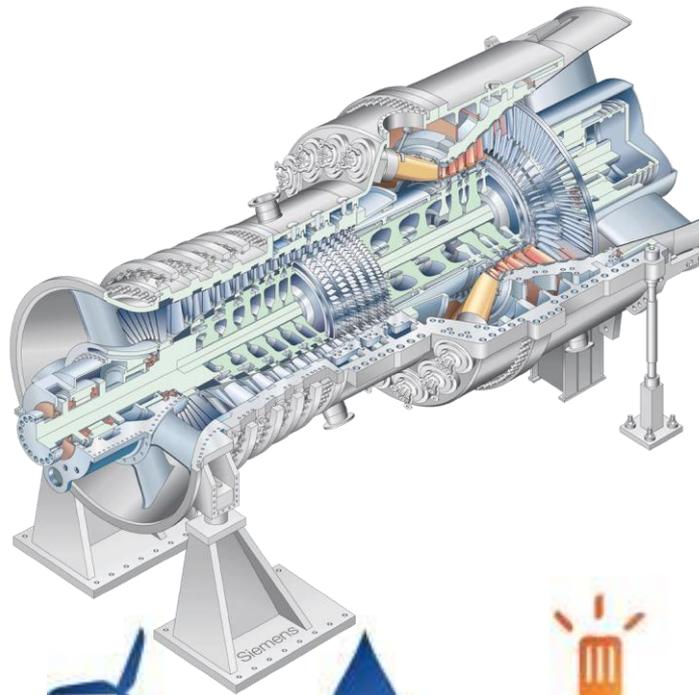


Calcul de procédés, CFD et Chimie des polluants

Application aux Turbines à Combustion et à l'IGCC (Integrated Gasification Combined Cycle)



Mohamed KANNICHE
EDF R&D, Chatou

Journée CFD de l'Univ. de Lorraine
ENSIC, Nancy
25 novembre 2014

EDF R&D

mohamed.kanniche@edf.fr



CO₂



Objectifs

- ▶ **NO_x & CO émis par les turbines à combustion (TAC).**
 - **NO_x : NO, NO₂ (problèmes de SMOG sur la santé, pluies acides)**
- ▶ **Outil précis (~ppm) et rapide (pour l'exploitant).**
- ▶ **Sensibilité aux conditions ambiantes :**
 - **Pression, température, humidité de l'air**
- ▶ **Sensibilité à la composition du gaz**
- ▶ **Prise en compte de la complexité due :**
 - **à la géométrie des brûleurs**
 - **à la turbulence**
 - **aux différentes voies de formation des NO_x**



Différentes voies de formation des NOx

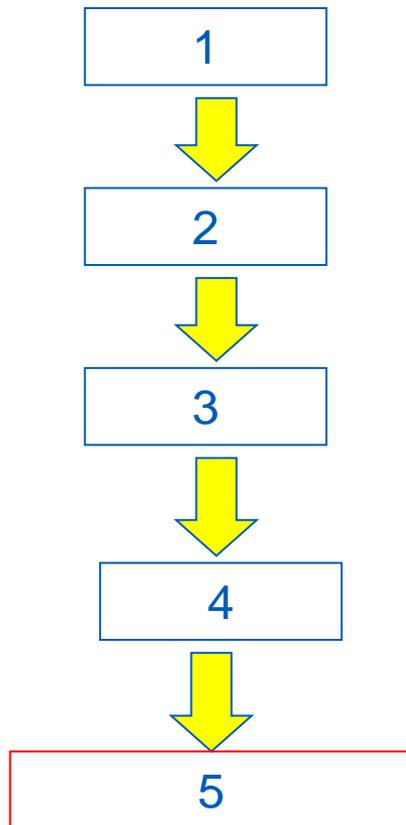
Voies prédominantes aux hautes températures (>1500 °C):

- NO_x thermique (Zeldovich) majoritaire
 - $O+N_2=N+NO$
 - $N+O_2=O+NO$
 - $N+OH=H+NO$
- Prompt (précoce) NO_x
 - $CH+N_2=HCN+N$
 - $N+O_2=NO+O$
 - $HCN+OH=CN+H_2O$

Autres voies non négligeables à basse température

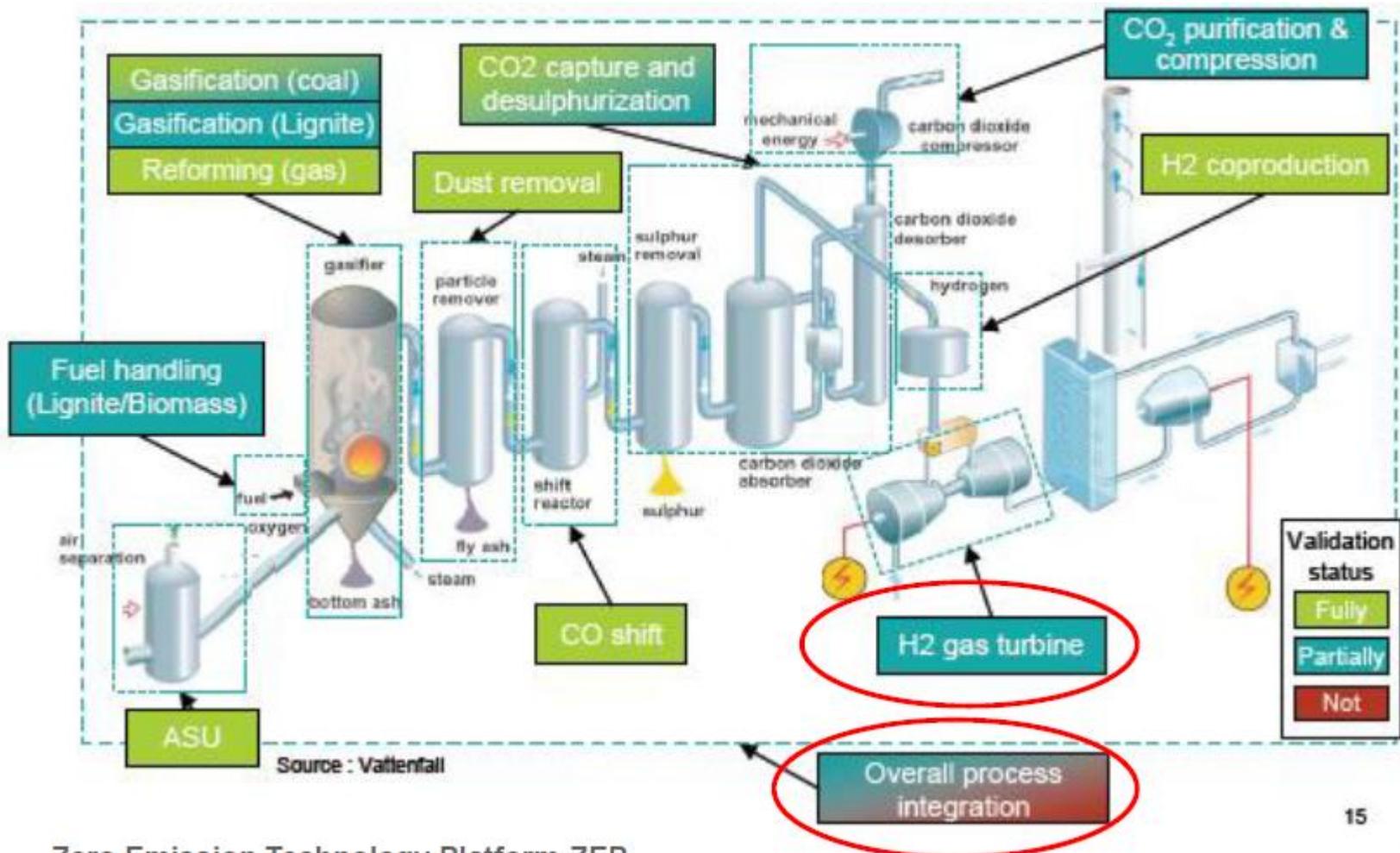
- Via N₂O
 - $N_2+O=N_2O$
 - $N_2O+O=NO+NO$
 - $N_2O+H=NH+NO$
- Via N₂H₃
 - $NNH \rightarrow N_2H_3 \rightarrow NH_3$
 - $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow NH \rightarrow N \rightarrow NO$
- Via NNH
 - $N_2+H=NNH$
 - $NNH+O=NO+NH$

Approche : Procédé + CFD + Chimie



- Simulation de procédés: Conditions aux limites pour la combustion!
- Modélisation CFD de la combustion
- Analyse de l'écoulement et construction du réseau de réacteur
- Chimie complète sur le réseau de réacteurs
- Résultats : Température, NOx & CO

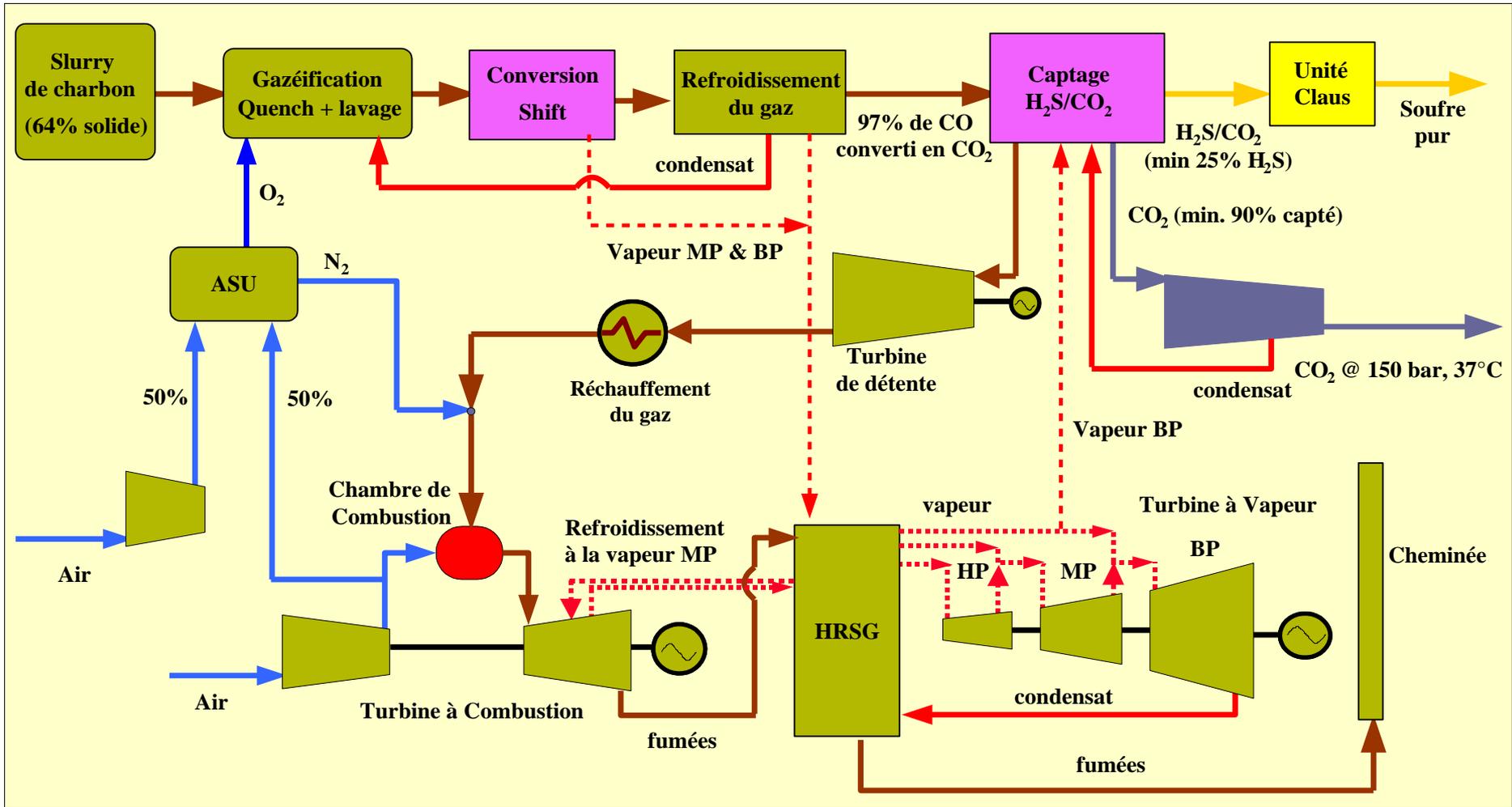
Applications aux TAC et aux IGCC avec captage de CO₂



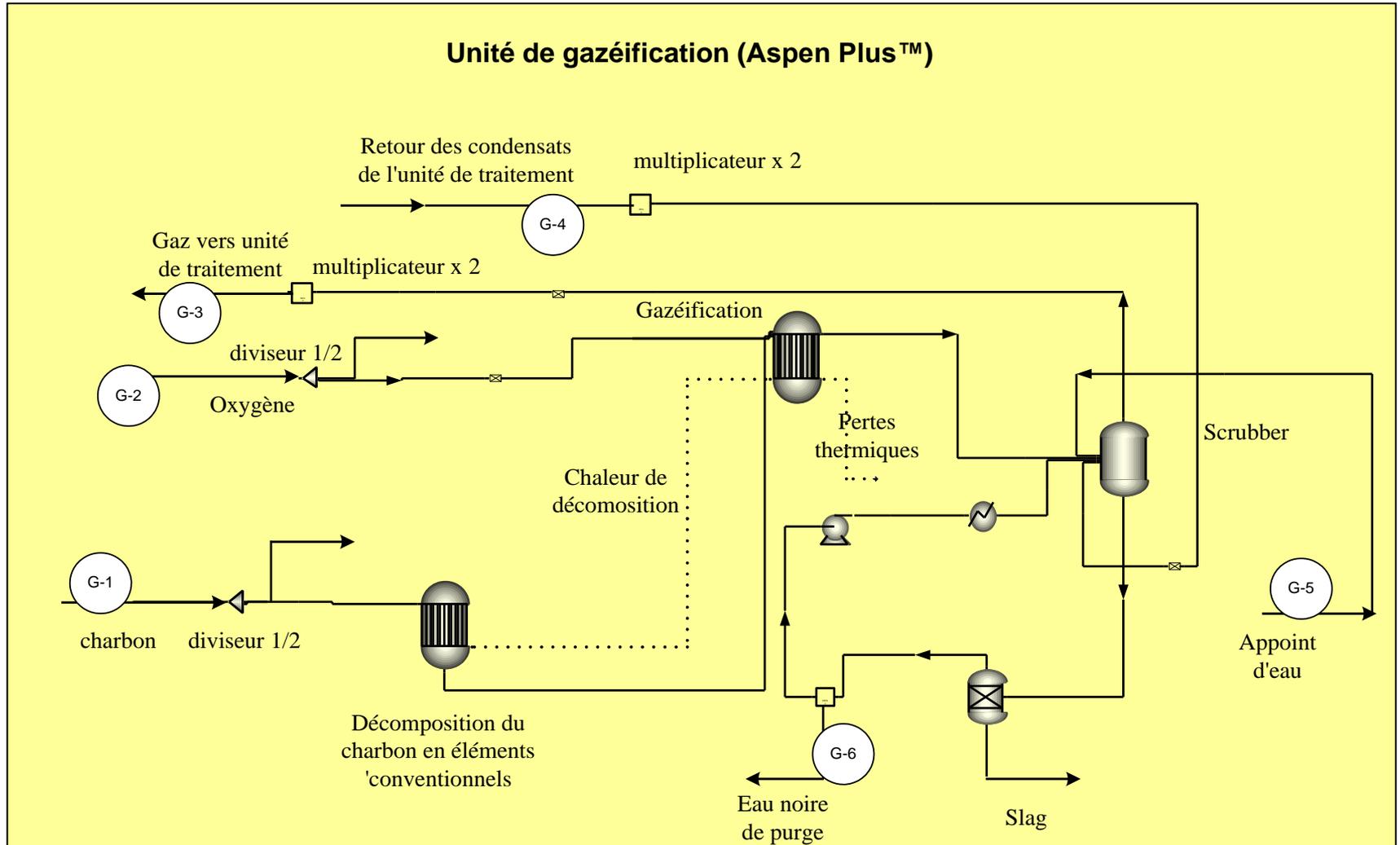
Zero Emission Technology Platform-ZEP
Technology Matrix-October 2008

Différents niveaux de maturité : procédés de pétrochimie (conversion shift, captage CO₂ & H₂S, ASU, traitement gaz) sont matures (~TRL 9)!

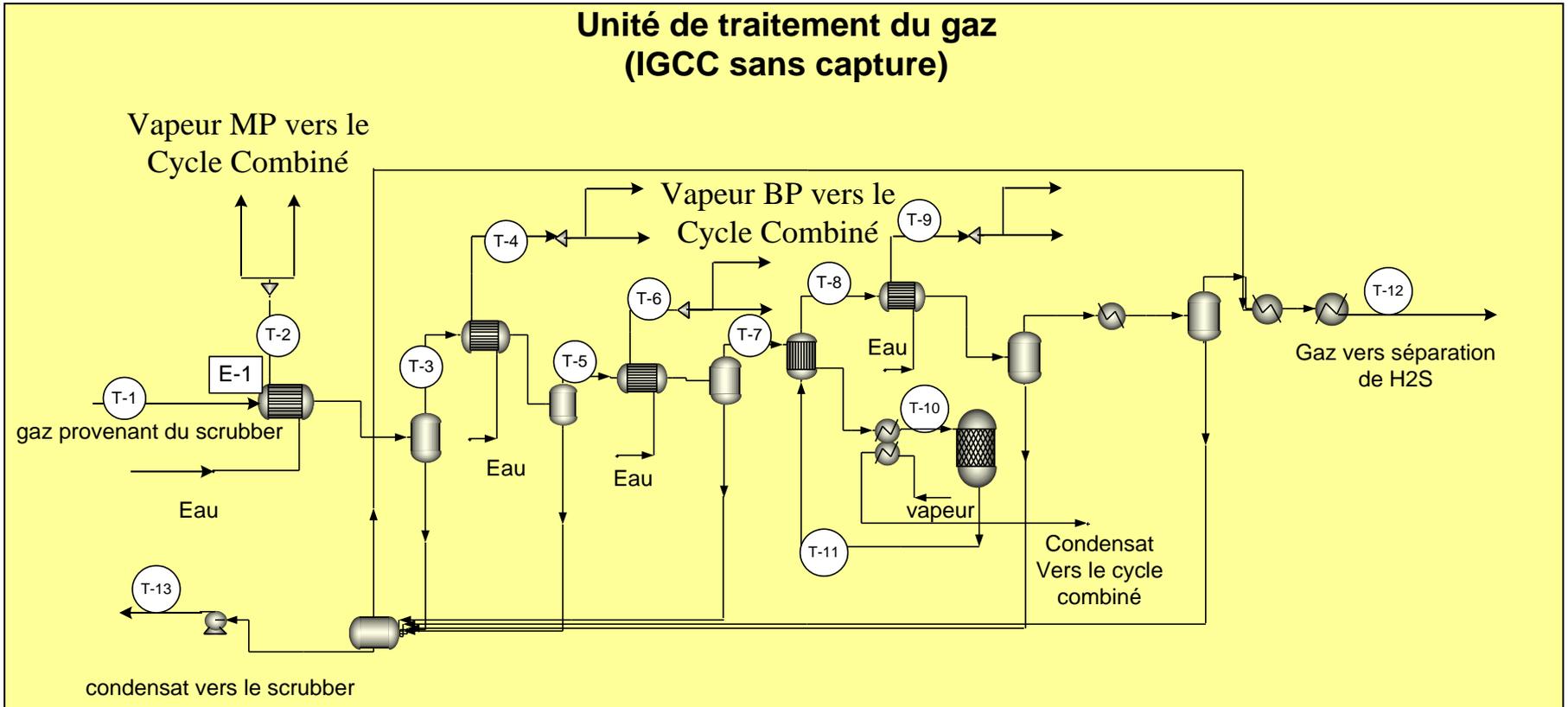
Modèle de l'IGCC avec Aspen Plus®



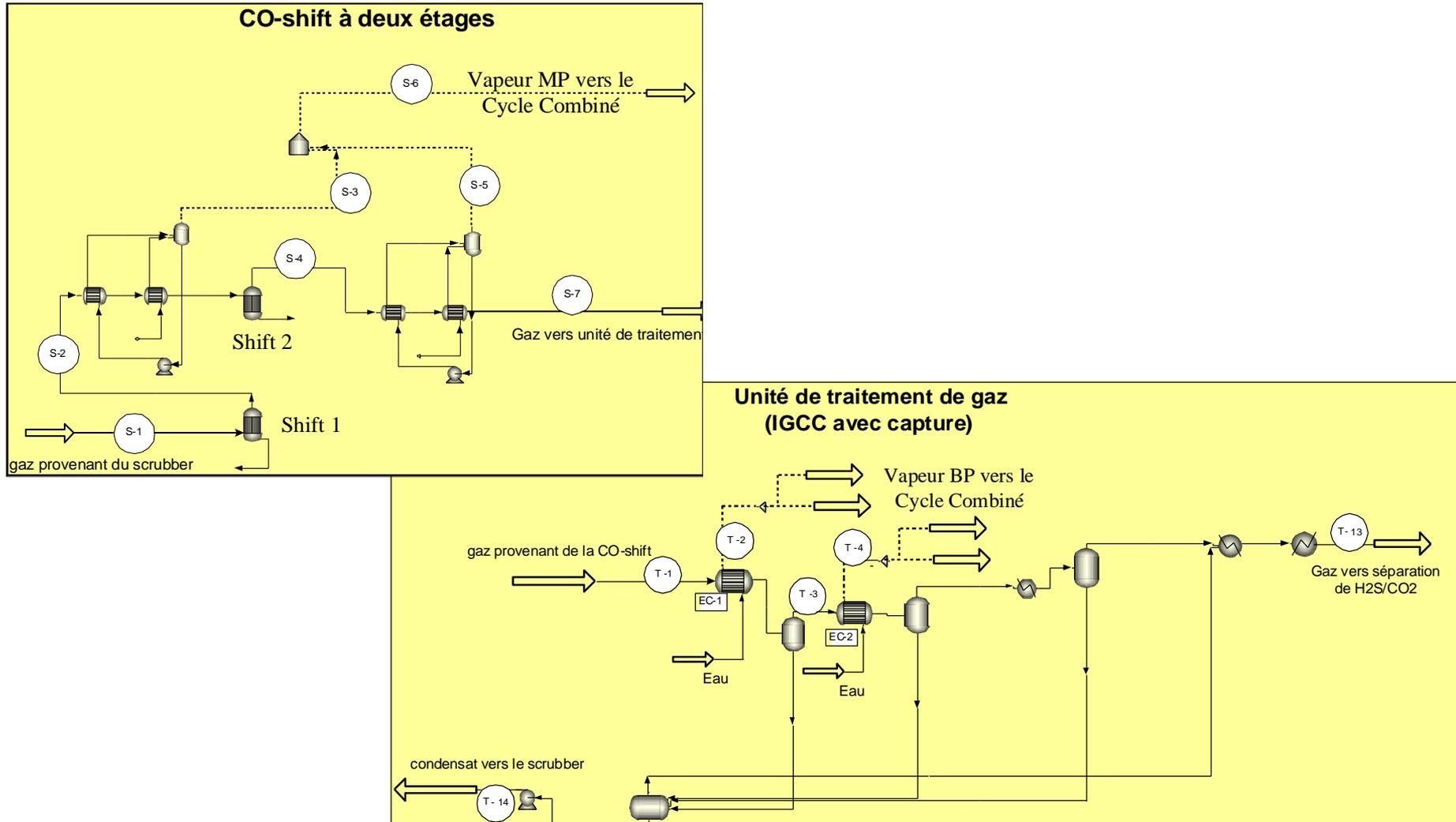
Modèle de l'IGCC avec Aspen Plus® (suite)



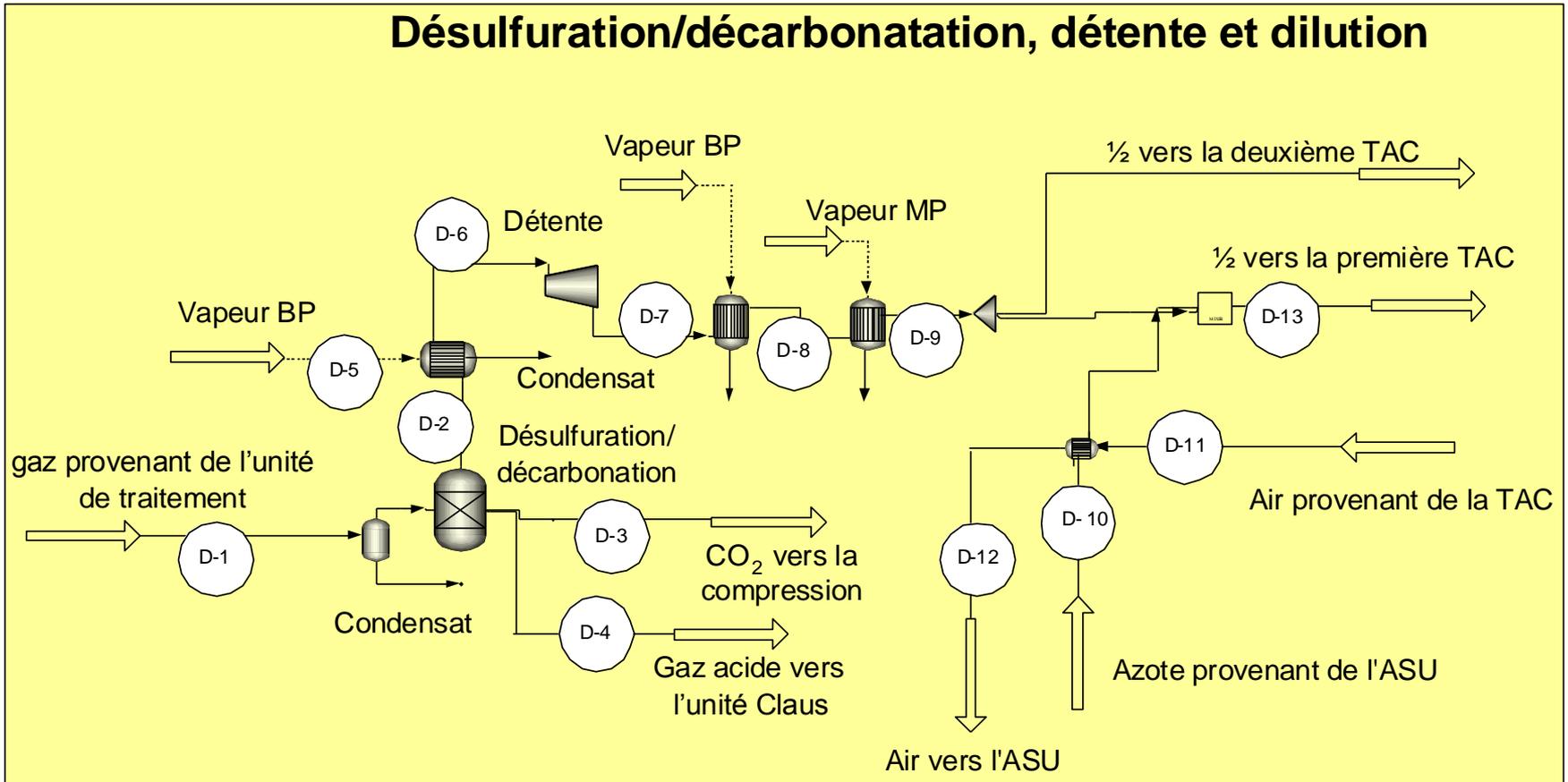
Modèle de l'IGCC avec Aspen Plus® (suite)



Modèle de l'IGCC avec Aspen Plus® (suite)



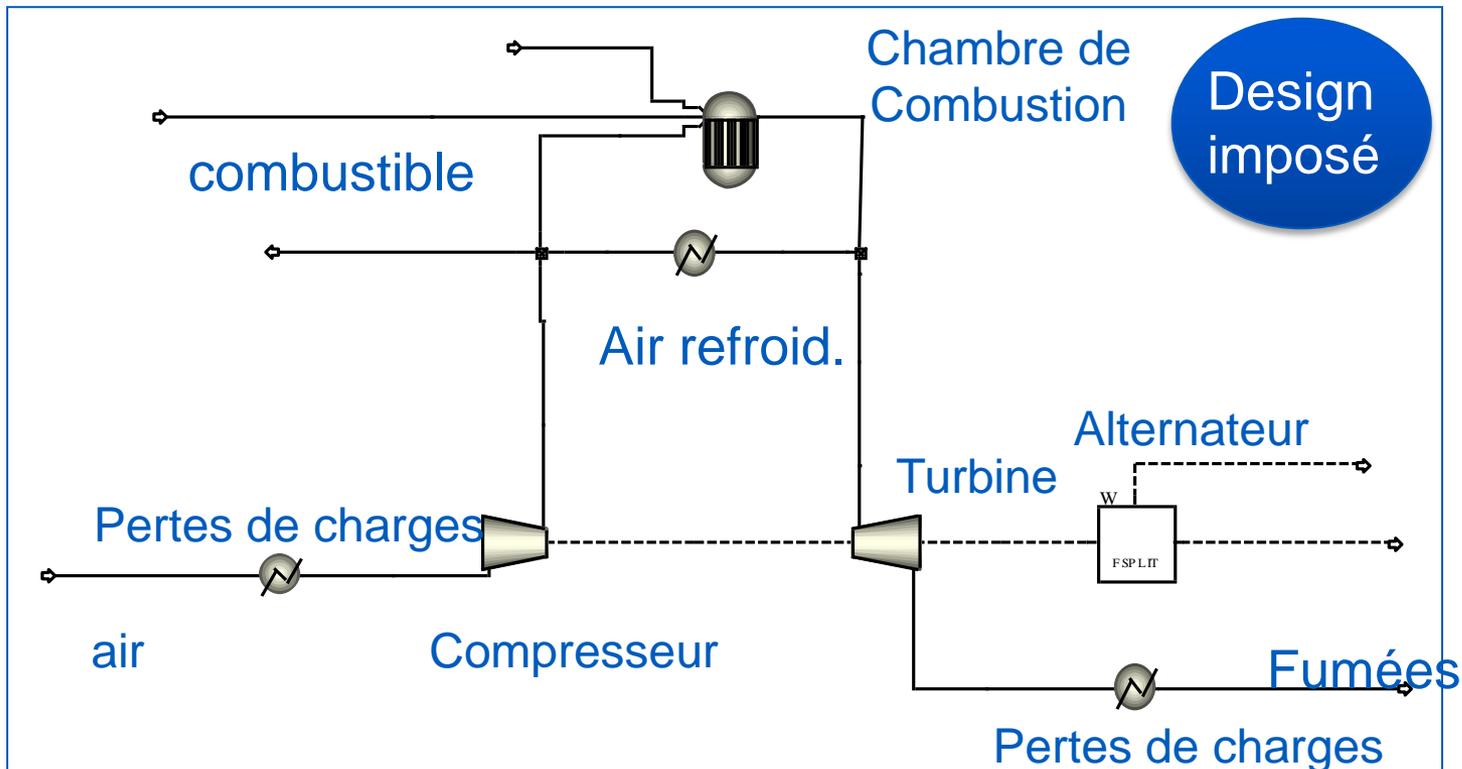
Modèle de l'IGCC avec Aspen Plus® (suite)



Modèle de la TAC avec Aspen Plus®

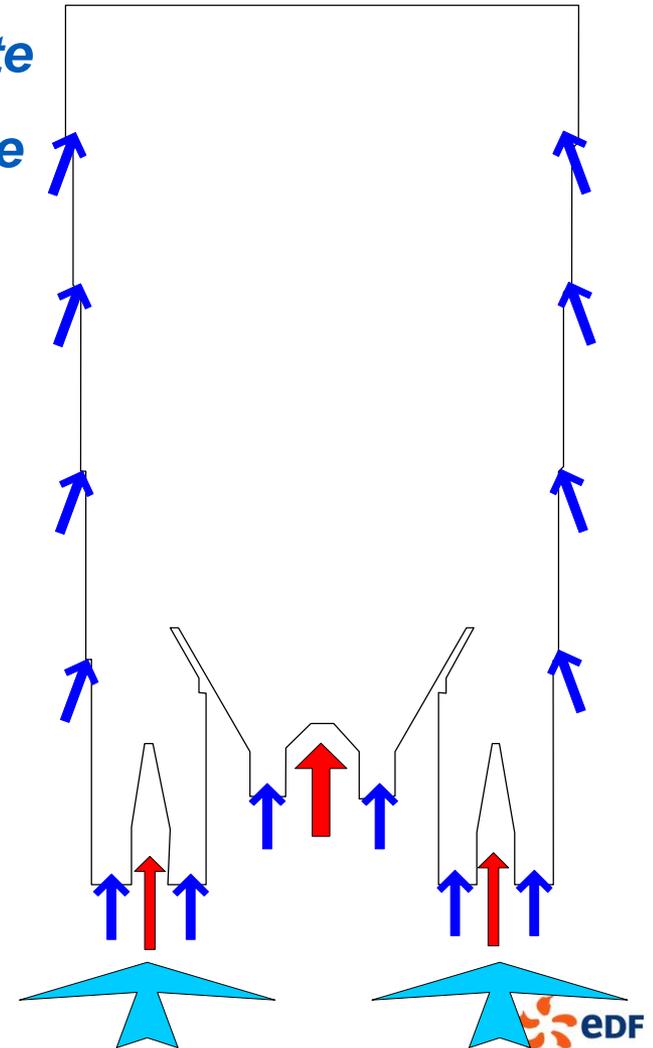
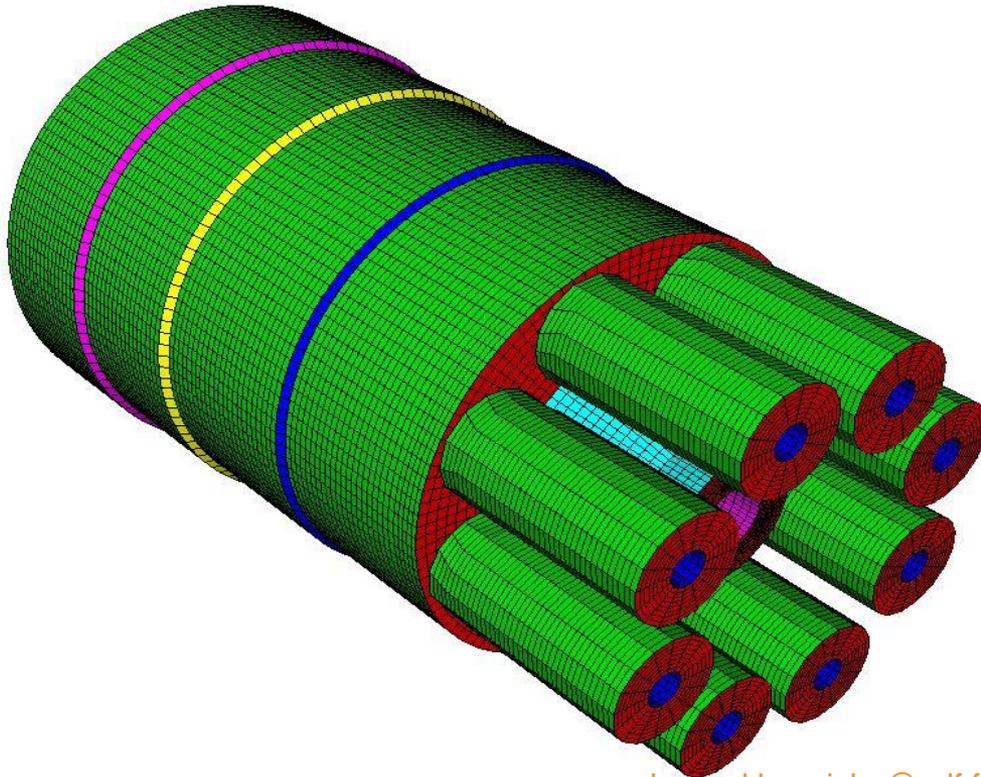
Conditions aux limites de la chambre combustion :

- P&T en sortie compresseur calculés avec Aspen Plus® (design imposé par un débit réduit constant aux conditions nominales!)
- expressions polynomiales des rendements compresseur et turbine en fonction des rendements respectifs aux conditions nominales.



CFD combustion avec code_Saturne (open Source EDF)

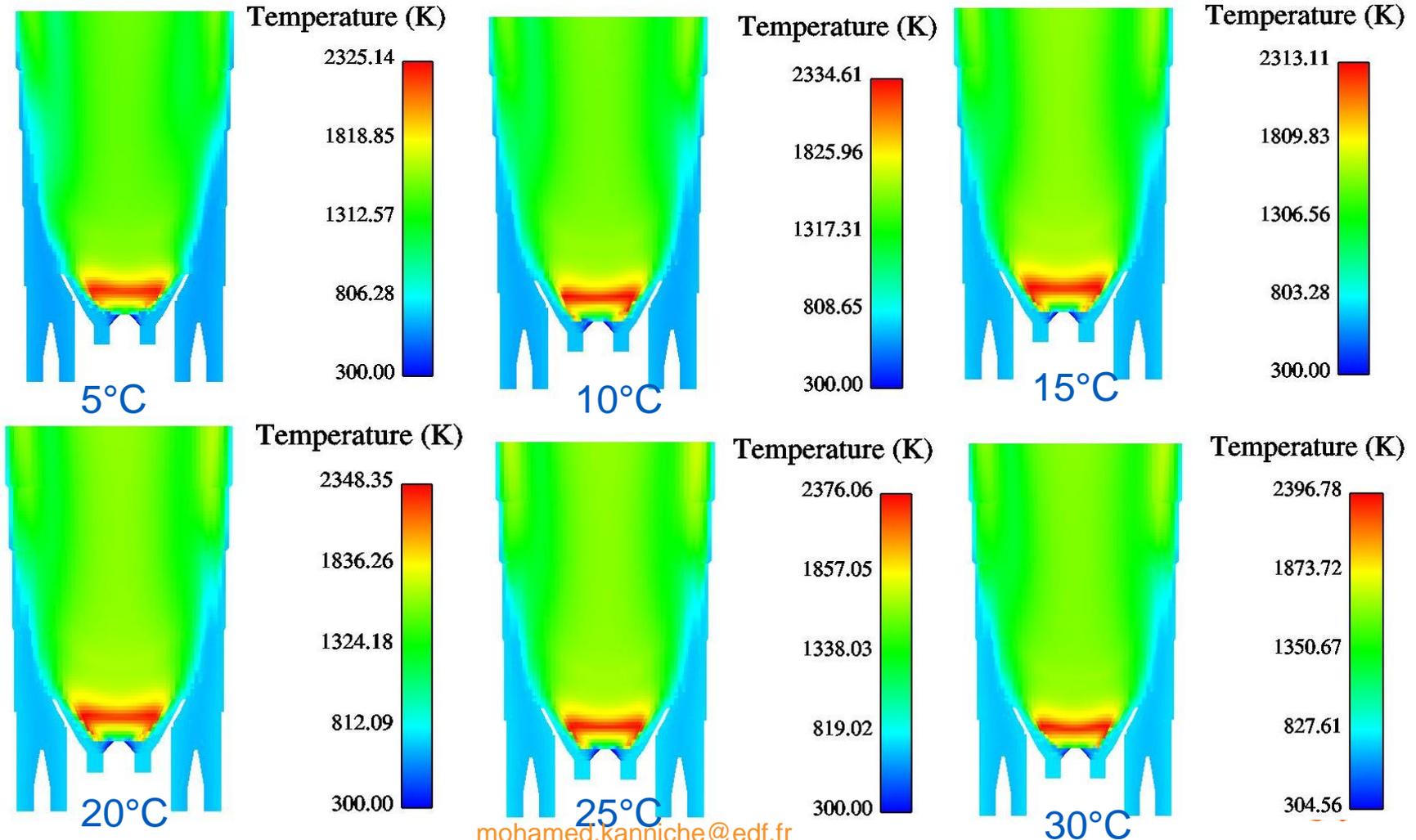
- *Huit brûleurs de prémélange faiblement swirlés autour d'un brûleur central (flamme pilote) non-prémélangé fort swirlé*
- *Répartition connue du gaz entre prém./pilote*
- *Répartition inconnue d'air entre prém./pilote (pertes de charge sections de passage)*



CFD combustion avec code_Saturne (suite)

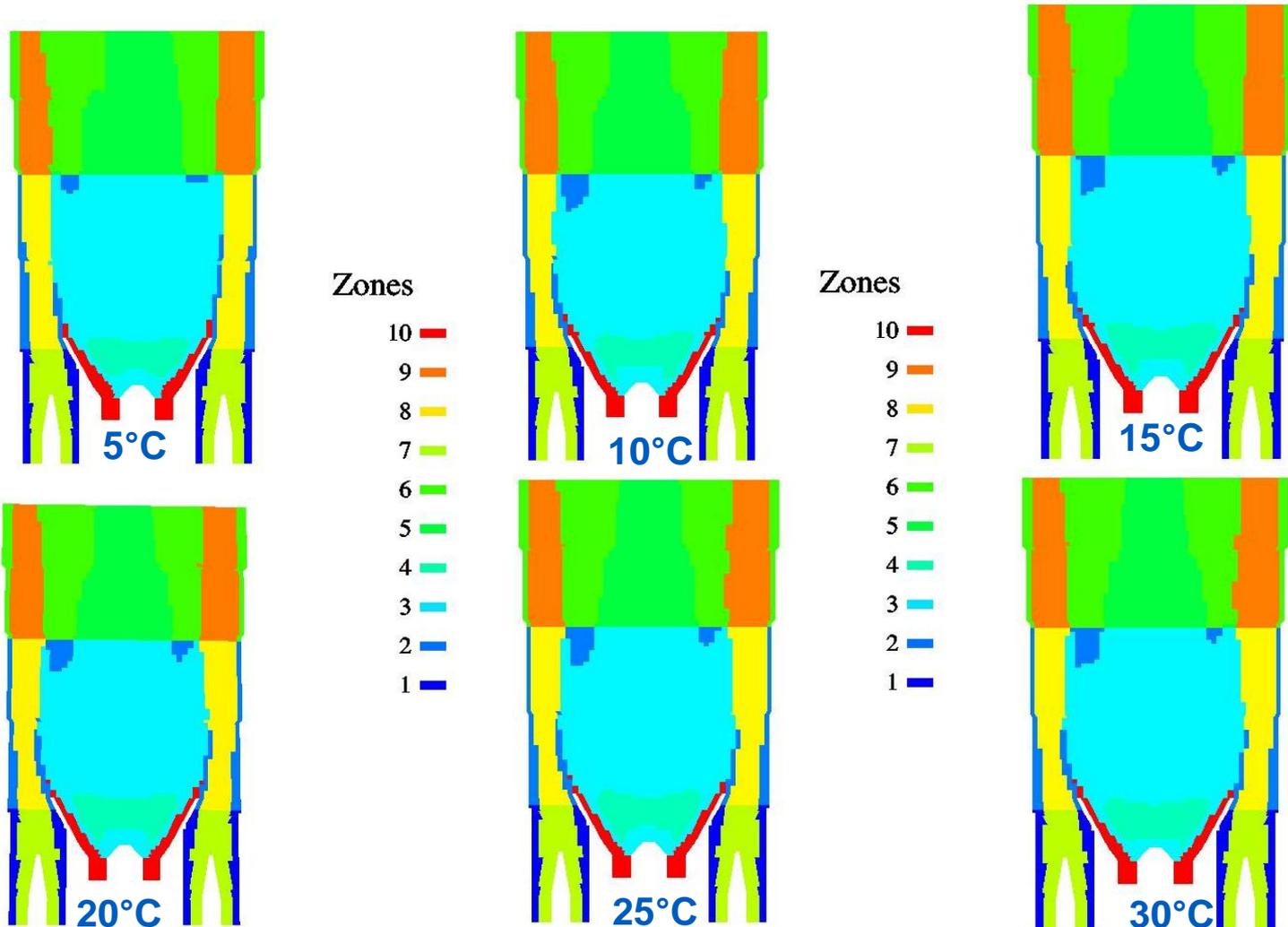
Température de combustion vs température air ambiant (air sec) :

Champs de température similaires sauf augmentation légères!



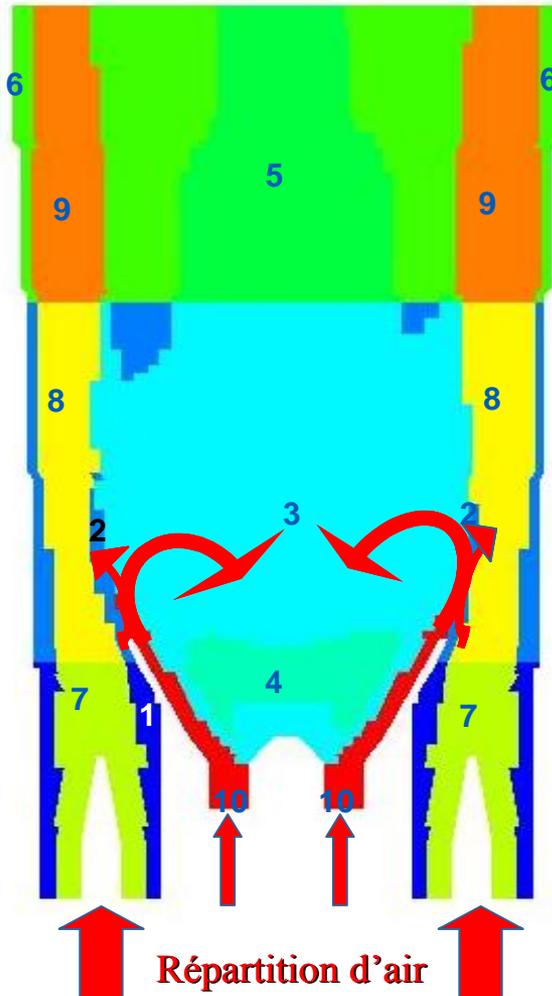
CFD combustion avec code_Saturne (suite)

*Zones (volume) vs température air ambiant (air sec) :
les volumes des zones sont très peu affectés!*



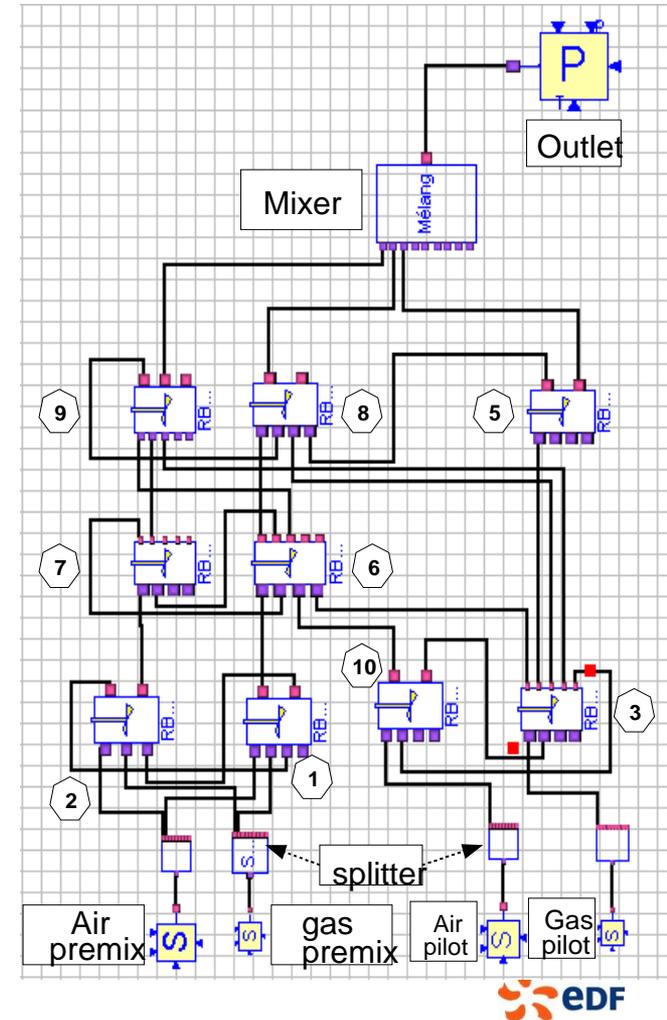
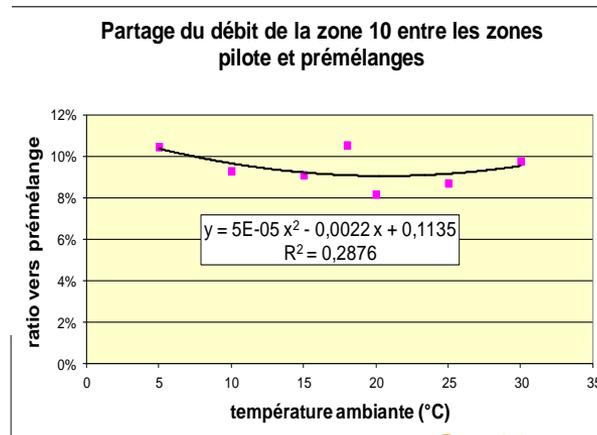
Construction du réseau de réacteurs

Regroupement en macro-cellule de cellules CFD de ~même richesse, ~même température et même zone géographique
+ prise en compte des âges des particules

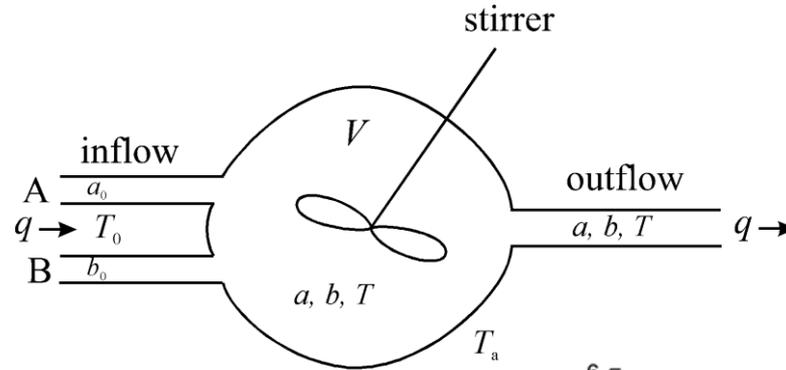


Effet du swirl
(stabilisateur de flamme):
une partie de l'air pilote
passe vers la zone de
prémélange (voir flèches)

D'où diminution
de la dilution du pilote
et donc augmentation NOx



Réacteur parfaitement agité (suite)

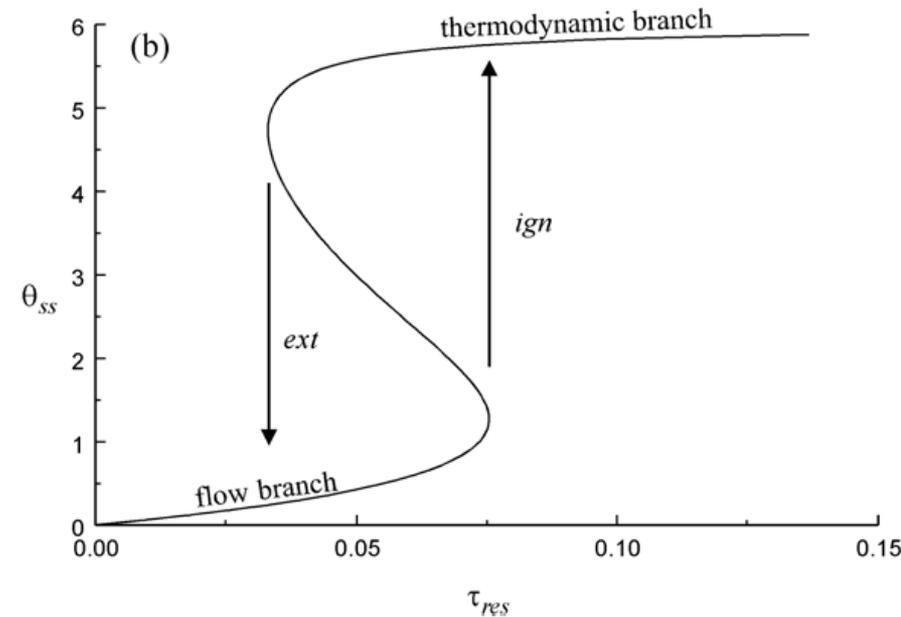


$$\frac{dY}{dt} = -\frac{1}{\tau}(Y - Y_{inlet}) + \frac{M}{\rho} \cdot \left(\sum_i^{\text{réactifs}} \alpha_i \cdot w_i - \sum_j^{\text{produits}} \alpha_j \cdot w_j \right)$$

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{\tau}(H - H_e)$$

$$\frac{H}{R \cdot T} = a_1 + \frac{a_2}{2} \cdot T + \frac{a_3}{3} \cdot T^2 + \frac{a_4}{4} \cdot T^3 + \frac{a_5}{5} \cdot T^4 + \frac{a_6}{T}$$

$$\frac{S}{R} = a_1 \cdot \ln T + a_2 \cdot T + \frac{a_3}{2} \cdot T^2 + \frac{a_4}{3} \cdot T^3 + \frac{a_5}{4} \cdot T^4 + a_7$$



Réacteur parfaitement agité (suite)

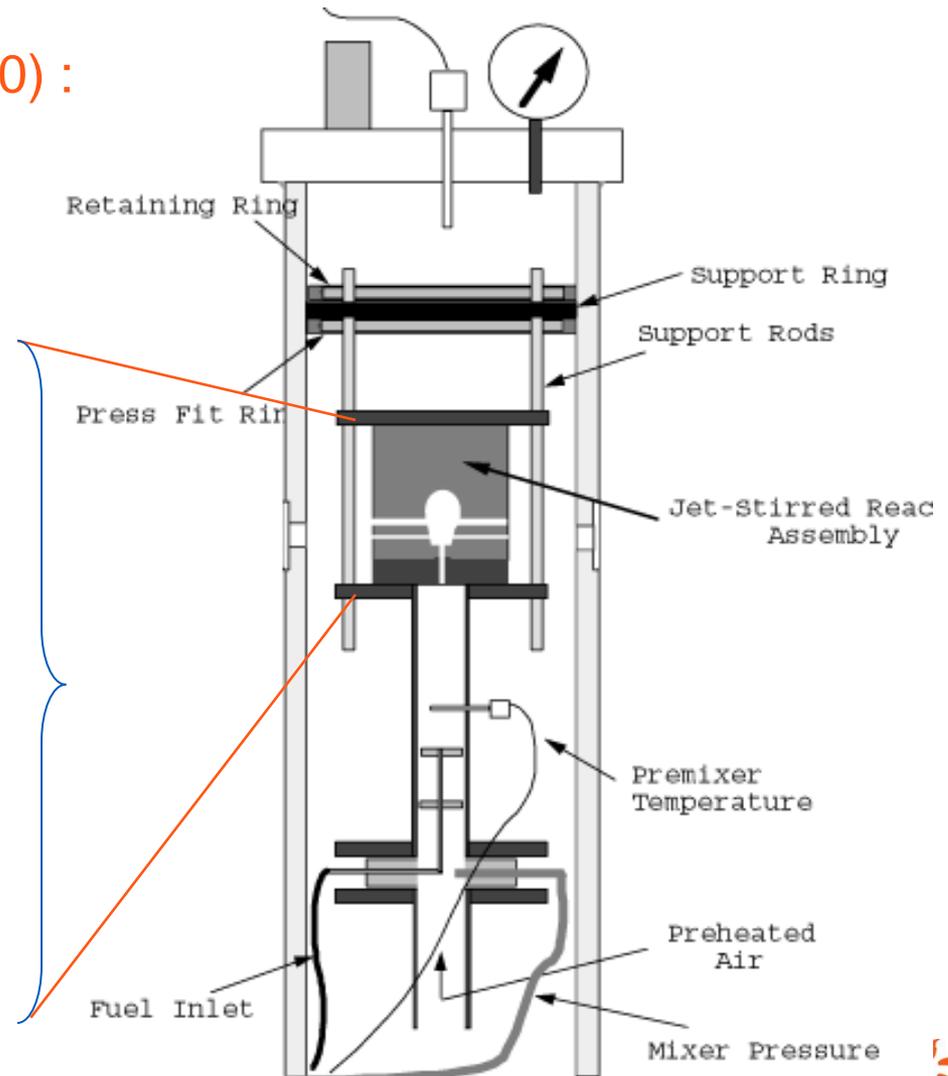
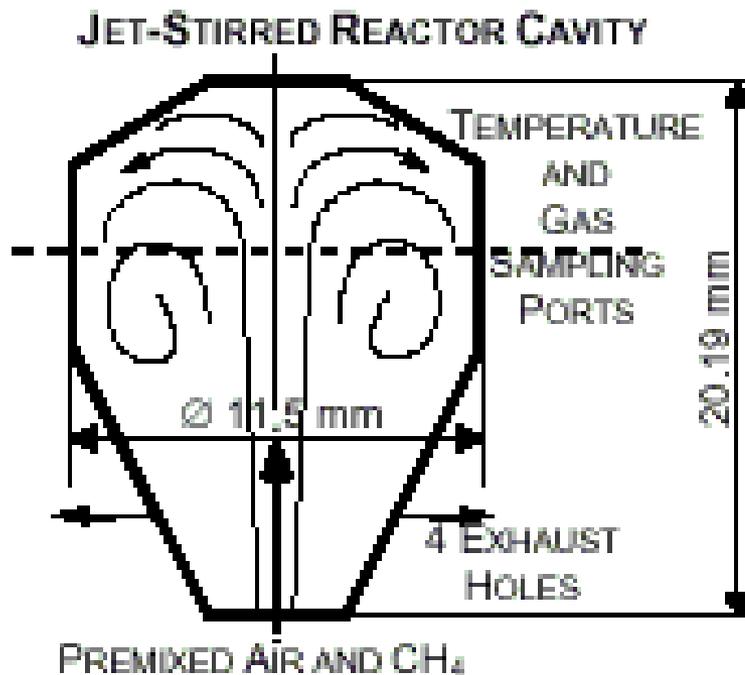
Schémas cinétiques de la combustion du gaz naturel

- GRI 3.0, schéma de GN de référence : 325 réactions ; 53 espèces
- LCSR - CNRS Orléans (thèse Lepage, 2000) : 333 réactions ; 56 espèces
- Données thermodynamiques : JANAF + NASA pour le calcul de la température via l'enthalpie résolue via l'équation de conservation.

Réacteur parfaitement agité (suite)

Validation

- Expérience de Rutar et al (2000) :
 - Température = 1800 K
 - Temps de séjour : 0,5 à 4 ms
 - Pression : 3, 4,7 & 6,5 atm.



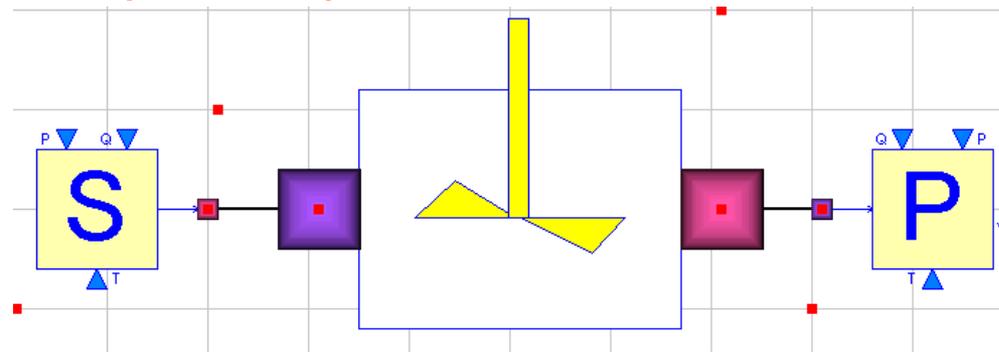
Réacteur parfaitement agité (suite)

Validation (suite)

➤ Expérience de Rutar et al (2000) :

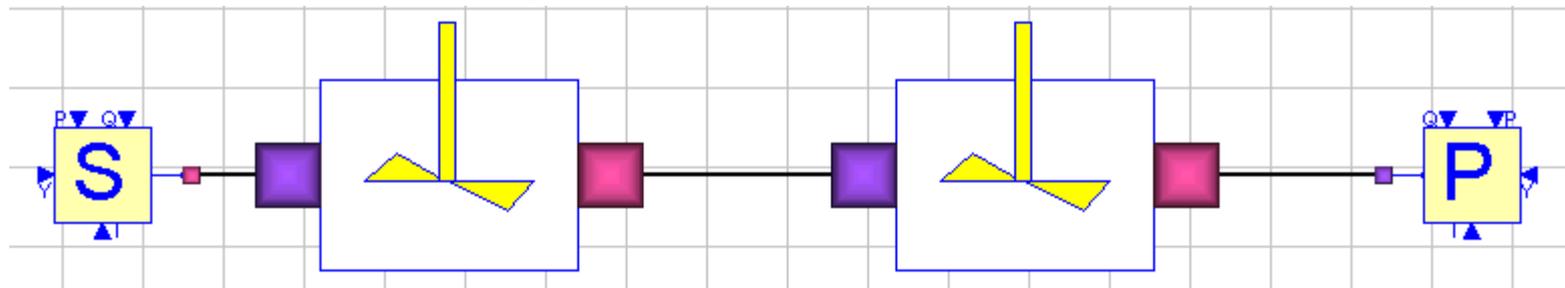
■ Temps de séjour : 0,5 - 2 ms

1 réacteur



■ Temps de séjour : 2 - 4 ms

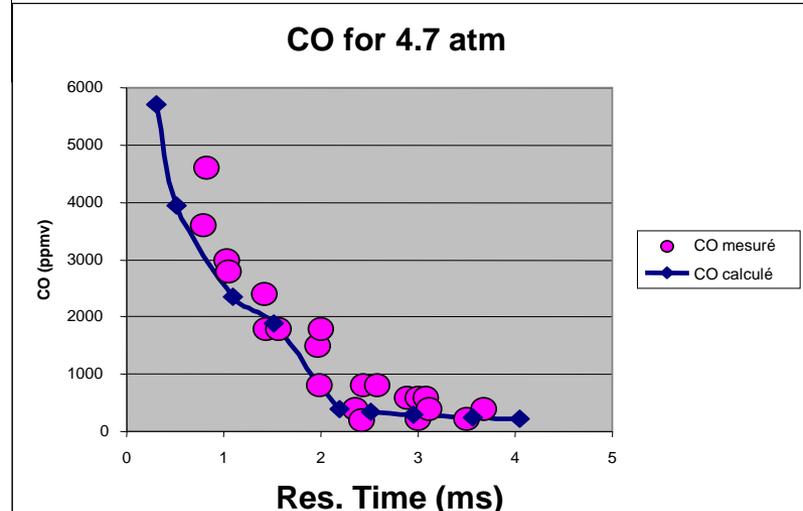
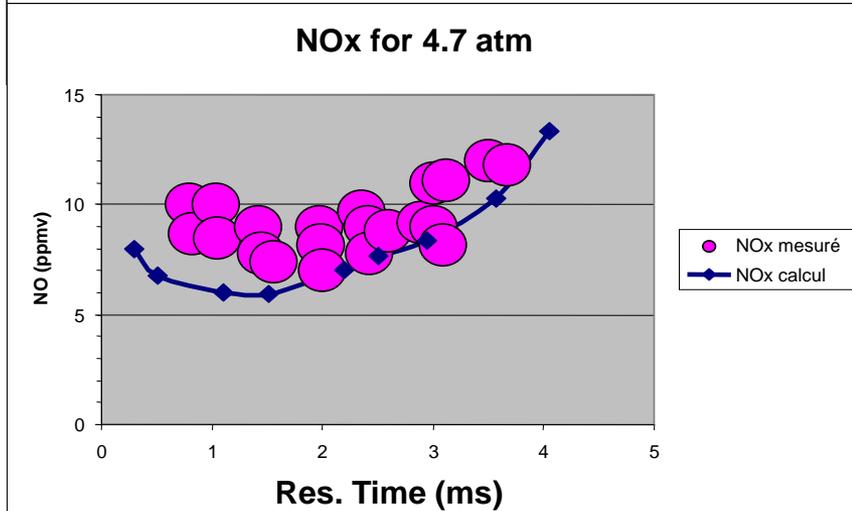
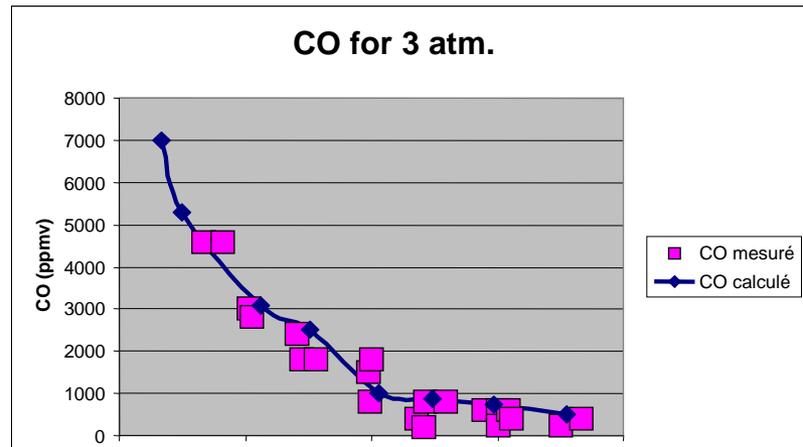
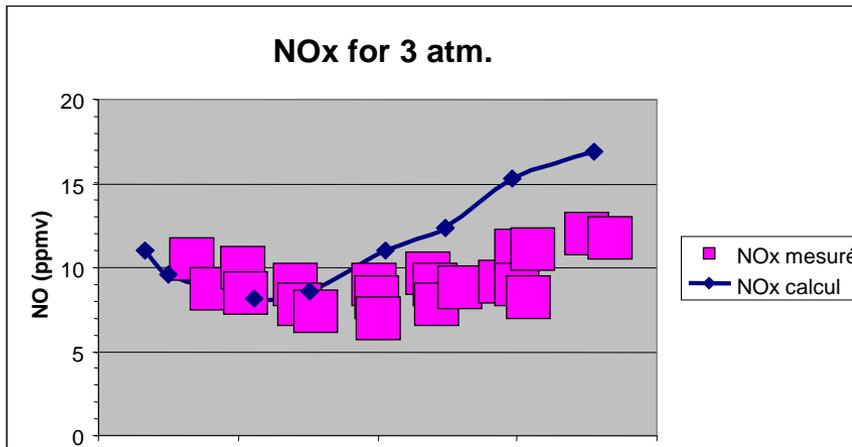
2 réacteurs



Réacteur parfaitement agité (suite)

Validation (suite)

➤ Expérience de Rutar et al (2000) :
NOx / temps de séjour (ms) & pression

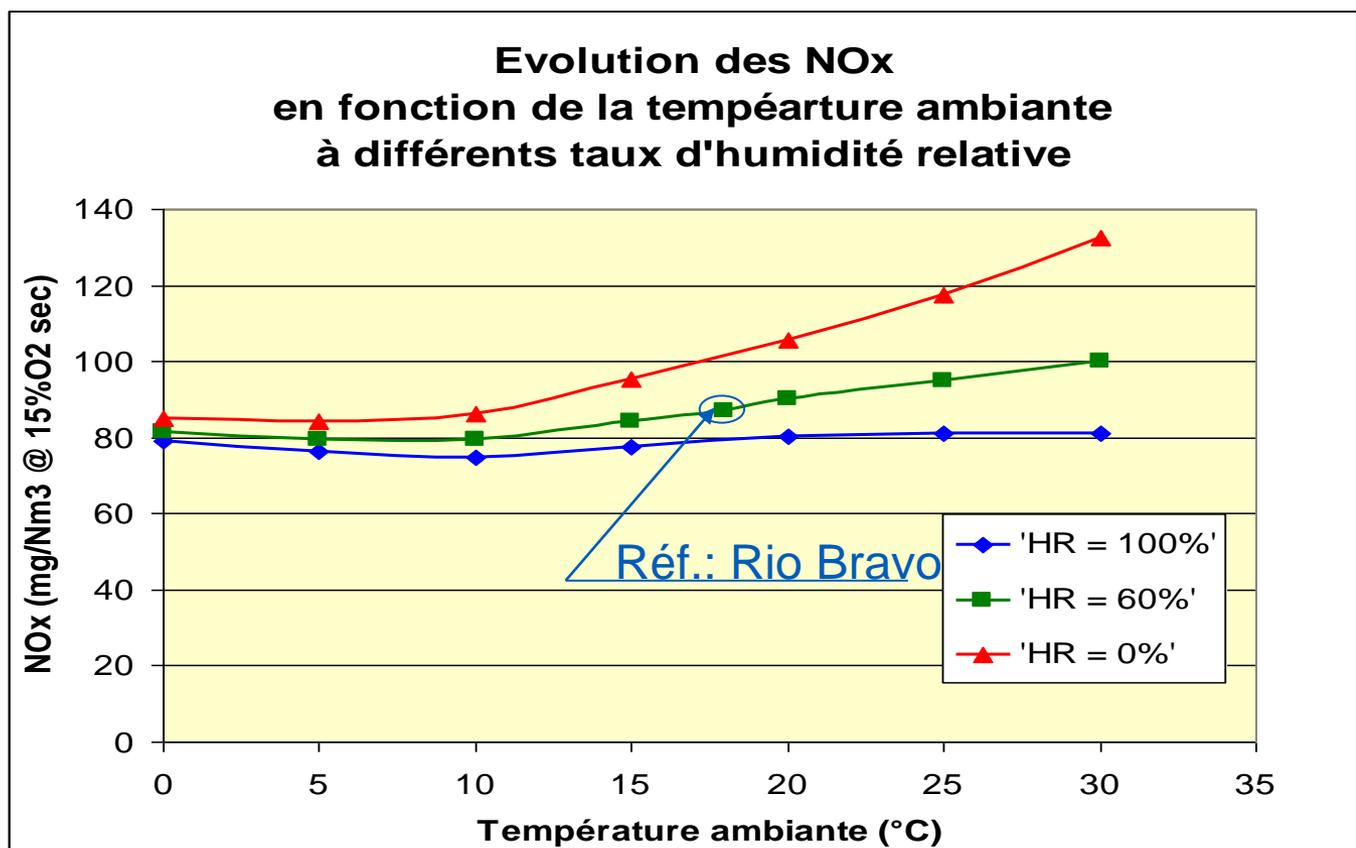


Calcul des NOx de TAC avec réseau de réacteurs

NOx (15%O₂ sec) / température air ambient et humidité relative

L'augmentation des NOx avec la température ambiante dépend de l'humidité relative de l'air ambient

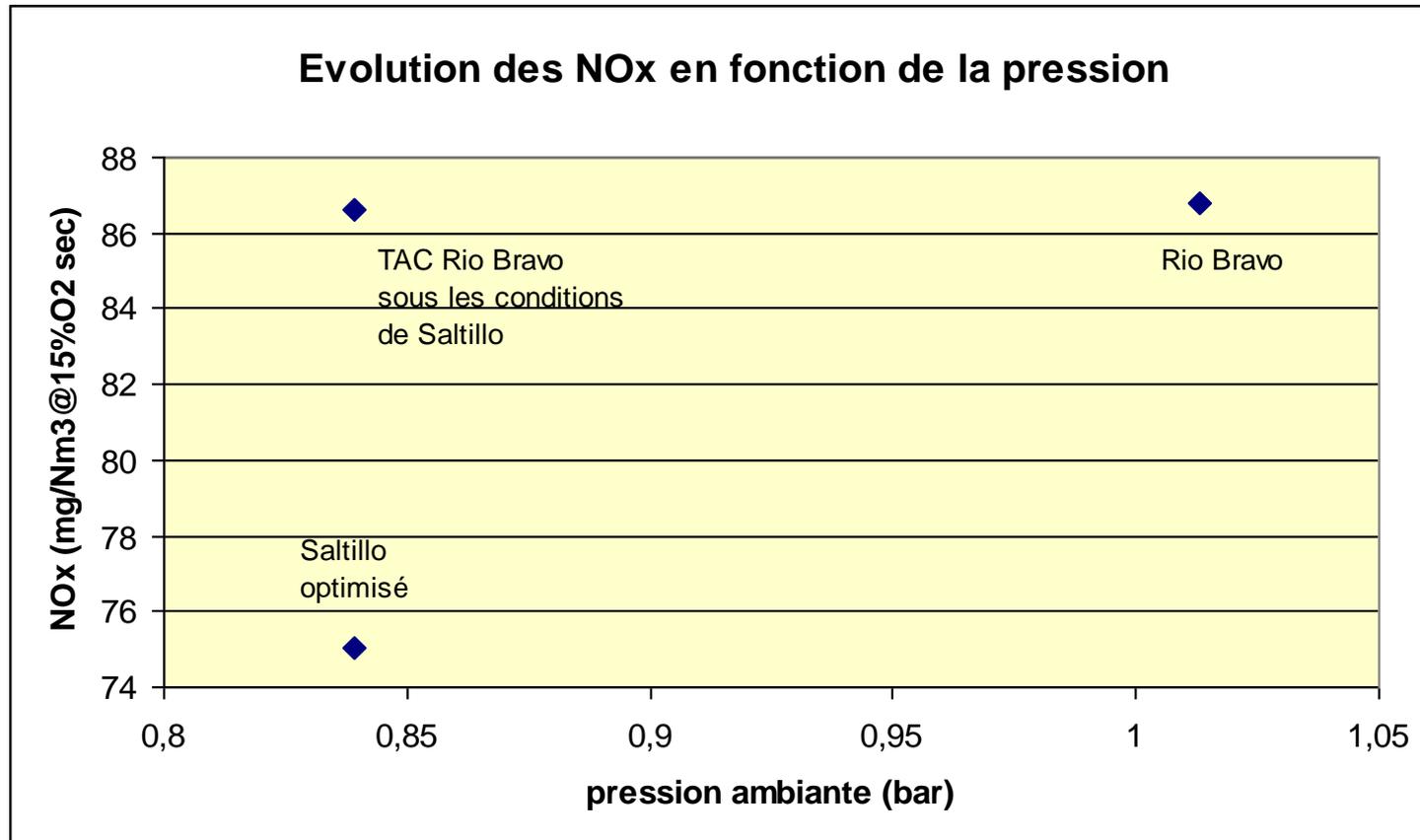
Pour avoir des faibles taux des NOx, un air chaud et saturé d'eau est plus favorable qu'un air sec et froid



Calcul des NOx de TAC avec réseau de réacteurs (suite)

NOx (15%O₂ sec) / altitude

Les NOx baissent en général (si la TAC est optimisée pour l'altitude!) quand la pression ambiante baisse.



Calcul des NOx de TAC avec réseau de réacteurs (suite)

NOx (15%O₂ sec) / composition du gaz naturel

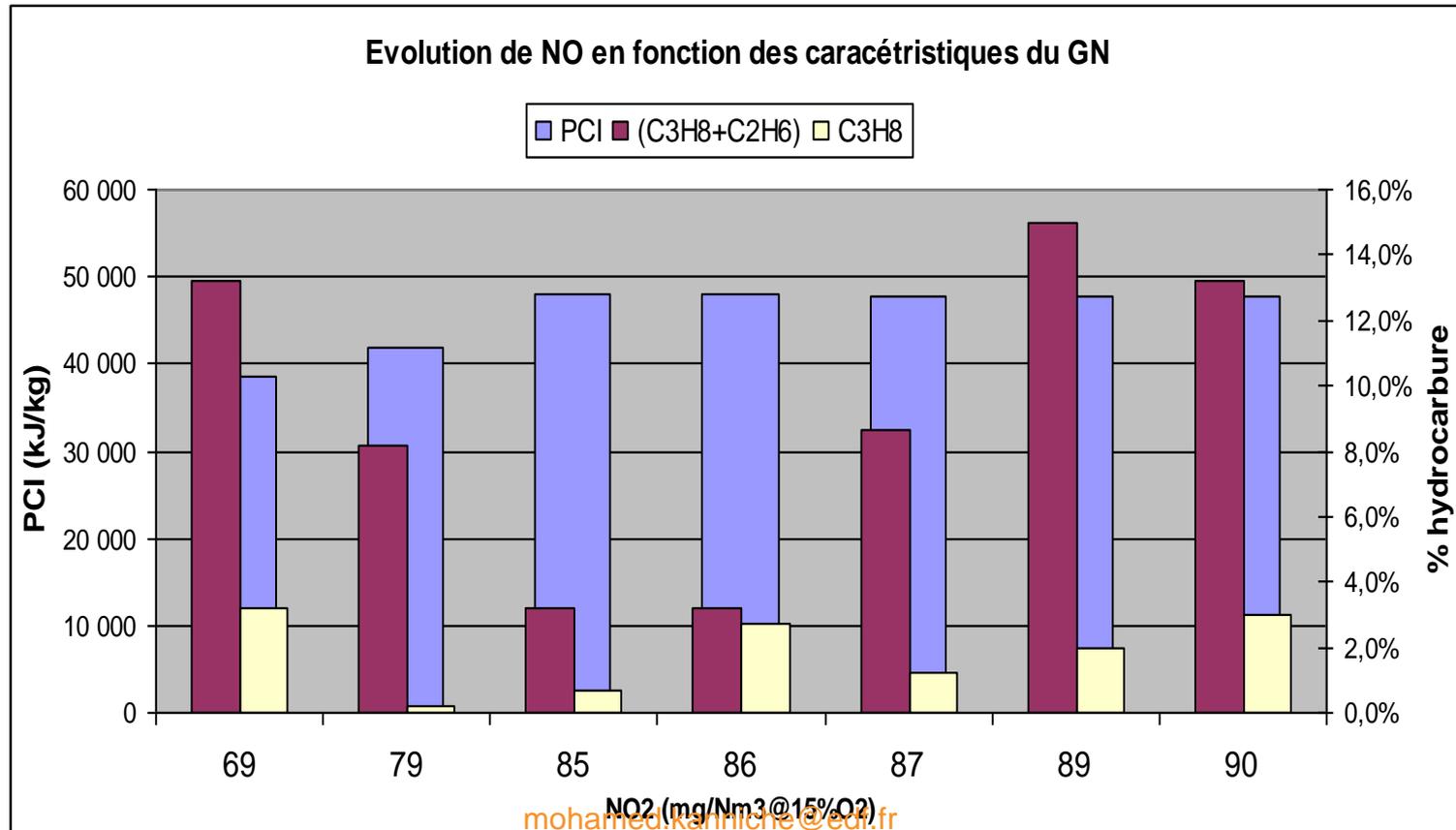
Gaz de référence avec Indice Wobbe (IW) de 60 897 kJ/kg
+ 4 gaz proches du gaz de référence à moins de 3% IW
+ 1 gaz à 15% IW
+ 1 gaz à 25% IW

%vol	Ref. Gaz	Gaz 1	Gaz 2	Gaz 3	Gaz 4	Gaz 5	Gaz 6
CH4	89,54%	85,00%	85,00%	95,00%	95,00%	84,00%	75,00%
C2H6	7,42%	13,00%	10,20%	2,50%	0,50%	8,00%	10,00%
C3H8	1,21%	0,20%	3,00%	0,70%	2,70%	0,20%	3,20%
N2	1,01%	1,00%	1,00%	1,00%	1,00%	3,00%	4,00%
CO2	0,82%	0,80%	0,80%	0,80%	0,80%	4,80%	7,80%
PCI gaz naturel (kJ/kg ; Aspen Plus)	47 795	47 741	47 659	47 983	47 915	41 885	38 575
Densité relative	0,62	0,63	0,65	0,59	0,60	0,66	0,73
Indice de Wobbe (kJ/kg)	60 897	60 000	59 262	62 631	62 030	51 718	45 210
Wobbe variation/ref. Rio-Bravo (%)	0,00%	-1,47%	-2,69%	2,847%	1,861%	-15,072%	-25,760%
Débit (kg/s)	10,200	10,21122	10,229	10,160	10,174	11,639	12,638

Calcul des NOx avec réseau de réacteurs (suite)

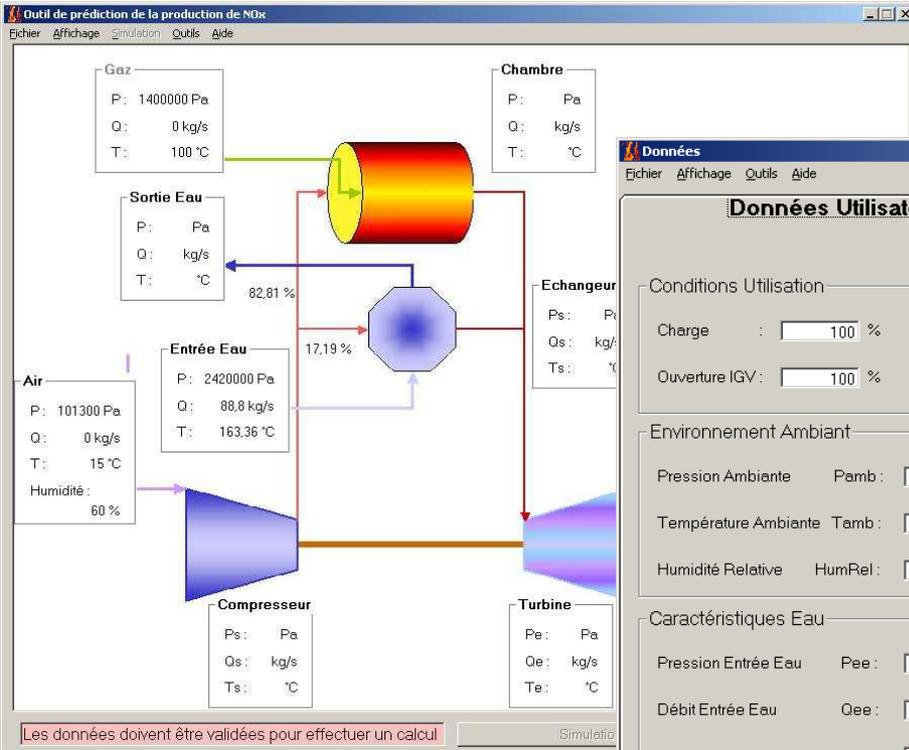
NOx (15%O₂ sec) vs composition du gaz naturel

Les NOx augmentent de manière générale avec le PCI ; à PCI équivalent, les NOx augmentent avec le taux des hydrocarbures plus lourds que le méthane (éthane, propane, n-butane); à taux d'hydrocarbures lourds équivalent, les NOx augmentent avec le taux des hydrocarbures les plus lourds (propane)



Résultat final : outil pour exploitants de TAC

Outil rapide (version compilée de Dymola® sous VB®) avec deux types d'interfaces : 'Utilisateur' et 'Administrateur'



Données

Echier Affichage Outils Aide

Données Utilisateur | **Données Administrateur**

Conditions Utilisation

Charge : % Débit Gaz Qgaz : kg/s

Ouverture IGV : % Débit Air Qair : kg/s

Environnement Ambiant

Pression Ambiante Pamb : Pa

Température Ambiante Tamb : °C

Humidité Relative HumRel : %

Caractéristiques Eau

Pression Entrée Eau Pee : Pa

Débit Entrée Eau Qee : kg/s

Température Entrée Eau Tee : °C

Réinitialisation Valider

Données

Echier Affichage Outils Aide

Données Utilisateur | **Données Administrateur**

Compresseur

Taux Compression nominal Txcn :

Rendement nominal Compression Rtcn :

Turbine

Taux Détente nominal Txdn :

Rendement nominal Détente Rtdn :

Pression nominale Ptnom : bar

Débit nominal Qtbnom : kg/s

Température nominale Ttnom : °C

Pertes Charge

Perte Charge Air Entrée PdpAir : %

Perte Charge Pré-Chambre PdpCh : %

Perte Charge Post-Turbine PdpTb : %

Chambre Combustion

Part Air vers Chambre : %

Alternateur

Rendement RendAlter : %

Echangeur Eau / Air

Efficacité Effic :

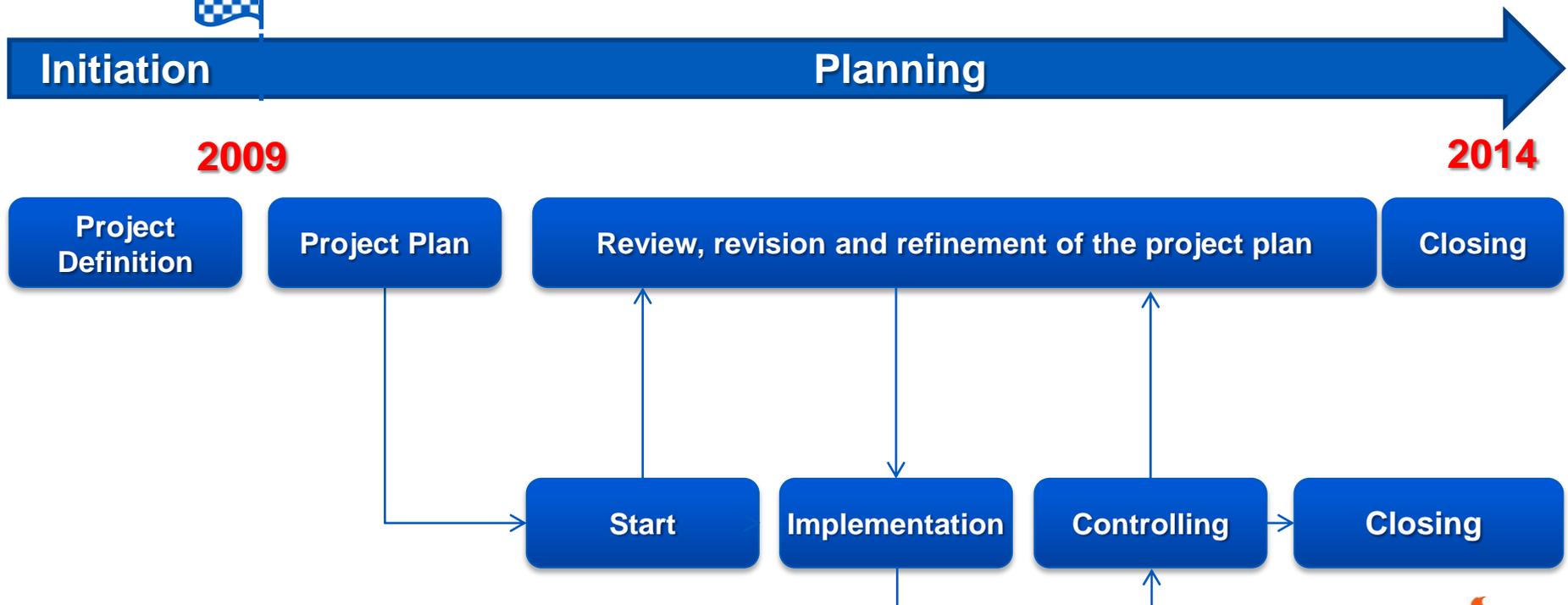
Perte Charge Côté fumées Kdpf :

Perte Charge Côté eau Kdpe :

Réinitialisation Valider Annuler Appliquer

H₂-IGCC FP7 Project vision

“To pave the way for commercial deployment of efficient, clean, flexible and reliable IGCC-CCS plants by 2020”



Project definition

Overall Objective

To provide and demonstrate technical solutions for the **next generation of IGCC plants**, which will allow the use of state-of-the-art (highly efficient, reliable) gas turbines, suitable for combusting **undiluted hydrogen-rich syngas derived from a pre-combustion CO₂ capture process**.

Specific Objective

- SP1** Safe and low emission combustion technology for undiluted, hydrogen-rich syngas will be developed and demonstrated
- SP2** Improved materials systems with advanced coatings able to protect base blade and combustor materials against the different and potentially more aggressive temperature and composition of exhaust gases will be developed and demonstrated.
- SP3** Modified compressor/turbine aerodynamics and hot path cooling will be investigated in order to deal with the increased mass flow rate of fuel and the increased heat transfer of exhaust gases.
- SP4** Thermo-economic system analysis will evaluate optimum IGCC plant configurations with special emphasis on the power island system components, including multiple train arrangements.

24 partners

Coordinator

European Turbine Network

Utilities

Enel
Nuon
Electrabel
(Laborelec)
E.ON Engineering
Electricite De France

OEM's

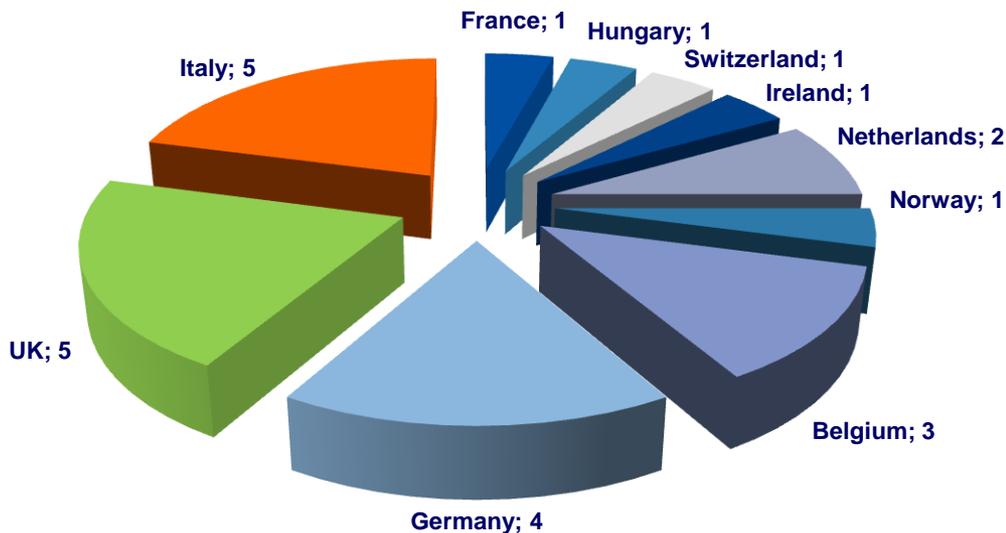
Ansaldo Energia
Siemens

Supplier/service Providers

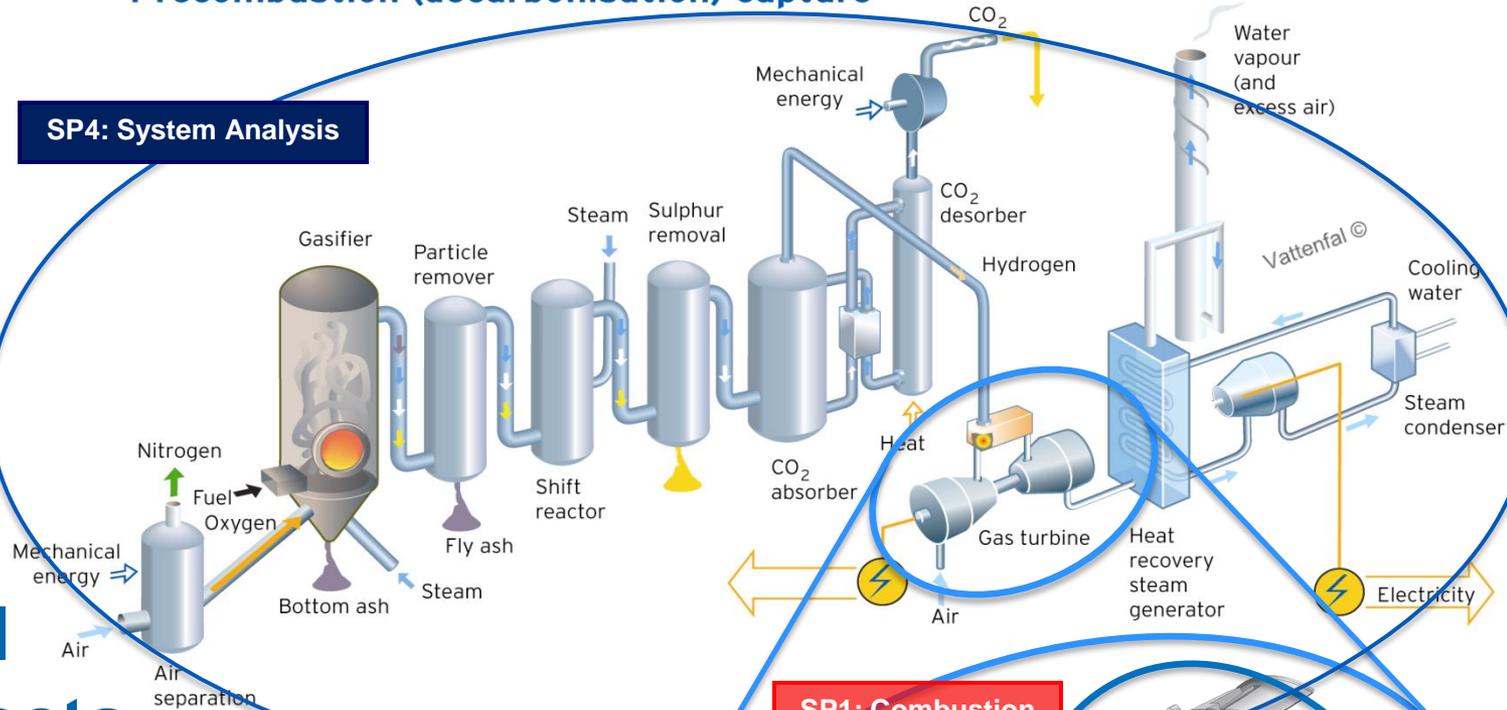
Flame Spray Hungary

Research Institutes & Universities

Cenaero
DLR
Paul Scherrer Institute
Jülich Research Center
RWTH Aachen
Cardiff University
Cranfield University
RSE (Milan)
National Univ. of Ireland Galway
Technical Univ. of Eindhoven
University of Genova
University Roma TRE
University of Sheffield
University of Stavanger
University of Sussex



SP4: System Analysis



Technical Sub Projects (SP):

SP1: Combustion

SP2: Materials

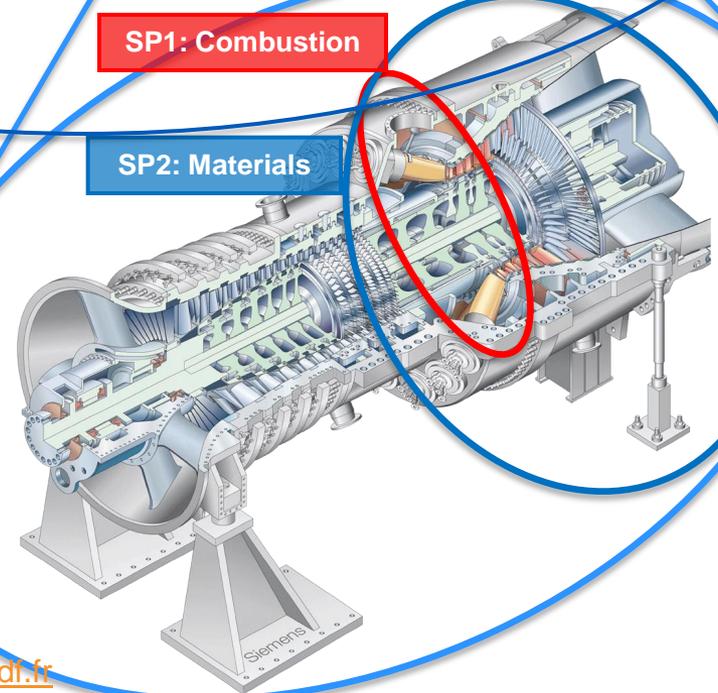
SP3: Turbo Machinery

SP4: System Analysis

SP1: Combustion

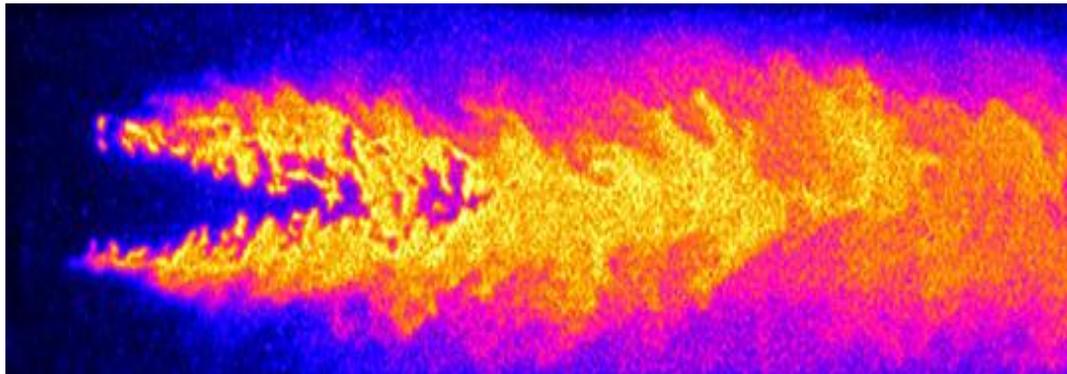
SP2: Materials

SP3: Turbo machinery

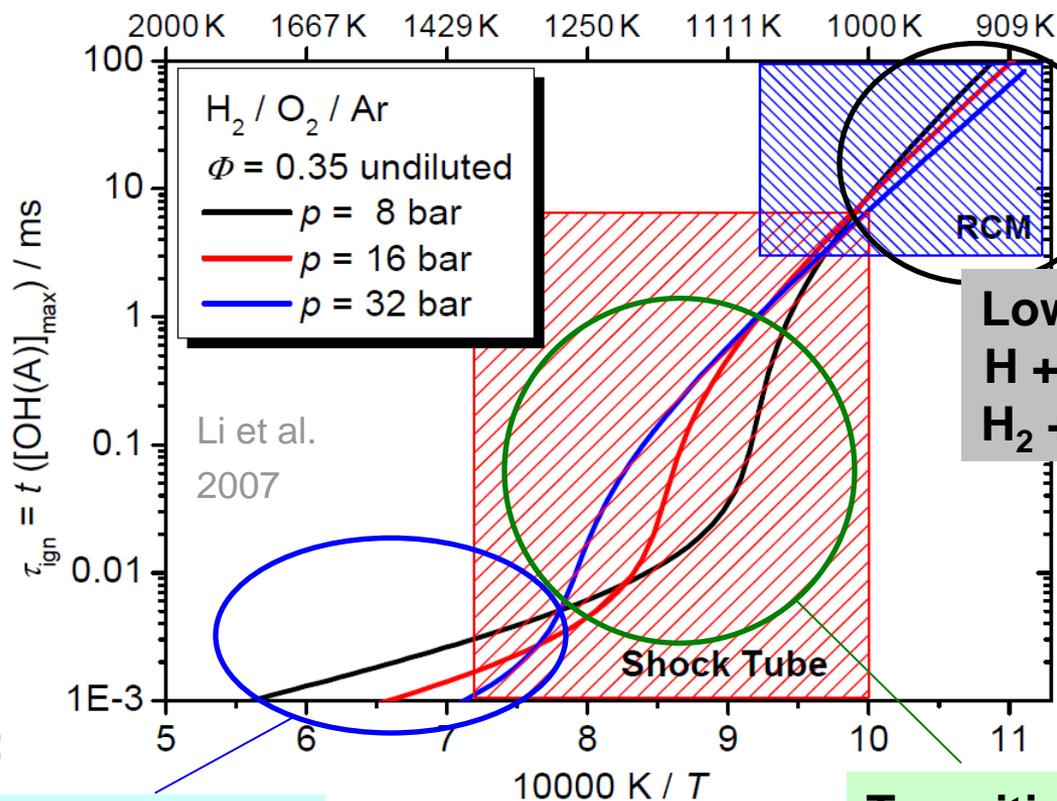


Technical challenges (Hydrogen vs natural gas):

- ❑ Higher flame speed,
- ❑ Higher adiabatic flame temperature,
- ❑ Shorter ignition delay time,
- ❑ Higher volume flow rate (turbine limitation!).



Ignition delay time



Low T regime:
 $\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \Rightarrow \text{HO}_2 (+\text{M})$
 $\text{H}_2 + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{O}_2$



Key reactions:

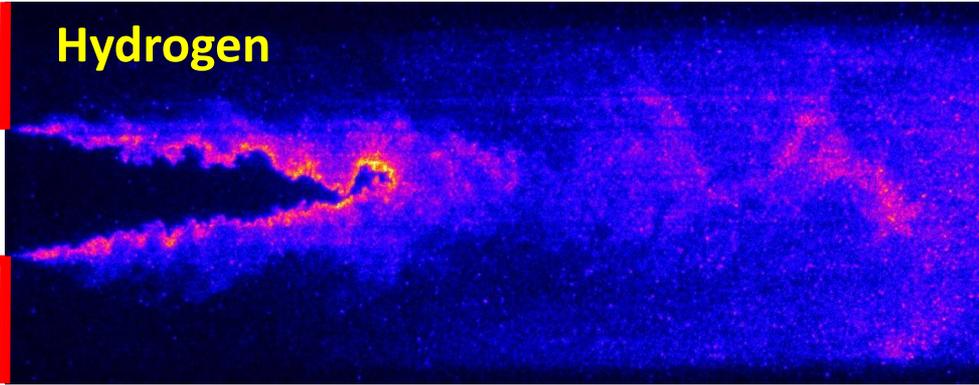
High T regime:
 $\text{H} + \text{O}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{O}$

Transition regime:
 $\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \Rightarrow \text{HO}_2 (+\text{M})$

Flame front profiles: H₂, Syngas, CH₄

Fuel
Air

Hydrogen

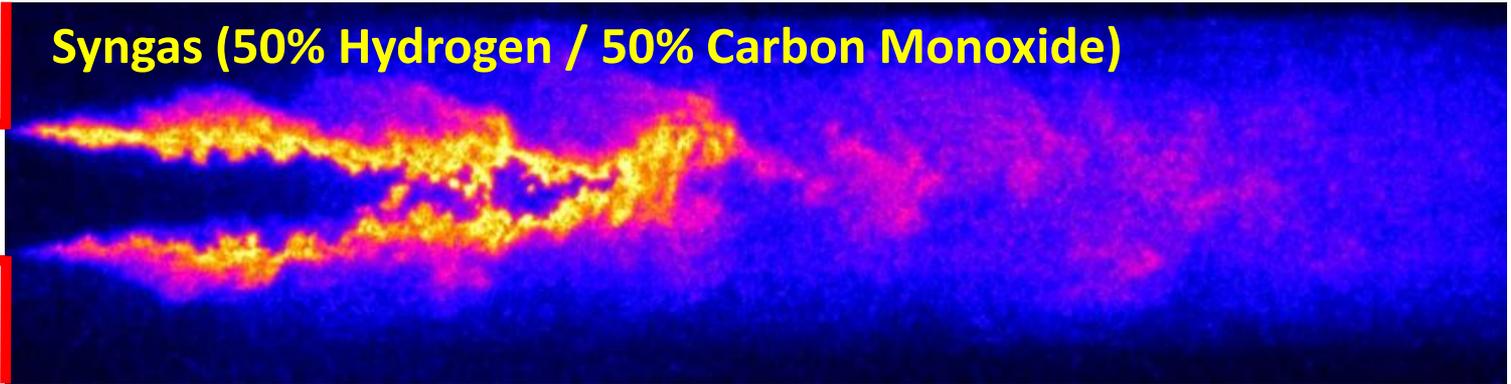


Pressure: 5 bars
Flame Temperature \approx 1750 K



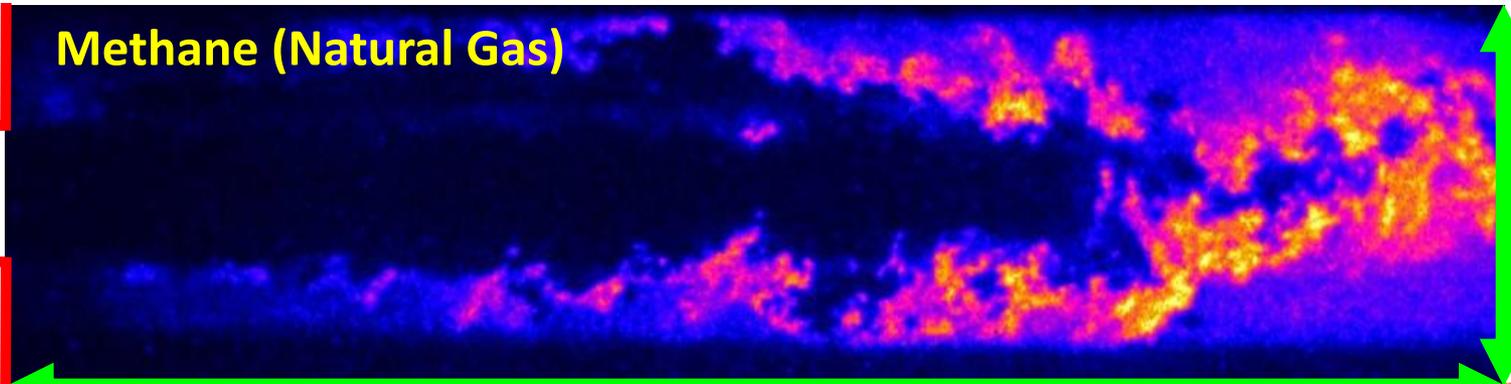
Fuel
Air

Syngas (50% Hydrogen / 50% Carbon Monoxide)



Fuel
Air

Methane (Natural Gas)



75 mm

\approx 290 mm

mohamed.kanniche@edf.fr

Fuel injection through blades (premix) CBO controls the flame front position (humming)



Fuel Injection
(integrated in swirler vanes)



Standard CBO



RDA 25

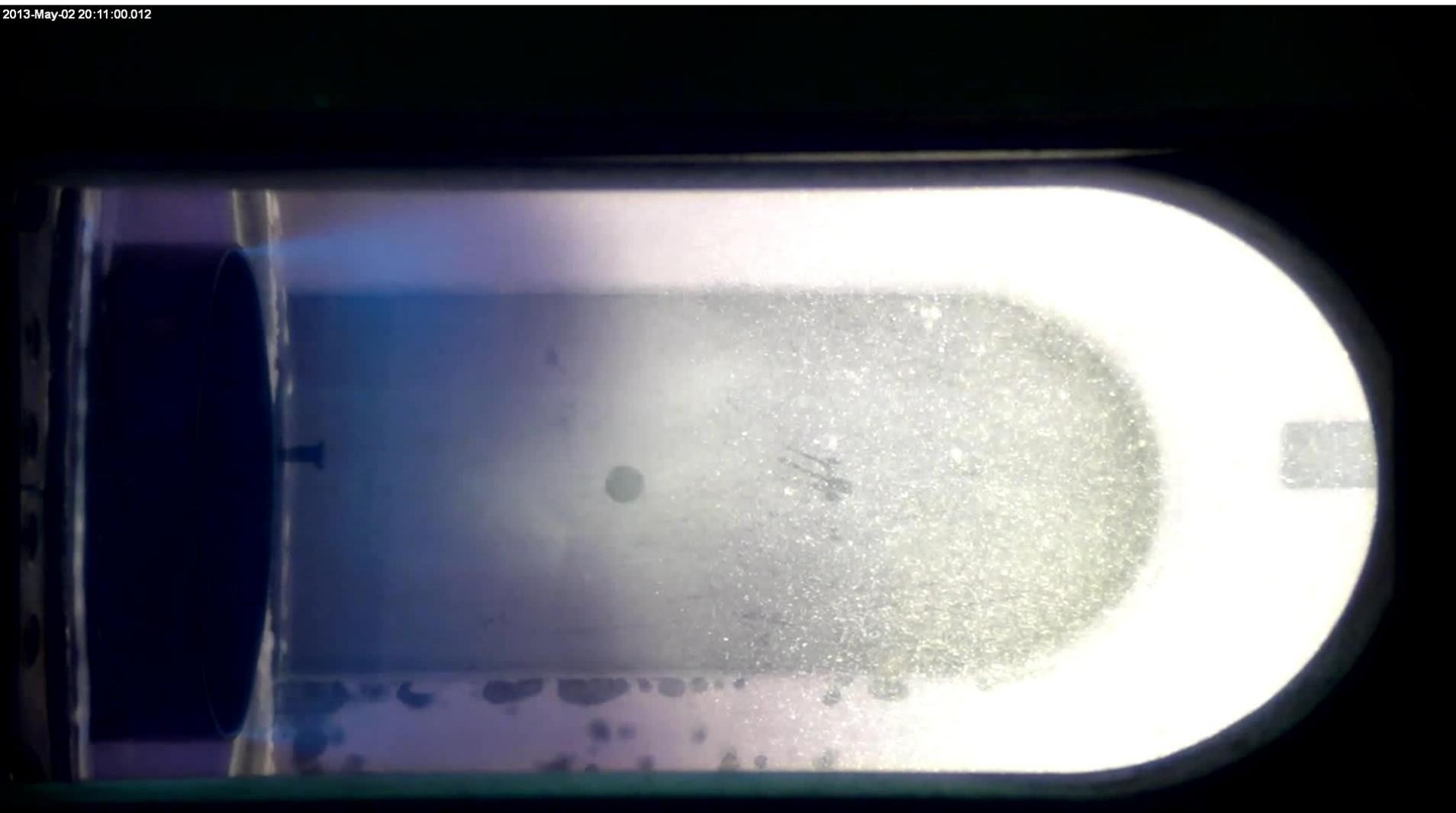
Ansaldo industrial burner Different configurations



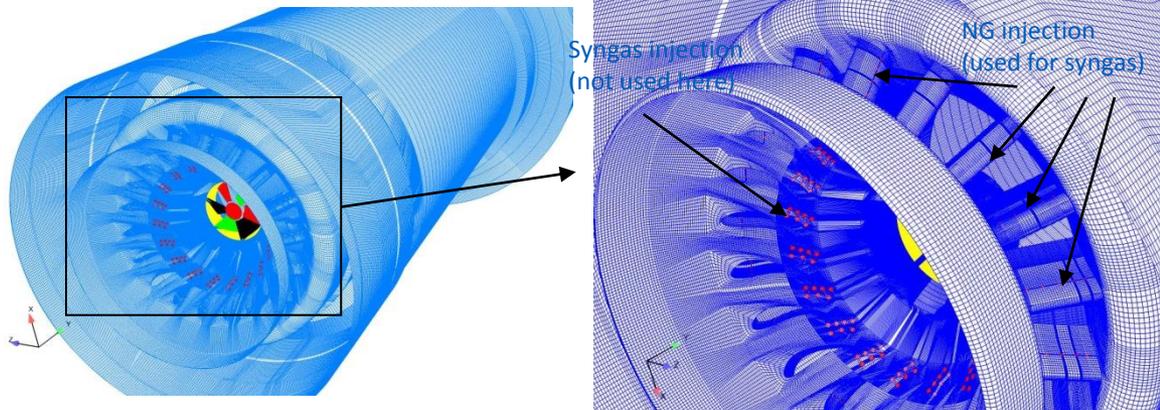
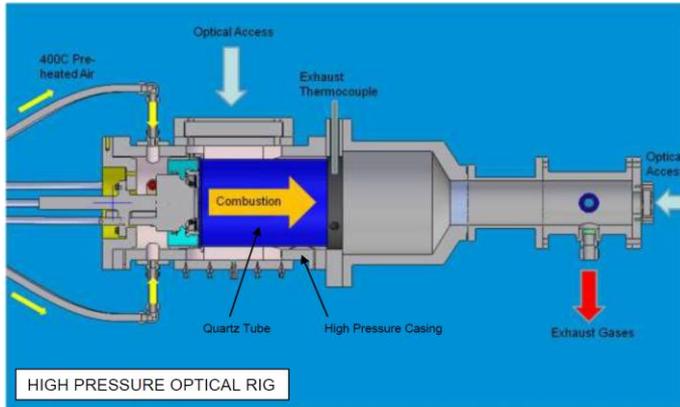
Premixed hydrogen flame without pilot flame!!

Visualisation de Cardiff University

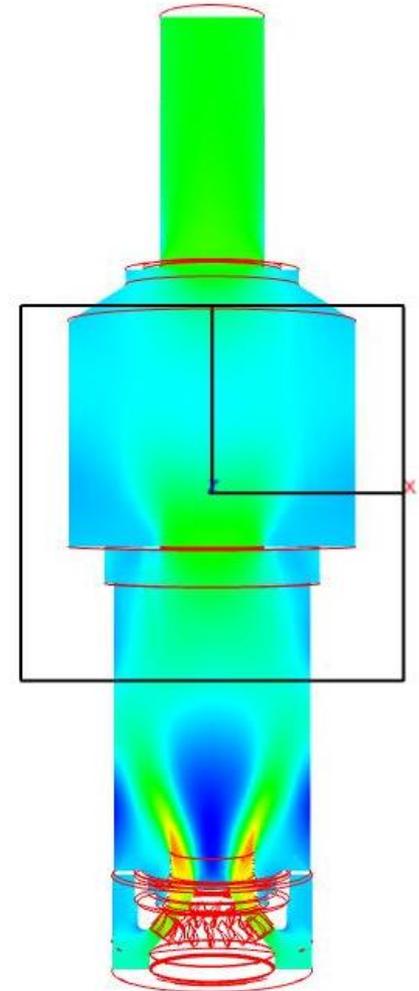
2013-May-02 20:11:00.012



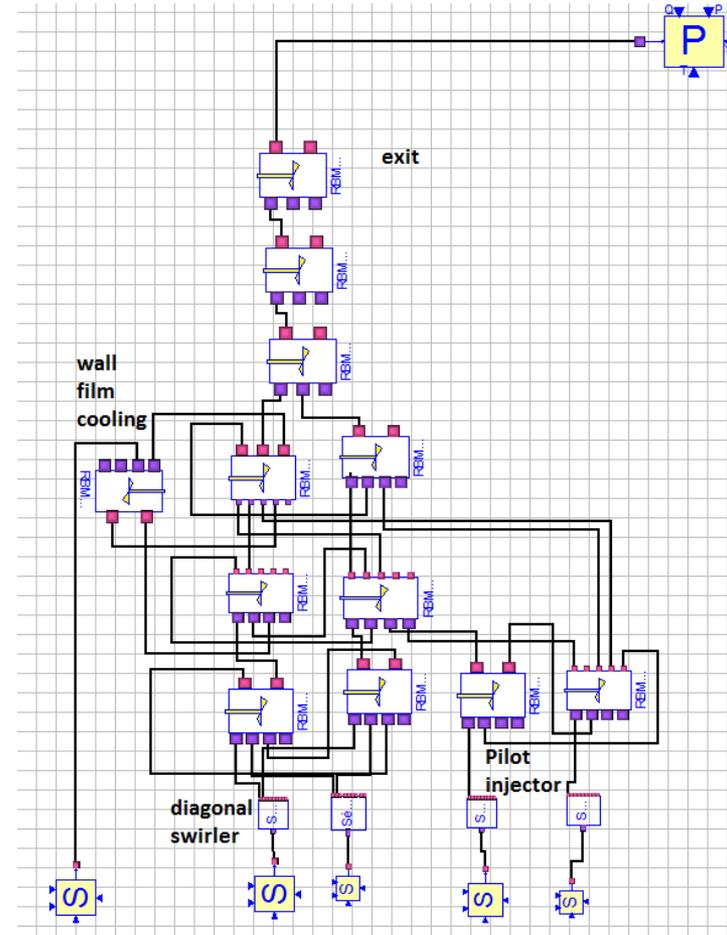
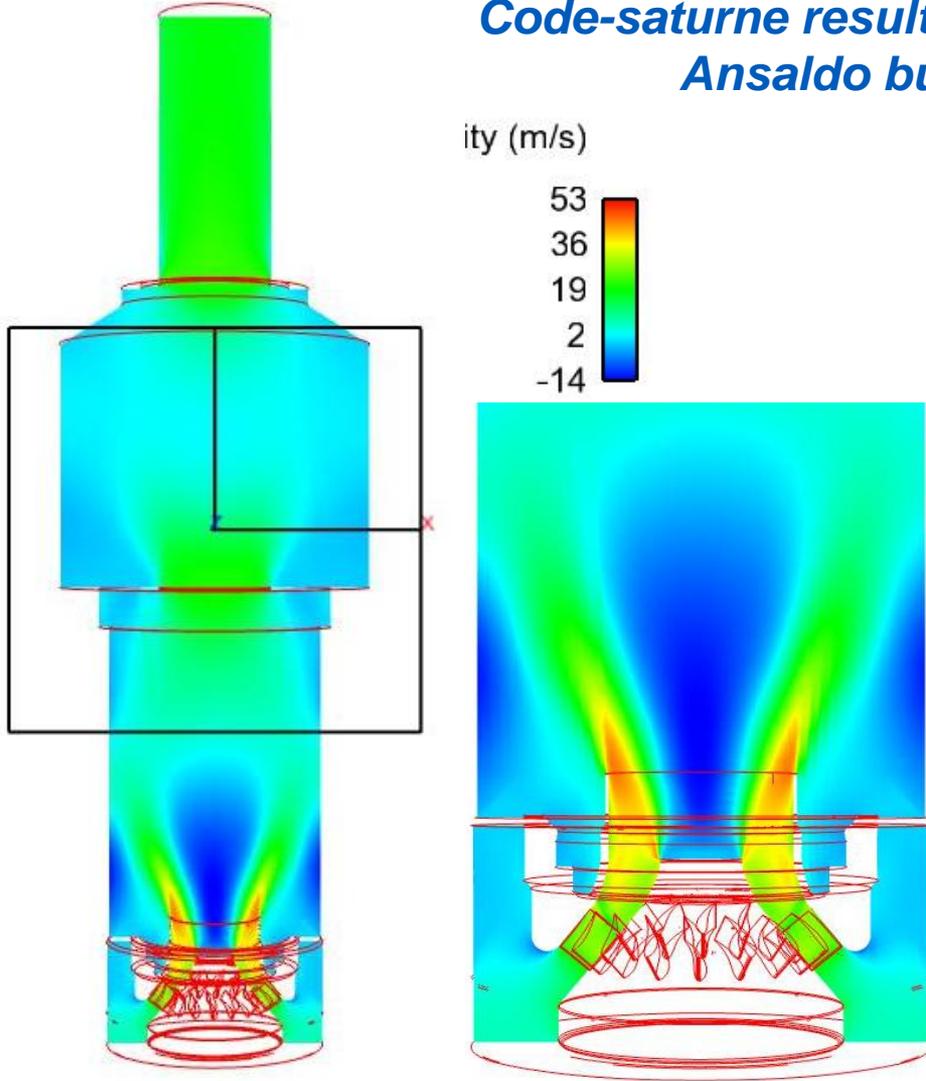
CFD modelling with code_saturne (EDF) Ansaldo burner tested in Cardiff University



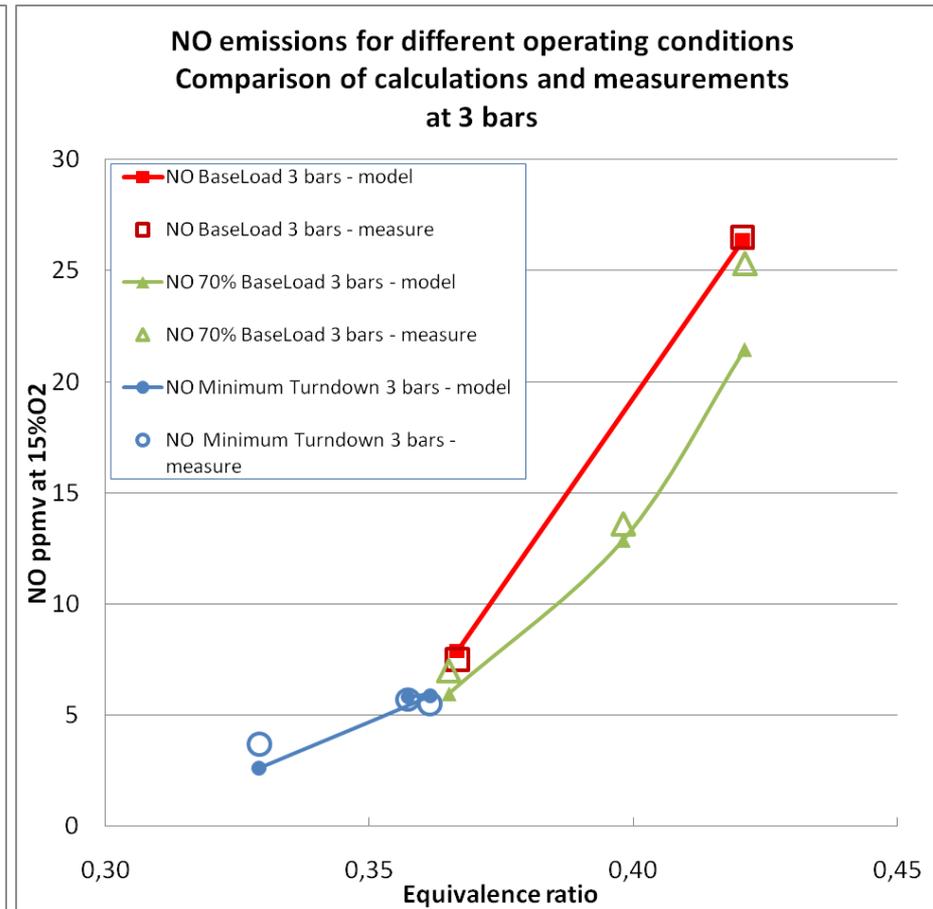
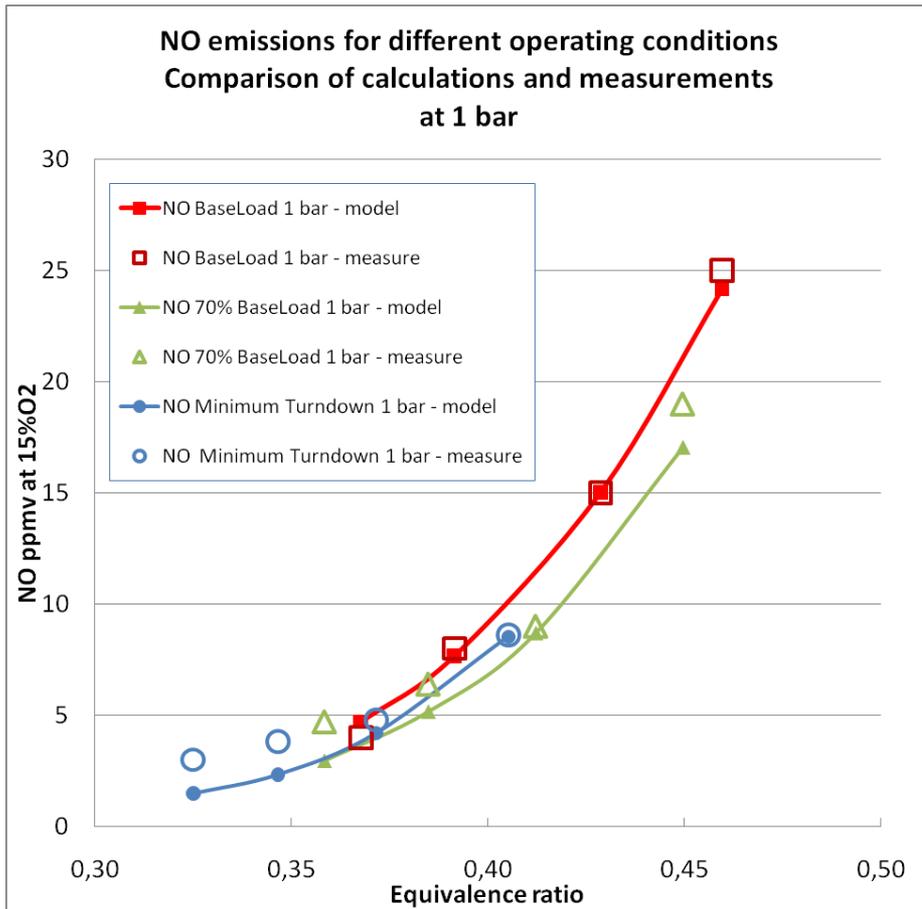
20 Millions de cellules



Code-saturne results (left) & reactor network (right) Ansaldo burner configuration 3.2



Mesures de Cardiff Univ. – Brûleur Ansaldo configuration 3.2



Conclusion: SP1 Combustion

WP 1.1:

1. ignition delay times
 - unique set of experimental data based on different measurement techniques
2. reaction mechanism validated (extended version includes N-chemistry)
3. flame speed (fuel consumption rates)
 - first-of-its-kind experimental data for laminar/turbulent flame speed



WP 1.2:

4. FGM in OpenFOAM (available for industrial purpose use)
5. Other modeling tools (NASCOMB) provided valuable support for experimental activities and burner design evaluation

WP 1.3:

6. combustion test campaigns (Genoa/Savona, Cardiff, Enel/Sesta) from atm. Pressure up to 13bar
7. Invaluable operating experience on H₂-rich fuel gas mixtures incl. NO_x emission characteristics

WP 1.4:

8. Lab scale testing of promising alternative combustion techniques (flameless combustion and wet/catalytic combustion)

Conclusion général

- L'approche Procédé + CFD + Chimie a été très utile pour construire un outil numérique précis et rapide pour évaluer le CO et les NOx émis par les TAC fonctionnant au gaz naturel, au gaz de synthèse (CO&H₂) ou à l'hydrogène pure sous des conditions ambiantes variables :
 - La simulation des procédés permet de fixer des conditions aux limites réalistes des différents équipements, en particulier ici de la chambre de combustion.
 - L'approche CFD permet de prendre en compte la complexité des brûleurs et les effets de la turbulence.
 - Le post-traitement du CFD permet de construire un réseau de réacteurs tenant en compte la distribution de l'écoulement turbulent (flux de masse) dans les différentes zones quasi-homogènes de la chambre de combustion.
 - La chimie via réseau de réacteurs permet d'estimer au plus précis les espèces mineures (ppm) tels que le CO et les NOx.

Fichet V., Kanniche M., Plion P., Gicquel O., A reactor network model for predicting Nox emissions in gas turbines, Fuel 89, 2010, 2202-2210.

Kanniche M., Coupling CFD with chemical reactor network for advanced Nox prediction, in gas turbine, Clean Techn Environ Policy, 2010.

mohamed.kanniche@edf.fr

