



# ZOE – CO<sub>2</sub> liquefaction

Web App development – Variables and Laws

# Input variables (1/4)

## □ Débit, défini en Nm<sup>3</sup>/h par l'utilisateur, à convertir vers kg/s pour envoyer vers COFE

➤ Total Inlet Mass Flow.Set Point

$$➤ Q_{kg/s} = Q_{Nm^3/h} * \frac{P}{R*T} * (\%_{CH_4} * 0.01604 + \%_{CO_2} * 0.04401 + \%_{O_2} * 0.031998 + \%_{N_2} * 0.0280134 + \%_{H_2O} * 0.018015) / 3600$$

## □ Composition du gaz, à envoyer sous la forme 0.XXX (99% → 0.99):

➤ CH4 (%): Inlet %CH4.Set Point

➤ O2 (%): Inlet %O2.Set Point

➤ H2O (%): Inlet %H2O.Set Point

➤ N2 (%): Inlet %N2.Set Point

➤ CO2 (%): non défini mais calculé comme 1 – CH4 – O2 – N2 – CO2, à afficher en %

## □ Pression en entrée, définie en mbarg, à convertir vers Pa pour envoyer vers COFE

➤ Inlet pressure.Pressure

$$➤ P_{Pa} = P_{mbarg} * 100 + 101325$$

# Input variables (2/4)

- ❑ **Température en entrée, définie en °C, à convertir vers K pour envoyer vers COFE**
  - Inlet temperature.Outlet temperature
  - $T_K = T_{°C} + 273.15$
- ❑ **Qualité finale du CO2 attendue, à envoyer sous la forme 0.XXX (99% → 0.99):**
  - CO2 Quality.component mole fraction 2 reboiler
  - Choix entre 99%, 99.9% et 99.99%
- ❑ **Utilisation (ou non) des chiller, choix utilisateur = oui ou non, à convertir vers 1 ou 0:**
  - CO2 Chiller.E
  - Si oui, envoyer 1 sinon envoyer 0
- ❑ **Régénération du PSA, choix utilisateur = oui ou non, à convertir vers 0.1 ou 0:**
  - Regen PSA.Split factors(0)
  - Si oui, envoyer 0.1 sinon envoyer 0

# Input variables (3/4)

## □ Paramètres des chillers définis et modifiables par l'administrateur

- a\_EER4.a
- b\_EER4.b
- c\_EER4.c
- d\_EER4.d



**Pour le EER4**



**Possibilité d'ajouter des valeurs à la main ?**

- a\_EER30.a
- b\_EER30.b
- c\_EER30.c
- d\_EER30.d



**Pour le EER30**

# Input variables (4/4)

- ❑ **Température ambiante, définie en °C, à convertir vers K pour envoyer vers COFE**
  - AmbientTemperature.input1
  - $T_K = T_{°C} + 273.15$
- ❑ **Pression du procédé, définie en barg, à convertir vers Pa pour envoyer vers COFE**
  - Process Pressure.IN
  - $P_{Pa} = P_{barg} * 10^5 + 101325$

# Type de calcul

## □ 2 calculs possibles

- Calcul "simple": 1 temperature, 2 pressions (2 simulations) → développement en cours
- Calcul "paramétrique": plage de temperature, 2 pressions (largeur de plage\*2 simulations)
  - *Enchainement de calcul "simple" sur différentes temperatures*
- Stockage de données à prévoir

# Post-traitement → Récupération de données (1/2)

## ❑ Auxiliary 1 et Auxiliary 2: modifiables

## ❑ Coefficient de performance EER4 et EER30:

- EER Chiller -30°C.EER Chiller 30C
- EER Chiller 4°C.EER4

## ❑ Positive chiller, thermal energy demand (W):

- FQ\_E Total HE\_EER30.HE03

## ❑ Negative chiller, thermal energy demand (W):

- FQ\_E Total HE\_EER4.HE02

## ❑ Compressor – Power (W):

- FQ\_E-Comp.E\_Comp

## ❑ CO2 Chiller:

- FQ\_E-Comp Sub.Energy demand

## ❑ PSA Heater:

- FQ\_E-PSA Heater.Heat duty

## ❑ Production de CO2:

- Débit: Liquid CO2 Mass Flow.Total Mass Flow
- Pression: Liquid CO2 Pressure.IN
- Temperature: Liquid CO2 Temperature.Temperature

## ❑ Chaleur récupérée des compresseurs:

- Heat recovery Compressor Stage 1.work
- Heat recovery Compressor Stage 2.work
- Heat recovery Compressor Stage 3.work

# Post-traitement → Récupération de données (2/2)

## □ Mass balance:

- 00-07
- FQ\_03b
- FQ\_08
- FQ\_12
- FQ\_21
- FQ\_27
- FQ\_NCG-01
- FQ\_29
- FQ\_30b
- FQ\_32b
- FQ\_Boil Off-01

Pression, temperature, debit, composition

```

flow_name = "00-07"
stream = doc.GetStream(flow_name)
thermo_material = stream.QueryInterface(coTypes.ICapeThermoMaterial)
P = thermo_material.GetSinglePhaseProp("pressure", "overall", None)[0]
T = thermo_material.GetSinglePhaseProp("temperature", "overall", None)[0]
flow = thermo_material.GetOverallProp("flow", "mass")
composition = thermo_material.GetOverallProp("fraction", "mass")
    
```

# Post-traitement → Traitement de données

## ❑ Calcul du CSP pour chaque couple (temperature; pression de process)

$$\text{➤ } CSP = \left( Aux1 + Aux2 + \frac{PositiveChiller}{EER4} + \frac{NegativeChiller}{EER30} + Compressor + CO2Chiller + PSA \right) / (1000 * \text{Débit de } CO2 \text{ liquide})$$

## ❑ Import de temperature annuel



# Appendix