

Lappeenrannan teknillinen yliopisto

School of Energy Systems

Energiatekniikan koulutusohjelma

BH10A0202 Energiatekniikan kandidaatintyö

Tulipesätase FluidProp-ohjelmalla
Furnace heat balance with FluidProp

Työn tarkastaja: Kari Myöhänen

Työn ohjaaja: Kari Myöhänen

Lappeenranta 23.1.2018

Kalle Malinen

TIIVISTELMÄ

Kalle Malinen 0413315

LUT School of Energy Systems

Energiatekniikan koulutusohjelma

Opinnäytetyön ohjaaja: Kari Myöhänen

Kandidaatintyö 2018

36 sivua, 9 kuvaa, 7 taulukkoa ja 2 liitettä.

Hakusanat: Energiatase, Ainetase, FluidProp, Kiertoleijupetikattila, Tulipesäreaktiot

Voimalaitosten hyötysuhteen maksimoimiseksi on usein mallinnettava erilaisia käyttötilanteita. Voimalaitoksen tulipesän mallinnus on nykyaikaisten kattiloiden osalta monimutkaista ja vaatii usein siihen erikseen tarkoitettuja luotuja kaupallisia ohjelmistoja. Myös muidenkin polttoprosessien kehityksessä on perusteltua käyttää mallinnustyökaluja hyötysuhteen optimointiin. Yksinkertaisten ja edullisten mallinnusohjelmien kirjo ei ole valtava, vaan kehittäjän on usein luotava malli lähes alusta asti itse.

Tässä opinnäytetyössä tarkastellaan voimalaitosten tulipesässä tapahtuvia reaktioita yleisellä tasolla ja tarkemmin kiertoleijupetikattilan osalta. Opinnäytetyöhön liittyen tehtiin Microsoft Excel -pohjainen kiertoleijupetikattilan energiataseen mallinnustyökalu. Laskentatyökalun avulla selvitetään ilmaisesti saatavissa olevan Asimptoten valmistaman FluidProp-ohjelmiston soveltuvuutta energiatekniikan mallinnuksiin. FluidPropia käytetään mallinnustyökalun fluidin tuntuvien entalpioiden määrittämiseen. Laskentatyökalu on sovellettavissa myös muille polttoprosesseille.

FluidProp soveltuu hyvin käytettäväksi energiatekniikan prosessien yksinkertaisiin mallinnustarpeisiin, sekä apuvälineenä monimutkaisemmissa tapauksissa. FluidProp itsessään ei aiheuta virhettä, vaan virhe tulee käytettävistä termodynaamisista tietokannoista. Maksullisten tietokantojen ja ominaisuuksien avulla sen käyttö on vielä huomattavasti monipuolisempaa.

SISÄLLYSLUETTELO

Tiivistelmä	2
Sisällysluettelo	3
Symboli- ja lyhenneluettelo	4
1 Johdanto	6
2 Tulipesäprosessit	8
2.1 Palamisreaktiot	8
2.2 Tuhkareaktiot.....	9
2.3 Rikin- ja typenpoistomenetelmät.....	10
3 Massa- ja ainetase	13
3.1 Massa- ja ainetase tulipesässä	13
3.2 Savukaasun koostumus ainetaseen kautta	14
4 Energiatase	16
4.1 Energiatase tulipesässä	18
4.2 Nykyaikaisten tulipesien energiataset	20
5 Kiertoleijupetikattilan energia- ja massatase	22
5.1 Kiertoleijupetikattila.....	22
5.2 Kiertoleijupetikattilan tulipesän massa- ja ainetase	25
5.3 Kiertoleijupetikattilan tulipesän energiataset	26
6 FluidProp	28
6.1 FluidProp:n laskennan tarkastelu	29
6.2 Energiataset FluidPropilla	32
6.3 Virheiden tarkastelu	33
7 Yhteenveto	35
Lähdeluettelo	36
Liite 1. Fluidprop:n yksikköjärjestelmät	38
Liite 2. Laskentaohjelman päätaulukot	40

SYMBOLI- JA LYHENNELUETTELO

Roomalaiset aakkoset

A	pinta-ala	[m ²]
c	ominaislämpökapasiteetti	[kJ/(kg×K)]
d	halkaisija	[m]
E	energia	[kJ]
g	gravitaatiovakio	[m/s ²]
H	entalpia	[J/kg]
h	korkeus	[m]
m	massa	[kg]
n	ainemäärä	[n]
p	paine	[Pa]
T	lämpötila	[K]
U	sisäenergia	[kJ/kg]
U	lämmönläpäisyyluku	[kJ/(m ² ×K)]
V	tilavuus	[m ³]
v	nopeus	[m/s]
Q	lämpöteho	[W]

Kreikkalaiset aakkoset

Δ	muutos kahden tilan välillä	
ρ	tiheys	[kg/m ³]

Yläindeksit

—	keskimääräinen	
ˆ	suhteessa massaan	

·
suhteessa aikayksikköön

Alaindeksit

<i>1</i>	alkutilan suure
<i>2</i>	lopputilan suure
<i>a</i>	ilma
<i>ash</i>	tuhka
<i>f</i>	polttoaine
<i>g</i>	savukaasu
<i>in</i>	sisäänvirtaus
<i>l</i>	kalkkikivi
<i>out</i>	ulosvirtaus
<i>v</i>	tilavuus

Lyhenteet

<i>kin</i>	kineettinen
<i>NO_x</i>	typenoksidit
<i>NTP</i>	normaali lämpötila ja paine (273,15 K ja 1 atm)
<i>pot</i>	potentiaali
<i>SO_x</i>	rikinoksidit

1 JOHDANTO

Nykyaikaisten voimalaitosten tulipesiin syötetään polttoaineen ja palamisilman lisäksi monia muita aineita, mikä tekee massa- ja energiataseen määrittelemisestä hyvin monimutkaista. Yksinkertaisimmillaan palaminen tarvitsee vain kolme eri komponenttia: palavaa ainesta, tarpeeksi lämpöä sekä happea (Raiko ym. 1995, s.139).

Polttoaineen lisäksi tulipesään syötetään usein myös apuaineita. Näiden aineiden tarkoitus on vähentää poltossa syntyviä haitallisia päästöjä esimerkiksi typen- (NO_x) ja rikinoksidien (SO_x) määrää savukaasuissa. Apuaineita voidaan myös syöttää kattilan toimintavarmuuden parantamiseksi. (Raiko ym. 1995. s. 230-231.)

Voimalaitosprosessin tulipesässä tapahtuu polttoaineen palamisreaktion lisäksi monia muita reaktioita. Tulipesän reaktiot voidaan jakaa niiden aiheuttaman potentiaalienergian muutoksen suhteen kahteen eri ryhmään. Reaktiot, jossa potentiaalienergia on pienempi lopputuotteissa kuin alkutuotteissa ovat eksotermisia. Sen sijaan reaktiot, jossa potentiaalienergia on suurempi lopputuotteissa, ovat endotermisia. Pääasiassa tulipesässä tapahtuvat reaktiot ovat eksotermisia, ja yleisimpiä näistä ovat polttoaineen palamis- ja kaasutusreaktiot. Endotermisia reaktioita tapahtuu enemmän apuainereaktioissa esimerkiksi kalsinointireaktiossa. Kyseisessä reaktiossa kalkkikiven sisältämä kalsiumkarbonaatti (CaCO_3) muuttuu lämpötilan vaikutuksesta kalsiumoksidiksi (CaO). Kalsiumoksidi reagoi tulipesässä rikkidioksidin kanssa muodostaen kalsiumsulfaattia (CaSO_4) ja näin vähentää ympäristölle haitallisen rikkidioksidin osuutta savukaasuissa. Jälkimmäistä reaktioita kutsutaan sulfanoinniksi. (Rayaprolu 2009, s. 509-510.) Energiataseen määrittelemiseksi on määriteltävä kaikkien merkittävien reaktioiden potentiaalienergian muutokset ja ainevirtojen avulla määritellä niiden energiavirrat. (Rayaprolu 2009, s. 14-15.)

Massa- ja energiataseiden määrittely tapahtuu yleensä mallinnusohjelmalla. Mallinnusohjelmien kirjo on laaja ja uusia kehitetään jatkuvasti. Usein nämä mallinnusohjelmat vaativat käyttäjältä myös paljon perehtymistä kyseiseen ohjelmaan. Työn tarkoituksena on rakentaa yksinkertainen mallinnusohjelma Asimptoten FluidProp-ohjelmaa käyttäen, sekä samalla selvittää sen käytettävyyttä voimalaitosprosessin tulipesätaseen laskentaan. FluidProp-ohjelma itsessään ei ole valmis mallinnustyökalu tulipesä prosesseihin, vaan sen avulla toteutetaan oma Microsoft Excel -pohjainen mallinnustyökalu, jota voidaan

tulevaisuudessa jatkokehittää. Opinnäytetyö on jaettu kahteen osaan: kirjallisuuskatsaukseen tulipesän prosesseista ja taselaskennasta sekä laskelmaohjelman luomiseen. Kirjallisuusosassa katsotaan asioita erityisesti kiertoleijupetikattilan kannalta ja perehdytään myös FluidProp-ohjelman käyttöön ja toimintaan. Laskentaohjelman toimintaa tarkastellaan kirjallisuustyön loppupuolella ja tutkitaan laskennassa syntyneitä virheitä.

2 TULIPESÄPROSESSIT

Tulipesän prosessit koostuvat erilaisista endo- ja eksotermisistä reaktioista. Tärkeimpiä reaktioita tulipesässä ovat polttoaineen palaminen ja kaasutus. Kiinteän polttoaineen palamis- tai kaasutusreaktiot voidaan jakaa kolmeen vaiheeseen, jotka ovat kuivuminen, pyrolyysi, eli polttoaineessa kiinteässä olomuodossa olevien haihtuvien aineiden kaasuuntuminen, ja jäännöshiilen palaminen tai kaasutus (Raiko ym. 1995, s.139 ja 153). Lisäksi palamisreaktioissa muodostuneet yhdisteet reagoivat edelleen. Polttolaitoksissa reagointi tapahtuu pääosin palamisreaktioissa, mutta kaasutuslaitoksissa nämä yhdisteet ovat osa esimerkiksi vaihtokonversioreaktiota (Myöhänen 2011, s. 87 ja 92-93). Näiden jälkeen tulipesässä tapahtuu vielä tuhkaraktioita, sekä erilaisia apuaineiden reaktioita merkittävimpinä typin- ja rikinsidonta.

Kookkailla polttoainehiukkasilla palamisreaktion vaiheet voivat tapahtua osittain päällekkäin. Tulipesässä tapahtuu kaikkia palamisreaktioita samanaikaisesti. Joissakin tulipesätyypeissä, esimerkiksi vinoarinassa, voivat palamisreaktion vaiheet olla selkeästi erotettavissa, kun taas joissakin tyypeissä, esimerkiksi kiertoleijupetikattiloissa, on mahdollista eritellä palamisreaktioita silmämääräisesti. Polttoaineen palamisreaktioiden nopeuteen vaikuttavat sen kemialliset ja fysikaaliset ominaisuudet, sekä palamisatmosfäärin ominaisuudet. (Raiko ym. 1995, s.139.)

2.1 Palamisreaktiot

Palamisen ensimmäinen vaihe on polttoaineen kuivuminen ja siinä samassa polttoainehiukkasen lämpeneminen. Tässä vaiheessa polttoainehiukkasen lämpötila on lähellä veden kiehumislämpötilaa, jolloin polttoaineessa oleva vesi höyrystyy. Veden kiehumisnopeutta rajoittaa lähinnä kappaleen lämmönsiirto, koska palamisreaktio tapahtuu yleisesti korkeissa lämpötiloissa. (Raiko ym. 1995, s.142.)

Seuraava vaihe on haihtuvien vapautuminen eli pyrolyysi. Haihtuvat aineet (eng. volatile matter), eli polttoaineen osuus, joka haihtuu korkeassa lämpötilassa, muuntuu hiukkaseen tuodun lämmön seurauksena kaasuksi. Pyrolyysituotteet syttyvät joko ulkoisen energialähteen avulla tai korkean lämpötilan johdosta. Pyrolyysin nopeuteen vaikuttaa tulipesän olosuhteissa lähinnä kemiallinen kinetiikka sekä lämmön- ja aineensiiro hiukkasessa.

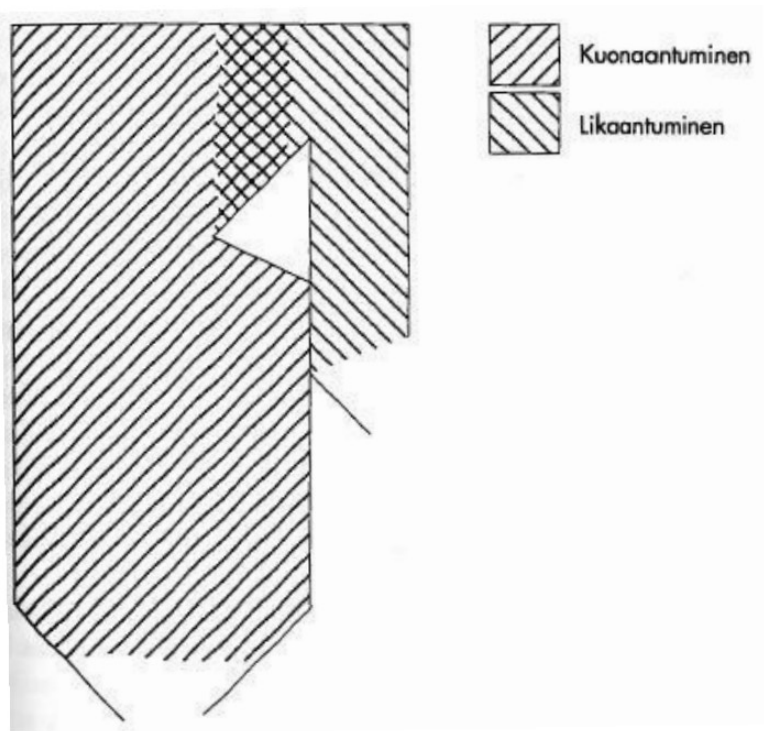
(Raiko ym. 1995, s.145-146). Pyrolyysireaktion avulla voidaan myös tuottaa erilaisia bioöljyjä. Tällöin pyrolyysi toteutetaan sellaisissa olosuhteissa, jossa haihtuvat aineet eivät pääse syttymään polttoainehiukkasen pinnalla. (Boslaugh 2014.)

Pyrolyysin jälkeen polttoainehiukkanen koostuu pääosin hiilestä. Tätä osaa polttoaineesta kutsutaan jäännöshiileksi (engl. char tai char coal). Jäännöshiilen palamisreaktiossa palaa loput palavista aineista ja muodostuu suurin osa tuhkasta. Jäännöshiilen reaktion nopeuteen vaikuttaa kemiallinen kinetiikka ja hapen tunkeutuminen palavan hiukkasen luokse. (Raiko ym. 1995, s.153.)

2.2 Tuhkareaktiot

Tuhka koostuu pääosin polttoaineen epäorgaanisista aineista. Tämä epäorgaaninen aine voi tulipesässä ollessaan vielä hapettua. Käytännön tilanteissa on tuhkan seassa myös vähän palamatonta polttoainetta. Tuhkasta osa lähtee savukaasuvirtauksen mukana ulos kattilasta ja osa tuhkasta tippuu kattilan alaosaan. Savukaasun seassa olevaa tuhkaa kutsutaan lentotuhkaksi ja kattilan alaosaan tippuvaa tuhkaa pohjatuhkaksi.

Tuhka aiheuttaa myös kattilan pintojen likaantumisen. Likaantumista esiintyy kattilan lämmönsiirtopinnoilla ja se heikentää lämmönsiirtopintojen toimintakykyä. Tuhkan aiheuttama likaantuminen voidaan jakaa kahteen kategoriaan, jotka ovat likaantuminen (engl. fouling) ja kuonaantuminen (slagging). Likaantumista esiintyy tulipesän lämmönsiirtopinnoilla, joissa pinnoille kertyy sulaa tuhkaa. Kuonaantumista esiintyy kattilan konvektiolämmönsiirtopinnoilla takavedossa, jossa tuhka on pääosin kiinteässä muodossa. (Raiko ym. 1995, s. 215.) Kattilan likaantumisen ja kuonaantumisen tyypilliset esiintymisalueet on esitetty kuvassa 1. Lämmönsiirtopinnoille kertynyt sula tuhka korrosoi nopeasti pintoja.



Kuva 1. Likaantuminen ja kuonaantuminen kattilassa (Raiko ym. 1995, s. 216).

2.3 Rikin- ja typenpoistomenetelmät

Rikin- ja typenoksidit luetaan kasvihuonekaasuiksi. Suomen lainsäädössä on annettu yli 50 MW tehoisten laitoksille päästöraja-arvot rikkidioksidi- ja typpioksidipitoisuudelle ympäristöön päästettävistä savukaasuissa. Suomen lainsäädännössä on myös veloitettu toiminnanharjoittajia tarkkailemaan aktiivisesti näiden kasvihuonekaasujen päästöjä ympäristöön. (Finlex 2014.)

Nykyaikaisten voimalaitosten rikinpoistomenetelmät voidaan jakaa toteutuksen mukaan kolmeen eri ryhmään, jotka ovat seuraavat: sorbentti-injektio, eli kuiva-, puolikuiva- ja märkämenetelmä. Menetelmien tärkeimmät erot on esitetty taulukossa 1. Rikinpoiston tehokkuus riippuu vahvasti lämpötilasta, johon apuaine syötetään. Rikinpoistosta puhuttaessa käytetään usein termiä rikinpoistoaste, joka kuvaa talteen kerätyn ja poltossa syntyneen rikkidioksidin suhdetta.

Taulukko 1. Rikinpoistomenetelmät (Kaikko 2017).

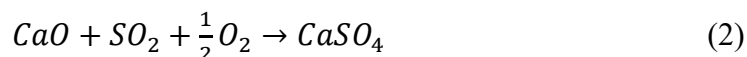
Menetelmä	Käytetty apuaine	Apuaineen syöttö	Erotus savukaasuista	Rikinpoistoaste
Kuiva-	Jauhettu kalkkikivi tai dolomiitti	Tulipesään tai savukaasukana-vaan	Sähkösuodattimella tai tuhkan mukana	Tulipesäinjektio: 30 – 50 % (90 – 99 % leijupetikattiloissa) Savukaasukanavainjektio 50 – 80 %
Puolikuiva-	Kalsiumhydroksidiliete	Erilliseen reaktoriin	Reaktorin pohjalta ja jälkierottimella	85 – 92 %
Märkämenetelmä	Kalsiumpohjainen liete	Erilliseen reaktoriin	Saostamalla lieteestä	92 – 98 %

Märässä rikinpoisto menetelmässä savukaasujen sekaan suihkutetaan kalsiumpohjaista lietettä, joka reagoidessaan savukaasujen kanssa sitoo rikkidioksidia. Märän menetelmän etuna voidaan pitää kykyä poistaa myös typenoksideja savukaasuista. (Gao ym. 2010, s. 5876.)

Näistä kolmesta vain sorbentti-injektio, eli kuivarikinpoisto tapahtuu tulipesässä, joten tarkastellaan sitä tarkemmin. Tulipesän sorbentti-injektion käyttö Suomessa rajoittuu käytännössä vain leijupetikattiloihin. Muutama poikkeus löytyy kuitenkin, mutta niissäkin on usein erillinen vesi-injektio savukaasukanavassa, jolloin saavutetaan parempi rikinpoistohyötysuhde. Yleisin sorbentti kuivassa rikinpoistossa on kalsiumkarbonaatti (CaCO_3). (Kaikko 2017.) Kuivamenetelmällä saavutetaan suurin rikinpoistoaste tulipesän lämpötilan ollessa hieman alle 850 °C (Rayaprolu 2009, s. 510).

Rikinpoisto kalsiumkarbonaatilla perustuu kalsiumkarbonaatin kalsinointi-, sekä kalsiumoksidin sulfanointireaktioon. Kalsinointireaktio on esitetty yhtälössä (1) ja sulfanointireaktio yhtälössä (2). (de las Obras-Loscertales ym. 2014, s. 386).





Suurin osa typenoksidien päästöistä koostuu typpimonoksidista. Typpioksidipäästöjen vähentämismenetelmät jaetaan primäärisiin ja sekundäärisiin menetelmiin. Primäärisissä menetelmissä typenoksidien päästöjä vähennetään ehkäisemällä niiden syntyä. Typenoksidien synty voidaan jakaa kolmeen eri ryhmään taulukon 2 mukaisesti.

Taulukko 2. Typenoksidien jaottelu syntymekanismin mukaan (Kaikko 2017).

Tyyppi	Syntymekanismi
Terminen No_x	Syntyy korkeissa lämpötiloissa tapahtuvissa poltoissa.
Polttoaine-No_x	Syntyy polttoaineen sisältämän typen hajoamisessa poltossa.
Nopea No_x	Syntyy ali-ilmaisessa palamisessa.

Sekundäärisissä typenpoiston menetelmissä poistetaan jo syntyneitä typenoksideja savukaasuista. Sekundäärimenetelmät voidaan jakaa katalyytin käytön perusteella SNCR- ja SCR-menetelmiksi.

SCR:ssä (engl. Selective Catalytic Reduction) eli katalyyttisessä menetelmässä ammoniakia tai ureaa lisätään savukaasuihin kattilan jälkeen erillisessä reaktorissa. Reaktori koostuu katalyyttielementeistä, jotka nopeuttavat reaktiota matalammassa lämpötilassa. Urea tai ammoniakki pelkistää typenoksidit typpimolekyyleiksi. (Hou ym. 2012, s. 9-10.)

SNCR:ssä (engl. Selective Non-Catalytic Reduction) eli katalyyttittömässä reaktiossa ammoniakki tai urea syötetään tulipesään, jolloin pelkistyminen tapahtuu korkeammassa lämpötilassa, eikä katalyyttiä tarvita. (Hao ym. 2015, s. 213–214.)

3 MASSA- JA AINETASE

Massatase on tapa määritellä suljetun systeemin massatasapainoa. Ainetta ei voi kadota, eikä sitä voi syntyä tyhjästä. Tällöin systeemiin virtaavan massan \dot{m}_{in} on oltava yhtä suuri kuin systeemistä poistuvan massan \dot{m}_{out} kanssa systeemin ollessa tasapainotilassa. Poikkeuksena ydinreaktiot, jossa massaa muuttuu energiaksi (Davidson 2014, s. 151). Tasapainotilalla tarkoitetaan tilaa, jossa systeemin massa on vakio. Massataseen avulla voidaan ratkaista tuntemattomia systeemin massavirtoja. Yksinkertaisin tasapainotilassa oleva massatase on esitetty yhtälössä (3). Ainetaseella tarkoitetaan käytännössä samaa asiaa massataseen kanssa, mutta massan sijasta tarkastellaan systeemin läpi virtaavia ainevirtoja. (Himmelblau ja Riggs 2012, s. 101.) Ainetaseen avulla pystytään laskemaan tarkemmin voimalaitosprosessin savukaasun koostumuksia ja erilaisia häviöitä.

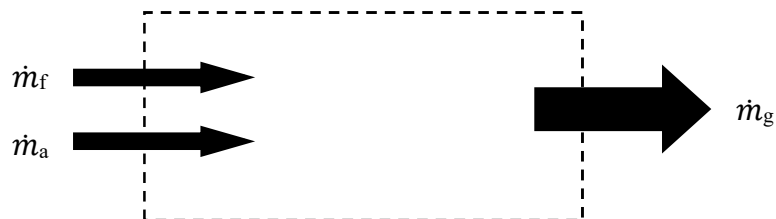
$$\dot{m}_{in} = \dot{m}_{out} \quad (3)$$

missä \dot{m}_{in} on systeemiin virtaava massa aikayksikössä [kg/s]

\dot{m}_{out} on systeemistä poistuva massa aikayksikössä [kg/s]

3.1 Massa- ja ainetase tulipesässä

Moderneissa kattilatyypeissä voi massatase olla hyvinkin monimutkainen. Tarkastellaan aluksi yksinkertaista massatasetta. Yksinkertaisimmillaan tulipesän massatase koostuu kahdesta systeemiin sisään menevästä massavirrasta ja yhdestä systeemistä poistuvasta massavirrasta. Yksinkertainen massatase on esitetty kuvassa 2. Kuvan systeemi on kuvitteellinen kattila, jossa tulipesään syötetään polttoainetta \dot{m}_f ja ilmaa \dot{m}_a ja tulipesästä poistuu savukaasua \dot{m}_g . Systeemin taseraja on kuvattu katkoviivalla. Taserajalla tarkoitetaan kuvitteellista häviötöntä rajaa, joka rajaa tarkasteltavan alueen (Paiho ym. 2015).



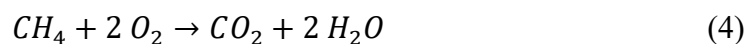
Kuva 2. Yksinkertainen massatase

Tarkastellessa tarkemmin palamisreaktiota ja siitä syntyviä savukaasuja, on massataseen sijasta käytettävä ainetasetta. Polttoaineen alkuaineanalyysin ja palamisilman koostumuksen avulla voidaan määrittää tulipesään syötettävä alkuainevirta. Mikäli tiedetään tulipesään syötettävät alkuainevirrat, voidaan laskea stokiometrinen savukaasun koostumus. Stokiometrisella palamisella tarkoitetaan palamistapahtumaa, missä kaikki palava aines palaa täydellisesti. Normaaleissa olosuhteissa ei palaminen ole stokiometrista. Tällöin savukaasun tarkan koostumuksen määrittelemiseksi on turvauduttava erilaisiin korrelaatioihin tai mittaustuloksiin, esimerkiksi hiilimonoksidin ja typenoksidien muodostumisen suhteen.

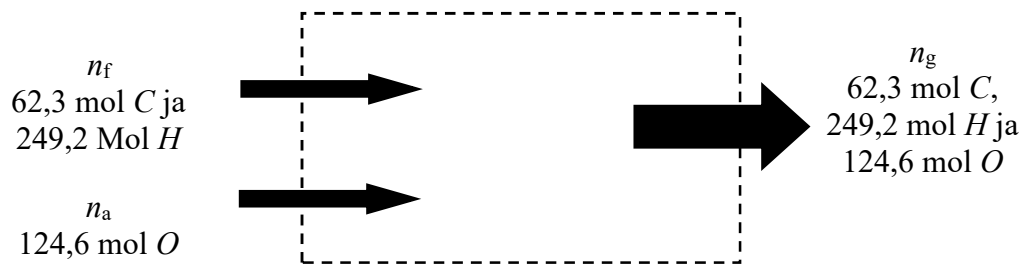
3.2 Savukaasun koostumus ainetaseen kautta

Voimalaitosprosessin tulipesän mallintamisen kannalta merkittävin käyttökohte ainetaseelle on palamisreaktion kuvaaminen ja sitä kautta savukaasujen koostumuksen selvittäminen. Savukaasujen koostumuksen selvittäminen aloitetaan muodostamalla polttoaineen stokiometrinen palamisreaktio. Palamisreaktion lopputuotteista voidaan muodostaa tulipesälle ainetase, josta voidaan laskea savukaasun koostumus.

Palataan kuvan 2 yksinkertaiseen massataseeseen ja määritellään polttoainevirraksi kilogramma metaanikaasua (CH_4) sekunnissa ja palamisilman koostuvaksi pelkästään hapesta (O_2). Metaanikaasun moolimassa NTP-olosuhteissa on 16,04 g/mol, jolloin kilogrammassa on noin 62,3 moolia metaanikaasua. Metaanikaasun täydellisessä palamisreaktiossa lopputuotteeksi jää vesi ja hiilidioksidi. Metaanikaasun täydellisen palamisen reaktioyhtälö on esitetty yhtälössä (4).



Reaktioyhtälöstä käy ilmi, että moolin metaanikaasua polttamiseen tarvitaan mooli happimolekyylejä ja reaktiotuotteeksi syntyy mooli hiilidioksidia ja kaksi moolia vettä. Systemin ainetase on esitetty kuvassa 3.



Kuva 3. Esimerkin ainetase, missä n_f kuvaa polttoaineen, n_a palamisilman ja n_g savukaasun aine-
määrää.

Laskemalla ainevirroista massavirrat taulukossa 3 esitetyillä moolimassoilla, voidaan to-
deta yksinkertaistetun mallin massataseen olevan tasapainossa. Reaktiotuotteiden masso-
jen suhteesta saataisiin laskettua savukaasun koostumus massaprosentteina.

Taulukko 3. Esimerkkilaskun lähtöarvot ja tulokset

	Moolimassa M [g/mol]	Sisääntulo		Ulostulo	
		ainemäärä n_{in} [mol]	massa m_{in} [g]	ainemäärä n_{out} [mol]	massa m_{out} [kg]
C	12,01	62,3	748	62,3	748
H	1,01	249,2	252	249,2	252
O	16,00	124,6	1994	124,6	1994

4 ENERGIATASE

Energiatase perustuu termodynamiikan ensimmäiseen pääsääntöön. Ensimmäisen pääsäännön mukaan suljetun systeemin kokonaisenergia pysyy vakiona. Tämän perusteella voidaan todeta, että tasapainossa olevaan systeemiin virtaava energia \dot{E}_{in} on oltava yhtä suuri kuin systeemistä ulosvirtaava energia \dot{E}_{out} . Systeemin sisällä voi energia kuitenkin muuttaa muotoaan, esimerkiksi tulipesässä poltettaessa kemiallisesti sitoutunut energia vapautuu lämpöenergiaksi palamisen yhteydessä. (Himmelblau 1989, s. 411 – 412.)

$$\dot{E}_{in} = \dot{E}_{out} \quad (5)$$

missä \dot{E}_{in} on energiavirta systeemiin [W]

\dot{E}_{out} on energiavirta systeemistä [W]

Systeemiin voidaan siirtää energiaa joko lämmön, työn tai aineen välityksellä. Työllä tarkoitetaan systeemin tai systeemiin vaikuttavan voiman ja matkan tuloa.

$$W = \int_{tila_1}^{tila_2} \bar{F} ds \quad (6)$$

missä W on systeemiin tehty työ / systeemin tekemä [W]

F on ulkoinen voima / systeemin aiheuttama voima [N]

s on etäisyys ja suunta, johon voima on vaikuttanut [m]

Lämpövirta ympäristöön tai ympäristöstä systeemiin on riippuvainen systeemin ja ympäristön välisestä lämpötilaerosta. Myös systeemin lämmönjohtavuutta kuvaava lämmönsiirtoluku ja lämpöä siirtävä pinta-ala vaikuttaa lämpövirran suuruuteen.

$$\dot{Q} = UA(T_2 - T_1) \quad (7)$$

missä \dot{Q} on lämpövirta [W]

U on lämmönsiirtoluku [W/(m²×K)]

A on lämmönjohtumisen pinta-ala [m²]

Kun systeemiin tuodaan tai systeemistä viedään ainetta, siirretään samalla energiaa. Kapaleen kokonaisenergia voidaan jakaa kolmeen eri alalajiin, jotka ovat seuraavat: sisäenergia (\hat{U}), kineettinen energia (\hat{E}_{kin}) ja potentiaalienergia (\hat{E}_{pot}) (Himmelblau 1989, s.

370 – 372). Sisäenergia pitää sisällään kappaleen molekyylien ja atomien liikkeestä syntyvän energian. Sisäenergian mittaaminen on mahdotonta. Käytännössä tämä energia on kuitenkin riippuvainen vain kappaleen ominaislämpökapasiteetista ja lämpötilasta, jolloin sen muutos voidaan kappaleessa laskea yhtälöllä (8). (Himmelblau 1989, s. 371 – 372.)

$$\hat{U}_2 - \hat{U}_1 = \int_{T_1}^{T_2} c_v dT \quad (8)$$

missä	\hat{U}_2 on systeemin sisäenergia tilapisteessä 2	[J/kg]
	\hat{U}_1 on systeemin sisäenergia tilapisteessä 1	[J/kg]
	T_2 on lämpötila tilapisteessä 2	[K]
	T_1 on lämpötila tilapisteessä 1	[K]
	c_v on kappaleen isokoorinen ominaislämpökapasiteetti	[J/(kgK)]

Kineettinen energia on riippuvainen pelkästään kappaleen nopeudesta. Kineettinen energia massayksikköä kohden voidaan laskea yhtälöllä (9). (Himmelblau 1989, s. 370.)

$$\hat{E}_{kin} = \frac{1}{2} v^2 \quad (9)$$

missä	\hat{E}_{kin} on kineettinen energia	[J/kg]
	v on kappaleen nopeus	[m/s]

Potentiaalienergia johtuu kappaleen massasta ja ympäröivän olosuhteiden gravitaatiovoimasta, eli normaalisti maan vetovoimasta. Kappaleen potentiaalienergia massayksikköä kohden voidaan laskea yhtälöllä (10). (Himmelblau 1989, s. 370 – 371.)

$$\hat{E}_{pot} = gh \quad (10)$$

missä	\hat{E}_{pot} on potentiaalienergia	[J/kg]
	g on gravitaatiovakio	[m/(s ² ×kg)]
	h on kappaleen korkeus referenssistä	[m]

Ainevirrasta johtuva energiavirta systeemiin kuvataan yleensä entalpiavirralla. Entalpia sisältää kappaleen sisäenergian sekä paineen ja tilavuuden tulon. Entalpian yhtälö on esitetty kaavassa (11). Koska entalpia koostuu kappaleen sisäenergiasta, kappaleen entalpia

määritellään entalpiaerona sisäenergian tavoin. Yleensä entalpian osalta käytetään referenssitiloja, jotka laskennan edetessä supistuvat pois. (Himmelblau 1989, s. 373.) Entalpian muutos voidaan laskea myös vakiopaineisessa lämpötilanmuutoksessa aineen isobaarisen ominaislämpökapasiteetin avulla, yhtälö (12).

$$H = \hat{U} + pV \quad (11)$$

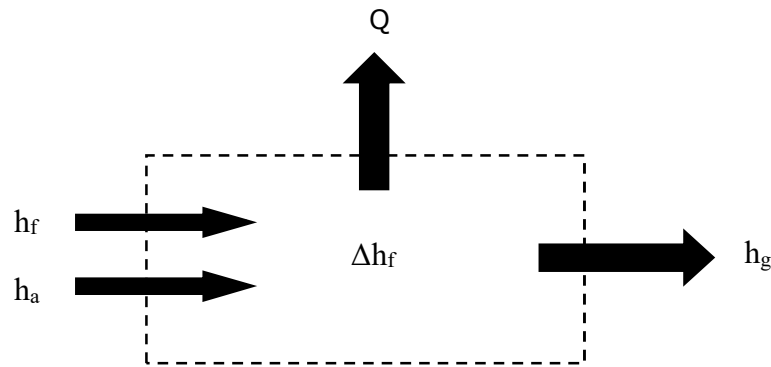
missä	H on entalpia	[J/kg]
	\hat{U} on kappaleen sisäenergia	[J/kg]
	p on kappaleessa vallitseva paine	[Pa]
	V on kappaleen tilavuus	[m ³]

$$\hat{H}_2 - \hat{H}_1 = \int_{T_1}^{T_2} c_p dT \quad (12)$$

missä	\hat{H}_2 on systeemin entalpia tilapisteessä 2	[J/kg]
	\hat{H}_1 on systeemin entalpia tilapisteessä 1	[J/kg]
	c_p on kappaleen isobaarinen ominaislämpökapasiteetti	[J/(kg×K)]

4.1 Energiatase tulipesässä

Koska energiataaseeseen energiavirrat ovat riippuvaisia massavirroista, on moderneissa kattiloissa hyvinkin monimutkaisia energiataaseita. Yksinkertaisimmillaan tulipesän energiataase on hyvin samankaltainen yksinkertaisen massataaseen kanssa, lukuun ottamatta ainevirroista johtumattomia energiavirtoja. Tärkeimpiä ainevirroista johtumattomia energiavirtoja on polttoaineen palamisesta vapautuva energia ja lämpöenergian siirtyminen systeemiin tai pois systeemistä. Yksinkertaistettuun tulipesään virtaa energiaa polttoaineen ja palamisilman massavirtojen kanssa ja poistuu savukaasun mukana. Tulipesässä polttoaine palaa, eli polttoaineeseen sitoutunut kemiallinen energia vapautuu lämpöenergiaksi. Yksinkertainen energiataase on kuvattu kuvassa 4.



Kuva 4. Yksinkertainen energiatase

Sisään ja ulos virtaavien virtojen on oltava yhtä suuret, jolloin systeemin energiatase voidaan kirjoittaa alla olevaan muotoon, yhtälö (13).

$$m_f h_f + m_a h_a + m_f \Delta h_f = Q + m_g h_g \quad (13)$$

missä	h_f on polttoaineen entalpia sisääntulossa	[J/kg]
	h_a on ilman entalpia sisääntulossa	[J/kg]
	Δh_f poltossa vapautuva energia	[J/kg]
	Q on lämpöenergia ympäristöön	[J]
	h_g on savukaasu entalpia ulostulossa	[J/kg]

Polttoaineen, palamisilman ja savukaasun entalpia voidaan kirjoittaa yhtälön (12) mukaisesti, jolloin energiatase saadaan alla olevaan muotoon, yhtälö (14).

$$m_f \int_{T_{1,f}}^{T_{ref}} c_{p,f} dT + m_a \int_{T_{1,a}}^{T_{ref}} c_{p,a} dT + \Delta H_f = Q + m_g \int_{T_{ref}}^{T_{2,g}} c_{p,g} dT \quad (14)$$

Avaamalla integraalit keskimääräisten ominaislämpökapasiteettien avulla ja määrittelemällä polttoaineen ja palamisilman loppulämpötilan, sekä savukaasun alkulämpötilan voidaan energiatase kirjoittaa yhtälöksi (15).

$$m_f \bar{c}_{p,f} (T_{ref} - T_{1,f}) + m_a \bar{c}_{p,a} (T_{ref} - T_{1,a}) + \Delta H_f = Q + m_g \bar{c}_{p,g} (T_{2,g} - T_{ref}) \quad (15)$$

Palamisreaktiossa vapautuva lämpö saataisiin laskettua yhdisteiden muodostumisentalpioiden tai polttoaineen lämpöarvon avulla. Esimerkkitilanteessa, jossa metaanikaasu reagoi happimolekyylin kanssa, on syntyvä aine hiilidioksidi ja vesihöyry. Hiilidioksidin ja vesihöyryn muodostumisentalpiat on esitetty taulukossa 4. Toinen vaihtoehto olisi selvittää polttoaineen lämpöarvo ja laskea tämän avulla palamisessa vapautuva energiamäärä.

Taulukko 4. Veden ja hiilidioksidin muodostumisentalpiat

Yhdiste	Muodostumisentalpia Δh_f [kJ/mol]
H ₂ O (l)	-241,8
CO ₂	-393,2

4.2 Nykyaikaisten tulipesien energiataseet

Moderneissa kattiloissa tapahtuu palamisreaktion lisäksi monia eri reaktioita, jotka tulee ottaa mukaan energiataseeseen. Pääsääntöisesti jokainen kemiallinen reaktio luovuttaa tai vastaanottaa lämpöenergiaa, jolloin se on otettava huomioon energiataseessa. Tämän tarkkaa tarkkan energiataseen määrittämiseksi on tiedettävä systeemin aine- ja massatase. Systeemin ainetase voidaan määrittää mittausten ja alkuaineanalyysin perusteella, kun taas energiatasetta ei voida määrittää luotettavasti mittaamalla.

Kattilan tulipesässä tapahtuu normaalien palamis- tai kaasutusreaktioiden lisäksi erilaisia reaktioita, joista osa on haluttuja ja osa ei. Halutuilla reaktioilla on tulipesän toiminnan kannalta jokin tarkoitus, esimerkiksi estää korroosio tulipesän lämmönsiirtopinnoilla tai sitoa haitallisia aineita savukaasuista. Kaikki reaktiot, joita tulipesässä tapahtuu olisi käytävä läpi laskettaessa kattilan energiatasetta. Käytännössä ottamalla huomioon vain tärkeimmät reaktiot saavutetaan sopiva tarkkuus laskennassa.

Energiataseen määrittäminen monimutkaisemmissa tapauksissa kannattaa suorittaa erottelemalla saapuvat ja lähtevät ainevirrat, häviöt, sekä reaktioissa vapautuva tai sitoutuva energia. Näin saatu yleistetty energiatase on esitetty yhtälössä (16).

$$\sum_{i=1}^n m_{i,in} \int_{T_{i,in}}^{T_{ref}} c_{i,in} dT + \sum_{i=1}^n \Delta h_i = Q_{steam} + Q_{loss} + \sum_{i=1}^n m_{i,out} \int_{T_{ref}}^{T_{i,out}} c_{i,out} dT \quad (16)$$

Reaktioissa vapautuva tai sitoutuva energia voidaan laskea joko lämpöarvojen tai muo-
dostumisentalpioiden avulla. Yleensä polttoaineen lämpöarvo on saatavissa pommikalo-
rimetrimittauksen avulla, mutta muiden reaktioiden osalta on energiat selvitettävä muo-
dostumisentalpioiden avulla.

5 KIERTOLEIJUPETIKATTILAN ENERGIA- JA MASSATASE

Leijupetikattilan keksi saksalainen Fritz Winkler vuonna 1921. Hiilen polttoon sitä alettiin soveltaa 60-luvulla. Suomalainen Ahlström on ollut merkittävä tekijä leijupetikattiloiden kehityksessä. Leijupetikattilalla tarkoitetaan voimalaitoskattilaa, jossa pienet polttoainehiukkaset ja lisäaineet fluidisoidaan ilmvirtauksen avulla pediksi. (Crowe 2005, s. 68–72.)

Leijupetikattilat voidaan jakaa kolmeen eri ryhmään leijukerroksen ja käyttöpaineen mukaan: kuplaleijupetikattila (BFB), kiertoleijupetikattila (CFB) ja paineistettu kiertoleijupetikattila (PCFB). Kuplaleijupetikattiloissa pedin korkeus on metrin luokkaa ja se voidaan silmämääräisesti nähdä kattilassa, kun kiertoleijupetikattiloissa peti kattaa koko lähes tulipesän sisäpuolen. (Vakkilainen 2010.)

FluidProp-malli luotiin suuren kokoluokan CFB hiilivoimalaitoksesta saatujen mittaustulosten perusteella, joten käsitellään seuraavaksi tarkemmin kiertoleijupetikattilaa esimerkkilaitoksen perusteella. Esimerkkilaitosta ei tässä työssä tarkemmin esitellä.

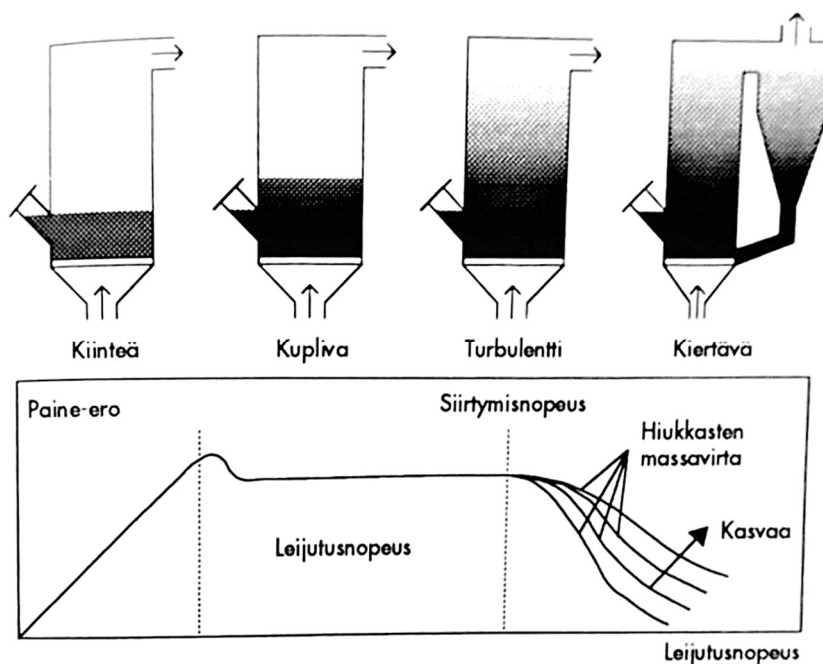
5.1 Kiertoleijupetikattila

Kiertoleijupetikattilan tulipesässä on palavan aineen lisäksi kiertoaine, jonka tarkoituksena on hajottaa polttoaine laajemmalle alueelle ja johtaa lämpöä polttoaineeseen palamistapahtuman tehostamiseksi. Kiertoaine koostuu pääosin tuhkasta, kalkkikivikomponenteista ja leijutushiekasta (engl. make-up sand). Jotta poltto- ja kiertoaineesta syntynyt peti saadaan kiertämään tulipesässä, on kaasun nopeuden ylitettävä hiukkasen terminaalinopeus. Terminaalinopeus voidaan laskea yhtälöllä (17) (Raiko ym. 1995, s. 424).

$$u_t = \sqrt{\frac{4}{3} * \frac{d_p(\rho_p - \rho_g)}{\rho_g * c_d} * g} \quad (17)$$

missä	u_t on terminaalinopeus	[m/s]
	d_p on hiukkasen halkaisija	[m]
	ρ_p on hiukkasen tiheys	[kg/m ³]
	ρ_g on kaasun tiheys	[kg/m ³]
	c_d on vastuskerroin	[-]
	g on gravitaatiovakio	[m/s ²]

Kaasun nopeutta kasvattamalla selvästi kiintoainehiukkasten terminaalinopeutta suuremmaksi saadaan aikaiseksi kiintoainehiukkasten kierto tulipesässä. Leijutusilman nopeuden vaikutusta leijukerrostyyppiin on havainnollistettu kuvassa 5.



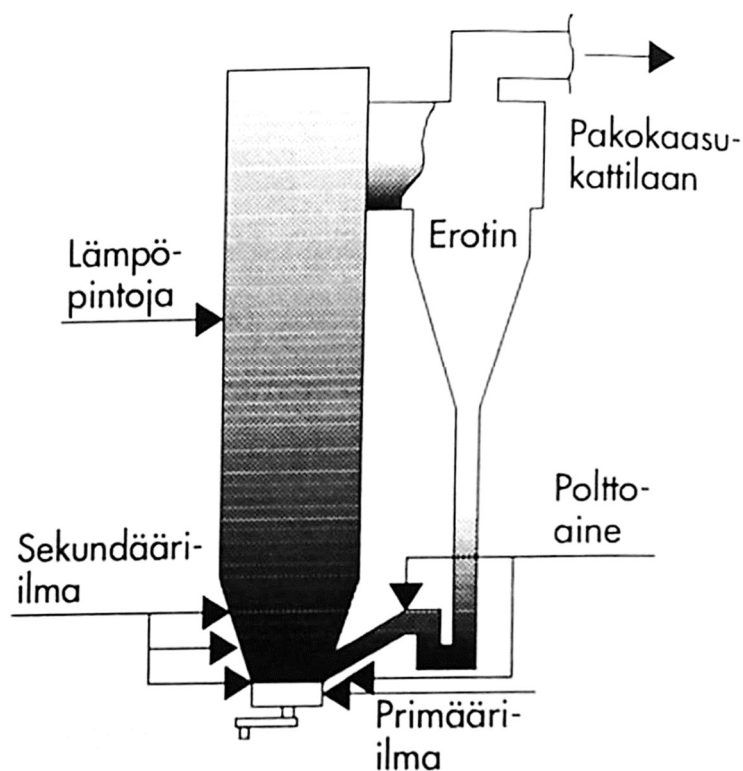
Kuva 5. Leijutusilman nopeuden vaikutus leijukerrokseen (Raiko ym. 1995, s. 419).

Kiertoleijupetikattila soveltuu hyvin erilaisille polttoaineille. Sitä käytetään usein erilaisien aineiden sekapolttoon, eli eri polttoaineiden samanaikaiseen polttoon. Poistamalla rajoite yhdestä polttoaineesta voidaan minimoida polttoaineiden hinnanvaihtelusta johtuvat kulut. Polttoaineen leijutukseen perustuvista kattilatyypeistä on kiertoleijupetikattila yleisempi suuressa kokoluokassa kuin kerrosleijukattila. Kiertoleijupetikattilan etuja ovat siinä tapahtuvan palamistapahtuman puhtaus ja tasaisuus. Tasaisella palamistapahtumalla syntyy vähemmän haitallisia yhdisteitä. Kiertoleijupetikattiloissa palaminen tapahtuu myös suhteellisen matalissa lämpötiloissa, jolloin typen oksidien muodostuminen on vähäisempää. (Vakkilainen, 2010.)

Kiertoleijupetikattilan polttoaine ja kalkkikiviseos syötetään tulipesän alaosaan. Tulipesän pohjasta syötettävällä primääri-ilmalla fluidisoidaan polttoaine ja kalkkikiviseos hiekkapetiin. Kuuma petimateriaali lämmittää polttoainetta ja aloittaa palamisreaktiot.

Polttoprosessiin ilma syötetään eri korkeuksilta, mikä vähentää typenoksidien muodostumista. Primääri-ilman tarkoitus on pääosin muodostaa leijupeti ja kierrättää sitä, minkä takia primääri-ilmaa ei syötetä tarpeeksi koko polttoaineseoksen palamiseen. Tarvittava palamisilma syötetään tulipesään hieman ylempää, jolloin polttoainehiukkaset ovat jo sekoittuneet ja täten palaminen tapahtuu happirikkaasti lähes koko pedin alueella, eikä epätäydellisiä palamistuotteita tai typenoksideja pääse muodostumaan niin paljoa. (Vakkilainen 2010.)

Tulipesän jälkeen kiintoaineet kerätään talteen syklonilla ja syötetään tulipesän pohjasta takaisin kiertoon. Syklonin ja tulipesän välisen paine-eron takia on paluulinjassa kaasulukko. Kaasulukon tarkoitus on ehkäistä kiertoaineen kulku väärään suuntaan paluukanaavassa. Suurella kiintoaineen kierrätysuhteella varmistetaan polttoaineen kunnollinen sekoittuminen. Kuumentuneet savukaasut johdetaan kattilan takaosaan, jossa niistä otetaan lämpöenergiaa talteen prosessihöyryyn. (Vakkilainen 2010.) Kiertoleijupetikattilan toimintaperiaate on esitetty kuvassa 6.



Kuva 6. Kiertoleijupetikattilan toimintaperiaate (Raiko ym. 1995, s. 418).

5.2 Kiertoleijupetikattilan tulipesän massa- ja ainetase

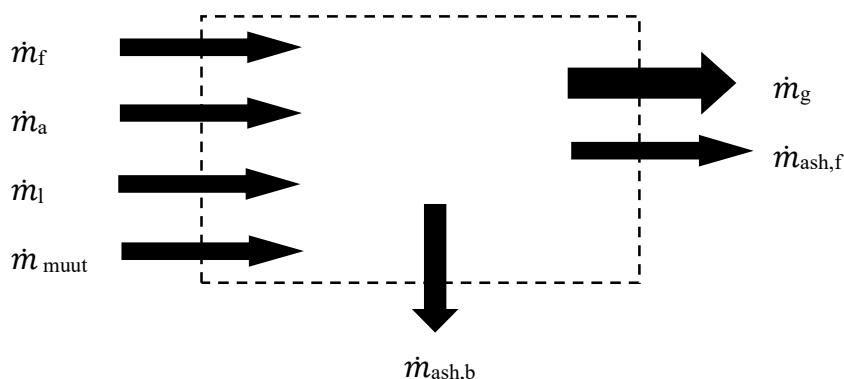
Kiertoleijupetikattilan tulipesään syötetään polttoaineen lisäksi poikkeuksetta leijutusainetta, useimmiten kvartsihiekkää. Myös tuhka ja polton erilaiset apuaineet voivat toimia kiertoaineena, esimerkiksi sorbentti-injektio aineet. (Huhtinen 2008, s. 97.)

Poltossa syntyviä rikki päästöjä voidaan sitoa palotapahtuman aikana syöttämällä tulipesään kalkkikiviseosta. Polttoaine ja kalkkikiviseos muodostavat yhdessä monissa tapauksissa kaiken kiintoainevirran tulipesään. Muita tulipesään syötettäviä aineita on esimerkiksi palamisilma ja joissakin tapauksissa savukaasut.

Joissakin laitoksissa käytetään ilman sijasta puhdasta happikaasua. Käytettäessä happikaasua polttoprosessissa vältetään palamisilmasta johtuvista typenoksidien päästöistä ja pienennetään savukaasuhäviöitä. Pelkkää happikaasua ei kuitenkaan voida käyttää, jottei tulipesän lämpötila nousisi liian korkeaksi metalleille. Happikaasun lisäksi tulipesään syötetään savukaasukanavasta savukaasua. (Myöhänen ym. 2017.) Savukaasuhäviöillä tarkoitetaan savukaasujen mukana ympäristöön menevää energiavirtaa, jota ei hyödynnetä voimalaitosprosessissa ja ne muodostavat merkittävimmän osan kattilan häviöistä (Vakkilainen 2010.)

Kiertoleijupetikattilan tulipesään syötetään ilmaa useammalta korkeudelta. Primääri-ilma syötetään tulipesän pohjalta, sekundääri-ilma tulipesän seinämiltä sekä polttoainevirta ha-
jotetaan paineilmalla tulipesään saapuessaan. (Huhtinen 2008, s. 98.)

Tulipesän jälkeen on kattilassa sykloni, jossa siitä erotetaan mahdollisimman hyvin kiintoaine kaasuista. Syklonissa erotettu savukaasu ohjautuu kattilan takavetoon, jossa siitä otetaan talteen lämpöenergiaa prosessihöyryyn. Savukaasun seassa kattilasta poistuu kiintoainesta lentotuhkana. Lentotuhka pyritään ottamaan talteen ennen savukaasun pääsyä pois prosessista. (Huhtinen 2008, s. 98.) Kattilan pohjalle kertyy myös tuhkaa, jota poistetaan yleensä mekaanisesti kattilasta. Savukaasut, lento- ja pohjatuhka muodostavat kattilasta poistuvat massavirrat. Esimerkkitapauksen massatase on havainnollistettu kuvassa 7.



Kuva 7. Esimerkkikattilan massatase, missä \dot{m}_f kuvaa polttoaineen, \dot{m}_a palamisilman, \dot{m}_l kalkkikiven, \dot{m}_{muut} muiden aineiden, $\dot{m}_{\text{ash,b}}$ pohjatuuhkan, \dot{m}_g savukaasun, sekä $\dot{m}_{\text{ash,f}}$ lentotuuhkan massavirtaa.

5.3 Kiertoleijupetikattilan tulipesän energiatase

Kiertoleijupetikattilan energiatase pohjautuu vahvasti massataseesta saatuihin massavirtoihin. Energiataseen määrittelyssä on huomioitava eri massavirtojen lämpötilan erotaselämpötilaan, sekä aineiden termodynaamiset ominaisuudet. Kiertoleijupetikattilan tulipesän reaktiot ovat myös tärkeitä energiataseen kannalta.

Tulipesässä tapahtuu polttoaineen palamisen lisäksi usein rikinpoistoon liittyviä reaktioita. Esimerkkitapauksen suuressa hiilivoimalassa on rikinpoisto toteutettu kalkkikivi-injektioilla. Kalkkikivi-injektiossa syötetään esimerkkitapauksessa tulipesään kalsiumkarbonaattia (CaO_3), joka kalsinoinnin ja sulfanoinnin seurauksena muodostaa kalsiumsulfaattia (CaSO_4).

Tulipesän energiatase rajataan tulipesään ja siellä sijaitseviin lämmönsiirtopintoihin, jolloin kattilan takavedossa tapahtuvaa prosessihöyryn, palamisilman tai veden lämmitystä ei oteta huomioon. Tulipesän seinissä on vesikanavat, joissa prosessissa kiertävää vettä höyrystetään, sekä tulipesässä on usein myös tulistin, jonka avulla saatua höyryä tulistetaan. Tulipesän seinien vieressä ilmenee usein suurempia kiintoainekertymiä, jotka tipuessaan tulipesän pohjalle luovuttavat lämpöä seinän sisällä virtaavaan prosessihöyryyn.

Olosuhteista riippuen nämä kiintoainekertymät voivat kasvaa niin suureksi, että ne heikentävät lämmönsiirtoa tulipesästä seinämiin. (Vakkilainen 2010.)

Savukaasut aiheuttavat merkittävimmän häviön kiertoleijupetikattiloissa. Savukaasuhäviö on riippuvainen savukaasun koostumuksesta ja lämpötilasta. Savukaasujen aiheuttamaa häviötä voidaan määrittää alkuaineanalyysin ja aineiden termodynaamisien ominaisuuksien avulla. Savukaasun komponentteja käsitellään yleensä ideaalikaasuna, mikä helpottaa laskentaa. Tarkkojen tulosten saamiseksi on kaasuja käsiteltävä reaalikaasuna. Tämän työn ohessa rakennetussa laskentaohjelmassa on tutkittu FluidProp-ohjelman soveltuvuutta tähän tarkoitukseen.

6 FLUIDPROP

FluidProp-ohjelman on kehittänyt Asimptote-niminen yritys yhteistyössä Delftin teknillisen yliopiston poltto ja energia -osaston kanssa. Yritys on perustettu 2011 ja se muodostui kahden pienemmän yrityksen yhdistyessä. Yritys on listannut päätarkoitukseksi tuottaa simulaatio-ohjelmia energia-alalle. Asimptote on kehittänyt FluidProp:n lisäksi muutaman mallinnusohjelman, joiden avulla voi mallintaa erilaisia voimalaitosratkaisuja tai termodynaamisia ilmiöitä.

FluidProp-ohjelma on tarkoitettu fluidien termodynaamisten ominaisuuksien laskentaan. Se perustuu kuuteen eri lähteeseen, jotka ovat esitetty taulukossa 5. Ohjelma itsessään on käyttäjälle maksuton, mutta ilmaiseen versioon ei ole sisällytetty kaikkia tietokantoja.

FluidProp-ohjelmalla ei itsessään ole käyttöliittymää, vaan sitä ajetaan muiden ohjelmien avulla. Ohjelma tukee COM ja NET-rajapintoja, joten sitä voidaan ajaa monilla yleisillä ohjelmilla, kuten Microsoft Excel ja Mathworks Matlab. FluidProp-ohjelmaa voidaan myös käyttää monien ohjelmistokehityskielen kanssa, kuten C, C++ ja Java.

Taulukko 5. FluidProp-ohjelman sisältämät termodynaamiset tietokannat. Tähdellä merkityt tietokannat ovat käytettävissä ilmaisversiossa.

GasMix*	Perustuu pääosin ideaalikaasun yhtälöön ja käyttö rajoittuu lähinnä kaasufaasin fluideihin.
IF97*	Käytettävissä vain vedelle ja höyrylle. Perustuu IAPWS -IF97 -standardiin (Wagner ym. 1998.)
RefProp	Perustuu Yhdysvaltojen kauppaministeriön alla toimivan National Institute of Standards and Technology:n kehittämään tietokantaan.
StanMix	Yksi tarkimmista tietokannoista ei ideaalisille kaasuille ja fluideille. Perustuu muokattuun PRSV-yhtälöön, eli Peng–Robinson-Stryjek-Vera tilanyhtälöön.
FreeStanMix*	StanMix:n ilmaisversio, joka ei ole yhtä tarkka, eikä kata kaikkia samoja fluideja.
PCP-SAFT	Perustuu molekyylien käyttäytymiseen mikrokooppisella tasolla, jonka perusteella ennustetaan makrotason käyttäytymistä. Soveltuu monimutkaisille fluideille.
TPSI*	FluidProp:n kehittäjien itse ylläpitämä tietokanta, joka sisältää erikoisempia fluideja ja lisämaksusta nestemetalleja.

6.1 FluidProp:n laskennan tarkastelu

Opinnäytetyössä tehtiin FluidPropilla laskentatyökäly käyttäen Microsoft Exceliä laskennan suorittamiseen, joten tässä työssä käsitellään FluidPropin funktioita siten, miten ne esiintyvät Excelissä. Funktiot muistuttavat kuitenkin toisiaan eri ohjelmistokehityskie-

lissä, mutta eroja on varsinkin muuttujien hallinnassa. Excelistä käytettiin englanninkielistä versioita desimaalierottimena piste. Nämä asetukset vaikuttavat funktioiden väli-merkkeihin. Käytettäessä pilkkua desimaalierottimena tulee funktioissa esiintyvä pilkku korvata puolipisteellä.

FluidProp oletusyksiköt ovat voimalaitosprosessien kannalta järkevät. Yksiköt ovat SI-järjestelmän mukaisia lukuun ottamatta painetta ja lämpötilaa. Paineessa käytetään yksikköä *bar (a)* ja lämpötilalle celsiusasteikkoa. Useilla suureilla käytetään myös yksikössä kilojoulea joulen sijasta. Ohjelman käyttämiä yksiköitä voidaan muuttaa *SetUnits*-funktiolla. Eri yksikköjärjestelmät ovat esitetty liitteessä 1.

$$= \text{SetUnits}(\text{Unitset}, \text{MassOrMole}, \text{Propeties}, \text{Units})$$

missä *UnitSet* on haluttu yksikköjärjestelmä

MassOrMol on valinta massan ja moolien välillä oletusyksiköissä

Properties-kenttään syötetään suure, mikä halutaan vaihtaa. Tyhjällä kentällä vaihdetaan kaikkien yksiköiden oletuksia

Units on halutut yksiköt

FluidProp-ohjelman ollessa vain termodynaamisten tietokantojen ja laskentaohjelmien välinen rajapinta, sen laskenta on hyvin suoraviivaista ja virheet ovat peräisin alkuperäisistä korrelaatioista. Virheiden välttämiseksi olisi parempi käyttää vain yhtä kirjastoa laskennassa. FluidPropin käyttö aloitetaan määrittelemällä fluidi *SetFluid*-funktiolla. Funktiolle syötetään argumentteina haluttu kirjasto ja fluidin nimi. Fluidin nimelle voidaan käyttää joko kirjaston oletusta tai FluidPropin omia nimiä. FluidPropin nimet ovat itsessään hyvin informatiivisia ja myötäilevät pitkälti aineiden kemiallisia merkintöjä alkuaineiden osalta

$$= \text{SetFluid}(\text{LibName}, \text{FluidName}, \text{SetUnitsCell})$$

missä *LibName* on kirjasto, josta termodynaamiset ominaisuudet haetaan

FluidName on fluidin nimi joko kirjaston tai FluidProp:n omien olutuksien mukaisessa muodossa

SetUnitsCell on solu, jossa on määritelty oletuksista poikkeavat yksiköt. Oletusyksiköitä käytettäessä jätetään tyhjäksi.

SetFluid-funktion avulla voidaan myös luoda kaasujen sekoituksia. Tällöin tulee muuttu-
jaan *FluidName* syöttää jonona kaasujen nimet ja kolmanneksi argumentiksi lisätä kaa-
sujen konsentraatiot. Tämän jälkeen voidaan luotua kaasuseosta käsitellä jatkossa yhtenä
objektina, jolloin sen termodynaamisten ominaisuuksien laskenta onnistuu helpommin
käyttäen vain yhtä funktiota.

Fluidin määrittämisen jälkeen voidaan *FluidProp*illa laskea haluttu termodynaaminen
ominaisuus kahden suureen avulla. Käyttökelpoiset suureet kullakin tietokannalla on esi-
tetty kuvassa 8.

State definition	TPSI	FreeStanMix IF97	GasMix	RefProp	StanMix	PCP-SAFT
PT	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Pv	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Pd	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Ph	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Ps	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Pq	✓	✓	✓	n/a	✓	✓
Pu	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Tv	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Td	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Th	n/a	n/a	✓	n/a	✓	n/a
Ts	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Tq	✓	✓	✓	n/a	✓	✓
Tu	n/a	n/a	✓	n/a	✓	n/a
vh	✓	✓	✓	✓	✓	✓
vs	✓	✓	✓	✓	✓	✓
vq	✓	✓	✓	n/a	n/a	✓
vu	✓	✓	✓	✓	✓	✓
dh	✓	✓	✓	✓	✓	✓
ds	✓	✓	✓	✓	✓	✓
dq	✓	✓	✓	n/a	n/a	✓
du	✓	✓	✓	✓	✓	✓
hs	✓	✓	✓	✓	✓	✓
sq	n/a	n/a	✓	n/a	n/a	n/a
su	n/a	n/a	✓	✓	n/a	n/a

Kuva 8. Käytettävissä olevat termodynaamiset tilat. ”n/a” merkintä tarkoittaa, ettei tila ole käy-
tössä kyseisessä tietokannassa. (Colonna ja van der Stelt 2016.)

Laskettavat suureet ovat jaettu *FluidProp*issa primäärisiin ja sekundäärisiin termodynaa-
misiin ominaisuuksiin. *FluidProp* sisältää myös aineiden moolimassat, kriittiset paineet

ja -lämpötilat. Yksi ohjelman innovatiivisimpia ominaisuuksia on mahdollisuus laskea derivoituja termodynaamisia ominaisuuksia, kuten tiheyden derivaatta paineen suhteen tai aineen isoterminen puristuvuuskerroin κ .

6.2 Energiatase FluidPropilla

Esimerkkikattilan palamisilman ja savukaasun tuntuvat entalpiat voidaan laskea käyttäen FluidProp-ohjelmaa. Kiinteille aineille FluidProp ei sovellu, joten polttoaineen, tuhkan ja kalkkikiven energiavirrat tulee määrittää muilla keinoin. Laskennassa käytettiin FluidPropissa sisällytettyjä GasMix ja IF97 -tietokantoja. IF97-kirjasto soveltuu vain vedelle ja vesihöyrylle, mutta se on niiden osalta hyvin tarkka. Lopuille fluideista käytettiin GasMixiä. Kyseistä tietokantaa käytettiin opinnäytetyön ohessa tehtyyn mallinnustyökaluun, sillä se kattaa parhaiten halutut fluidit. Entalpioita määritettäessä on huomioitava, että FluidProp laskee entalpian eri tietokannoissa käyttäen eri referenssitilaa. Tämän takia yhden tietokannan käyttö on suositeltavaa, mutta ei pakollista.

Tulipesään syötettävät ilmavirrat koottiin jokainen omaksi kaasusekoitukseksi FluidPropin *SetFluid*-funktiolla. Ilmavirtojen tuntuvat entalpiat saadaan laskemalla ominaisentalpia saapumistilassa ja tasetilassa. Ilmavirroista laskettiin myös alkuainevirrat kattilaan, jonka avulla voitiin määrittää tulipesään syötettävät ilmavirroista riippuvat alkuaineet.

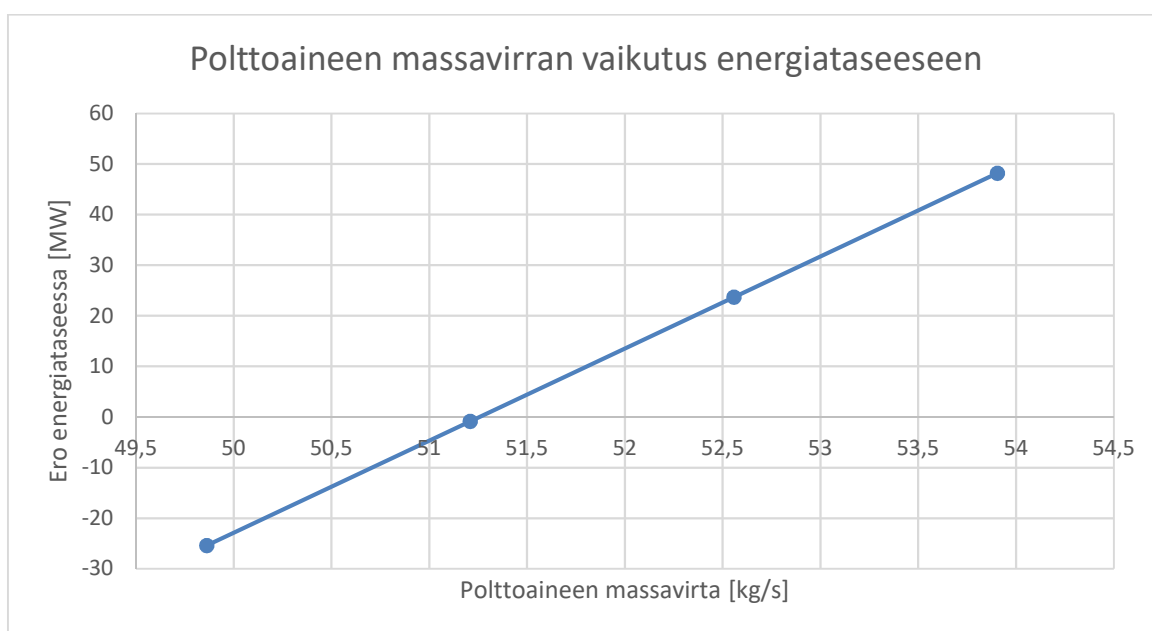
Savukaasuista tehtiin ilmavirtojen tavoin FluidProp-ohjelmalla kaasusekoitus, jotta käsittely oli jatkossa helpompaa. Savukaasun koostumus laskettiin polttoaineen ja ilmavirtojen alkuaineanalyysien perusteella. Ylimääräilman määrä voitiin määrittää mitatun savukaasujen happipitoisuuden perusteella. Palamistapahtuma oletettiin tapahtuvan ilman typenoksidien muodostumista. Hiilimonoksidin määrä saatiin savukaasuista mittaustulosten perusteella. Savukaasujen poistumislämpötila oli myös mitattu kattilasta, joten sen laskentaa ei tarvinnut tehdä.

Mikäli savukaasujen loppulämpötilaa ei olisi saatu mittaustuloksista, olisi se voitu laskea karkeasti energiataseen avulla. Laskenta olisi toteutettu käyttämällä tyypillistä arvoa ja energiataseen avulla iteroida loppulämpötila siten, että energiatase toteutuu halutulla tarkkuudella. Tämän olisi voinut toteuttaa laskentaohjelmaan, mutta tällöin olisi työnlaajuus

kasvanut turhan laajaksi. Laskentaohjelman tiedonsyöttö- ja yhteenvetotaulukot on esitetty liitteessä 2.

6.3 Virheiden tarkastelu

Laskentamalleissa, jotka perustuvat mittaustuloksiin, syntyy aina mittaustavoista johtuvia virheitä. Tämän takia energiataseessa ja massataseessa on lähes poikkeuksetta heittoa. Syntynyttä virhettä voidaan korjata olettamalla jokin suure epätarkaksi. Tämän suureen avulla voidaan iteratiivisesti etsiä sopiva arvo, jolla energiatase saadaan täsmäämään. Esimerkkilaitokselle tehdyn mallin osalta käytettiin polttoainevirtaa muuttujana. Työhön tarkoitetuilla lähtöarvoilla energiataseessa oli huomattava ero sisäänmenossa ja ulostulossa. Testaamalla eri polttoaineen massavirtoja saatiin ero mitättömäksi. Polttoaineen massavirran vaikutus energiataseeseen on esitetty kuvassa 9.



Kuva 9. Polttoaineen massavirran vaikutus energiataseeseen.

Kuvaajan perusteella polttoaineen massavirran arvolla 51,25 kg/s saavutetaan mitättömän pieni ero energiataseeseen sisäänmenon ja ulostulon välillä. Toki on huomioitava, että todellisesti ero energiataseessa on monien tekijöiden summa. Energiataseeseen vaikuttaa myös olennaisesti polttoaineen lämpöarvo ja aineiden muodostamat entalpiavirrat kattilaan.

FluidPropin eri kirjastojen välillä on myös eroja, joka vaikuttaa energiataseen ainevirtojen muodostamiin energiavirtoihin. Esimerkiksi vesihöyryn entalpian erot 10 barin paineessa (abs.) ja 500 °C lämpötilassa eri kirjastojen välillä on esitetty taulukossa 6.

Taulukko 6. Tietokantojen väliset erot laskettaessa entalpiaa verrattuna referenssitilaan.

Tietokanta	GasMix	FreeStanMix	IF97	TPSI
Entalpia [kJ/kg]	941,3	932,6	3479,0	3478,0

Taulukosta käy ilmi, että GasMix ja FreeStanMix käsittelee fluidin nestefaasissa, kun taas IF97 ja TPSI kaasumaisena. Entalpiaa laskettaessa kiinnostaa lähinnä kahden tilapisteen välinen entalpiaero. Laskettaessa entalpiaero tilapisteiden 1 (10 bar ja 500°C) ja 2 (5 bar ja 250°C) tasoittuu tietokantojen väliset erot. Erot lasketuissa entalpiaeroissa on esitetty taulukossa 7.

Taulukko 7. Tietokantojen väliset eroavaisuudet laskettaessa entalpiaeroa.

Tietokanta	GasMix	FreeStanMix	IF97	TPSI
Entalpiaero [kJ/kg]	511,6	512,6	517,9	518

Tietokantojen välille ei synny merkittäviä eroja, joten tietokannan valinta ei vaikuta lopputulokseen merkittävästi, mutta sisältää kuitenkin epävarmuutta. Käytettävää tietokantaa valittaessa on kuitenkin huomioitava tietokannan omat rajoitteet. GasMix osoittautui ainoaksi tietokannaksi, joka kattoi kaikki tarvittavat fluidit. Tietokantoja voi käyttää myös sekaisin, kunhan laskee kunkin aineen entalpia eron saman tietokannan avulla. Esimerkiksi laskentaohjelmassa päädyttiin käyttämään kaasujen osalta GasMixiä ja vesihöyrykierron osalta IF97-tietokantaa.

7 YHTEENVETO

FluidProp ohjelma soveltuu hyvin fluidien käsittelyyn erilaisten mallien kehityksessä. Yksinkertaisissa yksifaasisissa tilanteissa ohjelman käyttö ei vaadi paljoa huomioitavaa. Joidenkin tietokantojen osalta kaksifaasisissa tilanteissa käyttäjän on tarkkailtava ovatko tietokannan antamat tulokset neste- vai kaasufaasin arvoja.

Tämän työn osalta FluidPropia käytettiin lähinnä kaasuseosten muodostamiseen ja niiden entalpiaerojen laskemiseen. FluidProp sisältää kuitenkin paljon muitakin termodynaamisia ominaisuuksia, jotka voisivat olla hyödynnettävissä energiatekniikan mallinnuksessa. Myös maksullisten tietokantojen käyttö avaa lisää mahdollisuuksia ohjelman monipuoliselle käytölle.

FluidProp:n käyttö vaatii hetken harjoittelua ja kokeilua, sillä sen käyttöön ei ole saatavissa kattavia ohjeita. Ohjelma osoittautui kuitenkin pienen harjoittelun jälkeen todella nopeaksi, jolloin sitä tuli käytettyä muidenkin töiden tukena. Erityisen hyödylliseksi osoittautui ilman ominaisuuksien laskenta. Myös veden ja vesihöyryn laskenta käyttämällä FluidProp:n IF97-tietokantaa oli usein nopein vaihtoehto entalpian, tiheyden tai lämpötilan määrittämiseen.

Opinnäytetyön ohessa rakennettu laskentaohjelma hyödyntää FluidPropia sisään tulevan ilman, veden ja vesihöyryn entalpiamuutosten ja savukaasuhäviön laskennassa. Aineiden muodostumisentalpioiden sisällyttäminen FluidPropiin tekisi siitä entistä käyttökelpoisemman. FluidPropin avulla voitiin myös laskea aineiden ja yhdisteiden moolimassoja, kunhan kaikki yhdisteen alkuaineet olivat osana jotakin tietokantaa.

LÄHDELUETTELO

Boslaugh, S.E. 2014. Pyrolysis. Julkaistu 30.5.2014. [Verkkodokumentti]. Saatavissa: <https://www.britannica.com/science/pyrolysis> [Viitattu 12.13.17].

Colonna, P. & van der Stelt, T.P. 2016. FluidProp.

Crowe, C. T. 2005. Multiphase flow handbook. Boca Raton, FL: Taylor & Francis.

Davidson, M. 2014. Theories of Variable Mass Particles and Low Energy Nuclear Phenomena. *Foundations of Physics* 44.2 (2014): 144-174.

de las Obras-LoCERTALES, M., de Diego, L.F., García-Labiano, F., Rufas, A., Abad, A., Gayán, P., Adánez, J. 2014. Sulfur retention in an oxy-fuel bubbling fluidized bed combustor: Effect of Coal Rank, Type of Sorbent and O₂/CO₂ Ratio. *Fuel* 137 (2014): 384-392.

Gao, X., Du, Z., Ding, H., Wu, Z., Lu, H., Luo, Z., Cen, K. 2010. Kinetics of NO_x Absorption into (NH₄)₂SO₃ Solution in an Ammonia-Based Wet Flue Gas Desulfurization Process. *Energy Fuels* 24, 5876–5882. <https://doi.org/10.1021/ef101137k>

Hao, J., Yu, W., Lu, P., Zhang, Y., Zhu, X. 2015. The effects of Na/K additives and flyash on NO reduction in a SNCR process. *Chemosphere* 122, 213–218.

Himmelblau, D. M. 1989. Basic principles and calculations in chemical engineering. 5th ed. Englewood Cliffs (NJ): Prentice-Hall.

Hou, X., Schmiegel, S.J., Li, W., Epling, W.S. 2012. NH₃ pulsing adsorption and SCR reactions over a Cu-CHA SCR catalyst. *Catalysis Today* 197.1 (2012): 9-17.

Huhtinen, M. 2008. Voimalaitostekniikka. Opetushallitus.

Kaikko, J. 2017. Voimalaitosopin kurssimateriaali. LUT Energia.

Myöhänen, K., 2011. Modelling of combustion and sorbent reactions in three-dimensional flow environment of a circulating fluidized bed. Väitöskirja. LUT Energia.

Myöhänen, K., Diego, R., Kuivalainen, R., Hyppänen, T. 2017. Modelling Supported Development of Oxy-CFB Combustion. Energy Procedia 114 (2017): 589-599.

Paiho, S., Hoang, H., Hukkalainen, M., Westerberg, R. 2015. Paikallista energiaa asuinalueella. Esimerkkinä Helsingin Vartiosaari. VTT Technology: 234, Espoo, VTT, Saatavissa: <http://www.vtt.fi/inf/pdf/technology/2015/T234.pdf>

Raiko, R., Saastamoinen, J., Hupa, M., Kurki-Suonio, I. 1995. Poltto ja palaminen. Teknillistieteelliset akatemit.

Rayaprolu, K. 2009. Boilers for Power and Process. CRC Press.

Vakkilainen, E. 2010. Höyrykattilatekniikka kurssimateriaali. LUT Energia.

Wagner, W., Kruse, A. 1998. Properties of Water and Steam, The Industrial Standard IAPWS-IF97 for the Thermodynamic Properties and Supplementary Equations for Other Properties, Springer-V erlag Berlin Heidelberg.

LIITE 1. FLUIDPROP:N YKSIKKÖJÄRJESTELMÄT

Property name	Symbol	Default unit set	SI unit set	Anglo-Saxon unit set
Pressure	P	bar	Pa	psia
Temperature	T	°C	K	°F
Specific volume	v	m ³ /kg	m ³ /kg	ft ³ /lb
Density	d	kg/m ³	kg/m ³	lb/ft ³
Enthalpy	h	kJ/kg	J/kg	Btu/lb
Entropy	s	kJ/kg/K	J/kg/K	Btu/lb/°R
Internal energy	u	kJ/kg	J/kg	Btu/lb
Isobaric heat capacity	cp	kJ/kg/K	J/kg/K	Btu/lb/°R
Isochoric heat capacity	cv	kJ/kg/K	J/kg/K	Btu/lb/°R
Speed of sound	c	m/s	m/s	ft/s
$(\delta P/\delta \rho)_u$	alpha	m ² /s ²	m ² /s ²	ft ² /s ²
$(\delta P/\delta u)_\rho$	beta	kg/m ³	kg/m ³	lb/ft ³
$(\delta s/\delta \rho)_u$	chi	N.m ⁴ /kg ² /K	N.m ⁴ /kg ² /K	lbf.ft ⁴ /lb ² /°R
$(\delta s/\delta u)_\rho$	fi	K ⁻¹	K ⁻¹	°R ⁻¹
$(\delta \rho/\delta h)_P$	ksi	kg ² /N/m ⁴	kg ² /N/m ⁴	lb ² /lbf/ft ⁴
$(\delta \rho/\delta P)_h$	psi	s ² /m ²	s ² /m ²	s ² /ft ²
$(\delta T/\delta v)_u$	zeta	kg.K/m ³	kg.K/m ³	lb.°R/ft ³
Volumetric thermal expansion coefficient	theta	K ⁻¹	K ⁻¹	°R ⁻¹
Isothermal compressibility	kappa	bar ⁻¹	Pa ⁻¹	psia ⁻¹
Dynamic viscosity	eta	Pa.s	Pa.s	lb/ft/s
Thermal conductivity	lambda	W/m/K	W/m/K	Btu/h/ft/°F

Property name	Base units				
Length	m	in	ft	yd	mi
Mass	g	lb	oz		
Time	s	min	h	d	y
Temperature	K	°C	°F	°R	
Temperature difference	K	°C	°F	°R	
Area	m ²	a	sq in	sq ft	sq yd acre
Volume	m ³	L	cu in	cu ft	cu yd cc
Speed	m/s	mph	kn		
Force	N	gf	lbf		
Pressure, stress	Pa	bar	atm	mHg	psia
Energy, work, heat	J	Wh	cal	Btu	
Power	W	hp			

LIITE 2. LASKENTAOHJELMAN PÄÄTAULUKOT

CASE 1

Input	Fuel			Limestone		Gas input		Other		Total	
	Molar mass [kg/mol]	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s
AR	0,40			0,00		0,00		0,00		0,00	0,00
C	0,01	26,14		2176,67	0,61	50,63	1,38	115,05		0,00	28,13
H	0,00	2,70		2674,18	0,00	0,81	0,17	171,51	0,02	21,09	2,89
N	0,01	0,39		27,96		0,00	317,96	22700,25		0,00	318,35
O	0,02	12,61		788,05	2,44	152,30	99,18	6199,00	0,17	10,55	114,39
S	0,03	0,66		20,48	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,66
Ca	0,04	0,21		5,14	2,03	50,63					2,24
Ash		10,30		0,15							10,45
TOTAL		53,00		5692,48	5,23	254,37	418,69	29185,81	0,19	31,64	477,11

Output	Flue gas			Bottom ash		Fly ash		Other		Total	
	Molar mass [kg/mol]	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s
AR	0,40	0,00		0,00	0,00	0,00		0,00		0,00	0,00
C	0,01	26,20		2181,77	0,05	3,93	0,12	9,99	0,00	0,00	26,37
H	0,00	3,04		3013,96	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,04
N	0,01	318,27		22722,86	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	318,27
O	0,02	111,43		6964,63	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	111,43
S	0,03	0,03		0,95	0,48	14,99	0,67	20,80	0,00	0,00	1,18
Ca	0,04	0,00		0,00	1,38	34,64	2,05	51,18	0,00	0,00	3,44
Ash				6,98		10,06			0,00	0,00	17,05
TOTAL		458,97		34884,16	8,90	53,56	12,90	81,97	0,00	0,00	480,77

Energy Balance

Input	Fuel	Limestone	Gas in 1	Gas in 2	Gas in 3	Gas in 4	Other
Temperature [°C]	53,91	25,00		286,58	90,27	60,00	20,00
cp [kJ/kgK]	1,00	1,00					4,19
Δh [kJ/kg]			294,16	91,49	60,74		
Mass flow [kg/s]	53,00	5,23	411,12	2,29	4,12		0,19
E_in [kW]	2857,00	130,70	120934,21	209,79	250,37		15,92
							124397,99

Reaction	Fuel	Limestone	Water evaporation
E_reaction [kW]	1036988,39	794,38	-18071,02
			1019711,74

Output	Fly ash	Bottom ash	Flue gas 1	Losses	To steam
Temperature [°C]	870,00	875,00	870,00		
cp [kJ/kgK]	1,00	1,00			
Δh [kJ/kg]			1008,78		
Mass flow [kg/s]	12,90	8,90	458,97		
E_in [kW]	11223,00	7787,50	463005,85	1700,00	624115,76
					1107832,12

ΔEnergy 36277,61 kW
36,28 MW

CASE 2

Input	Fuel			Limestone		Gas input		Other		Total	
	Molar mass [kg/mol]	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s
AR	0,40			0,00		0,00		0,00		0,00	0,00
C	0,01	21,43		1784,36	0,46	37,91	1,64	136,50		0,00	23,53
H	0,00	2,42		2396,23	0,00	0,61	0,21	206,26	0,01	12,21	2,64
N	0,01	0,32		22,61	0,00	0,00	256,33	18300,29		0,00	256,64
O	0,02	11,74		734,07	1,82	114,04	81,02	5063,74	0,10	6,11	94,68
S	0,03	0,60		18,77	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,60
Ca	0,04	0,17		4,17	1,52	37,91					1,69
Ash		6,37		0,11							6,48
TOTAL		43,04		4960,21	3,91	190,48	339,19	23706,79	0,11	18,32	386,26

Output	Flue gas			Bottom ash		Fly ash		Other		Total	
	Molar mass [kg/mol]	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s	kg/s	mol/s
AR	0,40	0,00		0,00	0,00	0,00		0,00		0,00	0,00
C	0,01	21,48		1788,49	0,03	2,25	0,16	13,46	0,00	0,00	21,67
H	0,00	3,02		2994,48	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,02
N	0,01	257,95		18416,15	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	257,95
O	0,02	92,57		5785,92	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	92,57
S	0,03	0,03		0,78	0,25	7,90	0,52	16,11	0,00	0,00	0,79
Ca	0,04	0,00		0,00	0,72	18,08	1,53	38,15	0,00	0,00	2,25
Ash				3,50		7,64			0,00	0,00	11,14
TOTAL		375,05		28985,82	4,50	28,23	9,85	67,72	0,00	0,00	389,40

Energy Balance

Input	Fuel	Limestone	Gas in 1	Gas in 2	Gas in 3	Gas in 4	Other
Temperature [°C]	25,00	25,00		288,66	97,95	42,67	20,00
cp [kJ/kgK]	1,00	1,00					4,19
Δh [kJ/kg]			296,35	99,31	43,17		
Mass flow [kg/s]	43,04	3,91	331,28	2,41	4,11		0,11
E_in [kW]	1076,10	97,87	98174,65	239,37	177,57		9,22
							99774,77

Reaction	Fuel	Limestone	Water evaporation
E_reaction [kW]	815479,30	4344,14	-18545,22
			801278,21

Output	Fly ash	Bottom ash	Flue gas 1	Losses	To steam
Temperature [°C]	819,00	835,00	32,90		
cp [kJ/kgK]	1,00	1,00			
Δh [kJ/kg]			944,01		
Mass flow [kg/s]	9,85	4,50	375,05		
E_in [kW]	8067,94	3757,50	354044,49	1700,00	522684,51
					890254,44

ΔEnergy 10798,54 kW
10,80 MJ

Library for Fluidprop

Gasmix

Losses [MW] (excl. ash and fluegas)	1,7	1,7
Operation pressure [bar]	1	1
Water spray to furnace [kg/s]	0,19	0,11
Water spray temperature [°C]	20	20
Bed temperature [°C]	875	835

Fuel properties

Fuel flow [kg/s]	53	43,00534
Temperature [°C]	53,9057	25
c_p if know, otherwise 1 [kJ/kgK]		

Analysis (wt-% fractions)

Char	39 %	0,3871	0,39156	0,3916
Volatiles	26 %	0,2621	0,26521	0,2652
Moisture	15 %	0,1510	0,191	0,1910
Ash	19 %	0,1943	0,14805	0,1481
CaCO ₃	0 %	0,0000	0	0,0000
CaO	1 %	0,0054	0,00418	0,0042

Heat value [MJ/kg]	HHV	LHV	HHV	LHV
	23,503	19,56582	24,039	18,96228

Fuel ultimate analysis (dry-ash-free)

	(wt-frac)	(molar-frac)	(wt-frac)	(molar-frac)
Coal, C		0,500858	0,760	0,75878
Hydrogen, H		0,410068	0,052	0,05297
Nitrogen, N		0,006431	0,011	0,01121
Sulphur, S		0,004714	0,019	0,02131
Oxygen, O		0,077929	0,157	0,15573

Use molar wt or molar fractions,
leave another empty.**Limestone**

Mass flow [kg/s]	5,22422	3,91191
Temperature [°C]	25	25
c_p if know, otherwise 1 [kJ/kgK]		

Sulphur retention [-]	0,95155522	0,931862
-----------------------	------------	----------

Analysis	(wt-frac)	(wt-frac)
	CaCO ₃	0,97
CaO	0	0
CaSO ₄	0	0
CaS	0	0
Inert	0,0293	0,0293
Moisture	0,0007	0,0007

Flue gas

Flue gas temp [°C]	870	819
--------------------	-----	-----

composition

O ₂ (vol-%,wet)	3,43	3,45
CO (ppm,dry)	26	32,9
SO ₂ (ppm,dry)	60,7	60,1

Ash

Bottom ash flow [kg/s]	8,9	4,5
Heat cap [kJ/kgK]	1	1
Fly ash flow [kg/s]	12,9	9,8
Heat cap [kJ/kgK]	1	1

Bottom ash analysis (wt-%)

C carbonate	0,0026	0,0018
C combustible	0,0027	0,0042
S	0,054	0,0563
Ca	0,156	0,161

Fly ash analysis (wt-%)

C carbonate	0,0018	0,003
C combustible	0,0075	0,0135
S	0,0517	0,0527
Ca	0,159	0,156

Input gas

Pressure [bar]	1	1
----------------	---	---

Input gas composition

	(wt-frac)	(wt-frac)
O ₂	0,2306	0,2297
CO ₂	0,0005	0,0005
H ₂ O	0,0074	0,011
SO ₂	0	0
CO	0	0
AR	0	0
N ₂	0,7615	0,7588