problemas transientes. A equação genérica para a evolução temporal é dada pela equação (34).

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = F(\phi) \quad (34)$$

Onde F é a função de discretização da derivada temporal e no lado esquerdo está a derivada temporal. Se o lado esquerdo da equação depender apenas de valores do tempo atual e futuro, $n + 1$ e n respetivamente, então é considerado de primeira ordem, e a equação (35) é dada por

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi) \quad (35)$$

No caso de depender também do tempo passado, $n - 1$, então é considerado de segunda ordem e tem como equação (36).

$$\frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\Delta t} = F(\phi) \quad (36)$$

O lado direito da equação é calculado com o tempo futuro $n + 1$ então estamos na presença método implícito, com equação (37).

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi^{n+1}) \quad (37)$$

Se contrariamente depender apenas do tempo presente n então é designado por explícito e tem como equação (38).

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi^n) \quad (38)$$

Solvers Density-Based oferecem podem usar métodos implícitos e explícitos de várias ordens, já no *Pressure-Based* apenas estão disponíveis métodos implícitos de primeira e segunda ordem. A vantagem do método implícito é ser mais estável [66].

2.7.2.3. Convergência

Em simulações numéricas as equações de conservação ao serem resolvidas podem não obedecer à sua conservação ao longo do domínio do problema num primeiro instante, por essa razão é necessário proceder-se a iterações para os valores convergirem para conservação. Numa situação ideal a convergência resultaria em uma diferença nula entre valores finais e da sua iteração anterior, mas numericamente isso é impossível, logo um critério de convergência terá de ser fornecido para o Solver saber quando parar de iterar.

Os valores default de resíduos em escala para todas as equações são 10^{-3} exceto para energia no *Solver Pressure-Based* que deve ser de 10^{-6} [51].

É recomendado a criação de ficheiros para visualização de certas variáveis/quantidades físicas de interesse de modo a avaliar a sua convergência e se fisicamente os valores fazem sentido.

2.7.2.4. Inicialização e cálculos

O processo iterativo requer inicialização antes começar os cálculos, logo valores iniciais das variáveis devem ser colocados. Por os valores podem ser uma estimativa de modo a melhorar e acelerar a convergência e em outros casos um valor exato é necessário de modo a simular a situação real.

Antes de se iniciar os cálculos é ainda necessário a introdução do número de iterações e ainda, para problemas transientes, o time-step em segundos e número de *Time-Steps*. O número de iterações refere-se à discretização espacial e funciona do mesmo modo tanto para escoamentos estacionários ou transientes, já para problemas transientes é necessário introduzir o valor da sua divisão temporal (*Time-Step*) e consequentemente o número de divisões, uma vez que a sua multiplicação resulta o tempo real total.

2.7.3. Pós-processamento

A etapa de Pós-Processamento compreende a análise de resultados através de gráficos, figuras, animações, entre outros. No caso de invalidade dos resultados alterações devem ser realizadas para se proceder-se a nova simulação.

Se por outro lado os resultados são satisfatórios deve-se realizar a sua verificação e validação.

Se por outro lado os resultados são satisfatórios, uma etapa imprescindível para se considerar uma simulação *CFD* credível é proceder-se à sua validação e verificação.

3. MÉTODOS E APLICAÇÃO

Neste capítulo serão apresentadas quais as opções tomadas no *Fluent*, bem como a sua razão. As escolhas em cada uma das etapas passará pela combinação do conhecimento de trabalhos prévios e da adaptação ao caso atual.

Por isso, o método de seleção passará sempre que necessário, pela referência da bibliográfica e/ou adaptação caso não exista informação.

O Armazenamento de hidrogénio em estado gasoso para veículos é uma tecnologia consolidada. Existem diversos estudos feitos por institutos, empresas e universidades sobre o escoamento de hidrogénio para tanques de diversos tipos e formas. Muitos destes são relacionados com tanques do tipo 3 e 4, uma vez que são os mais utilizados em veículos.

De forma geral estes estudos investigam a evolução das temperaturas do hidrogénio dentro do tanque e dos materiais do forro e revestimento. Efeitos da variação da pressão, velocidade, condições iniciais, de *Inlet* e efeito *Joule-Thomson* também são abordadas.

O presente trabalho seguirá esse tipo de análises, por essa razão estará fora do leque de investigação, como em muitos outros artigos, a comparação de resultados com as tabelas do regulamento SAE J2601 bem como a utilização das suas condições de entrada, uma vez que não são de acesso livre.

3.1. Validação e verificação

Para a simulação *CFD* foi necessário saber-se de antemão qual o tipo de tanque bem como as suas propriedades e dimensões. Inerente a essa escolha está a do artigo base, pelo qual essas propriedades serão retiradas e validadas.

A validação e verificação são etapas imprescindíveis para se considerar uma simulação *CFD* credível.

Durante a verificação determinar-se-á se o modelo conceptual e as suas soluções são representadas de forma precisa na sua implementação [67] Nesta fase não é abordada a sua relação com o mundo real.

Na verificação identificam-se e quantificam-se erros associados á solução computacional, como por exemplo, insuficiente convergência na discretização temporal (problemas transientes) e espacial e convergência iterativa. A maneira mais comum de proceder à verificação é testar diferentes malhas e time steps.

A validação determina o grau em que o modelo representa a situação real que se pretende estudar, por esse motivo é nesta fase em que são comparados os resultados numéricos com os experimentais para avaliar o modelo.

O primeiro passo do processo de validação é a verificação em si, de modo a reduzir erros associados com o processo computacional. A comparação com dados reais e avaliação do erro associado para com a simulação pode por vezes ser de elevada complexidade, devido a fatores reais desconhecidos ou de difícil quantificação na construção do modelo.

Tendo isso em conta, utilizou-se como artigo base para validação a experiência e subsequente simulação realizadas em [44] Este estudou um tanque do tipo 3 de 40 litros de volume e *Inlet* com caudal mássico fixo de 8 gramas por segundo.

O tempo total de enchimento real e simulação foi de aproximadamente 200 segundos. No entanto, devido ao alto custo computacional apenas se simularam 50 segundos, uma vez que cada simulação demorava de um a dois dias com o equipamento disponível.

Foram testados dois tipos de temperatura de pré-arrefecimento no artigo base, mas para o efeito só será utilizado o de -20°C . Essa temperatura foi colocada no fluyente através de um *UDF*.

A verificação consistiu na implementação de três opções diferentes para a malha e *Time-Step*. Este número de opções (simulações) deve-se da análise dos resultados em cada uma das simulações, onde pesou a precisão das mesmas bem como o seu custo computacional.

3.2. Simulações a realizar

As simulações realizadas estão divididas em 8 categoria, Tabela 9, ao qual corresponde um caso.

O Caso 1 tem como objetivo a verificação e validação da simulação. Numa primeira fase realiza-se a verificação através da independência de malha, Casos 1-A a 1-C, utilizando três tipos de malhas distintas, numeradas de 1 a 3. E de seguida verificou-se a independência do *Time-Step* com o Caso 1-A e 1-E juntamente com 4-C, uma vez que possuem as mesmas propriedades.

A validação é feita através da comparação dos resultados reais com os Casos 1-A a 1-C, já que possuem as condições do artigo base.

Como já referido, pesa na escolha destes fatores o tempo de simulação, convergência e aproximação com os resultados reais. Nesse sentido, a decisão após análise de resultados, foi continuar as simulações com a malha 1 e *Time-Step* de 0,002 segundos.

No caso 2 testou-se com as mesmas condições do Caso 1-A a diferença entre o modelo turbulento *Realizable K - e* e *Standard K - e*.

Do Caso 3 considerou-se equilíbrio térmico entre o tanque e o hidrogénio de abastecimento, fixando assim as duas temperaturas. As simulações consistem em aumentar consecutivamente 10 Kelvin a temperatura de equilíbrio.

Após o consumo do hidrogénio no tanque, este pode chegar às estações com temperatura mais baixa que a ambiente, uma vez que o esvaziamento, contrariamente ao enchimento, reduz a temperatura. Para o efeito o Caso 4 apresenta uma temperatura fixa inicial e variável de *Inlet* e externa.

Para se analisar o erro associado em um caso totalmente adiabático, construiu-se uma malha sem forro e revestimento e realizaram-se dois conjuntos de simulações, Casos 5 e 7. Variou-se a temperatura no Caso 5 e o caudal mássico no Caso 7.

A velocidade é um parâmetro de elevada importância na avaliação do comportamento do escoamento e temperaturas do hidrogénio. Como está interligado com o caudal mássico, foram testados no Caso 6 diferentes caudais mássicos e analisado o seu impacto. O Caso 4-C foi utilizado em conjunto para o caudal de $0,008 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$.

Existe o interesse em ver as diferenças entre um tanque tipo 3 e 4, mas muitas vezes estes possuem dimensões e características diferentes. Para ultrapassar esse problema simulou-se um tanque do tipo 4, Caso 8, com as mesmas dimensões que o de tipo 3 do Caso 4-C, mas com forro de polímero polietileno de alta densidade (*HDPE*).

Na Tabela 9 são apresentadas todas as simulações feitas no âmbito deste trabalho, bem como as condições iniciais, de *Inlet*, *Time-Step*, malha e se é adiabático ou não.

Tabela 9 – Simulações realizadas

Simulação	Temperatura de Inlet (K)	Temperatura Inicial (K)	Caudal (kg.s ⁻¹)	Time-Step (s)	Malha	Temperatura exterior (K)
Caso 1-A	UDF	293	0,008	0,002	1	293
Caso 1-B	UDF	293	0,008	0,002	2	293
Caso 1-C	UDF	293	0,008	0,002	3	293
Caso 1-D	293	279,2	0,008	0,005	1	293
Caso 1-E	293	279,2	0,008	0,001	1	293
Caso 2	UDF	293	0,008	0,002	1	293
Caso 3-A	313	313	0,008	0,002	1	313
Caso 3-B	303	303	0,008	0,002	1	303
Caso 3-C	293	293	0,008	0,002	1	293
Caso 3-D	283	283	0,008	0,002	1	283
Caso 4-A	313	279,2	0,008	0,002	1	313
Caso 4-B	303	279,2	0,008	0,002	1	303
Caso 4-C	293	279,2	0,008	0,002	1	293
Caso 4-D	283	279,2	0,008	0,002	1	283
Caso 5-A	303	303	0,008	0,002	4	-
Caso 5-B	293	293	0,008	0,002	4	-
Caso 5-C	283	283	0,008	0,002	4	-
Caso 6-A	293	279,2	0,01	0,002	1	293
Caso 6-B	293	279,2	0,006	0,002	1	293
Caso 6-C	293	279,2	0,004	0,002	1	293
Caso 6-D	293	279,2	0,002	0,002	1	293
Caso 7-A	293	279,2	0,008	0,002	4	-
Caso 7-B	293	279,2	0,006	0,002	4	-
Caso 7-C	293	279,2	0,004	0,002	4	-
Caso 8	293	279,2	0,008	0,002	1	293

3.3. Escolha de parâmetros para Pré-processamento

3.3.1. Geometria

A geometria é composta por um cilindro e duas meias esferas, como representado na Figura 34, e com largura, espessura do forro e revestimento com base no artigo base. O número 1 é o tubo de *Inlet*, com espessura de 0,002 metros e é considerado adiabático. O número 2 e 3 referem-se ao alumínio e fibra de carbono respetivamente.

Modificação do comprimento interior do tanque foi necessária devido á variação da espessura do tanque real nas partes concavas e de não existir informação sobre essa variação. Procedeu-se então á modificação do comprimento de tal modo que o volume resultante fosse 40 litros.

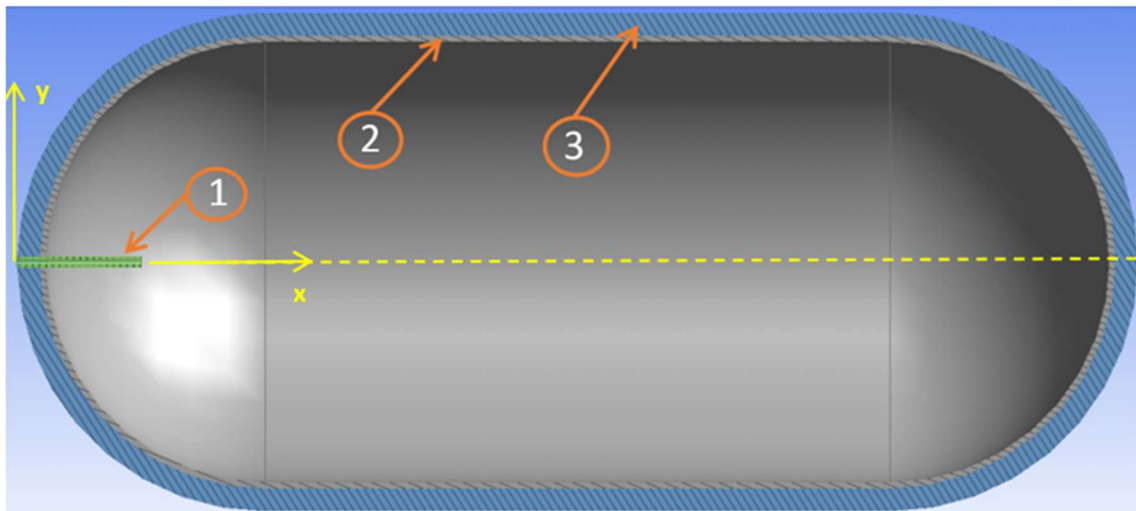


Figura 34- Esquema da geometria

Na Tabela 10 encontram-se as dimensões dos vários componentes.

Tabela 10 – Dimensões

Comprimento (m)	Largura (m)	Espessura alumínio (m)	Espessura Fibra de carbono (m)	Comprimento do tubo de Inlet (m)	Diâmetro interno do tubo de Inlet (m)
0,702	0,145	0,004	0,015	0,082	0,003

Devido ao alto custo computacional de uma simulação 3D optou-se por se realizar uma 2D. E de forma geral geometrias 2D apresentam resultados similares às 3D [43]

A construção da geometria em 2D foi feita estabelecendo-se como eixo de simetria axial o eixo X. A consideração de simetria axial só foi possível, porque na corrente configuração das simulações havia a certeza de que não existiria estratificação através de experiências prévias [68]. Isso também implica que a opção da gravidade não foi ativada.

3.3.2. Malha

Uma vez configurada a geometria o passo seguinte é a criação da malha.

Quatro tipos de malha foram contruídos para se proceder ao teste da sua independência. Na Tabela 11 estão apresentadas todos as malhas utilizadas bem como o seu número de elementos e células no tubo de *Inlet*.

Tabela 11 – Dimensões das malhas

Malha nº	Número de células	Número de células <i>Inlet</i>
Malha 1	26522	3
Malha 2	54698	5
Malha 3	52861	12
Malha 4	24185	3

A malha 1, Figura 35, foi a primeira a ser criada e a partir do qual a verificação foi feita comparando a 2 e 3. Como será discutido na análise dos resultados as malha 2 e 3 tem outra finalidade que é a diminuição do valor de y^* .

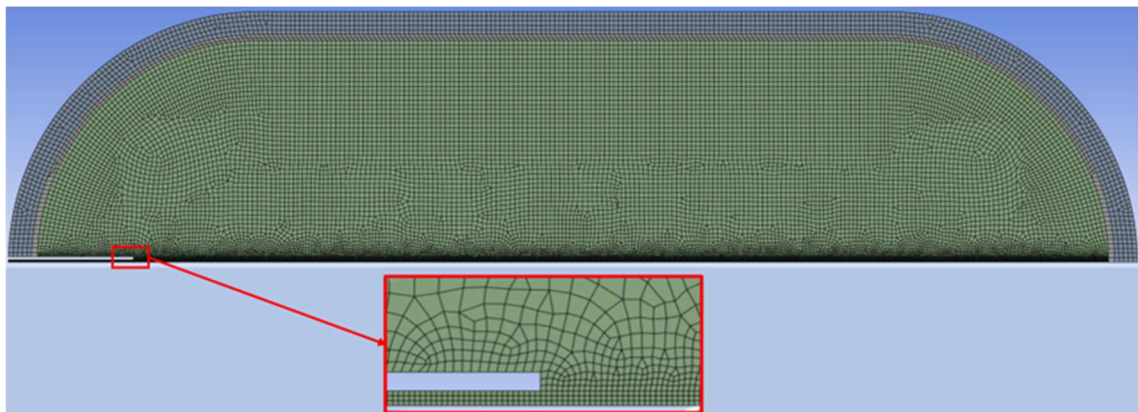


Figura 35- Malha 1

A malha 4, Figura 36, corresponde aos casos de escoamento adiabático, logo sem forro e revestimento.

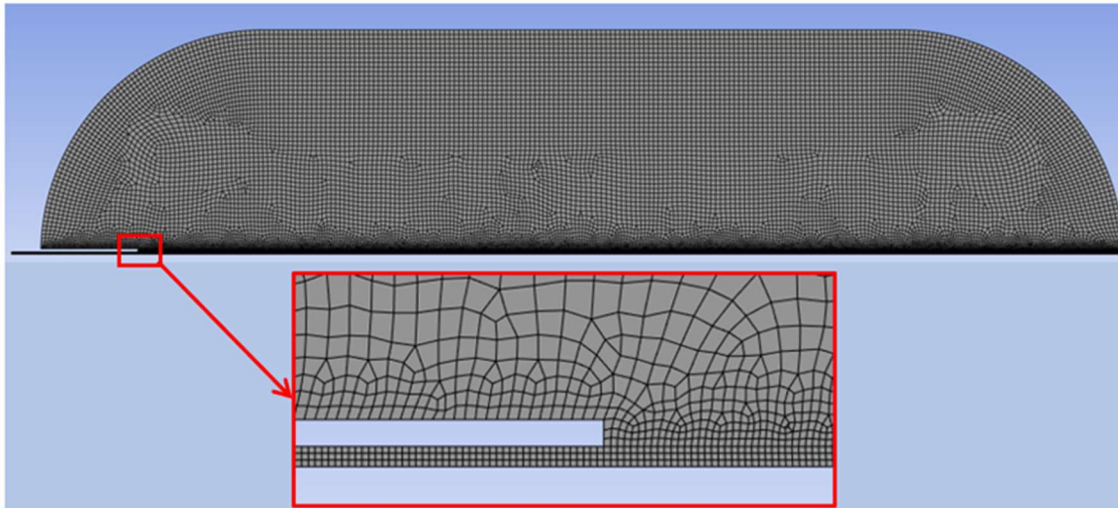


Figura 36- Malha 4

Todas as malhas obedeceram aos limites de *Skewness*, *Aspect ratio* e Ortogonalidade, com valores de *Skewness* e Ortogonalidade localizados na faixa de - Bons.

No final da construção de cada malha (1,2 e 3) procedeu-se à definição das interceções entre sólidos e fluidos. Neste caso foi feita para a superfície de contacto entre fibra de carbono-alumínio e alumínio-hidrogénio.

Como o tubo de *Inlet* é adiabático não se procedeu á construção da sua malha.

3.3.3. Zonas e propriedades físicas

As propriedades físicas do alumínio, fibra de carbono e polímero (Caso 8) [60] estão descritas na Tabela 12.

Tabela 12 – Propriedades físicas

	Fibra de carbono	Alumínio	HDPE [60]
Calor específico Cp (j.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	1120	900	1580
Densidade ρ (kg.m ⁻³)	1494	2700	945
Condutibilidade térmica k (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	0,740	167	0,385

Para o hidrogénio estabeleceu-se o calor específico (Cp), condutibilidade térmica e viscosidade dinâmica como funções polinomiais de quarto grau [47]

O cálculo da densidade do hidrogénio é feito através de equação de estado.

Como mencionado anteriormente, devido às pressões elevadas que ocorrem durante enchimento a equação para gases ideais não é indicada e a melhor opção neste caso é o uso da equação, equação (39), de gás real Redliche-Kwong.

$$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{\sqrt{TV_m}(V_m + b)} \quad (39)$$

Onde V_m é o volume molar, R a constante universal dos gases com valor 8.314 j.mol⁻¹.k⁻¹, T a temperatura e a e b constantes de correção para o potencial atrativo molecular e volumétrico

respetivamente. Estas constantes calculam-se á pressão crítica p_c e temperatura crítica T_c [69] segundo as equações (40) e (41).

$$a = \frac{(0,42748R^2T_c^{2,5})}{p_c} \quad (40)$$

$$b = \frac{(0,08664RT_c)}{p_c} \quad (41)$$

Após a definição dos valores das propriedades físicas estas foram atribuídas às zonas que lhe competem.

3.3.4. Condições de fronteira aplicadas

Aquando da seleção das interceções da malha o *Fluent* definiu as superfícies entre os três domínios como acopladas, o que significa que existe transferência de calor entre os três.

Também de forma automática as superfícies internas do tubo e tanque receberam condição de não escorregamento.

Na Figura 37 encontram-se as condições definidas manualmente. As letras A, B, C e D correspondem, respetivamente, às condições da parede exterior, do tubo de *Inlet*, de simetria e do *Inlet*.

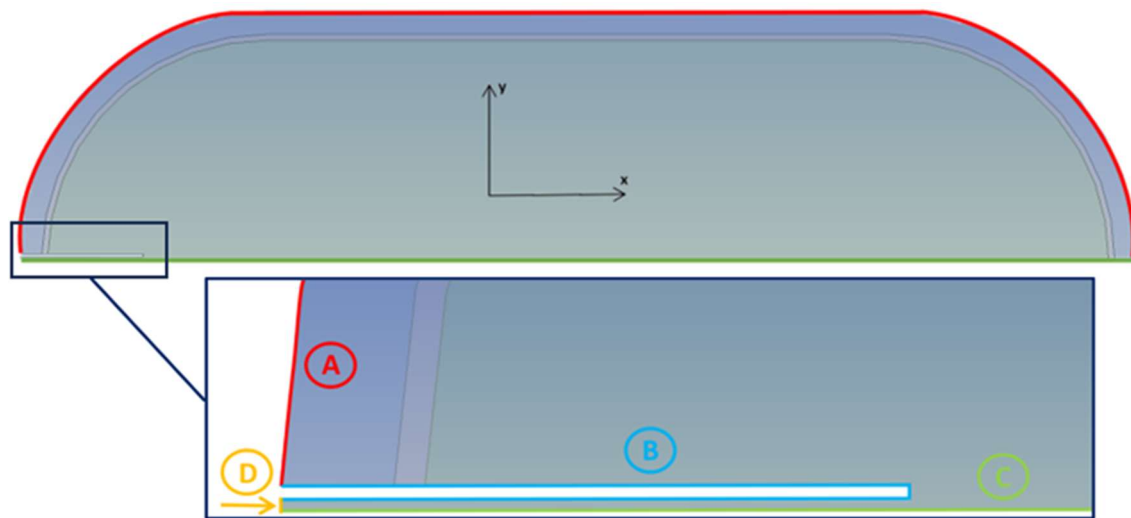


Figura 37- Condições de fronteira definidas pelo utilizador

Como referido anteriormente todas as simulações têm como condição de *Inlet* um caudal mássico constante. Os seus valores, juntamente com os de temperatura de *Inlet* e exterior, encontram-se na Tabela 9.

Uma condição de fronteira de caudal mássico implica que a temperatura de *Inlet* a indicar é a Total.

Para os casos adiabáticos (5 e 7) a superfície exterior tem condição de fluxo de calor nulo (adiabático). Já para os restantes casos uma condição de convecção foi estabelecida com o valor do coeficiente de transferência de calor igual ao artigo base, de $6 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}$.

Como o tubo de *Inlet* é adiabático, as suas superfícies receberam condição de fluxo de calor nulo.

3.3.5. Escolha do modelo de turbulência

O modelo utilizado (exceto Caso 2) foi o *Standard K – e*. É um modelo popular, robusto, de relativo baixo custo computacional e que apresentou bons resultados por vários autores, Tabela 8, bem como no atual processo de validação.

Foi necessário modificar-se a constante C1 de 1,44 para 1,52 devido a uma taxa de propagação elevada do jato de hidrogénio encontrada neste modelo [70].

No Caso 2 escolheu-se utilizar para comparação o modelo *Realizable K – e*, uma vez que é o recomendado pelo *Ansys* para a generalidade dos casos. Este difere do *Standard* na formulação da equação para taxa de dissipação turbulenta e e em C_{μ} , que passa a ser uma variável ao contrário de constante no *Standard*.

Estes modelos de turbulência utilizam como tratamento de parede *Wall Functions*. O *Fluent* oferece vários submodelos para esse tipo de tratamento, como *Standard*, *Scalable*, *Enhanced*, entre outros.

De entre eles os únicos capazes de fazer tratamento intensivo de y^* , necessário para testes de *independência* de malha, são o *Scalable* e *Enhanced*. Como o y^* no presente estudo muda de posição no espaço e tempo, o *Enhanced* não é indicado pois necessita de maior resolução de malha em zonas de onde y^* é inferior a 5.

Por essa razão escolheu-se o submodelo *Scalable*, que garante que o valor de Y^* nunca é inferior a 11,225. Esse valor corresponde à de interceção do perfil linear e logarítmico.

Devido á compressão o gás no tanque o aquecimento por forças viscosas não pode ser negligenciado, por isso ativou-se o aquecimento viscoso (*Viscous Heating*)[47].

3.4. Configuração do Solver

3.4.1. Escolha do Solver e método de acoplamento

Na configuração atual das simulações, nenhuma atingiu valores de velocidade supersónica ($Mach > 1$), logo não existem grandes gradientes espaciais de pressão e densidade provocados por ondas de choque. Por essa razão o *Solver Pressure-Based* é o mais indicado para esta situação[47].

O acoplamento de pressão-velocidade SIMPLE foi escolhido, porque é de forma geral robusto e trata uma ampla variedade de escoamentos, nomeadamente compressíveis. Para além disso provou ter bons resultados por outros autores [59]

3.4.2. Discretização

Para discretização espacial do termo de pressão e convectivo foram utilizados esquemas de Segunda Ordem e Segunda Ordem *UPWIND*, respetivamente. A escolha passa pelo facto de que são os mais precisos e de comprovado bons resultados [71].

A discretização temporal seguiu o mesmo princípio de Segunda Ordem Implícito para resultados mais precisos[36].

Para os gradientes não existia informação disponível, por essa razão optou-se *Least-Squares Cell-Based*, uma vez que é um dos mais precisos.

3.4.3. Convergência, inicialização e cálculos

O critério de convergência dependeu dos resultados observados nas primeiras simulações. Este assumiu o valor *default* de 10^{-4} uma vez que a equação da Conservação de Massa limitava valores mais baixos.

O valor de pressão inicial em todas as simulações foi de 2 Mpa, já da temperatura inicial varia de caso para caso.

Na Tabela 13 encontram-se os tempos de simulação em função do *Time-Step*.

Tabela 13 – Parâmetros temporais da simulação

Time-Step (segundos)	Número de Iterações	Tempo Real (segundos)
0,001	25000	25
0,002	25000	50

3.5. Pós-processamento

A análise de resultados será feita através de gráficos, tabelas imagens.

Para os casos de validação e independência de malha, utilizar-se-ão pontos aproximados da localização dos sensores no artigo base, uma vez que a localização exata não foi disponibilizada.

A localização destes pontos é dada na Tabela 14 e o centro e orientação dos eixos segue os da Figura 34.

Tabela 14 – Pontos de medição da temperatura

	X	Y
Ponto 1 (hidrogénio)	0,351	0,140
Ponto 2 (alumínio)	0,351	0,147

O ponto 2 será sempre o utilizado para medição da temperatura do alumínio.

As temperaturas médias resultam da média da área da geometria e as pressões apresentadas serão sempre absolutas.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta secção são exibidos os resultados obtidos pelas simulações descritas anteriormente.

Numa primeira fase é apresentada a verificação e validação, respetivamente, que sustentarão as escolhas tomadas para as restantes simulações em termos de malha e *Time-Step*. Utilizar-se-ão os Pontos 1 e 2 para medição das temperaturas na independência da malha e validação. Para a independência do *Time-Step* usou-se a temperatura média do gás e do Ponto 2 para alumínio.

De seguida é feita a comparação entre o modelo *Standard* e *Realizable*, através dos valores das três malhas testadas na verificação.

Para os Casos 3 e 4 analisou-se as variações de temperaturas médias do gás e do alumínio no Ponto 2.

Verificou-se a influência da variação do caudal mássico, Caso 6, na velocidade e temperatura médias. Esta variação de velocidade tem efeitos na relação entre temperatura total e estática na região do *Inlet*. Estudou-se essa relação através do número de *Mach*.

A temperatura média dos Casos adiabáticos, 5 e 7, serão comparadas com os de respetivas condições nos Casos 3 e 6.

Será avaliada com o Caso 8 a influência do forro de polímero nas temperaturas médias do gás, temperatura do forro (Ponto 2), pressão e velocidade.

Por último calculou-se a diferença de pressões máximas e mínimas, para saber se existe, neste caso, impacto do efeito *Joule-Thomson*.

4.1. Resultados da validação e verificação

A simulação inicial para independência de malha foi do Caso 1-A. Nesta o valor resultante de y^* máximo era bastante alto, na ordem de 1300. Por essa razão, para o Caso 1-B, aumentou-se de três para cinco o número de células no *Inlet*, uma vez que era a zona onde esses valores ocorriam devido á velocidade alta.

Ainda no Caso 1-B diminuiu-se o tamanho geral das células para metade, como é comum em testes de independência de malha.

Após a análise do Caso 1-B descobriu-se que a descida de y^* não tinha sido suficiente para este ficar abaixo do valor recomendado de 500. Desse modo foi necessária a construção de uma terceira malha com 12 células. Nesta o tamanho geral das células voltou a ser igual ao da malha 1 do Caso 1-A, uma vez que se verificaram pequenas variações nas temperaturas.

A malha 3 do Caso 1-C apresentou valor máximo de y^* de 434, logo dentro do máximo recomendado.

Na Tabela 15 encontram-se as temperaturas do hidrogénio (Ponto 1), alumínio (Ponto2) e y^* em função da malha.

Tabela 15 – Exemplo de tabela

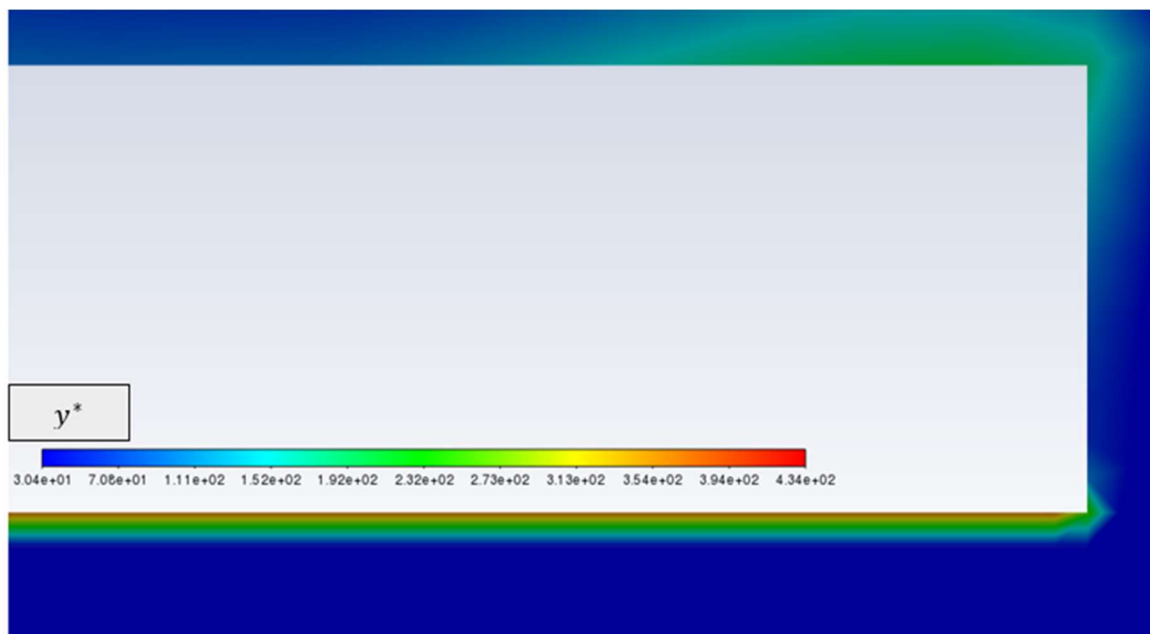
	Temperatura Ponto 1 (K)	Temperatura Ponto 2 (K)	Velocidade (m.s ⁻¹)	Malha	y^*
Caso 1-A	319,100	312,718	91,71	1	1300
Caso 1-B	319,129	312,682	92,8	2	869
Caso 1-C	319,103	312,633	93,1	3	434

A temperatura máxima foi de 323 K.

Pelos resultados obtidos, variação pequena das temperaturas e velocidades, é possível concluir que existe independência de malha e que o valor máximo de y^* não teve impacto significativo nos resultados.

A razão pela qual isso acontece é que, como pode ser visto pela Figura 38, esses valores altos encontram-se no *Inlet*. O tubo ao ser adiabático, a única variável de interesse é a velocidade e esta tem bons valores mesmo com uma malha local não adequada em termos de y^* [72].

Como tem um número total de células menor, a malha escolhida para as simulações seguintes foi a Malha 1.

Figura 38- Distribuição do Y^* pelo tubo *Inlet*

Para a independência de *Time-Step* o ponto de partida foi 0,002 segundos. Também aqui se aumentou e diminuiu o seu valor para testar a sua influência. Na Tabela 16 estão apresentados os resultados.

Tabela 16 – Independência temporal

	Temperatura (K) aos 25 segundos	Temperatura (K) aos 50 Segundos
Caso 1-D	315,949	328,933
Caso 1-E	315,290	
Caso 4-C	315,600	327,612

Da análise dos valores pode-se concluir que existe independência e em tentativa de poupar custo computacional o mais indicado era utilizar 0,005. No entanto a solução não convergiu. Por essa razão e numa lógica conservadora decidiu-se utilizar para as restantes simulações 0,002 segundos.

A validação apresentou bons resultados de forma geral. Tal como na simulação do artigo base existe uma sobreavaliação das temperaturas do gás, Figura 39, e alumínio, Figura 40, em relação à experiência. Acrescentando o facto de o perfil de crescimento seguir de muito perto o da simulação do artigo base, podemos concluir que as escolhas feitas no Pré-processamento e Solver foram corretas.

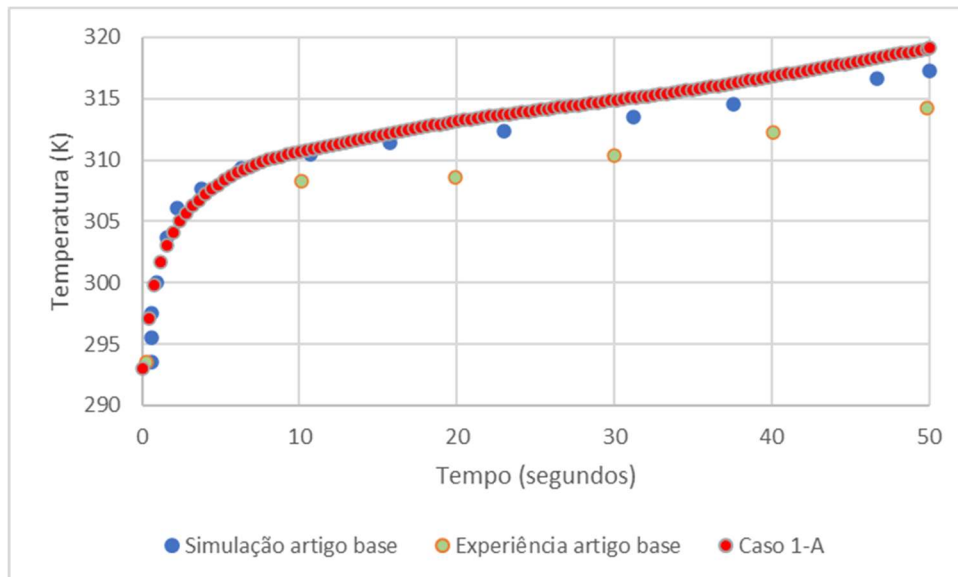


Figura 39- Validação (Temperatura hidrogénio)

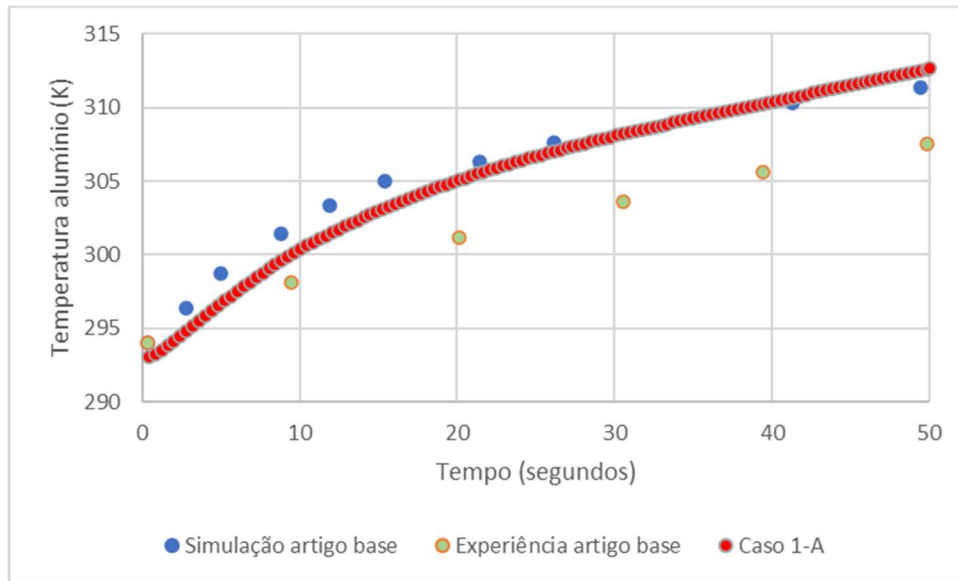


Figura 40- Validação (Temperatura alumínio)

A diferença entre simulações e experiência pode ter como explicação os efeitos produzidos pela abertura da válvula no início abastecimento, que só são sentidos na experiência.

Em todos os casos simulados (exceto os adiabáticos 5 e 7), bem como no artigo base, a temperatura do hidrogénio apresentou grande uniformidade dentro do tanque e elevados gradientes no tubo de *Inlet*, como pode ser visto na Figura 41.

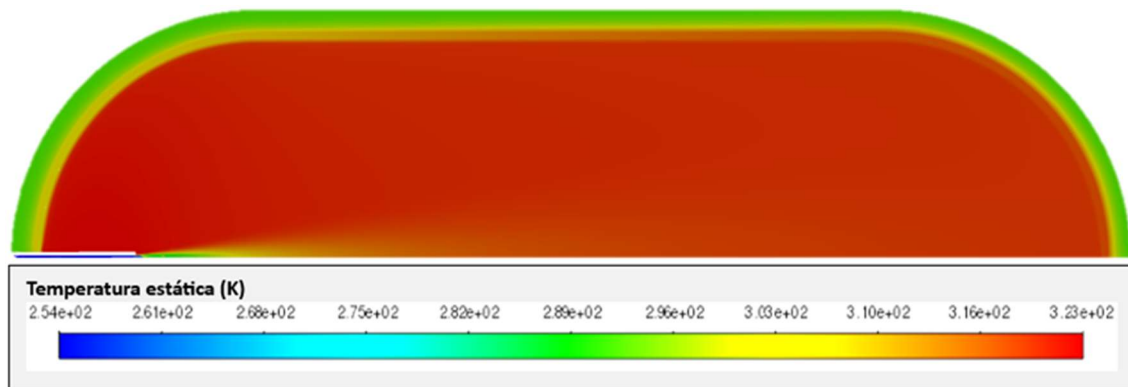


Figura 41- Temperatura estática

Já o alumínio e consecutivamente a fibra de carbono, Figura 42, apresentaram temperaturas superiores no lado oposto do *Inlet*. Isto ocorre devido a vários fatores como os efeitos da compressão mais sentidos nessa área, velocidades relativamente mais altas nessa zona e ainda o jato de hidrogénio de temperaturas inferiores à do gás no tanque vai arrefecer zonas mais próximas do *Inlet*.

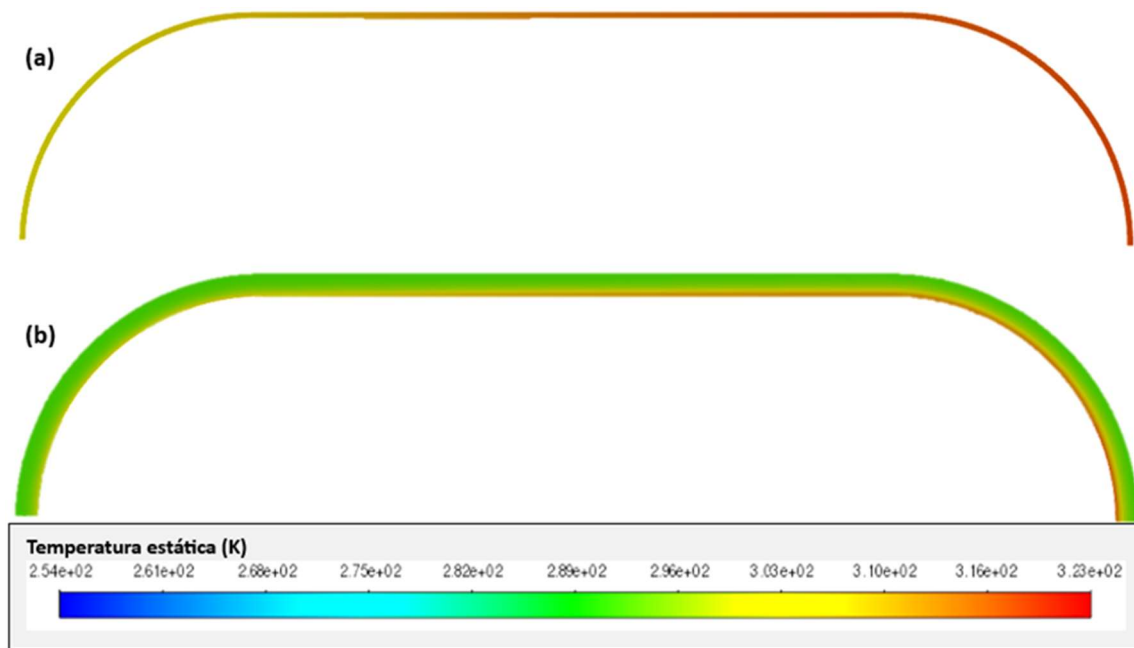


Figura 42- Temperatura no alumínio (a), Temperatura na fibra de carbono (b)

Em todas as simulações realizadas no presente trabalho, não existiu subida significativa da temperatura na parte mais exterior da fibra de carbono. Isto deve-se ao baixo coeficiente de transferência de calor da fibra. Nessa medida também se pode considerar negligenciável o efeito da condição de convecção na parte exterior do tanque.

Como se esperava a velocidade desceu ao longo do tempo e com maior taxa no início, como mostra a Figura 43. O seu valor máximo foi logo no início da simulação, contrariamente ao que acontece quando uma condição de pressão é escolhida. Esta última só alcança valores máximos aproximadamente cinco segundos (pode depender do caso) após o início, uma vez que é quando atinge o seu valor de caudal mássico máximo[42].

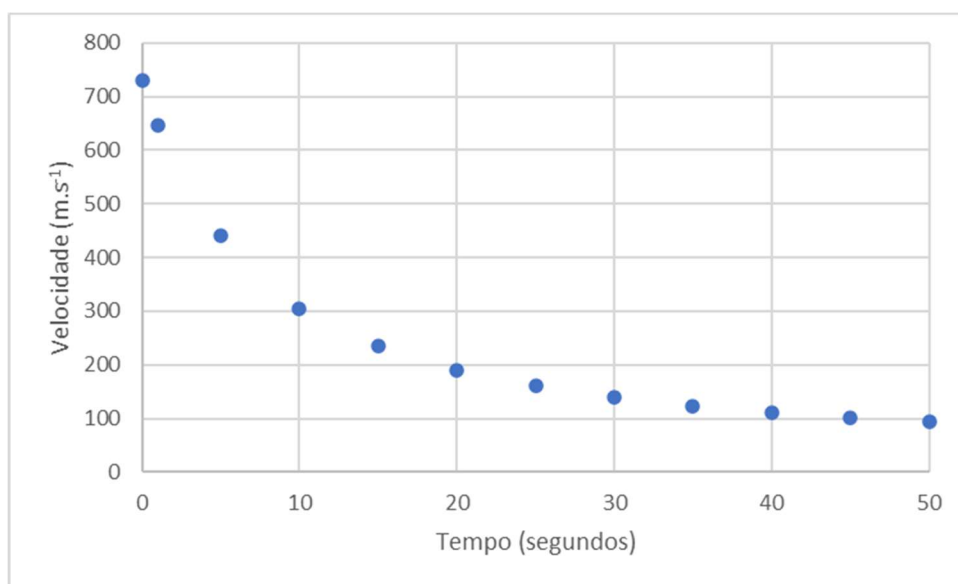


Figura 43- Velocidade máxima

A velocidade desce com o decorrer do tempo porque a variação de pressão entre o tanque e do gás a entrar também desce.

Como aconteceu com a temperatura, os maiores gradientes encontram-se no *Inlet*. A Figura 44 mostra a variação de velocidade aos consideram-se aos 50 segundos.

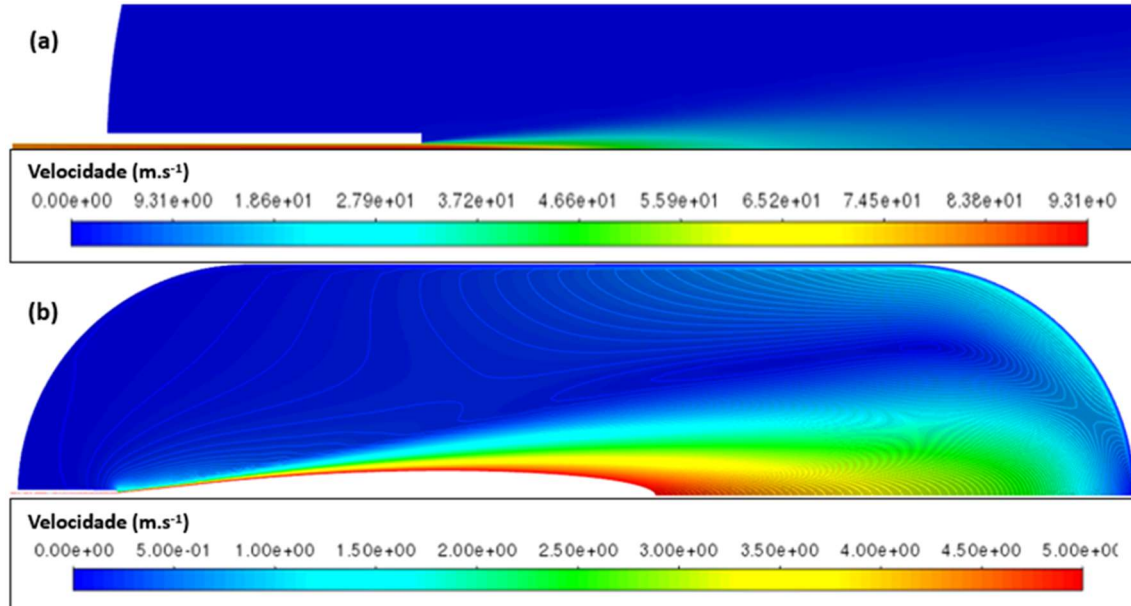


Figura 44- Velocidade aos 50 segundos (a), Velocidade aos 50 segundos com limite de 5 m.s⁻¹ (b)

Verificou-se ainda convergência de resultados como pode ser visto pela Figura 45. De notar que todas as simulações posteriores também respeitarão os limites de convergência.

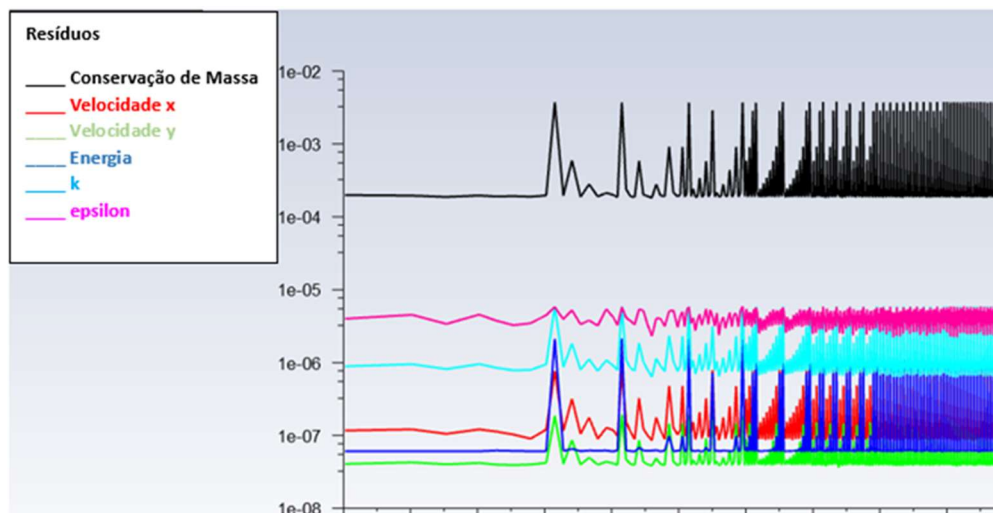


Figura 45- Resíduos

Os picos devem-se ao facto que a cada *Time-Step* uma nova convergência espacial ocorre.

Note-se ainda que o modelo contruído para esta simulação obteve resultados muito próximos com o 3D do artigo base e em muito menor custo computacional.

4.2. Comparação entre o modelo Standard e Realizable

O modelo Realizable, seguiu de perto os resultados do Standard, como pode ser visto Tabela 17. O custo computacional também foi o mesmo e respeitou os critérios de convergência.

Tabela 17 – Exemplo de tabela

	Temperatura final no Ponto 1 (K)	Temperatura final no Ponto 2 (K)
Realizable Caso 2	319,377	312,439
Standard Caso 1-A	318,304	311,954

No entanto apresentou uma pequena sobrestimação dos valores de temperatura, logo é possível concluir que para este caso, o modelo Standard é a melhor opção.

4.3. Aumento de temperaturas em equilíbrio total com o ambiente

O Caso 3 está em uma situação de equilíbrio das temperaturas do hidrogénio, materiais do tanque e exteriores (condição de convenção) com as de *Inlet*. Na Figura 46 pode-se ver que um aumento de 10 Kelvin nas condições de equilíbrio resultou em um aumento da temperatura média do hidrogénio em 11 Kelvin.

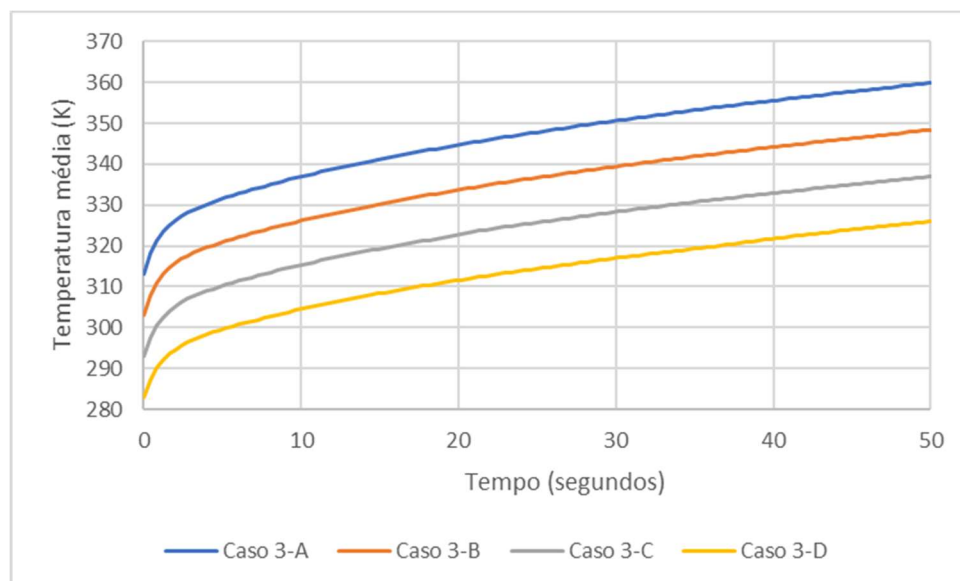


Figura 46-Aumento de temperaturas médias do Caso 3

Este valor é próximo do de 10 Kelvin encontrado por [25] em uma simulação de um tanque tipo 3 de 70 MPa e em condição de pressão variável no Inlet. É difícil dizer se essa pequena variação será proveniente das propriedades dos materiais do tanque, o volume diferente (74 litros) ou pela condição Inlet de pressão.

No entanto, é possível concluir que estes três fatores não influenciarão significativamente o valor do aumento linear em um tanque tipo 3 de 70 Mpa.

Como pode ser visto pela Figura 47, também neste caso a temperatura do alumínio variou linearmente com o mesmo valor de 11 Kelvin de aumento.

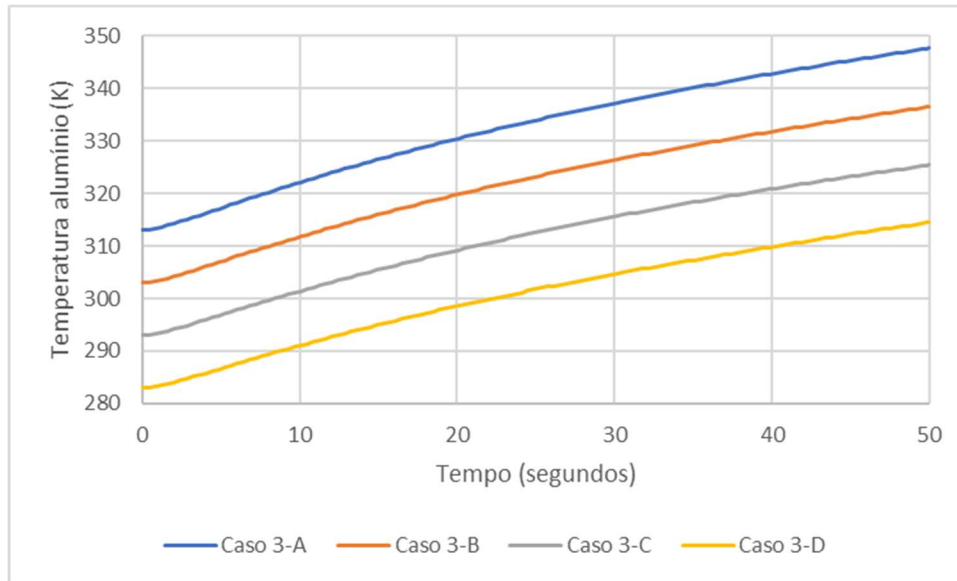


Figura 47- Aumento de temperaturas do alumínio do Caso 3

Chega-se então à conclusão que o alumínio segue na mesma magnitude o aumento da temperatura média, apesar de perfil de crescimento diferente.

A diferença de temperaturas entre o hidrogénio e alumínio também seguem um aumento aproximadamente linear, de 10 a 12 graus.

A pressão e velocidades também variam linearmente, como mostra a Tabela 18.

Tabela 18 – Pressões e velocidades Caso 3

	Pressão final (MPa)	Velocidade inicial (m.s-1)	Velocidade final (m.s-1)
Caso 3-A	19	769	100,5
Caso 3-B	18,5	746	100
Caso 3-C	18	723	99,5
Caso 3-D	17,5	700	99

Nos casos de temperaturas mais altas as pressões são maiores porque a densidade do gás é menor.

4.4. Aumento da temperatura de *Inlet* em condições de temperatura de equilíbrio fixa

No Caso 4 a temperatura inicial do tanque (equilíbrio com ambiente) de 279,2 Kelvin foi mantida constante, enquanto se variou a de *Inlet* e da condição de convecção.

Tal como no Caso 3 uma relação de linearidade foi encontrada na temperatura média do gás, mas com magnitude diferente. Como mostra a Figura 48, a subida foi de 5 Kelvin por cada 10 de aumento no *Inlet*.

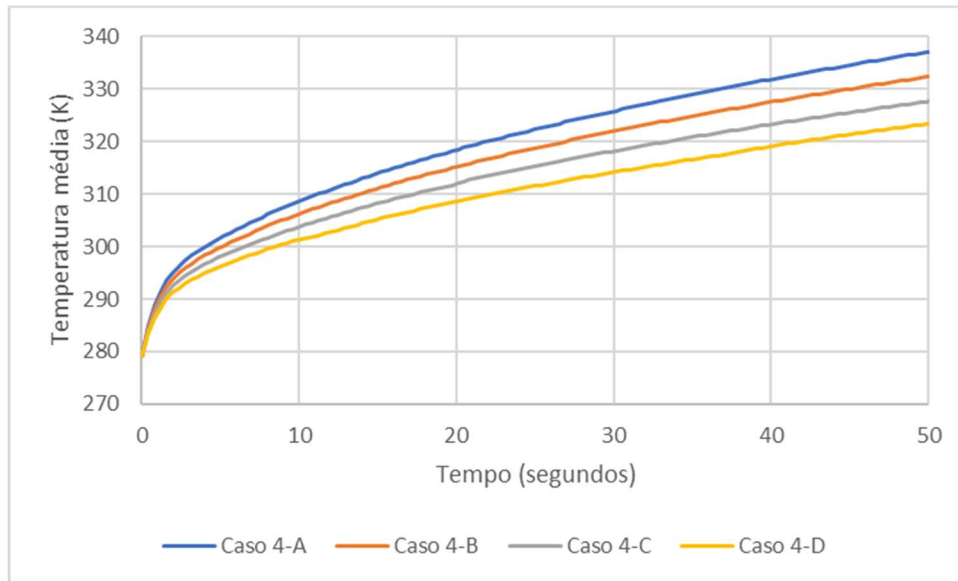


Figura 48- Aumento de temperaturas médias do Caso 4

Tal como no caso anterior, o alumínio também aumentou linearmente com a mesma magnitude da temperatura média, neste caso 5 Kelvin.

4.5. Influência da variação do caudal mássico na velocidade e temperatura

A diminuição do caudal mássico leva a uma diminuição das temperaturas médias não linear até os 50 segundos de simulação, Figura 49.

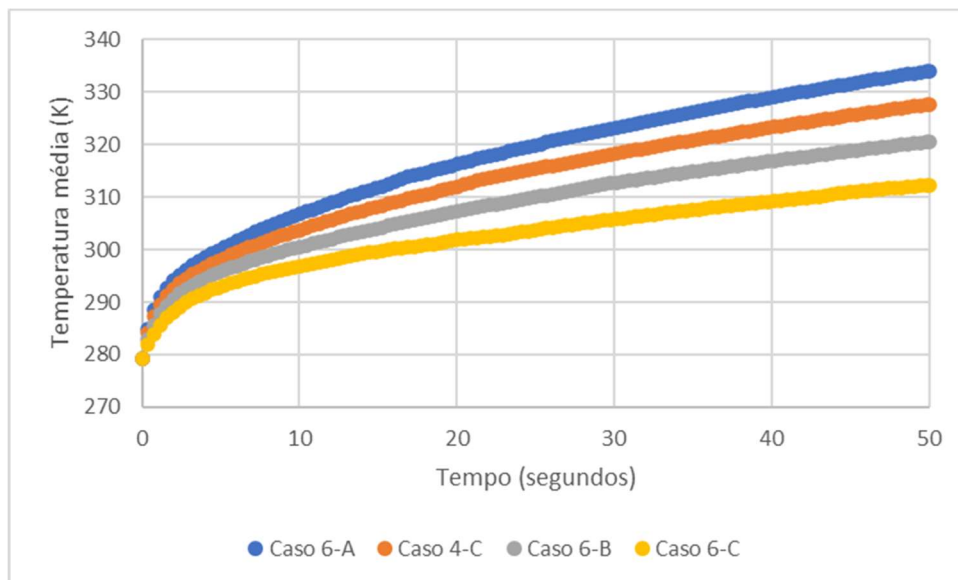


Figura 49- Aumento de temperaturas médias com o aumento de caudal mássico

Note-se que a variação do caudal influencia o tempo de abastecimento, logo caudais menores necessitam de tempos maiores. Por essa razão estudos complementares são necessários para se verificar os valores finais de temperatura média.

Como esperado a velocidade máxima diminui com a diminuição do caudal mássico[68] no entanto verificou-se que existe convergência das velocidades ao longo do tempo, como mostra a Figura 50.

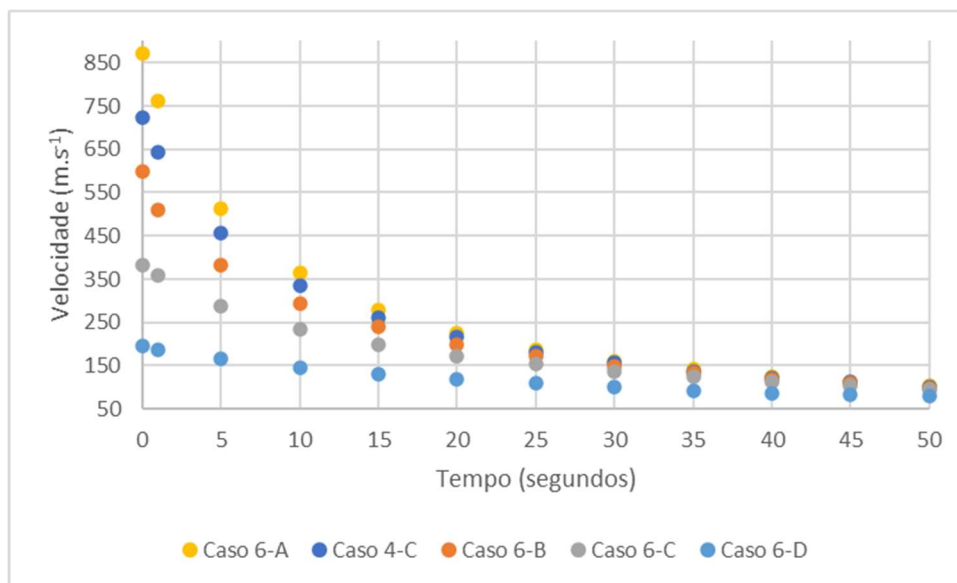


Figura 50- Variação da velocidade com o caudal mássico

No final da simulação a diferença passou a ser na ordem das dezenas ao contrário que no início era na ordem das centenas.

A velocidade do hidrogénio tem ainda uma influência significativa na temperatura estática na zona do tubo de *Inlet*.

Isso acontece porque na condição de fronteira de caudal mássico no *Inlet* a temperatura imposta é a total, segundo a equação (8) de escoamento isentrópico. Esse pressuposto é válido no tubo de *Inlet* porque este é adiabático.

A necessidade de o tubo ser adiabático advém do facto que fluxo de calor leva à variação da entropia.

Note-se ainda que um escoamento isentrópico também necessita de ser reversível e que o tubo apresentar fricção nas paredes, logo irreversibilidades. Mas neste caso a equação (8), continua válida mesmo na presença de fricção [73].

Em um escoamento incompressível a diferença entre a temperatura estática e total é pequena ou quase nula.

Enquanto o escoamento de um líquido pode ser considerado incompressível, devido á sua baixa variação de densidade mesmo para pressões altas, em um gás este pressuposto é mais restrito.

O escoamento de um gás é considerado incompressível se o seu valor de *Mach*, for inferior a 0,3 e compressível acima deste [52]. Na faixa compressível considera-se subsónico até valores de 1 e supersónico de 1 até 5. A medida que o número de Mach aumenta os efeitos compressivos tornam-se mais evidentes, principalmente na densidade acima de valor de Mach 1.

Como pode ser visto pela Figura 51 alguns dos caos testados possuíam valores de *Mach* superiores a 0,3.

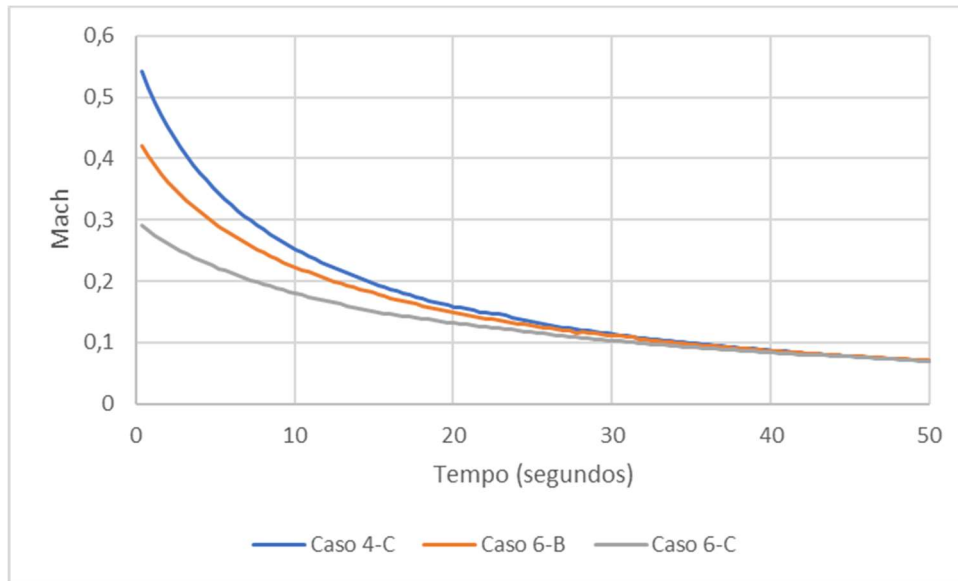


Figura 51- Variação no número de *Mach* com o caudal mássico

Como Mach varia proporcionalmente com a velocidade, equação (8), ele apresenta o mesmo perfil de descida que as velocidades correspondentes

Isso é a razão pela qual as temperaturas de *Inlet* à entrada e ao longo do tubo diferem das colocadas como condição. A condição era de temperatura total e como neste caso, o escoamento no *Inlet* apresenta Mach compressível, a temperatura estática nessa zona é menor que a total, Figura 52.

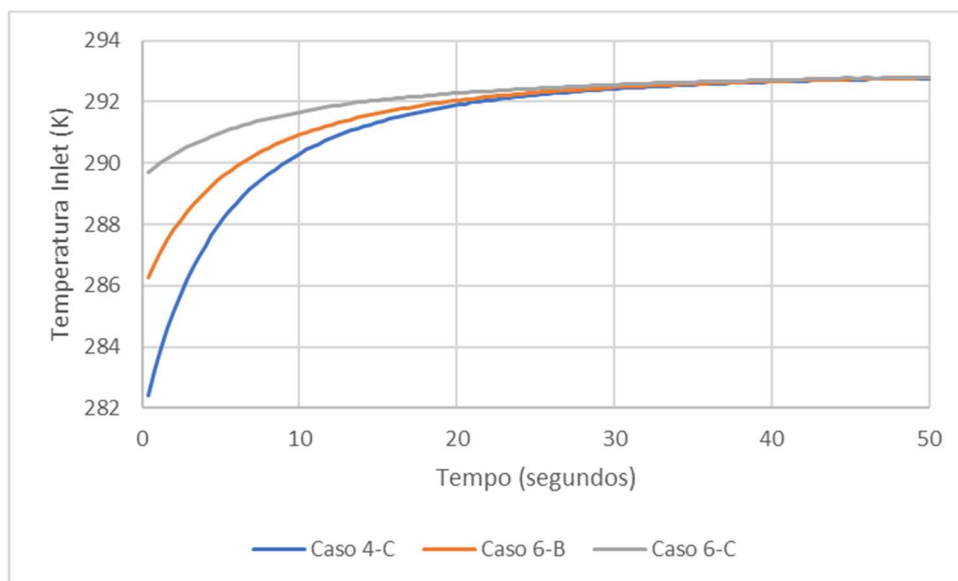


Figura 52- Variação da temperatura máxima de *Inlet* com o caudal mássico

Com o avanço do tempo a temperatura estática de *Inlet* vai convergir com a total.

A temperatura total tem como definição ser a temperatura medida se o escoamento parar. Ora, como o tubo tem uma condição de não escorregamento, a sua superfície estará então à temperatura total. Na Figura 53 pode-se visualizar esse acontecimento.

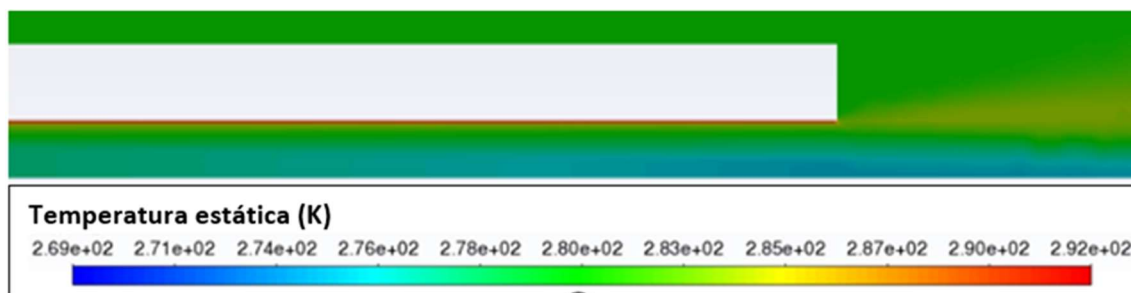


Figura 53- Temperatura estática no *Inlet* aos 0,04 segundos de escoamento real

Em um escoamento num tubo a fricção criada pela condição de não escorregamento vai levar à criação de uma camada limite dentro do tubo. O desaceleramento do fluido perto das paredes do tubo, devido às maiores tensões de cisalhamento, provoca o seu aceleração no centro uma vez que o caudal mássico tem de ser conservado.

Como o perfil da camada limite se desenvolve ao longo do tubo, a velocidade aumentará também ao longo do comprimento, Figura 54. Essa é a razão pela qual na imagem anterior as temperaturas estáticas mais baixas estão na saída do tubo.

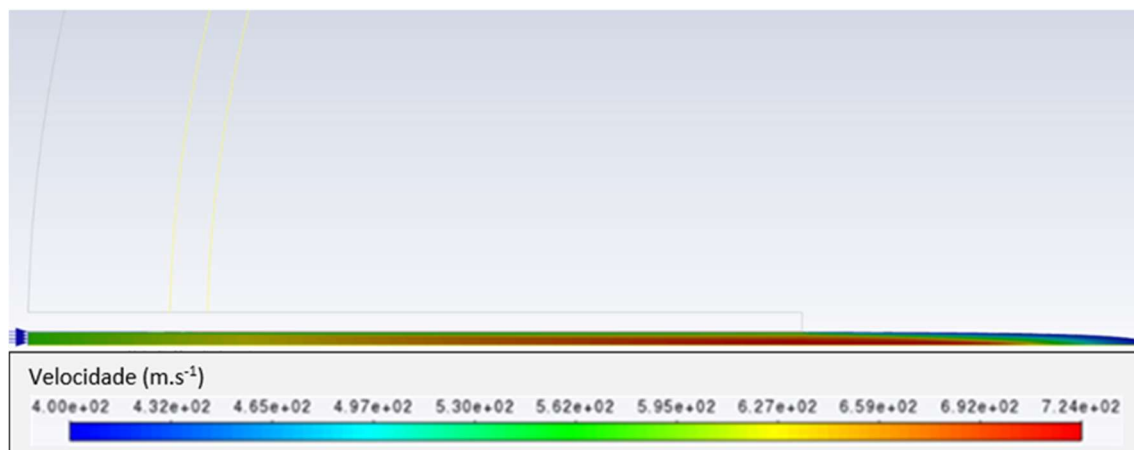


Figura 54- Velocidade *Inlet* aos 0,04 segundos de escoamento real

Disto resulta um aspeto importante, é que dependendo do ponto de medição no tanque a escolha do tipo de sensor de temperatura pode fazer diferença. Para a validação de uma simulação CFD, na maioria das vezes utiliza-se um perfil de temperaturas no *Inlet*, ora este deveria medir a temperatura total, mas não existe até ao momento, pelo conhecimento do autor deste trabalho, tal informação.

Note-se ainda, que não existe diferença no caso de o sensor ser colocado no interior do tanque mais afastado do *Inlet*, uma vez que nessa zona as velocidades são muito pequenas e leva a que a temperatura total e estática sejam idênticas.

O ideal seria uma maior transparência do tipo de sensores utilizados e a medição de ambas as temperaturas no *Inlet*.

4.6. Tanque adiabático

Uma subida de 10 Kelvin em cada simulação no Caso 5 resultou em uma subida de temperatura não linear, como pode ser visto na Figura 55.

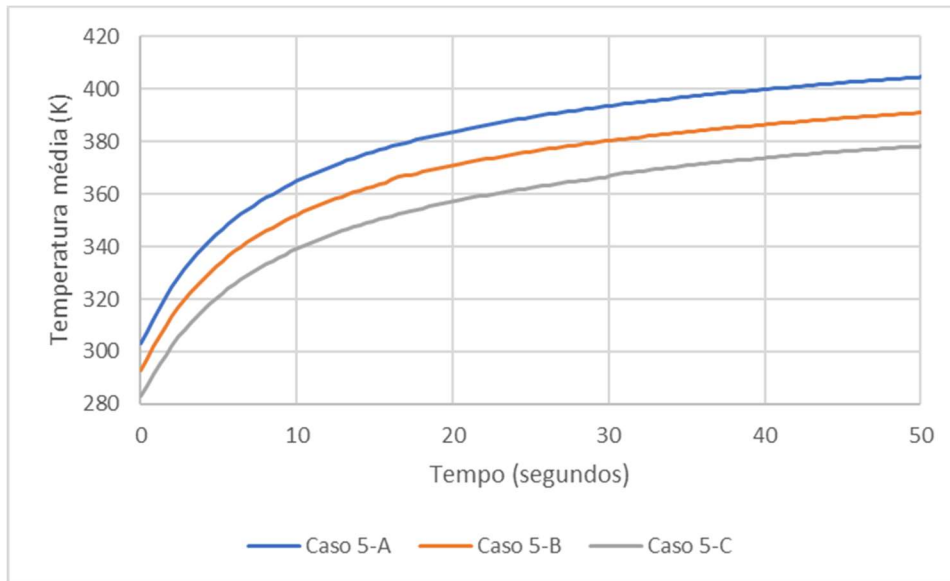


Figura 55- Aumento temperatura média no Caso 5

Essa não linearidade também foi verificada, Figura 56, quando se varia o caudal mássico no Caso 7.

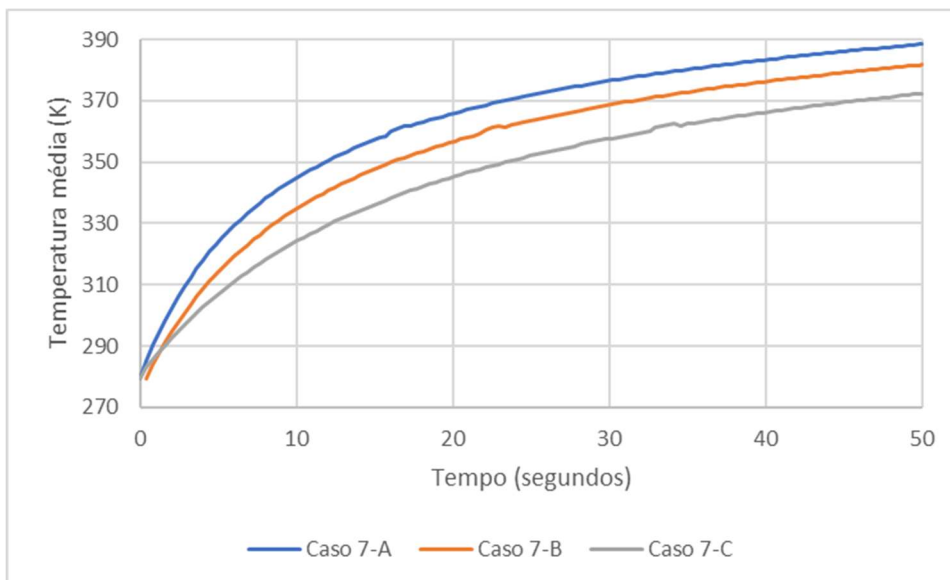


Figura 56- Aumento temperatura média Caso 7

A diferença de temperaturas entre os casos adiabáticos 5 e 7 e respectivos não adiabáticos são apresentados na Tabela 19 e Tabela 20, respetivamente.

Tabela 19 – Diferença de temperatura média entre Caso 5 e 3

	Diferença entre 5-A e 3-B	Diferença entre 5-B e 3-C	Diferença entre 5-C e 3-D
Temperaturas médias (K)	56,11	54,03	52,09

Tabela 20 – Diferença de temperatura média entre Caso 7 e 4

	Diferença entre 7-A e 4-C	Diferença entre 7-B e 6-B	Diferença entre 7-C e 6-C
Temperaturas médias (K)	60,83	61,38	60,07

Como se pode constatar, ao retirarmos os materiais do tanque existe uma subida drástica na temperatura. Isso ocorre porque o alumínio começa desde início a receber calor do gás diminuindo assim a sua temperatura. Conclui-se então que ao se fazer uma suposição de um tanque totalmente adiabático, leva em elevados erros. Conclusão similar foi tirada por [74] e [36]

Ao contrário dos respetivos casos não adiabáticos, os adiabáticos não apresentaram homogeneidade do hidrogénio dentro do tanque. Como se vê na Figura 57, existe na zona esquerda visivelmente maiores temperaturas que no restante do tanque.

A razão para tal acontecer pode ter a ver com as baixas velocidades, logo pouca mistura com o restante gás.

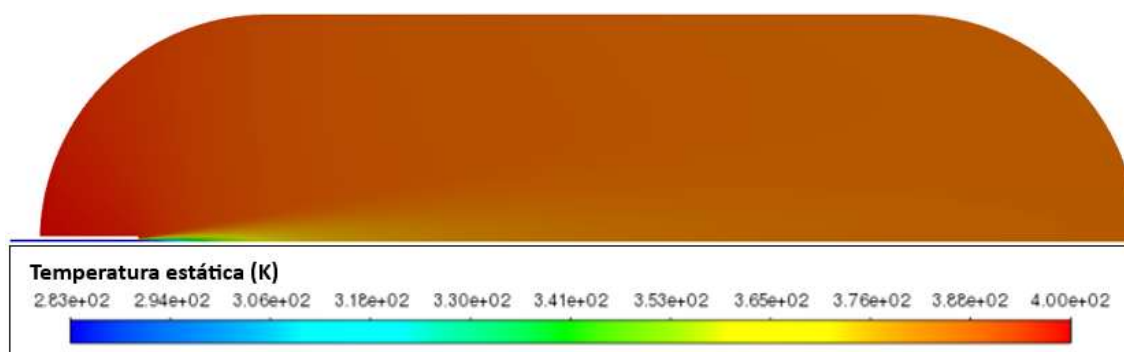


Figura 57- Tanque adiabático

4.7. Tanque tipo 4

Como esperado, as temperaturas do hidrogénio de um tanque tipo 4 em comparação com tipo 3 são superiores, Figura 58. Isto deve-se ao facto de o forro de HDPE possuir condutibilidade térmica menor que o alumínio.

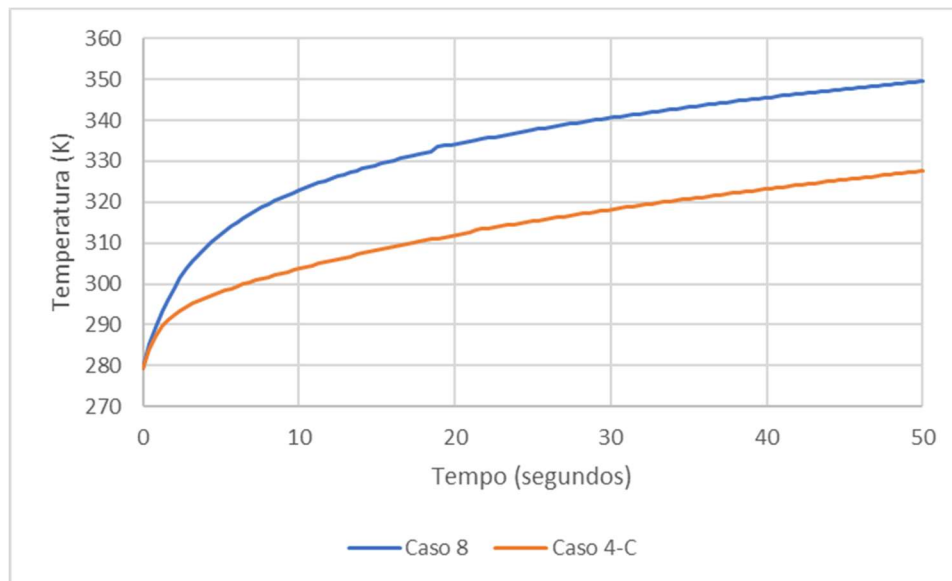


Figura 58- Aumento de temperaturas em um tanque 3 (Caso 4) e 4 (Caso 8)

O aumento é sentido logo a partir dos 2-3 segundos e ao fim dos 30 a diferença de aumento entre os dois parece estabilizar.

Por consequência a pressão do Caso 8, Figura 59, também foi superior, devido à menor densidade do gás resultante das temperaturas superiores.

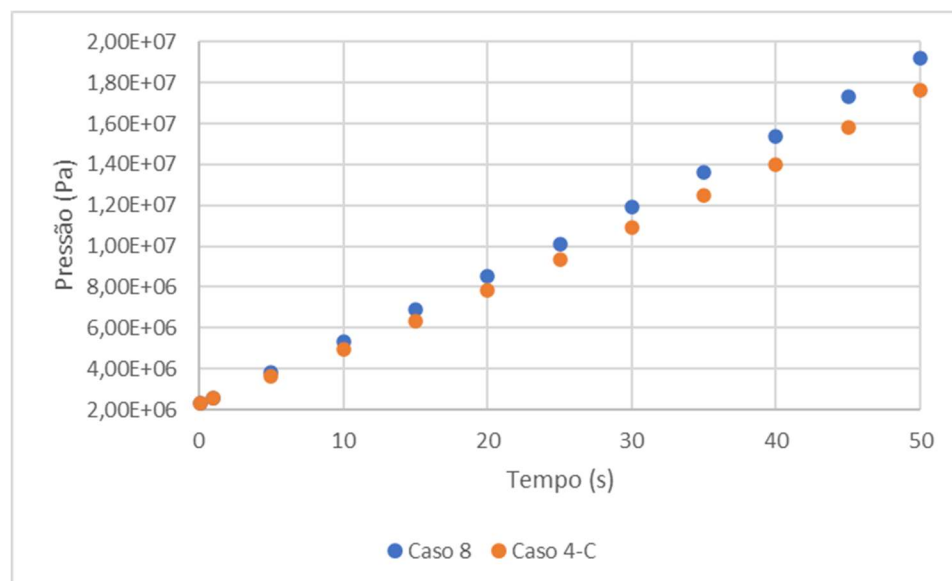


Figura 59- Variação da pressão em um tanque tipo 3 (Caso 4) e 4 (Caso 8)

Consecutivamente a velocidade do Caso 8 será menor. No entanto a variação é pequena, como mostra a Figura 60.

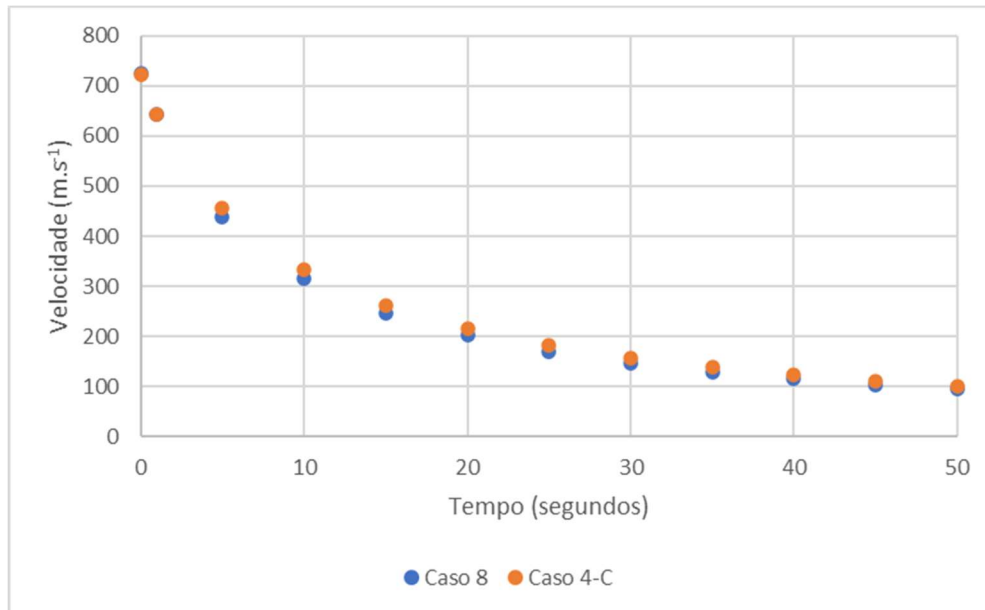


Figura 60- Variação da velocidade em um tanque tipo 3 (Caso4) e 4 (Caso 8)

4.8. Verificação do impacto do efeito Joule-Thomson

O efeito Joule-Thomson, às temperaturas das simulações deste estudo, pode provocar um aumento de temperatura no gás de entrada. Dependendo da diferença de pressão mínima e máxima este aumento pode ser significativo ou não.

Na Figura 61 está a diferença de pressão máxima (*Inlet*) e mínima (interior do tanque) ao longo do abastecimento.

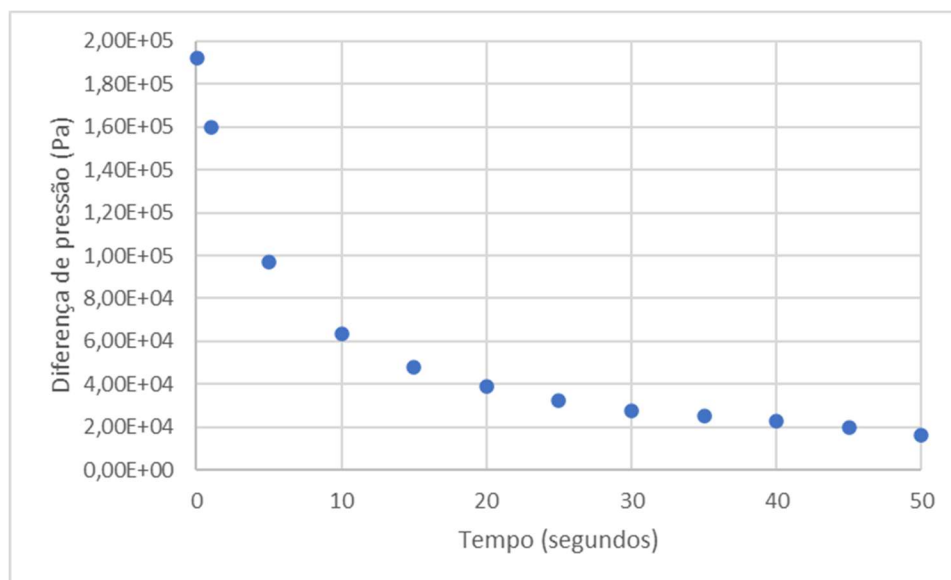


Figura 61- Diferença de pressão máxima e mínima no tanque

Esta variação foi sentida em todas as simulações, com valores aproximadamente iguais.

Ora, como o efeito é responsável por um aumento de 2,64°C a 5,05°C para uma diferença de pressão de 10 MPa [74] e nos casos atuais a diferença máxima é de 0,19 MPa, conclui-se que este efeito é negligenciável no estudo atual [36].

Isto deve-se ao facto que na simulação apenas estamos a considerar o escoamento após o *Inlet*. E nesta posição a variação de pressões entre tanque e *Inlet* é pequena, diminuído ainda mais com o decorrer do abastecimento [75].

5. CONCLUSÃO

No presente trabalho estudou-se o escoamento de hidrogénio em um tanque, a caudal constante, através de várias simulações CFD e diversas combinações.

Nesta secção serão apresentadas as conclusões finais bem como as limitações e trabalhos futuros.

5.1. Conclusões finais

O modelo 2D contruído apresentou bons resultados na validação com o artigo base.

Verificaram-se relações lineares de aumento de temperatura, tanto para tanques em total equilíbrio com o ambiente, como com uma temperatura fixa inicial. Um aumento de 10 Kelvin resultou no Caso 3 em um aumento de 11 Kelvin na temperatura média e no caso 4 de 5 Kelvin.

O modelo *Realizable* apresentou resultados muito próximos ao modelo Standard, pelo que pode ser considerado uma boa alternativa apesar de uma pequena sobrestimação das temperaturas.

A variação do caudal mássico e conseqüentemente da velocidade tem implicações significativas nas temperaturas ao longo do tubo de *Inlet*. Com o aumento da velocidade a temperatura estática começa a descer, enquanto a total se mantém. Isto acontece devido ao carácter compressivo do gás a essa velocidade.

Ora, isso pode conduzir a erros aquando da realização de uma simulação, uma vez que é comum se utilizar perfis de experiências como condição de *Inlet*. É necessário então uma maior transparência no tipo de sensores no tipo de sensores que são utilizados para temperatura e pressão.

A condição de tanque adiabático acarreta aumentos de temperatura na ordem dos 50 a 60 Kelvin para os primeiros 50 segundos de simulação, em relação ao mesmo tanque, mas com revestimento e forro. Verificou-se ainda uma acumulação de temperaturas mais elevadas no lado esquerdo do tanque. Conclui-se então que deve se evitar a utilização desta consideração.

A comparação entre um tanque de tipo 3 e 4 com as mesmas condições exceto do forro, provou que o aumento da temperatura do tanque tipo 4 começa logo por volta dos 3 segundos e estabiliza aos 30. A pressão é também bastante afetada enquanto a temperatura não apresentou grande diferença.

Por último verificou-se o impacto do efeito Joule-Thomson no aquecimento do hidrogénio. Chegou-se á conclusão, que para este caso, os valores de diferença de pressão máxima e mínima eram pequenos o suficiente para se considerar o efeito negligenciável.

5.2. Limitações e trabalhos futuros

A principal limitação deste trabalho foi o tempo computacional de cada simulação. Com cada simulação a durar de um a dois dias, reduziu o potencial de testar novas combinações e aprofundar conclusões.

Para trabalhos futuros seria interessante a avaliação do tempo completo de simulação, por exemplo 200 segundos para comparação com os protocolos SAE j2601.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] A. Keçebaş and M. Kayfeci, "Hydrogen properties," in *Solar Hydrogen Production*, Elsevier, 2019, pp. 3–29. doi: 10.1016/B978-0-12-814853-2.00001-1.
- [2] W. Jolly, "Hydrogen," *Britannica*. 2022.
- [3] C. Allevi and G. Collodi, "Hydrogen production in IGCC systems," in *Integrated Gasification Combined Cycle (IGCC) Technologies*, Elsevier, 2017, pp. 419–443. doi: 10.1016/B978-0-08-100167-7.00012-3.
- [4] A. Baptista, C. Pinho, G. Pinto, L. Ribeiro, J. Monteiro, and T. Santos, "Assessment of an Innovative Way to Store Hydrogen in Vehicles," *Energies (Basel)*, vol. 12, no. 9, p. 1762, May 2019, doi: 10.3390/en12091762.
- [5] A. Haryanto, S. Fernando, N. Murali, and S. Adhikari, "Current Status of Hydrogen Production Techniques by Steam Reforming of Ethanol: A Review," *Energy & Fuels*, vol. 19, no. 5, pp. 2098–2106, Sep. 2005, doi: 10.1021/ef0500538.
- [6] X. Hu, Q. Xie, J. Zhang, Q. Yu, H. Liu, and Y. Sun, "Experimental study of the lower flammability limits of H₂/O₂/CO₂ mixture," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 51, pp. 27837–27845, Oct. 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.07.033.
- [7] D. Hardie, E. A. Charles, and A. H. Lopez, "Hydrogen embrittlement of high strength pipeline steels," *Corros Sci*, vol. 48, no. 12, pp. 4378–4385, Dec. 2006, doi: 10.1016/j.corros.2006.02.011.
- [8] "Climate Science Special Report: Fourth National Climate Assessment, Volume I," Washington, DC, 2017. doi: 10.7930/J0J964J6.
- [9] J. L. Holechek, H. M. E. Geli, M. N. Sawalhah, and R. Valdez, "A Global Assessment: Can Renewable Energy Replace Fossil Fuels by 2050?," *Sustainability*, vol. 14, no. 8, p. 4792, Apr. 2022, doi: 10.3390/su14084792.
- [10] C. A. S. Hall and K. A. Klitgaard, *Energy and the Wealth of Nations*. New York, NY: Springer New York, 2012. doi: 10.1007/978-1-4419-9398-4.
- [11] "International Energy Outlook 2019," *Energy Information Administration*. 2019.
- [12] Ricardo Silvestre, "A Importância de Portugal na Independência Energética e Dilema de Segurança da União Europeia".
- [13] S. Bajracharya, "Microbial electrosynthesis of biochemicals : innovations on biocatalysts, electrodes and ion-exchange for CO₂ supply, chemicals production and separation," Wageningen University, 2016. doi: 10.18174/385426.
- [14] A. Ajanovic, M. Sayer, and R. Haas, "The economics and the environmental benignity of different colors of hydrogen," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 47, no. 57, pp. 24136–24154, Jul. 2022, doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.02.094.
- [15] F. Mantei *et al.*, "Techno-economic assessment and carbon footprint of processes for the large-scale production of oxymethylene dimethyl ethers from carbon dioxide and hydrogen," *Sustain Energy Fuels*, vol. 6, no. 3, pp. 528–549, 2022, doi: 10.1039/D1SE01270C.
- [16] G. Gonca, M. Cakir, and B. Sahin, "Performance Characteristics and Emission Formations of a Spark Ignition (SI) Engine Fueled with Different Gaseous Fuels," *Arab J Sci Eng*, vol. 43, no. 9, pp. 4487–4499, Sep. 2018, doi: 10.1007/s13369-017-2906-3.
- [17] M. Gurz, E. Baltacioglu, Y. Hames, and K. Kaya, "The meeting of hydrogen and automotive: A review," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 36, pp. 23334–23346, Sep. 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.02.124.
- [18] Y. Wang, K. S. Chen, J. Mishler, S. C. Cho, and X. C. Adroher, "A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: Technology, applications, and needs on fundamental research," *Appl Energy*, vol. 88, no. 4, pp. 981–1007, Apr. 2011, doi: 10.1016/j.apenergy.2010.09.030.

- [19] T. Omatick *et al.*, “Usage,” in *Machinery and Energy Systems for the Hydrogen Economy*, Elsevier, 2022, pp. 251–304. doi: 10.1016/B978-0-323-90394-3.00009-6.
- [20] S. C. Kim, S. H. Lee, and K. B. Yoon, “Thermal characteristics during hydrogen fueling process of type IV cylinder,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 13, pp. 6830–6835, Jul. 2010, doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.03.130.
- [21] Y. Su, H. Lv, W. Zhou, and C. Zhang, “Review of the Hydrogen Permeability of the Liner Material of Type IV On-Board Hydrogen Storage Tank,” *World Electric Vehicle Journal*, vol. 12, no. 3, p. 130, Aug. 2021, doi: 10.3390/wevj12030130.
- [22] P. Prachi R., W. Mahesh M., and G. Aneesh C., “A Review on Solid State Hydrogen Storage Material,” *Advances in Energy and Power*, vol. 4, no. 2, pp. 11–22, Jun. 2016, doi: 10.13189/aep.2016.040202.
- [23] R. Ortiz Cebolla *et al.*, “Hydrogen tank first filling experiments at the JRC-IET GasTeF facility,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 11, pp. 6261–6267, Apr. 2014, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.10.038.
- [24] J. Tomioka, K. Kiguchi, Y. Tamura, and H. Mitsuishi, “Influence of temperature on the fatigue strength of compressed-hydrogen tanks for vehicles,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 3, pp. 2513–2519, Feb. 2011, doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.04.120.
- [25] J. Zheng *et al.*, “Experimental and numerical study on temperature rise within a 70 MPa type III cylinder during fast refueling,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 25, pp. 10956–10962, Aug. 2013, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.02.053.
- [26] Z. Tian, H. Lv, W. Zhou, C. Zhang, and P. He, “Review on equipment configuration and operation process optimization of hydrogen refueling station,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 47, no. 5, pp. 3033–3053, Jan. 2022, doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.10.238.
- [27] G. Sdanghi, G. Maranzana, A. Celzard, and V. Fierro, “Review of the current technologies and performances of hydrogen compression for stationary and automotive applications,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 102, pp. 150–170, Mar. 2019, doi: 10.1016/j.rser.2018.11.028.
- [28] W. Yu, X. Dianbo, F. Jianmei, and P. Xueyuan, “Research on sealing performance and self-acting valve reliability in high-pressure oil-free hydrogen compressors for hydrogen refueling stations,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 15, pp. 8063–8070, Aug. 2010, doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.01.089.
- [29] K. Liang, “A review of linear compressors for refrigeration,” *International Journal of Refrigeration*, vol. 84, pp. 253–273, Dec. 2017, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2017.08.015.
- [30] SAE, “An Introduction to SAE Hydrogen Fueling Standardization,” 2014.
- [31] J. Schneider *et al.*, “Validation and Sensitivity Studies for SAE J2601, the Light Duty Vehicle Hydrogen Fueling Standard,” *SAE International Journal of Alternative Powertrains*, vol. 3, no. 2, pp. 2014-01–1990, Apr. 2014, doi: 10.4271/2014-01-1990.
- [32] R. Hirotsani, T. Terada, Y. Tamura, H. Mitsuishi, and S. Watanabe, “Thermal Behavior in Hydrogen Storage Tank for Fuel Cell Vehicle on Fast Filling,” Apr. 2007. doi: 10.4271/2007-01-0688.
- [33] T. Terada, H. Yoshimura, Y. Tamura, H. Mitsuishi, and S. Watanabe, “Thermal Behavior in Hydrogen Storage Tank for FCV on Fast Filling (2nd Report),” Apr. 2008. doi: 10.4271/2008-01-0463.
- [34] S. C. Kim, S. H. Lee, and K. B. Yoon, “Thermal characteristics during hydrogen fueling process of type IV cylinder,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 13, pp. 6830–6835, Jul. 2010, doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.03.130.
- [35] Y.-L. Liu *et al.*, “Experimental studies on temperature rise within a hydrogen cylinder during refueling,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 7, pp. 2627–2632, Apr. 2010, doi: 10.1016/j.ijhydene.2009.04.042.
- [36] M. C. Galassi, E. Papanikolaou, M. Heitsch, D. Baraldi, B. A. Iborra, and P. Moretto, “Assessment of CFD models for hydrogen fast filling simulations,” *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 11, pp. 6252–6260, Apr. 2014, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.03.164.

- [37] M. C. Galassi, D. Baraldi, B. Acosta Iborra, and P. Moretto, "CFD analysis of fast filling scenarios for 70 MPa hydrogen type IV tanks," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 37, no. 8, pp. 6886–6892, Apr. 2012, doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.01.041.
- [38] N. de Miguel, B. Acosta, P. Moretto, and R. Ortiz Cebolla, "Influence of the gas injector configuration on the temperature evolution during refueling of on-board hydrogen tanks," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 42, pp. 19447–19454, Nov. 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.07.008.
- [39] X. Wu, J. Liu, J. Shao, and G. Deng, "Fast filling strategy of type III on-board hydrogen tank based on time-delayed method," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 57, pp. 29288–29296, Aug. 2021, doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.01.094.
- [40] M. Heitsch, D. Baraldi, and P. Moretto, "Numerical investigations on the fast filling of hydrogen tanks," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 3, pp. 2606–2612, Feb. 2011, doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.04.134.
- [41] R. Immel and A. Mack-Gardner, "Development and Validation of a Numerical Thermal Simulation Model for Compressed Hydrogen Gas Storage Tanks," *SAE Int J Engines*, vol. 4, no. 1, pp. 2011-01–1342, Apr. 2011, doi: 10.4271/2011-01-1342.
- [42] N. R. Kesana, P. Welahettige, P. M. Hansen, Ø. Ulleberg, and K. Vågsæther, "Modelling of fast fueling of pressurized hydrogen tanks for maritime applications," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 79, pp. 30804–30817, Sep. 2023, doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.04.142.
- [43] D. Melideo, D. Baraldi, M. C. Galassi, R. Ortiz Cebolla, B. Acosta Iborra, and P. Moretto, "CFD model performance benchmark of fast filling simulations of hydrogen tanks with pre-cooling," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 9, pp. 4389–4395, Mar. 2014, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.12.196.
- [44] D. Melideo, D. Baraldi, B. Acosta-Iborra, R. Ortiz Cebolla, and P. Moretto, "CFD simulations of filling and emptying of hydrogen tanks," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 11, pp. 7304–7313, Mar. 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.05.262.
- [45] K. Reddi, A. Elgowainy, N. Rustagi, and E. Gupta, "Impact of hydrogen SAE J2601 fueling methods on fueling time of light-duty fuel cell electric vehicles," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 26, pp. 16675–16685, Jun. 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.04.233.
- [46] A. Suryan, H. D. Kim, and T. Setoguchi, "Comparative study of turbulence models performance for refueling of compressed hydrogen tanks," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 22, pp. 9562–9569, Jul. 2013, doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.07.055.
- [47] A. Suryan, H. D. Kim, and T. Setoguchi, "Three dimensional numerical computations on the fast filling of a hydrogen tank under different conditions," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 37, no. 9, pp. 7600–7611, May 2012, doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.02.019.
- [48] J.-Q. Li, Y. Chen, Y. B. Ma, J.-T. Kwon, H. Xu, and J.-C. Li, "A study on the Joule-Thomson effect of during filling hydrogen in high pressure tank," *Case Studies in Thermal Engineering*, vol. 41, p. 102678, Jan. 2023, doi: 10.1016/j.csite.2022.102678.
- [49] E. Wicklein *et al.*, "Good modelling practice in applying computational fluid dynamics for WWTP modelling," *Water Science and Technology*, vol. 73, no. 5, pp. 969–982, Mar. 2016, doi: 10.2166/wst.2015.565.
- [50] D. Adair, Z. Bakenov, and M. Jaeger, "Building on a traditional chemical engineering curriculum using computational fluid dynamics," *Education for Chemical Engineers*, vol. 9, no. 4, pp. e85–e93, Dec. 2014, doi: 10.1016/j.ece.2014.06.001.
- [51] "ANSYS Fluent Users Guide." ANSYS, Jan. 2020.
- [52] Ansys, "ANSYS Fluent theory guide," *Ansys Fluent*. Ansys, 2022.
- [53] NASA, "Stagnation temperature Real gas effects".
- [54] Glenn Research Center, "Speed of sound," *Nasa*. Nasa, 2021.
- [55] J. Tu, G.-H. Yeoh, and C. Liu, "Practical Guidelines for CFD Simulation and Analysis," in *Computational Fluid Dynamics*, Elsevier, 2018, pp. 255–290. doi: 10.1016/B978-0-08-101127-0.00007-6.
- [56] ANSYS, "Turbulence Modeling," *Introduction to ANSYS Fluent*.

- [57] H. Sturm, G. Dumstorff, P. Busche, D. Westermann, and W. Lang, "Boundary Layer Separation and Reattachment Detection on Airfoils by Thermal Flow Sensors," *Sensors*, vol. 12, no. 11, pp. 14292–14306, Oct. 2012, doi: 10.3390/s121114292.
- [58] ANSYS, "ANSYS FLUENT Turbulence Modeling ." 2006.
- [59] Y. Zhao *et al.*, "Numerical study on fast filling of 70 MPa type III cylinder for hydrogen vehicle," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 37, no. 22, pp. 17517–17522, Nov. 2012, doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.03.046.
- [60] N. de Miguel, R. Ortiz Cebolla, B. Acosta, P. Moretto, F. Harskamp, and C. Bonato, "Compressed hydrogen tanks for on-board application: Thermal behaviour during cycling," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 40, no. 19, pp. 6449–6458, May 2015, doi: 10.1016/j.ijhydene.2015.03.035.
- [61] K. Nasrifar, "Comparative study of eleven equations of state in predicting the thermodynamic properties of hydrogen," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 8, pp. 3802–3811, Apr. 2010, doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.01.032.
- [62] ANSYS FLUENT, "Introductory Fluent Notes ." 2006.
- [63] H. Ishida and S. Asano, "A Finite-Volume Solution with a Bidirectional Upwind Difference Scheme for the Three-Dimensional Radiative Transfer Equation," *J Atmos Sci*, vol. 64, no. 11, pp. 4098–4112, Nov. 2007, doi: 10.1175/2007JAS2312.1.
- [64] "Ansys Introduction CFD ." 2009.
- [65] Marco Andrés Guevara-Luna, "Diseño de un equipo de recuperación de líquidos de gas natural empleando CFD," University of Strasbourg, 2015.
- [66] ANSYS, "ANSYS Workbench Users Guide." Jan. 2020.
- [67] "Guide: Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations (AIAA G-077-1998(2002))," in *Guide: Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations (AIAA G-077-1998(2002))*, Washington, DC: American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 1998. doi: 10.2514/4.472855.001.
- [68] N. de Miguel, B. Acosta, P. Moretto, and R. Ortiz Cebolla, "Influence of the gas injector configuration on the temperature evolution during refueling of on-board hydrogen tanks," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 42, pp. 19447–19454, Nov. 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.07.008.
- [69] M.-S. Kim, J.-H. Ryu, S.-J. Oh, J.-H. Yang, and S.-W. Choi, "Numerical Investigation on Influence of Gas and Turbulence Model for Type III Hydrogen Tank under Discharge Condition," *Energies (Basel)*, vol. 13, no. 23, p. 6432, Dec. 2020, doi: 10.3390/en13236432.
- [70] V. I. J. A. V. Magi, "THE k-ε MODEL AND COMPUTED SPREADING RATES IN ROUND AND PLANE JETS," *Numeri Heat Transf A Appl*, vol. 40, no. 4, pp. 317–334, Sep. 2001, doi: 10.1080/104077801753238130.
- [71] T. Setoguchi, M. M. A. Alam, M. Monde, and H. D. Kim, "Characteristics of Turbulent Confined Jets during Fast Filling of H₂ Tank at High Pressure," *Int J Aeroacoust*, vol. 12, no. 5–6, pp. 455–474, Oct. 2013, doi: 10.1260/1475-472X.12.5-6.455.
- [72] Salim M., "Wall Y+ strategy for dealing with Wall-Bounded Turbulent flows," *IMECS*. 2009.
- [73] F. M. White, *Mecânica dos Fluidos*, 6th ed. Porto Alegre: ARTMED Editora S.A. e MCGRAW-HILL, 2011.
- [74] N. de Miguel, B. Acosta, D. Baraldi, R. Melideo, R. Ortiz Cebolla, and P. Moretto, "The role of initial tank temperature on refuelling of on-board hydrogen tanks," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 20, pp. 8606–8615, Jun. 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.03.158.
- [75] B. Acosta, P. Moretto, N. de Miguel, R. Ortiz, F. Harskamp, and C. Bonato, "JRC reference data from experiments of on-board hydrogen tanks fast filling," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 35, pp. 20531–20537, Dec. 2014, doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.03.227.

APÊNDICE A

ANEXO A