

PROJET PHYSIQUE :

Modélisation de la combustion de la biomasse



[0]

Angéla Tran
Romain Briet
Qixiao Chen
Nathan Lesourd

Cette page est laissée intentionnellement vierge.

Informations concernant le projet

Date de remise du rapport : *12 juin 2021*

Référence du projet : *STPI / P6 / 2021 - 07*

Intitulé du projet : *Modélisation de la combustion de la biomasse*

Type de projet : *recherches, documentation et modélisation numérique*

Objectifs du projet : *L'objet de ce projet est d'analyser le mécanisme de la combustion de la biomasse, en étudiant les modèles théoriques établis jusqu'à ce jour et en modélisant à notre tour ce phénomène grâce à des outils numériques. Ce projet a pour but de nous aider à comprendre tout le mécanisme de la combustion.*

Mots clés du projet : *Filière biomasse - Combustion - Énergie*

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Remerciements | 4 |
| Nomenclature | 5 |
| Introduction | 6 |
| Méthodologie, organisation du travail | 7 |
| 1 Théorie de la combustion de la biomasse | 8 |
| 1.1 Définitions et bases | 8 |
| 1.2 Les différents modèles au cours de l'histoire | 9 |
| 1.3 Modèle étudié et hypothèses | 10 |
| 2 Modélisation de la pyrolyse | 12 |
| 2.1 Modèles cinétique | 12 |
| 2.1.1 Un premier modèle cinétique (1) : | 12 |
| 2.1.2 Un second modèle cinétique (2) : | 13 |
| 2.2 Transferts thermiques et équation de la chaleur | 14 |
| 2.3 Les différents modes de résolution | 19 |
| 2.4 Algorithmes et optimisation | 22 |
| 3 Résultats obtenus et discussions | 23 |
| 3.1 Résultats pour le modèle (1) | 23 |
| 3.2 Résultats pour le modèle (2) | 26 |
| 3.3 Comparaison et discussions | 28 |
| Conclusion | 30 |
| Annexes | 31 |
| Références | 33 |

Remerciements

Nous tenons à remercier Monsieur Angel Alfonso Martinez, notre enseignant encadrant, qui nous a aidé à mener à bien notre projet. Il a su nous guider et nous aider dans nos recherches. Il est resté à notre écoute et disponible pour nos diverses questions. Nous le remercions pour son engagement et le temps qu'il nous a accordé.

Nos remerciements se tournent également vers l'INSA, pour nous avoir proposé et donné la possibilité de réaliser ce projet qui nous tenait à coeur.

Enfin, nous remercions chaque membre de ce groupe, sans qui il n'y aurait pas eu ce résultat.

Nomenclature

| | |
|---------------|--|
| α | Coefficient de diffusion thermique en m^2/s |
| ΔH | Chaleur apportée à la réaction en J/kg |
| Δx | Pas d'espace adimensionnel pour la matrice de résolution |
| $\Delta \tau$ | Pas de temps adimensionnel pour la matrice de résolution |
| ϵ | Coefficient d'émissivité (sans unité) |
| ρ | Densité en kg/m^3 |
| σ | Constante de Stefan-Boltzmann : $5,67.10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}$ |
| τ | Temps adimensionnel |
| θ | Température adimensionnelle |
| A_j | Coefficient d'Arrhenius pour la réaction j en s^{-1} |
| B | Biomasse séchée |
| C | Charbon |
| C_i | Concentration de l'espèce i en kg/m^3 |
| C_p | Capacité thermique massique en $J.K^{-1}.kg^{-1}$ |
| E_j | Energie d'activation pour la réaction j en $J.mol^{-1}$ |
| G_1 | Gaz 1 et volatiles |
| G_2 | Gaz 2 et volatiles |
| H | Nombre de Biot (sans unité) |
| h | Coefficient de convection thermique en $W.m^{-1}.K^{-1}$ |
| k | Conductivité thermique en $W.m^{-1}.K^{-1}$ |
| k_j | Constante de vitesse de la réaction j en s^{-1} |
| l | Longueur de la particule cylindrique de biomasse |
| n_j | Ordre de la réaction j |
| Q | Enthalpie de la réaction en m^3/kg |
| R | Rayon de la particule cylindrique de biomasse |
| r | Distance radiale en m |
| R_u | Constante molaire des gaz parfaits en $J.mol^{-1}.K^{-1}$ |
| T | Goudron |
| T | Température en K |
| t | Temps en s |
| T_0 | Température initiale en K |
| T_f | Température finale en K |
| x | Distance radiale adimensionnelle |

Introduction

L'un des plus grands défis du XXI^e siècle est de surmonter la pénurie de combustibles fossiles et de contrôler les émissions de gaz à effet de serre. Récemment, ce défi a incité les secteurs industriel et universitaire à examiner la faisabilité de l'utilisation des carburants renouvelables dans le cadre de projets nationaux et internationaux de grande envergure. L'utilisation de la biomasse (le bois, les écorces ou les bio-déchets) est un très bon moyen de créer de l'énergie renouvelable sans émission de CO₂. Elle est en plein essor et a de nombreuses applications dans la vie de tous les jours (poêles, chaudières,...). Par ailleurs, la biomasse peut être utilisée énergétiquement sous deux formes : soit sous forme de combustible, dans les chaudières ou équipements de même type, soit sous forme de carburant, dans les moteurs.

Dans le cadre de notre deuxième année de formation à l'INSA, il nous est demandé de réaliser un projet de physique en groupe. Ce projet a un objectif pédagogique très important, il permet aux étudiants d'appliquer leurs enseignements dans un cadre plus concret et nécessitant organisation et communication au sein d'un groupe. Pour que le travail soit de qualité, il faut que l'esprit de l'équipe soit au beau fixe et s'assurer de la bonne communication entre tous les acteurs du projet pour favoriser la performance collective.

Nous avons donc travaillé sur la réalisation du projet "Modélisation de la combustion de la biomasse". Ce projet nous a permis de mettre en application des notions acquises au cours de notre cycle "Sciences et Techniques pour l'ingénieur". En effet, des connaissances sur les transferts thermiques, la cinétique chimique ou encore l'informatique étaient nécessaires.

Enfin, le but de ce travail était de trouver différents modèles décrivant la combustion de la biomasse afin de prédire, du mieux que possible, les résultats expérimentaux de ce phénomène. Pour cela, nous avons modélisé numériquement ce processus.

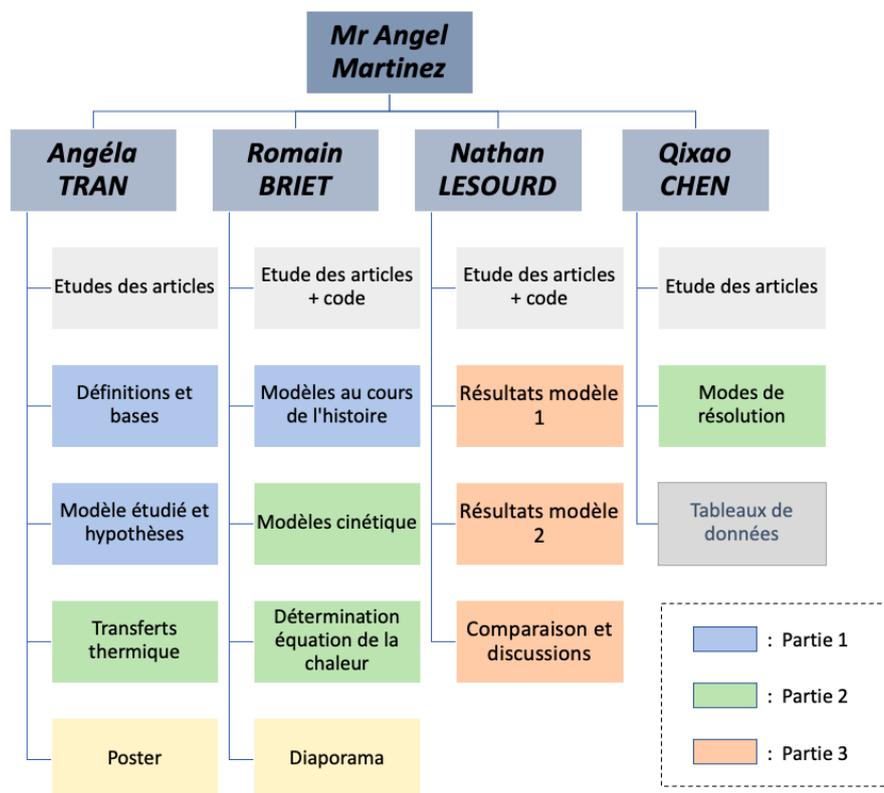
Méthodologie, organisation du travail

Afin de mener à bien le projet, il était primordial de mettre au point une organisation efficiente. En effet, il a fallu nous mobiliser de manière à ce que tous les acteurs de ce projet focalisent leur énergie pour atteindre les objectifs fixés. Nous avons du choisir les méthodes à employer pour travailler de la manière la plus efficace possible.

Ainsi, grâce aux conseils de notre Directeur de projet, nous avons suivi le calendrier suivant :

- **Février / Mars** : Documentation, bibliographie, recherches théoriques sur la combustion de la biomasse
- **Avril / Mai** : Modélisation numérique en codage Python pour vérifier les prédictions théoriques des modèles présentés, approfondissement de la documentation
- **Mai / Juin** : Rédaction du rapport, conception du poster, préparation de la soutenance orale.

Nous avons défini trois axes de travail pour notre sujet : la documentation, la modélisation numérique et la synthèse de la documentation, c'est-à-dire la rédaction du rapport. La réalisation des différentes parties de notre travail a été détaillée par l'organigramme présenté en *figure 1*. Il ne faut cependant pas oublier que ce projet est avant tout un projet de groupe où chaque membre a pu apporter son point de vue et son esprit critique sur les parties de ses coéquipiers.



Théorie de la combustion de la biomasse

1.1 Définitions et bases

La combustion de la biomasse désigne le fait de brûler des matières organiques (essentiellement végétales) pour produire de l'énergie. Selon Xu [14], la combustion de la biomasse comprend le processus de séchage, le processus de pyrolyse ou dévolatilisation s'il y a la présence d'oxygène, et le processus de combustion du charbon. Ces processus couvrent des transformations physiques et chimiques complexes, qui impliquent la combustion homogène de substances volatiles, la combustion hétérogène de charbon, le transfert de chaleur, le transfert de masse ainsi que la fusion des cendres. Les gaz volatiles sont un mélange : $\text{CO} + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{goudron (=benzène)} + \text{hydrocarbures (=méthane)}$. La plupart des matériaux de la biomasse sont chimiquement et physiquement hétérogènes, et leurs composants ont des réactivités différentes et donnent des produits différents [1].

Nous avons étudié plusieurs articles qui expliquaient ces différents mécanismes. Grâce à des scientifiques comme Xu, Zhai, Jin [14] en 2019 ou encore Porteiro, Granada et Collazo [7] en 2007, nous avons pu arriver à énumérer ces processus :

- **Séchage** : lorsque la particule est exposée à un environnement à haute température, la chaleur de l'environnement est transférée à la surface de la particule, ce qui augmente la température de la surface de la particule dans un premier temps. [1] Ensuite, la chaleur est transférée de la surface de la particule vers l'intérieur. Lorsque la température atteint la température de vaporisation, le processus de séchage commence et l'eau s'évapore. Si la teneur en humidité initiale est au-dessus du point de saturation des fibres (>30%), les pores contiennent de l'eau liquide. Au fur et à mesure du séchage, on arrive progressivement à la valeur de sorption maximale (plus d'eau liquide). [2] Le temps de séchage est le temps nécessaire pour perdre 95 % de l'humidité présente au sein de la particule. [7]
- **Pyrolyse** : qui consiste en la dégradation thermique de la matière première de la biomasse, en l'absence d'oxygène/air, conduisant à la formation de produits solides (charbon de bois), liquides (goudron et autres produits organiques) et gazeux. La particule de biomasse se décompose donc progressivement en résidus de charbon et en gaz volatils. Au cours du processus de pyrolyse, les pores du solide sont élargis ce qui favorise leur interaction avec le solide chaud et la particule solide devient simplement plus poreuse parce que la biomasse se transforme en gaz. [1]

Juste après le séchage, on observe une dévolatilisation s'il y a la présence d'oxygène. Pendant cette étape, il y a une libération de gaz légers et une perte de masse. L'oxygène se diffuse de l'environnement vers l'intérieur de la particule à travers les pores à l'intérieur de la particule. L'oxygène réagit avec le charbon, ce qui forme du dioxyde de carbone, du monoxyde de carbone, de l'eau et des résidus de cendres à la surface et à l'intérieur des pores de la particule [14]. L'étape de séchage s'arrête lorsque l'humidité s'évapore totalement (au moment

où la température centrale du granulé de biomasse atteint plus de 100°C), tandis que l'étape de dévolatilisation se termine lorsque la biomasse est totalement consommée (la température centrale du granulé commence à augmenter rapidement après un plateau) [5].

En l'absence d'oxygène, la pyrolyse est une étape clef dans la combustion de la biomasse et une majorité des articles publiés présentant une modélisation de la combustion de la biomasse étudient cette étape. Il s'agit de la décomposition chimique d'un composé organique par augmentation importante de la température. Selon Hemati et Laguerie [4], la température de pyrolyse du bois est toujours comprise entre 425 et 475°C. La pyrolyse peut se décomposer en 3 étapes : une décomposition primaire endothermique, une zone partielle exothermique et une zone de combustion endothermique. La pyrolyse rapide favorise la formation de produits volatils tandis que la pyrolyse lente favorise la formation de charbons d'après Stimely et Blankenhorn en 1984. Un de nos plus grands travaux a été d'étudier une multitude de modèles expérimentaux qui permettaient de déduire quels étaient les facteurs favorisant ou non la pyrolyse. La région de réaction de pyrolyse se déplace vers le centre de la particule au fur et à mesure de la progression de la réaction en laissant des couches de charbon thermiquement isolantes. Au sein de la pyrolyse, il peut y avoir des réactions secondaires : homogène dans le gaz (composants lourds de goudrons se fissurent en hydrocarbures plus légers) et hétérogène. Le bois sec perd environ 80% de sa masse lors de la pyrolyse. [2].

La durée totale de combustion de la biomasse est définie par le temps qui s'écoule entre le séchage et la fin de la combustion du charbon. Le temps de combustion total augmente linéairement avec la densité des particules [14]. L'augmentation de la densité ou de l'humidité des particules peut améliorer la combustion en raison de l'augmentation du temps de séjour. Enfin, plus la particule sera grande, et plus le rendement en charbon sera élevé. [10]

Enfin, lorsqu'un corps solide, comme du bois, brûle, cela se fait souvent de la manière suivante : l'humidité est évaporée (déshydratation), la chaleur de la flamme décompose la matière en molécules légères du type méthane, celles-ci brûlent avec le dioxygène de l'air. Il y a donc une combinaison pyrolyse/combustion d'un gaz, la combustion provoquant et entretenant la pyrolyse aussi longtemps qu'il reste de la matière à brûler.

1.2 Les différents modèles au cours de l'histoire

Le but de ce travail est donc de trouver différents modèles décrivant la combustion de la biomasse afin de prédire, du mieux que possible, les résultats expérimentaux. Le procédé de la combustion étant très complexe, de nombreux modèles ont été testés prenant en compte certains facteurs.

Aujourd'hui on pense que la première approche de modélisation a été réalisée par Bamford. Ce scientifique a réussi à mesurer l'évolution de la température au centre de morceaux de bois quand ceux-ci sont chauffés par leur côté. [7] Au cours du temps, de nombreux autres modèles ont été proposés afin d'enrichir le modèle initial. Différentes recherches scientifiques sont présentées ci-dessous.

Di Blasti a modélisé une approche pour la pyrolyse d'une particule de bois qui fait intervenir 3 réactions parallèles. [7] Il a également étudié l'influence des propriétés physiques de la dévolatilisation de la biomasse et en a conclu que les variations physiques affectent grandement les réactions secondaires. [6]

Thunman (en 2002) a présenté un modèle simplifié de la combustion en faisant une étude unidimensionnelle et en faisant dépendre les changements intra particulaire par les taux de transfert de chaleur et de masse depuis la surface de la particule. [7]

Babu et Chaurasia (en 2003) ont développé un modèle unidimensionnel en couplant les facteurs précédents et la description chimique de la pyrolyse de la biomasse. [7] Ils ont ainsi effectué une simulation qui a montré que certaines conditions de pyrolyse comme la taille des particules, la température, la vitesse de chauffage, le temps de séjour et même le type de biomasse avaient une grande importance sur les proportions de produits obtenus. [12]

Pyle et Zaror ont utilisé le modèle de Bamford pour définir l'importance du transfert de chaleur interne et externe ainsi que la cinétique de la pyrolyse. Ils ont utilisé un modèle cinétique du premier ordre basé sur la densité de la biomasse initiale. [1]

Miller et Bellan ont étudié l'influence de la température du réacteur, de la vitesse de chauffage, de la porosité, de la taille initiale de la particule mais aussi de la température initiale sur les rendements et la conversion du charbon. Il a alors été montré qu'une augmentation de vitesse de chauffage diminuait d'une part le rendement du charbon et d'une autre le temps de conversion pour la cellulose du bois. [6]

D'autres études (Fan, Miyunami) ont été effectuées sur la pyrolyse de la biomasse mais une majorité d'entre elles ne prenaient pas en compte les réactions secondaires pourtant essentielles pour comprendre au mieux le phénomène selon Kansa. [1]

Il faut cependant noter que le modèle que nous allons utiliser en majorité correspond au modèle de Thunman qui décrit l'évolution de la combustion par une désintégration superficielle des couches de la particule de biomasse.

1.3 Modèle étudié et hypothèses

Dans la suite de notre étude sur la combustion de la biomasse, nous avons décidé de nous concentrer sur l'une des dégradations de la biomasse : la pyrolyse. Pour cela, nous nous sommes appuyé sur un modèle développé par Babu et Chaurasia en 2003 (*voir figure 3 pour plus de détails*). Ils ont élaboré un modèle mathématique pour décrire la pyrolyse d'une seule particule solide de biomasse. Il couple l'équation de transfert de chaleur avec les équations de cinétique chimique. La vitesse de pyrolyse a été simulée par un schéma cinétique impliquant trois réactions (primaires et secondaires) : deux réactions parallèles et une troisième pour les interactions secondaires entre les produits volatils et gazeux et le charbon.

Le modèle précédent a pris en compte l'effet de la chaleur spécifique et de la conductivité thermique du charbon en fonction de la température. L'effet de la taille des particules et la variation de la condition limite au niveau de la paroi sont analysés. La variation des profils de température en fonction de la distance radiale et des différents moments du processus de pyrolyse est présentée pour une large gamme de températures.

Nous pouvons résumer le processus expérimental de cette pyrolyse en deux étapes, l'une primaire et l'autre secondaire. On chauffe la particule solide de biomasse dans une atmosphère inerte. La chaleur est d'abord transférée à la surface de la particule par rayonnement et/ou convection, puis à l'intérieur de la particule. Puis, la température à l'intérieur de la particule augmente, provoquant l'élimination de l'humidité présente dans la particule de biomasse (=

séchage). Au cours du processus de pyrolyse, les pores du solide sont élargis ce qui favorise leur interaction avec le solide chaud et la particule solide devient simplement plus poreuse parce que la biomasse se transforme en gaz. La réaction de pyrolyse se déroule à une vitesse qui dépend de la température locale.

Afin de réaliser cette étude, Babu et Chaurasia ont émis des hypothèses et ont simplifié le processus :

- Le profil de température est prédit par l'équation de transfert de chaleur proposée en utilisant la relation linéaire entre la température et le temps
- Le modèle développé a considéré l'effet de la chaleur spécifique et de la conductivité thermique du charbon en fonction de la température.
- La valeur moyenne du coefficient de transfert de chaleur par convection tirée des données expérimentales rapportées par Pyle et Zaror, est utilisée tout au long du projet
- Pour l'équation de la chaleur : le transfert thermique se fait dans la direction radiale uniquement et on ne considère ces transferts/flux par la conduction uniquement.

Les transferts thermiques se déroulant au niveau du pellet peuvent être représentés par la *figure 2* ci dessous. De même, tous les paramètres utilisés dans notre modélisation cinétique sont renseignés.

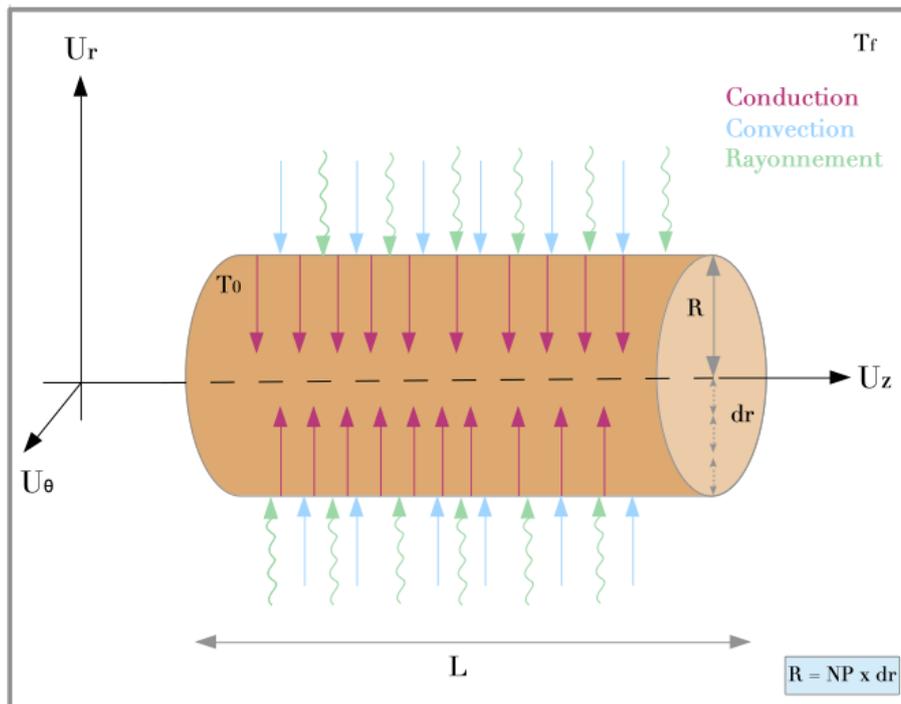


FIGURE 2 – Schéma du pellet

Modélisation de la pyrolyse

Il faut savoir qu'il existe de nombreux modèles, plus ou moins différents pouvant décrire l'étape de pyrolyse dans la combustion de la biomasse. Plus un modèle sera complexe et prendra en compte la majorité des facteurs, plus celui-ci sera précis et intéressant à développer.

2.1 Modèles cinétique

2.1.1 Un premier modèle cinétique (1) :

Intéressons nous tout d'abord à un premier modèle, décrit selon Babu et Chaurasia dans l'article [1]. Celui-ci prends en compte les éléments suivant :

- une particule de biomasse déjà séchée
- la formation de 2 produits majoritaires : le gaz et substances volatiles ainsi que le charbon en parallèle
- deux produits secondaires : du gaz 2 et du charbon 2 à partir du charbon 1 réagissant avec le gaz 1
- les réactions ont toutes un ordre (n_1 , n_2 et n_3).

Ce modèle peut alors être représenté par le schéma suivant :

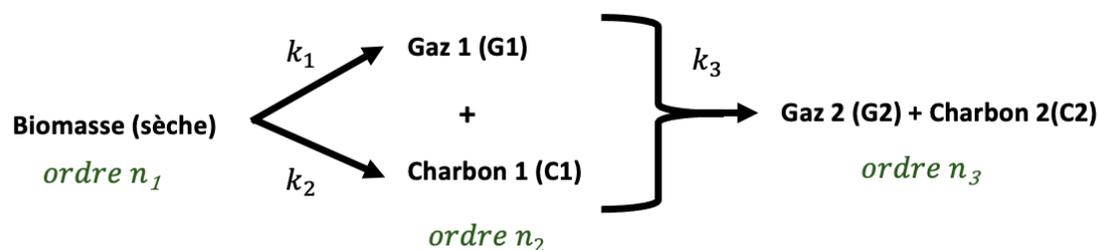


FIGURE 3 – Schéma de principe du premier modèle cinétique

Afin d'étudier la pyrolyse et observer l'évolution des différentes espèces au cours du temps, il est important d'établir un modèle cinétique. Nous avons alors utilisé nos connaissances de STPI2 pour établir les différentes équations de vitesse. Les équations de vitesse s'écrivent donc :

$$\begin{aligned}
 - \frac{dC_B}{dt} &= -(k_1 + k_2)C_B^{m_1} \\
 - \frac{dC_{G_1}}{dt} &= k_1C_B^{m_1} - k_3C_{G_1}^{m_2}C_{C_1}^{m_3} \\
 - \frac{dC_{C_1}}{dt} &= k_2C_B^{m_1} - k_3C_{G_1}^{m_2}C_{C_1}^{m_3} \\
 - \frac{dC_{G_2}}{dt} &= k_3C_{G_1}^{m_2}C_{C_1}^{m_3}
 \end{aligned}$$

$$- \frac{dC_{C_2}}{dt} = k_3 C_{G_1}^{m_2} C_{C_1}^{m_3}$$

On peut relier certaines de ces données à la variation de la densité de la particule par : $\frac{dC_B}{dt} + \frac{dC_{C_1}}{dt} + \frac{dC_{C_2}}{dt} = \frac{d\rho}{dt} = -k_1 C_B^{m_1} (0)$.

Pour chacun des réactifs, une constante de vitesse numérotée a été introduite. En étudiant les différents articles, nous nous sommes rendu compte que plusieurs relations pouvaient être utilisées pour la décrire. Nous avons alors fait le choix de les décrire par la loi d'Arrhenius donnée par la formule ci-dessous.

Loi d'Arrhenius :

$$k_i(T) = A_i e^{-\frac{E_i}{R_u T}}$$

avec :

- E_i : l'énergie d'activation en $J.mol^{-1}$
 - A_i : coefficient d'Arrhenius de même unité que k_i
 - T : température en K
 - R_u : constante molaire des gaz parfaits $8,314 J.mol^{-1}.K^{-1}$
-

Pour chaque constante, les grandeurs E et A ont été déterminées expérimentalement. Dans notre étude, nous avons utilisé des données fournies dans l'article [1]. Celles-ci ont été reportées sur le *tableau 1* disponible en annexes.

2.1.2 Un second modèle cinétique (2) :

Dans l'étude qui suit, nous allons nous intéresser à un second modèle, proposé par Park et Di Blasti, prenant en compte plusieurs facteurs :

- le séchage de la biomasse à partir d'un taux en humidité imposé
- la formation de 3 produits majoritaires : le gaz et substances volatiles, le goudron ainsi que le charbon à partir de la biomasse sèche
- le craquage thermique du goudron, c'est à dire la transformation du goudron en gaz, qui a été proposé par Di Blasti.

Ce modèle peut être représenté par le schéma suivant :

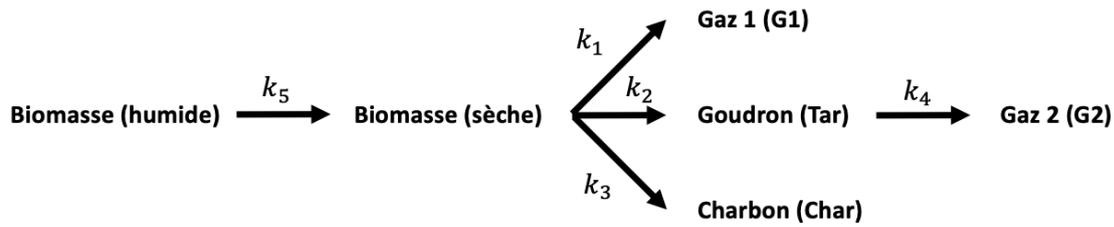


FIGURE 4 – Schéma de principe du second modèle cinétique

En faisant l'hypothèse que les ordres partiels par rapport à chacun des réactifs sont de 1, on peut là encore établir les différentes équations de vitesse à savoir :

$$- \frac{dC_B}{dt} = -k_1 C_B - k_2 C_B - k_3 C_B$$

$$- \frac{dC_C}{dt} = k_3 C_B$$

$$- \frac{dC_G}{dt} = k_1 C_B + k_4 C_T$$

$$- \frac{dC_T}{dt} = k_2 C_B - k_4 C_T$$

Pour représenter l'équation du séchage de la particule de biomasse, c'est-à-dire la disparition d'eau, on introduit k_5 tel que :

$$- \frac{dC_M}{dt} = -k_5 C_M$$

On peut également relier certaines de ces données à la variation de la densité de la particule par : $\frac{dC_B}{dt} + \frac{dC_C}{dt} + \frac{dC_T}{dt} = \frac{d\rho}{dt} = -k_1 C_B$ (0)

On peut noter que l'on obtient un résultat comparable pour le premier modèle. On utilisera ce résultat par la suite. Encore ici, les grandeurs E et A ont été déterminées expérimentalement. Dans notre étude, nous avons utilisé des données fournies par notre professeur. Celles-ci ont été reportées sur le *tableau 2*, également en annexes.

2.2 Transferts thermiques et équation de la chaleur

Une fois les modèles cinétiques permettant de décrire l'évolution des différentes espèces au cours de la pyrolyse établis, il est nécessaire d'incorporer un modèle thermique pour prendre en compte l'évolution de la température tout au long du phénomène. Il faut noter ici que ce modèle est identique pour les 2 cas étudiés.

À l'intérieur de la particule pyrolysante, la chaleur est transmise par les mécanismes suivants : conduction à l'intérieur de la particule solide, convection à l'intérieur des pores de la particule et convection et rayonnement à partir de la surface de la pastille. Cependant, on suppose que la chaleur est transmise à l'intérieur du solide par conduction uniquement afin de simplifier notre étude. Les changements de chaleur dus aux réactions chimiques et les changements de phase contribuent à un gradient de température en fonction du temps. Le flux de chaleur qui traverse la couche de charbon par conduction à partir de la surface externe de la particule

sert à fournir l'énergie nécessaire à l'entretien de la réaction chimique à la surface du noyau réactif, au réchauffement du gaz produit par la réaction et qui diffuse à travers la couche de charbon et à la variation d'énergie accumulée au sein du charbon et à l'intérieur du noyau réactif.

Dans le cadre de notre étude, nous avons décidé de travailler sur un échantillon de biomasse cylindrique, de rayon R , de longueur l et de distance radiale dr . Il faut savoir que le phénomène de pyrolyse est très complexe et possède une multitude de facteurs à considérer pour une modélisation. Nous avons donc dû, pour travailler convenablement, travailler avec plusieurs hypothèses. Il faut cependant noter que ces hypothèses permettent d'obtenir des résultats très proches des valeurs expérimentales fournies par Pyle et Zaror [1] et sont donc physiquement cohérentes. Les hypothèses de Xue Aijun [15] sont telles que :

- $l \gg R$: donc le transfert de chaleur s'effectue uniquement dans la direction radiale (pas de composantes en \vec{u}_θ et en \vec{u}_z)
- le goudron et les gaz quittent le pellet de manière constante dès qu'ils ont été générés. Par ce fait, les transferts thermique au sein de la particule de biomasse sont uniquement de nature conductive. En effet, on suppose que l'énergie est conduite sans déplacement macroscopique de la matière par propagation de proche en proche du mouvement d'agitation moléculaire à travers les pores.
- les transferts thermique entre la surface de la particule de biomasse et l'air sont de nature convective (les échanges thermiques se déroulant dans l'air en mouvement) et radiative (se produisant par l'émission de photons à la surface de la particule de biomasse).
- le volume du pellet reste constant au cours de la pyrolyse : on ne considère pas son rétrécissement afin de ne pas avoir de conditions limites variables
- la conductivité thermique interne est isotrope : elle présente les mêmes propriétés dans toutes les directions
- afin d'obtenir une température finale fixe, on considère que la température de la flamme reste constante dans toute la zone de pyrolyse
- de plus, on respecte les modèles cinétique précédemment utilisés avec $n_1 = 1$
- on travaille avec des particules de biomasse cylindrique ce qui nous donne impose le facteur géométrique $b = 2$ (dans notre étude, on utilisera directement cette donnée)

Encore ici, il est nécessaire d'imposer des valeurs propres à certaines données. Celles-ci seront données par les tableaux disponibles en *Annexes*.

Tout d'abord, nous allons devoir établir l'équation de la chaleur. Le bilan thermique dans le cas général donne :

$$\phi_{prod} = \phi_{stc} + \phi_{ech}$$

et sous son autre forme :

$$\iiint_V p \times dV = \iiint_V \frac{\partial}{\partial t} (C_p \times \rho \times T) dV + \iint_S \vec{\varphi} \cdot \vec{n} dS$$

et par le théorème de Green-Ostrogradski :

$$\iiint_V p \times dV = \iiint_V \frac{\partial}{\partial t} (C_p \times \rho \times T) dV + \iiint_V div(\vec{\varphi}) dV$$

$$\Leftrightarrow \iiint_V (p - \rho \times \frac{\partial}{\partial t}(C_p \times \rho \times T) - \text{div}(\vec{\varphi}))dV = 0$$

Pour que cette égalité soit valable quelque soit le domaine considéré on a :

$$p - \frac{\partial}{\partial t}(C_p \times \rho \times T) - \text{div}(\vec{\varphi}) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(C_p \times \rho \times T) = p - \text{div}(\vec{\varphi})$$

Le système étudié étant un solide, les échanges se réduisent au flux conductif, c'est à dire :
 $\vec{\varphi}_{\text{cond}} = -k \times \vec{\text{grad}}(T)$.

D'où :

$$\text{div}(\vec{\varphi}) = \text{div}(-k \times \vec{\text{grad}}(T)) = -k \times \text{div}(\vec{\text{grad}}(T)) = -k\Delta T$$

avec ΔT le Laplacien de T en coordonnées cylindriques : $\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$.

D'après notre hypothèse de départ, le transfert thermique s'effectue uniquement dans la direction radiale donc on prendra : $\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r}$.

On a finalement l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial}{\partial t}(C_p \times \rho \times T) = p + k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

On peut remplacer le terme de production p par $-\Delta H \left(\frac{d\rho}{dt} \right)$ qui correspond au flux de chaleur apporté, ce qui permet enfin d'exprimer la chaleur de la réaction dans l'équation tout en respectant les unités. Ici on place un signe négatif devant ΔH pour avoir un terme de production positif.

$$\frac{\partial}{\partial t}(C_p \times \rho \times T) = (-\Delta H) \left(-\frac{d\rho}{dt} \right) + k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

Comme ρ et T sont des fonctions dépendantes du temps, on peut développer l'équation précédente avec la dérivée d'un produit :

$$C_p T \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = (-\Delta H) \left(-\frac{d\rho}{dt} \right) + k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{(-\Delta H + C_p T)}{\rho C_p} \left(-\frac{d\rho}{dt} \right) + \frac{k}{\rho C_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (1)$$

On peut exprimer les conditions initiales et limites :

Condition initiale : pour $t = 0$, $T(r, t = 0) = T_0$

Conditions limites (aux bords) pour $t > 0$:

- au centre du pellet : $\overrightarrow{\varphi_{cond}}(r = 0) = -k \times \overrightarrow{grad}(T) = -k \left(\frac{dT}{dr}\right)_{r=0} \overrightarrow{u_r} = \overrightarrow{0}$ (imposé par la symétrie du pellet car on ne travaille que d'un côté) d'où : $\left(\frac{dT}{dr}\right)_{r=0} = 0$
- à la surface du pellet : $\overrightarrow{\varphi_{cond}}(r = R) = -k \times \overrightarrow{grad}(T) = -k \left(\frac{dT}{dr}\right)_{r=R} \overrightarrow{u_r} = \overrightarrow{\varphi_{conv}} + \overrightarrow{\varphi_{ray}}$ (représentant les échanges thermiques avec l'air à la surface) d'où : $-k \left(\frac{dT}{dr}\right)_{r=R} = h(T_f - T) + \sigma\varepsilon(T_f^4 - T^4) = (T_f - T)(h + \sigma\varepsilon(T_f^3 + T^2T_f + T_f^2T + T^3))$

Pour faciliter la résolution algorithmique, il a fallu réexprimer cette équation avec des paramètres sans dimension.

On note les paramètres vérifiant les équations :

- $\alpha = \frac{k}{\rho \times C_p}$
- $x = \frac{r}{R} \Leftrightarrow r = xR$
- $\tau = \frac{\alpha \times t}{R^2} \Leftrightarrow t = \frac{\tau R^2}{\alpha}$
- $\theta = \frac{T_f - T}{T_f - T_0} \Leftrightarrow T = T_f - \theta(T_f - T_0)$
- $H = \left(\frac{R}{k}\right) (h + \varepsilon\sigma(T_f^3 + T^2T_f + T_f^2T + T^3))$
- $Q = \frac{(-\Delta H) + C_p T}{\rho C_p (T_f - T_0)}$

Reste à réexprimer (1) en fonction des ces paramètres adimensionnels. Ce qui nous donne :

$$\frac{\partial(T_f - \theta(T_f - T_0))}{\partial\left(\frac{\tau R^2}{\alpha}\right)} = \frac{(-\Delta H + C_p T)}{\rho C_p} \left(-\frac{d\rho}{d\left(\frac{\tau R^2}{\alpha}\right)}\right) + \frac{k}{\rho C_p} \left(\frac{\partial^2(T_f - \theta(T_f - T_0))}{\partial(xR)^2} + \frac{1}{xR} \frac{\partial(T_f - \theta(T_f - T_0))}{\partial(xR)}\right)$$

En isolant les paramètres constants :

$$\begin{aligned} \frac{-(T_f - T_0)\partial\theta}{\frac{R^2}{\alpha}\partial\tau} &= \frac{(-\Delta H + C_p T)}{\rho C_p} \left(-\frac{d\rho}{\frac{R^2}{\alpha}d\tau}\right) + \frac{k}{\rho C_p} \left(\frac{-(T_f - T_0)\partial^2\theta}{R^2\partial x^2} + \frac{1}{xR^2} \frac{-(T_f - T_0)\partial\theta}{\partial x}\right) \\ \Leftrightarrow \frac{\partial\theta}{\frac{R^2}{\alpha}\partial\tau} &= \frac{(-\Delta H + C_p T)\alpha}{\rho C_p (T_f - T_0)R^2} \left(\frac{d\rho}{d\tau}\right) + \alpha \left(\frac{\partial^2\theta}{R^2\partial x^2} + \frac{1}{xR^2} \frac{\partial\theta}{\partial x}\right) \\ \Leftrightarrow \frac{\partial\theta}{\frac{R^2}{\alpha}\partial\tau} &= \frac{(-\Delta H + C_p T)}{\rho C_p (T_f - T_0)} \frac{\alpha}{R^2} \left(\frac{d\rho}{d\tau}\right) + \frac{\alpha}{R^2} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial\theta}{\partial x}\right) \\ \Leftrightarrow \frac{\partial\theta}{\partial\tau} &= \frac{(-\Delta H + C_p T)}{\rho C_p (T_f - T_0)} \left(\frac{d\rho}{d\tau}\right) + \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial\theta}{\partial x} \\ \Leftrightarrow \frac{\partial\theta}{\partial\tau} &= \frac{1}{x} \frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + Q \left(\frac{d\rho}{d\tau}\right) \quad (2) \end{aligned}$$

On peut exprimer les conditions initiales et limites sous cette forme adimensionnelle :

Condition initiale : pour $\tau = 0$, $\theta(x, \tau = 0) = 1$

Conditions limites (aux bords du pellet) pour $\tau > 0$:

– au centre du pellet : $\left(\frac{d\theta}{dx}\right)_{x=0} = 0$ (imposé par la symétrie du pellet car on ne travaille que d'un côté)

– à la surface du pellet :

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\theta}{dx}\right)_{x=1} &= \left(\frac{d\left(\frac{T_f - T}{T_f - T_0}\right)}{d\left(\frac{r}{R}\right)}\right)_{x=1} = \left(-\frac{R}{T_f - T_0} \frac{dT}{dr}\right)_{x=1} \\ \Leftrightarrow \left(\frac{d\theta}{dx}\right)_{x=1} &= \left(\frac{R}{T_f - T_0} \frac{1}{k} (T_f - T)(h + \sigma \varepsilon (T^3 + T^2 T_f + T_f^2 T + T_f^3))\right)_{x=1} = (\theta \times H)_{x=1} \end{aligned}$$

En utilisant le fait que $t = \frac{\tau R^2}{\alpha}$ et en le remplaçant dans (0), on a :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= \frac{d\rho}{d\left(\frac{\tau R^2}{\alpha}\right)} = \frac{d\rho}{\frac{R^2}{\alpha} d\tau} = -k_1 C_B \\ \Leftrightarrow \frac{d\rho}{d\tau} &= -\frac{k_1 \times R^2}{\alpha} C_B \quad (3) \end{aligned}$$

Enfin, on injecte (3) dans (2), ce qui nous donne :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{Q k_1 R^2 C_B}{\alpha} \quad (4)$$

En regardant de plus près ce dernier résultat, on peut facilement se rendre compte qu'au centre du pellet, c'est à dire en quand on fait tendre x vers 0, le résultat final tendra vers l'infini ce qui est physiquement impossible. La condition au centre n'est donc pas possible ici : il faut donc trouver un moyen de contourner ce problème. Pour cela, on utilise la *Règle de l'Hôpital* dans ce cas particulier :

Si $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = \lim_{x \rightarrow 0} g(x) = 0$

et si $\lim_{x \rightarrow 0} \left[\frac{g'(x)}{f'(x)}\right] = L$

Alors : $\lim_{x \rightarrow 0} \left[\frac{g(x)}{f(x)}\right] = L$.

Dans notre cas, on pose :

– $g(x) = \frac{\delta \theta}{\delta x} \Rightarrow g'(x) = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}$
 – $f(x) = x \Rightarrow f'(x) = 1$

On a bien $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = \lim_{x \rightarrow 0} g(x) = 0$ et $\lim_{x \rightarrow 0} \left[\frac{g'(x)}{f'(x)} \right] = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}$.

Donc $\lim_{x \rightarrow 0} \left[\frac{1}{x} \times \frac{\partial \theta}{\partial x} \right] = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}$.

Dans notre problème, à $x = 0$, on obtient donc au final :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{Qk_1 R^2 C_B}{\alpha} \quad (5)$$

À partir de ce point, il est possible de résoudre le problème initial et modéliser la pyrolyse.

2.3 Les différents modes de résolution

Les fonctions connues ont deux variables indépendantes : le temps et l'espace, la méthode d'Euler implicite peut donc être utilisée. Pour pouvoir résoudre notre problème, on utilise une grille discrète de θ dans une structure rectangulaire. Soit p l'étiquette de temps et i l'étiquette d'espace, $\Delta\tau$ est le pas de temps, Δx est le pas d'espace, P et M sont les valeurs maximales de p et m respectivement.

$$\theta_{\Delta x, \Delta \tau} = [(x_i, \tau_p) : x_i = i\Delta x, t_p = p\Delta\tau]_{i=1:M}^{p=0:P}$$

L'équation de conduction thermique est exactement établie sur le point de la grille (x, τ) , on a la forme générale :

$$\frac{\theta_i^{p+1} - \theta_i^p}{\Delta\tau} - 2 \frac{\theta_{i+1}^p - a\theta_i^{p+1} + \theta_{i-1}^{p+1}}{(\Delta x)^2} = f_i^{p+1} + 0((\Delta x)^2 + \Delta x)$$

On a les conditions limites pour $\tau > 0$ dans la partie 2.2 :

$$\left(\frac{d\theta}{dx} \right)_{x=0} = 0 \Leftrightarrow \frac{d\theta_1^p}{dx} = 0$$

$$\left(\frac{d\theta}{dx} \right)_{x=1} = \theta H \Leftrightarrow \frac{d\theta_M^p}{dx} = \theta_M^p H$$

Pour $x = 0$, c'est au centre du pellet, $\frac{d\theta_1^p}{dx} = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\theta_1^{p+1} - \theta_1^p}{\Delta\tau} &= 4 \frac{\theta_2^{p+1} - \theta_1^{p+1}}{(\Delta x)^2} + f_1^{p+1} \\ f_1^{p+1} &= 2 \frac{d^2 \theta_1^{p+1}}{dx^2} - \frac{QR^2 k_1 C_B^{m_1}}{\alpha} = - \frac{QR^2 k_1 C_B^{m_1}}{\alpha} \\ \frac{\theta_1^{p+1} - \theta_1^p}{\Delta\tau} &= \frac{4}{(\Delta x)^2} (\theta_2^{p+1} - \theta_1^{p+1}) - \frac{QR^2 k_1 C_B^{m_1}}{\alpha} \quad (6) \end{aligned}$$

Pour $0 < x < 1$, c'est sous la forme générale.

$$\frac{\theta_i^{p+1} - \theta_i^p}{\Delta\tau} = a \frac{\theta_{i+1}^{p+1} - 2\theta_i^{p+1} + \theta_{i-1}^{p+1}}{(\Delta x)^2} + f_i^{p+1}$$

$$f_i^{p+1} = \frac{1}{x_i} \frac{d\theta_i^{p+1}}{dx} + \frac{d^2\theta_i^{p+1}}{dx^2} - \frac{QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha} = \frac{1}{x_i} \frac{\theta_{i+1}^{p+1} - \theta_{i-1}^{p+1}}{2\Delta x} - \frac{QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha}$$

$$\frac{\theta_i^{p+1} - \theta_i^p}{\Delta\tau} = \frac{\theta_{i+1}^{p+1} - 2\theta_i^{p+1} + \theta_{i-1}^{p+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{x_i} \frac{\theta_{i+1}^{p+1} - \theta_{i-1}^{p+1}}{2\Delta x} - \frac{QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha} \quad (7)$$

Pour $x = 1$, c'est à la surface du pellet, $\frac{d\theta_M^p}{dx} = \theta_M^p H$

$$f_M^{p+1} = \frac{1}{x_M} \frac{d\theta_M^{p+1}}{dx} + \frac{d^2\theta_M^{p+1}}{dx^2} - \frac{QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha} = \theta_M^{p+1} H - \frac{QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha}$$

$$\frac{\theta_M^{p+1} - \theta_M^p}{\Delta\tau} = \frac{2\Delta x H(-\theta_M^{p+1} - 2\theta_{M-1}^{p+1} + 2\theta_{M-1}^p)}{(\Delta x)^2} + \theta_M^{p+1} H - \frac{QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha} \quad (8)$$

Réorganiser les équations. (6) - (8) donneront les ensembles d'équations suivants, ce qui facilitera la résolution numérique.

$$\left(\frac{4\Delta\tau}{(\Delta x)^2} + 1 \right) \theta_1^{p+1} + \left(-\frac{4\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) \theta_2^{p+1} = \theta_1^p - \left(\frac{\Delta\tau QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha} \right) \quad (9)$$

$$\left(\frac{\Delta\tau(1)}{2(\Delta x)x_i} - \frac{\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) \theta_{i-1}^{p+1} + \left(\frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} + 1 \right) \theta_i^{p+1} + \left(-\frac{\Delta\tau(1)}{2(\Delta x)x_i} - \frac{\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) \theta_{i+1}^{p+1}$$

$$= i\theta_i^p - \left(\frac{\Delta\tau QR^2k_1C_B^{n_1}}{\alpha} \right) \quad (10)$$

$$\left(-\frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) \theta_{M-1}^{p+1} + \left(\frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} + 1 + \frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} H + \Delta\tau H \right) \theta_M^{p+1} = \theta_M^p + \left(\frac{\Delta^2 k_1 C_B^{n_1}}{\alpha} \right) \quad (11)$$

Par conséquent, nous avons un ensemble de M équations algébriques simultanées linéaires et de M inconnues, qui peuvent être facilement résolues par des méthodes numériques standard. Dans la présente étude, l'algorithme de matrice tri-diagonale (TDMA), également connu sous le nom d'algorithme de Thomas, est utilisé pour résoudre l'ensemble des équations (9) - (11).

Soit $u \times v = w$ où

$$u = \begin{bmatrix} \left(\frac{4\Delta\tau}{(\Delta x)^2} + 1 \right) & \left(-\frac{4\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) & & & 0 \\ \dots & \dots & \dots & & \\ & \left(\frac{\Delta\tau}{2(\Delta x)x_i} - \frac{\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) & \left(\frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} + 1 \right) & \left(-\frac{\Delta\tau}{2(\Delta x)x_i} - \frac{\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) & \\ & & \dots & \dots & \\ 0 & & & \left(-\frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} \right) & \left(\frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} + 1 + \frac{2\Delta\tau}{(\Delta x)^2} H + \Delta\tau H \right) \end{bmatrix}$$

$$v = \begin{bmatrix} \theta_1^{p+1} \\ \dots \\ \theta_i^{p+1} \\ \dots \\ \theta_M^{p+1} \end{bmatrix}$$

$$w = \begin{bmatrix} \theta_1^p - \left(\frac{\Delta\tau QR^2 k_1 C_B^{n_1}}{\alpha} \right) \\ \dots \\ i\theta_2^p - \left(\frac{\Delta\tau QR^2 k_1 C_B^{n_1}}{\alpha} \right) \\ \dots \\ M\theta_M^p - \left(\frac{\Delta\tau QR^2 k_1 C_B^{n_1}}{\alpha} \right) \end{bmatrix}$$

Afin de fixer les valeurs de $\Delta\tau$ et Δx , les résultats sont obtenus pour différentes valeurs de M allant de 26 à 176. Pour $\Delta\tau = 0,01$ et des valeurs de $M = 151$ et $M = 176$, les résultats sont les mêmes. Ainsi, afin de gagner du temps informatique, $M = 151$, c'est-à-dire ($\Delta x = 1/M$) est utilisé dans la présente étude.

Les profils de température obtenus à partir du modèle de transfert de chaleur, basés sur les conditions initiales, servent d'entrée au modèle de cinétique chimique. Les cinq équations dans la partie 2.1.1 sont résolues par la méthode du quatrième ordre de Runge – Kutta et la méthode de taille de pas variable de Runge – Kutta. On constate que la méthode de taille de pas variable de Runge – Kutta est plus rapide que la méthode de quatrième ordre, comme discuté par Babu et al., mais la méthode de taille de pas variable de Runge – Kutta ne donne pas la solution pour un intervalle de temps particulier et fixe. Par conséquent, pour obtenir la solution à un intervalle de temps particulier, ce qui est nécessaire pour comparer les résultats de la présente étude avec ceux rapportés dans la littérature, la méthode du quatrième ordre de Runge-Kutta avec un pas fixe est utilisée dans la présente étude.

Soit f_n et g_n les fonctions dérivées

$$f_1 = \frac{dC_B}{dt} = -k_1 C_B - k_2 C_B$$

$$f_2 = \frac{dC_{G_1}}{dt} = k_1 C_B^{m_1} - k_3 C_{G_1}^{m_2} C_{C_1}^{m_3}$$

$$f_3 = \frac{dC_{C_1}}{dt} = k_2 C_B^{n_1} - k_3 C_{G_1}^{m_2} C_{C_1}^{m_3}$$

$$f_4 = \frac{dC_{G_2}}{dt} = k_3 C_{G_1}^{m_2} C_{C_1}^{m_3}$$

$$f_5 = \frac{dC_{C_2}}{dt} = k_3 C_{G_1}^{m_2} C_{C_1}^{m_3}$$

$$C_{n+1} = C_n + (g_1 + 2g_2 + 2g_3 + g_4) \frac{h}{6} \text{ où}$$

$$g_1 = f(t_n, C_n)$$

$$g_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, C_n + g_1 \frac{h}{2})$$

$$g_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, C_n + g_2 \frac{h}{2})$$

$$g_4 = f(t_n + h, C_n + g_3 h)$$

2.4 Algorithmes et optimisation

Il faut savoir que, pour le cas 2, nous avons décidé de ne pas nous intéresser à l'étude des équations concernant le séchage. Nous remercions donc notre professeur encadrant de nous avoir fournis toutes les données nécessaires à sa résolution algorithmique.

A partir de ce point, nous avons pu travailler sur la résolution algorithmique du problème. Dès le début de notre étude, nous nous sommes rendus compte de la difficulté de notre projet. Nous avons à construire des courbes pouvant décrire l'évolution de plusieurs facteurs. Avec nos connaissances en informatique en *Pascal* des précédents semestres, il nous était impossible de créer l'intégralité d'un algorithme dans le temps imparti. Nous avons alors eu l'opportunité d'étudier plusieurs algorithmes fournis par notre professeur encadrant.

Cependant, nous nous sommes vite rendus compte d'une nouvelle complexité : le langage de programmation. En effet, pour cause de simplicité pour la résolution algorithmique, ceux-ci nous ont été fournis en *Python*. Il nous a donc fallu apprendre et comprendre ce nouveau langage afin de le réutiliser pour y effectuer les modifications souhaitées. L'apprentissage du code s'est effectué tout au long de notre projet et nous avons donc pu obtenir des résultats de plus en plus précis et rigoureux. De plus, pour tracer les graphiques souhaités, nous avons dû apprendre le fonctionnement de ce nouveau mode de programmation afin d'optimiser le code et ainsi obtenir le plus efficacement possible les résultats.

Il faut savoir que pour réaliser les deux cas de figures, nous avons utilisé des codes distincts qui possédaient cependant certaines similitudes (comme la résolution pour l'évolution de la température).

Afin d'avoir le code le plus performant possible, nous avons décidé de le diviser en 3 fichiers, tous liés entre eux. Un premier contenant le programme principal qui, pour chaque itération, va calculer la concentration des différentes espèces au cours du temps et de nombreux autres paramètres comme la capacité thermique de la biomasse. Celui-ci va également résoudre l'équation de la température et tracer les différentes courbes, adimensionnelles ou non. Le second fichier contient quant à lui les différentes fonctions appelées dans le programme principal comme celles définissant le modèle cinétique utilisé, la résolution de la cinétique chimique chimique, la concentration des différentes espèces mais aussi tout ce qui permet de résoudre l'équation de température. Enfin, le dernier décrit les différents paramètres de calculs de l'algorithme avec les différentes constantes.

Résultats obtenus et discussions

Nous allons maintenant voir dans cette partie les résultats obtenus par l'étude précédente. Afin d'obtenir des résultats cohérents, nous avons utilisé certaines valeurs connues et disponibles dans la littérature scientifique. Celles-ci ont été répertoriées en *Annexes*. Le *tableau 3* montre les différentes constantes et valeurs qui ont été utilisés pour les 2 modèles. On peut remarquer que la diffusivité thermique est considérée comme constante et est basée sur la température initiale du bois, qui est une valeur représentative en pyrolyse. Le *tableau 4* montre les paramètres algorithmiques utilisés pour la réalisation des graphiques. Enfin, les *tableaux 5 et 6* représentent respectivement les valeurs des paramètres pour le premier et deuxième cas.

3.1 Résultats pour le modèle (1)

Dans la section précédente nous avons étudié précisément comment était construit les différents modèles cinétiques. Nous allons maintenant nous intéresser aux différents résultats que l'on peut obtenir grâce au programme python. Dans un premier temps nous utiliserons le code utilisant le premier modèle cinétique (voir figure 3 pour plus de détails).

Avant de pouvoir commencer l'étude, il faut pouvoir valider notre code. Deux solutions se présentent à nous, soit obtenir directement les résultats à travers une expérience en laboratoire, soit comparer avec des articles qui recensent des données déjà obtenues. Nous avons opté pour la seconde solution pour sa simplicité et par soucis d'économie. Par conséquent, nous allons comparer les résultats obtenus avec le code avec ceux de l'article *Modeling for pyrolysis of solid particle : kinetics and heat transfer effects* [1]

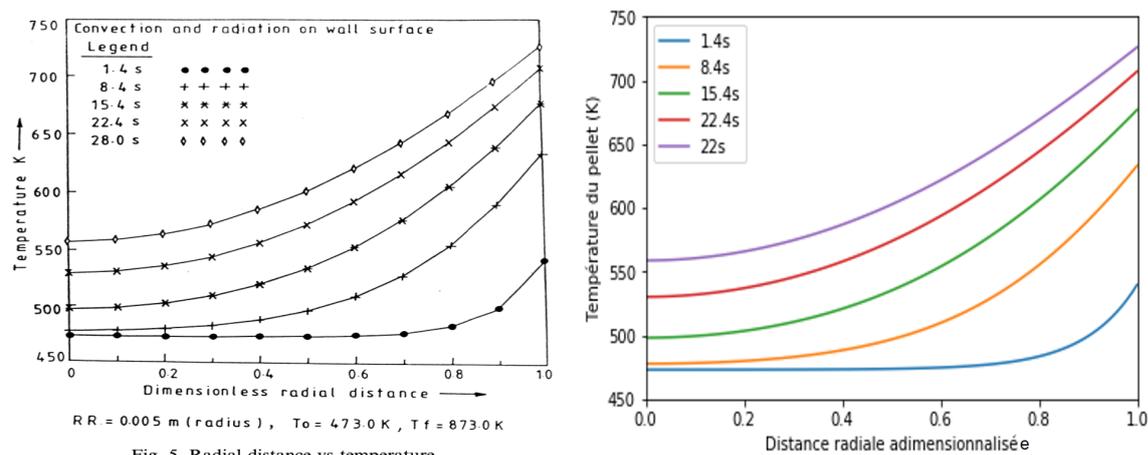


FIGURE 5 – Evolution de la température du pellet en fonction de la distance radiale

Les allures des courbes obtenues avec le code sont en accord avec le graphique de l'article. Ainsi, notre code comprenant les différentes fonctions dont le modèle cinétique, la paramétrisation du modèle et la résolution des concentrations et des températures est validé. Nous pouvons continuer son étude sereinement.

Pour commencer, il serait intéressant de voir l'évolution des concentrations des différentes espèces. Gardons en tête que l'évolution des concentrations ne dépend pas uniquement du modèle cinétique mais aussi de la paramétrisation de la combustion. Nous avons fixé les coefficients d'ordres de réaction (n_1 , n_2 et n_3) et fait varier le rayon du pellet.

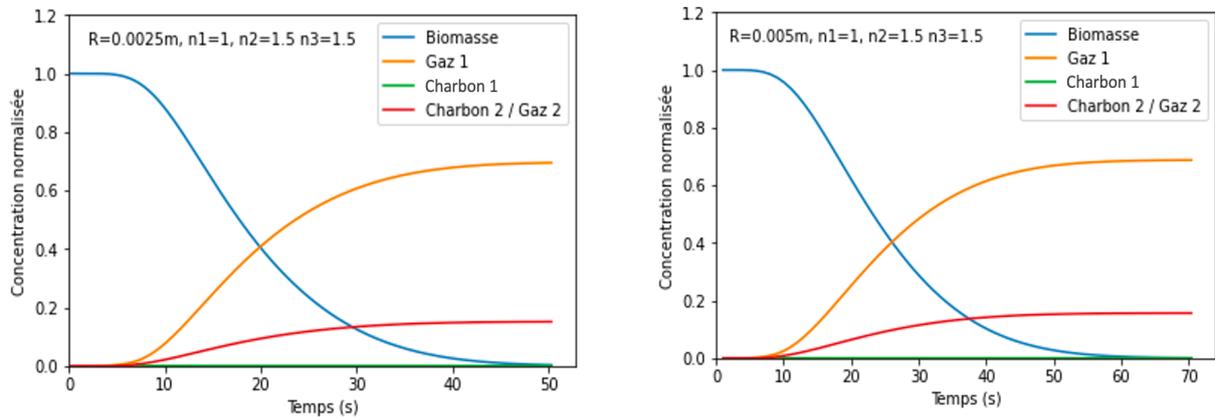


FIGURE 6 – Evolution de la concentration des espèces en fonction du temps

On retrouve les espèces vues précédemment dans le schéma de principe du modèle cinétique. Néanmoins, on constate que la concentration normalisée du goudron n'évolue pas et reste nulle. Pour rappel, la pyrolyse prend fin lorsque la concentration de la biomasse est égal à 0. Graphiquement, on obtient respectivement 50 secondes et 65 secondes pour le temps d'accomplissement de la pyrolyse. Ainsi, plus le rayon du pellet est petit plus la pyrolyse s'achève rapidement. Expérimentalement, cette constatation est tout à fait cohérente. En effet, si l'on considère deux objets étant d'une même matière l'un grand et l'autre plus petit, c'est l'objet le plus petit qui s'enflamme le plus rapidement (synonyme de fin de pyrolyse).

Regardons l'impact des coefficients n_1 , n_2 et n_3 lors de la combustion de la biomasse. Pour cela, nous conservons les précédents paramètres avec le rayon du pellet égal à 0,005 m et nous modifions uniquement la valeur de n_1 .

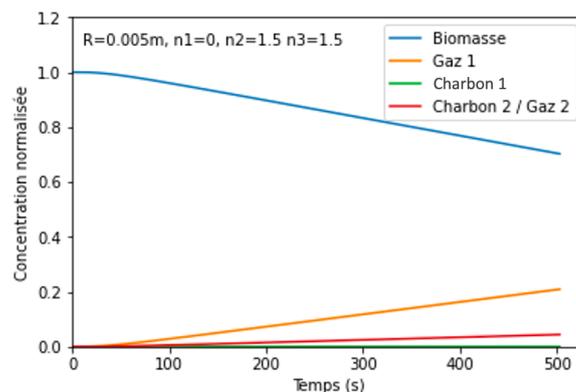


FIGURE 7 – Evolution de la concentration des espèces en fonction du temps

Le constat est sans appel, le temps d'accomplissement de la pyrolyse est bien supérieur lorsqu'on diminue n_1 de 1 à 0. Cette grande variation de temps s'explique par le fait que les ordres de réactions (n_1 , n_2 et n_3) conditionnent la cinétique chimique et l'influence de l'espèce en question. On voit bien que si l'on néglige l'influence de la réaction de la biomasse, l'évolution des concentrations n'est pas du tout la même. Comme l'explique Babu et Chaurasia [1], si l'on fixe n_1 proche de 0 alors le modèle devient indépendant de la concentration initiale du pellet. Afin de modéliser le plus fidèlement possible la réalité nous fixons pour la suite de cette étude $n_1=1$, $n_2=1.5$, $n_3=1.5$.

Pour continuer d'appréhender ce modèle nous allons maintenant nous intéresser à l'évolution de la température du pellet en son centre et à sa surface.

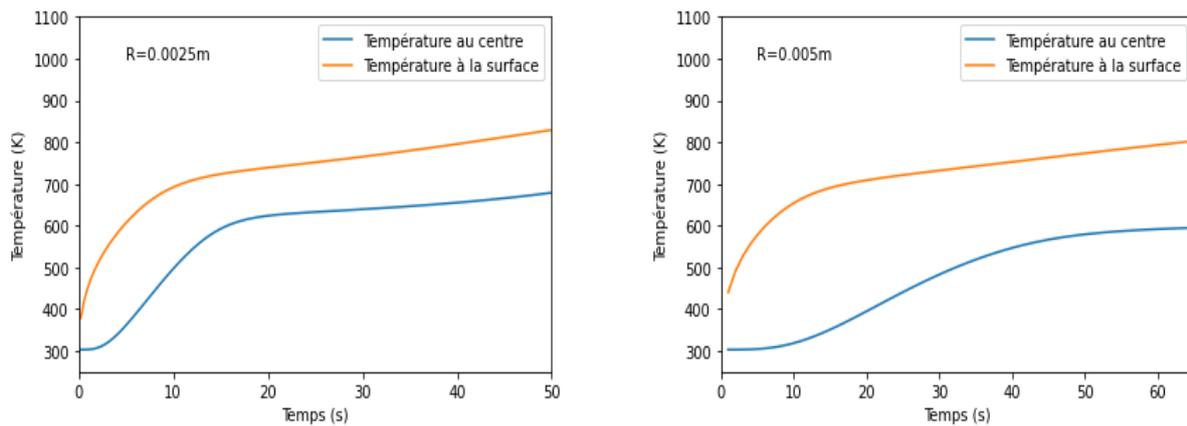


FIGURE 8 – Evolution de la température du pellet en fonction de la distance radiale

Nous pouvons constater que le rayon n'a pas d'impact sur l'évolution de la température à la surface du pellet. En revanche, il a un fort impact sur l'évolution de la température au centre du pellet. Nous pouvons expliquer cette différence d'évolution par le fait que le pellet n'est pas un conducteur idéal, sa conductivité est finie. Par conséquent la transmission de chaleur n'étant pas instantanée, on observe comme dans le deuxième graphique un retard lorsqu'on augmente le rayon.

Maintenant que nous avons étudié l'évolution de la température à la surface et au centre du pellet, il serait intéressant de regarder l'évolution de la température en fonction de la distance radiale à un instant donné. On considère l'instant où se complète la pyrolyse.

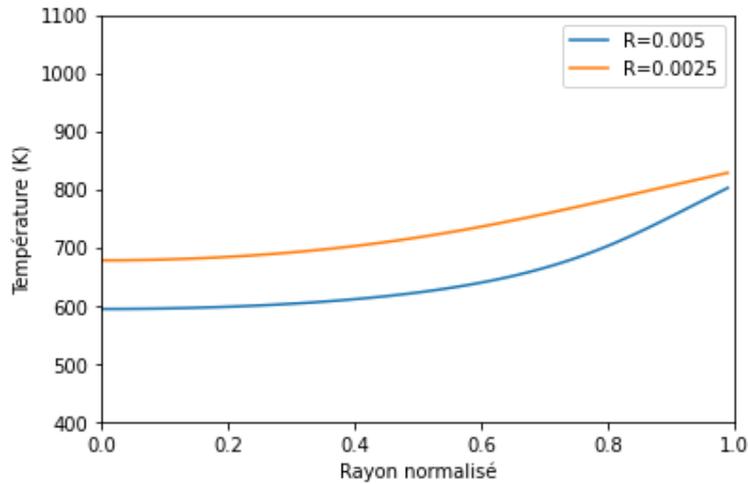


FIGURE 9 – Température de pellet en fonction de la distance radiale

On observe des allures semblables. De plus, on retrouve bien la notion de conduction à travers ce graphique.

Enfin, terminons l'étude de ce modèle avec l'évolution de la masse totale du pellet pour appréhender les différentes phases lors de la pyrolyse. La verticale grise indique la fin de la pyrolyse. Nous expliquerons plus précisément comment nous avons obtenu ce graphique avec le second modèle cinétique.

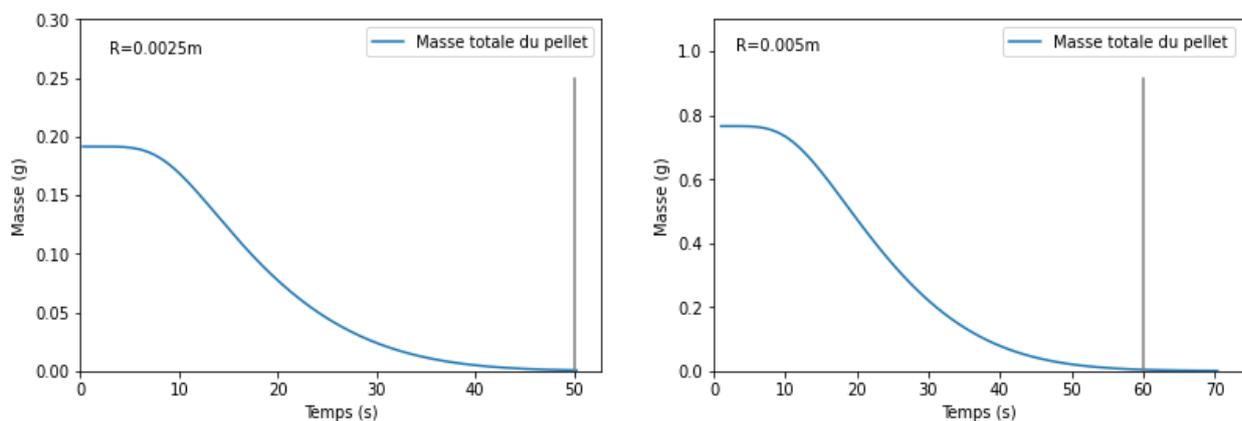


FIGURE 10 – Evolution de la masse totale du pellet en fonction du temps

3.2 Résultats pour le modèle (2)

Dans un second temps, nous allons nous intéresser au deuxième modèle cinétique décrit précédemment (voir figure 4 pour plus de détails). Contrairement au premier modèle, nous n'avons pas besoin de nous intéresser aux ordres des réactions puisqu'il ne le prend pas en compte.

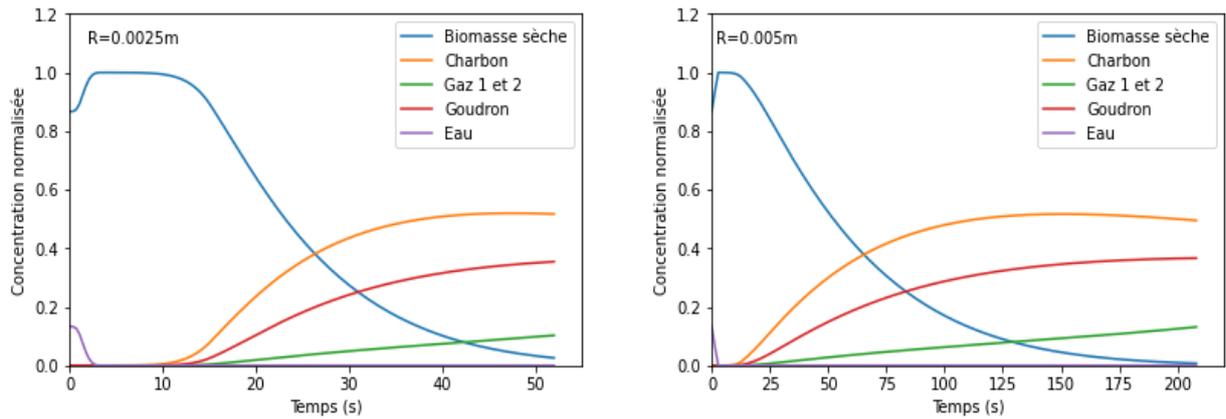


FIGURE 11 – Evolution de la concentration des espèces en fonction du temps

Regardons dès à présent l'évolution des concentrations des différentes espèces en fonction du temps pour deux valeurs de rayon.

On retrouve la même corrélation qu'avec le premier modèle, plus on augmente le rayon du pellet plus la pyrolyse est longue. Cette fois-ci, aucune concentration normalisée reste nulle.

Il faut tout de même surligner le fait que ce modèle prend en considération le séchage de la biomasse. Initialement la biomasse n'étant pas sèche, il y a présence d'eau. Par conséquent, il est possible de suivre l'évolution de la concentration d'eau et donc d'étudier la période de séchage. Mais avant, il faut fixer le taux d'humidité initial du pellet qui correspond au quotient de la concentration massique d'eau par la concentration massique de biomasse au sein du pellet. En moyenne, on considère le taux d'humidité du bois à 13% en été et 19% en hiver. Pour avoir un taux d'humidité s'approchant de 15%, on fixe $C_{M_0} = 100 \text{ kg/m}^3$.

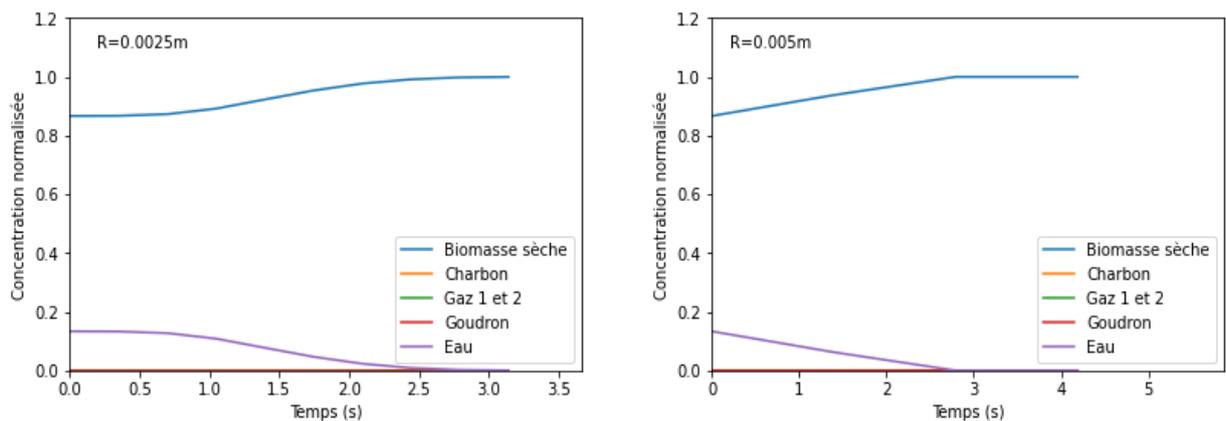


FIGURE 12 – Evolution de la concentration des espèces en fonction du temps lors du séchage

Les deux graphiques sont ni plus ni moins des zooms des deux précédents graphiques. En ayant réduit l'axe des abscisses, on constate que la période de séchage est sensiblement la même pour les deux rayons considérés. De plus, on remarque que la phase de séchage corres-

pond en valeur relative à 1,5% du temps de la pyrolyse dans le cas où $R=0,005$ m. La question se pose, peut-on négliger la phase de séchage ?

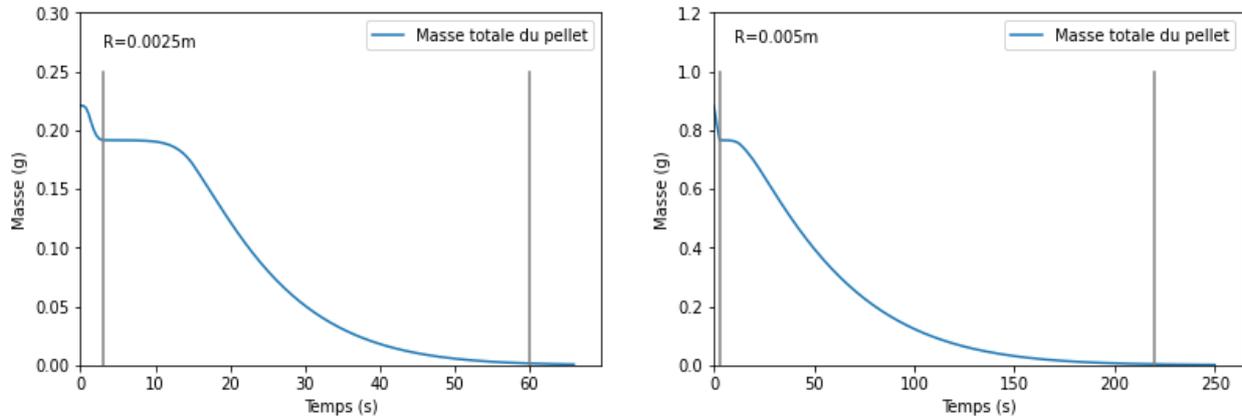


FIGURE 13 – Evolution de la masse totale du pellet en fonction du temps

Pour finir, voici deux graphiques qui suivent l'évolution de la masse totale du pellet en fonction du temps. Pour obtenir ce graphique, nous avons utilisé l'évolution des concentrations massique de la biomasse et de l'eau que nous avons multiplié par le volume du pellet. Celui-ci s'obtient avec la formule suivante : $V = \pi R^2 L$. Pour l'étude du pellet nous avons fixé la longueur du pellet égal à 0,015 m. Grâce à ces graphiques, nous pouvons identifier les différentes phases : le séchage, la pyrolyse et enfin la combustion du charbon s'il y a présence d'oxygène. Comme vu précédemment, le temps de séchage est très court mais il présente une forte diminution de masse dû à l'évaporation de l'eau. Cela permet aussi de constater que la combustion se fait à partir du charbon produit par la pyrolyse.

3.3 Comparaison et discussions

L'objectif d'un modèle est d'avoir des résultats qui s'approchent le plus possible de la réalité. Comparons nos deux modèles cinétiques pour voir les différences et les similitudes qu'ils présentent afin de décrire le plus fidèlement possible le comportement du pellet lors de la combustion de la biomasse.

Les deux modèles cinétiques sont fondamentalement différents. En effet, on ne considère pas les mêmes réactions chimiques. Par conséquent, l'évolution des concentrations des réactifs et des produits ne sera pas la même. De plus, le second modèle prend en compte le séchage du pellet tandis que le premier le néglige. Ces différences dans la paramétrisation du problème amènent à des différences notables dans les calculs de température dans le pellet à un instant donné.

Restons pour le moment avec une vision globale de la modélisation de ce problème. Les deux modèles cinétiques arrivent à la même conclusion, plus le rayon du pellet est grand plus la pyrolyse est longue. Plus le rayon du pellet est grand plus la conductivité du pellet entre en jeu. Nous retrouvons les affirmations de Babu et Chaurasia [1].

Si l'on regarde maintenant de plus près les résultats des deux modèles on commence à voir des différences considérables. Pour R égal à 0.0025 m, les résultats convergent vers 50 secondes

pour le temps de pyrolyse. En revanche pour R égal à 0.005 m, le premier modèle nous donne 65 secondes contre 200 secondes pour le second. Se pose alors la question : la différence vient-elle de la construction des deux modèles ou alors d'une mauvaise paramétrisation du code python ? Cette question semble difficile à répondre puisque nous ne disposons pas de résultats expérimentaux supplémentaires. Une première solution est donnée dans l'article [15]. En effet, le deuxième modèle intégrant la phase de séchage fonctionnerait uniquement pour des faibles rayons, de l'ordre de 0.001 m.

Enfin, abordons les avantages et inconvénients des deux modèles pour en déduire des axes d'amélioration. Le grand avantage du premier modèle est que l'on peut modifier les ordres des réactions afin de mettre plus ou moins en avant une réaction. On ne peut pas lui reprocher le fait de prendre en compte le goudron comme produit car il pourrait se produire avec une autre paramétrisation du modèle. Vient ensuite le second modèle qui se caractérise par un modèle cinétique plus simple mais qui prend en compte le séchage de la biomasse. Dans notre cas, ce séchage n'a pas une grande influence sur le temps d'accomplissement de la pyrolyse et l'évolution des concentrations. On peut regretter un manque de flexibilité du modèle cinétique qui ne dispose pas d'ordre de réaction.

Conclusion

Face au pic pétrolier et au danger de l'effet de serre, les énergies renouvelables et en particulier la biomasse-énergie font l'objet d'un intérêt accru pour notre avenir. L'étape de pyrolyse est une étape clef dans la combustion de la biomasse. Celle-ci a été largement étudiée au cours des dernières années par de nombreux scientifiques et c'est pour cela qu'il a été intéressant de faire des recherches dessus. A l'aide de nos connaissances acquises lors de ces deux premières années à l'INSA, nous avons pu comprendre les différentes études menées et approfondir certains phénomènes et réactions utilisés.

A partir des différentes hypothèses posées et en exécutant les différents algorithmes, nous avons pu obtenir des résultats proches d'approches expérimentales, qui nous permettent de valider le premier modèle. Cependant, avec plus de temps disponible, nous aurions aimé développer davantage nos résultats sur la pyrolyse mais aussi nous intéresser à la combustion en elle-même et la modéliser.

En travaillant sur ce projet, nous avons pu développer de nombreuses connaissances dans de nombreux domaines qui nous étaient encore inconnus. Tout d'abord, ce projet nous a permis d'approfondir notre esprit critique sur les informations trouvées dans de nombreux ouvrages littéraires. En effet, lors de notre étude bibliographique, nous avons dû comparer les différents écrits et croiser ces nouvelles connaissances pour avoir une interprétation du phénomène de la combustion la plus précise possible. Afin d'obtenir nos résultats, nous avons dû comprendre et apprendre un nouveau langage de programmation : *Python*, ce qui nous a posé certains problèmes. Il faut savoir qu'il a été difficile de faire fonctionner ce programme sur toutes nos machines. Avec les restrictions sanitaires toujours en place lors de la réalisation du Projet Physique, il n'a parfois pas été très simple de communiquer entre nous sur son avancée. Cependant chacun d'entre nous était toujours volontaire et disponible pour se retrouver afin de poursuivre les recherches, ce qui nous a donc permis d'être efficace.

Cette nouvelle façon de travailler sur un projet de groupe nous a été à tous très bénéfique tant sur le point de vue intellectuel que sur l'autonomie. Selon nous, ce projet nous a permis de développer des connaissances et des compétences indispensables pour exercer notre futur métier d'ingénieur. De plus, ce projet nous a permis de réaliser en quoi consistait le raisonnement et la démarche d'un ingénieur, c'est-à-dire de pousser notre réflexion, notre esprit critique et notre argumentation au maximum et trouver des solutions innovantes face à des problèmes. Nous pouvons donc dire que cette expérience a été très valorisante au sein de notre cursus de formation INSA.

Annexes

Tableau 1

Valeurs des paramètres cinétiques pour le premier cas [1]

| Numéro de la réaction | A_j en s^{-1} | E_j en $J.mol^{-1}$ |
|-----------------------|-------------------|-----------------------|
| 1 | $9,973.10^{-5}$ | ----- |
| 2 | $1,068.10^{-3}$ | ----- |
| 3 | $5,7.10^5$ | 81000 |

Tableau 2

Valeurs des paramètres cinétiques pour le second cas

| Numéro de la réaction | A_j en s^{-1} | E_j en $J.mol^{-1}$ |
|-----------------------|-------------------|-----------------------|
| 1 | $4,38.10^9$ | 152700 |
| 2 | $1,08.10^{10}$ | 148000 |
| 3 | $3,27.10^7$ | 111700 |
| 4 | $4,28.10^6$ | 107500 |
| 5 | $5,13.10^{10}$ | 88000 |

Tableau 3

Valeurs des paramètres utilisées dans la solution numérique des 2 modèles [1]

| Propriété | Valeurs |
|--|--|
| Coefficient de transfert de chaleur par convection | $h = 8,4 W/m^2 K$ |
| Capacité thermique massique du bois | $C_p = 1112,0 + 4,85(T - 273) J/kg K$ |
| Capacité thermique massique du charbon | $C_{pc} = 1003,2 + 2,09(T - 273) J/kg K$ |
| Capacité thermique massique de l'eau | $C_a = 4117,2 + 0,09(T - 273) J/kg K$ |
| Conductivité thermique du bois | $k = 0,13 + 0,0003(T - 273) W/mk K$ |
| Conductivité thermique du charbon | $k_c = 0,08 + 0,0003(T - 273) W/m K$ |
| Conductivité thermique de l'eau | $Ka = 0,571 + 0,002(T - 273) W/m K$ |
| Chaleur de la réaction | $\Delta H = -255000 J/kg$ |
| Densité initiale du bois | $\rho_0 = 650 kg/m^3$ |
| Diffusivité thermique initiale du bois | $\alpha = 1,79.10^{-7} m^2/s$ |
| Coefficient d'émissivité | $\varepsilon = 0,95$ |
| Constante de Stefan Boltzmann | $\sigma = 5,67.10^{-8} W/m^2 K^4$ |
| Facteur géométrique | $b = 2$ |
| Température initiale | $T_0 = 303 K$ |
| Température finale | $T_f = 1000 K$ |
| Plage de rayon de la particule | $R = 0,00025 - 0,005 m$ |

Tableau 4

Valeurs des paramètres algorithmiques utilisées pour les deux cas [1]

| Paramètres | Valeurs |
|----------------------------|---|
| Temps initial | $t_0 = 0 \text{ s}$ |
| Pas de temps | $dt = \frac{d\tau R^2}{\alpha} \text{ s}$ |
| Pas de temps adimensionnel | $d\tau = 1,479 \cdot 10^{-3}$ |
| Discretisation spatiale | $NP = 305$ |
| Nombre d'itérations | $n_{pdt} = 50 - 220$ |

Tableau 5

Valeurs nominales des paramètres utilisées pour le premier cas [1]

| Paramètres | Valeurs |
|------------------------------|---------------------------------|
| Concentration initiale de B | $C_{B_0} = 650 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale de G1 | $C_{G_{10}} = 0 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale de C1 | $C_{C_{10}} = 0 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale de G2 | $C_{G_{20}} = 0 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale de C2 | $C_{C_{20}} = 0 \text{ kg/m}^3$ |

Tableau 6

Valeurs nominales des paramètres utilisées pour le deuxième cas

| Paramètres | Valeurs |
|------------------------------|---------------------------------|
| Concentration initiale de B | $C_{B_0} = 650 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale de G1 | $C_{G_{10}} = 0 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale de T | $C_{T_0} = 0 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale de G2 | $C_{G_{20}} = 0 \text{ kg/m}^3$ |
| Concentration initiale d'eau | $C_{M_0} = 100 \text{ kg/m}^3$ |
| Longueur de la particule | $L = 0,015 \text{ m}$ |

Références

- [1] B.V Babu and A.S Chaurasia. Modeling for pyrolysis of solid particle : kinetics and heat transfer effects. *Energy Conversion and Management*, 44(14) :2251–2275, aug 2003.
- [2] Morten G. Grønli and Morten C. Melaaen. Mathematical model for wood Pyrolysis- Comparison of experimental measurements with model predictions. *Energy & Fuels*, 14(4) :791–800, jul 2000.
- [3] Y Yousef Haseli. Modeling combustion of single biomass particle, 2012.
- [4] M. Hemati and C. Laguerie. Etude cinétique de la pyrolyse de bois à haute température en thermobalance. *The Chemical Engineering Journal*, 35(3) :157–168, jul 1987.
- [5] Xiyan Li and Chungeng Yin. A drying model for thermally large biomass particle pyrolysis. *Energy Procedia*, 158 :1294–1302, feb 2019.
- [6] Hong Lu, Warren Robert, Gregory Peirce, Bryan Ripa, and Larry L. Baxter. Comprehensive study of biomass particle combustion. *Energy & Fuels*, 22(4) :2826–2839, jul 2008.
- [7] J. Porteiro, E. Granada, J. Collazo, D. Patiño, and J. C. Morán. A model for the combustion of large particles of densified wood. *Energy & Fuels*, 21(6) :3151–3159, nov 2007.
- [8] J. Porteiro, J.L. Míguez, E. Granada, and J.C. Moran. Mathematical modelling of the combustion of a single wood particle. *Fuel Processing Technology*, 87(2) :169–175, jan 2006.
- [9] Johannes Rath and Gernot Staudinger. Cracking reactions of tar from pyrolysis of spruce wood. *Fuel*, 80(10) :1379–1389, aug 2001.
- [10] Jaakko Saastamoinen, Martti Aho, Antero Moilanen, Lasse Holst Sørensen, Sønnik Clausen, and Mogens Berg. Burnout of pulverized biomass particles in large scale boiler – single particle model approach. *Biomass and Bioenergy*, 34(5) :728–736, may 2010.
- [11] Jaakko J. Saastamoinen, Martti J. Aho, and Veli L. Linna. Simultaneous pyrolysis and char combustion. *Fuel*, 72(5) :599–609, may 1993.
- [12] Anup Kumar Sadhukhan, Parthapratim Gupta, and Ranajit Kumar Saha. Modelling of pyrolysis of large wood particles. *Bioresource Technology*, 100(12) :3134–3139, jun 2009.
- [13] Johann C. Wurzenberger, Susanne Wallner, Harald Raupenstrauch, and Johannes G. Kihnast. Thermal conversion of biomass : Comprehensive reactor and particle modeling. *AIChE Journal*, 48(10) :2398–2411, oct 2002.
- [14] Yao Xu, Ming Zhai, Shuai Jin, Xun Zou, Shubin Liu, and Peng Dong. Numerical simulation of high-temperature fusion combustion characteristics for a single biomass particle. *Fuel Processing Technology*, 183 :27–34, jan 2019.
- [15] Aijun Xue, Jihong Pan, Maocheng Tian, and Xiaolu Yi. Pyrolysis model of single biomass pellet in downdraft gasifier. *Transactions of Tianjin University*, 22(2) :174–181, apr 2016.

Ressources image

- [0] Combustion granulé de bois sur : <https://cdn.futura-sciences.com/buildsv6/images/>