

CFD-Simulation einer H₂ - Feuerung in Industriekesseln

W.Timm¹, B. Zimmermann¹

¹ Power Service Solutions GmbH, Schifferstraße 80, 47059 Duisburg

Abstract

Wasserstoff wird für verschiedene Anwendungen als Ersatz für fossile Brennstoffe geplant. Durch seine hohe Reaktivität entstehen jedoch verschiedenste Herausforderungen bei der Umrüstung bestehender Anlagen. Bei der Power Service Solutions GmbH wurden verschiedene Konzepte untersucht, um erdgasgefeuerte Anlagen in Zukunft mit Wasserstoff zu betreiben. Dazu wurden auch diverse CFD-Simulationen durchgeführt.

Zur Validierung wird zunächst eine vermessene H₂-Laborflamme [1] mittels CFD simuliert, um die Temperatur und den NO_x-Gehalt zu bestimmen. Dabei kommt ein reduzierter Mechanismus zum Einsatz [2], der nur die wesentlichen Reaktionen der Oxidation von Wasserstoff berücksichtigt.

Diese Modellierung wird auf verschiedene industrielle Anlagen übertragen, die im Rahmen einer Studie untersucht bzw. bereits gebaut wurden. Bei großtechnischen Anlagen besteht zusätzlich die Herausforderung, dass durch die Komplexität der Strömung mehrerer Brenner oftmals Modifikationen am Turbulenzmodell zur Kalibrierung der Turbulenz-Chemie-Interaktion gemacht werden müssen [3,4]. Die gemessenen Werte für NO_x bzw. die Rauchgastemperatur werden zur Modellkalibrierung herangezogen. Es werden verschiedene Lastfälle für H₂ und Erdgas/H₂ als Mischfeuerung am Beispiel industrieller Dampferzeuger unterschiedlicher Größen und Leistung betrachtet.

Es zeigt sich, dass die reine Wasserstofffeuerung im Hinblick auf die NO_x-Produktion durch eine Rauchgasrezirkulation gesteuert werden kann. Hierbei kommen verschiedene Brennertypen mit unterschiedlicher Rauchgasrückführung zum Einsatz.

Im Vergleich zur reinen Erdgasflamme bzw. Mischfeuerung sind bei der reinen H₂-Feuerung allerdings höhere Rezirkulationsgasmengen erforderlich, da durch die besonderen Eigenschaften der Wasserstoffflamme (v.a. Temperatur, hohe Geschwindigkeit) die Bildung von thermischen NO_x-Emissionen begünstigt wird.

1. Einleitung

Im Zuge der Umstellung von fossilen Brennstoffen auf alternative Energiequellen ist insbesondere die Verbrennung von Wasserstoff in den Fokus der industriellen Energieerzeugung gerückt. Erste Umrüstungen von bestehenden Anlagen von Erdgas auf Wasserstoff finden vermehrt statt bzw. werden auf Machbarkeit untersucht. Mit seiner hohen Verbrennungstemperatur stellt Wasserstoff allerdings auch eine Herausforderung für die Einhaltung von NO_x-Grenzwerten dar. Hier kommt CFD-Simulationen als Werkzeug zur Vorab-Analyse von Feuerungskonzepten eine besondere Bedeutung zu. Ziel der vorliegenden Studie ist die Entwicklung eines Konzepts zur numerischen Simulation von Flammen in Wasserstoff- bzw. Wasserstoff/Erdgas-Feuerungen, das belastbare Vorhersagen zur Temperaturverteilung und NO_x-Emissionen machen kann, wobei aber gleichzeitig der Rechenaufwand in realistischem Rahmen bleiben soll.

Zunächst wird ein Versuchsbrenner nachgebildet, der aufgrund reproduzierbarer Laborbedingungen eine genaue Simulation der Strömungsverhältnisse bei gleichbleibenden Brennstoff- und Verbrennungsluftmassenströmen ermöglicht. Hierdurch ist eine zielgerichtete Auswahl einer Verbrennungskinetik möglich, da Störeinflüsse weitgehend ausgeschaltet sind. Es wird der am IMFT in

Toulouse [1] entwickelte HYLON (Hydrogen Low NOx)-Brenner betrachtet, der in Abbildung 1 dargestellt ist.

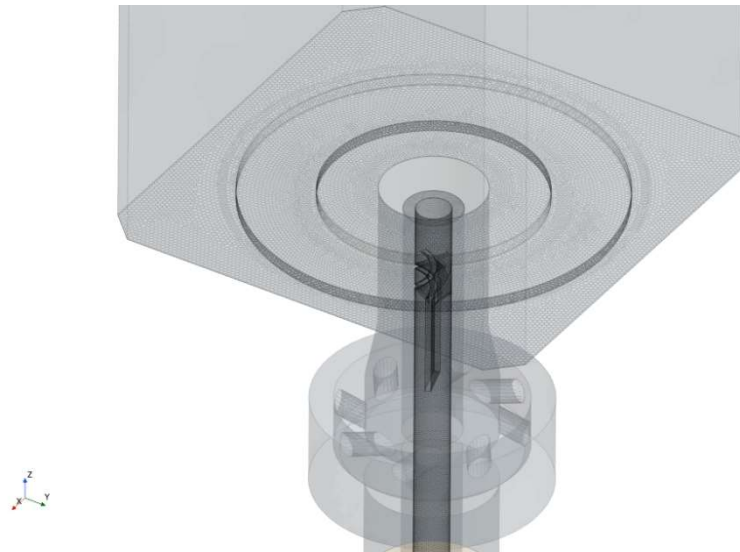


Abbildung 1. Geometrie des HYLON-Brenners [1], [10]

Dieser im Rahmen des TNF-Workshops als CAD-Geometrie mit Messwerten für Temperaturen und NOx-Werten zur Verfügung gestellte Brenner [10] ermöglicht die Realisierung verschiedener Flammenformen. Zum einen kann eine direkt am Brenner anliegende Flamme (Flamme A) mit einer thermischen Leistung von $P_{th} = 4 \text{ kW}$ erzeugt werden, ebenso ist eine abgelöste, aber hydrodynamisch stabilisierte Flamme (Flamme L) mit einer Leistung von 10 kW möglich [1]. Diese zwei Flammentypen zeichnen sich durch unterschiedliche Werte der NOx-Emissionen aus, so dass eine Auswahl eines geeigneten Turbulenz- bzw. Chemiemodells mitsamt zugehöriger Interaktion erfolgen kann, die beide Zustände möglichst gut abdeckt. Dieses Modell wird zur Simulation eines industriellen Dampferzeugers mit zwei Brennern, mit je 8 Gaslanzen verwendet, der bei einer thermischen Leistung von $\sim 80 \text{ MW}$ eine Dampfleistung von 100 t/h erreicht. Dieser ist als 3D CAD-Modell in der folgenden Abbildung dargestellt.

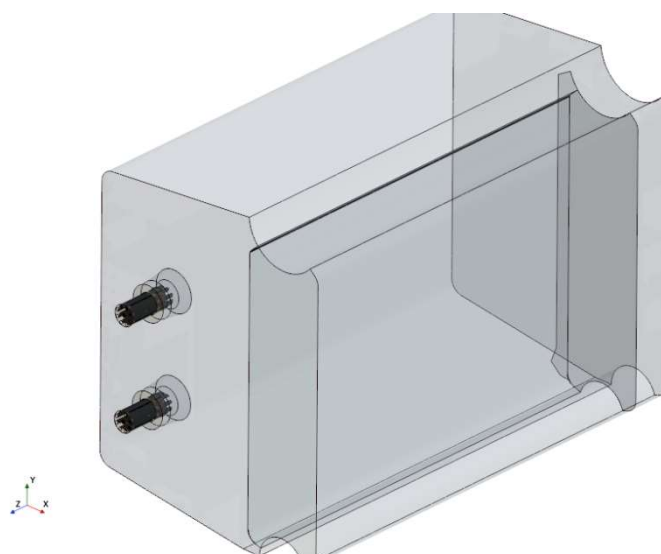


Abbildung 2. Geometrie des Dampferzeugers

Im Gegensatz zur Erdgasverbrennung kann der kinetische Mechanismus der Oxidation von Wasserstoff durch eine wesentlich geringere Anzahl an Einzelreaktionsschritten beschrieben werden, da keine langkettigen Verbindungen bzw. deren Zerlegung in verschiedenste Zwischenprodukte beschrieben werden muss. Selbst Methan braucht eine deutlich höhere Anzahl von Reaktionsschritten als reiner Wasserstoff. Dessen Verbrennungsmechanismus stellt im Grunde eine Untermenge der Reaktionen der Erdgasverbrennung dar, wie z.B. von Zettervall dargestellt [8]. Dieser beschreibt die Kinetik des H_2/O_2 -Mechanismus als ein System von ca. 20 Einzelreaktionen in vier Untersystemen, wobei neben den beiden Ausgangsstoffen und dem Reaktionsprodukt Wasser die Zwischenprodukte bzw. -radikale HO_2 , H_2O_2 , OH , und O von Bedeutung sind. Die letzteren beiden sind wiederum entscheidende Faktoren für den Mechanismus der thermischen NO_x -Bildung nach Zeldovich.

Zur Modellierung der Verbrennung von Erdgas bzw. Wasserstoff sowie NO_x -Bildung wurden verschiedene Kinetiken entwickelt, die entweder als reduzierter Mechanismus die wesentlichen Zwischenreaktionen beschreiben z.B. in [2] oder als globaler Mechanismus direkt die Umsetzung der Ausgangsstoffe in die Endprodukte in wenigen Schritten formulieren [5,6,7,9]. Die aufwendigsten Systeme mit 50 oder mehr Spezies und Hunderten von Unterreaktionen stellen die leistungsfähigsten Kinetiken dar [11-13], benötigen jedoch auch den höchsten numerischen Aufwand. In der vorliegenden Studie wurde ein kombinierter Ansatz gewählt, bei dem nur die Verbrennung von Methan und Wasserstoff mit einem ausführlicheren Mechanismus beschrieben wird und die im Brenngas des industriellen Dampferzeugers enthaltenen längeren Kohlenwasserstoffe mit dem globalen Ansatz nach Jones und Lindstedt modelliert werden [6].

2. Simulation der HYLON-Flamme

Im Rahmen von Testrechnungen stellte sich heraus, dass zur Berechnung der NO_x -Emissionen eine auf die Wasserstoffreaktionen reduzierte Version des San-Diego-Mechanismus [11] und die von Conaire et. al. [2] entwickelte Kinetik im Zusammenspiel mit dem ebenfalls an der Universität San Diego entwickelten NO_x -Mechanismus vergleichbare Ergebnisse lieferten. Im Folgenden sind die Ergebnisse dargestellt, die mit dem San-Diego-Gesamtsystem aus Verbrennungs- und NO_x -Kinetik erhalten wurden, da dieses den Vorteil einer konsistenten Datenbasis aus einer Quelle bietet. Für die Turbulenz-Chemie -Interaktion wird das Eddy-Dissipation-Concept Modell mit den bekannten Standardparametern zusammen mit einem elliptischen k-epsilon Modell verwendet. Aufgrund der vergleichsweise einfachen Strömung mit relativ niedriger Reynoldszahl im Vergleich zu einer hochturbulenten Feuerraumströmung mit mehreren Brennern wird davon ausgegangen, dass dieser Ansatz zur Auswahl der NO_x -Kinetik bzw. Verbrennungschemie komplett ausreichend ist, zumal eine detaillierte transiente Simulation mit bspw. einem LES-Modell bei einer realen Kesselgeometrie aus Gründen der Rechenzeit nicht praktikabel wäre. Der Einfluss der Strahlung wird durch das Diskrete-Ordinaten-Modell berücksichtigt.

Beim HYLON-Brenner wird ein zentraler Wasserstoffstrom über einen Drallkörper in eine ebenfalls drallbehaftete umgebende Oxidationsluftströmung geleitet. Beide Ströme haben jeweils Umgebungstemperatur. Eine genaue Beschreibung des Versuchsaufbaus kann [1] bzw. [10] entnommen werden. Die Hauptparameter der jeweiligen Flammenkonfiguration finden sich in Tabelle 1.

Tabelle 1. Parameter der Flammen A und L

Flamme	P_{th} [kW]	V_{H_2} [m/s]	V_{Luft} [m/s]	T [°C]
A	3,89	13,6	11,4	25
L	9,73	34,0	28,5	25

Eine Möglichkeit zur Visualisierung der Flammenform besteht in der Methode der Chemolumineszenz, bei der die Verteilung der OH-Radikale optisch sichtbar gemacht wird, was in industriellem Maßstab z.B. bei Daurer et. al. [4] beschrieben wird und ebenfalls beim HYLON Versuchsaufbau zum Einsatz kommt. In Abbildung 3 und 4 ist dies für die beiden untersuchten Flammentypen dargestellt.

Ein Vergleich von gemessener und simulierter Verteilung der OH-Radikalkonzentration zeigt eine deutliche Übereinstimmung der Flammenform, so dass davon ausgegangen werden kann, dass beide Flammen im CFD-Modell prinzipiell richtig wiedergegeben werden.

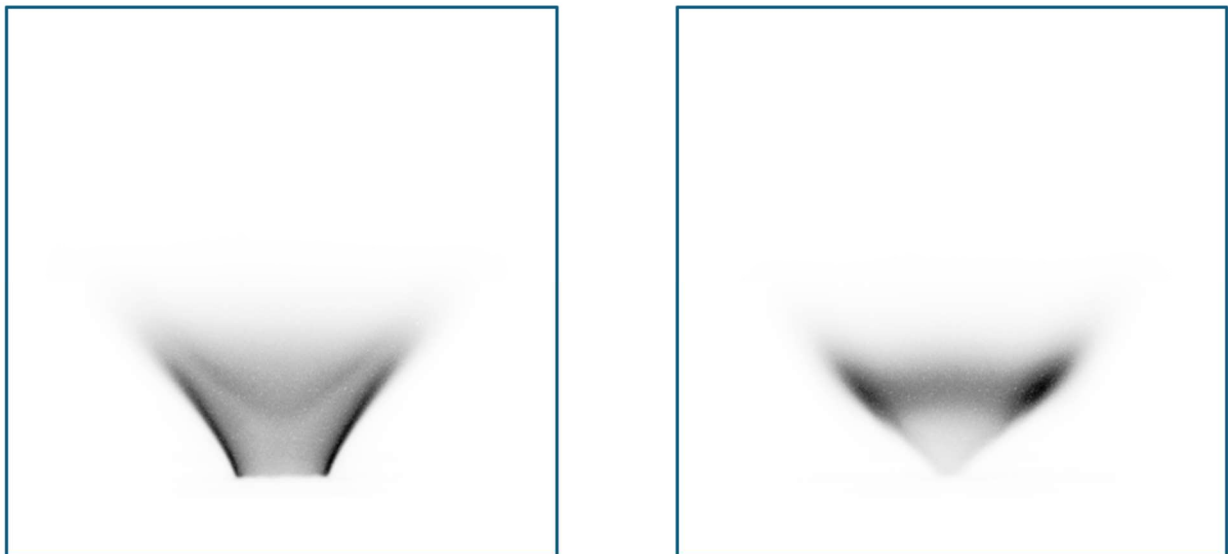


Abbildung 3. Flamme A (links) und L (rechts) in OH*-Radikalverteilungsdarstellung [1]

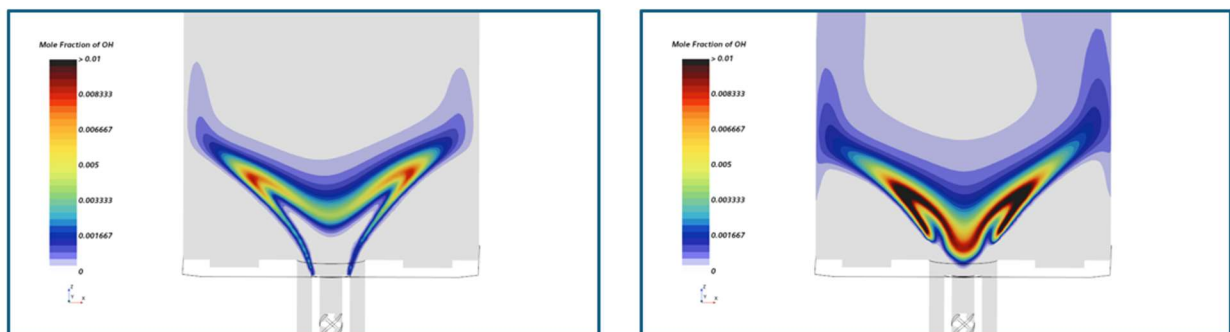


Abbildung 4. CFD-Simulation der OH*-Radikalkonzentration

Der grundsätzliche Unterschied in den beiden Flammentypen spiegelt sich auch in der Temperaturverteilung bzw. dem NO_x-Verlauf wider. Die gemessene bzw. simulierte Temperatur sowie der NO-Wert am Auslass (ppm, wasserfrei) ist in der Tabelle 2 aufgeführt. (NO₂ wurde getrennt ermittelt, liegt aber in beiden Fällen auf vernachlässigbarem Niveau.)

Tabelle 2. Temperatur und NO-Emission der Flammen A und L am Austritt

Flamme	NO gemessen [ppm]	NO berechnet [ppm]	T gemessen [K]	T berechnet [K]
A	12,1	15,7	~1170	~1207
L	6,2	5,3	~1360	~1321

Es fällt auf, dass bei der Flamme mit höherer thermischer Leistung und Temperaturniveau ein deutlich niedrigerer NO-Wert vorliegt, was der Tatsache geschuldet sein dürfte, dass es in der heißesten Zone der Flamme zu anderen Verweilzeiten und Reaktionsraten im abgelösten Fall L aufgrund unterschiedlicher Rezirkulationsströmung kommt. Da dieses auf den ersten Blick unerwartete Ergebnis

der Messung auch in der Simulation genauso wiedergegeben wird, kann davon ausgegangen werden, dass das hier verwendete CFD-Modell Wasserstoffflammen mit ausreichender Genauigkeit beschreibt. In den nachfolgenden Abbildungen 5 und 6 sind die Temperatur und NO_x-verläufe für beide Flammen einander gegenübergestellt.

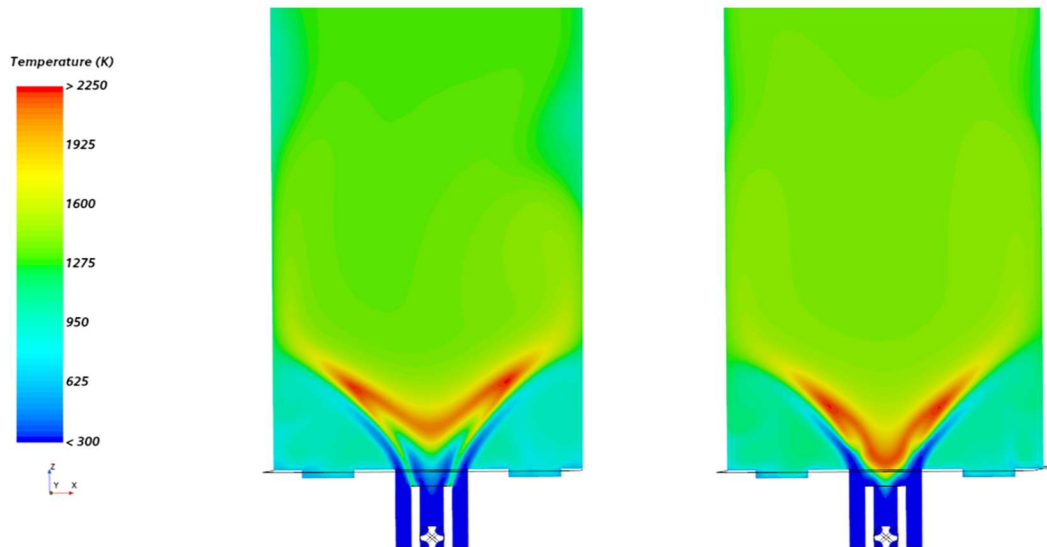


Abbildung 5. Temperaturverlauf von Flamme A (links) und L (rechts)

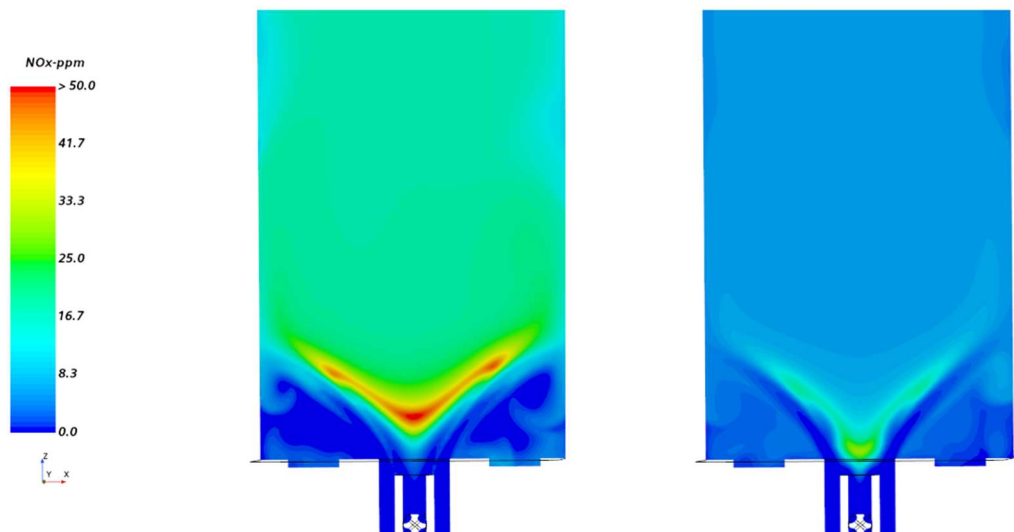


Abbildung 6. NO_x-Verteilung von Flamme A (links) und L (rechts)

3. Simulation eines industriellen Dampferzeugers mit 80 MW thermischer Leistung

Aufgrund der guten Übereinstimmung des Modells mit den Messwerten des Laborbrenners werden die genutzten CFD-Modelle auch für die Simulation des hier vorgestellten Dampferzeugers genutzt, wobei aber noch einige Zusatzannahmen gemacht werden müssen. Im Gegensatz zu einem Laborbrenner ist auf industriellen Anlagen von einer nicht vernachlässigbaren Menge an Kohlenwasserstoffen selbst im Falle von scheinbar „reinem“ Wasserstoffbetrieb auszugehen. Außerdem bleibt Erdgas im Mischbetrieb weiter ein wichtiger Brennstoff, so dass in der Realität verschiedene Lastfälle mit variierendem

Wasserstoffanteil erfolgreich gefahren werden müssen. Bei den Abnahmetests der gezeigten Anlage wurden 4 Lastfälle mit steigendem Wasserstoffanteil geprüft, wobei Lastfall P1 reiner Erdgasbetrieb ist. In der Tabelle 3 sind die wesentlichen Betriebsparameter aufgeführt, sowie in der letzten Spalte der Mittelwert der gemessenen NO_x-Werte im Rauchgas bezogen auf 3% Sauerstoff. Der Fall mit maximalem Wasserstoffanteil von 95 Vol. % enthält 5 Vol. % Erdgas, was aufgrund des Dichteunterschiedes zu einem immer noch signifikanten Beitrag des Erdgases zur thermischen Leistung führt. Um dies in der chemischen Kinetik zu berücksichtigen, werden die Methan-Reaktionen des San-Diego Mechanismus mitberücksichtigt und die Reaktionen höherer Kohlenwasserstoffe wie eingangs erwähnt in einer Ein-Schritt-Aufspaltung in CO und H₂ mit Lindstedt-Jones-Kinetik [6] modelliert.

Tabelle 3. Lastfälle des Dampferzeugers bei Abnahmetest

Lastfall	H ₂ -anteil [%]	Luftzahl	Rezi Mass. [%]	P _{th} [MW]	Dampf [t/h]	NO _x gemessen [ppm tr.]
P1	0	1,11	5,3	73	94	43
P2	50	1,08	12,0	78	103	42
P3	75	1,07	16,2	77	102	42
P4	95	1,08	21,1	67	88	41

Die Limitierung des H₂-Anteils auf 95% ergibt sich bei dieser Anlage (Dampferzeuger einer Raffinerie) dadurch, dass als Betriebsmittel neben Erdgas ein sogenanntes „Rich Gas“ zur Verfügung steht, dass neben 95% Wasserstoff auch noch 0,6% Methan und jeweils ca. 1,6% Ethan und Propan und geringe Mengen höherer Kohlenwasserstoffe enthält. Der eigentliche Brennstoff wird durch die Mischung von Rich Gas und Erdgas bereitgestellt. Die Zusammensetzung des hier eingesetzten Erdgases ist in Tabelle 4 angegeben.

Tabelle 4. Zusammensetzung des Erdgases

Komponente	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	CO ₂	N ₂
Vol.-Anteil [%]	91,32	5,69	0,45	0,02	1,89	0,63

Bei den Emissionsmessungen wurden bei allen vier Lastfällen sehr ähnliche NO_x-Werte festgestellt. Dies konnte dadurch erreicht werden, dass mit zunehmendem Wasserstoffanteil eine höhere Menge an Rauchgas rezirkuliert und der Verbrennungsluft beigemischt wurde. Für reines Erdgas ist bereits ein Rezi-Anteil von 5% ausreichend (Volumenstrom Rauchgas bezogen auf Frischluftvolumenstrom), wohingegen bei nahezu reinem Wasserstoff aufgrund der deutlich höheren Flammentemperatur ein Rezi-Anteil von 21% erforderlich ist. Ein Indiz für den Einfluss des Wasserstoffanteils auf die Flammentemperatur insbesondere im Brennernahbereich lieferten die Daten von Thermoelementen, die am unteren Brenner vorne an der Brennerkehle in 12 Uhr Position befestigt waren. Diese sind in der folgenden Abbildung zusammen mit der vom CFD-Modell berechneten Temperaturverteilung dargestellt.

Man erkennt deutlich, dass ein Unterschied von mehr als 200K bei Wasserstoffbetrieb im Vergleich zu reinem Erdgas vorliegt, was sich auch sehr gut mit den Daten der Messungen deckt. Auch die maximalen Temperaturen der eigentlichen Flamme sind bei Wasserstoffbetrieb höher, obwohl durch die Rauchgasbeimischung der Sauerstoffgehalt der Verbrennungsluft bereits deutlich abgesenkt ist.

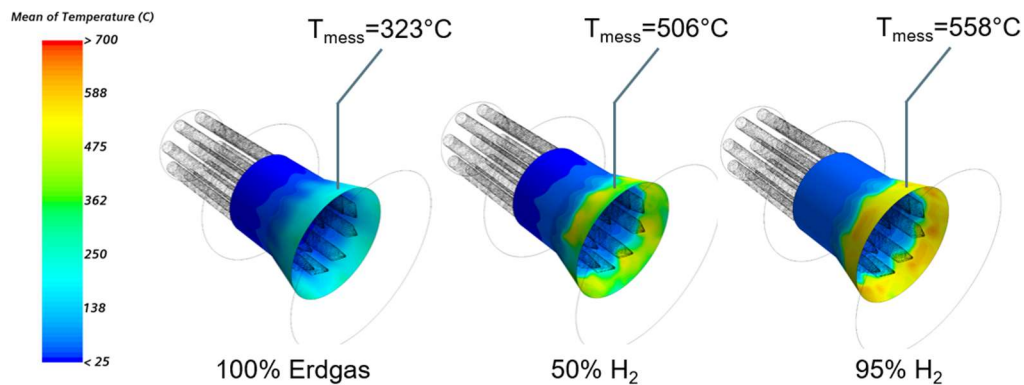


Abbildung 7. Temperatur der Brennerkehle in Abhängigkeit des H₂-Anteils

Eine Gegenüberstellung der Temperaturverteilung im Feuerraum auf zwei Schnittebenen für jeweils Erdgas- und Wasserstoffbetrieb findet sich in der folgenden Abbildung 8. Man erkennt, dass im Vergleich zu Erdgas die Wasserstoffflamme schlanker und etwas heißer ist, wobei die Temperaturerhöhung aufgrund der hier deutlich höheren Rauchgasrezirkulation vergleichsweise moderat ausfällt. Eine Testrechnung mit ebenfalls 5% Rauchgasrezirkulation zeigte sehr viel höhere Temperaturen bei doppelt so hohen NO_x-Werten.

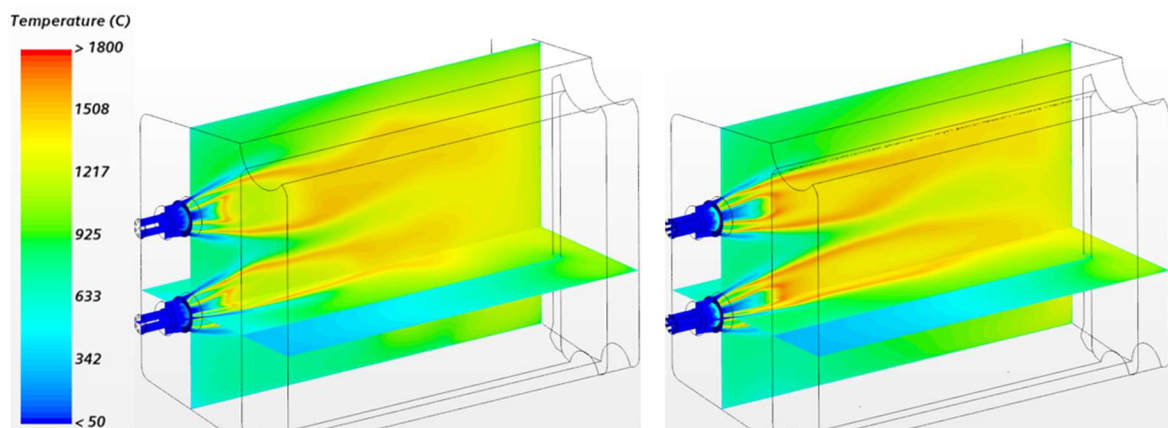


Abbildung 8. Flammentemperatur bei Erdgas- (P1, links) und Wasserstoffbetrieb (P4, rechts)

Für die Bildung von Stickoxiden ist die Gastemperatur natürlich ein entscheidender Faktor, der aber durch die Zumischung von sauerstoffarmem Rauchgas so reguliert wird, dass im Betrieb in allen Lastfällen ein Niveau von im Mittel 40 bis 43 ppm erreicht wurde, was auch vom verwendeten CFD-Modell gut wiedergegeben wurde. Eine Abweichung mit beim CFD-Modell etwas zu geringen NO_x-Werten lag lediglich beim reinen Erdgasfall vor, was hier auf die Verwendung des San-Diego Mechanismus zurückzuführen sein dürfte, da dieser aufgrund seiner Performance für die Wasserstoffflamme des Laborbrenners ausgewählt wurde. Tatsächlich zeigte eine weitere Rechnung des Erdgasfalles mit dem Gri-Mech-2.11 Mechanismus, der gezielt auf Methanverbrennung hin optimiert wurde [13], höhere und realistischere Werte.

In Abbildung 9 ist die NO_x-Verteilung der Fälle P1 und P4 im Vergleich dargestellt.

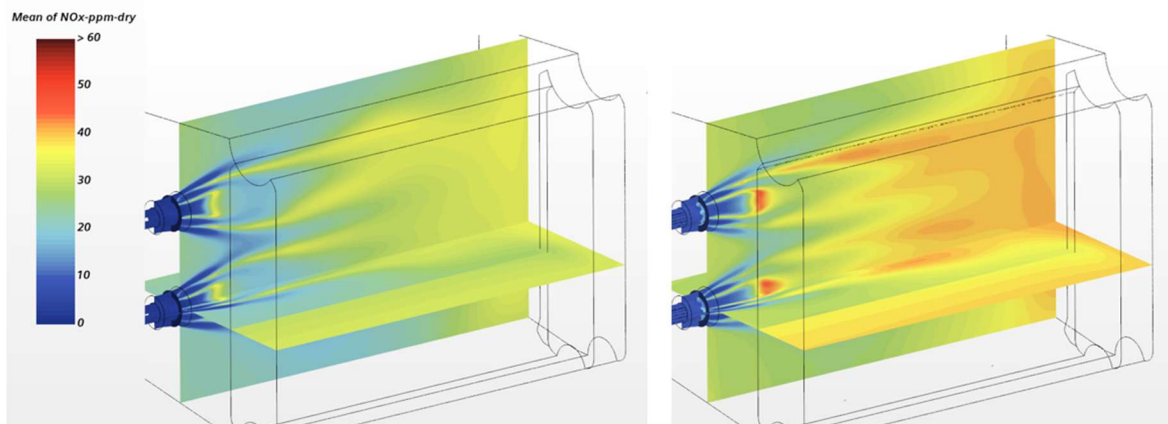


Abbildung 9. NOx-Verteilung bei Erdgas- (P1, links) und Wasserstoffbetrieb (P4, rechts)

Man kann erkennen, dass die Hauptzonen der NOx-Bildung erwartungsgemäß mit dem Temperaturverlauf korrelieren und in den Bereichen mit dem höchsten Brennstoffumsatz stattfinden. Da dieser wiederum durch die Rauchgasrezirkulation verzögert wird, liegen am hinteren Teil des Kessels große Bereiche mit ähnlicher NOx-Konzentration vor, da hier schon eine weitgehende Vermischung aller Komponenten stattgefunden hat. Das Diagramm in Abbildung 10 enthält alle aufgezeichneten Messwerte für die 4 Lastfälle und die zugehörigen Werte des CFD-Modells.

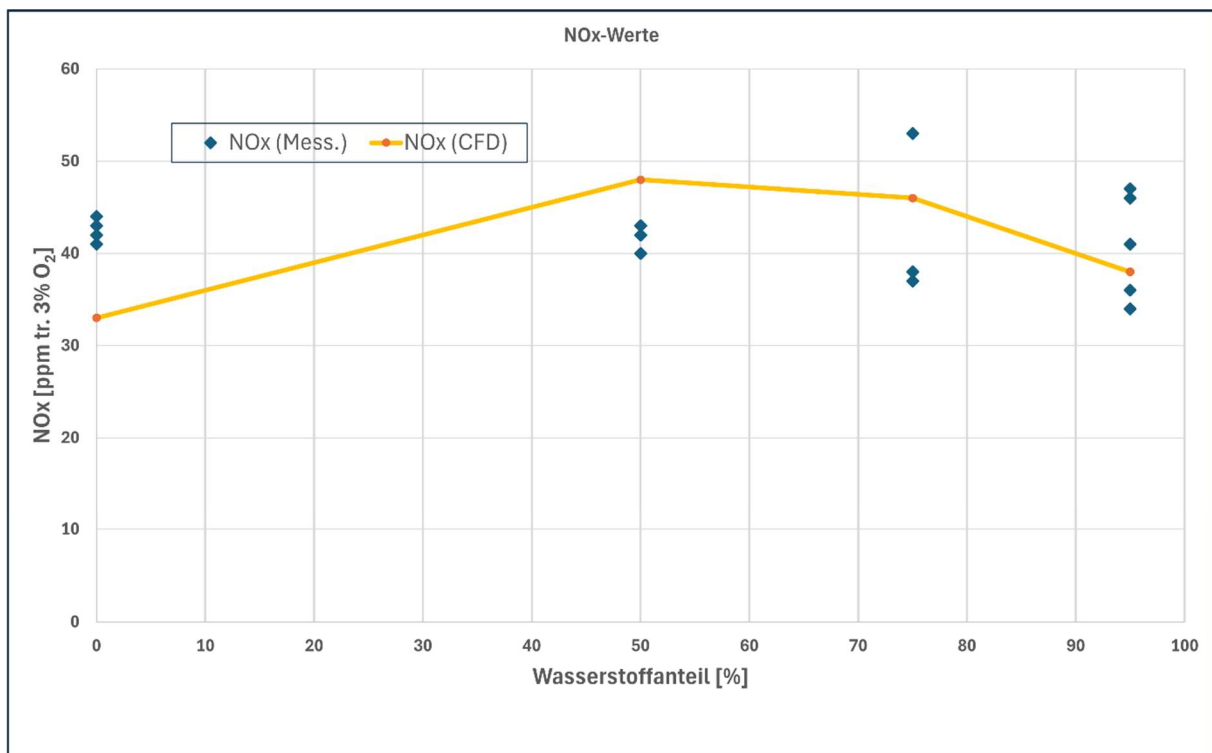


Abbildung 10. NOx-Messwerte und CFD-Werte über dem Wasserstoffanteil des Brenngases

Bei den Messwerten handelt es sich um punktuelle Einzelmessungen zu verschiedenen Zeitpunkten, die CFD-Werte geben den massenstromgemittelten Wert über dem Austrittsquerschnitt hinter dem Bündelbereich an. Wie bereits erwähnt, gibt es eine kleine Abweichung nach unten beim reinen Erdgasfall, wohingegen die NOx-Vorhersage des CFD-Modelles bei allen Fällen mit höherem Wasserstoffgehalt mit hinreichender Genauigkeit zutrifft.

4. Fazit

Es wurde gezeigt, dass die industrielle Verbrennung von Wasserstoff (bzw. Gemischen mit hohem Wasserstoffanteil) mit bestehender Brennertechnologie beherrschbar und auch simulationstechnisch in Bezug auf Temperaturverlauf und NO_x-Emissionen reproduzierbar ist.

Der wichtigste Parameter zur Minderung der NO_x-Emissionen ist die Menge des rezirkulierten Rauchgases, womit ein für verschiedene Lastfälle mit variierendem Wasserstoffgehalt gleichbleibend niedriger Level an NO_x im Rauchgas sichergestellt werden kann.

Mittels CFD-Simulationen kann die benötigte Rauchgas-Rezirkulationsmenge korrekt vorhergesagt werden. Eine Modellauswahl, die die NO_x-Bildung an einem genau vermessenen Laborbrenner reproduzieren konnte, ist auch auf eine großtechnische Anlage übertragbar.

Literatur

- [1] Aniello A., Laera D., Marragou S., Magnes H., Selle L., Schuller T., Poinot T., *Experimental and numerical investigation of two flame stabilization regimes observed in a dual swirl H₂-air coaxial injector*, Combustion and Flame, Volume 249, (March 2023).
- [2] Conaire M., Curran H., Simmie J., Pitz W., Westbrook C., *A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation*, Int. Journ. Chemical Kinetics 36, 603-622, (2004)
- [3] Andreini A., Facchini B., Innocenti A., Cerutti M., *Numerical analysis of a low NO_x partially premixed burner for industrial gas turbine applications*, Energy Procedia 45, 1382-1391, (2014)
- [4] Daurer G., Schwarz S., Demuth M., Gaber C., Hochenauer C., *Experimental and numerical analysis of industrial-type low-swirl combustion of hydrogen enriched natural gas including OH* chemiluminescence imaging*, Int. Journ. Hydrogen Energy 80, 890-906, (2024)
- [5] Marinov N., Westbrook C., Pitz W., *Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen*, Transport phenomena in combustion 1, 118-129, (1996)
- [6] Jones, W. P., & Lindstedt, R. P., *Global reaction schemes for hydrocarbon combustion*, Combustion and flame, 73(3), 233-249, (1988)
- [7] Leiser S., Schnell U., Scheffknecht G., *A kinetic homogeneous reaction model for oxy-fuel combustion*, 9th International Conference on Energy for Clean Environment. povoa de Varzim, Portugal. (July 2-5 2007)
- [8] Zettervall, N., *Methodology for developing reduced reaction mechanisms, and their use in combustion simulations*, PhD Thesis, Department of Physics, Lund University, (2021)
- [9] Si J., Wang G., Li P., Mi J., *Optimization of the Global Reaction Mechanism for MILD Combustion of Methane Using Artificial Neural Network*, Energy Fuels 34, 3805-3815, (2020)
- [10] <https://tnfworkshop.org/hydrogen-flames/>
- [11] <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>
- [12] <https://c3.universityofgalway.ie/combustionchemistrycentre/mechanismdownloads/>
- [13] <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>