

SVS FEM

Jsme experti v oblasti simulací

Využití vodíku pro spoluspalování se stávajícími uhlíkatými palivy

Jiří Vondál



— SVS FEM

- Pomáháme našim partnerům vyvíjet lepší produkty
- 32 let know-how v oblasti numerických simulací
- Certifikace **ISO 9001:2008** a **ISO 27001**.



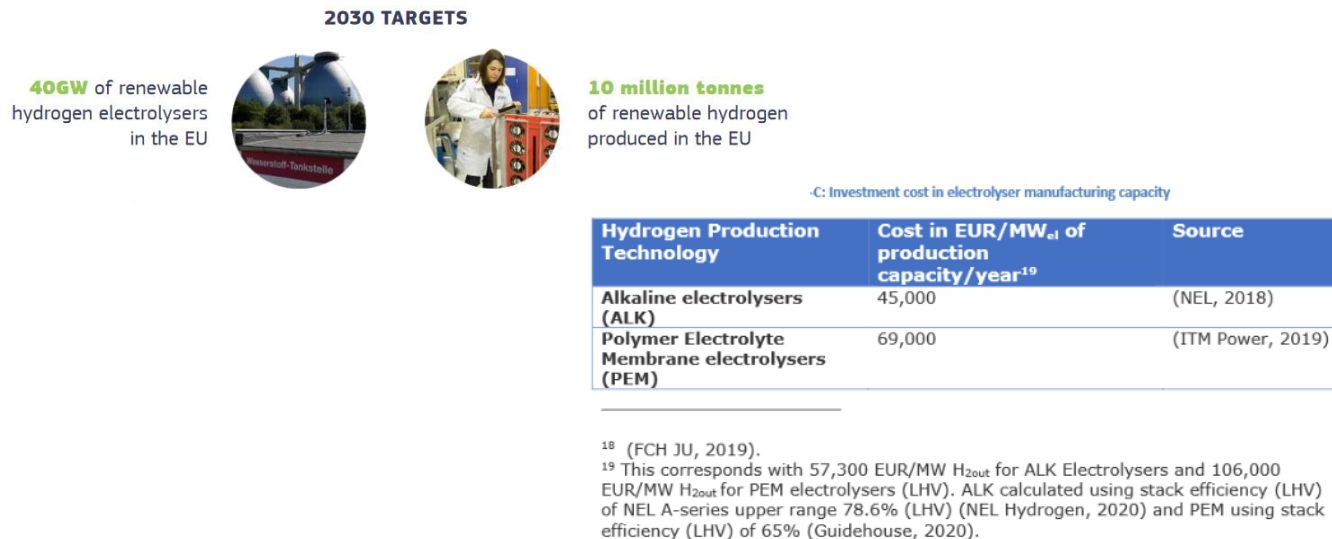
Licencování

- Pronájem licence dlouhodobý/krátkodobý
- Trvalá licence
- Cloudové licence

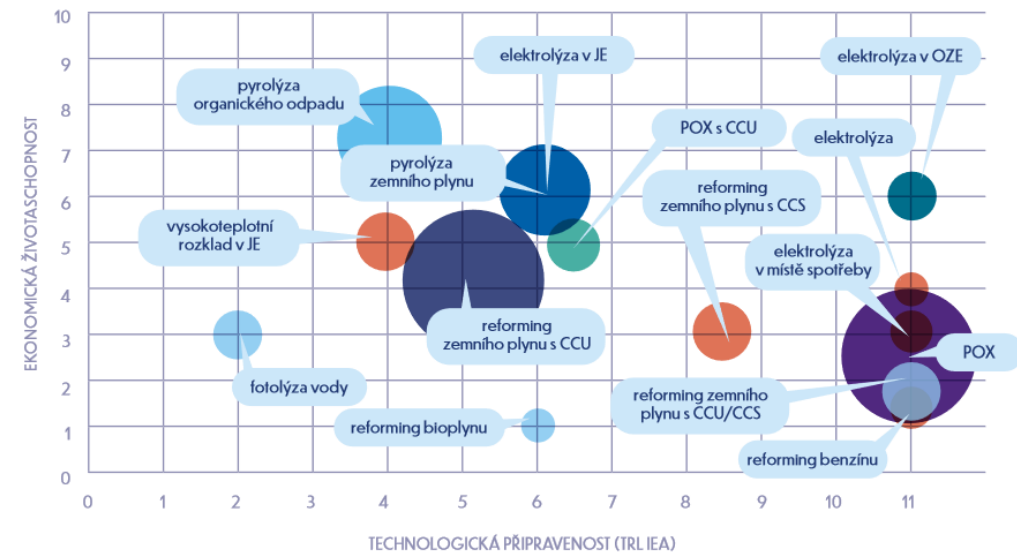


Využití vodíku v energetice

- Závisí na možnostech výroby vodíku.
- V roce 2022 schválil ČEZ cca 38 tis. žádostí o zřízení fotovoltaiky s celkovým výkonem 6844 MWp. E.On obdržel dalších 16 tis. žádostí.
- Může zde být potenciál pro špičkovou výrobu vodíku při požadavku na omezení špiček v síti.
- Účinnost výroby vodíku pomocí elektrolýzy vody 50 – 80 %.
- Jasný důraz EU na využití vodíku.
- ČR má Vodíkovou strategii z roku 2021.



Výroba vodíku



Využití vodíku v energetice

- V cementárnách v ČR již proběhlo testování nasazení vodíku do spalovacího procesu.
- Počítá se s využitím ve spalovacích procesech.

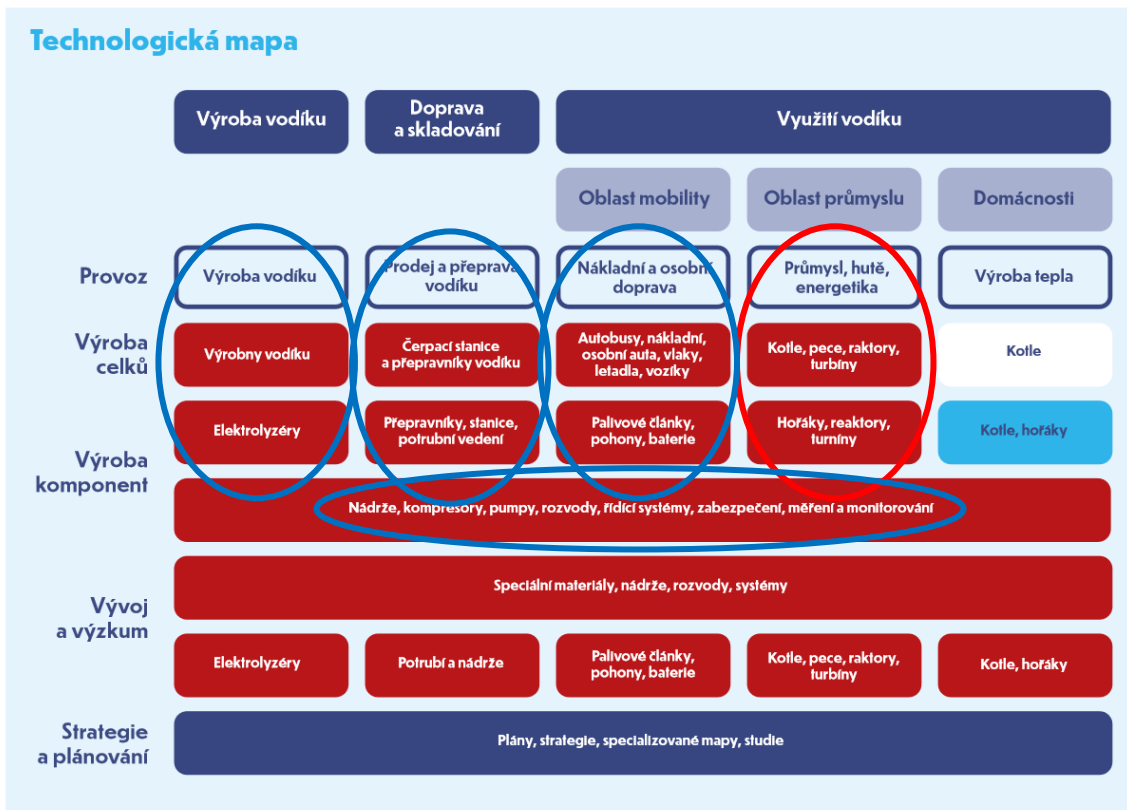
Governments with adopted national hydrogen strategies; announced targets; priorities for hydrogen and use; and committed funding



Country	Document, year	Deployment targets (2030)	Production	Uses	Public investment committed
Australia	National Hydrogen Strategy , 2019	None specified	Coal with CCUS Electrolysis (renewable) Natural gas with CCUS		AUD 1.3 bln (~USD 0.9 bln)
Canada	Hydrogen Strategy for Canada , 2020	Total use: 4 Mt H ₂ /y 6.2% TFEC	Biomass By-product H ₂ Electrolysis Natural gas with CCUS Oil with CCUS		CAD 25 mln by 2026 ⁽¹⁾ (~USD 19 mln)
Chile	National Green Hydrogen Strategy , 2020	25 GW electrolysis ⁽²⁾	Electrolysis (renewable)		USD 50 mln for 2021
Czech Republic	Hydrogen Strategy , 2021	Low-carbon demand: 97 kt H ₂ /yr	Electrolysis		n.a.
European Union	EU Hydrogen Strategy , 2020	40 GW electrolysis	Electrolysis (renewable) Transitional role of natural gas with CCUS		EUR 3.77 bln by 2030 (~USD 4.3 bln)
France	Hydrogen Deployment Plan , 2018 National Strategy for Decarbonised Hydrogen Development , 2020	6.5 GW electrolysis 20-40% industrial H ₂ decarbonised ⁽³⁾ 20 000-50 000 FC LDVs ⁽³⁾ 800-2 000 FC HDVs ⁽³⁾ 400-1 000 HRSs ⁽³⁾	Electrolysis		EUR 7.2 bln by 2030 (~USD 8.2 bln)

Zdroj: <https://iea.blob.core.windows.net/assets/5bd46d7b-906a-4429-abda-e9c507a62341/GlobalHydrogenReview2021.pdf>

Příklad jedné z technologických map vypracovaných pro projekty IPCEI:



Zdroj: https://www.mpo.cz/assets/cz/prumysl/strategie-projekty/2021/8/Vodikova-strategie_CZ_G_2021-26-07.pdf

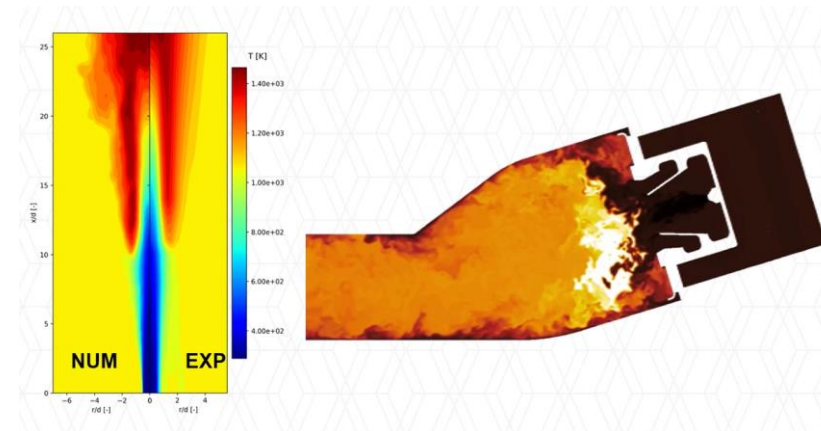
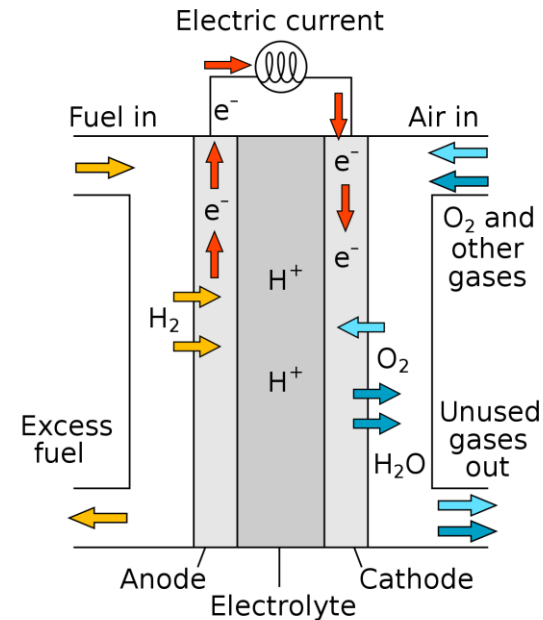
Palivové články vs spalování

Palivové články

- + vysoká účinnost procesu,
- + téměř žádné emise,
- + tichý chod,
- + minimální údržba,
- velké investiční náklady,
- nízké stejnosměrné napětí jednoho článku,

Spalování vodíku

- + úprava stávající technologie,
- + lze využít i pro vysokoteplotní aplikace,
- + vyšší hustota energie,
- + lze kombinovat se stávajícím palivem,
- neřeší problém emisí,
- bezpečnostní rizika,
- doprava a skladování vodíku.

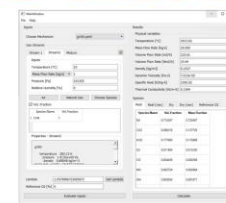
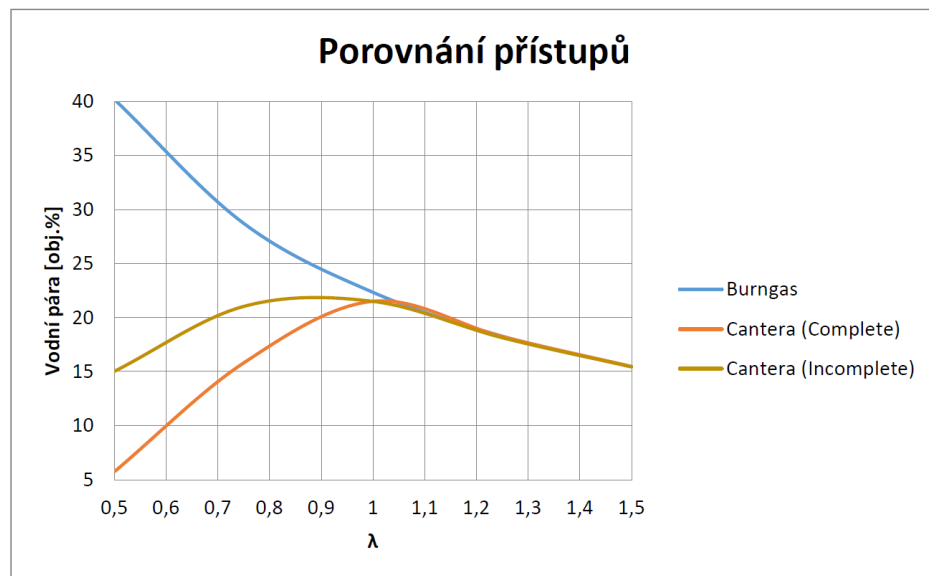




0-D a 1-D Modelování spalování vodíku

— Nástroj pro 0-D a 1-D výpočty - GasComb

- Nástroj pro výpočty chemických reakcí – využívá principu „Chemické rovnováhy“ + numerického řešení pro rychlost spalování.
- Nástroj pro určení vlastností plynů a kapalin na základě termodynamických dat (NASA, GriMech, apod.)
- V podstatě zobrazuje výsledky výpočtů provedených pomocí knihovny Cantera.
- Program s otevřeným zdrojovým kódem: <https://github.com/UPEI-CFD/GasComb>
- Web: <https://sites.google.com/vutbr.cz/gascomb>



Combustion calculations

- Calculate composition of the gas
- Adiabatic temperature
- Chemical equilibrium solver
- Based on [Cantera](#) libraries



Gas/liquid properties calculations

- Get properties of various gases and water in liquid/vapour state
- Based on [Cantera](#) calculations using mainly Ideal Gas Model
- Water liquid/steam properties based on [NIST](#), [NIST-JPL](#) Thermodynamic Properties in SI graphs tables, and corresponding equations for fully condensed, saturated, and superheated steam.

— Vodík – základní vlastnosti

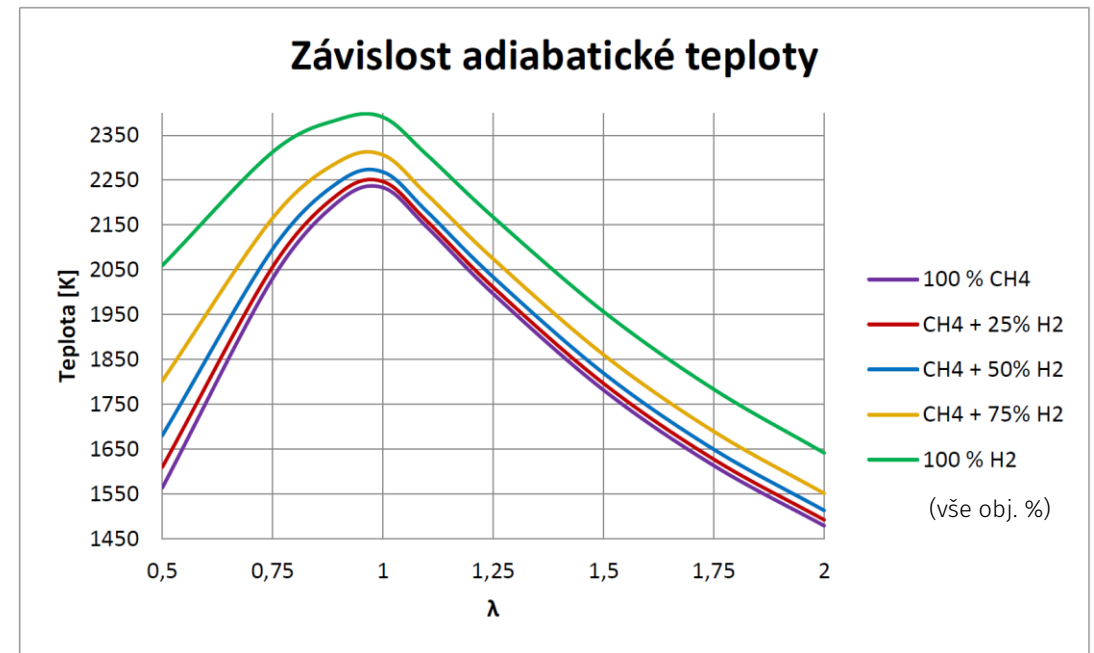
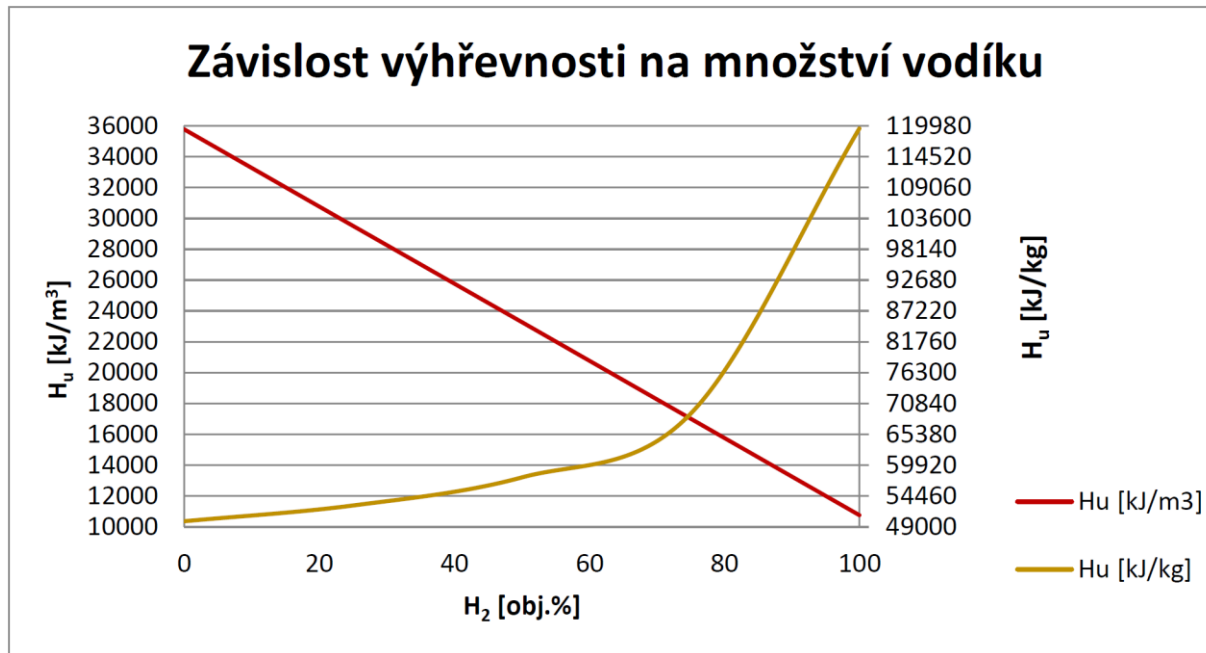
- O řád nižší hustota oproti metanu.
- Výhřevnost vztažená na kg je 2x vyšší než metanu.
- Výhřevnost vztažená na m³ je 3x nižší než metanu.

	Vodík	Metan
Hustota [kg/m ³]	0,0899 kg/m ³	0.716 kg/m ³
Adiabatická teplota plamene ve vzduchu [K]	2127 °C	1952 °C
Teplota vznícení	520 °C	600 °C
Dolní mez výbušnosti se vzduchem*	18,3 obj.%	4,4 %
Horní mez výbušnosti se vzduchem*	59 obj.%	17 %
Výhřevnost vztažená na m ³	10 752 kJ/m ³	33 806 kJ/m ³
Výhřevnost vztažená na kg za norm. podm.	120 MJ/kg	50 MJ/kg
Měrná tepelná kapacita	14304 J/kg-K	2172 J/kg-K
Rychlost šíření plamene	2,75 m/s	0,38 m/s

*Pro vodík hodnoty odpovídají tzv. Explosion limit. Flammability limit pro vodík je 4 – 74 %.
https://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/pdfs/h2_safety_fsheets.pdf

Chování vodíku ve směsi s metanem

- Ukázáno rozdílné chování při míchání vodíku a metanu.
- Nárůst adiabatické teploty 7,9 % -> nejvyšší pro 100% vodík => 2127 °C vs metan => 1952 °C.

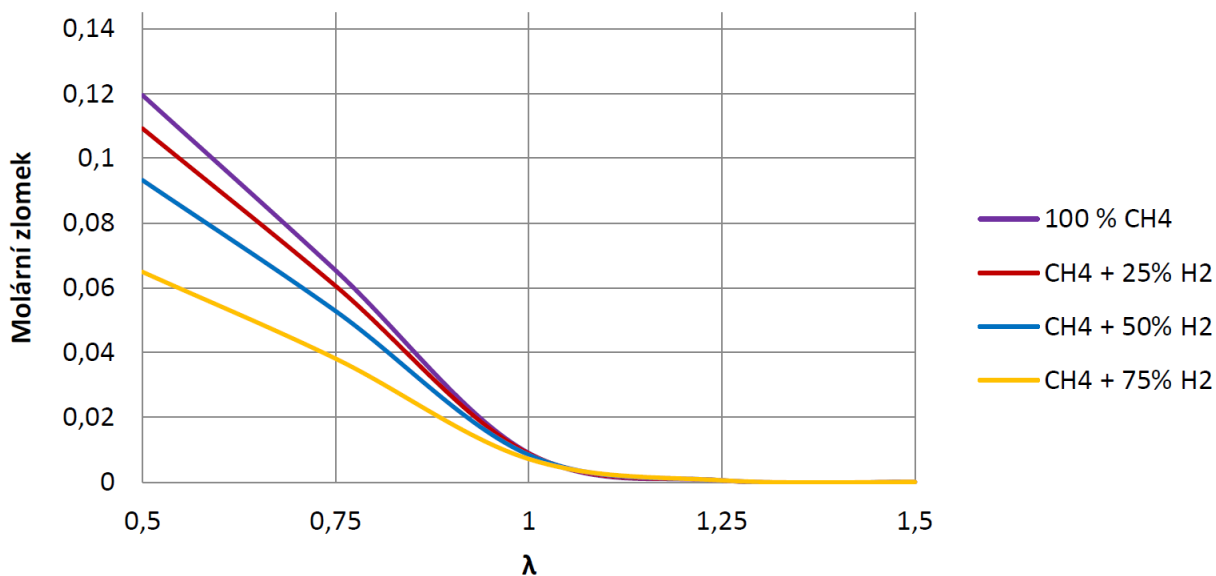


Zdroj: FRIEDEL, Petr. *Využití vodíku jako paliva ve spalovacích procesech*. Brno, 2022. <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/142341>.

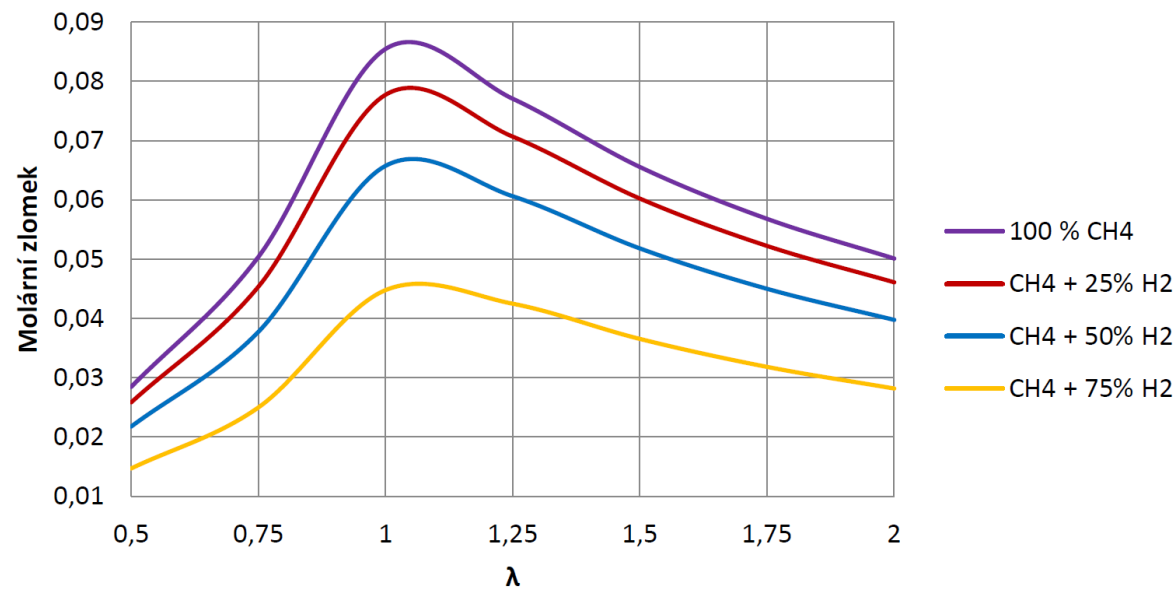
Chování vodíku ve směsi s metanem

- Vliv na CO_2 je jasně pozitivní.
- Stejně i vliv na CO z důvodů sníženého obsahu uhlíku v palivu.

Závislost koncentrace CO na λ



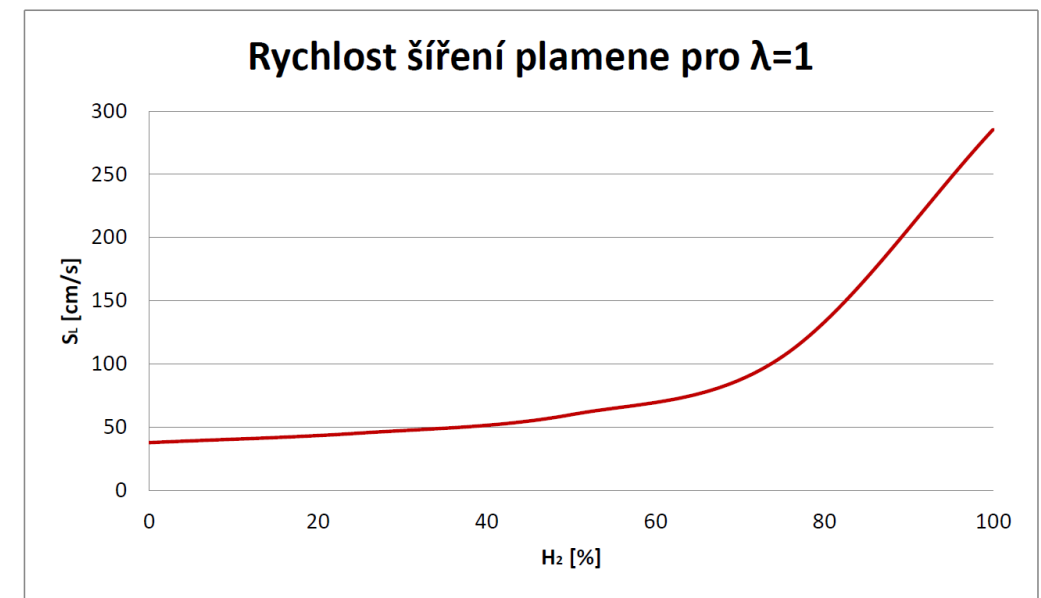
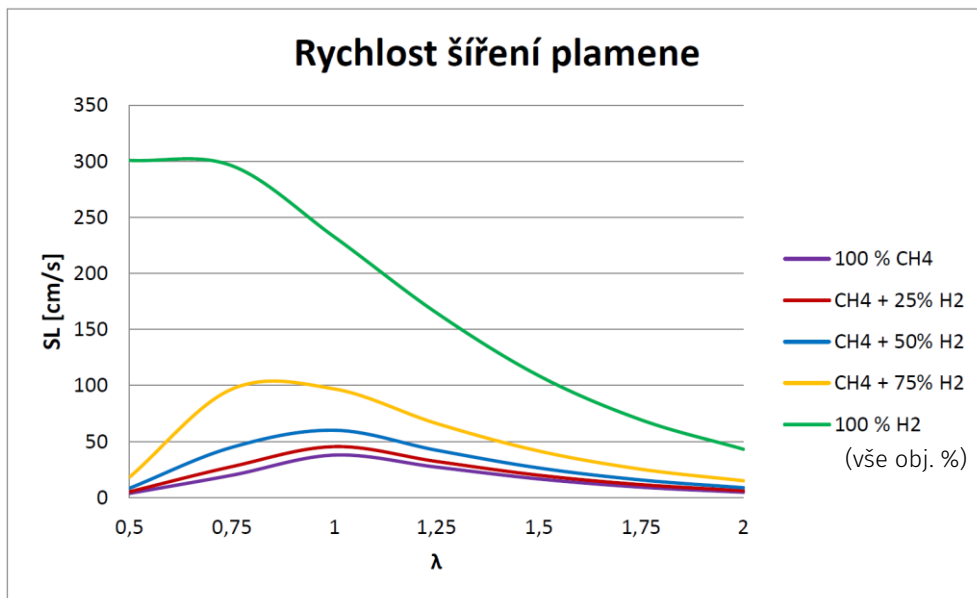
Závislost CO_2 na λ



Zdroj: FRIEDEL, Petr. Využití vodíku jako paliva ve spalovacích procesech. Brno, 2022. <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/142341>.

Chování vodíku ve směsi s metanem

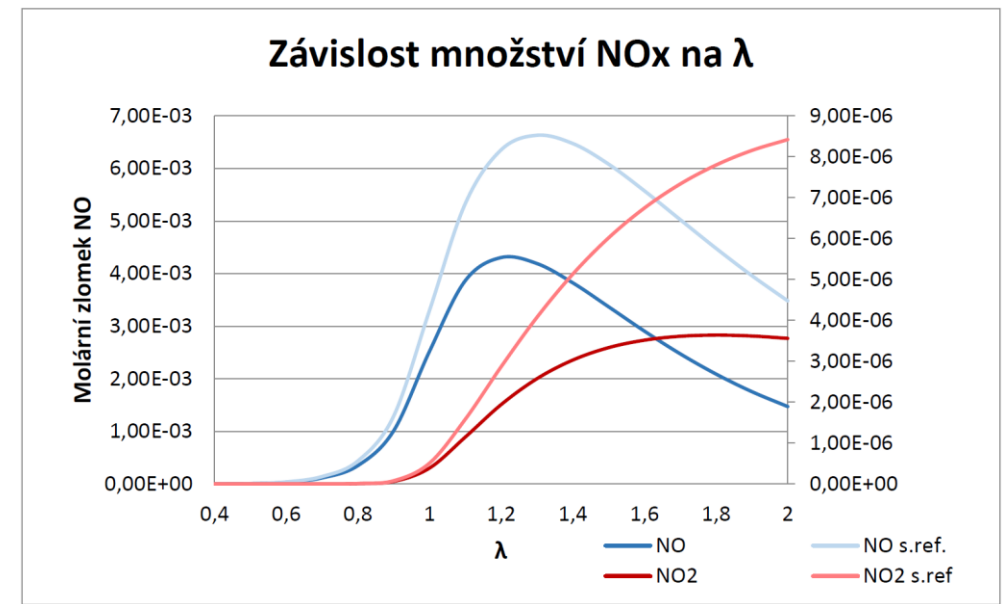
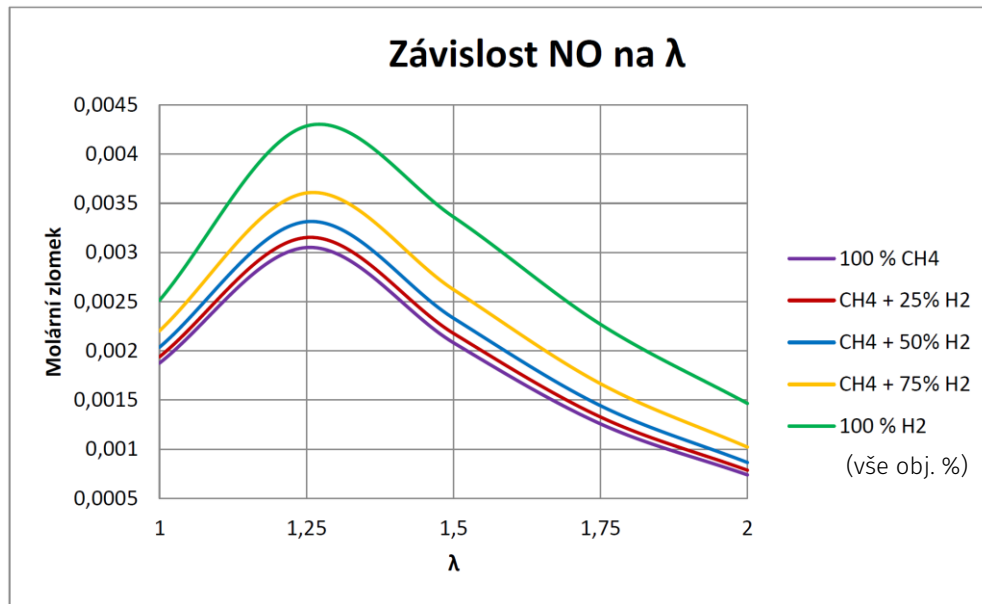
- Rychlost hoření vodíku je 7x vyšší ve srovnání s metanem.
- Při míchání vodíku a metanu rychlost hoření významně klesá již při nízkých koncentracích metanu ve směsi.



Zdroj: FRIEDEL, Petr. *Využití vodíku jako paliva ve spalovacích procesech*. Brno, 2022. <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/142341>.

Vliv na tvorbu emisí NOx

- Pozor – uvažují se pouze rovnice pro dosažení chemické rovnováhy.
- Nejde o reálný případ – hypotetický, ideálně promíchaný reaktor.
- Vliv vodíku je především vlivem vyšší adiabatické teploty.



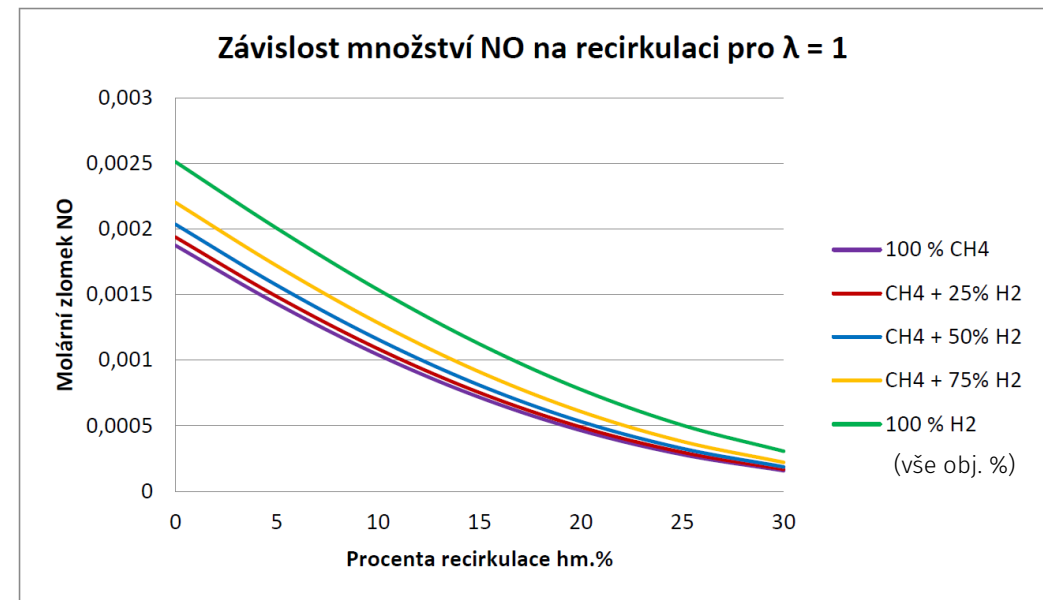
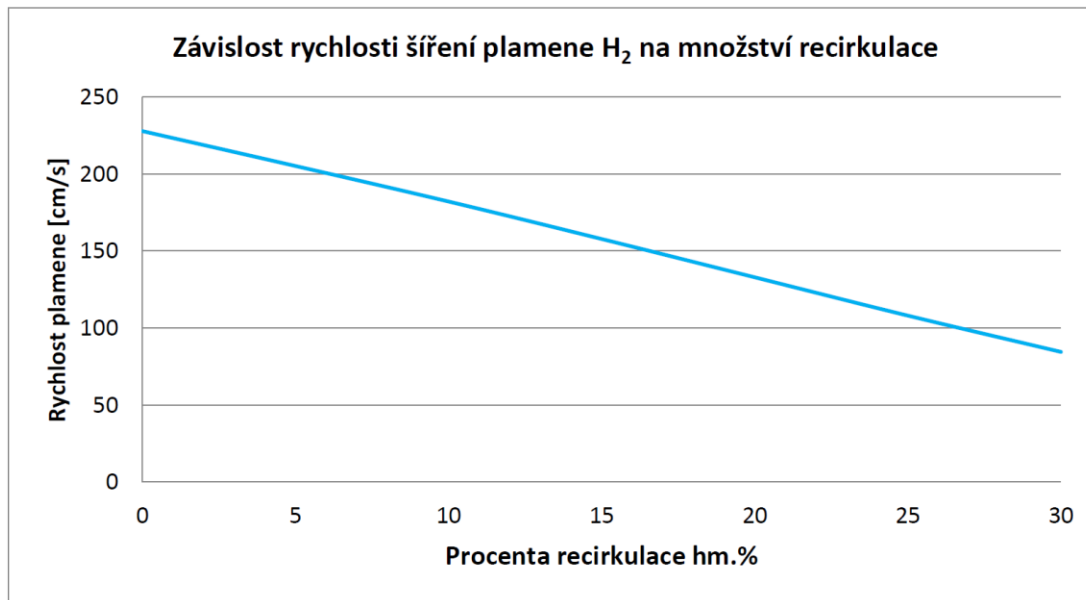
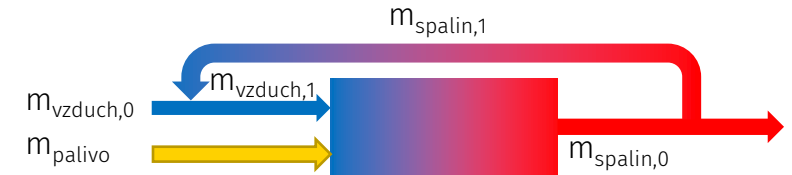
Zdroj: FRIEDEL, Petr. Využití vodíku jako paliva ve spalovacích procesech. Brno, 2022. <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/142341>.

Chování při recirkulaci spalin

- Uvažuje se ochlazení spalin na teplotu spalovacího vzduchu (25 °C).

$$m_{spalin,1} = \lambda \cdot m_{spalin,0}$$

$$m_{vzduch,1} = m_{spalin,1} + m_{vzduch,0}$$



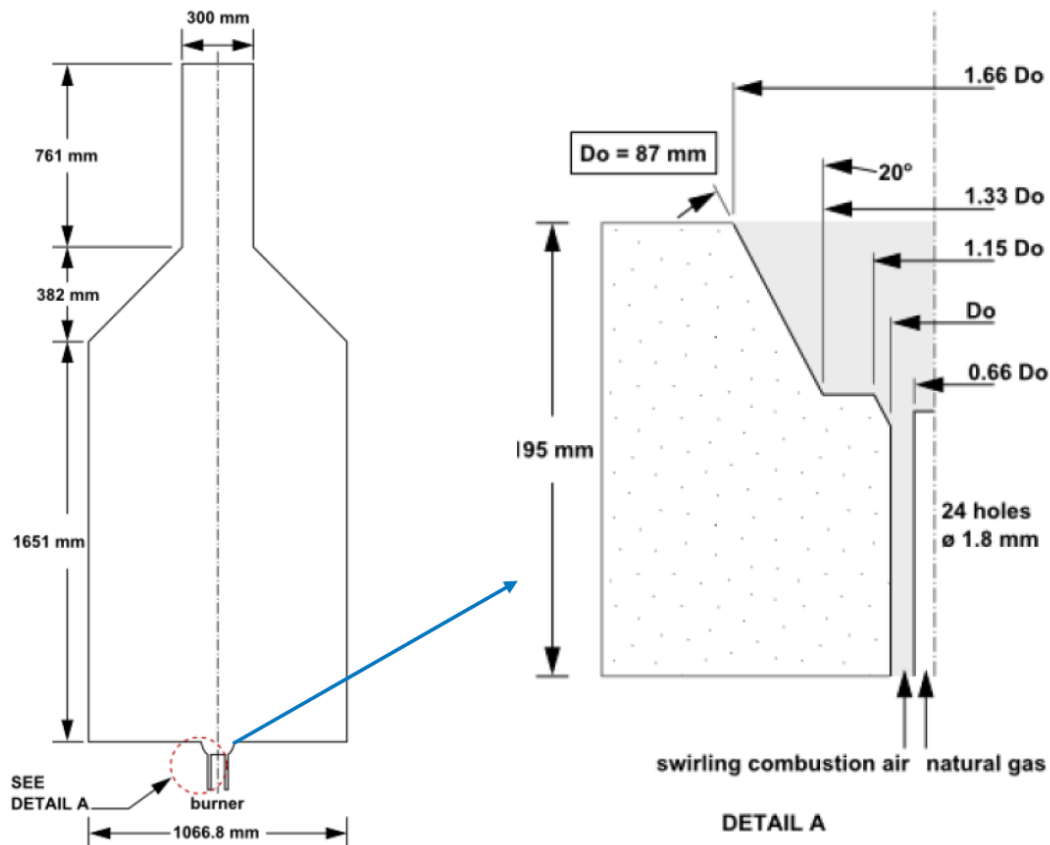
Zdroj: FRIEDEL, Petr. *Využití vodíku jako paliva ve spalovacích procesech*. Brno, 2022. <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/142341>.



CFD modelování náhrady paliva

— Cílem je provést simulaci spalování vodíku a porovnat se spalováním metanu

■ Berl hořák



Uvažovaná úloha zahrnuje turbulentní, difúzní hořák o výkonu 305 kW.

Pec je vertikální a má osmiúhelníkový průřez s kuželovým krytem pece a válcovým výfukovým potrubím, žáruvzdornou vyzdívkou nebo chlazení vodou. Hořák je vybaven 24 radiálními palivovými otvory.

Vzduch se přivádí kruhovým přívodem. Rozměry hořáku jsou uvedeny na obrázcích na této stránce. Profily okrajových podmínek, rychlostní okrajové podmínky vstupu plynu a teplotní okrajové podmínky vycházejí z experimentálních údajů.

Model je 2D axisymetrický bez zavírání na vstupu se zadanými hmotnostními průtoky. Palivové trysky jsou nahrazeny mezikružím o odpovídající ploše.

Nastavení výpočtu – 305 kW

<https://sites.google.com/vutbr.cz/gascomb>

■ 100% metan

- Palivo: $T_{\text{fuel}} = 34,85 \text{ }^\circ\text{C}$; $V = 30,7 \text{ m}_N^3/\text{h}$
- Vzduch: $T_{\text{air}} = 38,85 \text{ }^\circ\text{C}$; $V = 334,8 \text{ m}_N^3/\text{h}$
- Přebytek vzduchu 1,14

■ 50 % vodík + 50 % metan (obj.)

- Palivo: $T_{\text{fuel}} = 34,85 \text{ }^\circ\text{C}$; $V = 47,2 \text{ m}_N^3/\text{h}$
- Vzduch: $T_{\text{air}} = 38,85 \text{ }^\circ\text{C}$; $V = 322,2 \text{ m}_N^3/\text{h}$
- Přebytek vzduchu 1,14

■ 100% vodík

- Palivo: $T_{\text{fuel}} = 34,85 \text{ }^\circ\text{C}$; $V = 101,9 \text{ m}_N^3/\text{h}$
- Vzduch: $T_{\text{air}} = 38,85 \text{ }^\circ\text{C}$; $V = 277,9 \text{ m}_N^3/\text{h}$
- Přebytek vzduchu 1,14

■ Model turbulence SST k-w.

■ Model chemických reakcí FGM + GriMech 3.0

The screenshot displays the GasComb software interface. The 'Inputs' section shows the mechanism set to 'gri30.yaml' and the gas stream 'Stream 1' with a mass flow rate of 0.115 kg/s, pressure of 101325.0 Pa, and temperature of 38.850000000000002 °C. The 'Results' section shows physical variables: Temperature [°C] = 1869.60, Mass Flow Rate [kg/s] = 0.120, Volume Flow Rate [m3/h] = 0.78, Volume Flow Rate [Nm3/h] = 0.10, Density [kg/m3] = 0.1542, Dynamic Viscosity [Pa-s] = 6.934e-05, Specific Heat [J/kg-K] = 1513.74, Thermal Conductivity [W/m-K] = 0.1543, Thermal Power [kW] = 305.3515, and Flame Speed [m/s] = Disabled in Settings. The 'Species' section shows a table of species and their volume fractions: O2 (0.2100), N2 (0.7900), CO2 (0.0000), and H2O (0.0000). The 'Properties - Stream 1' section shows properties for the gas stream: temperature 312 K, pressure 1.0133e+05 Pa, density 1.1269 kg/m^3, mean mol. weight 28.851 kg/kmol, and phase of matter gas. The 'Evaluate inputs' button is visible at the bottom.

Species Name	Volume Fraction
1 O2	0.2100
2 N2	0.7900
3 CO2	0.0000
4 H2O	0.0000

	1 kg	1 kmol
enthalpy	-1.6637e+05	-4.5117e+06 J
internal energy	-8.2331e+05	-2.2328e+07 J
entropy	9908.1	2.687e+05 J/K
Gibbs function	-2.1397e+07	-5.8027e+08 J
heat capacity c_p	1513.7	41052 J/K
heat capacity c_v	1207.2	32737 J/K

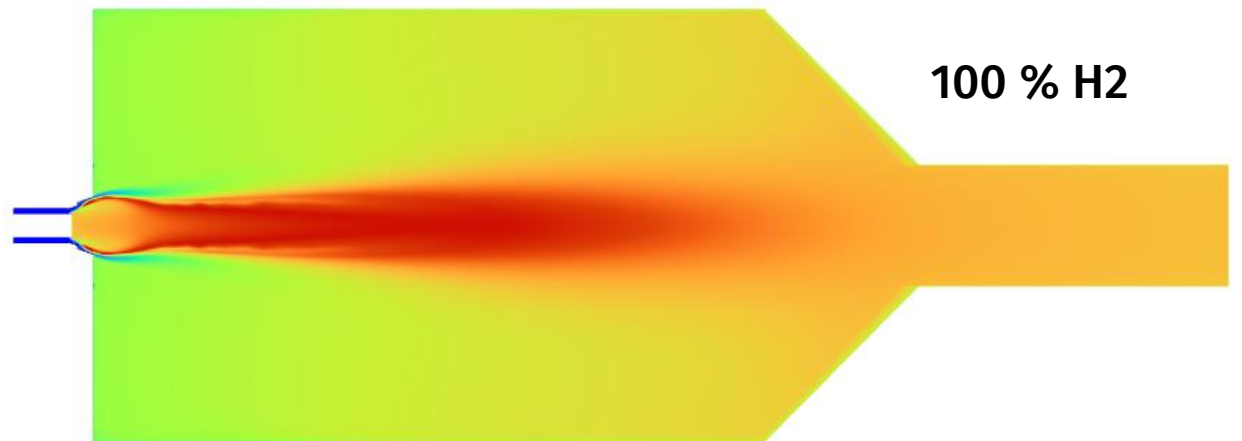
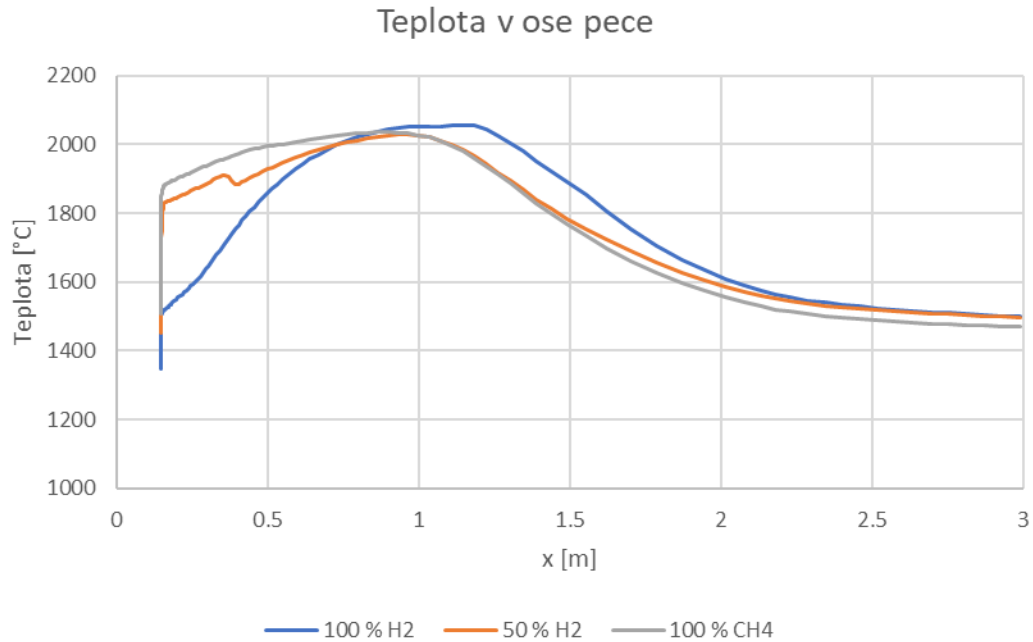
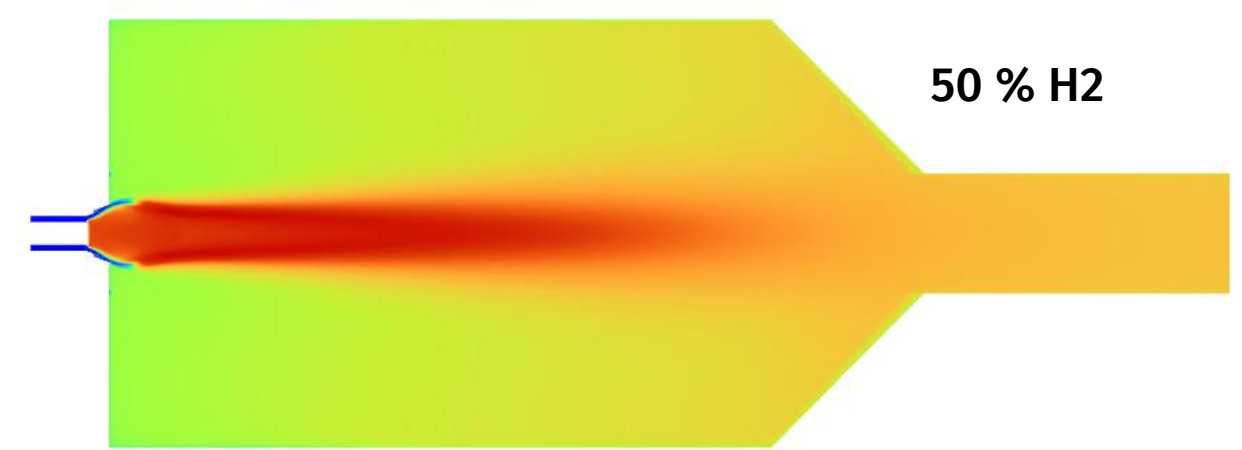
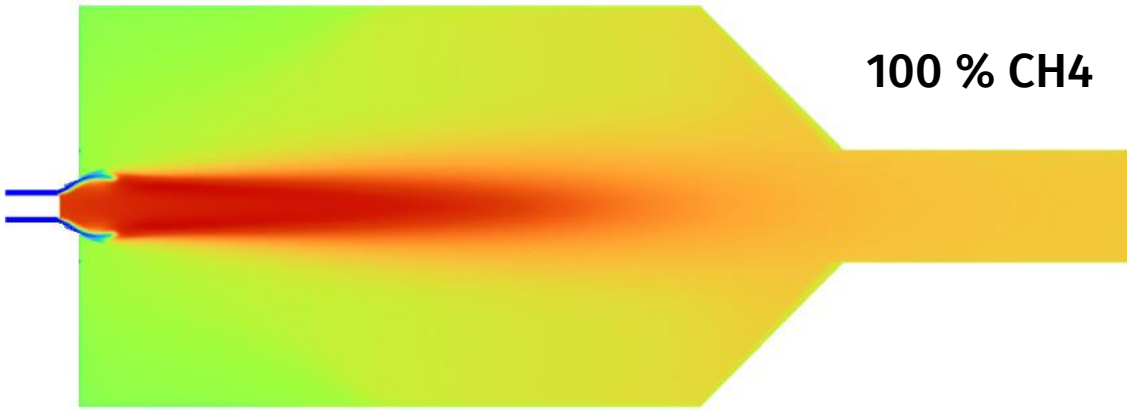
	mass frac. Y	mole frac. X	chem. pot. / RT
H2	7.6095e-05	0.0010236	-26.585
H	4.8081e-06	0.00012936	-13.293
O	0.00016525	0.00028012	-16.4
O2	0.026753	0.022674	-32.8
OH	0.0019708	0.0031426	-29.692
H2O	0.1296	0.1951	-42.985
HO2	1.5589e-06	1.2809e-06	-46.092
H2O2	1.072e-07	8.5474e-08	-59.385
CO	0.0017685	0.0017123	-40.516
CO2	0.1042	0.064209	-56.915
HCO	6.2986e-11	5.8865e-11	-53.808

— Výsledky výpočtů a porovnání

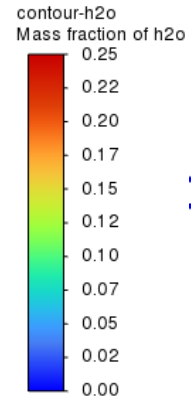
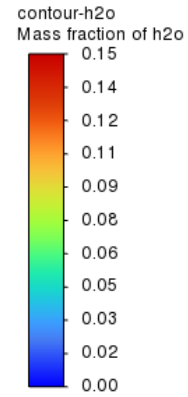
- Výsledky vyhodnoceny pro jednotlivé případy.
- Koncentrace látek jsou uvedeny ve hmotnostních zlomcích, pokud není uvedeno jinak.

	T_{\max}	T_{out}	O_2	H_2O	CO_2	CO	NO
Metan	1820,1	1188,4	0,026	0,108	0,13	0,0025	0,00055
Vodík 50 % + Metan 50 % (obj.)	1831,3	1215.2	0,026	0,13	0,105	0,0026	0,00065
Vodík	1867,4	1217.7	0,027	0,22	0	0	0,0009

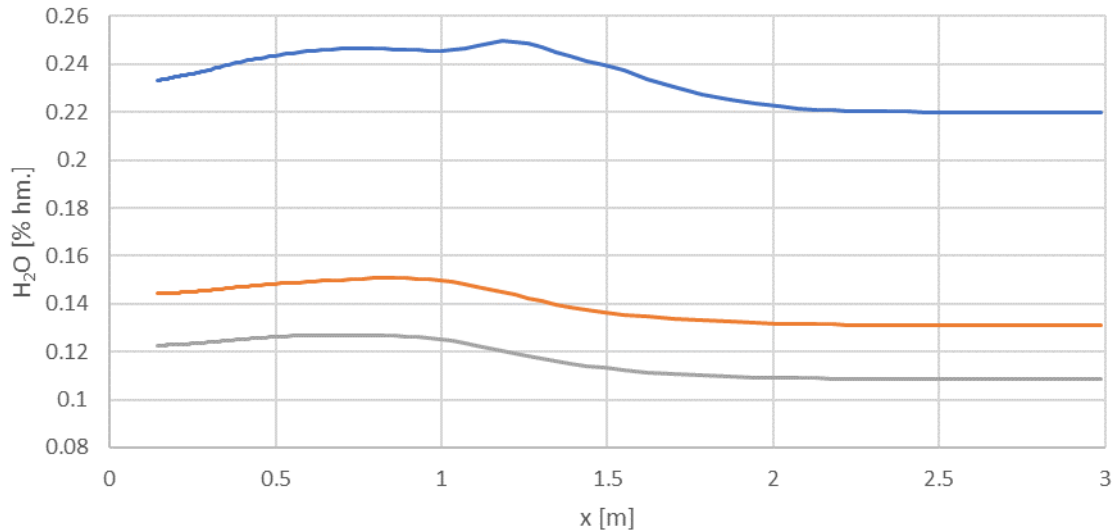
Teplotní pole



Koncentrace H₂O



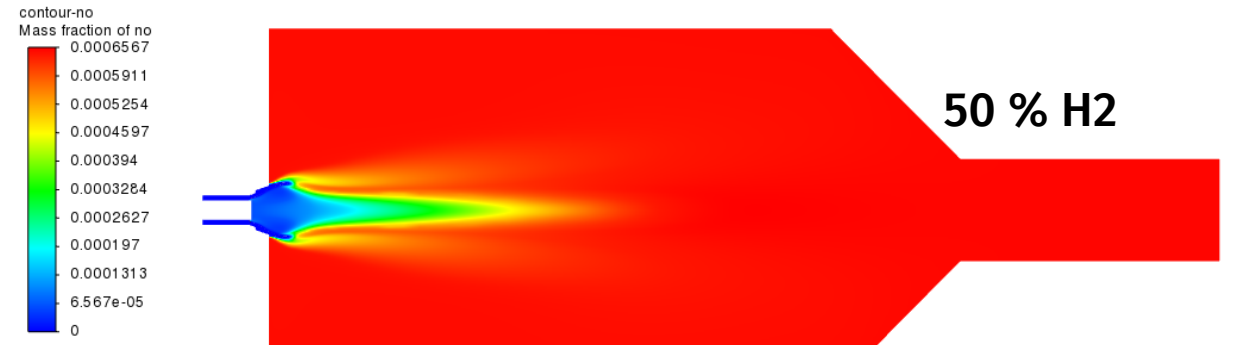
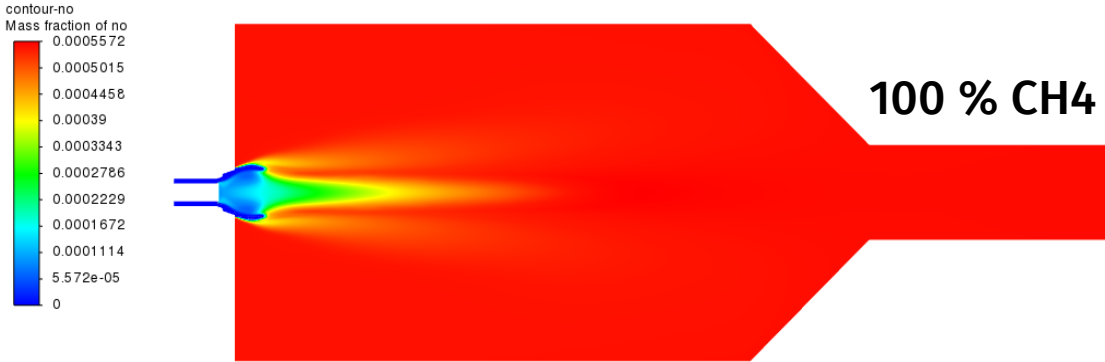
Koncentrace H₂O v ose komory



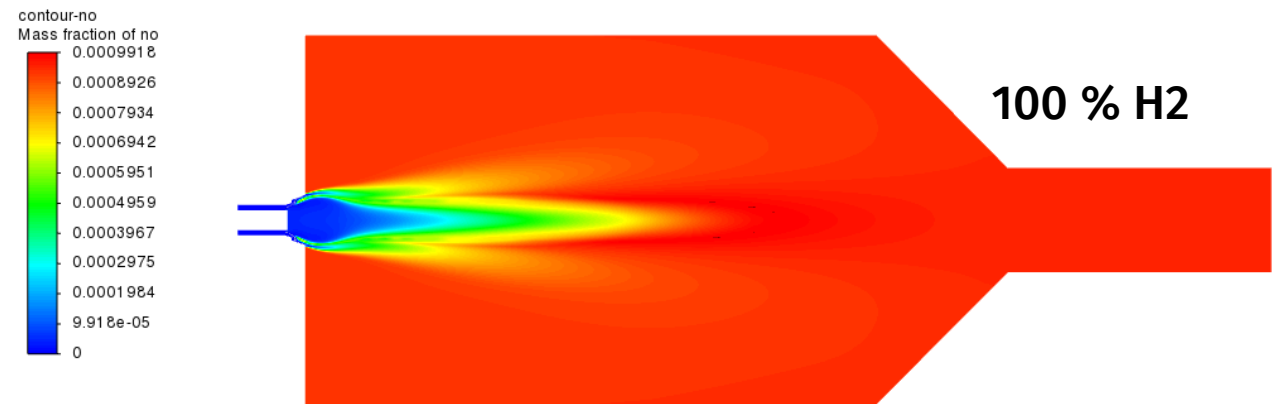
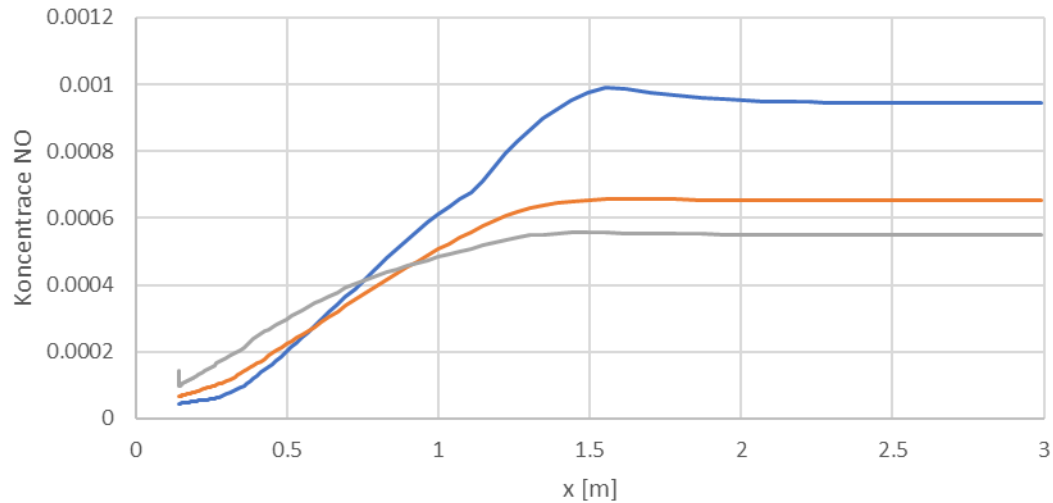
— 100 % H₂ — 50 % H₂ — 100 % CH₄



Koncentrace NO



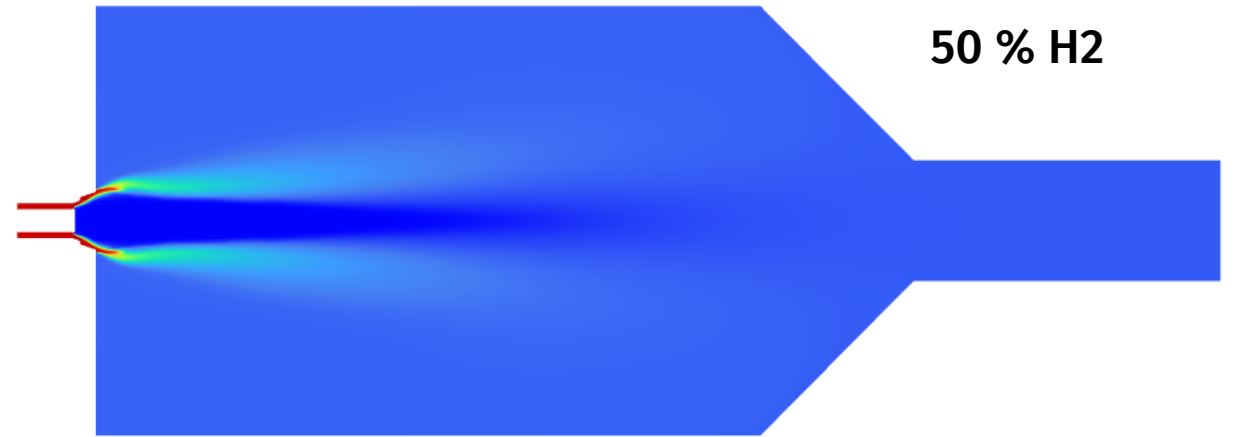
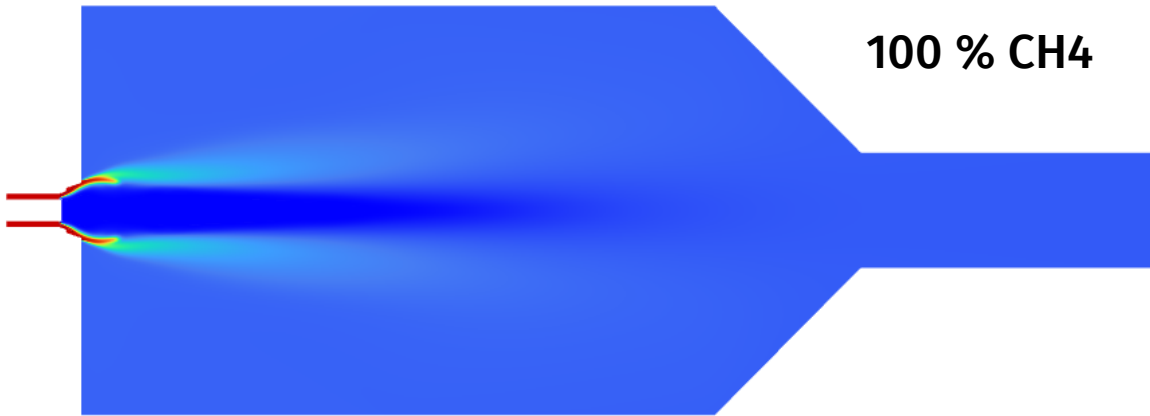
Koncentrace NO v ose pece



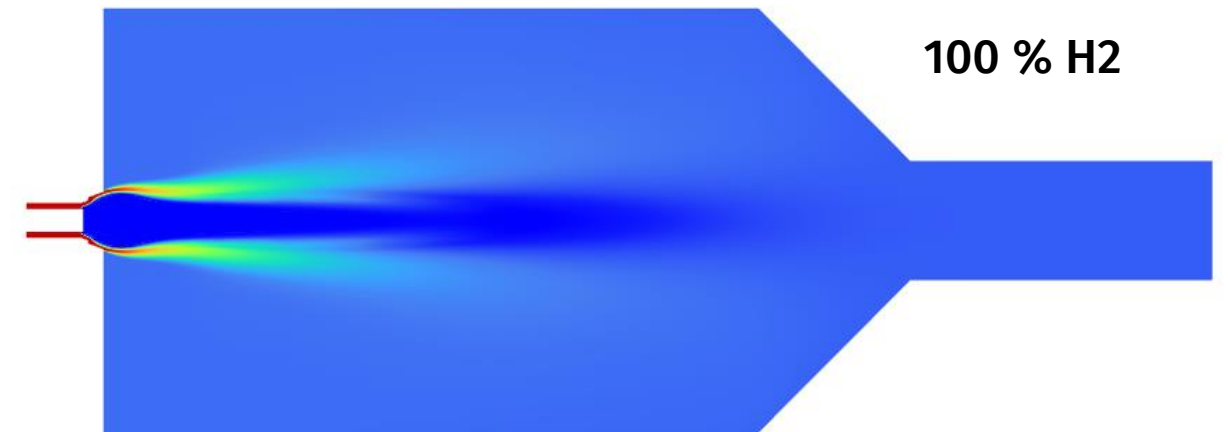
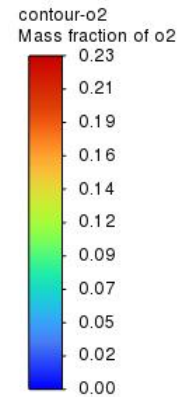
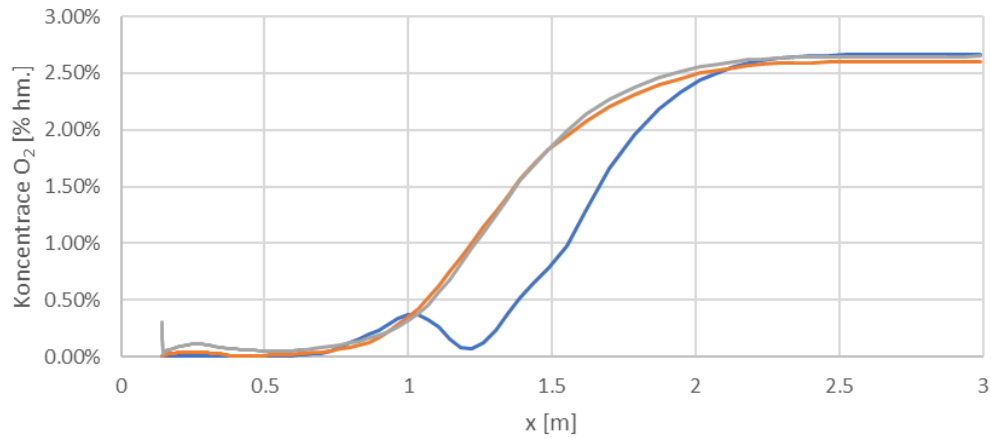
— 100 % H2 — 50 % H2 — 100 % CH4



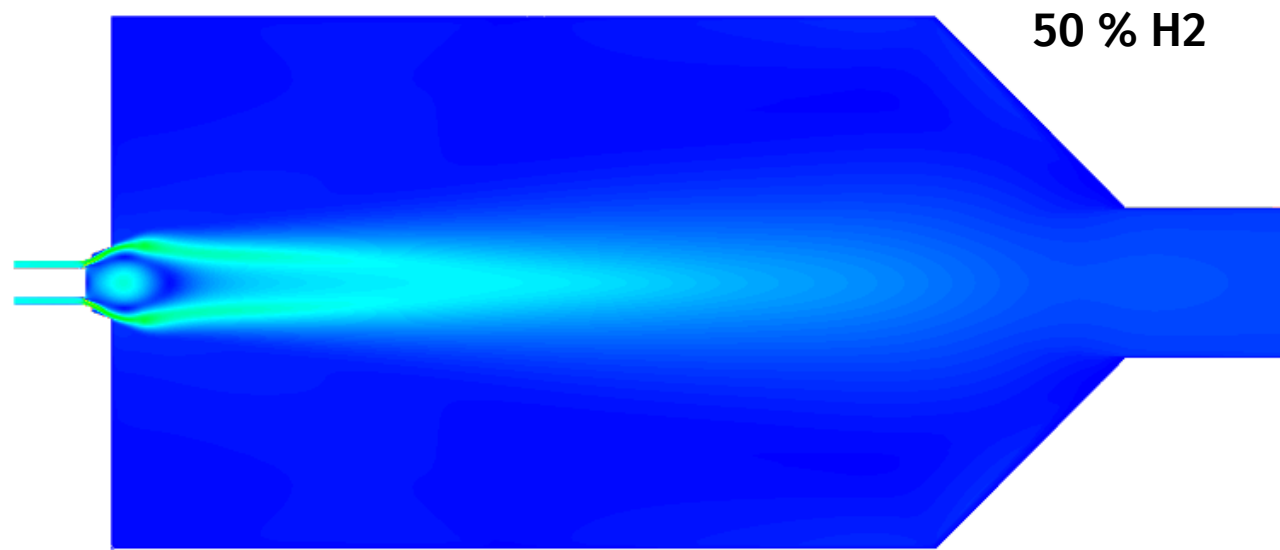
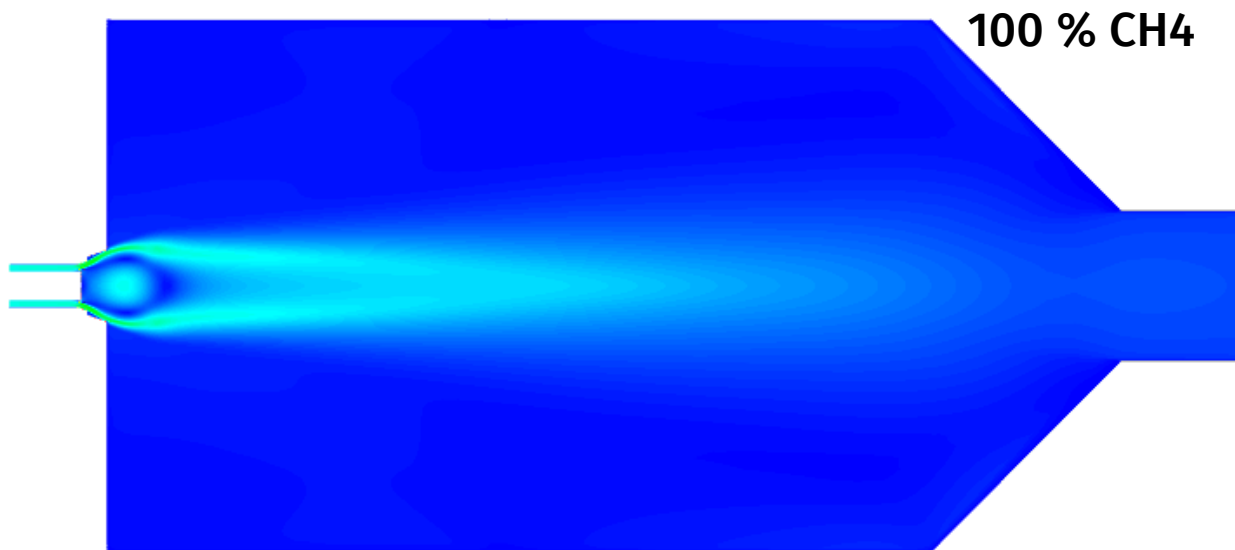
Koncentrace O₂



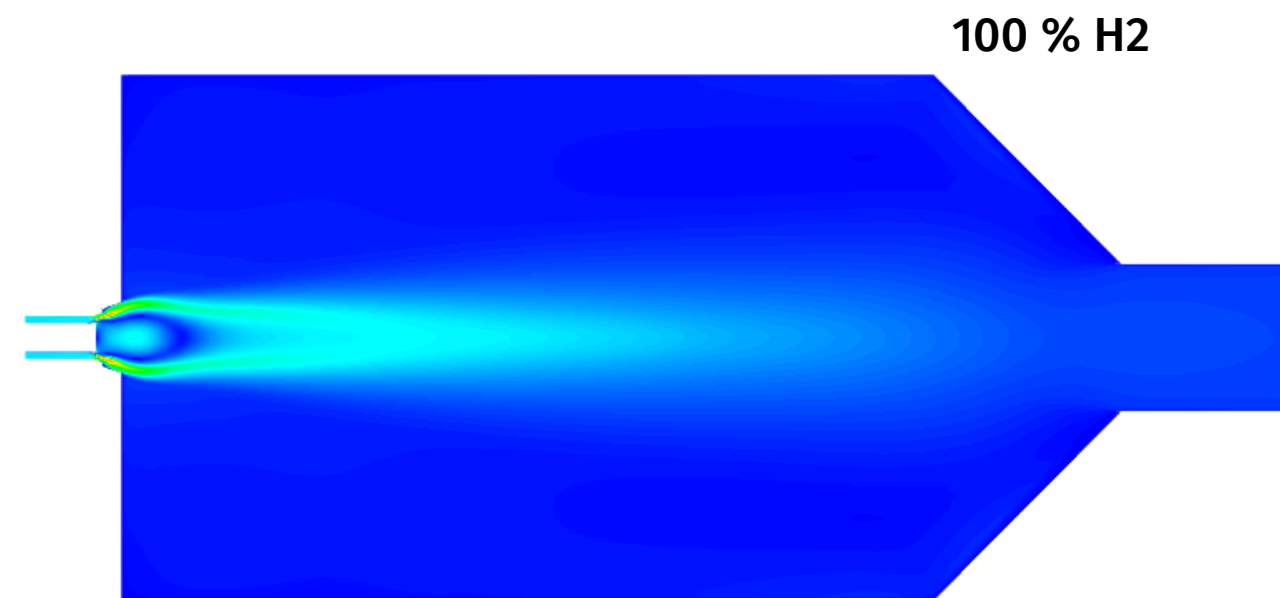
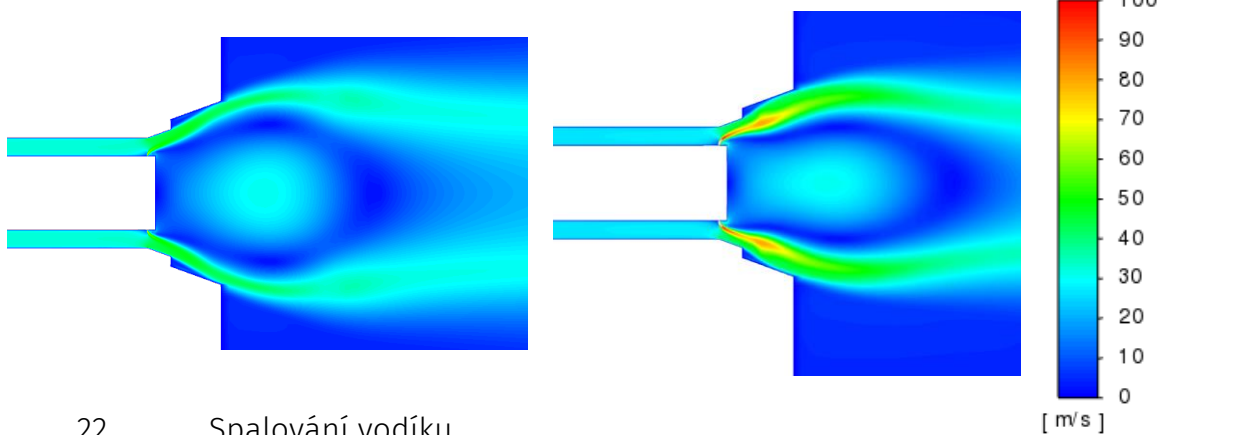
Koncentrace O₂ v ose pece



Rychlostní pole

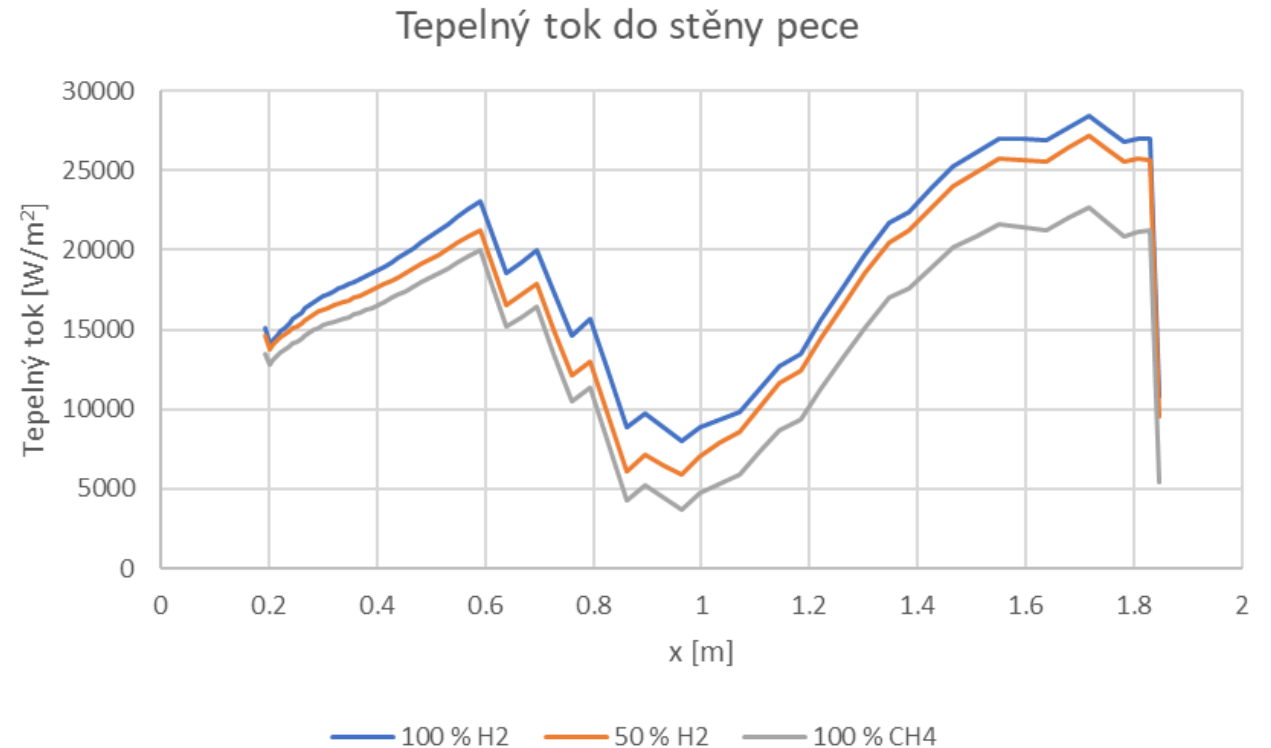
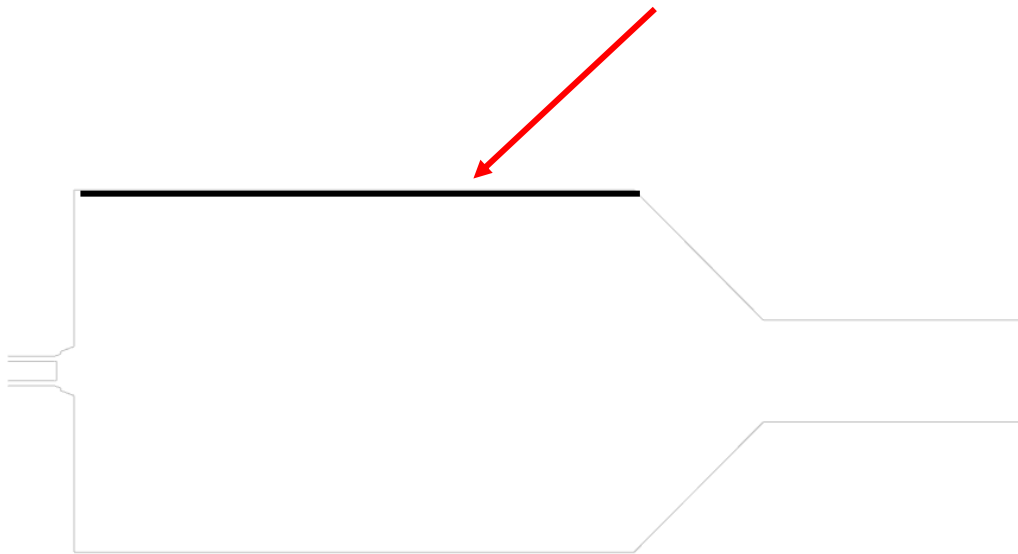


- Nárůst maximální rychlosti ze 76 m/s na 201 m/s!



— Tepelné toky do stěn

- Nespojité profily tepelných toků je daný nespojitě zadanou teplotou dle naměřených hodnot z testů se zemním plynem.





Možnosti modelování v Ansys Fluent

Zaměření simulací

Výroba

- Modelování parního reformingu (**SMR**)
- Elektrochemická a fluidní dynamická optimalizace elektrolýzy

Skladování

- Návrh kryogenních nádob
- Návrh kompresorů
- Zkapalňování s podporou **LNG**

Transport

- **Samovznícení** v důsledku úniku
- Konstrukce nádrží na stlačený H_2
- Modelování adsorpce v hydridech

Využití

- Spalování vodíku
- Vozidla s palivovými články
- Spalování H_2 v plynové turbíně

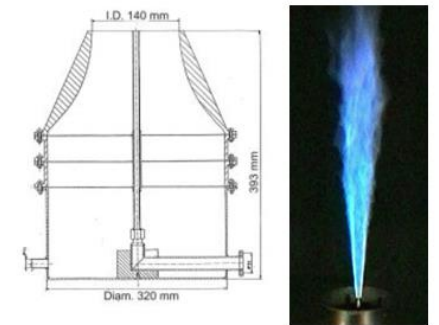
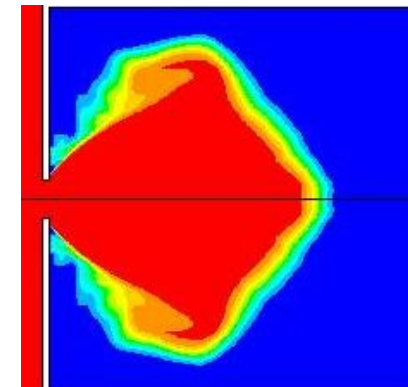
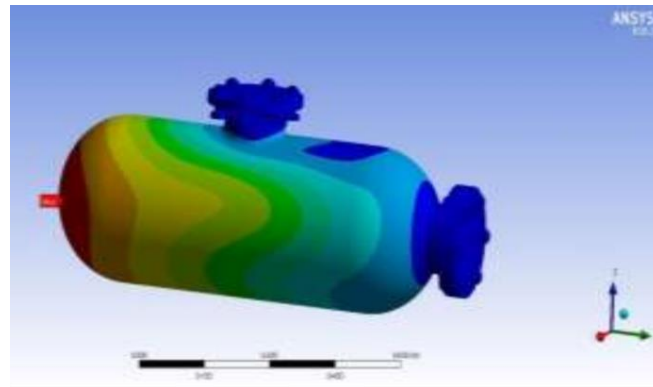
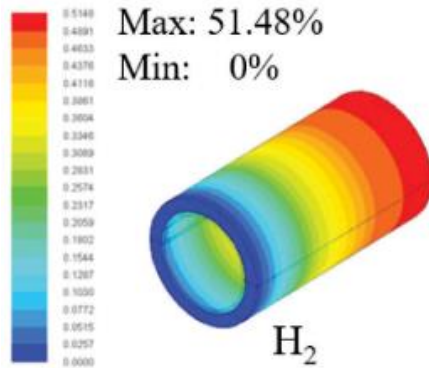
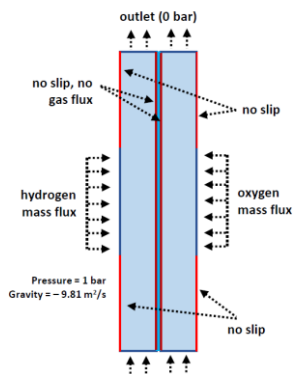


FIGURE 1: DLR burner schematic and flame shape [2]

Modelování elektrolýzy

Modelování SMR

Modelování nádrží

Modelování samovznícení

Modelování spalování

Simulace může hrát klíčovou roli v každém aspektu vodíkové energie, pro urychlení jejího zavádění.



Ekologičtější spalovací turbíny: Simulace spalování vodíku

Cíle v inženýrské oblasti

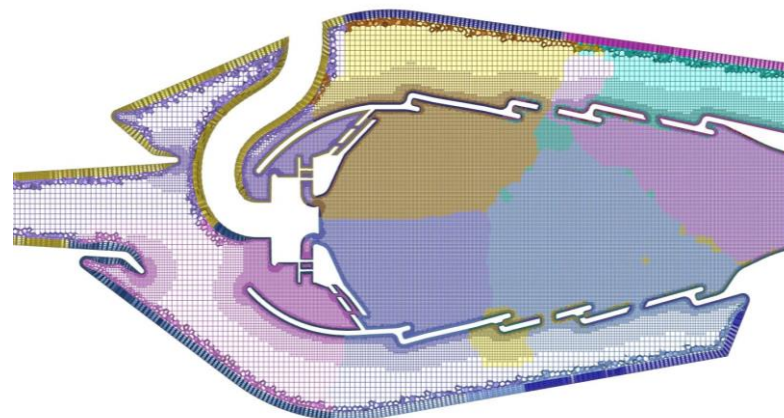
- Eliminace emisí uhlíku ze spalovacích turbín.
- Navrhnout low-NOx spalovací motory pro pohon a APU na vodík/biopalivo.

Řešení v Ansysu

- **Vysoce věrné modely spalování a turbulence:** Pomocí modelu spalování FGM s modelem turbulence SBES se přesně modeluje spalování vodíku (nebo směsi H₂/SAF).
- **Paralelní a automatizované vytváření sítí:** Generuje miliony vysoce kvalitních poly-hexcore buněk během několika minut.
- **HPC:** Vysoce škálovatelný CFD řešič na stovkách tisíc jader pro rychlejší hodnocení návrhů.

Výhody

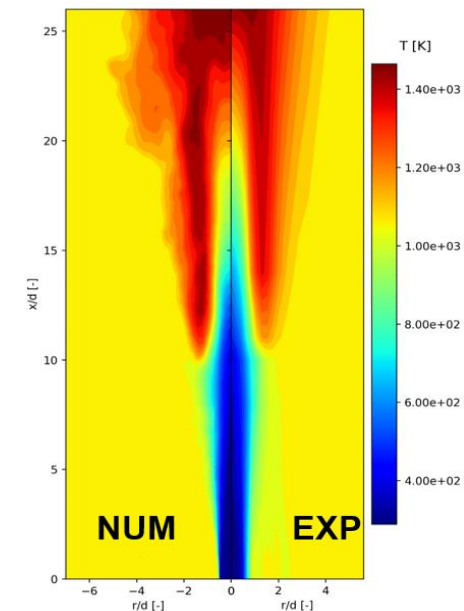
- **Přesná** predikce celkového výkonu a složitých jevů spojených se spalováním H₂, jako jsou:
 - zpětné zahoření, samovznícení, odfouknutí plamene, emise NO_x,
 - termoakustika, interakce mezi plamenem a vyzdívkou.
- Zkrácení doby testování zařízení a doby uvedení na trh pomocí spolehlivých simulací k rychlému hodnocení různých koncepcí.



Distribuované paralelní generování sítě v softwaru Fluent Meshing (100 milionů buněk Poly-Hexcore za 20 minut).



Aerotermitické pole uvnitř spalovacího prostoru letového motoru simulované pomocí modelu spalování FGM a modelu turbulence SBES v programu Ansys Fluent.



Předpovědi CFD programu Ansys Fluent pro vodíkový plamen Cabra a jejich ověření na základě experimentálních dat.

Modelování sfouknutí plamene při chudé směsi

Cíle v inženýrské oblasti

- Pochopení kritických charakteristik spalování.
- Poskytnout pokyny pro stabilizaci chudého spalování a snížení emisí výfukových plynů.
- Pomáhat prosazovat úsilí o dekarbonizaci.

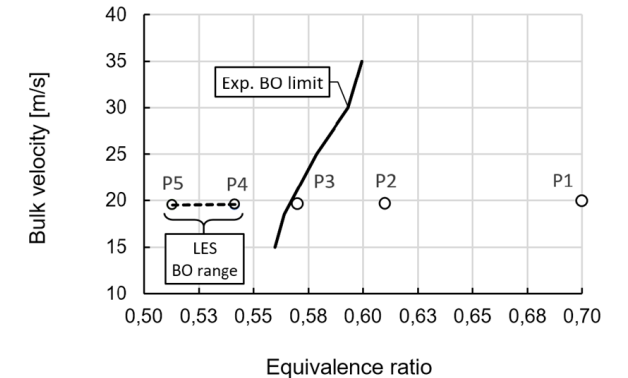
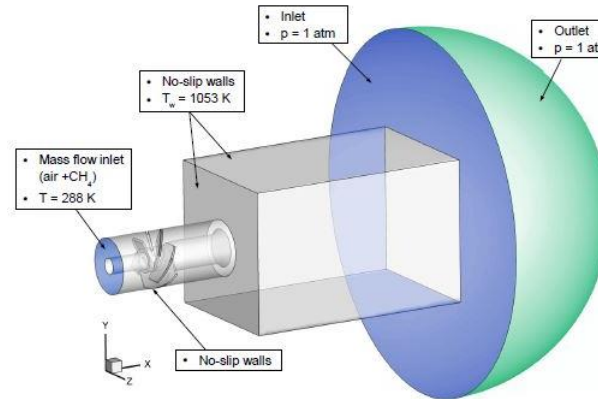
Řešení v Ansysu

- Model spalování Strained-FGM s řadou turbulentních modelů přesně simuluje chudé směsi předmíšeného spalování vodíku.
- Osvědčené mechanismy pro spalování vodíku a vodíkových směsí.

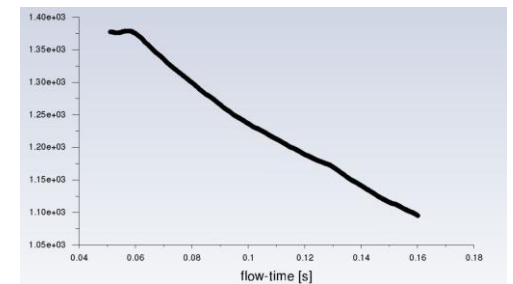
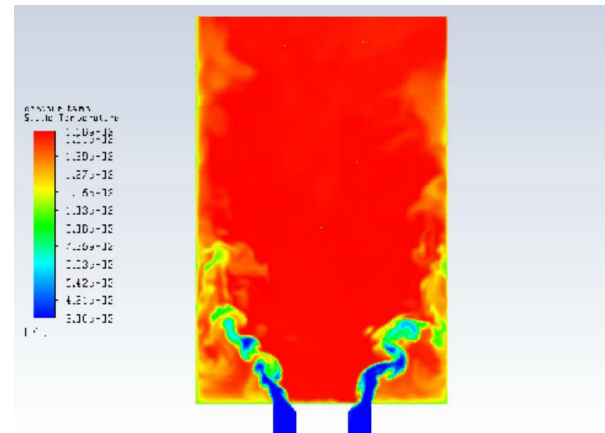
Výhody

- Pochopení složitých jevů, jako je hranice sfouknutí plamene chudé směsi, plameny ve vířivém spalování s chudou směsí.
- Poskytnutí přesných předpovědí rychlosti plamene a přesnějších předpovědí NOx a CO.

Cambridge lean premix burner



P3 : Above LBO --- Burning
P5 : Below LBO --- Quenching



- Počáteční řešení nad hranicí LBO,
- snížení vstupní frakce směsi pod mezní hodnotu LBO,
- předpovídá zhášení plamene.

Modelování sfouknutí plamene při chudé směsi

Cíle v inženýrské oblasti

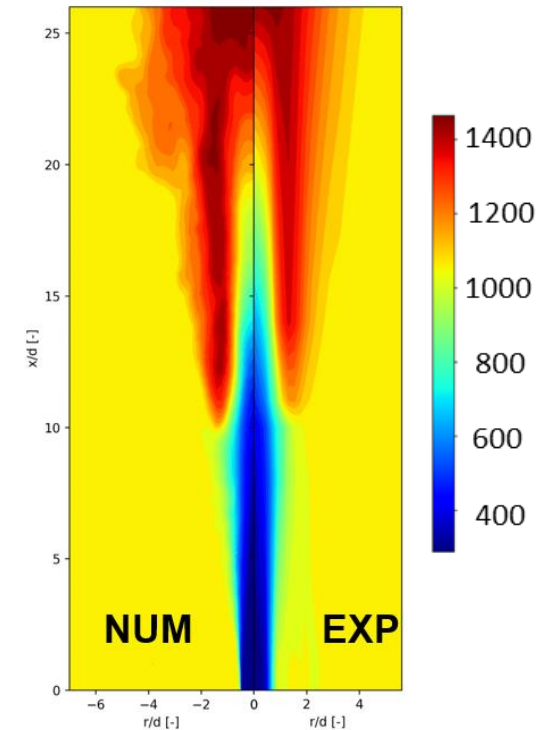
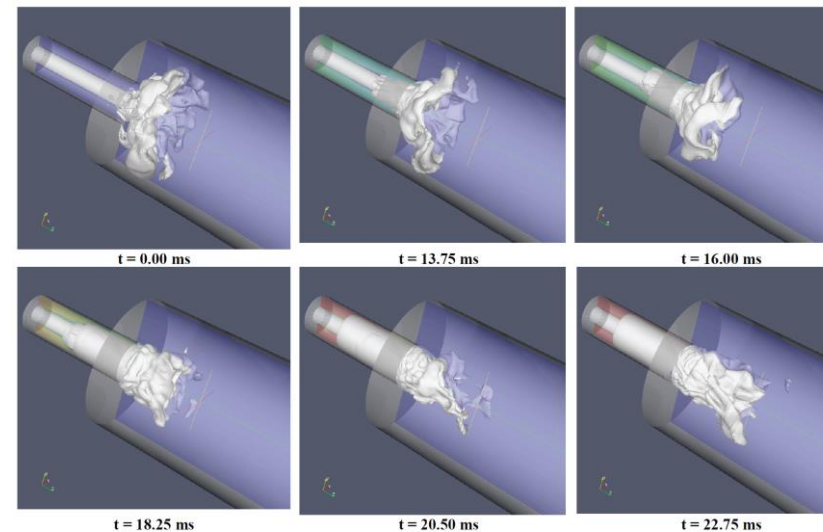
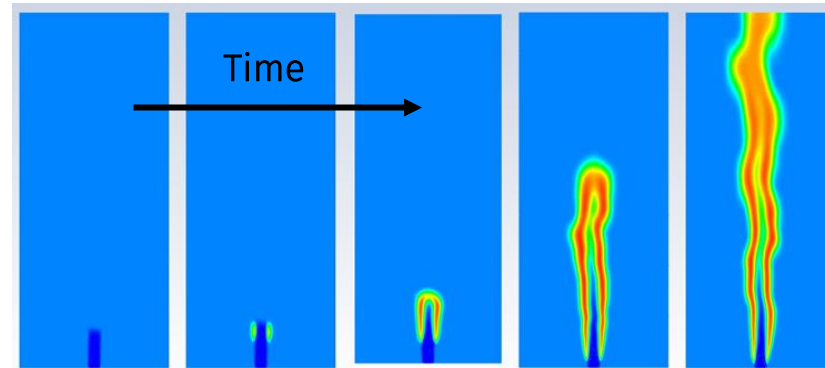
- Porozumět podmínkám vzniku zahoření u čistého vodíku a paliv s vodíkovou směsí.
- Vyhodnotit a optimalizovat konstrukce hořáků, aby se zabránilo/omezilo zpětnému zahoření.
- Poskytnout pokyny pro bezpečnější provozní podmínky.

Řešení v Ansysu

- Rychlý pre-processing: postup založený na Fluent Meshing.
- Přesné simulace spalování pomocí Finite rate modelů (FR) a modelů Flamelet Generated Manifold (FGM).
- Možnost zahrnout do simulací rozsáhlejší reakční mechanismy pro zachycení zahoření.
- Řada modelů turbulence pro přesnou predikci rychlostního pole.
- Škálovatelný výkon na HPC pro modelování spalování.

Výhody

- Lepší přehled o spalovacích vlastnostech čistého vodíku a paliv s vodíkovou směsí
- Lepší pochopení scénářů způsobujících zpětné zahoření.
- Optimalizace konstrukce hořáku pro zamezení zpětného zahoření.
- Best practise pro bezpečný provoz motoru/spalovacího zařízení.



Zpětné zahoření ve spalovacím zařízení SimVal
(Eggenspieler a kol., 2008)

Vodíkové palivo pro letecké motory

Cíle v inženýrské oblasti

- Použití vodíku jako paliva v turbostrojích pro pohon letadel
- Nulové emise uhlíku / nízké emise NOx

Řešení v Ansysu

- Vysoká věrnost: Vhled do (Workbench + Fluent)
 - Vliv chování Jet A1 nebo vodíkového paliva ve spalovací komoře,
 - vliv tvaru hořáku na účinnost spalování,
 - teplota stěny komory, tepelný gradient vstupní turbíny a poloha chladičho zařízení chrání konstrukci.

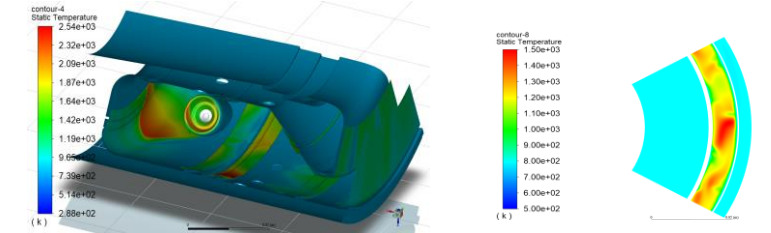
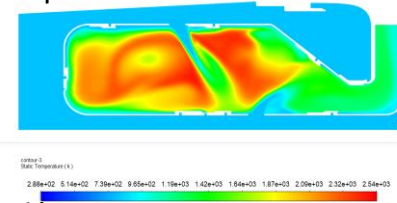
Výhody

- "Vyřešte složité výpočty turbín a kompresorů, nahradte fyzické prototypy virtuálními prototypy a zlepšete zkoumání návrhu," říká Damien Fauvet, generální ředitel společnosti TURBOTECH.
- "Turbotech přinese novou generaci motorů s nižší hlučností, nižším dopadem na životní prostředí a větší letovou výdrží."
- Ověřování a zdokonalování stávajících turbovrtulových motorů a turbogenerátorů s vodíkovým palivem.

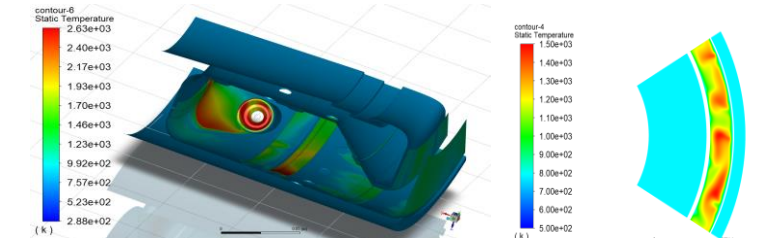
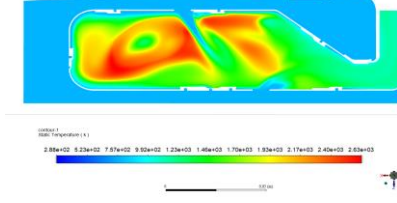
TURBOTECH



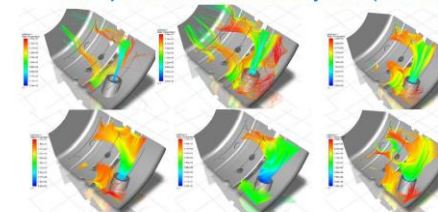
Jet A1 palivo



H₂ palivo



CFD – particle tracks from fuel injection (mean flow)



<https://www.youtube.com/watch?v=kmWJB-gTP5A>



Chcete dál prohlubovat znalosti v Ansys?

Registrujte se na školení a semináře na www.svsfem.cz

Sledujte SVS FEM ve světě sociálních sítí



**Díky za pozornost
a zůstaňme ve spojení**

 Jiří Vondál

SVS FEM

www.svsfem.cz