



Modelling of coal combustion with SimuSage within the VerSi project

Matthias Dohrn, Michael Müller Masood Azizi, Klaus Hack, Moritz to Baben

Institute for Energy and Climate Research, IEK-2, Thermochemistry GTT Technologies

GTT Usermeeting 2017, Herzogenrath, 29th June 2017







VerSi-EM

Prediction of Deposit Formation via Thermochemical Modelling and CFD Modelling

Basic Experiments and Thermochemical Modelling







High load



Low load



Power plants in Germany





59 lignite boilers at 19 locations with 19.8 GW net capacity

82 hard coal boilers at 41 locations with 26.7 GW net capacity













SimuSage User Interface 🕗 JÜLICH







Elements in Database 🕗 JÜLICH



- Alkalis: Na, K
- > Alkaline earths: Mg, Ca
- Network former: AI, Si
- Amphoteric: Fe
- Elements from ultimate analysis: C, H, S, O, N
- Halogens: CI
- Additional elements: (Ti), (P)
- 13 elements in total (without Ti and P):
 - 54 gas species
 - 219 pure solids
 - 56 solutions





SimuSage User Interface JÜLICH



Process Flow 1 Process Flow 2 Process Flow 3 Process Flow 4 Process Flow 5 Result Table

The results (phases amounts) from all reactors:

Reactors\Phases	gas_ideal	MULLITE	Slag#1	SiO2_SiO2_cristo_b_S4	CORDIERITE	Al2CaSi2O8_ANORTHITE(s)	CORUNDU
Equil_1	1368.66567041318	0.0421448226228958	6.25375245162356	0.0	0.0	0.0	0.0
Wall_1	136.865649241352	0.0367784445370387	0.59372908319685	0.0	0.0	0.0	0.0
Equil_2	1368.64987267188	0.594725021343513	5.16879171652212	0.0	0.0	0.0	0.0
Coarse_1R	0.0	0.0	0.0	0.409906	0.0	0.0	0.0
Main_1R	1368.66548705986	0.0529671013512181	6.197613958694	0.0	0.0	0.0	0.0
Coarse_2R	0.0	0.0	0.0	0.364406434	0.0	0.0	0.0
Main_2R	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Equil_3	1368.64125992408	0.921768382758592	4.25681281136632	0.118079548317773	0.0224861908765044	0.0	0.0
Wall_2	136.864480761794	0.0782792743596259	0.498578904981653	0.0	0.0	0.0	0.0
Wall_3	136.863758806165	0.104238581402732	0.361337471282437	0.0534567684158498	0.0132490584112904	0.0	0.0
Equil_4	1368.63460662263	1.06565856183877	2.4479972955547	0.869032806553436	0.246342743041347	0.170185901335095	0.2108797
Coarse_3R	0.0	0.0	0.0	0.31885562975	0.0	0.0	0.0
Main_3R	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Equil_5	1368.62970771899	1.08559012007664	1.46916420102713	1.19796069688074	0.324330986758957	0.401500396482573	0.3909973
Wall_4	136.863233553439	0.107181989523267	0.190977235899061	0.104935110932638	0.0304127641496596	0.0338521683265653	0.0338775
Wall_5	136.862249328673	0.110892271827002	0.132778640384193	0.12724129852878	0.0333347162237137	0.0415715852020157	0.0418573
Equil_6	1368.63045399192	1.09761621800556	0.0	0.0	0.353026373387177	0.513660318738335	0.4863810
Wall_6	136.863043828787	0.110184333355814	0.0	0.0	0.035203946010377	0.0513660318742095	0.0485403
Equil_7	1368.48260703802	1.40631775576274	0.0	0.0	0.351086214055478	0.0	0.4647098
Wall_7	136.84826024278	0.141006957156647	0.0	0.0	0.0350055258691155	0.0	0.0464613
Equil_8	1368.37550858953	1.58477452317198	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4537145
Equil_9	1368.27029643896	1.80294924344419	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4421871
Wall_8	136.837550826419	0.158683818778778	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0454463
Wall_9	136.827029636211	0.180413253232202	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0444079
Equil_10	1368.27029635035	1.80544277424342	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4487665

GTT - TECHNOLOGIES		
Gr	Visualization	JÜLICH FORSCHUNGSZENTRUM
Datei A C:\Users\mdohrn\Desktop\Steinkohlen\SKC\Einzel\SKC_SFP08_WR.xls	Datei B C:\Users\mdohrn\Desktop\Steinkohlen\SKC\Einzel\SKC_SFP10_WR.xls Diagramme Diagramme	und Tabellen speichern Einheit [kg] Gas_ideal Filterr
•	Programmstopp	\bigcirc
Mit diesem Tool können zwei von SimuSage erzeugte xls-Dateien verglichen wer werden jeweils zum vollen Prozentsatz (immer positiv) angezeigt. Phasen die nu schlussendlich (wenn erwünscht) in eine neue Excel-Datei kopiert (zuzüglich der Diagramm Vergleich Diagramm Daten A Diagramm Daten B Diagram	rrden. Die Daten der beiden Dateien werden zuerst ausgelesen und in Gewichtsprozent umgewandelt. Anschließend werden gleiche Phasen prozentual ur in Datei A vorkommen, sind an der entsprechenden Stelle der Datei A in der Tabelle zu finden. Phasen die nur in der Datei B vorkommen, werden ans r Ausgangstabellen) und im Ordner der Datei A hinterlegt. mm Flugphase Vergleich Diagramm Wand Vergleich Vergleichsdaten Vergleichsdaten Flugphase Vergleichsdaten Wand Daten A Da	verglichen. Phasen, die nur in einer Datei vorkommen : Ende der Tabelle angehängt. Die gesamte Tabelle wird
		AI2CaSi2O8_ANORTHITE(s)
1400M -		
1400R -		CORUNDUM#1
1400 -		✓ Ca2K2S3O12_S2(s2)
1300M -		CaS4Mg3O16_S1(s)
1300R -		CaSO4_S1(s)
1300 -		FSPA
1250 -		Gas_ideal
1200M -		K2S3Mg2O12_S1(s)
1200		
°C 1150 -		Na6CaS4O16_S1(s)
1100 -		✓ SiO2_SiO2_cristo_b_S4
1050] -	and a second provide the second provide second provide second provide second provide second provide second provide second s	SiO2_SiO2_quartz_a_S1
050 -		✓ SIO2_SIO2_quartz_b_S2
900 -		
850 -		
800 -		V Phase Q
750 -		V Phase K
650 -	<mark> </mark>	Phase S
600 -		Dhase I
550 -		
25 -		
0 5 10 15 20 25	30 35 40 45 50 55 60 65 70 75 80 85 90 95	100 Phase V
	Gewichtsprozent	Pridse T

GTT - TECHNOLOGIES	
	arison of Results
	FORSCHUNGSZENTRU
tei A	Datei B
C:\Users\mdohrn\Desktop\Steinkohlen\SKC\Einzel\SKC_SFP08_WR.xls	C:\Users\mdohrn\Desktop\Steinkohlen\SKC\Einzel\SKC_SFP10_WR.xls Diagramme und Tabellen speichern Einheit [kg] Gas_idea
	Programmstopp 🥥 🥥
t diesem Tool können zwei von SimuSage erzeugte xls-Dateien verglichen werden. Die Dater	n der beiden Dateien werden zuerst ausgelesen und in Gewichtsprozent umgewandelt. Anschließend werden gleiche Phasen prozentual verglichen. Phasen, die nur in einer Datei vorkomme
rden jeweils zum vollen Prozentsatz (immer positiv) angezeigt. Phasen die nur in Datei A vor ilussendlich (wenn erwünscht) in eine neue Excel-Datei kopiert (zuzüglich der Ausgangstabe	rkommen, sind an der entsprechenden Stelle der Datei A in der Tabelle zu finden. Phasen die nur in der Datei B vorkommen, werden ans Ende der Tabelle angehängt. Die gesamte Tabelle w ellen) und im Ordner der Datei A hinterlegt.
Jiagramm Vergleich Diagramm Daten A Diagramm Daten B Diagramm Flugphase V	Vergleich Diagramm Wand Vergleich Vergleichsdaten Vergleichsdaten Flugphase Vergleichsdaten Wand Daten A Daten B
	✓ AI2CaSi208_ANORTHITE(s) →
<u>1400</u> -	
1200	V Cas4Mq3016 S1(s)
<u>1300</u>] -	🔽 Ca504_51(s)
	E SPA
	Gas_ideal 🔚
1100 -	v x2s3Mg2012_S1(s)
•C 1000 -	
	V SIO2_SIO2_CIISt0_8_34
900 -	view in the second s
	Slag≢1
	🔤 🖉
	📰 🕹 🖓 Phase Q 🔚
	🖉 🛛 🕹 🔜 🖉 Phase R
600 -	🔚
	🔚 🕹 🕹 🖉 Phase T
450 -	Phase U
	And a state of the
- ¹	
-8 -7 -6 -5 -4 -3	-2 -1 0 1 2 3 4 5 6 7 8 V Phase X
	Ocwicinsprozeni







Example calculation



South African (Kleinkopje) hard coal calculation without quartz bypass







Example calculation



South African (Kleinkopje) hard coal calculation with 20% quartz bypass









South African (Kleinkopje) hard coal calculation with 50 % quartz bypass









South African (Kleinkopje) hard coal **Comparison (0% vs 20 % bypass)**



Phases are higher in 20% calculation $\leftarrow \rightarrow$ Phases are higher in 0% calculation







South African (Kleinkopje) hard coal **Comparison (0% vs 50 % bypass)**



Phases are higher in 50% calculation $\leftarrow \rightarrow$ Phases are higher in 0% calculation



Modelling issues



Database export:

- Number of solutions higher than 40
 - Solution: Newest FactSage version (7.1) for database export necessary Newest SimuSage version (7.3) for calculations necessary
- Number of elements is limited by "Slag" solution
 - Solution: Remove elements with high amount of cross reactions in "Slag" solution like P or Ti

Calculations:

 \succ

- Equilibrium composition not obtained
 - Solution: In progress...
- Overestimation of "Slag"
 - Solution: Definition of critical amount of "Slag" using the "sticking factor"







Model:

- Calculations with cyclic load changes
- Addition of further coal streams
- Database for coal data (including names)
- Ease output graphics for non-mineralogists

Calculations:

- Solve "Equilibrium composition not obtained" error
- Perform calculations for all hard coals and lignites in the VerSi project

Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft



Thank you for your attention!

