

EXEMPLE D'APPLICATION PROSIMPLUS

CENTRALE DE PRODUCTION D'ELECTRICITE A TROIS CYCLES COMBINES

INTERET DE L'EXEMPLE

Cet exemple présente la simulation d'une centrale de production d'électricité à trois cycles combinés : une pile à combustible à oxyde solide (SOFC), une turbine à gaz ainsi qu'un cycle vapeur.

DIFFUSION	<input checked="" type="checkbox"/> Libre Internet	<input type="checkbox"/> Réservée clients	<input type="checkbox"/> Restreinte	<input type="checkbox"/> Confidentielle
------------------	---	--	--	--

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	<i>PSPS_EX_FR- Centrale-production-électricité-trois-cycles-combinés.pmp3</i>
---	---

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

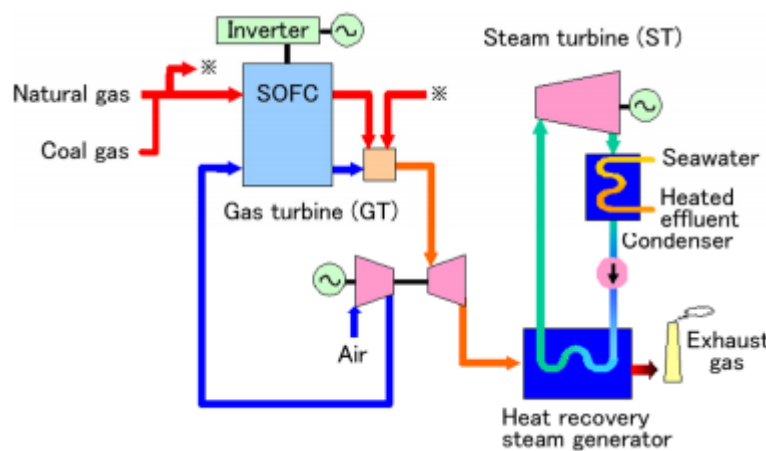
TABLE DES MATIÈRES

1. MODELISATION DU PROCEDE	3
1.1. Présentation du procédé	3
1.2. Schéma de simulation	4
1.3. Constituants	5
1.4. Modèle thermodynamique	6
1.5. Réaction chimique	7
1.6. Conditions opératoires	8
1.6.1. Pile à combustible à oxyde solide	8
1.6.2. Turbine à gaz	10
1.6.3. Cycle vapeur	11
1.7. Initialisations	13
1.8. « Trucs et astuces »	14
2. RESULTATS	18
2.1. Résumé des résultats	18
2.2. Performance de la pile à combustible à oxyde solide	20
2.3. Performance de la turbine à gaz	21
2.4. Performance du cycle vapeur	22
2.5. Performance globale de l'installation	23
3. BIBLIOGRAPHIE	24

1. MODELISATION DU PROCÉDE

1.1. Présentation du procédé

Cet exemple présente la production d'électricité grâce à trois cycles combinés. Une pile à combustible à oxyde solide (SOFC) fonctionne à haute température, soit de 600 à 1000°C. En associant la chaleur du gaz sortant de cette pile à un cycle combiné pour la production d'électricité, un système de production d'énergie à très haut rendement peut être obtenu (environ 60 %). Cet exemple est inspiré d'un procédé développé par Mitsubishi Heavy Industries (MHI) comme illustré ci-dessous. Il utilise l'énergie des combustibles fossiles dans trois étages en cascade : SOFC, turbine à gaz (GT) et turbine à vapeur (ST). Pour le dernier étage, un cycle vapeur est utilisé pour maximiser la valorisation énergétique du procédé [MHI11].



Dans ce contexte, le procédé est donc constitué de 3 parties :

- une pile à combustible à oxyde solide (SOFC) ;
- une turbine à gaz (GT) ;
- un cycle vapeur (ST).

La pile à combustible à oxyde solide est une solution de production d'électricité intéressante car elle présente une bonne efficacité avec un faible impact environnemental. Elle est constituée de deux électrodes (anode et cathode) séparées par un électrolyte solide. Le combustible, en général l'hydrogène, est introduit dans le compartiment anodique où il subit une réaction d'oxydation. Les électrons produits passent dans le circuit électrique externe. L'oxygène est introduit dans le compartiment cathodique où il est réduit en ions oxyde O^{2-} . Ces ions diffusent à travers l'électrolyte conducteur ionique.

Pour la turbine à gaz, l'air est comprimé avant d'entrer dans la pile puis mélangé avec le gaz sortant de la pile avant d'entrer dans la chambre de combustion. Les gaz de combustion sont ensuite détendus dans la turbine, qui produit ainsi de l'électricité.

Pour le cycle vapeur, l'eau est compressée puis vaporisée au contact d'une source chaude (gaz sortant de la turbine à gaz). La turbine du cycle permet de transformer cette énergie thermique en électricité.

1.2. Schéma de simulation

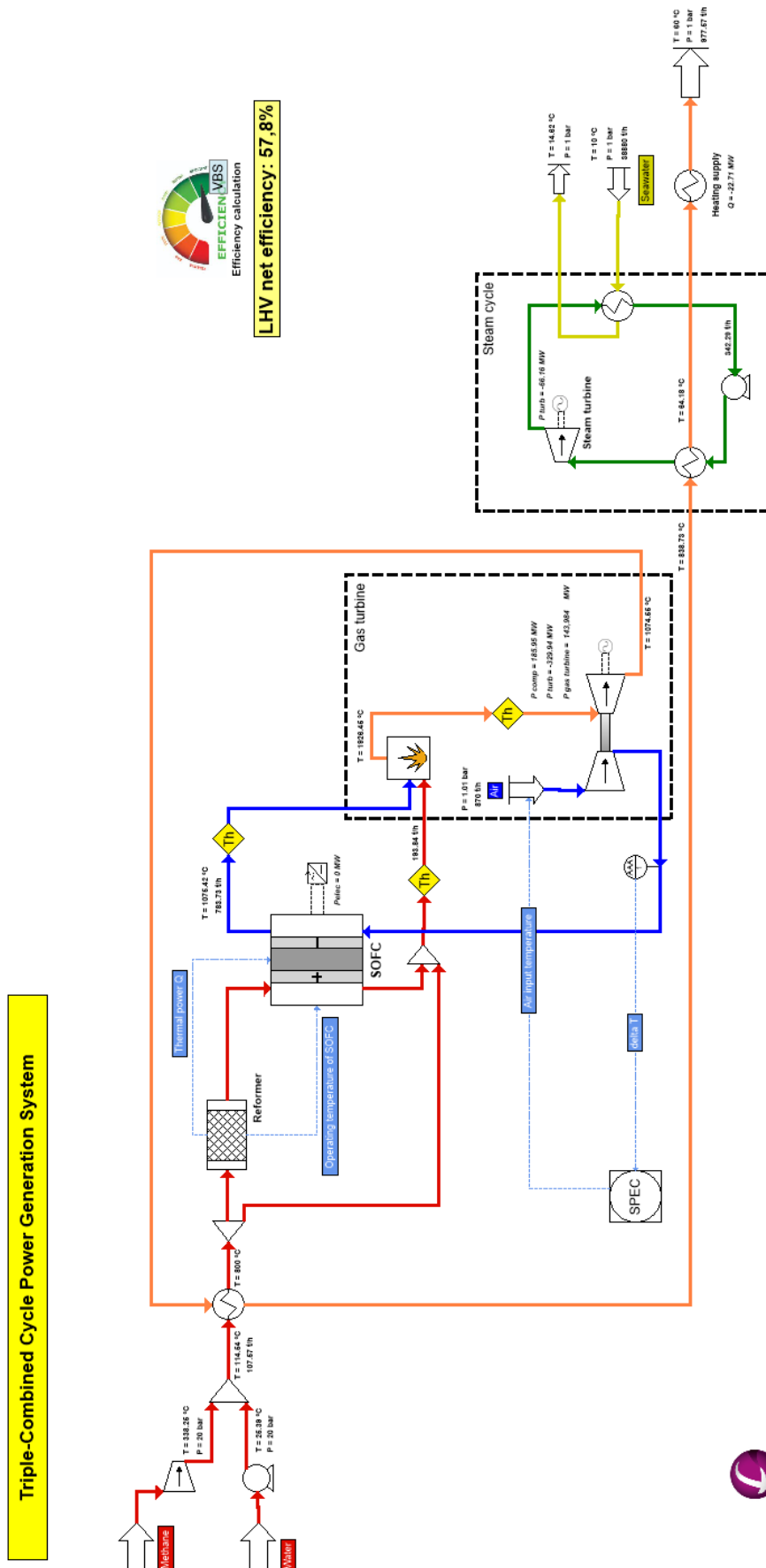


Schéma de simulation d'une centrale de production d'électricité à trois cycles combinés

1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation ainsi que leurs formules chimiques et leurs numéros CAS¹ sont présentés dans le tableau ci-après. Les propriétés de corps purs sont extraites de la base de données standard des logiciels ProSim [WIL21].

Constituant	Formule chimique	Numéro CAS ⁽¹⁾
Water	H ₂ O	7732-18-5
Oxygen	O ₂	7782-44-7
Hydrogen	H ₂	1333-74-0
Nitrogen	N ₂	7727-37-9
Carbon dioxide	CO ₂	124-38-9
Methane	CH ₄	74-82-8
Ammonia	NH ₃	7664-41-7
Hydrogen sulfide	H ₂ S	7783-06-4
Sulphur dioxide	SO ₂	7446-09-5
Nitric oxide	NO	10102-43-9
Carbon monoxide	CO	630-08-0
Sulphur trioxide	SO ₃	7446-11-9

¹ CAS Registry Numbers® are the intellectual property of the American Chemical Society and are used by ProSim SA with the express permission of ACS. CAS Registry Numbers® have not been verified by ACS and may be inaccurate.

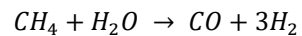
1.4. Modèle thermodynamique

Trois « calculator » thermodynamiques sont définis pour simuler cet exemple :

- « Global calculator » : ce calculator est utilisé pour l'ensemble du flowheet, excepté pour le cycle vapeur et le module de combustion. Le profil thermodynamique retenu est Soave-Redlich-Kwong (SRK).
- « Fumes – Biogas » : ce calculator est spécifiquement utilisé pour modéliser les courants entrants et sortants (combustible, air, fumées) du module de combustion. Le profil thermodynamique retenu est « Idéal ».
- « Water » : ce calculator est utilisé pour les courants d'eau pure au niveau du cycle vapeur. Le modèle thermodynamique est le modèle spécifique eau pure.

1.5. Réaction chimique

Dans le réacteur simple, la réaction suivante a lieu :



Ce réformeur permet de convertir une partie du méthane en monoxyde de carbone et en hydrogène pour la pile à combustible. Le taux de conversion du méthane est de 0,85 (85%).

The screenshot shows a software window titled "Définition de la réaction chimique" with a close button in the top right corner. The "Nom" field contains the chemical equation "CH4 + H2O --> CO + 3H2". Below the name field are four tabs: "Identification", "Stoechiométrie", "Ordres", and "Notes". The "Stoechiométrie" tab is active, displaying a table with the following data:

Constituant	Coefficient stoechiométrique
OXYGEN	0,000000
HYDROGEN	3,000000
CARBON DIOXIDE	0,000000
CARBON MONOXIDE	1,000000
NITROGEN	0,000000
WATER	-1,000000
METHANE	-1,000000
HYDROGEN SULFIDE	0,000000
SULFUR DIOXIDE	0,000000
SULFUR TRIOXIDE	0,000000
NITRIC OXIDE	0,000000
AMMONIA	0,000000

At the bottom right of the window are two buttons: "Ok" and "Annuler".

1.6. Conditions opératoires

1.6.1. « Section pile à combustible »

✓ Alimentations :

Nom :	Methane	Water
Débits massiques partiels (t/h)		
Oxygen	0	0
Hydrogen	0	0
Carbon dioxide	0	0
Carbon monoxide	0	0
Nitrogen	0	0
Water	0	59.45
Methane	48.12	0
Température (°C)	25	25
Pression (bar)	1.01325	1.01325

✓ Compresseur « Fuel compressor »

Spécification fournie	Pression
Pression de refoulement (bar)	20
Efficacité isentropique	0.75
Efficacité mécanique	0.95
Efficacité électrique	0.98

✓ Pompe centrifuge « P1 »

Spécification fournie	Pression
Pression de refoulement (bar)	20
Efficacité volumétrique	0.65
Efficacité mécanique	0.95
Efficacité électrique	0.98

- ✓ Echangeur de chaleur généralisé « Generalized heat exchanger »

Type d'échangeur	Contre-courant ou multi-passes
Type de spécification	Température de sortie sur courant froid
Température de sortie (°C)	800

- ✓ Diviseur de courants « S1 »

Spécification fournie	Taux de partage
Taux de partage	0.378
Courant calculé automatiquement	Courant entrant dans le réacteur simple

- ✓ Réacteur simple « Reformer »

Jeu de réactions	Jeu global
Fonctionnement thermique du réacteur	Température de sortie spécifiée
Température (°C)	800
Spécification pour la pression	La plus faible des alimentations
Taux de conversion du méthane	0.85

- ✓ Pile à combustible à oxyde solide « SOFC »

Taux de conversion du monoxyde de carbone	0.85
Taux de conversion de l'hydrogène	0.85
Ecart de température cathode-anode en sortie (°C)	0.6
Efficacité énergétique	0.5

- ✓ Calculator Switch

Un module **Calculator Switch** permet de changer le calculator thermodynamique d'un courant matière lorsque celui-ci entre dans un module qui n'utilise pas le même modèle thermodynamique que celui dont il est affecté. Ce changement s'avère nécessaire notamment lorsque les deux calculators n'utilisent pas la même base enthalpique, le même chemin de calcul enthalpique voire la même approche thermodynamique.

	Calculator switch	Calculator switch 1
Modèle thermodynamique	« Fumes – Biogas »	« Fumes – Biogas »

- ✓ Gestion des contraintes et des recyclages (« SPEC ») : le module « Gestion des contraintes et des recyclages » est requis car il est nécessaire d'atteindre une certaine température en sortie du compresseur. Le module est configuré par défaut.

Ce module récupère l'écart entre la température mesurée du courant sortant du compresseur « Air compressor » et la consigne fixée, en ajustant la température de l'alimentation « Air » pour que cet écart soit nul.

- ✓ Consignateur de température « Heating supply »

Température de sortie (°C)	60
-----------------------------------	----

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

1.6.2. Turbine à gaz

- ✓ Alimentation

Nom :	Air
Fractions molaires	
Oxygen	0.21
Hydrogen	0
Carbon dioxide	0
Carbon monoxide	0
Nitrogen	0.79
Water	0
Methane	0
Débit massique (t/h)	870
Température (°C)	588.675
Pression (bar)	1.01325

- ✓ Combustion « combustion »

Calcul des PCI	A partir de données de corps purs
Pertes thermiques (% de la puissance de combustion)	5
Pression de la chambre de combustion	Egale à la plus faible des pressions des alimentations

✓ Compresseur « Air compressor »

Spécification fournie	Pression
Pression de refoulement (bar)	20
Efficacité isentropique	0.78
Efficacité mécanique	0.95
Efficacité électrique	0.98

✓ Turbine « Gas turbine »

Spécification fournie	Pression
Pression de décharge (bar)	1
Efficacité isentropique	0.85
Efficacité mécanique	0.95
Efficacité électrique	0.98

✓ Calculator Switch

Modèle thermodynamique	« Global calculator »
-------------------------------	-----------------------

1.6.3. Cycle vapeur

✓ Alimentation

Nom :	Seawater
Débits massiques partiels (t/h)	
Oxygen	0
Hydrogen	0
Carbon dioxide	0
Carbon monoxide	0
Nitrogen	0
Water	38880
Methane	0
Température (°C)	10
Pression (bar)	1

- ✓ Echangeurs de chaleur généralisés « Generalized heat exchanger »

	Condenser	Evaporator
Type d'échangeur	Contre-courant ou multi-passes	Contre-courant ou multi-passes
Type de spécification	Courant chaud sous-refroidi au-dessous de sa température de bulle	Ecart de température interne minimum
Différence de température (°C)	5	10

- ✓ Turbine « Steam turbine »

Spécification fournie	Pression
Pression de décharge (bar)	0.05
Efficacité isentropique	0.75
Efficacité mécanique	0.95
Efficacité électrique	0.98

- ✓ Pompe centrifuge « P2 »

Spécification fournie	Pression
Pression de refoulement (bar)	23
Efficacité volumétrique	0.75
Efficacité mécanique	0.95
Efficacité électrique	0.98

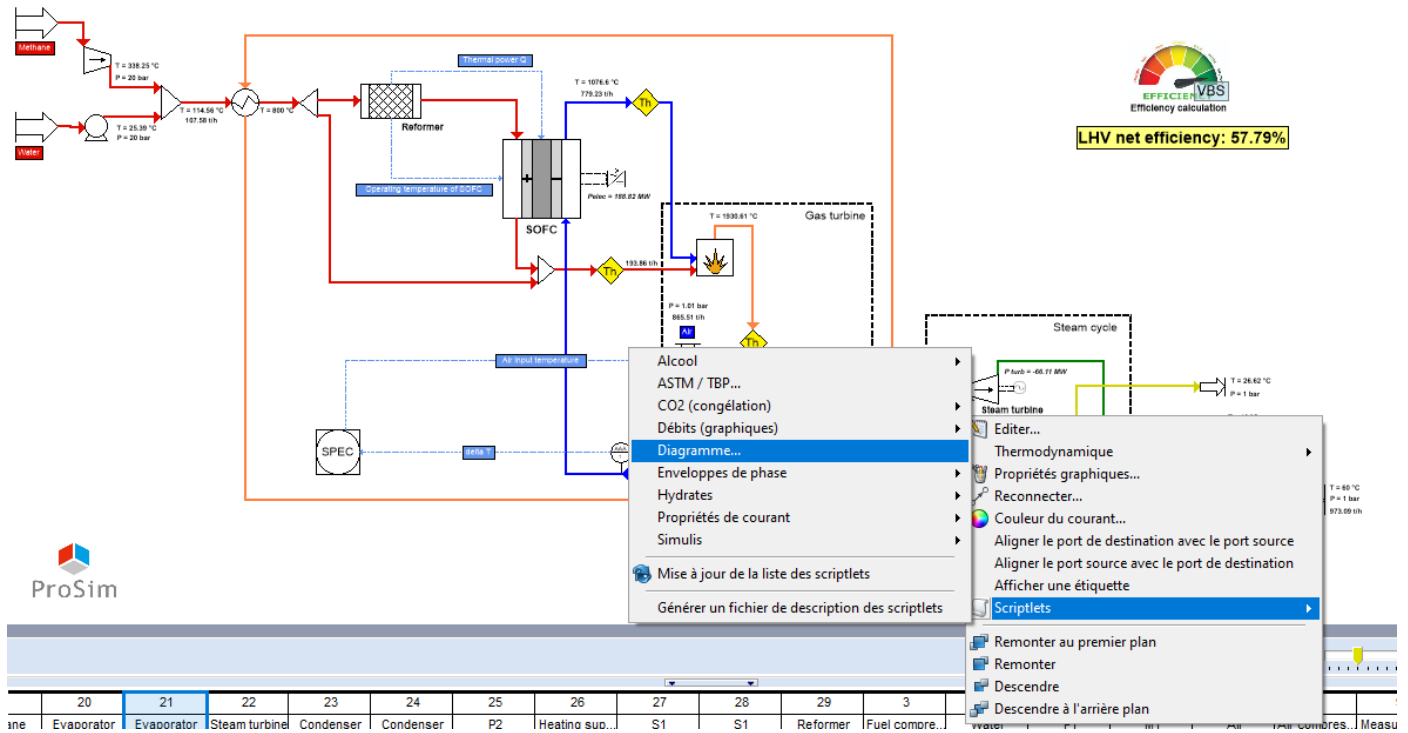
1.7. Initialisations

La séquence de calcul est automatiquement déterminée par ProSimPlus. Le courant coupé numéroté « 3 » (sortie de la pompe en entrée de l'échangeur généralisé) doit être initialisé pour définir le flux circulant dans la boucle. La définition suivante est utilisée :

Courant	3
Débits massiques partiels (t/h)	
Oxygen	0
Hydrogen	0
Carbon dioxide	0
Carbon monoxide	0
Nitrogen	0
Water	342.29
Methane	0
Oxygen	0
Hydrogen	0
Carbon dioxide	0

1.8. « Trucs et astuces »

Le scriptlet « Diagramme » permet de tracer des cycles thermodynamiques ou des points d'un procédé dans un diagramme (P-H, P-S, P-T, T-H, T-S). Pour utiliser ce scriptlet, il suffit de sélectionner un des courants « matière » du cycle et ensuite, par un clic-droit, de lancer le scriptlet via « Scriptlets -> Diagramme » :



Definition du type de diagramme

Ce scriptlet permet de tracer les points du procédé ou les points d'un cycle thermodynamique dans un diagramme.

Sélectionnez le type de diagramme souhaité

P-H
 P-S
 P-T
 T-H
 T-S

Cocher les isométriques souhaitées

Iso taux de vaporisation
 Iso température
 Iso pression
 Iso enthalpie
 Iso entropie

Ok Annuler

Paramètres du scriptlet

Sélectionnez le type souhaité (enthalpie et entropie)

Molaire
 Massique

Voulez vous relier les points entre eux ?

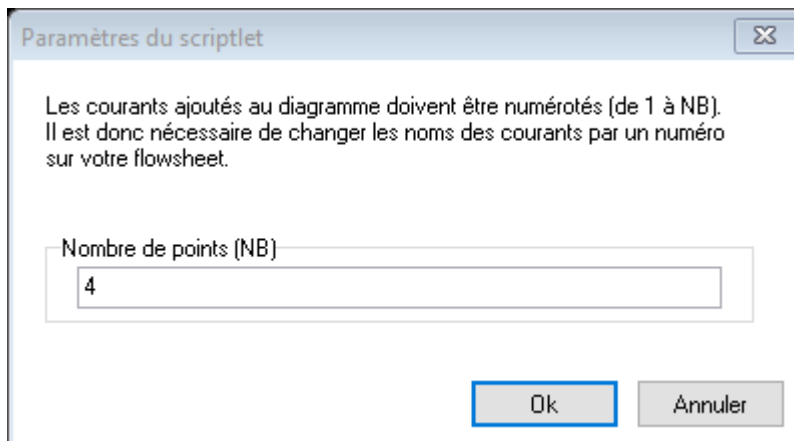
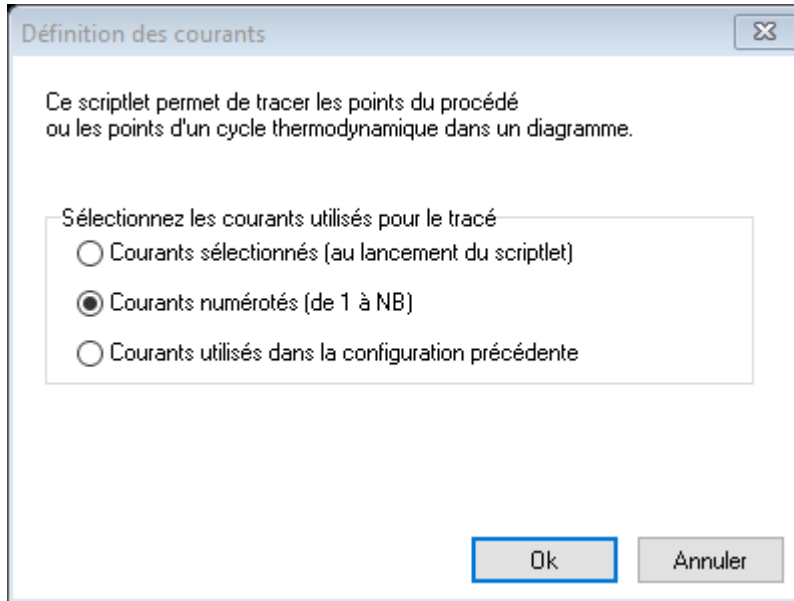
Non
 Oui

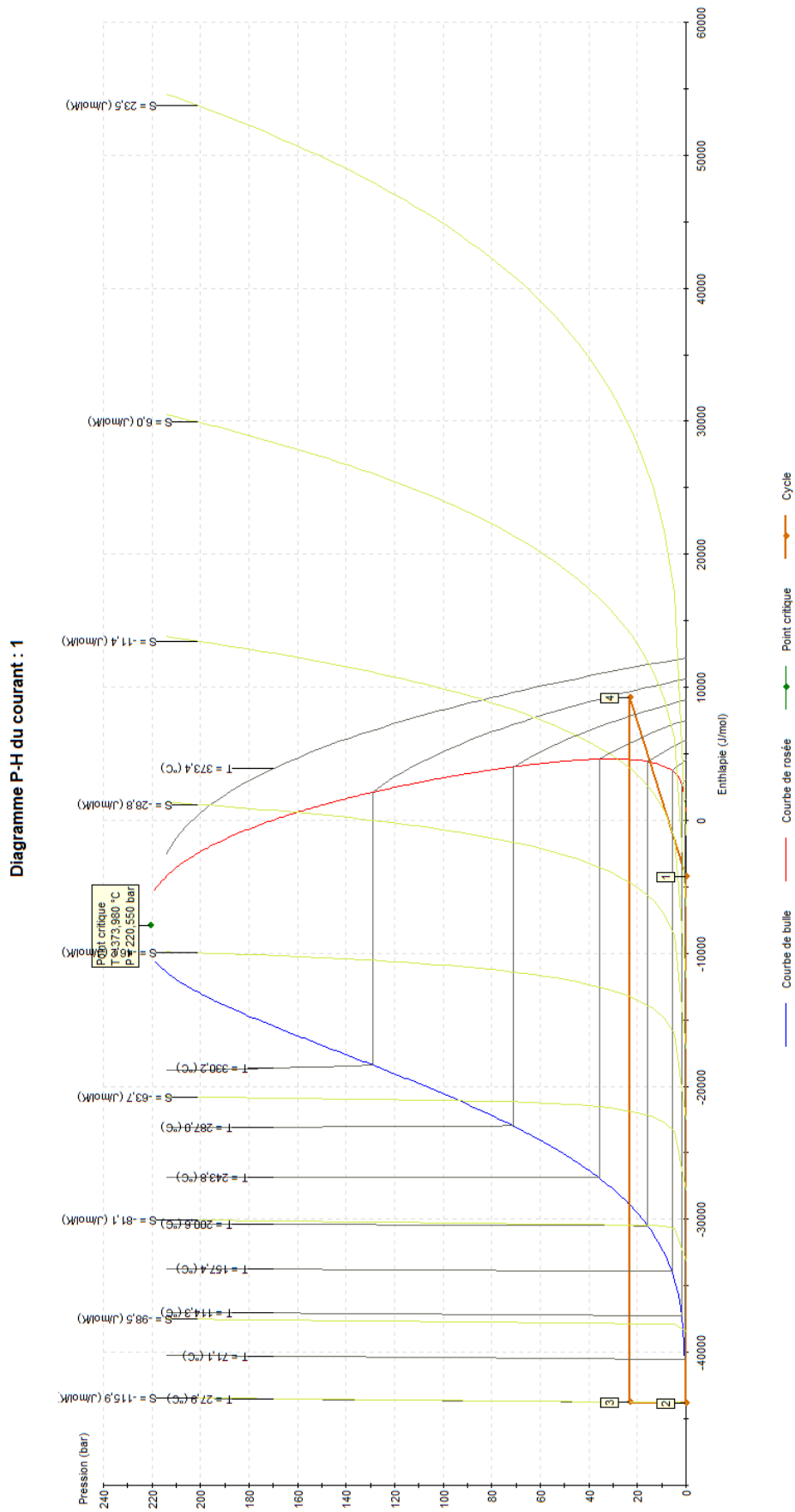
Voulez vous modifier le nombre d'iso par défaut ?

Non
 Oui

Ok Annuler

Pour que les points du cycle soient reliés, il est nécessaire de numéroter les courants matière dans l'ordre du cycle souhaité, de 1 à NB.

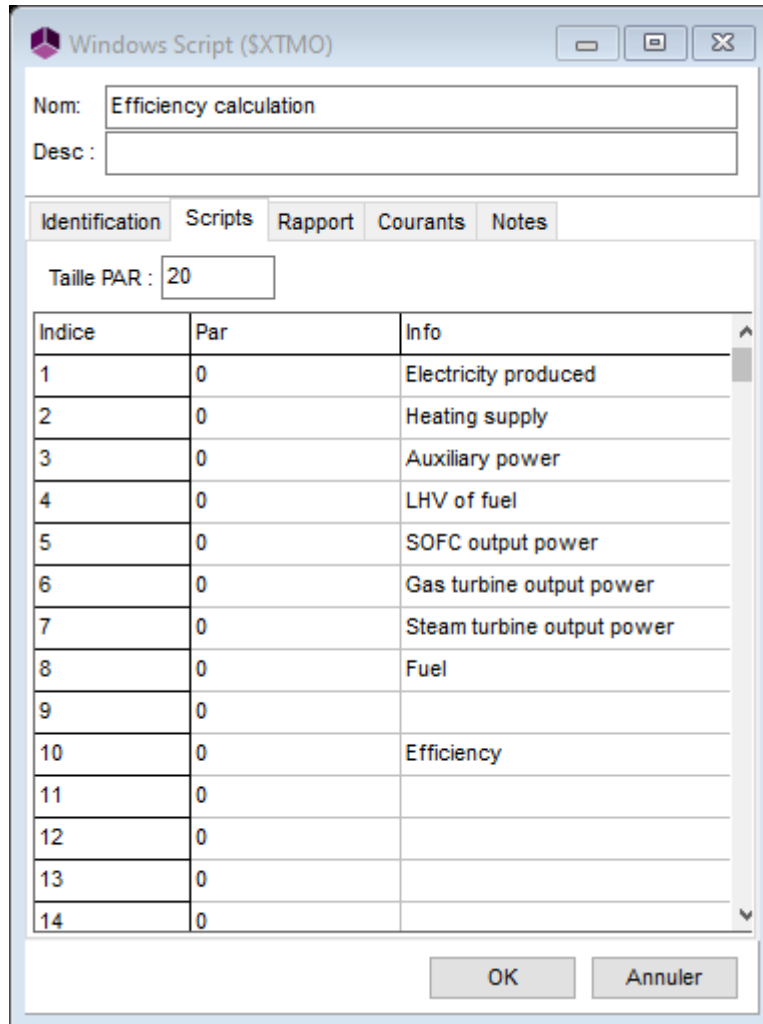




2. RESULTATS

2.1. Résumé des résultats

Le module Windows Script « Efficiency Calculation » est employé dans le flowsheet et permet de résumer les performances globales du procédé.



The screenshot shows a software window titled "Windows Script (SXTMO)". It contains a form for "Efficiency calculation" with the following fields and elements:

- Nom: Efficiency calculation
- Desc: (empty)
- Identification Scripts Rapport Courants Notes (tabbed interface)
- Taille PAR : 20
- Table with 3 columns: Indice, Par, and Info.
- Buttons: OK, Annuler

Indice	Par	Info
1	0	Electricity produced
2	0	Heating supply
3	0	Auxiliary power
4	0	LHV of fuel
5	0	SOFC output power
6	0	Gas turbine output power
7	0	Steam turbine output power
8	0	Fuel
9	0	
10	0	Efficiency
11	0	
12	0	
13	0	
14	0	

Le script suivant est utilisé :

```

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

Function OnCalculation()

  'Calculation of electrical power produced
  Module.parameter(5) = Project.Modules("SOFC").RealElectricPower
  Module.parameter(6) = abs(Project.Modules("Gas turbine").Power) - Project.Modules("Air
compressor").TotalUsefulPower
  Module.parameter(7) = abs(Project.Modules("Steam turbine").Power)
  Module.parameter(1) = Module.parameter(5) + Module.parameter(6) + Module.parameter(7)

  'Calculation of amount of heat recovered
  Module.parameter(2) = abs(Project.Modules("Heating supply").HeatDuty)

  'Calculation of auxiliary power
  Module.parameter(3) = Project.Modules("Fuel compressor").TotalUsefulPower +
Project.Modules("P1").UsefulPower + Project.Modules("P2").UsefulPower

  'Calculation of the methane LHV and net efficiency of the process
  Module.parameter(4) = LHVStream(Project.Modules("Methane").OutputStream(1),1)
  Module.parameter(8) = (Project.Modules("Methane").OutputStream(1).MassFlowRate *
Module.parameter(4))

  Module.parameter(10) = ((Module.parameter(1) - Module.parameter(3))*100) / Module.parameter(8)

OnCalculation = true
end Function

'-----'
' Print results
'-----'
Sub OnPrintResults()
with Module
  .PrintReport("SOFC output power" = " &
NiceFloat(ConvertFromProSim("Power", Module.parameter(5), "MW"))& "(MW)"
  .PrintReport("Gas turbine output power" = " &
NiceFloat(ConvertFromProSim("Power", Module.parameter(6), "MW"))& "(MW)"
  .PrintReport("Steam turbine output power" = " &
NiceFloat(ConvertFromProSim("Power", Module.parameter(7), "MW"))& "(MW)"
  .PrintReport("-----")
  .PrintReport("Total electrical power produced" = " &
NiceFloat(ConvertFromProSim("Power", Module.parameter(1), "MW"))& "(MW)"
  .PrintReport("")
  .PrintReport("Auxiliary power" = " &
NiceFloat(ConvertFromProSim("Power", Module.parameter(3), "MW"))& "(MW)"
  .PrintReport("")
  .PrintReport("Fuel power" = " &
NiceFloat(ConvertFromProSim("Power", Module.parameter(8), "MW"))& "(MW)"
  .PrintReport("")
  .PrintReport("Heating supply" = " &
NiceFloat(ConvertFromProSim("Power", Module.parameter(2), "MW"))& "(MW)"
  .PrintReport("")
  .PrintReport("")
  .PrintReport("LHV net efficiency" = " &
NiceFloat(FormatNumber(Module.parameter(10),2)) & "(%)")

end with
End Sub

```

2.2. Performance de la pile à combustible à oxyde solide

Résultats de simulation	Notation	Valeur
Élévation de la température à la cathode (°C)	A	275.42
Courant électrique généré (A)	B	2.89.10 ⁸
Puissance électrique générée (MW)	C	188.80
Différence de potentiel aux bornes d'une cellule élémentaire constituant la pile – en fonctionnement réversible (V)	D	1.02
Différence de potentiel aux bornes d'une cellule élémentaire constituant la pile – en fonctionnement réel (V)	E	0.65
PCI du combustible consommé* (kWh/Nm ³)	F	2.79
Quantité de chaleur générée par la combustion du combustible consommé ($\dot{m}_{CO} LHV_{CO} + \dot{m}_{H_2} LHV_{H_2}$) (MW)	G	377.6
Efficacité de la pile η (%)	H	50.0

* Seuls l'hydrogène et le monoxyde de carbone sont pris en compte pour le calcul du PCI du combustible

Remarque : l'efficacité de la pile est calculée avec la formule suivante :

$$\eta = \frac{P_{elec}}{\dot{m}_{CO} LHV_{CO} + \dot{m}_{H_2} LHV_{H_2}} * 100$$

Avec :

η : Rendement énergétique de la pile (%)

\dot{m}_{CO} : Débit de monoxyde de carbone CO consommé (mol/s)

\dot{m}_{H_2} : Débit d'hydrogène H₂ consommé (mol/s)

LHV_{CO} : Pouvoir Calorifique Inférieur du monoxyde de carbone CO consommé (J/mol)

LHV_{H_2} : Pouvoir Calorifique Inférieur de l'hydrogène H₂ consommé (J/mol)

P_{elec} : Puissance électrique (W)

2.3. Performance de la turbine à gaz

Résultats de simulation	Notation	Valeur
Puissance utilisée par le compresseur (MW)	I	185.95
Puissance du module turbine (MW)	J	329.94
Puissance nette générée par la turbine à gaz (MW)	K (=J-I)	143.98
PCI du combustible consommé (kWh/Nm ³)	L	1.80
Efficacité de la turbine à gaz η (%)	M	37.8

Remarque : l'efficacité de la turbine à gaz est calculée avec la formule suivante :

$$\eta = \frac{P_{elec}}{\dot{m} LHV} * 100$$

Avec :

η : Rendement énergétique de la turbine à gaz (%)

\dot{m} : Débit de combustible (mol/s)

LHV : Pouvoir Calorifique Inférieur du combustible consommé (J/mol)

P_{elec} : Puissance électrique (W)

2.4. Performance du cycle vapeur

Résultats de simulation	Notation	Valeur
Puissance générée par la turbine (MW)	N	66.16
Puissance consommée par la pompe (MW)	O	0.31
Puissance nette générée par le cycle vapeur (MW)	P (=N-O)	65.85
Chaleur consommée par l'évaporateur (MW)	Q	279.5
Coefficient de performance du cycle (%)	R (=P/Q)	23.6

Remarque : l'efficacité du module est calculée avec la formule suivante :

$$COP = \frac{P_{elec\ net}}{E_c} * 100$$

Avec :

COP : Coefficient de performance du cycle (%)

$P_{elec\ net}$: Puissance électrique (W)

E_c : Quantité de chaleur consommée par l'évaporateur (W)

2.5. Performance globale de l'installation

Résultats de simulation	Notation	Valeur
Puissance générée par la pile SOFC (MW)	S	188.80
Puissance générée par la turbine à gaz (MW)	T	143.98
Puissance générée par la turbine du cycle vapeur (MW)	U	66.16
Puissance électrique produite (MW)	V (=S+T+U)	398.94
Chaleur échangée (MW)	W	22.71
Puissance utilisée par le compresseur « Fuel compressor » et les pompes (MW)	X	12.67
Puissance du combustible (MW)	Y	668.75
Efficacité du procédé η (%)	Z	57.76

Remarque : l'efficacité du module est calculée avec la formule suivante :

$$\eta = \frac{P_{elec} - P_{aux}}{\dot{m} LHV} * 100$$

Avec :

η : Rendement énergétique du procédé (%)

P_{elec} : Puissance électrique totale générée (W)

\dot{m} : Débit de combustible (mol/s)

LHV : Pouvoir Calorifique Inférieur du combustible consommé (J/mol)

P_{aux} : Puissance électrique consommée par le compresseur et les pompes (W)

3. BIBLIOGRAPHIE

- [KOB11] Y. Kobayashi, Y. Ando, T. Kabata, M. Nishiura, K. Tomida, N. Matake, *Extremely High-efficiency Thermal Power System-Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) Triple Combined-cycle System*, Mitsubishi Heavy Industries Technical Review, Vol.48, No. 3 (2011).
- [WIL21] Wilding, W. V.; Knotts, T. A., Giles, N. F., Rowley, R. L. DIPPR Data Compilation of Pure Chemical Properties; Design Institute for Physical Properties, AIChE: New York, NY (2021).