

EXEMPLE D'APPLICATION DE PROSIMPLUS

CENTRALE A CYCLE COMBINE A GAZEIFICATION INTEGREE

INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple présente la simulation d'un cycle combiné à gazéification intégrée à partir d'un déchet.

DIFFUSION	☒ Libre-Internet	☐ Réservée clients	☐ Restreinte	☐ Confidentielle
-----------	--	---	-------------------------------------	---

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	PSPS_EX_FR-Centrale-CCGI.pmp3
----------------------------------	-------------------------------

Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. Fives ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.

Energy

Fives ProSim

Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE

Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30

S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487

www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

TABLE DES MATIERES

1. SIMULATION DU PROCEDE	3
1.1. Présentation du procédé	3
1.2. Diagramme du procédé	4
1.3. Constituants	4
1.3.1. Constituant Coal (« Waste »)	4
1.3.2. Liste globale des constituants	9
1.4. Modèle thermodynamique	10
1.5. Réactions	10
1.6. Opérations unitaires du bloc « Gasification island »	13
1.6.1. Bloc d'unité de séparation de l'air (« Air Separation Unit (ASU) »)	13
1.6.2. Bloc gazéification (« Gasifier »)	17
1.6.3. Bloc de purification du gaz et de récupération énergétique (« H2S Removal and Heat Recovery »)	34
1.6.4. Bloc de traitement du gaz (« Gas Cleaning »)	37
1.6.5. Bloc de saturation du gaz en eau (« Saturator »)	39
1.7. Opérations unitaires du bloc « Combined cycle »	40
1.7.1. Bloc de la turbine à gaz (« Gas turbine »)	40
1.7.2. Bloc de récupération énergétique et de génération de vapeur (« Heat Recovery Steam Generator (HRSG) »)	41
1.7.3. Bloc des turbines vapeur (« Steam turbines »)	43
2. RESULTATS DE SIMULATION	46
2.1. Résumé des résultats	46
2.2. Puissance électrique produite “nette” et efficacité de l'installation	49
3. BIBLIOGRAPHIE	52

1. SIMULATION DU PROCEDE

1.1. Présentation du procédé

Cet exemple présente la simulation d'une centrale à Cycle Combiné à Gazéification Intégrée (CCGI). Ce procédé est utilisé pour transformer le charbon et / ou d'autres combustibles à base de carbone en « syngas » (également appelé « gaz de synthèse ») au moyen d'une oxydation partielle avec de l'air, de l'oxygène ou de la vapeur. Les principales entrées du procédé sont l'air (comme comburant) et les déchets « waste » (comme combustible). Le charbon « coal » (appelé « Waste » dans cet exemple) est converti en gaz de synthèse à travers des réactions de gazéification et de combustion dans le gazéifieur. Le gazéificateur fonctionne à haute pression et avec de l'oxygène pur (séparé dans une unité de séparation d'air « ASU »).

Contrairement aux procédés de combustion du charbon, la gazéification est réalisée avec moins d'oxygène. Par conséquent, le gaz combustible obtenu est composé principalement de monoxyde de carbone (CO) et d'hydrogène (H₂). Les impuretés sont éliminées du gaz de synthèse « syngas » avant d'entrer dans le cycle de production d'énergie « Combined cycle ». Certains de ces polluants, tel que le soufre (S), peuvent être transformés en sous-produits réutilisables grâce au procédé « Claus ».

Avec un réacteur supplémentaire, une réaction de gaz à l'eau (Water Gas Shift) peut augmenter l'efficacité de la gazéification et réduire les émissions de monoxyde de carbone (CO) en le convertissant en dioxyde de carbone (CO₂). Le dioxyde de carbone résultant de la réaction WGS peut être séparé, comprimé et stocké par séquestration.

Ces premières opérations (préparation du charbon, gazéification, épuration des gaz) représentent le bloc « Gasification island » d'une installation CCGI.

Ensuite, la chaleur excédentaire provenant de la gazéification et de la combustion du « syngas » est transmise à un cycle de vapeur, similaire à une turbine à gaz à cycle combiné. Ce second bloc est appelé bloc « Combined cycle ».

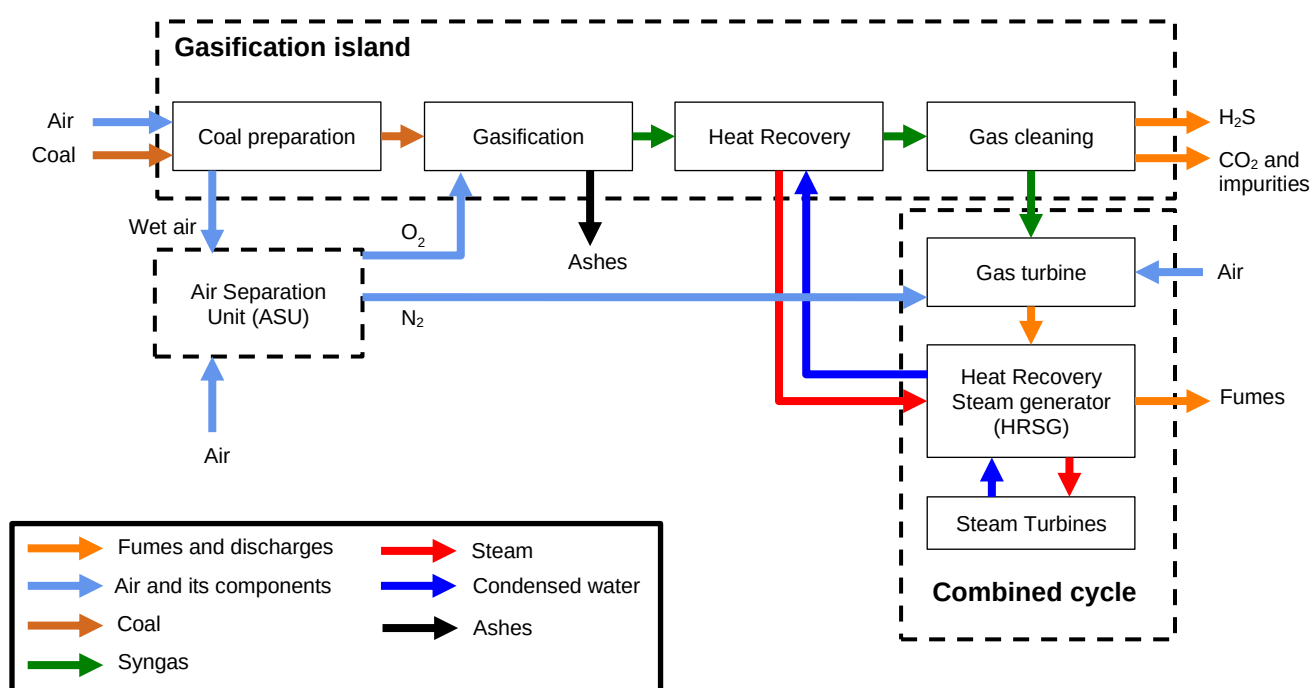
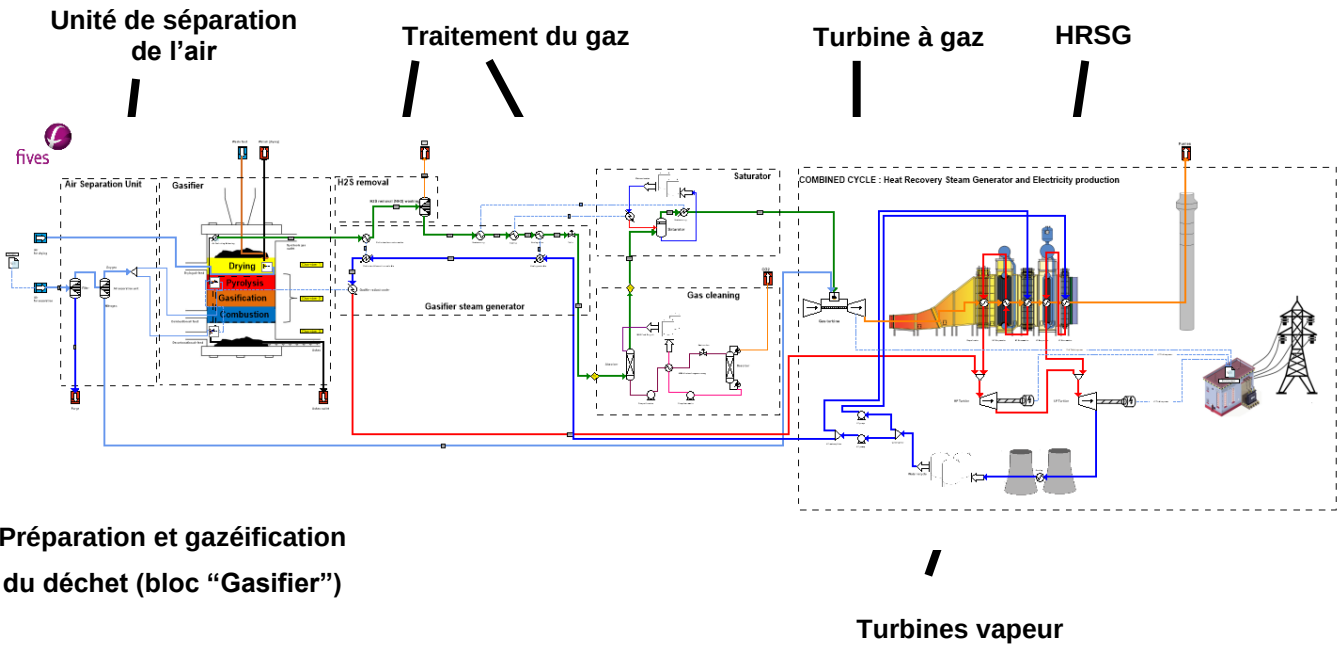


Schéma bloc d'une installation CCGI

Les données d'entrée et les résultats de cet exemple sont basés sur les installations CCGI présentées dans les références [EDW07], [ENE17] et [NAY11].

1.2. Diagramme du procédé

Le diagramme du procédé est divisé en plusieurs blocs en adéquation avec le schéma bloc présenté plus haut.



1.3. Constituants

1.3.1. Constituant Coal (« Waste »)

La composition du déchet « Coal » (« Waste ») est décrite ci-dessous :

Elément	Pourcentage (% mas.)
Cendres	7.24
Carbone (C)	73.81
Hydrogène (H)	4.88
Azote (N)	1.42
Soufre (S)	2.13
Oxygène (O)	5.41
Humidité (H ₂ O)	5.05

Composition du déchet « Coal »

Le déchet « Coal » est un solide non conventionnel et, par conséquent, le composé ne peut pas être chargé directement à partir de la base de données DIPPR intégrée dans Simulis Thermodynamics [ROW17]. Le déchet doit être créé en tant que nouveau composé et sa composition doit être saisie sous une forme appropriée à ProSimPlus.

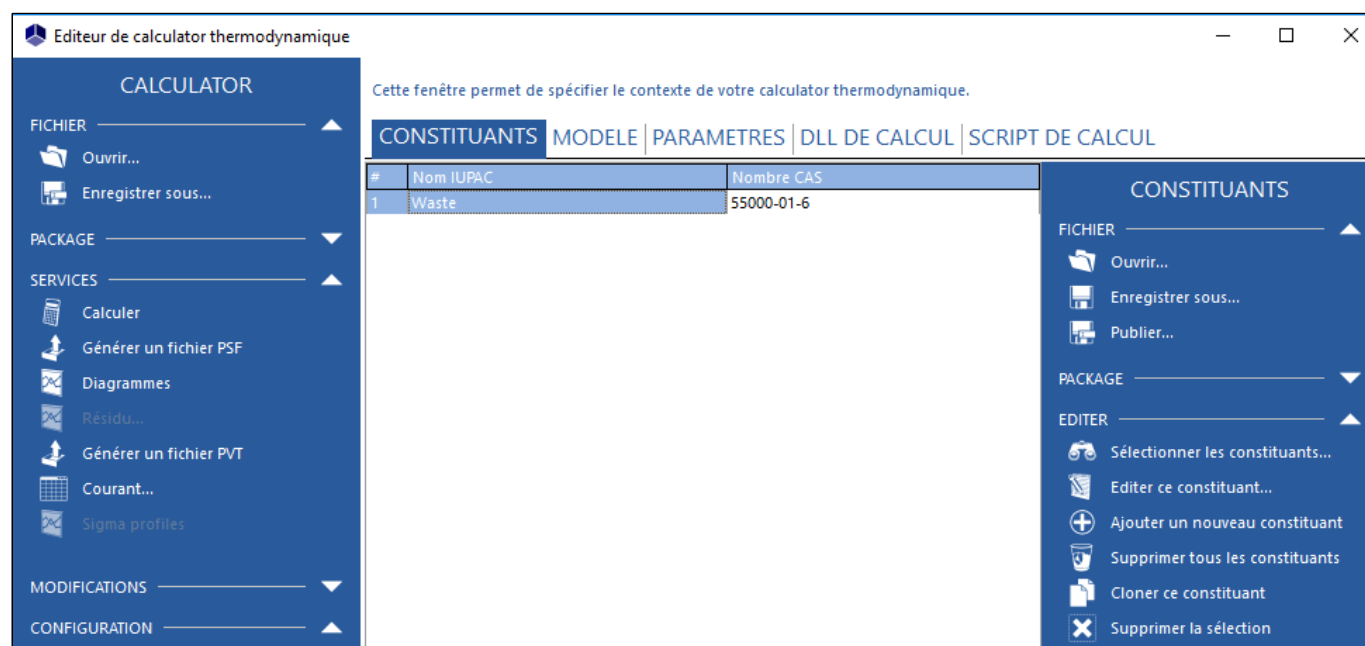
Le déchet « Coal » est composé de 3 constituants suivant la terminologie de Simulis Thermodynamics:

- « Waste » : constituant « CHONS » créé avec les outils ProSimPlus ;
- « Ashes » : dans cet exemple, les cendres ont été considérées comme du dioxyde de silicium (SiO_2). Ce composé est le plus communément trouvé dans la nature et le charbon « coal » et représente bien les inertes d'un flux de déchets (les propriétés critiques (T_c , P_c , Z_c , V_c) de ce composé a été supprimée pour imposer l'état solide de ce composé quelque soit la température de travail du système). ;
- « Water » : pour représenter l'humidité.

La composition du constituant « Waste » est calculée comme suit (voir « Constituant_Coal.xlsx ») :

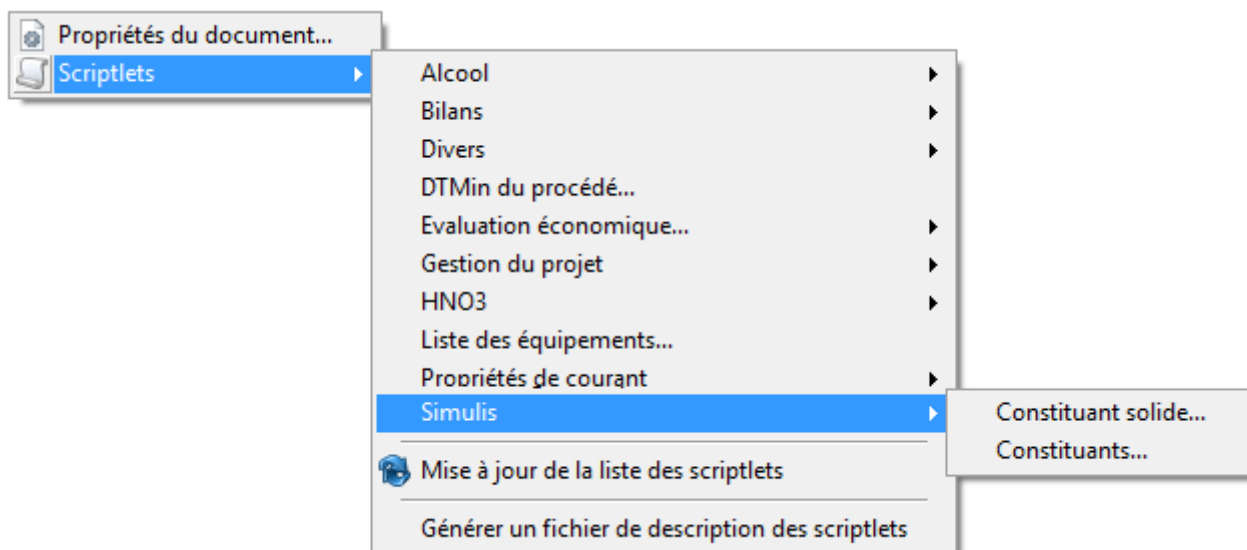
Elément	Pourcentage (% mas)
Carbone (C)	84.15
Hydrogène (H)	5.56
Azote (N)	1.69
Soufre (S)	2.43
Oxygène (O)	6.17

Le constituant « Waste » est créé avec la fonction « Ajouter un nouveau constituant » dans l'éditeur de calculator de Simulis Thermodynamics :

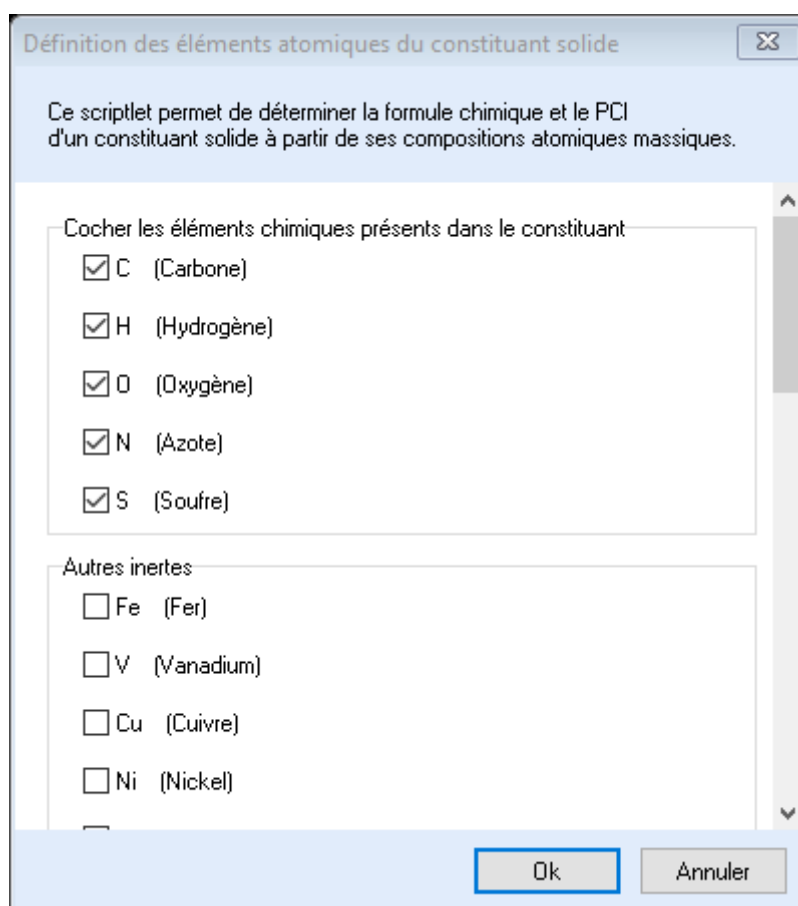


Remarque : le nom du nouveau constituant doit être modifié ainsi que le numéro CAS associé (55000-01-6).

Ensuite, le constituant « Waste » est modifié en utilisant le scriptlet « Constituant solide » (plus de détails peuvent être trouvés dans [NT172]). Ce scriptlet est accessible par un simple clic droit sur la zone de dessin de ProSimPlus.



La fenêtre suivante est affichée et les éléments atomiques doivent être décrits :



Dans cet exemple, seuls les éléments atomiques C, H, O, N, et S sont utilisés.

Le scriptlet « Constituant solide » permet à l'utilisateur d'estimer la chaleur de combustion du solide (Pouvoir Calorifique Inférieur : PCI) ou de fournir la valeur du PCI directement dans la fenêtre du scriptlet.

Le nombre d'éléments atomiques (C) de la formule chimique du déchet est une donnée d'entrée du scriptlet. Cette donnée d'entrée n'a pas d'effet sur les résultats massiques de la simulation (seuls les résultats molaires sur les courants avec le déchet « Waste » sont différents).

La composition et le débit du déchet sont donnés en massique. Ainsi, le nombre d'atomes de carbone défini dans le scriptlet n'a pas d'effet sur les résultats massiques de la simulation.

Remarque : les coefficients stœchiométriques sont différents selon le nombre d'atomes de carbone (C) (cf.1.5 Réactions).

Résultats du scriptlet avec un nombre d'atomes de carbone (C) de 10 000 :

Atom	Fraction massique (-)	Fractions molaires (-)	Formule chimique	Formule chimique (pour un réacteur équilibré)	Mw (g/mol)	DH0f (J/mol)	DG0f (J/mol)	PCI (kJ/kg)	PCS (kJ/kg)	Réaction de décomposition en C, H2, O2, N, S	Coef. Stoe.
C	0.84	0.535	10000	10000	142350	-4.413618E7	69414880	34189.7	35405.8	Compound	-1.00
H	0.055	0.421	7872	7872						C	10000
O	0.062	0.0294	550	550						H2	3936
N	0.016	0.0088	165	165						O2	275
S	0.022	0.0053	99.7	100						N2	82.5
										S	99.7

Résultats du scriptlet avec un nombre d'atomes de carbone (C) de 1 :

Atom	Fraction massique (-)	Fractions molaires (-)	Formule chimique	Formule chimique (pour un réacteur équilibré)	Mw (g/mol)	DH0f (J/mol)	DG0f (J/mol)	PCI (kJ/kg)	PCS (kJ/kg)	Réaction de décomposition en C, H2, O2, N, S	Coef. Stoe.
C	0.84	0.535	1	1	14.235	-4413.618	6941.488	34189.7	35405.8	Compound	-1.00
H	0.055	0.421	0.7872	0.7872						C	1
O	0.062	0.0294	0.055	0.055						H2	0.3936
N	0.016	0.0088	0.0165	0.0165						O2	0.0275
S	0.022	0.0053	0.00997	0.01						N2	0.00825
										S	0.00997

Le scriptlet permet à l'utilisateur de changer **automatiquement** les propriétés du constituant sélectionné en utilisant les résultats du scriptlet.

Editeur de constituant

CONSTITUANT

FICHIER

- Ouvrir...
- Enregistrer sous...

OUTILS

- Sélectionner un constituant...
- Copier
- Coller
- Export PDF (Impression)
- Exporter vers Excel
- Importer
- Exporter
- Pseudo-constituant...
- Prediction de propriétés...

AFFICHAGE

- Créer une vue
- Supprimer cette vue
- Modifier cette vue

MODIFICATIONS

- Défaire
- Refaire

Nom : Waste
ID : {20486022-E1F0-45F5-9ED2-B422A1A87389}
ID original :
Emplacement original : \\

Aide sur les propriétés...

Complète

Propriétés	Valeur
Identification	
Nom IUPAC	Waste
Nom spécifique	Waste
Nombre CAS	55000-01-6
Famille chimique	Composés Organique...
Formule chimique	CH
Smiles	
Identifiant de jeu	
N° intrinsèque (Spécifique ProSim)	0
Synonymes	
Commentaires sur le constituant	Decomposition: 1.Co...
Fichier Cosmo	<inconnu>
Modèle de contribution de groupe	
Atomique	
Changement de phase	
Combustion, sécurité, toxicité	
Pouvoir calorifique inférieur	34142,249892925 kJ/kg
Pouvoir calorifique supérieur	35356,1009601006 kJ/kg
Enthalpie de combustion	
Limite inférieure d'explosivité dan...	<inconnu>
Limite supérieure d'explosivité da...	<inconnu>
Limite inférieure d'explosivité dan...	<inconnu>
Limite supérieure d'explosivité da...	<inconnu>
Point éclair	
Température d'inflammabilité	

Decomposition: 1.Compound --> 1.C + 0,393616369106565.H2 + 2,75184566250743E-02.O2 + 8,25332177303251E-03.N2 + 1,08176180357018E-02.S

Appliquer

OK Annuler

Fenêtre d'édition du constituant "Waste"

1.3.2. Liste globale des constituants

Les constituants utilisés dans cet exemple sont listés dans le tableau suivant. L'ordre des constituants doit être défini comme suit car cet ordre est prédéfini dans certains scripts de la simulation (cf. suite du document).

Nom	Formule chimique	Numéro CAS
Waste	$\text{CH}_{0,787}\text{O}_{0,055}\text{N}_{0,0165}\text{S}_{0,0099}$	55000-01-6
Char	C	7440-44-0
Oxygen	O ₂	7782-44-7
Nitrogen	N ₂	7727-37-9
Water	H ₂ O	7732-18-5
Hydrogen	H ₂	1333-74-0
Carbon monoxide	CO	630-08-0
Carbon dioxide	CO ₂	124-38-9
Methane	CH ₄	74-82-8
Toluene	C ₇ H ₈	108-88-3
Naphthalene	C ₁₀ H ₈	91-20-3
Hydrogen sulfide	H ₂ S	7783-06-4
Sulfur dioxide	SO ₂	7446-09-5
Nitric oxide	NO	10102-43-9
Nitrogen dioxide	NO ₂	10102-44-0
Ashes	SiO ₂	14808-60-7
Sulfur	S	7704-34-9
Sulfur trioxide	SO ₃	7446-11-9
Monoethanolamine	C ₂ H ₇ NO	141-43-5

Constituants
DIPPR

1.4. Modèle thermodynamique

Le CCGI est divisé en plusieurs blocs qui traitent de différents composants tels que le solide, le gaz de synthèse, l'eau pure, la monoéthanolamine (MEA). Afin d'obtenir des résultats réalistes, plusieurs « calculator » thermodynamiques sont définis pour simuler le procédé CCGI :

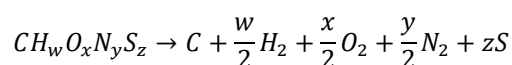
- « Global calculator » : contient la liste globale des constituants définie précédemment et est défini avec un profil thermodynamique « Idéal ». Ce calculator est utilisé pour modéliser le gaz de synthèse « syngas » (différents hydrocarbures) et les courants de fumées pour lesquels le mélange idéal (pas d'interaction entre molécules) est pris en compte. En effet, ces flux subissent uniquement un traitement thermique par l'intermédiaire d'un échangeur de chaleur et aucun équilibre entre phases (ballon flash par exemple) n'a lieu sur les conduites de gaz de synthèse et de fumées ;
- « Gasification drying » : contient la liste globale des constituants définie précédemment et est défini avec un profil thermodynamique « Applications bio avec solides ». Ce calculator est spécifiquement utilisé pour simuler le séchage du déchet avec un flash. En effet, l'équilibre qui se produit dans le ballon flash doit être précis pour représenter la séparation du solide de l'air de séchage ;
- « Syngas cleaning » : contient la liste globale des constituants définis précédemment et est défini avec un profil thermodynamique « Amines et gaz acides ». Ce calculator est utilisé pour modéliser l'élimination du CO₂ à l'aide de la MEA (bloc « Gas cleaning » du procédé) ;
- « Pure water » : contient uniquement le constituant « WATER » et est donc défini avec un profil thermodynamique « Eau pure » (basé sur les tables de vapeur NBS / NRC). Ce calculator est utilisé pour modéliser les courants d'eau.

Plus d'informations sur ces différents modèles sont accessibles dans le guide de l'utilisateur des modèles thermodynamiques, accessible depuis l'onglet « MODÈLE » de l'éditeur de calcul Simulis Thermodynamics.

1.5. Réactions

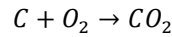
Plusieurs réactions ont lieu dans le procédé de gazéification. De ce fait, 6 jeux de réactions ont été définis :

- Jeu de réactions « Decomposition » : ce jeu présente une seule réaction basée sur les coefficients stœchiométriques calculés par le scriptlet « Constituant solide » :

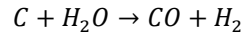
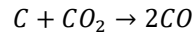


Décomposition en C, H ₂ , O ₂ , N, S	Coef. Stoe.	Notation
Compound	-1.00	-
C	1	-
H ₂	0.3936	w/2
O ₂	0.0275	x/2
N ₂	0.00825	y/2
S	0.00997	z

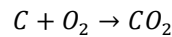
- Jeu de réactions « Combustion » : réaction conventionnelle du carbone (C) :



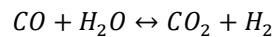
- Jeu de réactions « Gasification » : réactions conventionnelles de gazéification du carbone (C) :



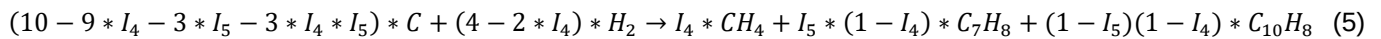
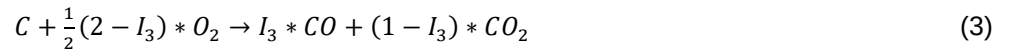
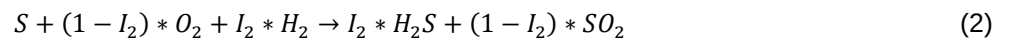
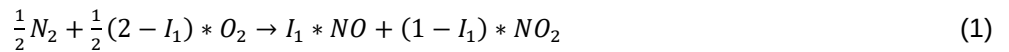
- Jeu de réaction « Decarbonation » : réaction conventionnelle de combustion du carbone (C) :



- Jeu de réaction « WGS » : réaction du gaz à l'eau (« water gas shift ») :



- Jeu de réaction « Balancing » : ce jeu de réactions présente les réactions de pyrolyse. Ces réactions sont décrites par des taux de répartition (I_1, I_2, I_3, I_4, I_5) :



Avec :

I_1 : Taux de répartition entre NO et NO₂ (%)

I_2 : Taux de répartition entre H₂S et SO₂ (%)

I_3 : Taux de répartition entre CO et CO₂ (%)

I_4 : Taux de répartition entre CH₄ et les goudrons (C₇H₈, C₁₀H₈) (%)

I_5 : Taux de répartition entre C₇H₈ et C₁₀H₈ (%)

Remarque : l'ordre des réactions du jeu « Balancing » doit rester identique à la description ci-dessus car les réactions sont utilisées et prédéfinies dans cet ordre dans le script du réacteur « Balancing ».

Réactions chimiques

Réactions

- $C + O_2 \Rightarrow CO_2$ Contrôlée
- $C + CO_2 \Rightarrow 2CO$ Contrôlée
- $C + H_2O \Rightarrow CO + H_2$ Contrôlée
- $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$ Equilibrée
- $CH_wO_xNySz \Rightarrow C + (w/2)H_2 + (x/2)O_2 + (y/2)N_2 + (z/2)S_2$ Contrôlée
- $0,5N_2 + 0,5(2-I_1)O_2 \Rightarrow I_1N$ Contrôlée
- $S + (1-I_2)O_2 + I_2H_2 \Rightarrow I_2H_2S$ Contrôlée
- $C + 0,5(2-I_3)O_2 \Rightarrow I_3CO + \dots$ Contrôlée
- $H_2 + 0,5O_2 \Rightarrow H_2O$ Contrôlée
- $(10-9I_4-3I_5-3I_6)C + (4-2I_4-2I_5-2I_6)H_2 \Rightarrow I_4CH_4 + I_5C_2H_6 + I_6C_3H_8$ Contrôlée

Activer Modifier **Ajouter**

Inhiber Dupliquer Supprimer

Jeux de Réactions

Jeu Global
Decomposition
Combustion
Gasification
Decarbonation
WGS
Balancing

Ajouter Modifier

Supprimer Dupliquer

Chaleurs de réaction

A partir des dH standard de formation à 298.15 K ☒

Base enthalpique :
Etat Gaz Parfait à 298.15K

Ok Annuler

Définition des jeux de réactions

Toutes les réactions sont définies comme « contrôlées » exceptées la réaction du gaz à l'eau (Water Gas Shift WGS) définie comme réaction équilibrée :

Définition de la réaction chimique

Nom : $C + O_2 \Rightarrow CO_2$

Identification | Stoechiométrie | Ordres | Notes

Type de réaction : Contrôlée

Modèle cinétique : Concentration

Modèle mathématique : Polynomial

Energie d'activation : 0 cal/mol

Chaleur de réaction : -393,8 kJ/mol

Facteur préexponentiel : 0

$$\frac{1}{U_t U_c^{N_c} \prod_{i=1}^{N_c} \alpha_{j,i}^{-1}}$$
 Ut : h
 Uc : mole/l
 P : atm

Ok Annuler

Définition de la réaction chimique

Nom : $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$

Identification | Stoechiométrie | Ordres | Notes

Type de réaction : Equilibrée

Modèle cinétique : Concentration

Modèle mathématique : Logarithmique

Energie d'activation : 12600 J/mol

Chaleur de réaction : -41 kJ/mol

Constantes d'équilibre :

a1 0
a2 0
a3 0
a4 0
a5 0

Ok Annuler

Fenêtre de définition des réactions chimiques pour toutes les réactions (à gauche)
excepté la réaction WGS (à droite)

1.6. Opérations unitaires du bloc « Gasification island »

1.6.1. Bloc d'unité de séparation de l'air (« Air Separation Unit (ASU) »)

Les conditions opératoires pour le bloc « ASU » sont présentées dans cette partie.

✓ Alimentation en déchet « Coal »

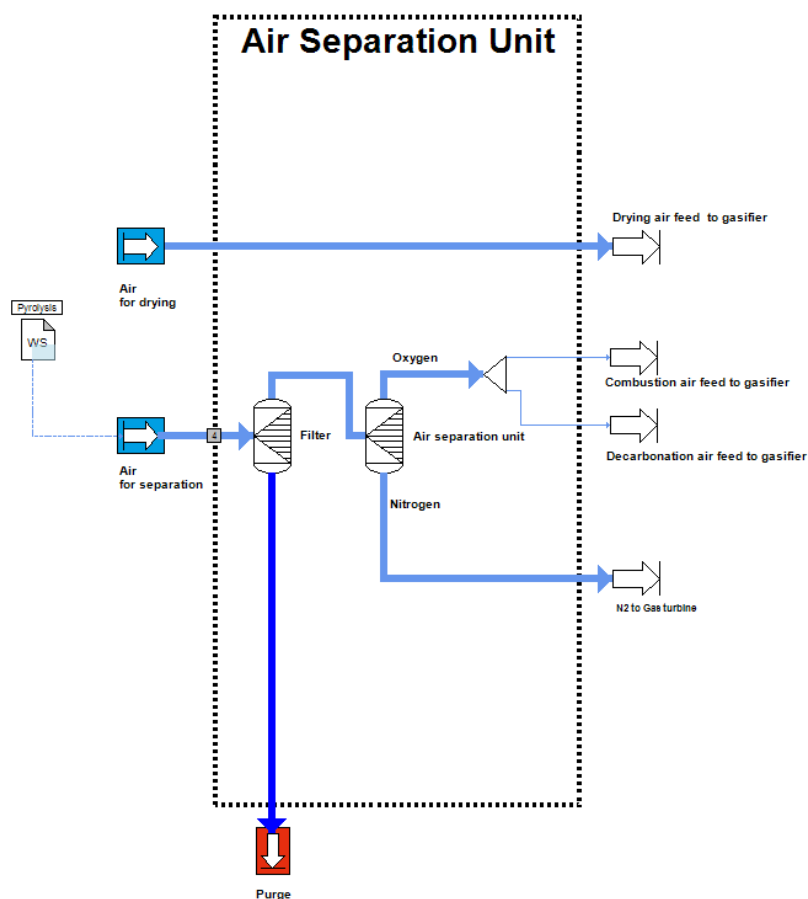
		Coal feed
Pourcentage massique	Waste (Coal)	87.71
	Ashes	7.24
	H ₂ O	5.05
Débit massique total (t/h)		6.25
Température (°C)		20
Pression (atm)		1

✓ Air pour la séparation (« ASU »)

		Air feed
Pourcentage molaire	N ₂	0.21
	O ₂	0.79
Débit molaire total (Nm3/h)		23000
Température (°C)		25
Pression (atm)		1

✓ Air pour le séchage

		Air feed
Pourcentage molaire	N ₂	0.21
	O ₂	0.79
Débit molaire total (Nm3/h)		5000
Température (°C)		25
Pression (atm)		1



Modélisation du bloc « ASU »

✓ Séparateur de constituants

Paramètres opératoires	Filter
Taux de récupération vers le produit de tête	Produit de tête vers le module "Air separation unit"
Nitrogen	1
Oxygen	1

L'opération unitaire « Filter » a pour but d'éliminer les impuretés et l'humidité de l'air entrant.

Paramètres opératoires	Air separation unit
Taux de récupération vers le produit de tête	Produit de tête (enrichi en oxygène) vers l'alimentation du gazéificateur
Nitrogen	0.01
Oxygen	0.998
Température du séparateur (°C)	25
Pression du séparateur (bar)	40

✓ Diviseur de courant

Paramètres opératoires	Air splitter
Type de spécification	Débits molaires
Débit molaire d'air pour la décarbonatation (Nm³/h)	320

✓ Windows script : "Pyrolysis"

Ce module « Windows Script » est utilisé pour fournir des paramètres pour le gazéificateur. Il doit être calculé comme le premier module de la séquence de calcul, c'est pourquoi il est connecté à l'alimentation « Air for separation » avec un courant d'information.

Ce courant d'information est uniquement utilisé pour imposer la séquence de calcul et est configuré comme présenté dans la capture d'écran suivante.

Dans la suite de ce document, un courant d'information ainsi configuré sera appelé « -1/-1 ».

Courant information (\$ISTR)

Nom: Inf

Desc :

Identification

Paramètres

Notes

Nature de l'information à émettre:

Définie par sa position dans la zone paramètre du ...

Saisissez ici les positions de début et de fin définissant le segment d'informations à émettre depuis "Pyrolysis"

Début: -1

Fin: -1

Nature de l'information à récupérer:

Définie par sa position dans la zone paramètre du ...

Saisissez ici les positions de début et de fin définissant le segment d'informations à recevoir dans "Drying_gas_feed"

Début: -1

Fin: -1

OK

Annuler

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

www.fives-prosim.com

Le script suivant est utilisé dans le module (windows script « Pyrolysis ») :

```

'-----
' Validation of module
'-----
Function OnCalculation()
    OnCalculation = True
End Function
'-----

'-----
' CALL OF «UNIT CONVERSION» SCRIPT
'-----
With CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
    ExecuteGlobal .OpenTextFile(Project.ApplicationPath & "Scripts\UnitConversion.vbs", 1).ReadAll()
End With
'-----

'-----
' Print of results/parameters
'-----
Sub OnPrintResults()

    Temperature_Unit = ReportUnit("Temperature")

    With Module
        .PrintReport(" ")
        .PrintReport(" PROVIDED DATA FOR PYROLYSIS")
        .PrintReport(" -----" & vbCrLf)

        .PrintReport(" Conversion rate of char for pyrolysis")
        .PrintReport("      - Conversion rate : " & FormatNumber(.Parameter(1),2) & " % mass" & vbCrLf)

        .PrintReport(" Reactions parameters for synthesis gas")
        .PrintReport("      - Distribution rate between NO and NO2           : " & _
            FormatNumber(.Parameter(2),2) & " %")
        .PrintReport("      - Distribution rate between H2S and SO2           : " & _
            FormatNumber(.Parameter(3),2) & " %")
        .PrintReport("      - Distribution rate between CO and CO2            : " & _
            FormatNumber(.Parameter(4),2) & " %")
        .PrintReport("      - Distribution rate between CH4 and the tars      : " & _
            FormatNumber(.Parameter(5),2) & " %")
        .PrintReport("      - Distribution rate between C7H8 and C10H8       : " & _
            FormatNumber(.Parameter(6),2) & " %")
        .PrintReport("      - Conversion rate of the oxygen                   : " & _
            FormatNumber(.Parameter(7),2) & " %" & vbCrLf)
    End with
End Sub
'-----

```

Module de script (\$XTMO9)

Nom:

Desc :

Identification Scripts Rapport Courants Notes

Taille PAR :

Indice	Par	Info
1	0	-
2	50	Distribution rate between NO and NO2 (%)
3	50	Taux de conversion Distribution rate between H2S and SO2 (%)
4	76	(I ₁ à I ₅) Distribution rate between CO and CO2 (%)
5	97	Distribution rate between CH4 and the tars (C7H8, C10H8)
6	50	Distribution rate between C7H8 and C10H8 (%)
7	85	Conversion rate of the oxygen (C + O2 => CO + CO2) (%)

< >

OK Annuler

1.6.2. Bloc gazéification (« Gasifier »)

Dans le gazéifieur, le déchet subit une série de réactions chimiques et de changements physiques :

- Séchage du déchet (Chambre 1) ;
- Décomposition, Dévolatilisation (Pyrolyse) (Chambre 2) ;
- Combustion (Chambre 2 et 3) ;
- Gazéification du carbone (Chambre 3).

Chaque réaction est associée à un jeu de réactions (cf. 1.5 Réactions) et à un réacteur.

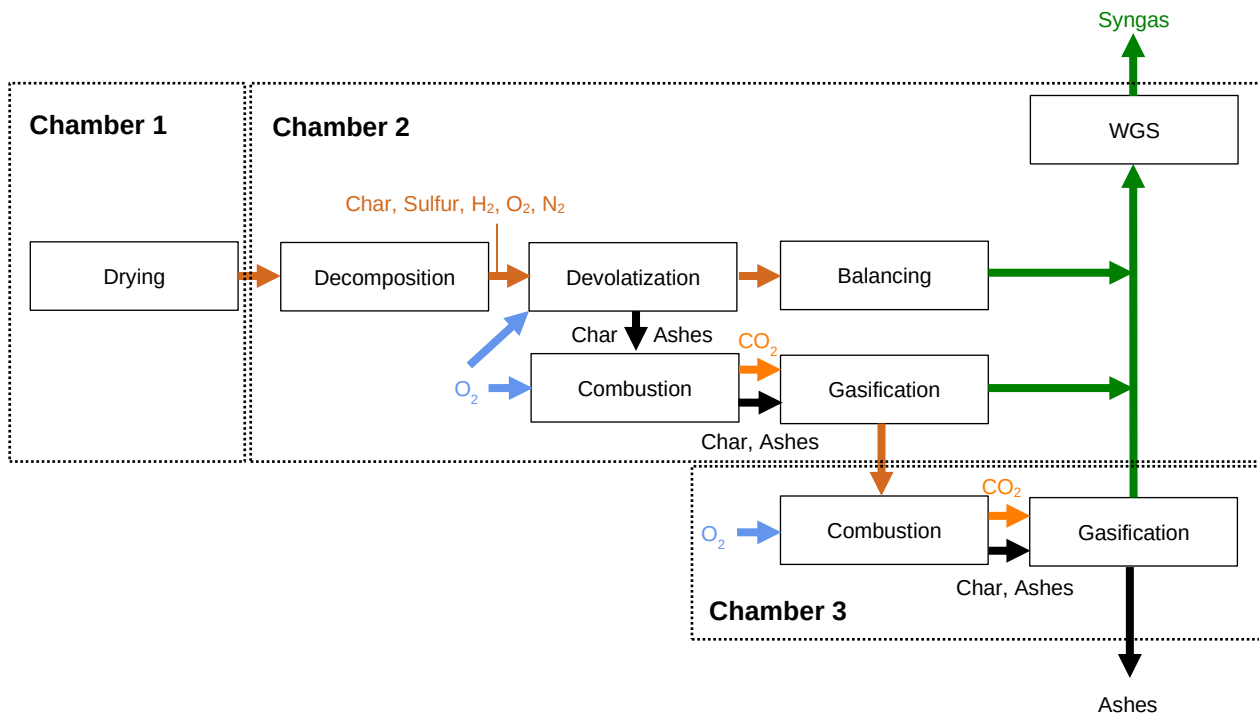


Schéma bloc du « Gazifier » pour la simulation

La dévolatilisation ou la pyrolyse représente un pourcentage important de perte de poids du déchet et survient rapidement au cours des premières étapes du réchauffement du déchet. Au cours de ce processus, les liaisons labiles entre les grappes aromatiques dans le déchet sont rompues, générant des fragments de poids moléculaire beaucoup plus petit que le déchet. Ce processus est simulé avec le jeu de réaction « Decomposition ».

Ensuite, des fragments à faible poids moléculaire se vaporisent et s'échappent du déchet pour constituer des gaz légers et du goudron. Cette partie est traitée avec les blocs « Devolatization » et « Balancing ».

Les fragments ayant un poids moléculaire élevé, et donc de faibles pressions de vapeur, restent dans le déchet jusqu'à ce qu'ils se rattachent aux goudrons. Le produit solide issu de la « Devolatization » subit 2 étapes successives de « Combustion » et de « Gazéification ».

Le gaz de synthèse brut issu de la pyrolyse (réacteur « Balancing »), issu de la première et de la seconde gazéification du déchet, est mélangé et envoyé dans un réacteur « WGS ». La pyrolyse (réacteur « Balancing ») et le réacteur « WGS » sont supposés être à la même température de 600°C.

Le gazéifieur travaille sur un processus exothermique, c'est pourquoi il est refroidi à l'aide d'une eau condensée à travers un refroidisseur de gaz de synthèse (faisceau de tubes interne pour le système de refroidissement). De ce fait, le gazéifieur produit à la fois du gaz de synthèse et de la vapeur d'eau à haute pression.

L'air et l'oxygène pur utilisés respectivement pour le séchage et la pyrolyse / combustion sont préchauffés avant d'entrer dans le gazéifieur.

D'un point de vue technique, le gazéifieur se présente comme suit :

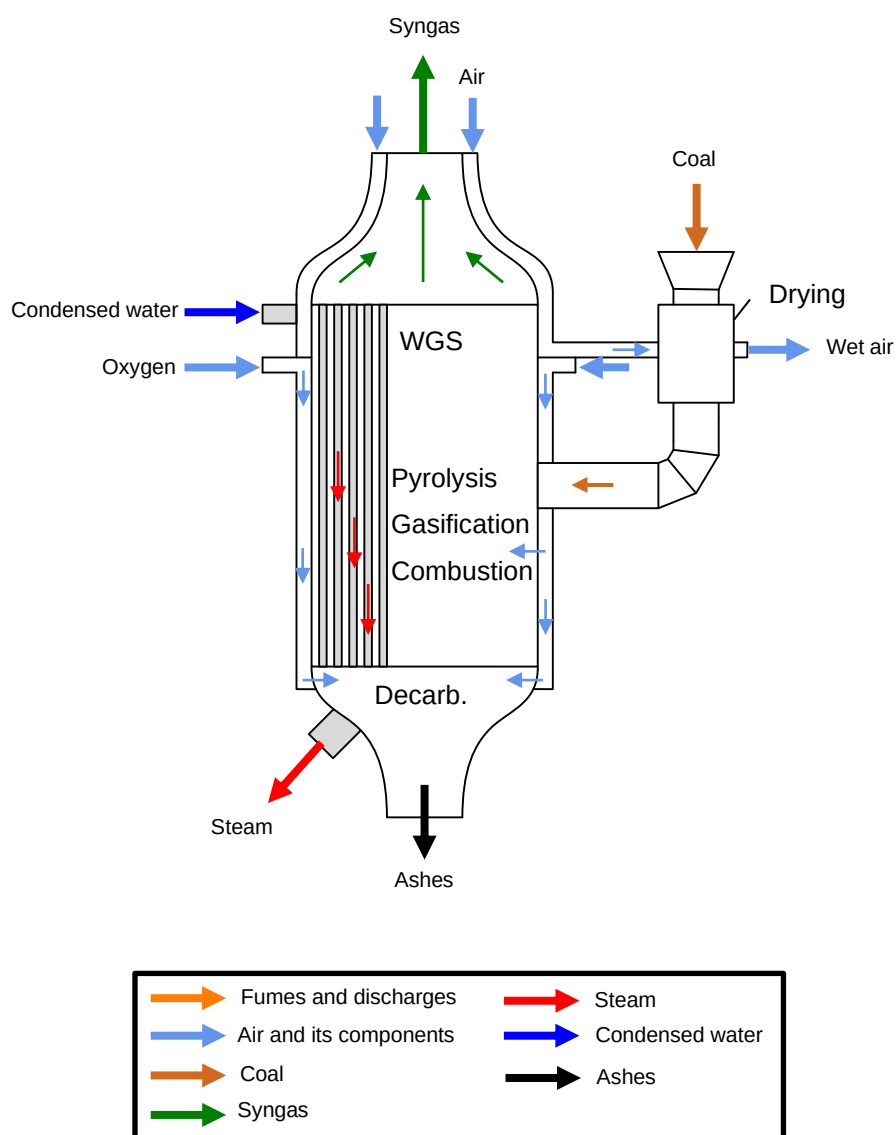
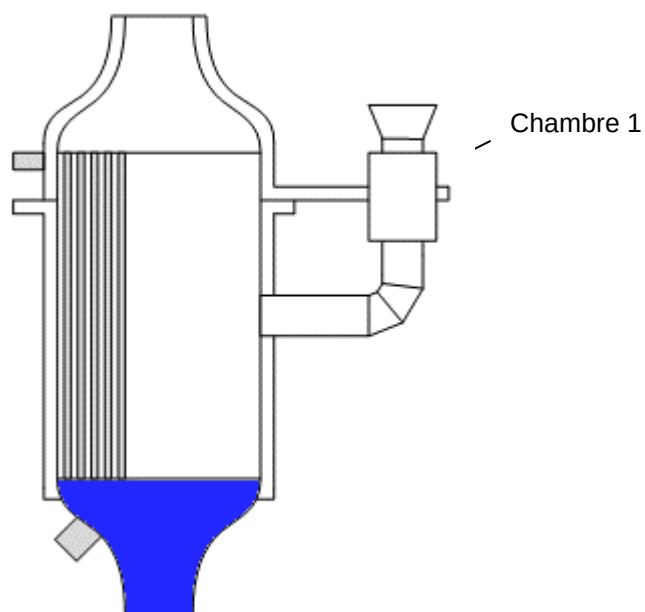
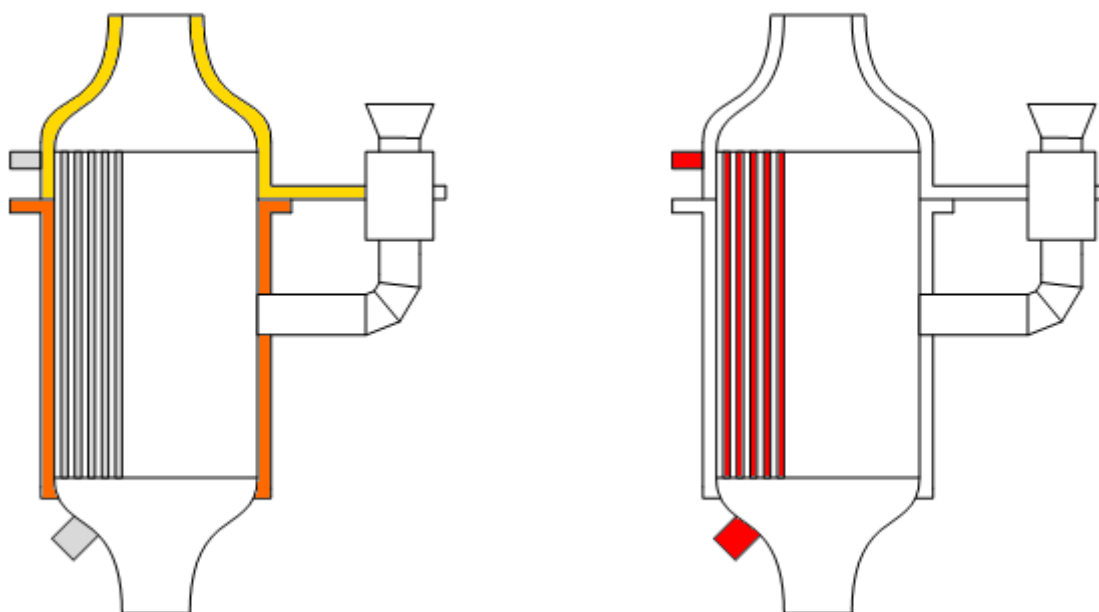


Schéma technique du gazéifieur

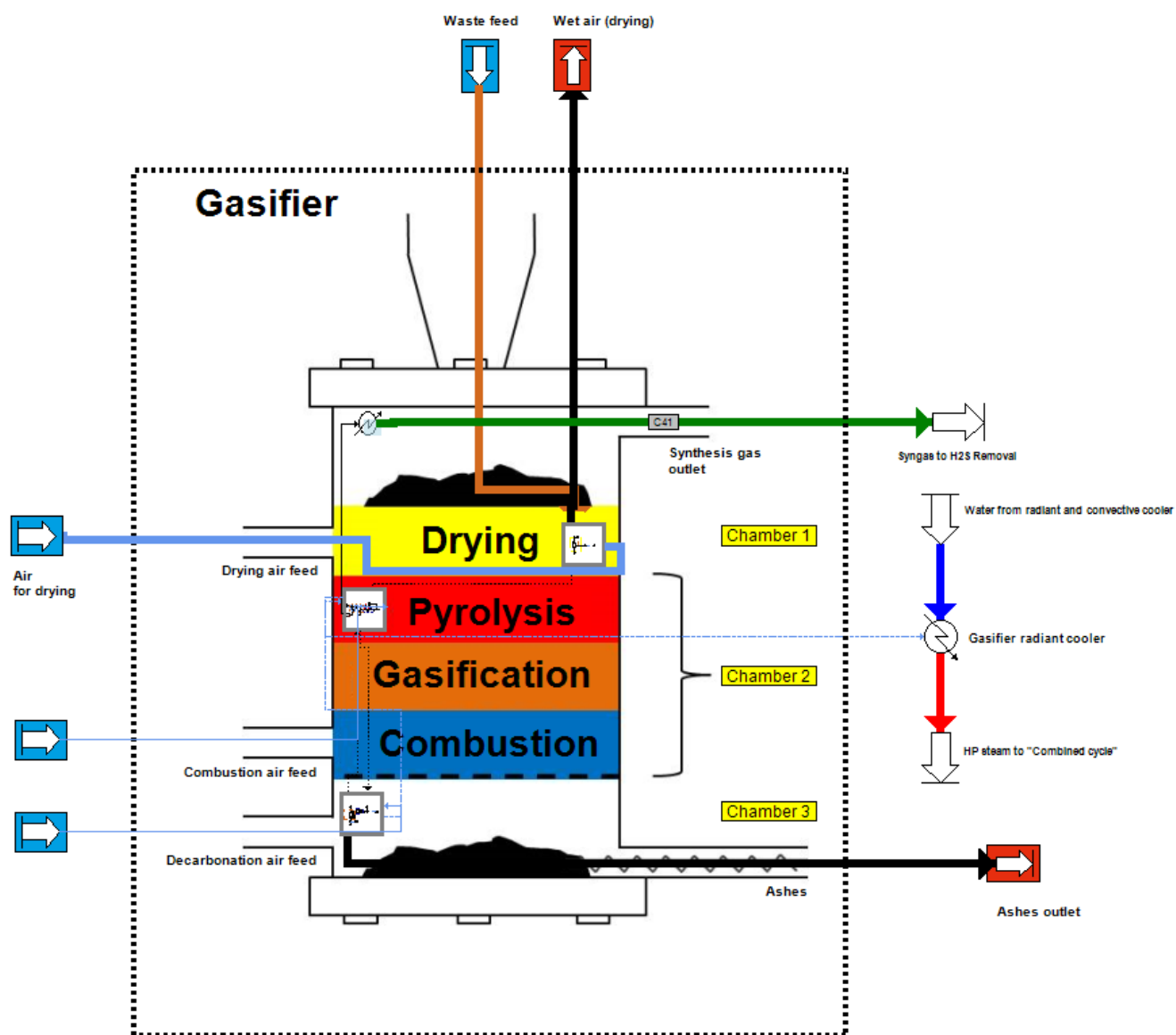


Configuration des chambres du gazéifieur



Conduites de l'air de séchage (jaune) et de l'oxygène (orange)

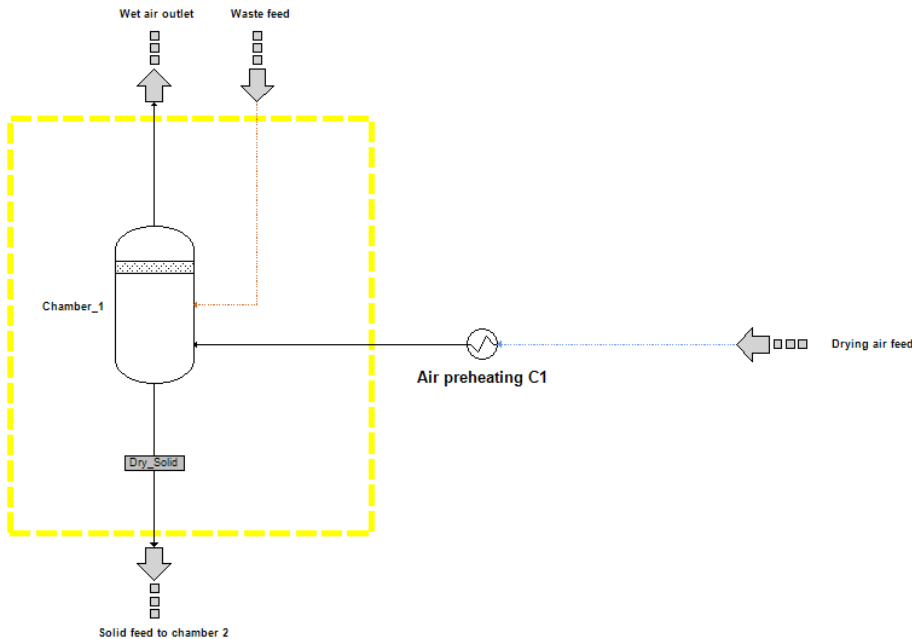
Conduite du système de refroidissement (rouge)



Modélisation du gazéifieur

1.6.2.1. Chambre 1 : Séchage (« Drying »)

Chamber 1 : Drying



Modélisation de la chambre n°1

✓ Consignateur de température

Nom	Température de sortie (°C)	Perte de charge (bar)
Air preheating C1	280	0

✓ Séparateur diphasique

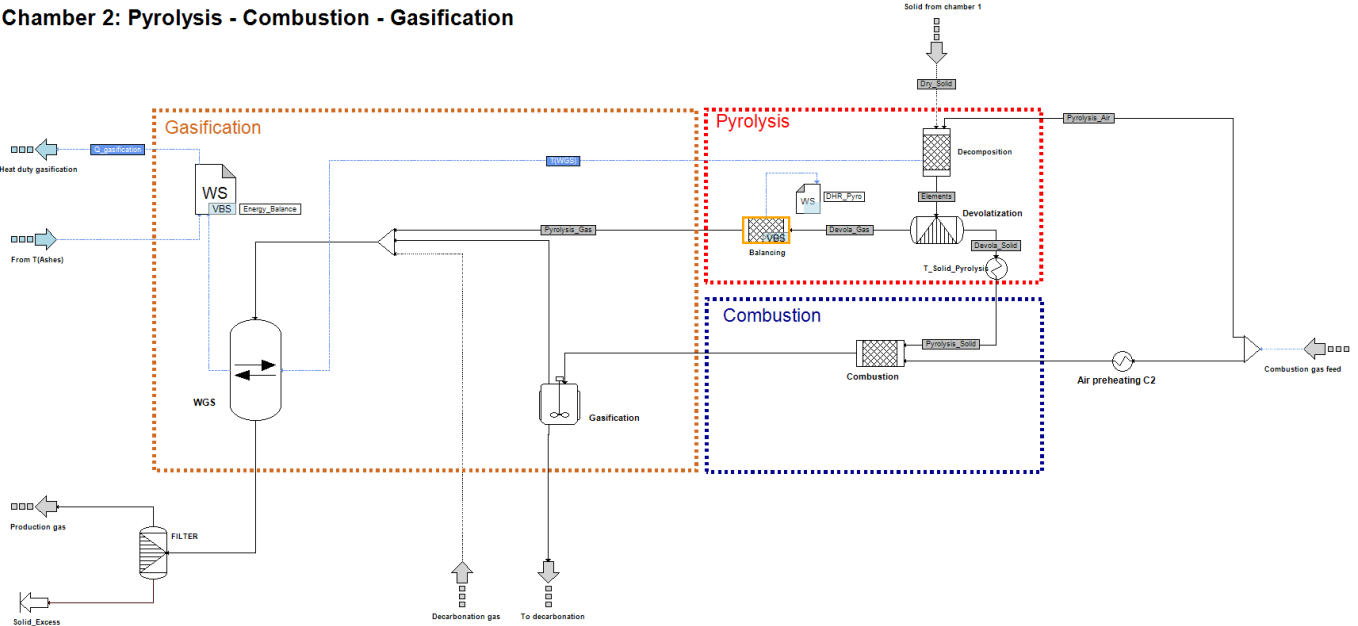
Paramètres opératoires	Chamber_1
Type de séparateur	Séparateur Liquide-Vapeur
Pression (bar)	40
Perte de charge (bar)	0.2
Quantité de chaleur échangée (W)	Adiabatique

Remarque : le « calculator » est modifié pour le calcul du séparateur. Dans l'onglet « Identification » du séparateur, le calculator « Gasification drying » est sélectionné :

Modèle thermodynamique: Gasification drying

1.6.2.2. Chambre 2 : Pyrolyse - Gazéification - Combustion

Chamber 2: Pyrolysis - Combustion - Gasification



Modélisation de la chambre n°2

✓ Consignateurs de température

Nom	Température de sortie (°C)	Perte de charge (bar)
Air preheating C2	600	0
T_Solid_Pyrolysis	200	0

✓ Séparateur de constituants

Paramètres opératoires	Devolatilization
Taux de récupération vers le produit de tête	Produit de tête envoyé vers la combustion : courant « Devola_Solid »
Waste	1
Char	0.765

Paramètres opératoires	Filter
Taux de récupération vers le produit de tête	Produit de tête est le courant “Solid_Excess”
Ashes	1
Char	1

Remarque : dans cet exemple, le courant « Solid_Excess » a un débit nul (pas d'excès de solide).

✓ Diviseur de courant

Paramètres opératoires	Air splitter C2
Type de spécification	Débits molaires
Débit molaire d'air de combustion (Nm³/h)	3000

✓ Réacteur simple

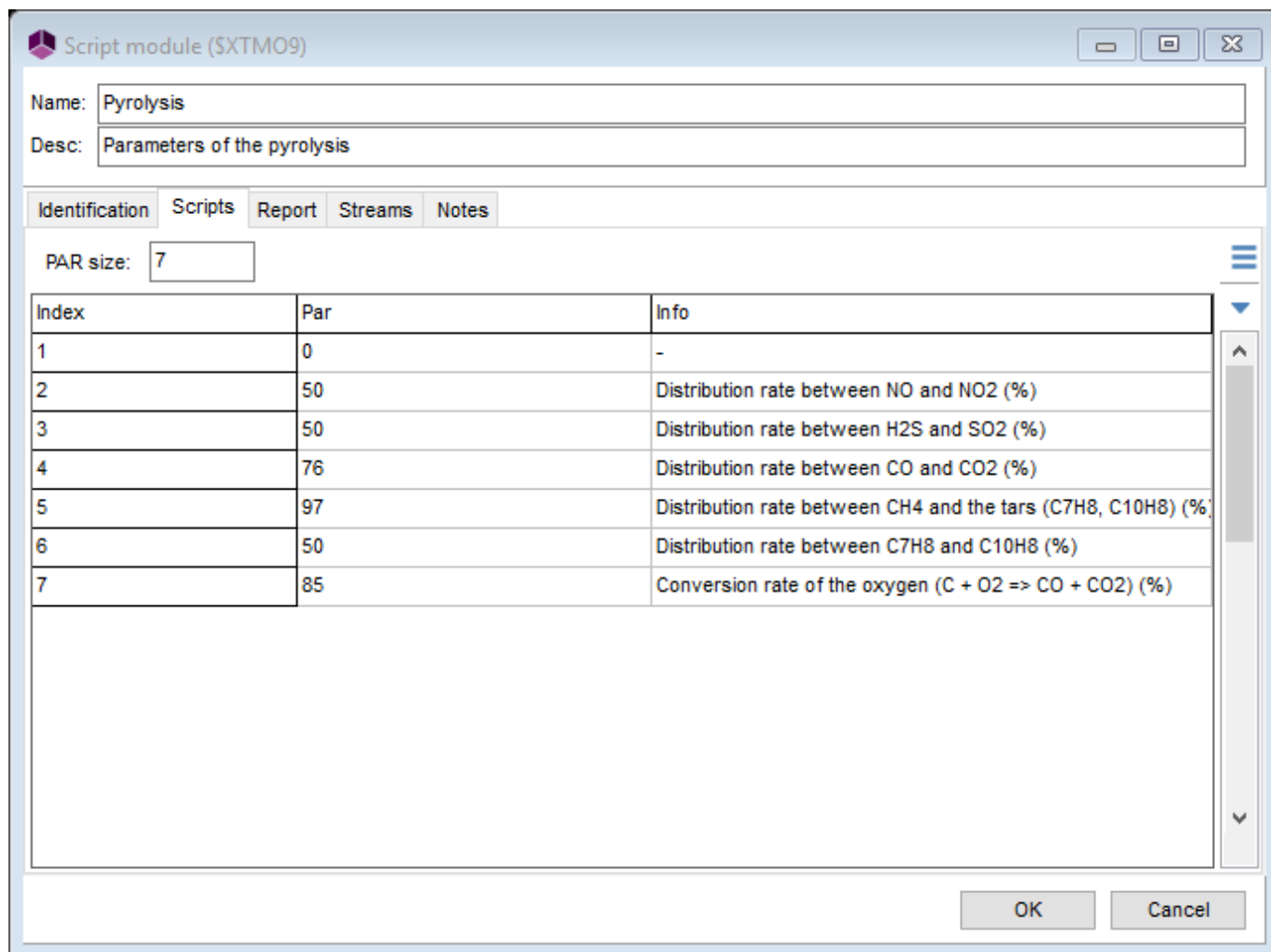
Paramètres opératoires	Decomposition
Jeu de réactions	« Decomposition »
Type de spécification	Réacteur à température constante spécifiée
Température spécifiée (°C)	600
Constituant clé	Waste
Taux de conversion de la réaction	1

Paramètres opératoires	Combustion
Jeu de réactions	“Combustion”
Type de spécification	Réacteur adiabatique
Constituant clé	Oxygen
Taux de conversion de la réaction	1

Paramètres opératoires	Balancing
Jeu de réactions	“Balancing”
Type de spécification	Réacteur à température constante
Constituant clé pour la réaction n°1	Nitrogen
Taux de conversion de la réaction n°1	1
Constituant clé pour la réaction n2	Sulfur
Taux de conversion de la réaction n°2	1
Constituant clé pour la réaction n°3	Char
Taux de conversion de la réaction n°3	0.85
Constituant clé pour la réaction n°4	Oxygen
Taux de conversion de la réaction n°4	1
Constituant clé pour la réaction n°5	Char
Taux de conversion de la réaction n°5	1

Compte tenu du jeu de réactions utilisé pour le réacteur « Balancing », les taux de partage des réactions doivent être définis (I_1, I_2, I_3, I_4, I_5). Ces valeurs sont fournies directement dans l'onglet « Script » du réacteur « Pyrolysis ». De plus, le taux de conversion de la réaction n°3 du jeu de réactions « Balancing » est aussi à renseigner (des valeurs sont fournies (pour initialiser) dans l'interface du réacteur « Balancing » et elles peuvent être modifiées). Ce script permet à l'utilisateur de modifier directement les taux de partage et le taux de conversion sans ouvrir l'éditeur de

fenêtres de réaction chimique .



Index	Par	Info
1	0	-
2	50	Distribution rate between NO and NO2 (%)
3	50	Distribution rate between H2S and SO2 (%)
4	76	Distribution rate between CO and CO2 (%)
5	97	Distribution rate between CH4 and the tars (C7H8, C10H8) (%)
6	50	Distribution rate between C7H8 and C10H8 (%)
7	85	Conversion rate of the oxygen (C + O2 => CO + CO2) (%)

Le script suivant est utilisé dans le réacteur (onglet « Script » du réacteur « Balancing ») :

```
Sub OnCalculationStart()
' Indexes calculation
' -----
For i = 0 To Project.Compounds.Count-1
  CasN = Project.Compounds.Items(i).CasRegistryNumber
  Select Case casN
    Case "7440-44-0"
      C = Module.GlobalToCalculator(i)
    Case "7782-44-7"
      O2 = Module.GlobalToCalculator(i)
    Case "7727-37-9"
      N2 = Module.GlobalToCalculator(i)
    Case "7732-18-5"
      H2O = Module.GlobalToCalculator(i)
    Case "1333-74-0"
```

```

    H2 = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "630-08-0"
    CO = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "124-38-9"
    CO2 = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "74-82-8"
    CH4 = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "108-88-3"
    C7H8 = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "91-20-3"
    C10H8 = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "7783-06-4"
    H2S = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "7446-09-5"
    SO2 = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "10102-43-9"
    NO = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "10102-44-0"
    NO2 = Module.GlobalToCalculator(i)
Case "7704-34-9"
    S = Module.GlobalToCalculator(i)
End Select
Next

' Calculation of the stoichiometric coefficients
' -----

' Get the parameters from "Pyrolysis" windows script
With Project.Modules("Pyrolysis")
    L1 = .Parameter(2) / 100.0
    L2 = .Parameter(3) / 100.0
    L3 = .Parameter(4) / 100.0
    L4 = .Parameter(5) / 100.0
    L5 = .Parameter(6) / 100.0
    Tx = .Parameter(7) / 100.0
End With

Dim Reaction

With Module
    'MsgBox .ReactiveCalculator.Reactions.Count
    For i=1 To .ReactiveCalculator.Reactions.Count
        Set Reaction = .ReactiveCalculator.Reactions.Items(i-1)
        'MsgBox Reaction.Name
        If Reaction.Name = "0,5N2 + 0,5(2-11)O2 => 11NO + (1-11)NO2" Then
            'MsgBox Reaction.Name
            Reaction.StoichiometricCoefficient(N2) = -0.5
            Reaction.StoichiometricCoefficient(O2) = -(2.0-L1)/2.0
            Reaction.StoichiometricCoefficient(NO) = L1
            Reaction.StoichiometricCoefficient(NO2) = 1.0 - L1
        ElseIf Reaction.Name = "S + (1-L2)O2 +12H2 => 12H2S + (1-L2)SO2" Then
            'MsgBox Reaction.Name
            Reaction.StoichiometricCoefficient(S) = -1.0
            Reaction.StoichiometricCoefficient(O2) = -(1.0-L2)
            Reaction.StoichiometricCoefficient(H2) = -L2
            Reaction.StoichiometricCoefficient(H2S) = L2
            Reaction.StoichiometricCoefficient(SO2) = 1.0 - L2
        ElseIf Reaction.Name = "C + 0,5(2-L3)O2 => 13CO + (1-L3)CO2" Then
            'MsgBox Reaction.Name
            Reaction.StoichiometricCoefficient(C) = -1.0
            Reaction.StoichiometricCoefficient(O2) = -(2.0-L3)/2.0
            Reaction.StoichiometricCoefficient(CO) = L3
            Reaction.StoichiometricCoefficient(CO2) = 1.0 - L3
        ElseIf Reaction.Name = "H2 + 0,5O2 => H2O" Then
            'MsgBox Reaction.Name
            Reaction.StoichiometricCoefficient(H2) = -1.0
            Reaction.StoichiometricCoefficient(O2) = -0.5
            Reaction.StoichiometricCoefficient(H2O) = 1.0
        End If
    Next
End With

```

```
ElseIf Reaction.Name = "(10-914-315-31415)C + (4-214)H2 => 14CH4 + 15(1-14)C7H8 + (1-15)(1-14)C10H8" Then
  'MsgBox Reaction.Name
  Reaction.StoichiometricCoefficient(C) = -(10.0-9.0*L4-3.0*L5+3.0*L4*L5)
  Reaction.StoichiometricCoefficient(H2) = -(4.0-2.0*L4)
  Reaction.StoichiometricCoefficient(CH4) = L4
  Reaction.StoichiometricCoefficient(C7H8) = L5*(1.0-L4)
  Reaction.StoichiometricCoefficient(C10H8) = (1.0-L5)*(1.0-L4)
End If
Next
Set Reaction = Nothing
' Calculation of the conversion rate
' -----
' Reaction C + O2 => CO + CO2
.ConversionRatios(3) = Tx
End With
End Sub
```

✓ Cuve réactionnelle

Paramètres opératoires	Gasification
Jeu de réaction	"Gasification"
Type de spécification	Réacteur adiabatique
Température spécifiée (°C)	600
Constituant clé de la réaction n°1	Carbon dioxide
Taux de conversion de la réaction n°1	1
Constituant clé de la réaction n°2	Water
Taux de conversion de la réaction n°2	1

Taux de Conversion

Réaction	Constituant clé	Taux
C + CO2 => 2CO	CARBON DIOXIDE	1
C + H2O => CO + H2	WATER	1

OK

Annuler

✓ Réacteur équilibré

Paramètres opératoires	WGS
Jeu de réaction	"WGS"

Méthode	Constantes d'équilibre
Type de spécification	Température d'équilibre
Température spécifiée (°C)	700

Dans le gazéifieur, la réaction WGS et les réactions de pyrolyse se déroulent à la même température. Pour prendre en compte cette contrainte additionnelle, un courant d'information est ajouté depuis le réacteur « Decomposition » vers le réacteur « WGS ». La température de spécification du réacteur « WGS » est ainsi transmise depuis le réacteur « Decomposition » :

Courant information (\$ISTR14)

Nom: T(WGS)

Desc :

Identification

Paramètres

Notes

Nature de l'information à émettre:

☒ Température de sortie du réacteur

Le segment d'information à émettre sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module "Decomposition"

Début: 0

Fin: 0

Nature de l'information à récupérer:

☒ Température d'équilibre

Le segment d'information à recevoir sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module "WGS"

Début: 0

Fin: 0

OK

Annuler

✓ Windows script

Le script « DHR_Pyro » est utilisé pour calculer la chaleur de la réaction de pyrolyse.

Le script suivant est utilisé (windows script « DHR_Pyro ») :

```
'-----'
' CALL OF «UNIT CONVERSION» SCRIPT
'-----'
with CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
  ExecuteGlobal .OpenTextFile(Project.ApplicationPath & "Scripts\UnitConversion.vbs", 1).ReadAll()
end with

'-----'
' Calculation of the enthalpy of the pyrolysis reaction
'-----'
Function OnCalculation()
  ' Statement
  '-----
  Dim DH0f()
  With Project
    ' Get enthalpy of formation DH0f
    '-----
    NC = .Compounds.Count
```

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

www.fives-prosim.com

```

ReDim DH0f(NC)
For i = 1 To NC
    DH0f(i-1) = Convert("Molar enthalpy", .Compounds.Items(i-1).DeltaH0v.Value,
        .Compounds.Items(i-1).DeltaH0v.UnitName, "kcal/kmol")

    CasN = Project.Compounds.Items(i-1).CasRegistryNumber
    If Casn = "55000-01-6" Then
        MwDIB = Convert("Molar mass", .Compounds.Items(i-1).Mw.Value, .Compounds.Items(i-
            1).Mw.UnitName, "kg/kmol")
        DIBDebMol = .Streams("Dry_Solid").PartialMolarFlowRate(i)
    End If
Next

' Calculation of the reaction heat
' -----
DHR = 0.0
For i = 1 To NC
    DHR = DHR + (.Streams("Pyrolysis_Solid").PartialMolarFlowRate(i) + _
        .Streams("Pyrolysis_Gas").PartialMolarFlowRate(i) - _
        .Streams("Dry_Solid").PartialMolarFlowRate(i) - _
        .Streams("Pyrolysis_Air").PartialMolarFlowRate(i)) * DH0f(i-1)
Next
End With

Module.Parameter(3) = DHR
Module.Parameter(1) = DHR / DIBDebMol
Module.Parameter(2) = (DHR / DIBDebMol) / MwDIB

' Validation of the module
' -----
OnCalculation = True

End Function

' -----
' Print results
' -----

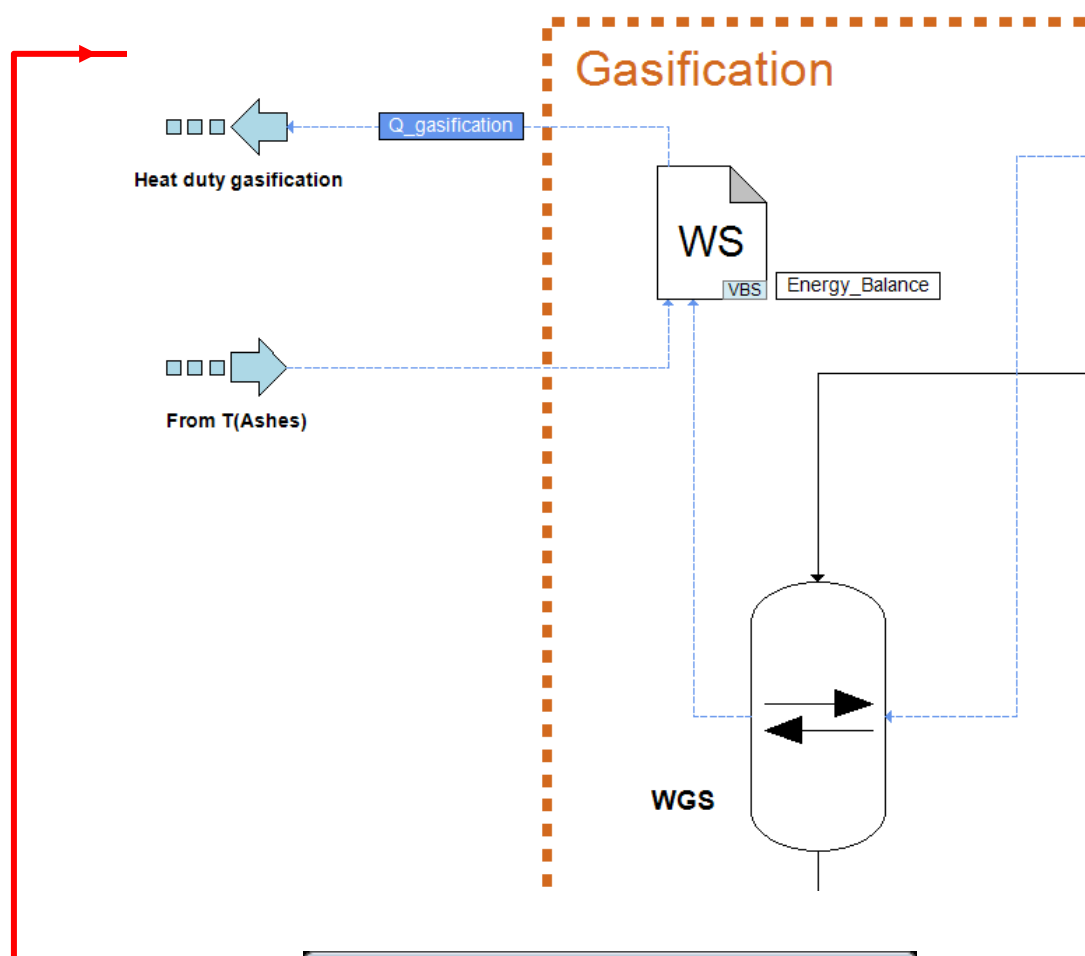
Sub OnPrintResults()
    MolarEnthalpy_Unit = ReportUnit("Molar enthalpy")
    MassEnthalpy_Unit = ReportUnit("Mass enthalpy")
    EnthalpicFlow_Unit = ReportUnit("Enthalpic flow")

    With Module
        .PrintReport(" ")
        .PrintReport(" PYROLYSIS HEAT OF REACTION")
        .PrintReport(" -----" & vbCrLf)

        .PrintReport("      - Molar      : " & FormatNumber(Convert("Molar enthalpy", .Parameter(1), _
            "kcal/kmol", MolarEnthalpy_Unit), 1) & " " & MolarEnthalpy_Unit)
        .PrintReport("      - Mass       : " & FormatNumber(Convert("Mass enthalpy", .Parameter(2), _
            "kcal/kg", MassEnthalpy_Unit), 1) & " " & MassEnthalpy_Unit)
        .PrintReport("      - Heat duty : " & FormatNumber(Convert("Enthalpic flow", .Parameter(3), _
            "kcal/h", EnthalpicFlow_Unit), 1) & " " & EnthalpicFlow_Unit)
    End with
End Sub

```

Le script « Energy_Balance » est utilisé pour calculer la puissance thermique libérée dans le gazéificateur. Cette quantité de chaleur est utilisée pour chauffer l'eau condensée HP (haute pression) afin de générer de la vapeur HP.



Courant information (\$ISTR6)

Nom: Q_gasification

Desc :

Identification Paramètres Notes

Nature de l'information à émettre:

☒ Définie par sa position dans la zone paramètre du ...

Saisissez ici les positions de début et de fin définissant le segment d'informations à émettre depuis "Energy_Balance"

Début: 5 Fin: 5

Nature de l'information à récupérer:

☒ Quantité de chaleur

Le segment d'information à recevoir sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module "Gasifier radiant cooler"

Début: 0 Fin: 0

OK Annuler

Quantité de chaleur
calculée dans le script
« Energy_Balance »

Quantité de chaleur de
l'opération unitaire
« Gasifier radiant cooler »

Le script suivant est utilisé (windows script « Energy_Balance ») :

```
'-----'
' CALL OF «UNIT CONVERSION» SCRIPT
'-----'
With CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
    ExecuteGlobal .OpenTextFile(Project.ApplicationPath & "Scripts\UnitConversion.vbs", 1).ReadAll()
End With

'-----'
' Energy balance on the component splitter «Devolatization»
'-----'
Function OnCalculation()

' Heat duty recovery
'-----'
With Project
    Hin          = .Streams("Elements").EnthalpyFlux
    Hout_Solides  = .Streams("Devola_Solid").EnthalpyFlux
    Hout_Gaz      = .Streams("Devola_Gas").EnthalpyFlux

    Q_Decomposition = .Modules("Decomposition").HeatDuty
    Q_SolidePyrolyse = .Modules("T_Solid_Pyrolysis"). HeatDuty
    Q_Equilibrage    = .Modules("Balancing"). HeatDuty

    Q_Ciel_Gazeux = .Modules("WGS"). HeatDutySpecValue

    Q_Cendres = .Modules("T(Ashes)"). HeatDuty
End With

' Calculation
'-----'
' Balance on conversion
Q_Devolatilisation = (Hout_Solides + Hout_Gaz) - Hin

' Balance on pyrolysis
Q_Pyrolyse = Q_Decomposition + Q_Devolatilisation + Q_Equilibrage + Q_SolidePyrolyse

' Balance on the gasifier
Q_calc = Q_Pyrolyse + Q_Ciel_Gazeux + Q_Cendres

' Gap
Q_Consigne = Module.Parameter(1)
Ecart      = Q_calc - Q_Consigne

' Save results
'-----'
With Module
    .Parameter(2) = Q_Pyrolyse
    .Parameter(3) = Q_Ciel_Gazeux
    .Parameter(4) = Q_Cendres
    .Parameter(5) = Q_calc
    .Parameter(6) = Ecart
End With

' Validation of the module
'-----'
    OnCalculation = True

End Function

'-----'
' Print results
'-----'
Sub OnPrintResults()
    With Module
        .PrintReport(" Energy balance on the gasification process" & vbLf )
    End With
End Sub
```

```

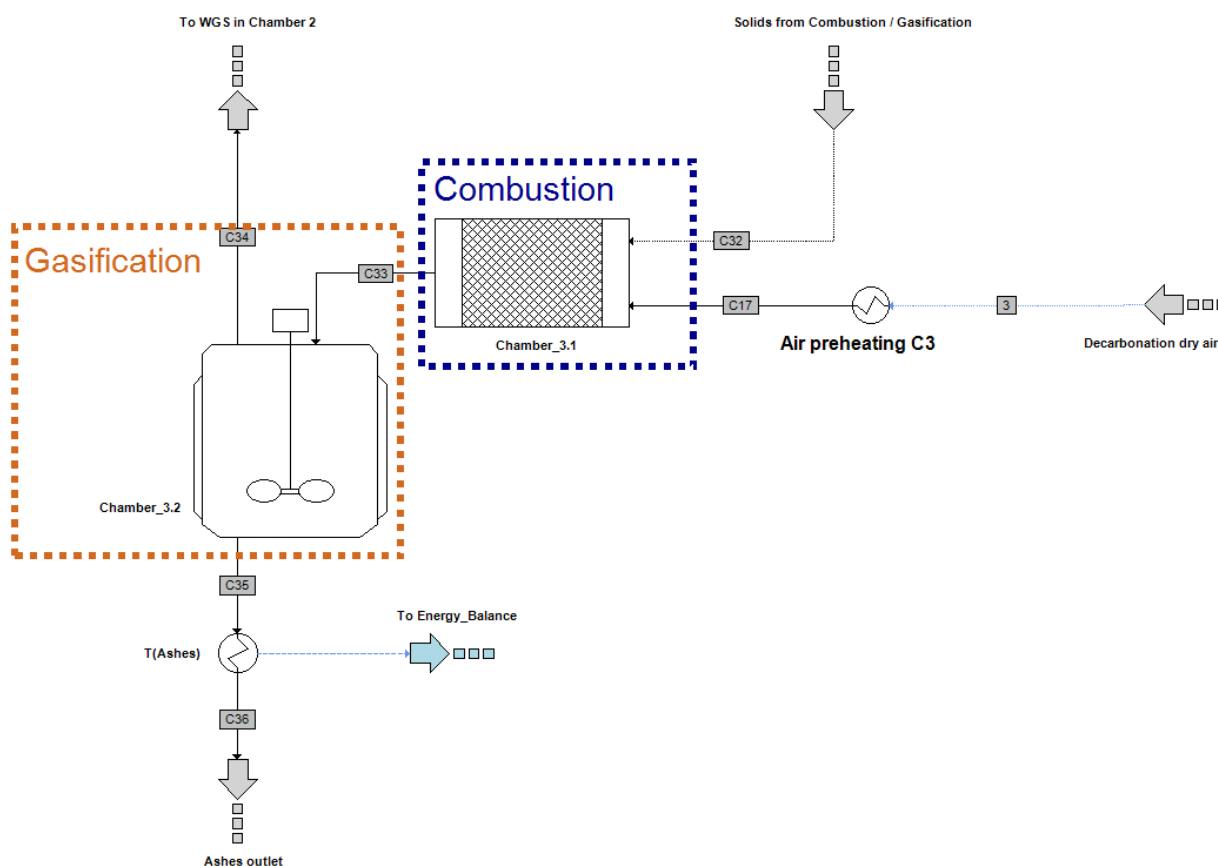
.PrintReport("      - Q(Pyrolysis)                : " & _
  FormatNumber(ProSimToReport("Enthalpic flow", .Parameter(2)),2) & " " & _
  ReportUnit("Enthalpic flow"))
.PrintReport("      - Q(Gas overhead)           : " & _
  FormatNumber(ProSimToReport("Enthalpic flow", .Parameter(3)),2) & " " & _
  ReportUnit("Enthalpic flow"))
.PrintReport("      - Q(Ashes)                  : " & _
  FormatNumber(ProSimToReport("Enthalpic flow", .Parameter(4)),2) & " " & _
  ReportUnit("Enthalpic flow"))
.PrintReport("      - Energy balance                : " & _
  FormatNumber(ProSimToReport("Enthalpic flow", .Parameter(5)),2) & " " & _
  ReportUnit("Enthalpic flow") & vbLf)
.PrintReport("      - Thermal losses specified : " & _
  FormatNumber(ProSimToReport("Enthalpic flow", .Parameter(1)),2) & " " & _
  ReportUnit("Enthalpic flow") & vbLf)
.PrintReport("      - Absolute difference            : " & _
  FormatNumber(ProSimToReport("Enthalpic flow", .Parameter(6)),2) & " " & _
  ReportUnit("Enthalpic flow"))

End with
End Sub

```

1.6.2.3. Chambre 3 : Décarbonation

Chamber 3: Decarbonation



Modélisation de la décarbonatation

✓ Consigneurs de température

Nom	Température de sortie (°C)	Perte de charge (bar)
Air preheating C3	600	0
T(Ashes)	1200	0

✓ Réacteur simple

Paramètres opératoires	Chamber_3.1
Jeu de réactions	"Combustion"
Type de spécification	Réacteur adiabatique
Constituant clé	Oxygen
Taux de conversion de la réaction	1

✓ Cuve réactionnelle

Paramètres opératoires	Chamber_3.2
Jeu de réaction	"Gasification"
Type de spécification	Réacteur adiabatique
Température spécifiée (°C)	600
Constituant clé de la réaction n°1	Carbon dioxide
Taux de conversion de la réaction n°1	1
Constituant clé de la réaction n°2	Water
Taux de conversion de la réaction n°2	1

1.6.2.4. Air preheating

Le gaz de synthèse (syngas) produit à 600°C préchauffe l'oxygène ou l'air pour les 3 chambres. L'échangeur de chaleur simple « Air Preheating Balancing » est ajouté sur la sortie de gaz de synthèse du gazéifieur et refroidit le gaz de synthèse de 600°C à ≈ 360°C.

✓ Echangeur simple

Nom	Quantité de chaleur (W)	Perte de charge (bar)
Air Preheating Balancing	0	0

Le script suivant est codé dans l'onglet « Script » de l'opération unitaire « Air Preheating Balancing » pour extraire les quantités de chaleur des 3 échangeurs de préchauffage :

```
Sub OnCalculationStart()  
  Q1 = Project.Modules("Air preheating C1").HeatDuty  
  Q2 = Project.Modules("Air preheating C2").HeatDuty  
  Q3 = Project.Modules("Air preheating C3").HeatDuty  
  Module.HeatDutySpecValue = Q1 + Q2 + Q3  
End Sub
```

1.6.3. Bloc de purification du gaz et de récupération énergétique (« H2S Removal and Heat Recovery »)

Le gaz de synthèse produit à partir du gazéifieur passe par des étapes de purification successives. L'objectif principal de la purification est d'éliminer le soufre, le chlore, l'ammoniac et le dioxyde de carbone du gaz de synthèse. Le gaz de synthèse traverse traditionnellement des filtres (élimination des particules de cendres volantes), et une colonne de lavage à l'eau (élimination de H₂S, HCl, HF et ammoniac).

Le gaz acide issu de la désulfuration, à forte teneur en H₂S, est envoyé à une unité Claus pour récupérer le soufre, et obtenir du soufre solide pur prêt à être vendu. Le gaz de queue de l'unité Claus est recyclé dans le procédé, permettant ainsi de récupérer 99,8% de la teneur en soufre du gaz.

Remarque : différents procédés de suppression et de récupération du soufre ont été étudiés dans les conceptions de CCGI et de « coal to syngas ». Une autre configuration la plus courante est le procédé Selexol pour l'élimination du soufre du gaz de synthèse brut, une installation Claus à deux étapes pour la récupération du soufre élémentaire et le procédé SCOT pour le traitement du gaz résiduaire de l'unité Claus.

Dans cet exemple, l'unité Claus n'est pas modélisée. Cette partie du processus est traitée dans l'exemple d'application « PSPS_EX_FR-Procède-Claus ». De plus, les étapes de purification successives sont simulées avec un séparateur de constituants.

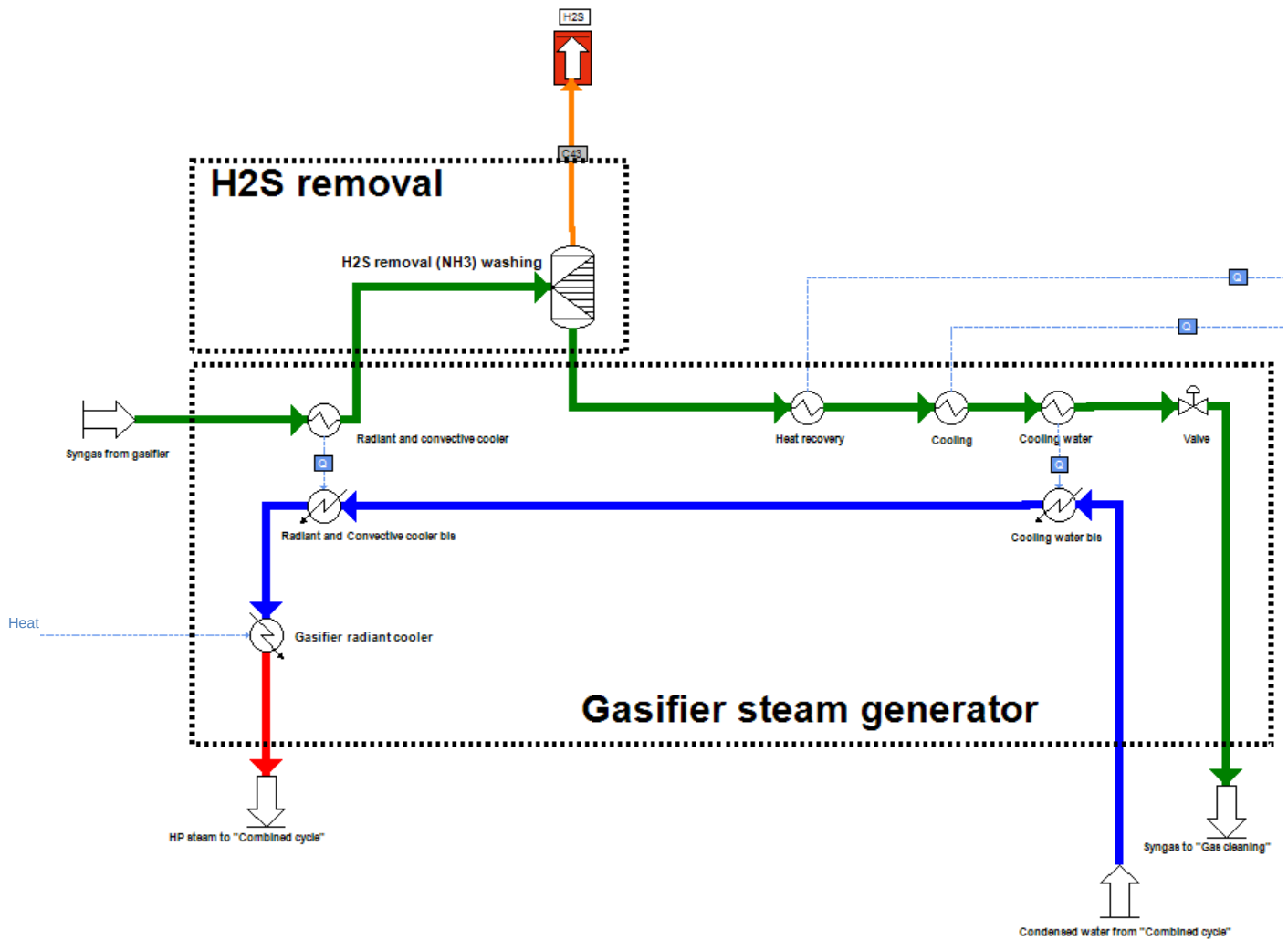
Le gaz de synthèse est refroidi avant et après le bloc « H2S Removal » pour récupérer un maximum d'énergie.

✓ Consignateurs de température

Nom	Température de sortie (°C)	Perte de charge (bar)
Radiant and convective cooler	250	0
Heat recovery	180	0
Cooling	120	0
Cooling water	50	0

✓ Séparateur de constituants

Conditions opératoires	H2S removal (NH3) washing
Taux de récupération vers le produit de tête	Produit de tête vers le module « Cleaning gas »
Hydrogen sulfide	0.99
Sulfur dioxide	0.9



Courant information (SISTR5)

Nom: Q

Desc :

Identification Paramètres Notes

Nature de l'information à émettre:

☒ Quantité de chaleur nécessaire pour atteindre la te...

Le segment d'information à émettre sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module "Radiant and convective cooler"

Début: 0 Fin: 0

Nature de l'information à récupérer:

☒ Quantité de chaleur

Le segment d'information à recevoir sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module "Radiant and Convective cooler bis"

Début: 0 Fin: 0

OK Annuler

Configuration des courants d'information entre les consignateurs de température et les échangeurs simples

✓ Echangeurs simples

Nom	Quantité de chaleur (W)	Perte de charge (bar)
Radiant and convective cooler bis	0	0
Cooling water bis	0	0
Gasifier radiant cooler	0	0

Les quantités de chaleur échangées des échangeurs « Radiant and convective cooler bis » et « Cooling water bis » sont fixées par les courants d'information provenant des échangeurs de refroidissement de la conduite de gaz de synthèse. La quantité de chaleur de l'échangeur « Radiant and convective cooler » est fournie par le module Windows script « Energy_balance » :

Courant information (\$ISTR6)

Nom: Q_gasification

Desc :

Identification

Paramètres

Notes

Nature de l'information à émettre:

Définie par sa position dans la zone paramètre du ...

Saisissez ici les positions de début et de fin définissant le segment d'informations à émettre depuis "Energy_Balance"

Début: 5

Fin: 5

Nature de l'information à récupérer:

Quantité de chaleur

Le segment d'information à recevoir sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module "Gasifier radiant cooler"

Début: 0

Fin: 0

OK

Annuler

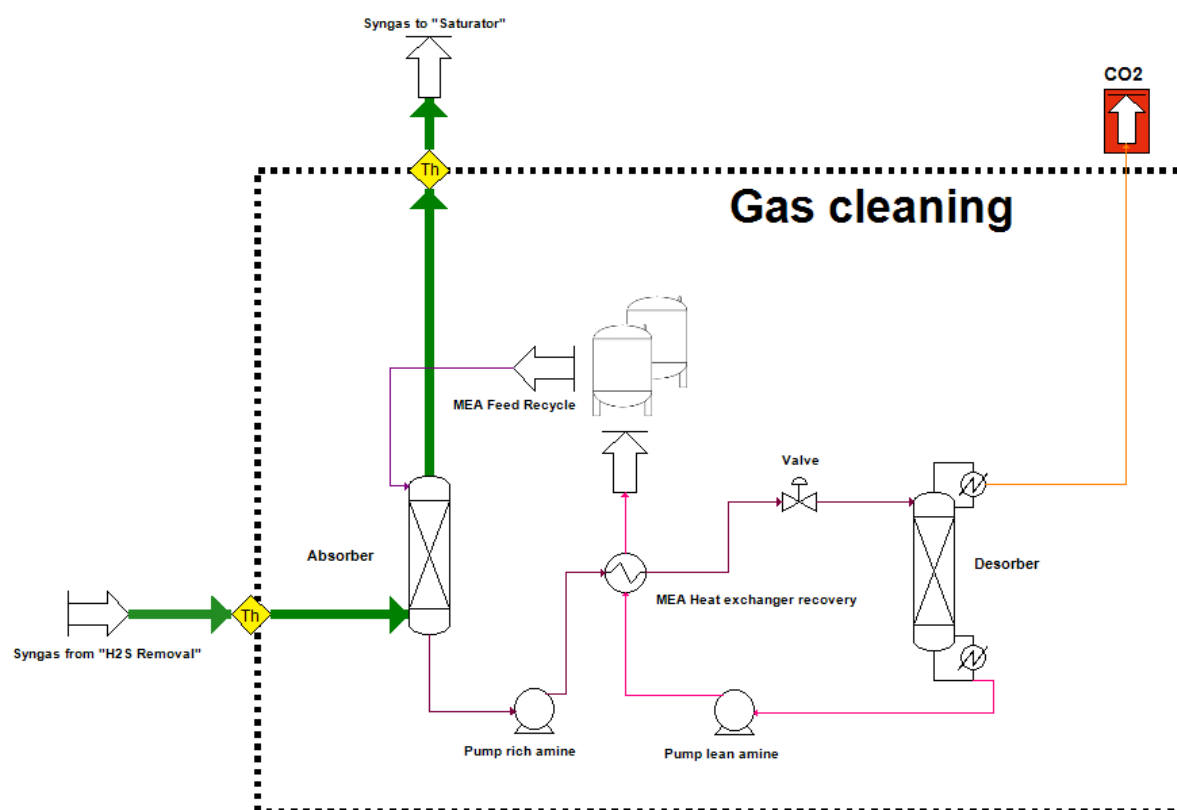
Fenêtre d'édition du courant d'information reliant « Gasifier radiant cooler » et « Energy_balance »

✓ Vanne de détente

Conditions opératoires	Valve
Type de contrainte	Spécification de la pression
Pression fournie (atm)	1

1.6.4. Bloc de traitement du gaz (« Gas Cleaning »)

Le traitement final pour le nettoyage des gaz est la suppression des composés soufrés restants et du dioxyde de carbone CO₂. Le dioxyde de carbone est séparé dans un absorbeur en utilisant une solution aqueuse d'amine.



Procédé de traitement du gaz de synthèse « Gas cleaning »

✓ Alimentation « MEA Feed Recycle »

		MEA Feed Recycle
Pourcentage massique	H ₂ O	80
	MEA	20
Débit massique total (t/h)		100
Température (°C)		40
Pression (atm)		1

✓ Pompes

Conditions opératoires	Pump rich amine
Pression de sortie (kPa)	750
Rendement isentropique	0.75
Rendement mécanique	1

Rendement électrique	1
Conditions opératoires	Pump lean amine
Pression de sortie (kPa)	700
Rendement isentropique	0.75
Rendement mécanique	1
Rendement électrique	1

✓ Vanne de détente

Conditions opératoires	Amine valve
Type de contrainte	Spécification de la pression
Pression fournie (kPa)	200

✓ Absorbeur

Conditions opératoires	Absorber
Nombre d'étages théoriques	2

✓ Colonne à distiller

Conditions opératoires	Desorber
Nombre d'étages théoriques	12
Position de l'alimentation	2
Spécifications pour les conditions opératoires	Débit de distillat vapeur et taux de reflux
Débit de distillat vapeur (t/h)	10
Taux de reflux molaire	1
Initialisation des taux de récupération dans le distillat vapeur	-
Water	0.1
Carbon dioxide	0.6
Monoethanolamine	0.001

✓ Echangeur généralisé

Conditions opératoires	MEA Heat exchanger recovery
Type de contrainte : "Autre"	Ecart de température interne minimum
Ecart de température (°C)	10

✓ Calculator Switch

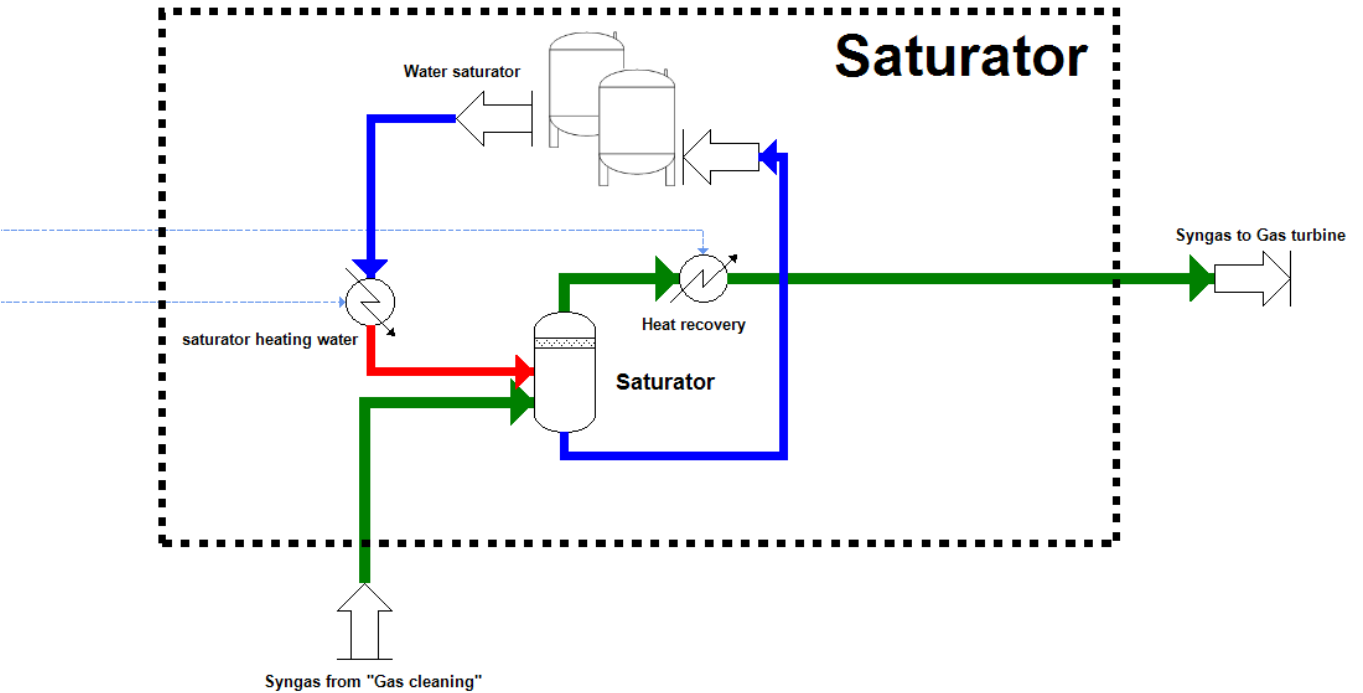
Nom	MEA Heat exchanger recovery
Calculator Switch (entrée syngas)	« Syngas cleaning »
Calculator Switch 1 (sortie syngas)	Modèle global (« Global calculator »)

Remarque : l'ajout et le recyclage de la MEA (connexion entre l'alimentation et la sortie du mélange MEA) ne sont pas modélisés dans cet exemple. Reportez-vous aux exemples d'application « PSPS_EX_FR - Exemple simple » ou « PSPS_EX_FR – Unité de production de cyclohexane » pour traiter des exemples illustrant le recyclage dans le procédé.

Remarque : un exemple plus détaillé de lavage des gaz avec une solution aqueuse d'amine est disponible dans l'exemple d'application « PSPS_EX_FR - Procédé capture CO2 avec amine ».

1.6.5. Bloc de saturation du gaz en eau (« Saturator »)

Le gaz nettoyé obtenu est saturé en eau et envoyé au cycle combiné (« Combined cycle »).



Procédé de saturation du syngas (bloc « Saturator »)

- ✓ Alimentation « Water saturator »

		Water saturator
Pourcentage massique	H ₂ O	100
Débit massique total (t/h)		2
Température (°C)		45
Pression (atm)		15

Remarque : le calculator utilisé pour les courants d'eau est le calculator « Pure water ».

Remarque : l'ajout et le recyclage de l'eau (connexion entre l'alimentation et la sortie en eau) n'est pas simulé dans cet exemple.

✓ Séparateur diphasique

Conditions opératoires	Saturator
Type de séparateur	Enthalpie et pression constantes
Pression (bar)	Pression la plus faible des alimentation
Quantité de chaleur échangée (W)	Adiabatique

✓ Echangeurs simples

Nom	Quantité de chaleur (W)	Perte de charge (bar)
Saturator heating water	0	0
Heat recovery	0	0

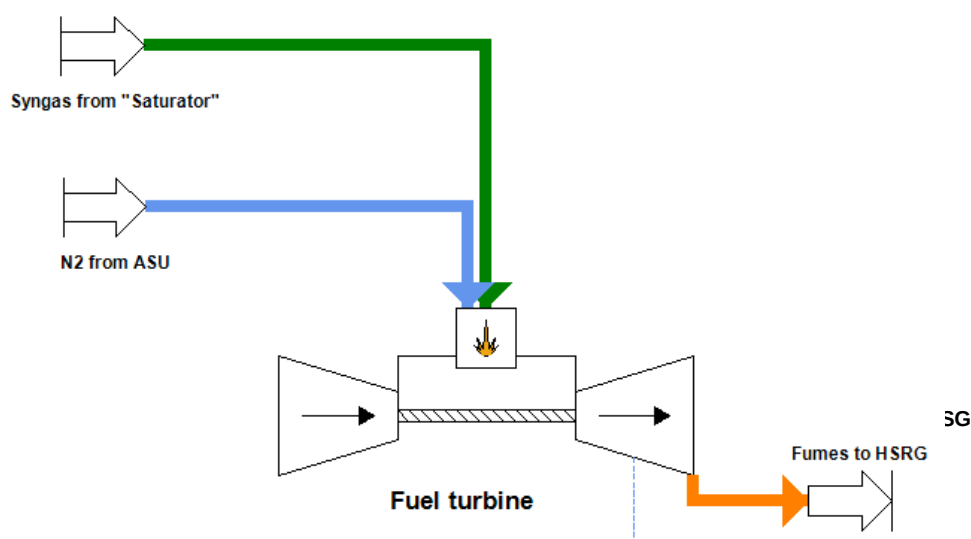
Les quantités de chaleur des échangeurs simples sont fixées par les courants d'information provenant des échangeurs refroidissant la conduite de syngas (cf. 1.6.3 Bloc de purification du gaz et de récupération énergétique (« H₂S Removal and Heat Recovery »).

1.7. Opérations unitaires du bloc « Combined cycle »

1.7.1. Bloc de la turbine à gaz (« Gas turbine »)

Le gaz de synthèse sort du bloc « Saturator » et est envoyé vers la turbine à gaz.

Remarque : le module « turbine à combustible » utilise les réactions conventionnelles de combustion. Il n'est pas nécessaire de décrire les réactions de combustion du syngas dans l'éditeur des réactions. Le calcul des coefficients stœchiométriques est automatiquement réalisé dans l'onglet « Réactions » du bouton « Combustion » du module.



✓ Turbine à combustible

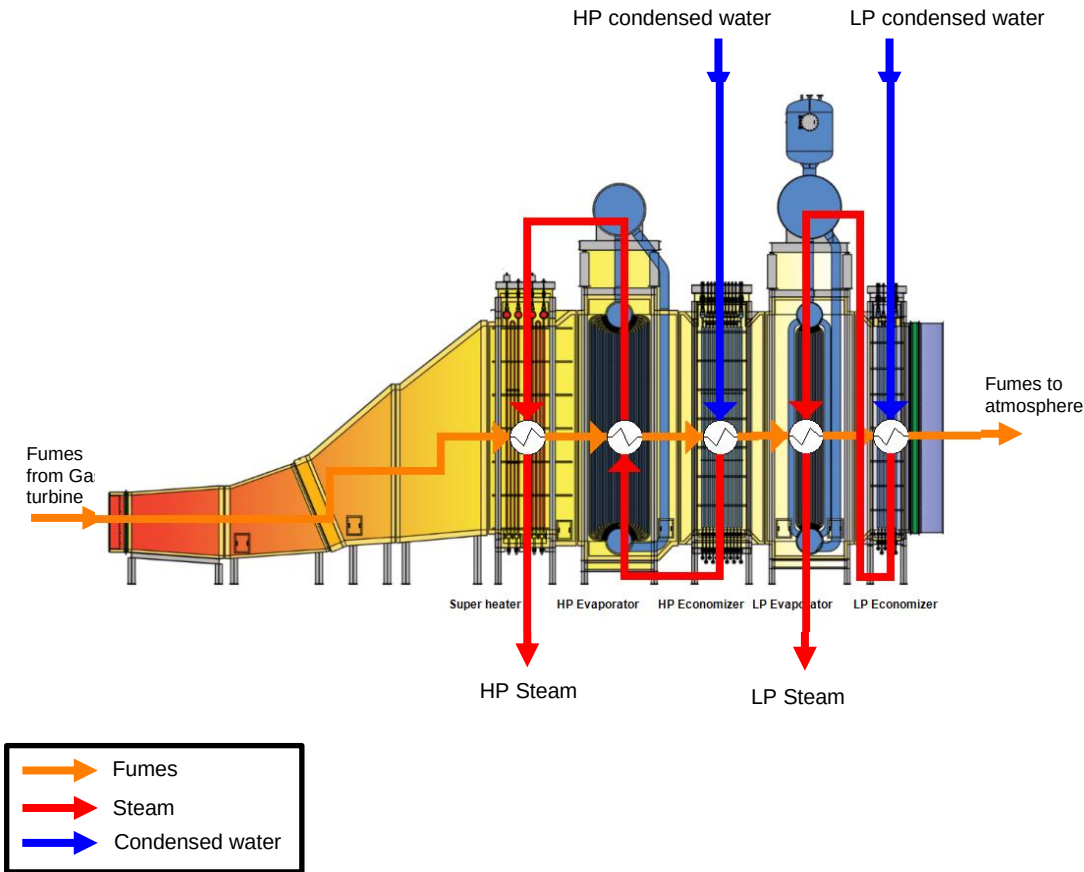
Fuel turbine power to « Electricity output »
window script

Conditions opératoires	Gas turbine
Contrainte sur le compresseur	Taux de compression
Taux de compression (-)	21
Rendement mécanique du compresseur (%)	98
Rendement isentropique du compresseur (%)	75
Contrainte sur la turbine	Pression de sortie
Pression (atm)	1
Rendement mécanique de la turbine (%)	98
Rendement électrique de la turbine (%)	99
Rendement isentropique de la turbine (%)	80
Type de comburant	Air
% massique O₂ dans les fumées	2
PCI du combustible	Calculated from compounds data

1.7.2. Bloc de récupération énergétique et de génération de vapeur (« Heat Recovery Steam Generator (HRSG) »)

Le système de récupération d'énergie pour la génération de vapeur (HRSG) est un ensemble d'échangeurs de chaleur dans lequel la chaleur est retirée des gaz d'échappement (fumées) pour générer de la vapeur. Typiquement, de la vapeur est produite à deux ou trois pressions différentes. De la vapeur surchauffée à haute pression est générée pour être utilisée dans la turbine à vapeur, et la sortie de ce premier étage de la turbine à vapeur est réchauffée. Les courants d'entrée du bloc HRSG comprennent l'échappement de la turbine à gaz et les alimentations en eau. Les principaux courants de sortie sont la vapeur haute et basse pression vers les turbines à vapeur. Plusieurs parties du HRSG doivent être dimensionnées pour recevoir le courant de vapeur à haute pression, y compris le surchauffeur, le réchauffeur, le ballon de séparation à haute pression, l'évaporateur à haute pression et les économiseurs.

Dans cet exemple, le HRSG est simplifié avec 2 étages (haute et basse pression) pour lesquels les fumées traversent le surchauffeur, l'évaporateur HP, l'économiseur HP, l'évaporateur BP et enfin l'économiseur BP avant d'être libérées dans l'atmosphère :



Configuration du HRSG

✓ Echangeurs généralisés

Conditions opératoires	Super heater
Type de contrainte : « Côté froid »	Surchauffé par rapport au point de rosée
Ecart de température (°C)	200

Conditions opératoires	HP Evaporator
Type de contrainte : « Côté froid »	Surchauffé par rapport au point de rosée
Ecart de température (°C)	1

Conditions opératoires	HP Economizer
Type de contrainte : « Côté froid »	Surchauffé par rapport au point de rosée
Ecart de température (°C)	-1

Conditions opératoires	LP Evaporator
Type de contrainte : « Côté froid »	Surchauffé par rapport au point de rosée
Ecart de température (°C)	150

Conditions opératoires	LP Economizer
Type de contrainte : « Côté froid »	Surchauffé par rapport au point de rosée
Ecart de température (°C)	-1

1.7.3. Bloc des turbines vapeur (« Steam turbines »)

Un système typique de turbine à vapeur pour une installation CCGI comprend des étages de turbine à haute pression, à pression intermédiaire et à basse pression, un générateur et un condenseur de vapeur d'échappement. L'étage haute pression reçoit de la vapeur surchauffée à haute pression provenant du HRSG. La vapeur de sortie de l'étage à haute pression retourne au HRSG pour réchauffage, après quoi elle entre dans l'étage de pression intermédiaire. La sortie de l'étage de pression intermédiaire passe à l'étage basse pression.

Dans cet exemple, le système de turbines à vapeur est simplifié avec deux étages de détente.

✓ Alimentation « Water saturator »

		Water recycle
Mass percentage	H ₂ O	100
Total mass flowrate (t/h)		33
Temperature (°C)		25
Pressure (atm)		1

Remarque : le calculator utilisé pour les courants d'eau est le calculator « Pure water ».

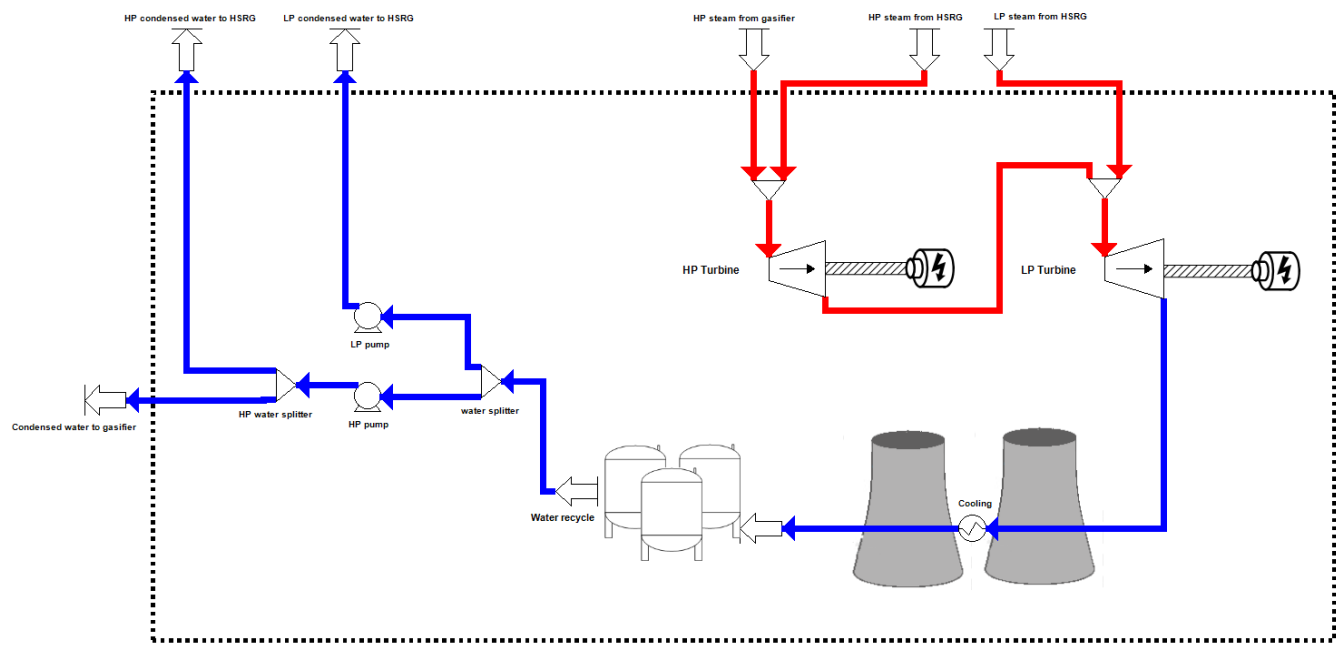


Diagramme du bloc « Steam turbines »

✓ Pompes

Paramètres opératoires	LP pump
Pression de sortie (bar)	50
Efficacité volumétrique	0.65
Efficacité mécanique	1
Efficacité électrique	1

Paramètres opératoires	HP pump
Pression de sortie (bar)	120
Efficacité volumétrique	0.65
Efficacité mécanique	1
Efficacité électrique	1

✓ Turbines

Paramètres opératoires	LP Turbine
Pression de sortie (bar)	0.07
Efficacité isentropique	0.85
Efficacité mécanique	0.98
Efficacité électrique	0.99

Paramètres opératoires	HP Turbine
Pression de sortie (bar)	50
Efficacité isentropique	0.85
Efficacité mécanique	0.98
Efficacité électrique	0.99

✓ Diviseur de courant

Paramètres opératoires	Water splitter
Type de spécification	Débits massiques
Débit massique de l'eau HP (vers la pompe HP "HP pump") (t/h)	25

Paramètres opératoires	HP water splitter
Type de spécification	Débits massiques
Débit massique d'eau vers le gazéifieur (t/h)	16

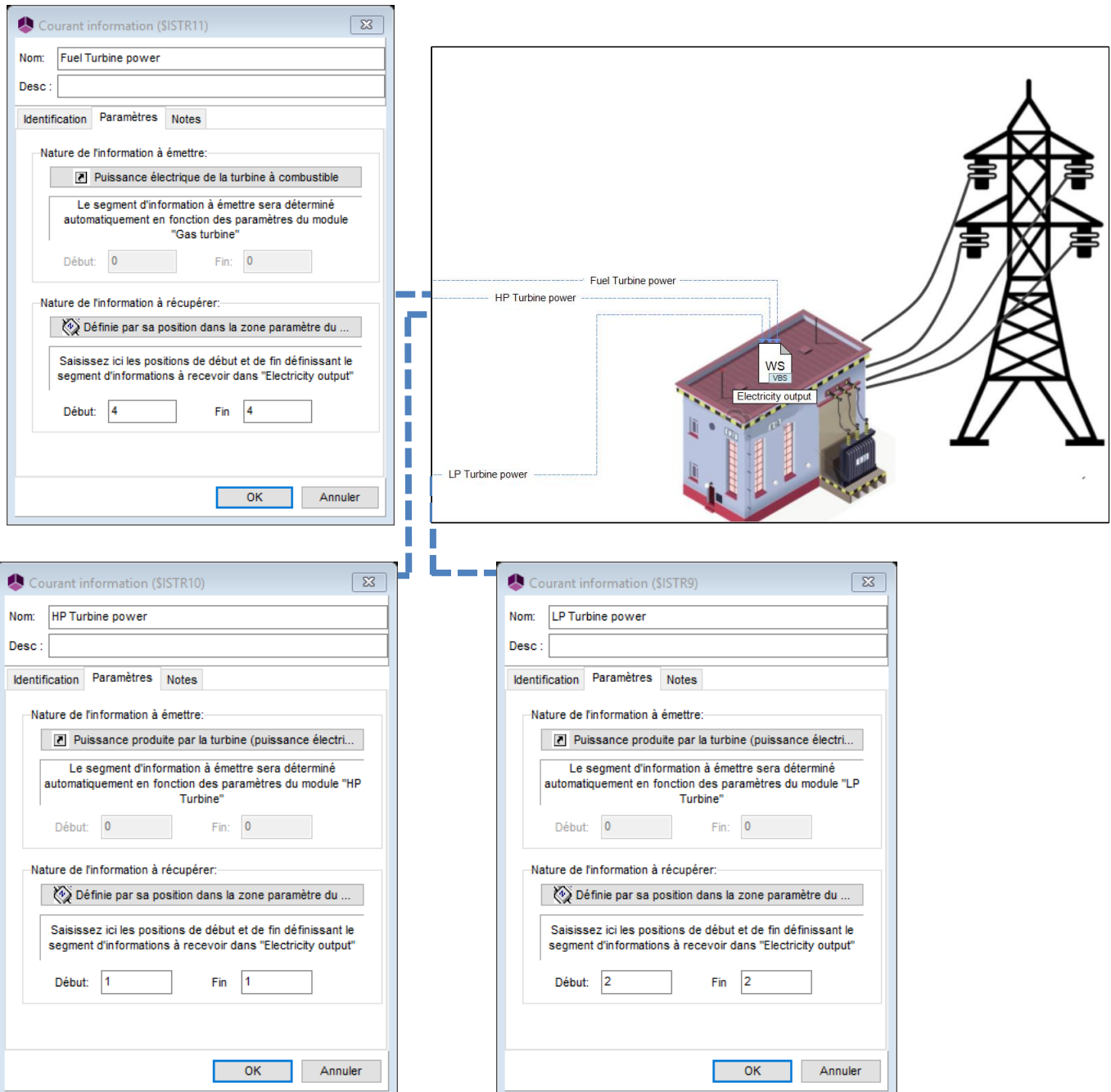
Remarque : les mélangeurs sont définis avec les valeurs par défaut (la pression de sortie est la plus faible des alimentations).

Remarque : l'appoint et le recyclage de l'eau (connexion entre l'alimentation et la sortie en eau) n'ont pas été simulés dans cet exemple.

2. RESULTATS DE SIMULATION

2.1. Résumé des résultats

Comme pour le module Windows script « Pyrolysis » qui permet à l'utilisateur de fournir et de définir des paramètres d'entrée, le module Windows script « Electricity output » permet de résumer les performances globales de l'installation CCGI.



Windows Script (\$XTMO)

Nom: Electricity output

Desc :

Identification Scripts Rapport Courants Notes

Taille PAR : 11

Indice	Par	Info
1	0	HP turbine power
2	0	LP turbine power
3	0	Total steam turbines power
4	0	Fuel turbine power
5	0	Total electric power
6	0	Thermal energy of the syngas
7	0	Thermal energy of the waste
8	0	LHV (mass) of the waste
9	0	LHV (mass) of the syngas
10	0	Gross electrical efficiency (based on waste)
11	0	Electrical efficiency (based on syngas)

OK Annuler

CALL OF «UNIT CONVERSION» SCRIPT

```
with CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
    ExecuteGlobal .OpenTextFile(Project.ApplicationPath & "Scripts\UnitConversion.vbs", 1).ReadAll()
    ExecuteGlobal .OpenTextFile(Project.ApplicationPath & "Scripts\StreamProperties.vbs", 1).ReadAll()
end with
```

Calculation of the total electric power and efficiencies

```
Function OnCalculation()
    With Module
        ' Total electric power of steam turbines and gas turbine
        .Parameter(3) = abs(.Parameter(1)) + abs(.Parameter(2))
        .Parameter(5) = abs(.Parameter(3)) + abs(.Parameter(4))

        ' LHV calculation of syngas and waste
        .Parameter(9) = Project.Modules("Gas turbine").FuelLHVCalculated / _
            Project.Modules("Gas turbine").FuelMolecularWeightCalculated
        .Parameter(8) = ConvertToProSim("Mass enthalpy", _
            LHV_Mol = ConvertToProSim("Molar enthalpy", _
                LHVStream(Project.Modules("Waste_Feed").OutputStream(1), 0), _
                ReportUnit("Molar enthalpy")))
        .Parameter(8) = LHV_Mol / Project.Modules("Waste_Feed").OutputStream(1).MolarWeight

        ' Thermal energy power
        .Parameter(6) = Project.Modules("Gas turbine").FuelMassFlowrateCalculated * .Parameter(9)
        .Parameter(7) = Project.Modules("Waste_Feed").OutputStream(1).MassFlowrate * .Parameter(8)

        ' Efficiencies
        .Parameter(10) = (.Parameter(5) / .Parameter(7)) * 100.0
        .Parameter(11) = (.Parameter(5) / .Parameter(6)) * 100.0
    End With
```

```

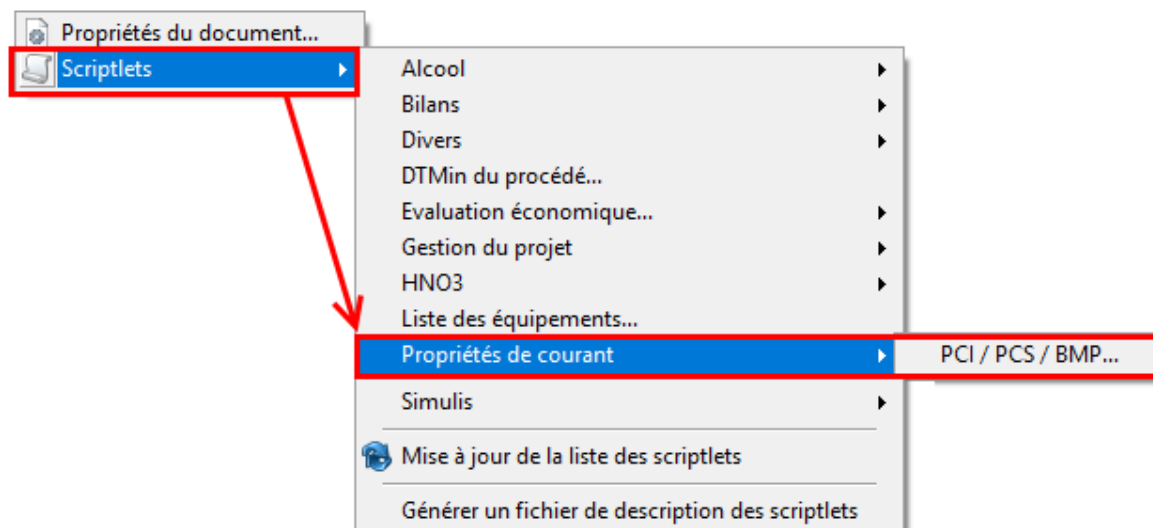
OnCalculation = true

End Function

'-----
' Print results
'-----
Sub OnPrintResults()
  With Module
    .PrintReport("ELECTRIC POWER")
    .PrintReport("HP Turbine power          : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Power",abs(.Parameter(1))),3) & " " & _
      ReportUnit("Power"))
    .PrintReport("LP Turbine power          : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Power",abs(.Parameter(2))),3) & " " & _
      ReportUnit("Power"))
    .PrintReport("-----")
    .PrintReport("Steam Turbines power          : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Power",abs(.Parameter(3))),3) & " " & _
      ReportUnit("Power"))
    .PrintReport("")
    .PrintReport("Fuel Turbine power          : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Power",abs(.Parameter(4))),3) & " " & _
      ReportUnit("Power"))
    .PrintReport("-----")
    .PrintReport("Total power produced          : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Power",abs(Module.Parameter(5))),3) & " " & _
      ReportUnit("Power"))
    .PrintReport("")
    .PrintReport("")
    .PrintReport("THERMAL ENERGY POWER (LHV)")
    .PrintReport("LHV of the waste              : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Mass enthalpy",abs(.Parameter(8))),3) & " " & _
      ReportUnit("Mass enthalpy"))
    .PrintReport("LHV of the syngas             : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Mass enthalpy",abs(.Parameter(9))),3) & " " & _
      ReportUnit("Mass enthalpy"))
    .PrintReport("")
    .PrintReport("Thermal energy of the waste   : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Power",abs(.Parameter(7))),3) & " " & _
      ReportUnit("Power"))
    .PrintReport("Thermal energy of the syngas : " & _
      FormatNumber(ProSimToReport("Power",abs(.Parameter(6))),3) & " " & _
      ReportUnit("Power"))
    .PrintReport("")
    .PrintReport("")
    .PrintReport("EFFICIENCIES")
    .PrintReport("Gross electrical efficiency (based on LHV waste) : " & _
      FormatNumber(abs(.Parameter(10)),3) & " (%)")
    .PrintReport("Electrical efficiency (based on LHV syngas)      : " & _
      FormatNumber(abs(.Parameter(11)),3) & " (%)")
  End With
End Sub

```

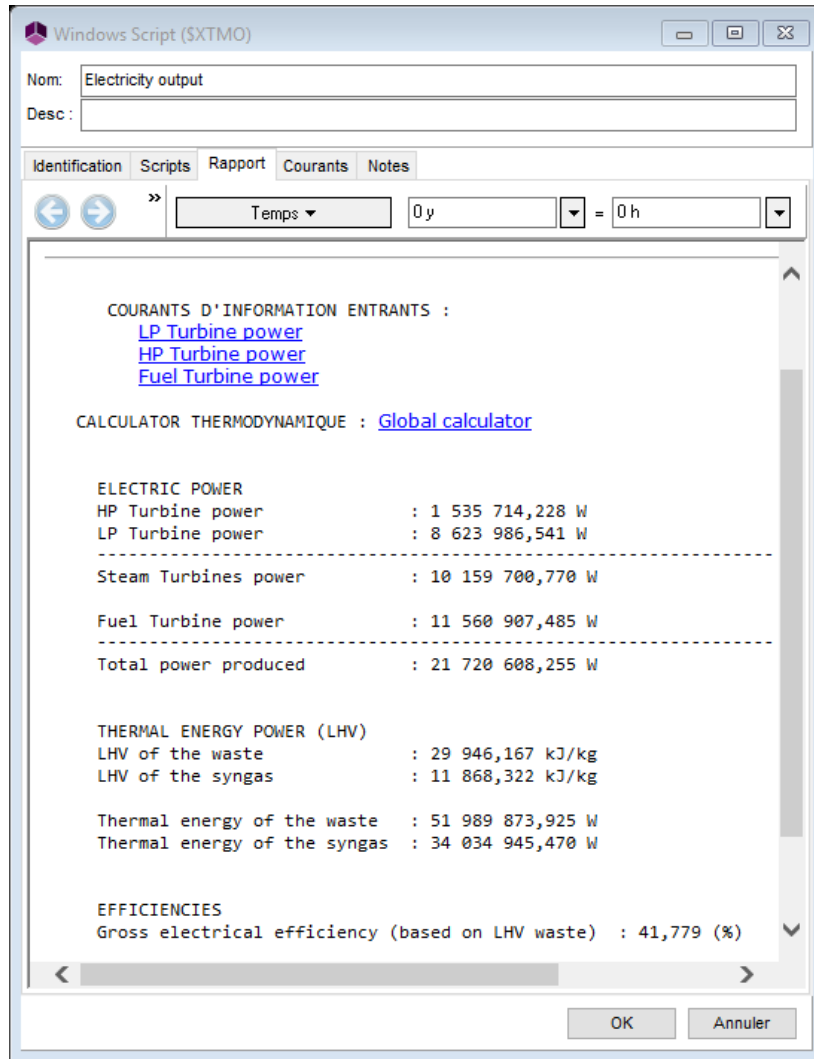
Remarque : le PCI d'un courant peut être calculé en utilisant le scriptlet « PCI / PCS / BMP » comme suit (le clic droit pour accéder aux scriptlets peut être fait sur le projet, sur un groupe d'opérations unitaires sélectionnées ou sur un courant spécifique) :



2.2. Puissance électrique produite “nette” et efficacité de l’installation

Les principaux résultats sont résumés dans le tableau suivant :

Résultats de simulation	Notation	Valeur
HP Turbine power (MW)	A	1.5
LP Turbine power (MW)	B	8.6
Total Turbine power (MW)	C (A+B)	10.1
Gas Turbine power (MW)	D	11.6
Total electric power produced (MW)	E (C+D)	21.7
LHV of the coal (MJ/kg)	F	30
LHV of the syngas (MJ/kg)	G	11.9
Coal mass flowrate (t/h)	H	6.25
Syngas mass flowrate (t/h)	I	10.3
Thermal energy of the coal (MW)	J (H*F)	52
Gross electrical efficiency (%)	K (E/J)	41.8



Résultats affichés dans le module Windows Script "Electricity output"

Dans cet exemple, l'efficacité brute est de 42%. Afin de calculer l'efficacité nette, les puissances consommées pour l'ASU (consommation des compresseurs), les pompes et autres fournitures doivent être prises en compte. Ces consommations électriques atteignent jusqu'à 10-15% de la puissance totale produite par l'usine. Les installations conventionnelles CCGI atteignent entre 35 et 45% d'efficacité nette.

Remarque : l'installation CCGI modélisée dans cet exemple a été simplifiée, ce qui explique l'efficacité brute relative « faible ». En effet, l'efficacité du HRSG, l'efficacité du gazéifieur et surtout le « cycle combiné » du CCGI sont perfectibles pour atteindre un rendement net aux environs de 40%.

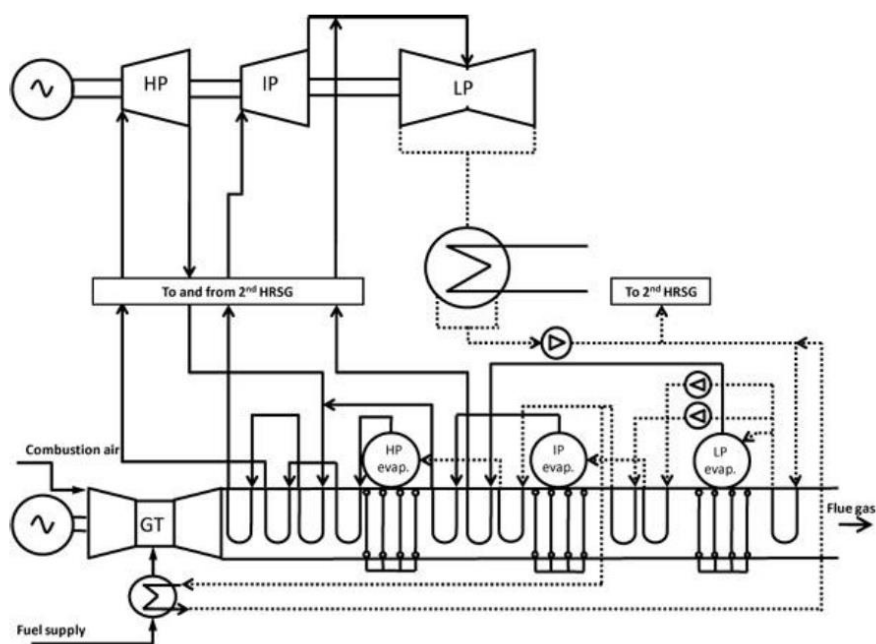


Schéma d'une installation avancée d'une centrale CCGI

3. BIBLIOGRAPHIE

- [NT172] Note technique NT172 : Scriptlet « Constituant solide ».
- [EDW07] Edward S. Rubin, "Technical Documentation: Integrated Gasification Combined Cycle Systems (IGCC) with Carbon Capture and Storage (CCS)", Carnegie Mellon University, 5-2007.
- [ENE17] Manuel Trevino Coca, "Integrated gasification combined cycle technology: IGCC", ELCOGAS, Puertollano, ENERCLUB (Club espanol de la energia).
- [NAY11] Rajul Nayak, Raju K. Mewada, "Simulation of Coal Gasification Process using ASPEN PLUS", INSTITUTE OF TECHNOLOGY, NIRMA UNIVERSITY, AHMEDABAD – 382 481, 08-10 DECEMBER, 2011.
- [ROW17] R.L. Rowley, W.V. Wilding, J.L. Oscarson, N.F. Giles, DIPPR® Data Compilation of Pure Chemical Properties, Design Institute for Physical Properties, AIChE, New York, NY (2017)