

Fiche-guide de TD sur le calcul des émissions de CO2 dans les cycles à combustion

1) Objectifs du TD

L'objectif de cette fiche-guide est d'expliquer comment calculer les émissions de gaz à effet de serre (GES), et notamment de CO2 dans les cycles à combustion, et de montrer comment le faire avec Thermoptim.

Elle comporte trois parties :

- la première est essentiellement méthodologique
- la seconde présente la classe externe permettant d'effectuer les calculs dans Thermoptim
- la troisième met en pratique les deux autres autour de quelques exemples

La difficulté de ce TD peut être modulée en fonction de celle des cycles auxquels la méthode est appliquée.

2) Références

La première référence ci-dessous est celle d'un site réalisé par le consultant à qui l'Ademe a demandé de préparer les méthodes d'estimation des bilans carbone aujourd'hui préconisés. Elle est à la fois assez exhaustive et facile d'accès.

- [1] Site internet de J.M. Jancovici, <http://www.manicore.com/documentation/serre/gaz.html>
[2] IPCC, www.ipcc.ch
[3] Circulaire du 15 avril 2002 relative aux modalités de contrôle par l'inspection des installations classées des bilans annuels des émissions de gaz à effet de serre, <http://aida.ineris.fr/textes/circulaires/text4222.htm>

3) Méthodologie

3.1 Introduction

Le pouvoir de réchauffement global (PRG) d'un gaz se définit comme le "forçage radiatif" (c'est à dire la puissance radiative que le gaz à effet de serre renvoie vers le sol), cumulé sur une durée variable. Cette valeur dépend du spectre d'absorption du gaz et de son temps de vie dans l'atmosphère. Elle est mesurée en comparaison au CO2.

Ce pouvoir de réchauffement global est une représentation simplifiée de la réalité :

- la concentration des gaz dans l'atmosphère évolue et conditionne leur pouvoir de réchauffement,
- les spectres d'absorption de deux gaz peuvent se recouvrir partiellement ainsi les pouvoirs de réchauffement de deux gaz sont interdépendants, ce qui n'est pas pris en compte ici,
- le temps de vie dans l'atmosphère peut varier suivant les conditions atmosphériques [1].

Le GIEC¹ a défini des équivalents d'émissions de CO2 pour 5 groupes de gaz à effet de serre, méthane, NOx, CFC, HFC, SF6. Ils sont rapportés dans le tableau donné en annexe 1.

Les émissions de GES des systèmes énergétiques prennent place lors de la fabrication, du transport ou de l'utilisation. Pour la combustion, les GES à prendre en compte sont les produits de la combustion (CO2, HC imbrûlés, N2O ...). Pour une source de type biomasse, il ne faut pas tenir compte du CO2 émis à la combustion qui est censé être absorbée par des puits de carbone.

¹ Groupe Intergouvernemental d'Etude du Climat [2]

3.2 Calculs pour la combustion

Pour la combustion, Thermoptim permet de calculer la composition des gaz de sortie. Les émissions de CO₂ sont donc connues. Cependant, le processus de combustion ne prend pas en compte les HC imbrûlés ni les émissions de NO_x et les émissions de protoxyde d'azote.

Or, si l'on prend par exemple la combustion d'un hydrocarbure donné, suivant le type de produit (CH₄, CO₂ ou seulement CO₂) le PRG des effluents varie. Ainsi, la connaissance de la composition en sortie est absolument nécessaire pour CO₂, CH₄ comme imbrûlé et N₂O.

Il n'y a toutefois pas d'équations simples permettant de relier les émissions de CH₄ et de N₂O à un carburant donné, ces émissions étant très dépendantes de la composition chimique du carburant, du type de combustion, de la géométrie de l'installation qui conditionne la combustion et des niveaux de températures, du facteur d'air ...

En conséquence, il semble plus raisonnable de partir de valeurs conventionnelles d'émissions telles qu'on les trouve dans la circulaire sur le comptage des émissions des gaz à effet de serre [3] ; la méthodologie est rapportée dans l'encadré ci-dessous. Les données (sous forme de tableaux) nécessaires à la méthodologie de calcul sont fournis en Annexe 2.

Les émissions de dioxyde de carbone issues de la combustion

Pour ce qui concerne la combustion, les émissions de dioxyde de carbone peuvent être calculées avec une très grande précision à partir d'un bilan du carbone contenu dans le combustible. Le pouvoir calorifique inférieur et la teneur en carbone du combustible, nécessaires à ce calcul, peuvent être mesurés avec précision par l'exploitant ou obtenus auprès de son fournisseur.

Le calcul des émissions de dioxyde de carbone liées à l'utilisation énergétique des combustibles comporte 5 étapes qui peuvent faire l'objet des contrôles présentés ci-dessous par l'inspection des installations classées :

- détermination de la quantité de combustible consommée au cours de l'année N ;
- calcul de la consommation énergétique à partir de la quantité de combustible consommée et du PCI du combustible (voir tableau A1 en annexe) ;
- calcul des émissions potentielles de carbone à partir de la consommation énergétique et des facteurs d'émissions de carbone (voir tableau A1 annexe) ;
- calcul du carbone réellement oxydé à partir des facteurs d'oxydation (voir tableau A2 en annexe) ;
- conversion du carbone oxydé en émissions de CO₂.

Exemple de calcul :

Soit une installation de combustion qui brûle 5 000 tonnes de fioul lourd par an, avec un PCI de 40 GJ/t, le calcul de ses émissions de CO₂ est le suivant :

Consommation énergétique = consommation de fioul lourd en tonnes x PCI du fioul lourd
 = 5 000 x 40 = 200 000 GJ.

Calcul des émissions potentielles de carbone = consommation énergétique x facteur d'émission de carbone = 200 000 x 21 = 4 200 tonnes de carbone.

Correction pour combustion incomplète (C non oxydé) = teneur en carbone x facteur d'oxydation pour le combustible = 4 200 x 0,99 = 4 158 tonnes de carbone oxydé émis.

Calcul des émissions de dioxyde de carbone = tonnage de carbone émis x masse molaire du dioxyde de carbone / masse molaire du carbone = 4 158 x 44 / 12 = 15 246 tonnes de dioxyde de carbone émis.

En l'absence de facteurs d'émissions de carbone pour un combustible donné dans le tableau A1, il pourra être demandé de fournir une analyse de PCI et de contenu en carbone du combustible soit obtenue auprès du fournisseur soit réalisée par l'exploitant.

Les émissions de méthane et de protoxyde d'azote

Les émissions de protoxyde d'azote (N₂O) et de méthane (CH₄) liées à la combustion seront calculées à partir de la consommation d'énergie telle que calculée ci-dessus et des facteurs d'émissions spécifiques aux technologies utilisées.

L'estimation des émissions provenant de sources fixes peut être décrite en utilisant la formule suivante :

$$\text{Emissions} = \text{Consommation} (\text{FEAC} \times \text{ActivitéAC})$$

Où

FE : Facteur d'émission (kg/TJ)

Activité : Energie entrante (TJ)

A : Type de combustible

C : Type de technologie

Le tableau A3 en annexe A fournit des facteurs d'émissions en fonction du combustible utilisé, du secteur d'activité et de la technologie utilisée.

Le calcul des émissions de méthane et de protoxyde d'azote comporte ainsi plusieurs étapes :

- calcul de la consommation énergétique (comme indiqué au paragraphe 1.2) ;
- sélection d'un facteur d'émission en fonction du combustible utilisé, du secteur d'activité et de la technologie utilisée (tableau A3 en annexe) ;
- calcul des émissions de protoxyde d'azote et de méthane comme le produit du facteur d'émissions choisi par la consommation énergétique.

Exemple de calcul :

Reprenons l'installation de combustion qui brûle 5 000 tonnes de fioul lourd par an, le calcul de ses émissions de méthane et de protoxyde d'azote est le suivant :

$$\begin{aligned} \text{Consommation énergétique} &= \text{consommation de fioul lourd en tonnes} \times \text{PCI du fioul lourd} \\ &= 5\,000 \times 40 = 200\,000 \text{ GJ} \end{aligned}$$

Dans l'industrie, pour ce combustible, le tableau A3 donne des facteurs d'émissions de 3,0 g de CH₄/GJ et de 1,75 g de N₂O/GJ.

$$\begin{aligned} \text{Calcul des émissions de méthane} &= \text{consommation énergétique} \times \text{facteur d'émission de méthane} \\ &= 3,0 \times 200\,000 = 600 \text{ kg de méthane} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Calcul des émissions de protoxyde d'azote} &= \text{consommation énergétique} \times \text{facteur d'émission de} \\ \text{protoxyde d'azote} &= 1,75 \times 200\,000 = 350 \text{ kg de protoxyde d'azote.} \end{aligned}$$

En l'absence de facteurs d'émissions pour un procédé donné dans le tableau A3, il pourra être fait usage d'un facteur d'émission de 2,5 g/GJ pour le protoxyde d'azote.

3.3 Méthode de calcul retenue

Le débit de CO₂ est calculé par rapport au débit des gaz et à leur concentration en CO₂, dans la même unité.

Les émissions de CH₄ et N₂O sont quant à elles estimées à partir de ce débit de CO₂, en le convertissant en puissance thermique mise en jeu et en appliquant les coefficients des tableaux donnés en Annexe 2.

Le passage des débits aux quantités émises se fait en les multipliant par la durée de fonctionnement de l'installation.

4 Implémentation dans Thermoptim

Une transfo externe appelée "CO2 emissions" a été développée (figure 4.1). Elle peut aisément remplacer une transfo-point de sortie des gaz (figure 5.1), mais il faut qu'elle dispose d'un point aval différent du point amont (faute de quoi aucun recalcul n'est fait).

Figure 4.1 : Bilan CO2 de l'exemple de la section 3.1

On choisit le type de combustible dans un pop-up menu et la durée de fonctionnement en heures (seuls les combustibles marqués en rouge dans l'annexe 2 ont été retenus pour ne pas trop alourdir la calssse).

Les résultats affichés à l'écran fournissent :

- le débit massique de CO2
- les débits massiques de CH4 et N2O
- les émissions annuelles en équivalent CO2 et en équivalent carbone
- un champ permettant d'entrer un commentaire.

Le code de la classe est le suivant :

- 1) déclarations, initialisations, tableaux

```
String[] listeConf={"Charbon","Bois","Fioul lourd","Fioul domestique",
"Gaz naturel","Autres produits pétroliers","Biogaz","Hydrogène"};
double[] valCH4={15.,32.,3.,1.5,4.,1.5,1.5,0.};
double[] valN2O={3.,4.,1.75,1.5,2.5,2.5,1.75,2.5};
double[] factOxydCarb={0.98,0.98,0.99,0.99,0.995,0.99,0.995,0};
double[] facteurEmission={26.,25.1,21.3,20.5,15.5,20.,20.5,0};
```

- 2) calcul des émissions

```

args[0]="process";//type of the element (see method getProperties(String[] args))
args[1]=tfe.getCompName();//name of the process (see method getProperties(String[] args))
vProp=proj.getProperties(args);
Double f=(Double)vProp.elementAt(3);
double flow=f.doubleValue();
String amont=(String)vProp.elementAt(1);//gets the upstream point name
getPointProperties(amont);//direct parsing of point property vector
Tamont=Tpoint;
double H=Hpoint;
Vector comburComp=lecorps.getGasComposition();
double fractCO2=Util.molarComp(comburComp,"CO2");//fraction molaire de O2
Vector vSubst=lecorps.getSubstProperties();
Double z=(Double)vSubst.elementAt(7);
double gazM=z.doubleValue();//masse molaire du combustible humide

int index=JComboFuelTypes.getSelectedIndex();
double fact=facteurEmission[index];
double CO2_massFlow=fractCO2*flow/gazM*44.*factOxydCarb[index];
CO2_value.setText(Util.aff_d(CO2_massFlow,4));
double CH4=CO2_massFlow/fact*valCH4[index];
CH4_value.setText(Util.aff_d(CH4,4));
double N2O=CO2_massFlow/fact*valN2O[index];
N2O_value.setText(Util.aff_d(N2O,4));
double totCO2=(CO2_massFlow+CH4*0.023+N2O*0.296)*duration*3.6/1000;
annualCO2_value.setText(Util.aff_d(totCO2,2));
annualC_value.setText(Util.aff_d(totCO2*12./44.,3));

//il faut qu'il y ait un point aval différent du point amont pour que la transfo soit calculée
//mais l'état du point aval est le même que celui du point amont
tfe.setupPointAval(getProperties());

```

5. Exemples de mise en application

5.1 Bilan d'une chaudière

A titre d'exemple, le bilan d'une chaudière brûlant 5000 t par an de fioul lourd conduit aux résultats des figures 4.1 et 5.1. Il s'agit du cas traité dans la section 3.2 ci-dessus.

Comme les émissions de CH₄ et N₂O sont ici prises en compte, il y a un petit écart avec les 15,25 t de CO₂ et 4,16 t de C indiquées section 3.2.

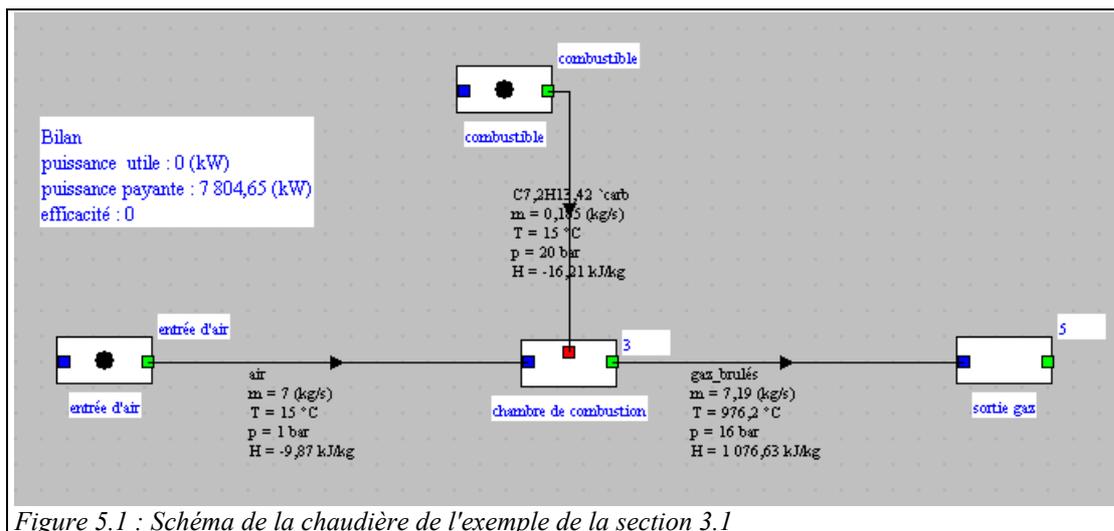


Figure 5.1 : Schéma de la chaudière de l'exemple de la section 3.1

5.2 Bilan d'une turbine à gaz

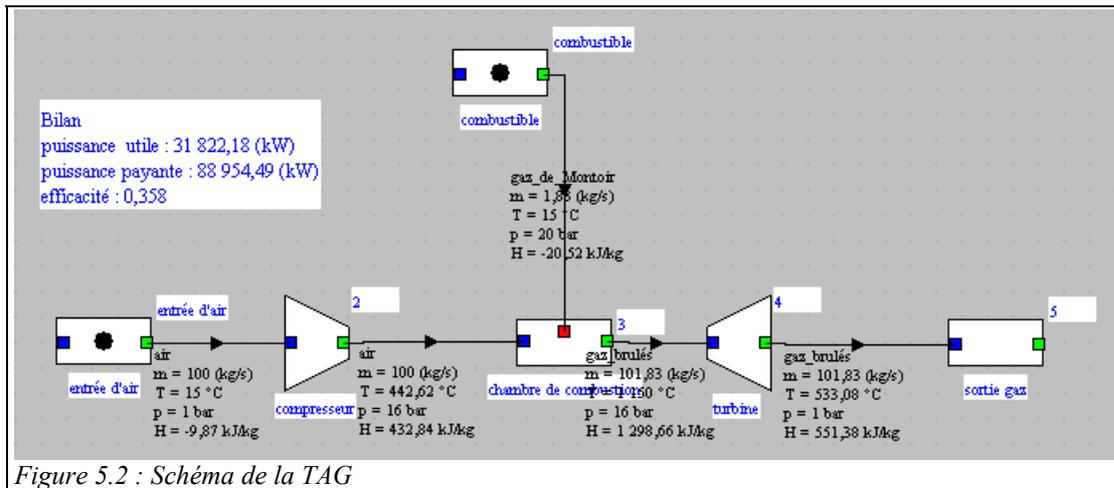


Figure 5.2 : Schéma de la TAG

transfo : sortie gaz type : externe < > Sauver

type énergie : autre débit imposé Supprimer Fermer

point amont : 4 débit (kg/s) : 101,82686 système fermé observée

m ΔH (kW) : 0 système ouvert Calculer

T (°C) : 533,08 CO2 emissions

P (bar) : 1

h (kJ/kg) : 551,38

titre : 1

point aval : 5 afficher

T (°C) : 533,08

P (bar) : 1

h (kJ/kg) : 551,38

titre : 1

Gas naturel duration (h) : 7500

CO2 emissions (kg/s) : 5.0132

CH4 emissions (g/s) : 1.2938

N2O emissions (g/s) : 0.8086

annual CO2 emissions (kt) : 152.13

annual C emissions (kt) : 41.490

Comment :

Figure 5.3 : Bilan carbone de la TAG

6) Fichiers de travail, recommandations

6.1 Fichiers de travail

Les fichiers de travail suivants sont joints au dossier dans l'archive SEGS.zip :

- code de la classe externe "CO2 emissions"
- fichiers extThopt.zip et extUser.zip contenant ces classes externes
- fichier inth.zip.zip contenant les textes en français
- fichiers de projet et de schéma du modèle Thermoptim de la chaudière
- fichiers de projet et de schéma du modèle Thermoptim de la turbine à gaz

6.2 Recommandations

Il faut que l'enseignant vérifie bien que les élèves ont à leur disposition dans leur environnement de travail Thermoptim les classes externes dont ils auront besoin.

Le plus simple pour cela est de lancer Thermoptim, puis d'ouvrir l'écran du visualisateur de classes externes (menu Spécial du simulateur). Les classes y étant regroupées par type, le "CO2 emissions" doit apparaître parmi les transfos, comme sur la figure 6.1.

Si l'une des classes manque, remplacez les fichiers extThopt.zip, extUser.zip et inh.zip par ceux qui sont fournis dans l'archive CO2emissions.zip pour les élèves devant travailler sur ce TD. S'ils sont présents, il est inutile d'effectuer ce changement.

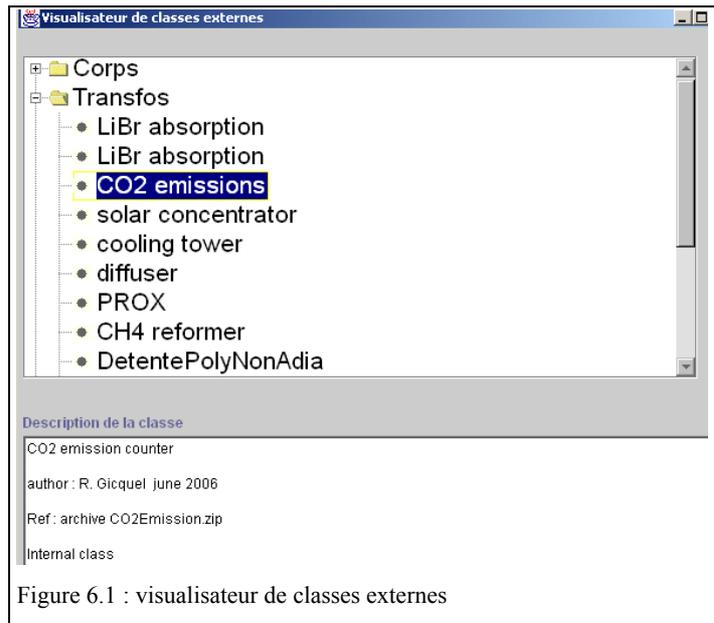


Figure 6.1 : visualisateur de classes externes

Annexe 1

	kg équ C par kg	kg équ CO ₂ par kg
CO2	0.273	1
Methane	5.727	21
NOx	10.909	40
N2O	84.545	310
HFC – 125	763.636	2 800
HFC – 134	272.727	1 000
HFC – 134a	354.545	1 300
HFC – 143	81.818	300
HFC – 143a	1 036.364	3 800
HFC – 152a	38.182	140
HFC – 227ea	790.909	2 900
HFC – 23	2 672.727	9 800
HFC – 236fa	1 718.182	6 300
HFC – 245ca	152.727	560
HFC – 32	177.273	650
HFC – 41	40.909	150
HFC – 43 – 10mee	354.545	1 300
Perfluorobutane	1 909.091	7 000
Perfluoromethane	1 309.091	4 800
Perfluoropropane	1 909.091	7 000
Perfluoropentane	2 045.455	7 500
Perfluorocyclobutane	2 372.727	8 700
Perfluoroethane	2 509.091	9 200
Perfluorohexane	2 018.182	7 400
R22	518.182	1 900
SF6	6 518.182	23 900

D'après [2], valeurs équivalentes sur 100 ans

Annexe 2

Références pour l'identification des combustibles, de leur pouvoir calorifique inférieur et leur facteur d'émission de carbone

Ces valeurs sont indiquées par défaut, lorsque l'exploitant n'en fournit aucune. Les valeurs CITEPA sont issues soit de valeurs nationales (ex. : Observatoire de l'énergie), soit de données spécifiques nationales (ex. : gaz de raffinerie, etc.), soit de l'application de données tirées de la littérature y compris du GIEC.

Code	Désignation	PCI/valeurs CITEPA (GJ/t)	Facteur d'émission de carbone/valeurs CITEPA (kg C/GJ) (1)
101	Charbon à coke (PCS >23 865 kJ/kg)		25,8
102	Charbon vapeur (PCS >23 865 kJ/kg)	26	25,8
103	Charbon sous-bitumineux (17 435 kJ/kg < PCS <23 865 kJ/kg)	20	26,2
104	Agglomérés de houille		25,8
105	Lignite (PCS <17 435 kJ/kg)	17	27,3
106	Brique de lignite	17	26,7
107	Coke de houille	28	29,2
108	Coke de lignite	17	29,5
109	Coke de gaz		
110	Coke de pétrole	32	26,2
111	Bois et similaire	18,2 (sec à l'air)	25,1
112	Charbon de bois	32,5	27,3
113	Tourbe	11,6	30
114	Ordures ménagères	8,8 (très variable)	29,7
115	Déchets industriels solides	12,5 (très variable)	
116	Déchets de bois	18,2 (très variable)	25,1
117	Déchets agricoles	14	27
118	Boues d'épuration	15	4,1
119	Dérivés de déchets		
120	Schistes bitumineux	9,4	29,1
121	Autres combustibles solides		
201	Pétrole brut	42,8	20
203	Fioul lourd	40	21,3
204	Fioul domestique	42	20,5
205	Gazole	42	20,5

206	Kérosène	44	20,2
207	Carburacteur	44	20,2
208	Essence	44	19,9
209	Essence aviation	44	19,9
210	Naphta	45	20
211	Huile de schiste bitumineux	36	20,0
212	Huile de moteur à essence		
213	Huile de moteur diesel		
214	Solvant usagé	très variable	
215	Liqueur noire		28,6
216	Fioul + charbon		
217	Produit d'alimentation des raffineries	45	20,0
218	Autres déchets liquides		
219	Lubrifiants	(très variable) 40,2	20
220	White spirit	45,2	
221	Paraffines		
222	Bitumes	40	22
223	Bio-alcool		
224	Autres combustibles liquides		
301	Gaz naturel	49,6 (dépend du type)	15,5
302	Gaz naturel liquéfié	49,6	15,5
303	Gaz de pétrole liquéfié	46 (variable)	17,5
304	Gaz de cokerie	31,5 (très variable)	12,8
305	Gaz de haut fourneau	2,3	73,1
306	Gaz de cokerie + gaz de haut fourneau		
307	Gaz industriel	(très variable)	
308	Gaz de raffinerie	48 (très variable)	15,3
309	Biogaz	14	20,5
310	Gaz de décharge		
311	Gaz d'usine à gaz		14,2
312	Gaz d'aciérie		49,9
313	Hydrogène	120	0

(1) En ce qui concerne les produits issus de la biomasse, on présente les facteurs d'émissions physiques déclarés, sachant que le facteur d'émission à retenir au titre du projet de directive établissant un système d'échange de quotas d'émissions au sein de la communauté pour le CO2 issu de la combustion de la biomasse est égal à 0. Sources : IPCC, OE, CITEPA, CORINAIR.

Déchets utilisés comme combustibles dans certaines activités : cimenteries (1) et papeteries

Code	Désignation	PCI/valeurs (GJ/t)	Facteur d'émission de carbone/valeurs (kg C/GJ)
	Huiles usagées	38,8	20,5
	Pneumatiques		23,2
	Plastiques		20,5
	Solvant	25,6	19,1
	Sciures imprégnées	15,7	26,8
	Farines animales	18,1	24,9
	Bois non imprégné		25,1
	Boues papetières (2)	3	40

(1) En ce qui concerne les produits issus de la biomasse, on présente les facteurs d'émissions physiques déclarés, sachant que le facteur d'émission à retenir au titre du projet de directive établissant un système d'échange de quotas d'émissions au sein de la communauté pour le CO₂ issu de la combustion de la biomasse est égal à 0.

(2) Valeurs proposées par le COPACEL (profession papetière).

Tableau A 2 : Références pour les facteurs d'oxydation du carbone

Nature du combustible	Fraction du carbone oxydé (%)
Charbon	98
Pétrole et produits pétroliers	99
Gaz	99,5
Tourbe	99

Les valeurs doivent être précisées par l'exploitant. On présente ici à titre de référence les valeurs du groupe intergouvernemental sur l'évolution du climat, établies à partir de moyennes mondiales. Dans un certain nombre de cas particuliers, des valeurs plus spécifiques devront être utilisées.

Pour certains charbons, la fraction oxydée peut ne représenter que 90 % du carbone présent.

Tableau A 3

Références pour les facteurs d'émissions de méthane et de protoxyde d'azote en fonction du combustible et de la technologie utilisée

Dans un certain nombre de cas particuliers, des valeurs plus spécifiques devront être utilisées.

Sauf cas particulier explicité ci-après, les émissions de CH₄ et de N₂O issues de la combustion sont faibles et par suite les facteurs d'émissions correspondent à des valeurs basses. La différenciation d'un grand nombre de sous cas selon la technologie utilisée introduit une grande complexité sans pour autant garantir une meilleure précision compte tenu du fait que les émissions réelles sont étroitement dépendantes des conditions opératoires réelles. Il est proposé d'utiliser les coefficients suivants pour un nombre limité de cas simplifiés (susceptibles d'évoluer avec l'état des connaissances) en fonction du combustible et accessoirement de la technologie. Dans certains cas qui le justifieraient, les données établies par le GIEC peuvent être utilisées.

En tout état de cause, ces valeurs restent accompagnées d'une incertitude élevée du fait de leur variabilité importante avec les conditions opératoires et les déclarations basées sur des données spécifiques mesurées périodiquement sont à encourager.

Valeurs en g/GJ	CH4	N2O
Charbon (tous types)	15	3
Bois, déchets de bois, déchets agricoles	32	4
Liqueurs noires	5	2,5
Fioul lourd	3	1,75
Déchets industriels solides	1	2,5
Fioul domestique	1,5	1,5
Gaz de raffinerie	2,5	1,75
Autres produits pétroliers	1,5	2,5
Déchets industriels liquides	1	2,5
Gaz naturel	4	2,5
Gaz aciérie	0	2,5
Gaz de cokerie	0,3	1,75
Gaz de haut-fourneau	0,3	1,75
Biogaz	1,5	1,75
Autres gaz industriels	1	2,5
Hydrogène	0	2,5

Attention : dans le cas du recours à une technique de lit fluidisé, les émissions de N2O sont considérablement plus élevées :

Pour le charbon, des valeurs comprises entre 20 et 100 g/GJ ont été observées.

Pour le lignite, des valeurs de 5 à 70 ont été mesurées.

Pour le bois, des valeurs de 14 à 165 ont déjà été constatées.

Dans le cas des lits fluidisés circulants, des mesures comprises entre 14 et 55 g/GJ ont été obtenues (moyenne 30) pour des installations de plus de 100 MW. On recommandera donc la mesure du N2O sur les installations équipées de lits fluidisés. A défaut, les valeurs recommandées dans le cadre de la taxe générale sur les activités polluantes peuvent être utilisées, soit :

Lit fluidisé haute température, installation < 100MW (thermique) 10

Lit fluidisé haute température, installation < 100 MW (thermique) 30

Lit fluidisé stationnaire 30

Lit fluidisé circulant 60

Pour ce qui concerne le méthane, le " catalytic woodstove " et le " non-catalytic modified combustion stove " réduisent respectivement de 90 % et de 50 % les émissions de méthane.