

**Projet de Physique P6
STPI/P6/2022 - 014**

**Modélisation de la combustion
d'une particule de Biomasse**



Étudiants:

BARRE Arthur

PIERRET Camille

ESSAKHI Jihane

VINOT Romane

HEBERT Gabriel

Enseignant-responsable du projet:

Angel Alfonso MARTINEZ

Cette page est laissée intentionnellement vierge.

Date de remise du rapport : **11/06/2022**

Référence du projet : **STPI/P6/2022 – 014**

Intitulé du projet : **Modélisation de la combustion d'une particule de biomasse**

Type de projet : **Bibliographie**

Objectifs du projet:

L'objectif de ce projet est de comparer différents modèles de la combustion d'une particule de biomasse et d'identifier les différences et similitudes afin d'en comprendre précisément le mécanisme. Ce projet nous permet de développer nos compétences de recherches bibliographiques tout en réalisant un travail de groupe.

Mots-clefs du projet: **Combustion, Modélisation, Émissions**

Remerciements

Nous tenons à remercier notre enseignant encadrant, Monsieur Angel Alfonso Martinez, qui nous a guidés tout le long de notre projet. Il nous a aidé dans nos recherches, nous a appris à étudier des articles scientifiques et nous a apporté de nombreuses connaissances scientifiques. Il a su rester à notre écoute et disponible pour toutes les questions que nous avons eu. Nous lui sommes également reconnaissants pour son engagement et le temps qu'il a accordé à notre projet.

Nous remercions également l'INSA de nous avoir offert l'opportunité de réaliser ce projet qui nous a permis d'enrichir nos compétences en termes de recherches scientifiques. Ces connaissances ne pourront être qu'utiles dans notre futur en tant qu'ingénieurs.

Enfin, nous tenons à remercier chaque membre de notre équipe, pour l'investissement et le travail réalisé, sans qui nous n'aurions jamais pu concrétiser un tel projet.

TABLE DES MATIÈRES

Remerciements	4
Introduction	6
Méthodologie/ Organisation du travail	8
I - Équations d'évolution	9
II - Conditions limites	11
III - Combustion de la partie solide	12
A. Le séchage	12
B. Rétrécissement / contraction	14
C. La pyrolyse	16
D. Gazéification et oxydation du charbon	19
E. La porosité	22
IV - Combustion de la flamme	25
Conclusion	27
Annexes	28
Bibliographie	41

Introduction

Depuis le début du 21^e siècle, l'impact environnemental de la production d'énergie occupe de plus en plus de place dans différentes discussions mondiales, avec des effets du réchauffement climatique qui sont de plus en plus ressentis maintenant qu'il y a 30 ans. La problématique écologique devient plus globale et intervient dans de nombreux domaines allant de la biodiversité à l'énergie en passant par l'agriculture et l'économie.

On dit que les ressources sont non-renouvelables dans le sens où leur vitesse de formation est beaucoup plus lente que celle de leur consommation. Ces ressources sont donc limitées et nous devons immanquablement faire face à leur épuisement à moyen terme. Leur utilisation pose aussi un problème climatique car elle cause la libération de grandes quantités de gaz à effet de serre responsables du réchauffement climatique.

La question de l'utilisation de formes d'énergies alternatives renouvelables se pose alors. En outre, la demande de production d'énergie est en forte augmentation, et ne fera qu'accroître dans le futur.

En France, les énergies renouvelables représentent 13,1% de la consommation totale d'énergies primaires, avec une production primaire d'énergies renouvelables dominée par la production de biomasse (35,8%), utilisée principalement pour le chauffage [57].

On peut alors noter que la part importante de la production de biomasse dans celles des énergies renouvelables pousse davantage à se pencher vers celle-ci et à s'intéresser à son exploitation, mais tout d'abord il serait important de connaître plus précisément la définition de cette dernière et ses différentes formes d'utilisations.

Le terme "biomasse" couvre un large éventail de plantes et de matériaux dérivés, y compris les déchets biodégradables (déchets végétaux agricoles et forestiers, déchets végétaux produits dans le secteur de l'agroalimentaire...). Étant donné que les compositions chimiques de ces matières premières varient considérablement, le type de technologies de conversion de la biomasse dépend du matériau donné [60].

En effet, la biomasse peut être transformée puis utilisée sous différentes formes et de différentes façons pour produire de l'énergie. Ces procédés de conversions thermochimiques ainsi que l'utilisation de l'énergie issue de la biomasse sont schématiquement représentés dans la *figure 1* en annexe.

Le plus employé, tant pour l'utilisation industrielle que domestique est la combustion. En effet, elle représente plus de 95 % des quantités de bois utilisées pour l'énergie. Elle est avantageuse quand les stocks de biomasse sont fluctuants.[59] La combustion constitue un processus dans lequel des phénomènes physiques complexes sont impliqués. Les phénomènes observés dans la combustion de la biomasse doivent être étudiés plus en détail, même si la biomasse est utilisée depuis des millénaires pour produire de la chaleur et de l'énergie.

Au cours des dernières décennies, de nombreuses études numériques ont été réalisées sur la conversion thermochimique de la biomasse. L'analyse thermogravimétrique (TGA) a été largement utilisée auparavant et, par conséquent, de nombreuses données cinétiques sur la dégradation thermique de la biomasse ont été publiées et utilisées pour la modélisation numérique. A cela s'ajoutent de nombreux travaux qui ont été réalisés sur la cinétique de la pyrolyse de la biomasse.

En parallèle à la recherche expérimentale, les modélisations numériques ont pris une importance considérable pour améliorer les systèmes de combustion de la biomasse afin de relever les défis susmentionnés. Dans le cadre de notre projet, nous nous concentrerons sur l'étude et la comparaison de différents modèles sur la combustion, ainsi que sur la compréhension et la modélisation de la pyrolyse à travers une conception de modèle en langage python. Nous nous intéresserons en particulier aux modèles CFD (computational fluid dynamics), qui fait référence à la simulation de l'écoulement de fluides, en tenant compte des phénomènes physiques et chimiques impliqués, tels que la turbulence, le transfert de chaleur ou les réactions chimiques. En d'autres termes, ces modèles consistent à étudier les mouvements d'un fluide ainsi que leurs effets par la résolution numérique des équations régissant le fluide, qui dépendent des hypothèses choisies [58].

L'avantage d'utiliser un modèle CFD est que le modèle peut prédire rapidement les résultats possibles avant l'investissement réel dans une application industrielle. De plus, des études sur le comportement de conversion thermique d'un seul granulé de biomasse peuvent aider à comprendre plus de détails lors du processus de conversion thermochimique à plus grande échelle.

Nos objectifs pour ce projet sont dans un premier temps de comprendre les différentes étapes qui constituent la combustion d'un pellet de biomasse. Pour cela, nous étudierons de nombreux modèles de combustion et essayerons d'identifier les différences et similitudes en fonction des hypothèses choisies. Nous diviserons alors dans notre rapport les comparaisons des articles étape par étape.

Méthodologie/ Organisation du travail

Pour mener à bien notre projet, il était important d'avoir une organisation efficace. Pendant les premières séances, nous avons chacun réalisé de notre côté des recherches dans de nombreux articles scientifiques, afin de s'appropriier le sujet qui nous était totalement inconnu. Nous avons également discuté avec le professeur qui nous a expliqué les bases de la combustion de la biomasse. Chacun a ensuite étudié un article précis, puis présenté celui-ci au reste du groupe. Cela nous a permis d'apprendre comment bien analyser un modèle scientifique et n'en garder que l'essentiel. Nous avons également vu un exemple d'utilisation de modélisation CFD avec OpenFoam, ainsi que des extraits d'un programme permettant de modéliser la combustion d'une particule de biomasse, qui nous a permis de voir un exemple concret de l'application d'un modèle similaire à ceux que nous avons étudié.

Puis, petit à petit, nous nous sommes mis d'accord sur un plan, avant de se répartir le travail que chacun devait réaliser. Notre projet étant bibliographique, notre but était d'expliquer les différentes étapes de la combustion de la biomasse. Notre professeur Angel MARTINEZ était présent pour répondre à toutes les questions que nous pouvions avoir et nous aiguiller dans la bonne direction.

Enfin, nous avons regroupé toutes nos parties afin de les mettre en commun dans notre rapport. Chacun a étudié les parties des autres afin de donner son avis sur ce qui pourrait être modifié. La mise en page a été réalisée à la toute fin.

Répartition:

Gabriel HEBERT	Arthur BARRE	Romane VINOT	Jihane ESSAKHI	Camille PIERRET
-Rétrécissement/ contraction -Etude du programme CFD -Poster	- Pyrolyse - Diaporama	- Porosité - Bibliographie JabRef	- Gazéification - Équations d'évolution - Conditions limites - Combustion de la flamme -Etude du programme CFD	- Séchage - Méthode/Organisation - Conclusion - Mise en page

I. Équations d'évolution

La précision et la complexité d'un modèle augmentent avec l'augmentation des détails dans la description mathématique des processus physiques et chimiques. Par conséquent, les équations d'évolution pertinentes pour la dégradation thermo-chimique du bois et la modélisation de la combustion doivent être expliquées et discutées.

Tout d'abord, en se basant sur la structure du bois, les équations descriptives doivent inclure l'influence de toutes les phases courantes. Compte tenu de la structure poreuse multiphase du bois, l'équation d'évolution de la température est donnée par [40] :

$$\begin{aligned} & (c_{p,s}\rho_s + c_{p,l}\rho_l + c_{p,b}\rho_b + \epsilon_g(c_{p,g}\rho_g^g)) \frac{\partial T}{\partial t} \\ & + (\rho_l v_l c_{p,l} + \rho_b v_b c_{p,b} + \rho_g v_g c_{p,g}) \nabla T \\ & = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + \Phi_{evap} + \Phi_{pyrolyse} + \Phi_{charbon} \end{aligned} \quad (1)$$

Où les indices *s*, *l* et *g* désignent respectivement les phases solide, liquide et gazeuse.

Les trois derniers termes du côté droit de l'équation sont les termes source dus à la chaleur des réactions de séchage, de pyrolyse et de conversion du charbon. Au cours de l'étape de conversion du charbon, le charbon et les cendres forment la phase solide. La conductivité thermique effective, k_{eff} , comprend l'influence du bois vierge, du charbon, du liquide libre et de l'eau liée, en plus des gaz.

Une des principales hypothèses simplificatrices qui a aussi été utilisée pour obtenir cette équation et qui est également appliquée par de nombreux chercheurs est l'hypothèse d'équilibre thermique entre toutes les phases (solide, liquide et gazeuse). Cette hypothèse réduit le nombre d'équations de température requises à une, cependant, certains écarts entre les résultats de modélisation et les résultats expérimentaux peuvent être dus à cette hypothèse comme démontré par Antonio Galgano et Colomba Di Blasi [45,46].

Certains auteurs, notamment Babu BV [2] négligent la convection dans la structure poreuse du bois. Cependant, la phase gazeuse qui s'écoule à travers les pores entraîne un refroidissement de la particule solide, et cet effet ne peut pas être modélisé avec précision si la convection est négligée. De plus, Di Blasi [5] a identifié une dépendance intéressante de la taille des particules par rapport à l'influence du terme convectif. L'augmentation de la taille des particules, entraîne la diminution de l'influence du terme convectif. Ce résultat peut donc justifier la raison pour laquelle le terme convectif dans l'équation de température peut être négligé dans le cas de très grosses particules de bois.

On note une équation de la continuité pour l'eau sans liquide donnée par M. C. Melaaen [28] est la suivante (voire nomenclature en [annexe](#)) :

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l v_l) = \dot{\omega}_{evap,l} \quad (2)$$

L'équation d'évolution de l'eau liée est construite de la même manière :

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_b v_b) = \dot{\omega}_{evap,b} \quad (3)$$

Les vitesses de transport de l'eau libre liquide et de l'eau liée sont calculées différemment, selon si le transport convectif ou le transport diffusif est dominant.

Le mouvement de l'eau liée est modélisé d'après par [48] :

$$\rho_b v_{bx} = - \rho_{bois,sec} D_b \left(\frac{\partial \left(\frac{\rho_b}{\rho_{bois,sec}} \right)}{\partial x} \right) \quad (4)$$

Melaaen [28] fait l'hypothèse commune du fait que le terme $\rho_{bois,sec}$ soit constant durant le séchage, ce qui simplifie plus l'équation.

Le transport de l'eau sans liquide est dominé par l'advection, qui est communément modélisée par la loi de Darcy :

$$v_l = - \frac{K_l K_{rl}}{\mu_l} \nabla P_l \quad (5)$$

La pression de la phase liquide est basée sur la corrélation entre la pression de la phase gazeuse et la pression capillaire donnée par :

$$P_l = P_g - P_c \quad (5bis)$$

La modélisation de la pression capillaire PC est communément basée sur le travail expérimental de Spolek et Plumb [56], mais d'après Haberle [40], cela réduit la validité des expressions mathématiques, non seulement pour certains types de bois mais aussi pour certaines conditions expérimentales.

La continuité de la phase gazeuse est aussi donnée par L.Sorum [19] dans l'équation suivante :

$$\frac{\partial (\epsilon_g \rho_g^g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g v_g) = \dot{\omega}_{evap} + \dot{\omega}_{pyrolyse} + \dot{\omega}_{charbon} \quad (6)$$

L'équation de la continuité des espèces de la phase gazeuse est :

$$\frac{\partial (\epsilon_g \rho_i^g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i v_g) = \nabla \cdot \left[\rho_g^g D_{eff}^i \nabla \left(\frac{\rho_i^g}{\rho_g^g} \right) \right] + \dot{\omega}_i \quad (7)$$

Le coefficient de diffusion effective Deff doit être utilisé dans l'équation de continuité des espèces en phase gazeuse car il tient compte des restrictions dues à la diffusion dans un milieu poreux, tel que le bois. Il est suggéré par Fogler [52] qu'il peut être lié au coefficient de diffusion binaire, D, tel que :

$$D_{eff} = \frac{\epsilon_g \sigma_c D}{\tau} \quad (7 \text{ bis})$$

Dans certains modèles comme ceux de Galgano [51] et Di Blasi [47], la diffusion des espèces gazeuses est négligée, car on suppose qu'elle est beaucoup plus faible par rapport à la convection. Enfin La vitesse de la phase gazeuse est donnée par :

$$V_g = - \frac{K_g K_{rg}}{\mu_g} \nabla P_g \quad (8)$$

Le calcul de l'advection des phases liquide et gazeuse à l'intérieur du bois avec la loi de Darcy dans plusieurs modèle est raisonnable d'après I.Haberle [40] puisque l'on s'attend à un écoulement laminaire dans les pores, et puisque les forces visqueuses dominent les forces d'inertie dans la structure de la biomasse ligneuse.

Afin de résoudre ces équations, on doit d'abord choisir plusieurs conditions limites appropriées. On retient les plus communes des différents modèles dans la partie suivante.

II. Conditions limites

Pour l'évolution de la température dans une particule de bois, il est plus courant de considérer l'influence du rayonnement et de la convection aux limites. Certains modèles fixent un flux de chaleur rayonnante uniforme pour chauffer la bûche ou particule de bois, et attribuent des pertes aux parois. Il est également courant d'attribuer des températures de fond fixes, soit une seule température ou une combinaison de température de rayonnement (généralement la température du four), Trad et de température de convection (de la phase gazeuse environnante), Tconv, ce qui entraîne un échauffement de la particule de bois. [40]

L'émissivité des particules est aussi un paramètre important qui couple les conditions extérieures du solide avec les processus de séchage, de dévolatilisation et de carbonisation se produisant à l'intérieur de la particule. L'émissivité des particules s'est vu attribuer une valeur de 0,85 comme dans le modèle de Porteiro, mais des valeurs plus élevées de 0,9 et 0,95 et 1 ont également été appliquées dans d'autres modèles comme ceux de Melaaen [28] et Bryden [7].

Pour modéliser le transfert externe de chaleur et de masse, des coefficients de transfert de chaleur et de masse doivent être définis. Certains auteurs comme Gronli [48] et Di Blasi supposent donc des valeurs constantes, tandis que d'autres ont commencé à travailler sur une description plus détaillée des transferts de chaleur et de masse à la surface des particules, en prenant en compte le flux de Stefan et l'effet de soufflage des gaz sortants. La pression à la frontière est généralement fixée égale à la pression atmosphérique.

Le modèle en couches (voire figure 18), appliqué par un certain nombre de chercheurs, comme Porteiro [23], a utilisé des conditions aux limites homogènes pour sa mise en œuvre. Le travail de Thunman [18] d'autre part, était basé sur une discrétisation eulérienne, qui ne nécessite pas de conditions aux limites homogènes en tant que telles. Une variation spatiale importante des conditions aux limites ne peut être modélisée avec précision que si la discrétisation est plus fine que la taille de la particule.

Cependant, afin d'inclure des conditions aux limites très diverses, il est recommandé de développer un modèle multidimensionnel basé sur un maillage afin d'obtenir une précision suffisante.

On note spécialement comme exemple, le modèle de Moussavi [27] qui utilise un modèle multidimensionnel et l'approche multi-régions lui donnant ainsi la possibilité d'utiliser les conditions aux limites présentées dans le *Tableau 1* en Annexe pour résoudre indépendamment les équations des différentes régions des particules.

Après avoir noté les différentes équations et conditions limites gouvernant la particule et son extérieur, il est maintenant intéressant d'examiner comment les processus de conversion thermique à l'intérieur de la particule sont modélisés en commençant par le processus de séchage.

III. Combustion de la partie solide

A. Le séchage

La majorité des combustibles solides et en particulier la biomasse contient une grande quantité d'humidité. En effet, la biomasse peut contenir jusqu'à 60% d'eau et le bois, même après séchage, peut encore contenir en moyenne de 10 à 15% d'humidité. Par conséquent, le séchage joue un rôle important dans le processus de combustion en termes de temps et d'énergie. C'est la première étape de la combustion de la biomasse. Le séchage a toujours été une difficulté dans le traitement thermique de la biomasse.

Plusieurs modèles sont utilisés dans la littérature pour étudier le séchage des particules de biomasse. Les trois modèles les plus couramment utilisés sont le modèle thermique, le modèle d'équilibre ou encore le modèle à vitesses cinétique. [32]

- Le **modèle thermique** se base sur l'hypothèse que le séchage se produit sur une fine couche au bord de la particule et à la température d'ébullition de l'eau. La vitesse de séchage est contrôlée par la vitesse de transfert de chaleur vers la particule. Il est le plus couramment utilisé. L'équation utilisée est la suivante:

$$r_{H_2O} = \begin{cases} 0, & T < T_{evap} \\ \frac{F_{Heat}}{\Delta h_{evap}}, & T > T_{evap} \end{cases} \quad (9)$$

$$F_{Heat} = S_a (h_T (T_j - T_{ini}) + \epsilon \sigma (T_j^4 - T_{ini}^4)) \quad (9bis)$$

- Le **modèle d'équilibre** se base lui sur l'équilibre chimique entre l'eau dans la phase liquide et dans la phase gazeuse. Ce modèle est souvent utilisé dans le séchage à basse température et est numériquement instable pour le séchage à haute

température. Lorsque l'on arrive à la pression de saturation, l'eau liquide commence à s'évaporer. L'équation pour calculer le taux de vaporisation numérique r_{H_2O} est:

$$r_{H_2O} = S_a \left(\frac{\rho_l}{\rho_l^0} \right) h_{m,pore} (\rho_v^{sat} - \rho_g Y_{vap}) \quad (10) \quad h_{m,pore} = 3,66 \frac{D_{eff,fw}}{d_{pore,hydraulic}} \quad (10bis)$$

- Dans le **modèle à vitesses cinétique**, la vitesse de réaction d'Arrhenius est supposée estimer la vitesse d'évaporation de l'eau. L'évaporation de l'eau est traitée comme une réaction chimique. On utilise donc l'expression d'Arrhenius suivante pour décrire le comportement de la vitesse de réaction.

$$r_{H_2O} = \rho A_{evp} \exp \left(-\frac{E_{evp}}{RT} \right) \quad (11)$$

[32] Dans cet article, les trois modèles ont été testés. Les modèle thermique est utilisé ici pour l'eau libre et le modèle cinétique pour l'eau lié. Le résultat montre que le choix d'un modèle thermique ou modèle cinétique n'affecte pas l'ensemble du processus de pyrolyse, bien qu'un modèle cinétique soit préféré pour l'eau liée. Le modèle d'équilibre lui n'est utilisé que pour l'eau libre en dessous de 100°C.

La *figure 2a)* montre trois étapes de pyrolyse indiquées par les flèches. Sur la *figure 2b)*, on identifie la première étape qui est l'étape de séchage. En effet, on peut constater que la biomasse est chauffée de manière significative et que l'eau liée se libère jusqu'à environ 6-7 secondes. On observe qu'il y a deux pics dans la courbe de libération de la vapeur d'eau (verte). Le premier est dû à la libération rapide d'eau libre. Avec le début de la décomposition de la biomasse, des autres gaz à faible poids moléculaire, comme H₂, CO, CO₂, CH₄, sont relâchés. La fraction massique de l'eau diminue alors. Cette étape est appelée étape initiale par Basu [26], autour de la température de 100°C à 300°C. Un autre pic de vapeur est causé par l'étape intermédiaire (200°C à 600°C) [26], où la pyrolyse primaire commence.

La *figure 3* montre l'évolution de la température, de la fraction massique de la biomasse sèche et de l'eau, dans un granulé avec une teneur en humidité de 40% et un avec une teneur en humidité de 6%. On retrouve également les étapes délimitées par les flèches pour les différentes teneur en humidité. On peut observer que lorsque la teneur en humidité est de 40% (jaune plein), le processus de séchage prend plus de temps. En effet, à 6%, il s'arrête au bout de 6-7 secondes alors qu'à 40%, il s'arrête vers 12 secondes.

Dans les deux cas, le processus de séchage s'arrête lorsque l'humidité s'évapore totalement, tandis que l'étape de dévolatilisation se termine lorsque la biomasse est totalement consommée. On peut également dire que le moment où l'étape de séchage s'arrête est le moment où la température centrale du granulé de biomasse atteint plus de 100 °C.

[27] Maintenant étudions un autre article. Ici, ils utilisent le modèle à vitesse cinétiques, aussi appelé modèle de réaction chimique, car ils le considèrent relativement simple à mettre en œuvre et plus stable que d'autres modèles. Ainsi ils calculent le taux de consommation des espèces solides ou liquides dans les réactifs par la formule suivante en reprenant la nomenclature utilisée dans les formules précédentes:

$$r_{H_2O} = \rho K_{int} \quad (12) \quad K_{int} = A_{evp} \exp\left(\frac{-E_{evp}}{RT}\right) \quad (12bis)$$

Des simulations ont été réalisées deux fois: une fois sans le mécanisme d'accélération ($f=1$) et une fois avec la variable $fvar$ basée sur la vitesse de la surface comme paramètre de contrôle. Les résultats sont présentés sur la *figure 4*, les deux simulations coïncident assez bien. La *figure 4d*) présente la fraction massique d'eau à 20 mm au-dessus de la particule. On observe que de l'eau est libérée pendant le séchage et la pyrolyse mais est également produite à partir de la combustion d'hydrocarbures en phase gazeuse.

En conclusion, on peut remarquer que les résultats de ces deux articles se rejoignent. En effet, les conclusions que l'on obtient sont pratiquement similaires. La quantité d'eau diminue rapidement avec l'augmentation de la température pendant les 7 premières secondes. De plus, cette évaporation de l'eau lors du séchage implique une réduction du volume de la particule de biomasse.

B. Rétrécissement / contraction

Dans l'essentiel des modèles de combustion de la particule de biomasse, il se produit une transformation appelée rétrécissement ou contraction (shrinkage en anglais), directement liée au processus de séchage, ainsi qu'à la porosité, comme nous allons le voir. En effet, presque tous les combustibles issus de la biomasse commencent par s'agrandir avec l'ouverture des pores, puis se rétrécissent considérablement pendant la pyrolyse. C'est pourquoi il est nécessaire, et parfois indispensable de prendre en compte l'impact du rétrécissement sur la combustion des particules de biomasse dans les modélisations.

Il est cependant important de mentionner que tous les modèles ne prennent pas en compte le rétrécissement de la particule, et que certains modèles supposent un volume constant de la particule tout au long de la combustion ([14] [49])

Tout d'abord, un modèle en particulier a servi de base à de nombreuses modélisations qui ont suivi. Il s'agit du modèle de Di Blasi [4], publié en 1995, à la suite de plusieurs expérimentations qui ont démontré un rétrécissement significatif de la particule suite à la combustion.

Selon ce modèle, le volume du solide diminue de manière linéaire selon la masse de la particule et augmente avec la masse de char selon un facteur multiplicatif α :

$$\frac{V_s}{V_{w,0}} = \frac{M_{w,t}}{M_{w,0}} + \frac{\alpha M_{c,t}}{M_{w,0}} \quad (13)$$

Pour leur modèle, Babu et Chaurasia [2] ont étudié le transfert de chaleur et la cinétique du rétrécissement des particules de biomasse, en se basant notamment sur le modèle de Di Biasi [4], et en particulier sur son équation (1). Ils ont constaté que le rétrécissement affecte à la fois le temps de pyrolyse et le rendement des produits et cela principalement dans des conditions de pyrolyse thermiquement épaisses. En outre, l'effet de contraction devient négligeable dans un modèle thermiquement mince. Ils se sont rendus également compte que la prise en compte du rétrécissement dans le modèle mathématique permettait une meilleure description de la transformation et correspondait aux données expérimentales (figure 5, figure 6).

Quant à Hagge et Bryden [39], leur étude repose un modèle à un seul paramètre qui calcule le rétrécissement dans une seule dimension (figure 7). Le coefficient de contraction f est défini comme le rapport entre la taille après rétrécissement et la taille originale avant la combustion de la particule (2).

$$f = \frac{\Delta y_t}{\Delta y_0} = \frac{L}{L_0} \quad (14)$$

Pour ce calcul, ils ont émis l'hypothèse que le rétrécissement était lié de manière linéaire avec la composition en matériaux de la particule poreuse (Bois, Char, Tar), en supposant la surface de la particule parfaitement définie, et sans craquelures. Par ailleurs, ils ont supposé que la contraction s'effectue uniquement selon l'axe d'étude (donc dans 1 seule dimension).

De la même manière que Babu et Chaurasia, ils ont conclu que le rétrécissement avait un impact négligeable sur le temps de pyrolyse et sur le rendement de la combustion pour les particules qu'ils considèrent thermiquement mince pour un nombre de Biot inférieur à 0,2 et ce, indépendamment de la teneur en humidité du pellet. En revanche, pour un problème thermiquement épais ($0,2 < Bi < 10$), ils ont conclu sur un impact non négligeable du phénomène de rétrécissement sur le temps de pyrolyse : l'impact étant d'autant plus important que l'épaisseur de la particule et la température augmentent (figure 8). Le taux d'humidité joue également un rôle non négligeable, d'où la nécessité de l'étape de séchage. Cependant, ce modèle a été plusieurs fois contesté, manque de données expérimentales pour pouvoir être vérifié correctement.

Ces trois modèles servent de base à de nombreux travaux dont nous allons voir un exemple :

Nous allons à présent nous intéresser au modèle de Gentile et al. [43], qui a été validé par des données expérimentales portant sur le rendement de la combustion. Leur modèle a été appliqué à un modèle numérique, en découpant la particule en un nombre N de cellules de calcul et en prenant en considération un front de rétrécissement (shrinking front) (figure 9) défini par l'équation suivante (3) et la variable y_i :

$$\gamma_i = \frac{\dot{\Omega}_i^s}{\max(\dot{\Omega}^s)} ; i \in [1, \dots, N_{\text{cellules}}] \quad (15)$$

avec $\dot{\Omega}_i^s$ le taux de consommation de la partie solide de la i ème cellule décrivant une portion de la particule, $\max(\dot{\Omega}^s)$ la valeur maximale du taux de consommation dans le domaine complet.

Il est supposé que les cellules de calcul dans la zone de contraction (zone bleue de la *figure 9*) sont de porosité constante (ce qui n'est pas le cas en réalité comme nous allons le voir plus tard), ce qui entraîne la perte de volume observée lors de la contraction du solide. Le rétrécissement est donc décrit de la manière suivante :

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = 0 \implies \frac{dV}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{NC^s} \dot{\Omega}_j^s}{\rho^s(1 - \varepsilon)} \quad (16)$$

En dehors de la zone de contraction (en rouge sur la *figure 9*), on n'a pas de rétrécissement, ce qui implique un volume constant, donc :

$$\frac{dV}{dt} = 0 \quad (17)$$

Le modèle numérique a donc été validé après comparaison avec plusieurs expérimentations utilisant plusieurs conditions pyrolytiques. On a donc un modèle numérique CFD utilisant OpenFoam comme solveur, se basant sur les 3 modèles précédents et séparant l'étude des zones de contraction de l'étude du reste de la particule. Cependant ce modèle (comme beaucoup d'autres simulations numériques) ne prend pas en compte la première partie d'expansion de la particule, car trop compliquée à modéliser.

Ainsi, nous avons pu voir 3 principaux modèles qui ont servi de base à des études comme celle de Gentile et al., ainsi que leurs caractéristiques. On peut donc noter le fait que la partie contraction de la combustion a un impact négligeable lorsque le problème est thermiquement mince, mais qu'il est important de la prendre en compte dans un modèle en régime thermiquement épais, en séparant les parties de "shrinkage", ou contraction, du reste de la particule. Enfin nous avons également pu constater que l'humidité de la particule, ainsi que sa porosité avaient un impact sur l'efficacité ainsi que le temps de la pyrolyse, ce qui relie directement cette partie de la combustion avec celles du séchage, de la pyrolyse ainsi que celle de la porosité.

C. La pyrolyse

Définition générale:

Du grec pur « feu » et du suffixe -lyse « dissolution », la pyrolyse signifie la séparation par le feu. Elle est la première transformation ayant lieu après le séchage lors de la combustion d'une particule de biomasse. C'est un processus complexe qui opère lors de fortes chaleurs et en absence d'oxygène; celui-ci est souvent remplacé par de l'azote. La

chaleur est transmise par rayonnement et convection à l'extérieur de la particule et est ensuite transmise par conduction dans le pellet.

Lors de la pyrolyse d'un granulé de matière organique, trois différents produits sont créés; du Charbon (Char) qui représente un résidu solide, des gazs légers non condensable (H_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4 ...) et des huiles et goudrons (Tar).

La proportion entre gaz, liquide et charbon obtenue après pyrolyse dépend de la température ainsi que du temps de chauffe de cette dernière.

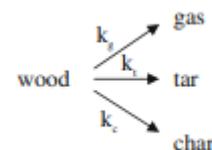
On retrouve différents types de pyrolyse, la pyrolyse "flash", qui consiste à chauffer rapidement à une température comprise entre 750 et 900 K, elle permet de maximiser la production d'huiles et réduire la production de charbon. La pyrolyse lente s'effectue à des températures entre 600 et 700 K et favorise la production de charbon et de gaz. Les produits de la pyrolyse dépendent du temps de chauffe ainsi que de la température voir *figure 11*.

Il est à noter qu'une particule de biomasse se compose de différents matériaux: la cellulose qui est présente à environ 50% et dont sa pyrolyse se produit entre 200 et 400 °C, l'hémicellulose qui est présente entre 10 et 30% pour des granulés et dont sa pyrolyse à lieu aux alentours de 230 °C . Et enfin la lignine qui représente de 20 à 40% et dont la pyrolyse à lieu entre 280 et 500°C. Finalement d'autres composants sont présents en faible quantité comme des molécules organiques plus petites ou des polymères comme les protéines, acides ou sels. Cependant, la majorité des modèles ne prennent pas en compte ces derniers composants.

Les modèles:

Dans cette partie nous développerons 3 modèles les plus couramment utilisés pour la modélisation de la pyrolyse. Nous détaillerons les hypothèses nécessaires à la compréhension ainsi que les atouts et inconvénients de chacun. Les modèles prenant en compte le craquage du charbon ne seront pas abordés dans cette partie car la gazéification sera abordée ultérieurement. Nous considérons aussi la biomasse comme sèche afin de pouvoir utiliser la loi d'arrhenius et calculer les constantes de vitesse. L'étude de la pyrolyse peut se faire à l'aide de plusieurs modèles [40] que nous étudierons et comparerons:

- Le modèle de pyrolyse en une étape est le modèle le plus simplifié qui suggère la transformation de la biomasse en 3 produits au cours d'une réaction simple en une seule étape. Ce modèle est proposé à l'origine par Shafizadeh avec les constantes de vitesse cinétique de Di Blasi et Branca [4]



La modélisation de la pyrolyse du bois nécessite l'étude et la description de phénomènes chimiques et physiques sous forme mathématique. Les équations de vitesses peuvent donc être décrites comme suivant l'évolution de la masse de bois en se basant sur les constantes de vitesse de réaction calculée avec la loi d'Arrhenius:

$$\frac{dm_w}{dt} = - (k_c + k_t + k_g) m_w \quad (18)$$

$$\frac{dm_{tar}}{dt} = k_t m_w \quad (20)$$

$$\frac{dm_{char}}{dt} = k_c m_w \quad (19)$$

$$\frac{dC_{gas}}{dt} = k_g m_w \quad (21)$$

Avec m_i les masses de bois (wood) , de charbon (Char) , d'huiles et goudrons (Tar) et enfin de gaz (gas). Et k_i les constantes de vitesses du gaz, du charbon et du goudron.

Le principal inconvénient du modèle global à une étape est que la phase gazeuse produite n'est pas automatiquement divisée en goudron et en gaz permanents. Dans cette approche, le réactif (bois) est considéré comme homogène, en ne considérant qu'un seul réactif, et par conséquent en définissant la cinétique par rapport à une seule constante de vitesse. Malgré cela, le principal avantage du mécanisme global en une étape est que les rendements des produits, ainsi que les taux de décomposition globaux, peuvent être prédits avec assez de précision pour un coût de calcul raisonnable.

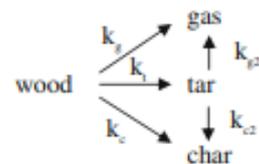
-On trouve ensuite le modèle cinétique proposé par W.C. Park et Arvind [25] qui supposent la décomposition de la biomasse au cours de 2 étapes: la première étape se compose de 3 réactions indépendantes qui produiront Gaz, Char et Tar. S'ensuit un craquage du goudron en gaz et en charbon.

$$\frac{dC_W}{dt} = - (k_c + k_t + k_g)C_W \quad (22)$$

$$\frac{dC_{Char}}{dt} = k_c C_W + k_{c2} C_{Tar} \quad (23)$$

$$\frac{dC_{Tar}}{dt} = k_T C_W - (k_{c2} + k_{g2})C_{Tar} \quad (24)$$

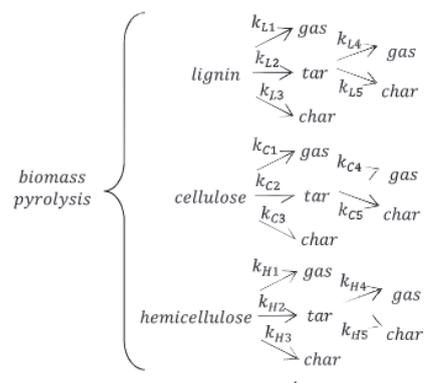
$$\frac{dC_{Gas}}{dt} = k_G C_W + k_{g2} C_{Tar} \quad (25)$$



Un inconvénient de ce modèle est que le bois en tant que réactif n'est pas décrit en détail. Par conséquent, la validité de ce modèle de réaction est limitée par l'utilisation de données cinétiques propres au bois testé, donc seules les espèces de bois similaires aux espèces de bois testées expérimentalement pour obtenir les données cinétiques peuvent être étudiées avec ce modèle.

-Ensuite on retrouve le schéma de pyrolyse à 3 réactions indépendantes en parallèle. Ce modèle de pyrolyse plutôt complexe décrit indépendamment la dégradation de la lignine, de la cellulose et de l'hémicellulose.

L'hypothèse de base pour le mécanisme des trois réactions indépendantes parallèles est que les composants du bois se dégradent de la même manière que s'ils se décomposent tout seul. Chacun des 3 réactifs produits donc indépendamment du charbon, du gaz et du goudron. Le goudron se décomposant par la suite en gaz et en charbon. Il s'agit donc d'un modèle qui demande beaucoup de calculs et est assez lourd.



Ce modèle, développé par Papari et Hawboldt, sur la base d'études menées par W.C Park [25] et Gautier et al. [44], donne plus de précision sur le rendement des différentes espèces produites. L'avantage d'un tel modèle est qu'il peut être appliqué à une grande variété de types de biomasse en prenant en compte la fraction de chaque espèce dans le bois utilisé. Il permet de modéliser la dévolatilisation qui commence par une réaction endothermique (principalement la formation de gaz et de goudron) et se poursuit avec quelques réactions exothermiques (principalement formation de charbon). Par conséquent, la chaleur de la pyrolyse dépend du rendement des différents produits. Dans cette étude, la chaleur de réaction est donc calculée en fonction des différences entre l'enthalpie totale des produits et des réactifs:

$$Q_{\text{reac}} = \sum [h + h_f^\circ]_{\text{products}} - \sum [h + h_f^\circ]_{\text{reactants}} \quad (26)$$

Ce modèle permet donc une bonne prédiction de l'évolution de la température centrale du pellet (*figure 12*).

L'un des principaux inconvénients de ce modèle est que les interactions entre cellulose, lignine et hémicellulose sont négligées. Ceci entraîne quelques différences notables entre les pertes de masses prédites et expérimentales (*figure 13*). Cependant cela reste le modèle apportant les meilleures prédictions de chaleurs et d'espèces produites.

Finalement nous avons pu voir trois modèles différents pour la description de la pyrolyse, le premier étant plutôt adapté pour une modélisation rapide avec des prédictions correctes mais surtout une rapidité de calcul. Enfin les deux modèles suivants plus complexes permettent une meilleure prédiction des produits de la pyrolyse ainsi que de l'évolution de température.

D. Gazéification et oxydation du charbon

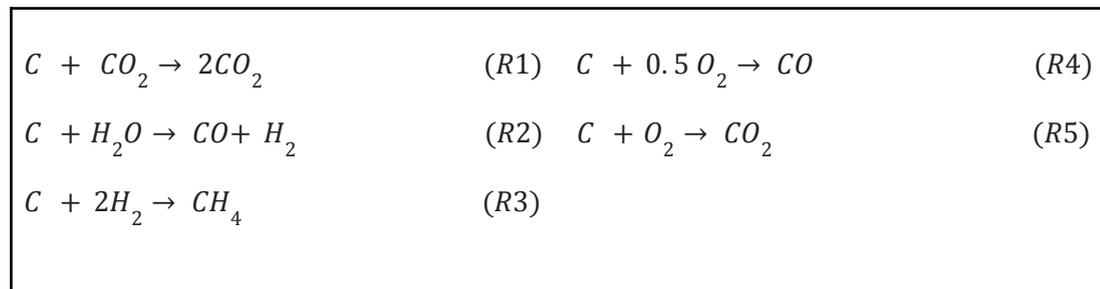
La gazéification est un processus à la frontière entre la pyrolyse et la combustion, précédé par l'oxydation. Elle désigne une transformation thermo-chimique consistant à décomposer par la chaleur un solide combustible carboné (charbon, biomasse) en présence d'un réactif gazeux (gaz carbonique, vapeur d'eau puis oxygène/air) dans le but d'obtenir un mélange gazeux combustible. La réaction de gazéification se passe dans des conditions de température très élevées (plus de 1 000 °C). Le gaz de synthèse obtenu à la fin, appelé « syngas » (pour « synthetic gas »), est un mélange de deux gaz combustibles : le monoxyde de carbone (CO) et l'hydrogène (H₂). [50] L'étape d'oxydation se déroule en présence d'oxygène à des températures comprises entre 1 200°C et 1 500°C. Les matières volatiles issues de la pyrolyse s'oxydent. Cette combustion dégage la chaleur nécessaire aux deux étapes précédentes et à l'étape suivante de la gazéification. Elle nécessite un fort apport en oxygène. [50]

L'étape qui suit, la gazéification, se déroule à des températures comprises entre 800 °C et 1200 °C. En l'absence d'oxygène, le coke obtenu lors de la phase de pyrolyse réduit la vapeur d'eau et le gaz carbonique obtenus dans l'étape précédente respectivement en

hydrogène et en oxyde de carbone pour former du syngas, combustible mélangeant en proportions variables CO et H₂. [50]

La modélisation de cette conversion du charbon est difficile car les réactions hétérogènes, qui sont influencées par le transfert de masse et la cinétique, doivent être modélisées.

Lorsqu'une particule à faible teneur en cendres, comme le bois, réagit, sa taille diminue également au fur et à mesure que les réactions se déroulent, comme vu dans la partie traitant le rétrécissement des particules. Les produits gazeux de la conversion du charbon sortiront de la surface de réaction et seront transportés dans le franc-bord par convection et diffusion. Le carbone réagit principalement avec l'oxygène et forme du CO₂ et du CO. En fonction des conditions de température et de pression et de la composition du gaz, les réactions suivantes peuvent être liées à la gazéification et à l'oxydation du charbon :



Ce phénomène a été pris en considération dans plusieurs modèles notamment ceux de Kwiatkowski [34], Gómez [41,42], Wickramaarachchi [15], Zhang [11] et autres.

S.M Mousavi [27] a repertorié les données de K.M Bryden [8] et M.L Hobbs [37] dans le *tableau* (2) en annexe dans lequel on observe que les vitesses de réaction dépendent de la concentration des agents réactifs aux surfaces internes des pores du charbon. La surface interne des pores de charbon est identifiée par S_a dans la formulation de la vitesse de réaction et peut varier en raison de la conversion du charbon. On retrouve aussi des données similaires dans le tableau de données cinétiques de Thunman [18] (*tableau* (3) en Annexe). Néanmoins, cela néglige le fait que la réactivité du charbon est affectée par les conditions opérationnelles du processus de conversion thermique. Comparée à une vitesse de chauffe plus basse, la vitesse de chauffage plus élevée résulte en un charbon beaucoup plus réactif et poreux, avec une structure plus endommagée suite à une libération plus rapide et soudaine de la phase gazeuse, comme montré dans l'étude de S. Septien [21]. Cette variation de réactivité ne peut être bien reflétée pour le moment, étant donné que la majorité des modèles utilisent les mêmes données cinétiques.

La cinétique de conversion du charbon reste l'une des incertitudes les plus importantes dans la modélisation actuelle de la conversion thermique des particules de biomasse ligneuse thermiquement épaisses. L'utilisation toujours des mêmes données cinétiques pour la conversion du charbon ne permet pas de prendre en compte l'influence des conditions de fonctionnement variables, par exemple la pression ou le temps de séjour du charbon à certaines températures, dans un modèle.

Après avoir expliqué le phénomène de la conversion du charbon et certaines hypothèses pour modéliser ses équations chimiques, on étudie ensuite sa modélisation mathématique dans la partie suivante.

Modélisation mathématique de la conversion du charbon :

D'après Haberle [40], la conversion du charbon est contrôlée soit cinétiquement, soit par transfert de masse. Le régime contrôlé cinétiquement est prédominant à basses températures, tandis que le régime contrôlé par transfert de masse prédomine à des températures plus élevées et avec un transfert de masse plus important pour les particules plus grosses, comme étudié par Porteiro [24] et Kwiatkowski [34].

La conversion du charbon est hétérogène et la vitesse à laquelle la conversion se produit est peut être exprimé par les équations suivantes (voir nomenclature 1 en annexe):

$$k_m(\rho_{e,O_2} - \rho_{O_2}) = \dot{\omega}_c \frac{n_{O_2}}{n_C} \frac{M_{O_2}}{M_C} \quad (27)$$

La densités d'oxygène à la surface est donnée par l'équation suivante :

$$\rho_{O_2} = \frac{P\bar{M}}{RT_s} Y_{O_2} \quad (28)$$

Avec T_s la température à la surface;

La densité d'oxygène externe est donnée par l'équation suivante :

$$\rho_{e,O_2} = \frac{P\bar{M}}{RT_e} Y_{e,O_2} \quad (29)$$

Avec T_e et Y_{e,O_2} prises de la phase gazeuse environnante, externe.

La gazéification, soit les réactions R1 et R2 est souvent modélisée par une expression d'Arrhenius (dont la définition est notée en annexe).

La réaction R1 est décrite par :

$$\dot{\omega}_{gasif,1} = S_{char} A_1 \exp\left(\frac{-E_{a,1}}{RT}\right) \rho_{char} y_{s,CO_2}^{n,1} \quad (30)$$

Et la réaction R2 est décrite par :

$$\dot{\omega}_{gasif,2} = S_{char} A_2 \exp\left(\frac{-E_{a,2}}{RT}\right) \rho_{char} y_{s,H_2O}^{n,2} \quad (31)$$

La réaction du charbon avec l'oxygène est plus rapide que les réactions de gazéification pour la plupart des applications pratiques. Par conséquent, une hypothèse de modélisation courante, et faite par exemple par Galgano et autres, est que tant que l'oxygène résiduel est en phase gazeuse, les réactions de gazéification du charbon peuvent être négligées.

Une autre hypothèse retrouvée dans plusieurs modèles, notamment ceux de Porteiro [23,24], est que le charbon ne contient que du carbone pur. En réalité, le charbon comprend également des cendres et certaines fractions massiques réduites de H, N et O, qui restent après que tout le carbone a été consommé. Le cendre peut constituer une couche supplémentaire entourant la particule, ce qui entraîne une augmentation de la résistance au transfert de masse et de chaleur.

Il a aussi été constaté qu'il n'y a pas d'approche commune sur la façon dont la surface spécifique disponible pour les réactions hétérogènes est modélisée. Cependant, la prédiction de la conversion du char dépend fortement de la surface spécifique. Étant donné que la formation de fissures entraîne des modifications de la surface, cela affecte également de manière significative les réactions hétérogènes. Galgano [51] et d'autres ont considéré l'influence des fissures en introduisant un facteur d'amélioration. Néanmoins, ce facteur d'amélioration est jugé plutôt ambigu par Haberle [40] car il n'est lié à aucune information détaillée concernant les changements structurels externes et internes d'une particule de bois. De plus, cette considération ne tient pas compte du fait que toutes les espèces de gaz ne peuvent pas pénétrer dans n'importe quelle taille d'une ouverture nouvellement formée.

Ce changement de structure physique et l'étude des ouvertures nouvellement formées sera plus détaillé dans la partie suivante traitant la porosité.

E. La porosité

Comme le montre la figure (13) [40], le volume du bois est formé par une matrice solide, et dans cette matrice solide se trouvent des ouvertures (appelées pores) qui contiennent une phase gazeuse et liquide. Les dimensions de ces pores peuvent varier considérablement. La distribution de la taille des pores, et par conséquent la porosité globale du bois, influencent le transfert de masse et de chaleur, ce qui affecte par conséquent la dégradation thermique. Cette structure combinée de matrice solide et de pores remplis de gaz ou de liquide permet de supposer que le bois peut être décrit comme un milieu poreux.

Lors de la combustion d'un pellet de biomasse, les produits gazeux, à une certaine étape du procédé, passent à travers les pores de la particule, ce qui a pour conséquence de modifier la densité des particules, c'est ce que nous dit l'étude de Jalan et al. [49]

Selon le modèle adopté, les effets de ceux-ci ont été considérés ou non. Pendant la pyrolyse (modèle de Curtis et Miller), les pores de la particule s'élargissent. La particule de biomasse devient donc plus poreuse, considérant en plus le fait qu'une partie s'est convertie en char, en tar et en gaz. On pourra considérer le phénomène de convection à travers les pores du pellet.

Le modèle de R.K. Jalan et V.K. Srivastava utilise une simplification du problème, considérant que la porosité du pellet n'a aucun effet sur le processus, modèle dit valide pour des particules très denses ou différents types de bois. Ici a donc été considérée la combustion uniquement.

Xue et al. [14], eux, considèrent les effets convectifs entre le pellet et la flamme comme transferts thermiques majoritaires. Le coefficient de convection est donné par :

$$h_T = \frac{j_h}{Pr^{\frac{2}{3}}} v_g C_p \quad (32)$$

$$\text{avec } j_h = \frac{0.357}{Re^{0.359\epsilon}} \quad (33)$$

avec Pr le nombre de Prandtl et Re le nombre de Reynolds (cf annexe). La porosité intervient bien dans ce modèle (ϵ).

On remarque donc que selon les modèles, la porosité a été traitée ou non, cependant, la porosité est un facteur qui évolue au sein d'une particule au cours de la dévolatilisation et qui influe ensuite sur le déroulement de la combustion. Il est donc important de comprendre comment ce paramètre évolue. On a vu dans des parties précédentes que la porosité intervenait par exemple dans l'équation de continuité de la phase gazeuse à l'intérieur des pores (1) ou encore dans la formule de rétrécissement (découlant d'une porosité supposée constante) (16).

La figure (14) [40] montre que la porosité augmente lorsque la densité diminue, ce qui correspond à la compréhension théorique de la structure du bois, contenant une matrice solide et des pores remplis de gaz. Une porosité plus élevée indique un volume plus important rempli par la phase gazeuse, ce qui conduit à une réduction de la quantité de phase gazeuse, ce qui conduit à une réduction de la densité apparente.

Yao et al. [13] ont mené en 2022 une étude sur ce paramètre. Leur article explique en effet qu'au cours d'un faible échauffement prolongé, les particules de biomasse ont tendance à garder leur forme initiale, cependant, durant une pyrolyse rapide, on peut observer des effets sur leur taille et leur forme. En effet, c'est durant notamment la dévolatilisation, à forte température, que l'on obtient des particules plastiquement déformées, une sphéroïdisation et une forte porosité, le sujet abordé par cette partie.

La taille finale, la structure physico-chimique des charbons sont des paramètres importants de la combustion et de la gazéification, tout comme la vitesse de réaction est influencée par la structure physique qui inclut : la taille de la particule, le volume des pores, leur surface, la répartition des pores selon leur taille. Il a été prouvé que les charbon produit à fortes températures de chauffe sont plus réactifs lors de la gazéification. Une forte température favorise le volume et la surface des pores, mais de très fortes températures compromettent celles-ci... Et en effet, prédire le profil de la combustion nécessite la connaissance de la structure physique de la particule.

Yao et al. ont mené différentes expériences en utilisant le modèle cinétique de Schiemann et Vorobiev. Ils ont placé des particules dans du diazote, dans un tube en fournaise à 1400K, qui sont ensuite recueillies sur un papier. On retrouve des particules plus petites qu'au départ, sphéroïdes, on peut voir une nette déformation et une nette fusion. (cf figure 15)

La même expérience a été réalisée dans l'air à la même température, mais ici on observe deux phases, la combustion des volatiles et une flamme autour de la particule (cf figure 16). Les particules sont ici encore devenues des sphéroïdes et ont fondu.

Décrivons maintenant le modèle utilisé afin de déterminer la porosité après la pyrolyse. L'équation d'énergie considérée pendant tout le long de l'expérience est la suivante :

$$\frac{\text{Nu} \cdot \lambda}{l^*} \Delta T = \frac{F^* \cdot \lambda}{A_p} \Delta T \quad (44)$$

avec le nombre de Nusselt posé à 2 car on néglige la vitesse entre les particules et les gaz soit $l^* = d_{\text{char}}$

On pose un pas de temps t_i , la masse de charbon consommée est étudiée sur un intervalle de temps Δt :

$$m_{\text{char}}(t_{i+1}) = m_{\text{char}}(t_i) - \dot{n}_c^p A_{\text{char}} M_c \Delta t, \quad (45)$$

Le profil de température décroît, le charbon a complètement brûlé. Les calculs sont réalisés jusqu'à ce que 99% du charbon ait brûlé. Deux études ont été réalisées, la première après pesées des particules sans connaître leur porosité, la deuxième en utilisant les porosités expérimentalement trouvées pour retrouver les masses des particules. Les résultats finaux sont donnés en annexe (*figure 17*). En somme, cette étude propose des valeurs précises de porosité au cas par cas et fait partie des rares études à avoir proposé une analyse complète de l'évolution de la porosité au sein des particules de biomasse lors de la combustion.

IV. Combustion de la flamme

Les gaz combustibles rejetés dans la phase gazeuse par la dévolatilisation et la gazéification du charbon participent à des réactions homogènes. La prise en compte de cette réaction en phase gazeuse homogène est très importante, car l'augmentation de température résultant de l'oxydation réchauffe davantage la bûche de bois, de sorte que les réactions de séchage, de dévolatilisation et de conversion du charbon peuvent se poursuivre. Par conséquent, une étude de ces réactions est nécessaire en connexion avec l'étude de la dégradation thermique d'une particule de bois solide dans une unité de combustion. [40]

Les équations qui gouvernent cette phase sont les suivantes:

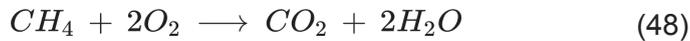


Ce qui est couramment considéré dans le franc-bord des appareils de chauffage domestique au bois actuels. Dans certains cas, la complexité du modèle de réaction homogène est encore renforcée en considérant également la dissociation du CO_2 . Cependant, cette réaction n'est pertinente qu'à des températures très élevées [40].

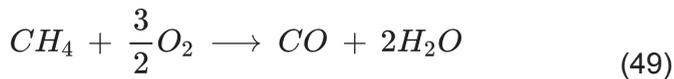
L'oxydation de l'hydrogène a également été modélisée dans les petits appareils de chauffage au bois, étant donné le fait que l'hydrogène est l'un des principaux composés des volatils libérés lors de la dévolatilisation d'une particule de bois. :



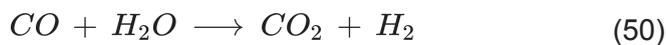
Quant à la combustion du méthane, cette dernière peut être modélisée de deux façons différentes, premièrement comme une oxydation complète par Galgano [47] :



Ou comme une oxydation partielle, comme Porteiro [24] l'a modélisée :



À ces réactions s'ajoute aussi celle de la réaction du décalage eau-gaz qui est également intéressant, car il peut être important pour les unités de combustion étagées qui ont des conditions plus semblables à celles d'un gazéifieur dans l'étage primaire :



On peut aussi noter que plusieurs espèces contenant du nitrogène sont libérées, ce qui pousse à modéliser la formation de NOx. Cependant l'azote libéré du bois lors de la dévolatilisation et de la conversion en charbon n'est pris en compte dans aucun des modèles à une seule particule. Même le schéma détaillé de Ranzi [53] ne peut pas décrire le taux de libération de NH3 ou de HCN du bois, qui seront les principaux précurseurs de NOx (provenant de l'azote lié au carburant). Certains chercheurs comme Zahirovic [54] ont développé des modèles de post-traitement. Haberle [40] estime que l'on peut justifier ce choix de simplification car les réactions NOx ont très peu d'influence sur la combustion ni sur le fluide lui-même.

En conclusion, l'examen de la modélisation en phase gazeuse homogène montre que des simplifications ne sont pas seulement nécessaires pour les processus chimiques et physiques à l'intérieur de la bûche de bois, mais sont également un aspect important pour le développement de modèles en phase gazeuse efficaces. Cela met en évidence qu'un outil de simulation informatique efficace pour les appareils de chauffage au bois ne repose pas uniquement sur un modèle en phase solide numériquement efficace et précis, mais dépend également fortement de l'efficacité numérique du modèle en phase gazeuse [40].

Les techniques CFD ont largement été utilisées dans les simulations de combustion en phase gazeuse pour de nombreux systèmes différents. La dynamique des gaz est généralement modélisée à l'aide d'équations de conservation de variables telles que la pression, la quantité de mouvement, l'énergie, la turbulence, le rayonnement et les espèces chimiques.

Les effets de turbulence permettent d'obtenir un résultat homogène mais ont des effets sur la forme de flamme. Pour tenir compte de l'effet de la turbulence, le modèle de combustion du réacteur partiellement agité (PaSR) est utilisé dans certains modèles. Dans l'étude de Gonzalès, on utilise une modélisation k-ε réalisable avec un traitement de paroi amélioré pour la turbulence, une modélisation à vitesse finie/dissipation de Foucault (FR-ED) pour les réactions d'espèces et le modèle discret ordonné pour le transport de rayonnement [27]. Le flux de gaz à l'intérieur des pores de la biomasse est modélisé à l'aide d'une approche de milieu poreux dispersé avec une source de quantité de mouvement basée sur la loi de Darcy, qui nécessite les coefficients de perméabilité notée auparavant.

Conclusion

Pour faire face au réchauffement climatique, les énergies renouvelables sont une alternative qui est de plus en plus envisagée pour notre avenir, et en particulier, la biomasse-énergie. La combustion de la biomasse a été largement étudiée par de nombreux scientifiques ces dernières années. Il a donc été intéressant d'étudier différents articles sur ce sujet afin d'élargir nos connaissances scientifiques dans ce domaine.

Nos compétences acquises lors des nos premières années à l'INSA nous ont permis de comprendre et de comparer les différents modèles et équations étudiées. Nous avons d'abord appris à identifier les informations essentielles d'un article scientifique. Il est important de savoir trouver quels résultats sont utiles à notre projet et quelles informations sont trop complexes ou trop spécifiques pour être utilisées à notre niveau. Cela n'a pas été toujours facile, car les articles étaient rédigés en anglais, utilisant des termes parfois complexes. De plus, les sujets abordés étaient relativement compliqués, et nous manquions souvent de connaissances pour les comprendre.

Dans un deuxième temps, nous avons étudié chaque étape de la combustion d'un pellet de biomasse en commençant par la partie solide puis en nous concentrant sur la phase fluide. Nous avons identifié les équations régissant chacune de ses étapes et nous avons cherché à comprendre chacun des termes. Enfin, nous avons comparé les résultats des différents modèles, que nous avons finalement validés ou non.

En toute fin de projet, certains membres qui connaissaient le langage Python se sont penchés sur le code d'un modèle afin de compléter ce projet par un exemple concret mais nous n'avons pas jugé son intégration dans notre projet suffisamment pertinente.

Ce projet nous a permis de développer des connaissances dans des domaines variés qui nous étaient pour certains encore inconnus. Tout d'abord, en travaillant sur ce projet, nous avons approfondi notre esprit d'analyse sur les informations trouvées dans des ouvrages scientifiques. Nous avons également pu réaliser en quoi consistait la démarche de recherche d'un ingénieur, c'est-à-dire croiser nos connaissances et les nouvelles informations obtenues pour obtenir une interprétation la plus précise possible sur le sujet. Enfin, grâce à ce projet, nous avons développé certaines compétences de groupe, comme le travail en équipe, la répartition des tâches et la coordination des différentes parties du projet.

En conclusion, cette expérience a été très bénéfique dans notre cursus d'ingénieur au sein de l'INSA, et nous utiliserons toutes les compétences acquises dans nos projets futurs.

Annexes

- Figures

Figure (1): Procédés de conversion de la Biomasse (Preau, 2007)

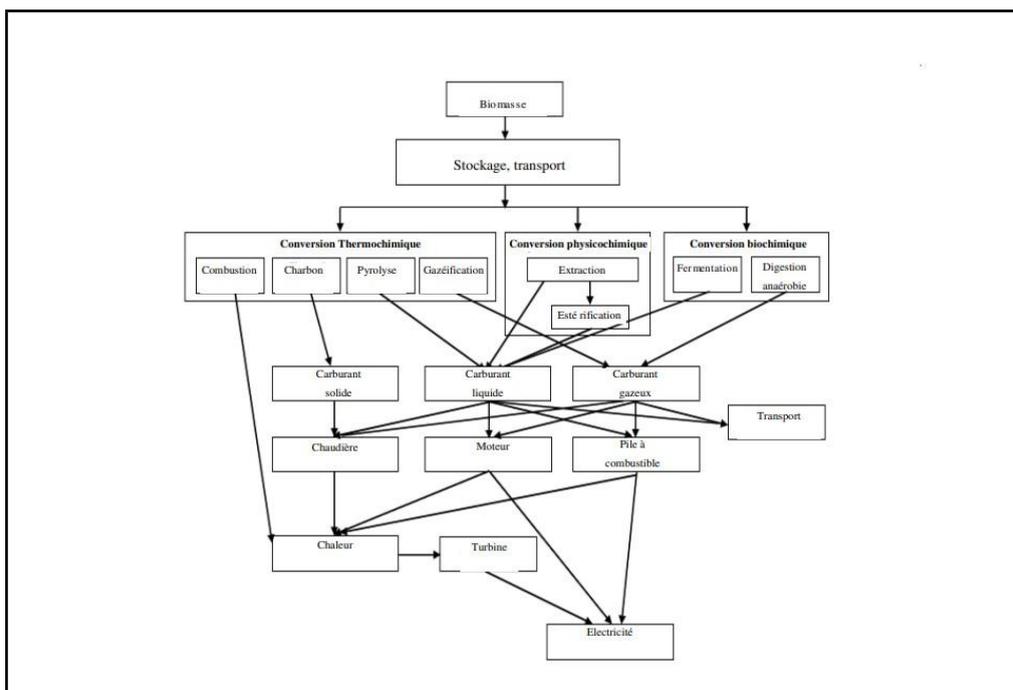


Figure (2): a) Evolution de la température en fonction du temps dans différents grid
b) Variation de la fraction massique des différentes espèces gazeuses dans le temps

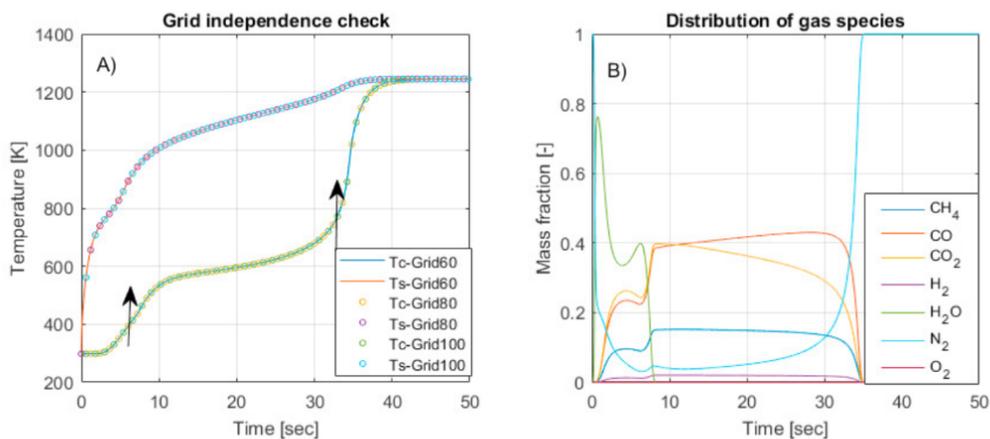


Figure (3): Profils de température et fractions massiques pour une particule de biomasse avec 40% d'humidité et une particule avec 6% d'humidité

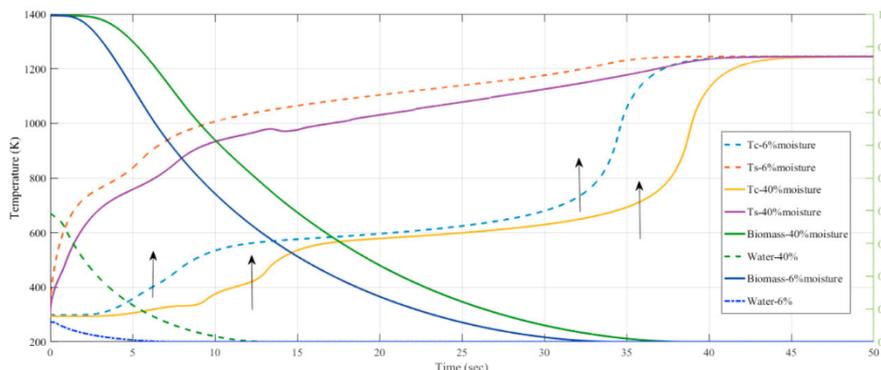


Figure (4): Résultats de simulation de pyrolyse et de réactions en phase gazeuse, avec et sans utilisation de fréquence de solution fluide variable. (a) la dérivée temporelle de la vitesse et la fréquence; (b) la température des particules, (c) la température de la phase gazeuse (d) H₂O, (e) C₆H₅OH et (f) les fractions massiques de CO₂

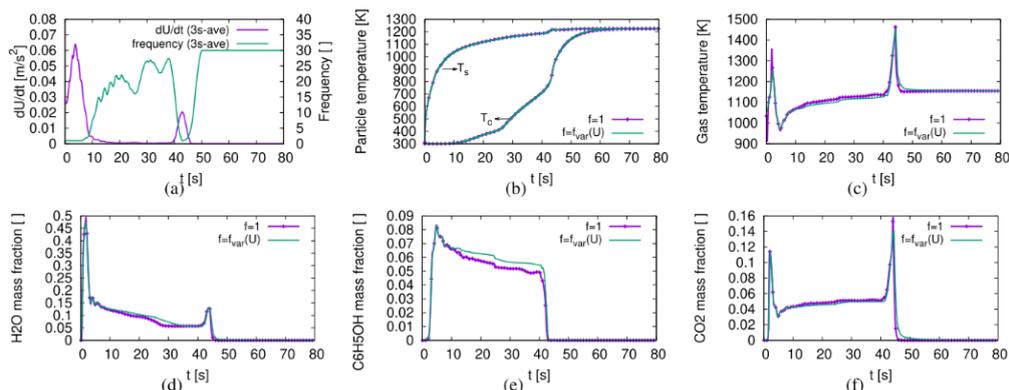


Figure (5): Profil température comme une fonction du temps au centre de pellet ($R=0,003$ m, $T_0= 303$ K, $T_f= 780$ K, $x=0$).

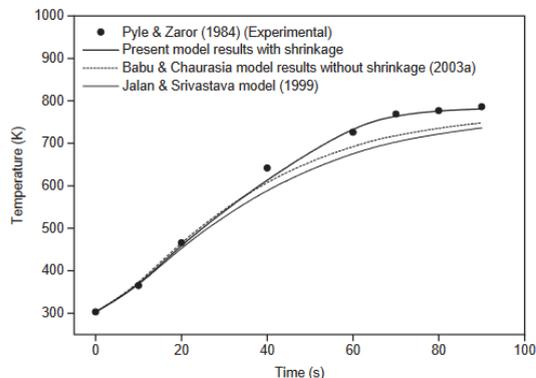


Figure (6): Profil température comme une fonction du temps au centre de pellet ($R=0,0075$ m, $T_0= 303$ K, $T_f= 773$ K, $x=0$).

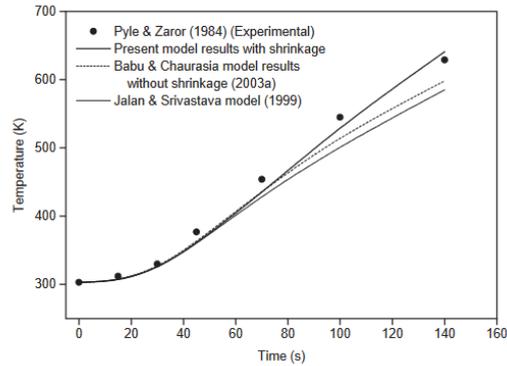


Figure (7) : Pyrolyse d'une particule de bois dans le modèle à 1 dimension de Hagge et Bryden

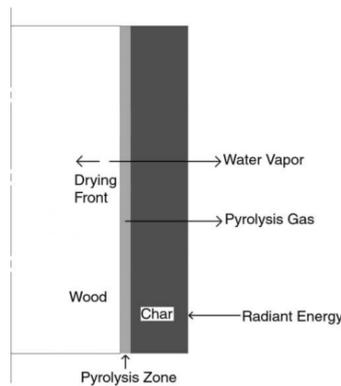


Figure (8): Pourcentage de réduction des temps de pyrolyse dû au rétrécissement ($f = 0.4$) pour une particule de bois de peuplier en fonction de la demi-épaisseur des particules et de la température pour le bois sec (trait plein) et pour le bois humide (30% d'humidité) (trait pointillé). Les zones $Bi < 0.2$ et $0.2 < Bi < 10$ correspondent respectivement aux régimes thermiquement mince et thermiquement épais.

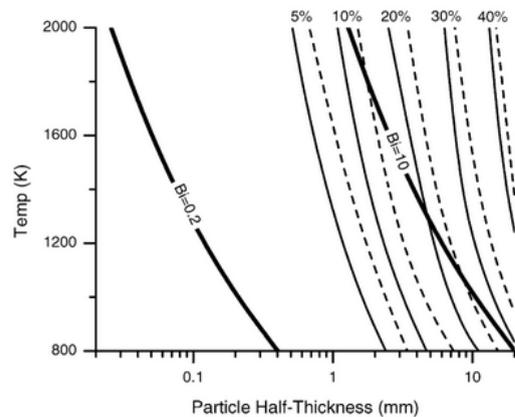


Figure (9) : Évolution du front de rétrécissement. Les cellules de calcul dans la région bleue sont considérées comme étant à l'intérieur de la zone de contraction. Les cellules dans la région rouge sont à l'extérieur de la zone de contraction. La ligne pointillée marque la position du front de rétrécissement.

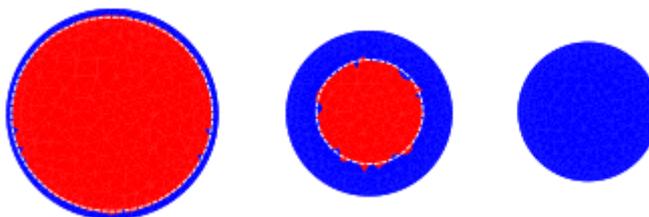


Figure (10): Tableau des taux de produits obtenus en fonction de la pyrolyse effectuée.

Mode	Conditions	Liquid (%)	Char (%)	Gas (%)
Fast	Temperature ~773 K, short vapour residence time ~1 s	75	12	13
Moderate	Temperature ~773 K, moderate vapour residence time ~10–20 s	50	20	30
Slow	Temperature ~773 K, very long vapour residence time ~5–30 min	30	35	35
Gasification	Temperature > 1023 K, moderate vapour residence time ~10–20 s	5	10	85

Figure (11): Comparaison de la température expérimentale et d'après le modèle à 3 réactions parallèles au centre de la particule

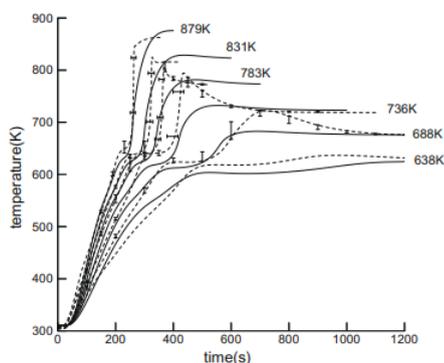


Figure (12): Comparaison de la fraction de masse solide expérimentale et calculé avec le modèle à 3 réactions parallèles

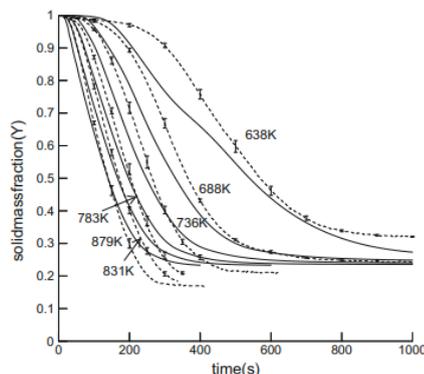


Figure (13): Schéma dépliant le caractère poreux du bois (s phase solide, l phase liquide, g phase gazeuse)

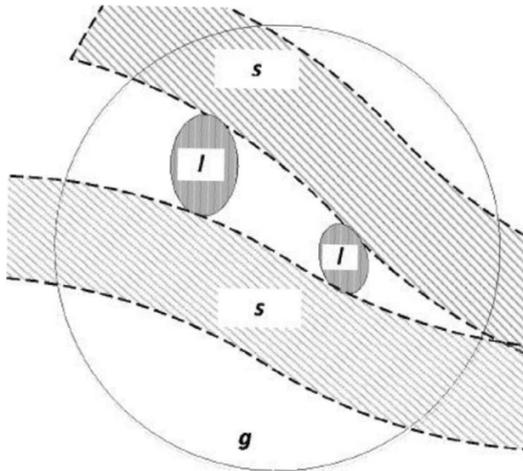


Figure (14): Graphique représentant la porosité en fonction de la densité des bois durs et des bois tendres respectivement

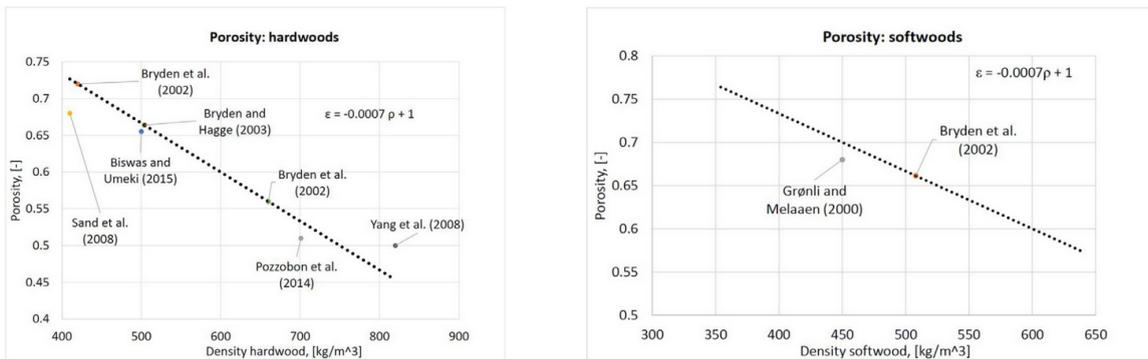


Figure (15): Exemple de particules d'Eucalyptus avant et après une pyrolyse rapide à forte température

(c) Eucalyptus (Raw)

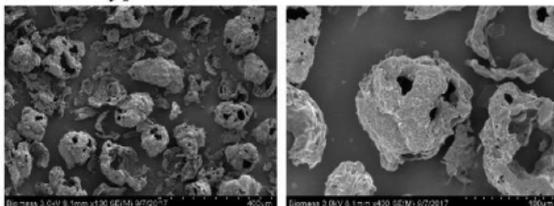


Figure (16): Particule d'eulalie torréfiée subissant une forte température dans l'air à différents instants

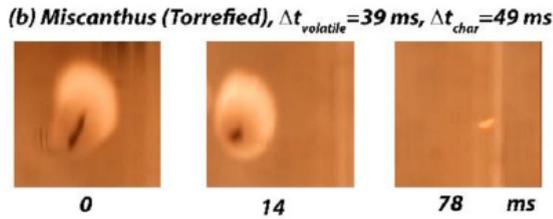
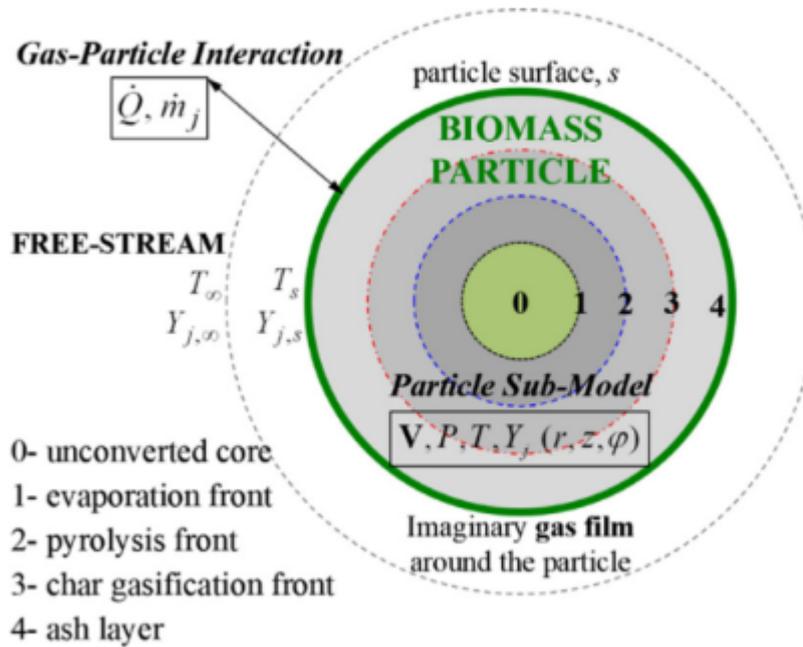


Figure (17): Tableau des porosités moyennes obtenues en fonction des diamètres des particules

Average porosities of bituminous coal char particles.

Assumed initial coal particle diameter in the 75–90 (μm) range	75	80	85	90
Average char porosity	57%	59%	60%	61%

Figure (18): modèle en couches [55]



- Nomenclatures

Nomenclature	
A_{char}	Aire de la particule de char (m ²)
A_{evp}	Facteur pré-exponentiel d'évaporation de l'eau (s ⁻¹)
b	émissivité du charbon (-)
C_p	Capacité thermique spécifique (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
C_{pi}	Capacité thermique des espèces i (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
D_b	Diffusivité de l'eau liée, qui dépend de la température et contenu de l'eau liée.
$D_{eff,fw}$	Diffusivité massique effective de l'eau libre (m ² .s ⁻¹)
E_{evp}	Energie d'activation de l'évaporation de l'eau (J.K ⁻¹ .mol ⁻¹)
F_{Heat}	Somme des transferts thermiques par radiation et convection (W.m ⁻³)
F^*	Coefficient de forme
$h_{m,pore}$	Coefficient de transfert de masse de vapeur dans le pore (m.s ⁻¹)
h_T	Coefficient de transfert de chaleur par convection (W.m ⁻² .K ⁻¹)
K_l	Perméabilité absolue
K_{rl}	Perméabilité relative

k_i	constante de cinétique chimique (s^{-1})
k_m	Coefficient de transfert de masse
l^*	Longueur caractéristique du solide (m)
M_c	Masse de char dans la particule (kg)
M_i	Masse moléculaire de l'oxygène ou du charbon (partie conversion du charbon)
m_i	masse des composants i (char, biomasse, cendres...) (kg) (partie porosité)
$M_{w,t}$	Masse de matériau pyrolysable (kg)
n_i	Nombre de moles d'oxygène ou charbon
Nu	Nombre de Nusselt (posé à 2)
p	Pression totale des gaz (Pa)
$P_{O_2,s}$	Pression partielle de l'oxygène à la surface de la particule (Pa)
\dot{n}_c^p	Vitesse de réaction du carbone par unité de surface ($mol.C/(m^2s)$)
r_{H_2O}	Taux de vaporisation numérique ($kg.m^{-3}.s^{-1}$)
S_a	Surface de la particule de bois (m^2/m^3)
T_i	Température du composé i (charbon, gaz, ...) (K)
v_b	Vitesse de l'eau liée.
V_{char}	Volume de char (m^3)
v_g	Vitesse de la phase gazeuse

v_l	Vitesse de l'eau sans liquide.
VM	Masse des composants volatiles (kg)
V_s	Volume total de la phase solide (bois+char) (m ³)
$V_{w,t}$	Volume solide effectif (m ³)
Y_{vap}	Pourcentage de vapeur dans toutes les espèces
γ	Évolution du volume dans la couche externe de la particule
Δh	Chaleur molaire (J.mol ⁻¹)
Δy_t	Variation d'épaisseur selon l'axe y à l'instant t
ε	Coefficient de porosité de la partie solide (-)
ϵ_g	Fraction de volume de la phase gazeuse
κ	Nombre de Péclet modifié
λ	Coefficient de conductivité thermique
ρ_{app}	Densité apparente de la particule (kg.m ⁻³)
ρ_b	Densité de l'eau liée
ρ_g^g	Densité intrinsèque, moyenne de la phase gazeuse
ρ_i^g	Densité moyenne de la phase intrinsèque de l'espèce i dans la phase gazeuse
ρ_l^0	Densité de l'eau libre liquide initiale (kg.m ⁻³)
ρ_l	Densité de l'eau libre liquide (kg.m ⁻³)

$\rho_{skeletal}$	Densité du squelette de la particule (kg.m^{-3})
σ	Constante de rayonnement de Stefan-Boltzmann ($5,86 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$)
σ_c	Facteur de constriction
τ	Tortuosité
ϕ	Porosité moyenne
$\dot{\omega}_c$	Vitesse de réaction de l'oxydation du charbon.
$\dot{\omega}_{charbon}$	Terme source dû à la conversion du charbon
$\dot{\omega}_{evap}$	Terme source dû à l'évaporation de l'eau
$\dot{\omega}_{evap,b}$	Taux d'évaporation de l'eau liée
$\dot{\omega}_{evap,l}$	Taux d'évaporation de l'eau sans liquide
$\dot{\omega}_i$	Terme sources de l'espèce i
$\dot{\omega}_{pyrolyse}$	Terme source dû à la pyrolyse/ dévolatilisation
y_{s,H_2O} et y_{s,CO_2}	Fractions molaires surfaciques de l'agent de gazéification correspondant
S_{char}	Surface spécifique du charbon

Le nombre de Péclet : le rapport du transport convectif et diffusif. Il est défini comme :

$$Pe = \frac{d u \rho c_p}{\lambda}$$

d est la longueur caractéristique, u est la vitesse, ρ est la densité, λ est la conductivité thermique et c_p est la capacité thermique spécifique.

Le nombre de Prandtl :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu c_p}{\lambda}$$

μ la viscosité dynamique ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$), c_p la capacité thermique massique ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$), ρ la masse volumique (kg m^{-3}), λ la conductivité thermique (en $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$), ν la viscosité cinématique $\frac{\mu}{\rho}$ (en kg m^{-3}), α la diffusivité thermique $\frac{\lambda}{\rho c_p}$ ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)

Le nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{uL}{\nu} = \frac{\rho u L}{\mu}$$

u vitesse caractéristique du fluide (m s^{-1}), L dimension caractéristique de l'écoulement (m), ν la viscosité cinématique $\frac{\mu}{\rho}$ (en kg m^{-3}), ρ la masse volumique (kg m^{-3}), μ la viscosité dynamique ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)

Les constantes cinétiques sont calculées par les expressions d'Arrhenius présentées dans l'équation suivante :

$$k_i = A_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right)$$

• Tableaux

Tableau (1) : Conditions limites Moussavi

Variable	Particule	Fluide
Vitesse	$\frac{\partial V_1}{\partial n} = 0$	$\rho_{g1} V_1 \epsilon_1 = \rho_{g2} V_2$
Pression	$p_1 = p_{atm}$	$\frac{\partial p_2}{\partial n} = 0$
Espèces gazeuses	$D_{eff} \frac{\partial Y_{j,1}}{\partial n} = h_m (Y_{j,\infty} - Y_{j,1})$	$Y_{j,1} = Y_{j,2}$
Température	$k_{eff} \frac{\partial T_1}{\partial n} = h_c (T_\infty - T_1) + q''_{rad}$	$T_1 = T_2$

*partie particule (1), partie fluide (2), n, est le vecteur normal extérieur à l'interface grad terme de radiation, grad le terme de rayonnement.

Tableau (2) : Données cinétiques de K.M Bryden et M.L Hobbs pour la conversion du charbon.

N°	Réaction	Ai (1/s)	E (kJ mol ⁻¹)
R4	$Char + 0.5 O_2 \rightarrow CO$	$0.658 C_{O_2} S_a T$	74.8
R1	$Char + CO_2 \rightarrow 2CO_2$	$3.42 C_{CO_2} S_a T$	130
R2	$Char + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$3.42 C_{H_2O} S_a T$	130

Tableau (3) : Les données cinétiques d'après Hong Lu et H.Thunman pour la conversion du charbon.

N°	Réaction	Expression de la vitesse	A	E ($kJ mol^{-1}$)
1	$\Omega C + O_2 \rightarrow 2(\Omega - 1)CO + (2 - \Omega)CO_2$	$k_6 C_{O_2}$	$1.715 \times T$	74.8
2	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$k_7 C_{CO_2}$	$3.42 \times T$	129.7
3	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$k_8 C_{H_2O}$	$3.42 \times T$	129.7
4	$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$k_9 C_{H_2}$	$0.00342 \times T$	129.7

Le rapport stoechiométrique, Ω , dans le tableau relie les moles de carbone aux moles d'oxygène. L'unité de vitesse pour les réactions 1 à 5 est en $kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$, et pour les réaction 6 à 9 elle est en $kmol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$

Bibliographie

- [1] S. S. Alves et J. L. Figueiredo, «A model for pyrolysis of wet wood,» *Chemical Engineering Science*, vol. 44, p. 2861–2869, 1989.

- [2] B. V. Babu et A. S. Chaurasia, «Heat transfer and kinetics in the pyrolysis of shrinking biomass particle,» *Chemical Engineering Science*, vol. 59, p. 1999–2012, May 2004.

- [3] B. V. Babu et A. S. Chaurasia, «Modeling for pyrolysis of solid particle: kinetics and heat transfer effects,» *Energy Conversion and Management*, vol. 44, p. 2251–2275, August 2003.

- [4] C. D. Blasi, «Heat, momentum and mass transport through a shrinking biomass particle exposed to thermal radiation,» *Chemical Engineering Science*, vol. 51, p. 1121–1132, April 1996.

- [5] C. D. Blasi, «Physico-chemical processes occurring inside a degrading two-dimensional anisotropic porous medium,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 41, p. 4139–4150, October 1998.

- [6] P. R. Borujerdi, B. Shotorban, S. Mahalingam et D. R. Weise, «Modeling of water evaporation from a shrinking moist biomass slab subject to heating: Arrhenius approach versus equilibrium approach,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 145, p. 118672, December 2019.

- [7] K. M. Bryden et M. J. Hagge, «Modeling the combined impact of moisture and char shrinkage on the pyrolysis of a biomass particle,» *Fuel*, vol. 82, p. 1633–1644, September 2003.

- [8] K. M. Bryden, K. W. Ragland et C. J. Rutland, «Modeling thermally thick pyrolysis of wood,» *Biomass and Bioenergy*, vol. 22, p. 41–53, January 2002.

- [9] T. Chen, X. Ku, J. Lin et L. Fan, «New Pyrolysis Model for Biomass Particles in a Thermally Thick Regime,» *Energy & Fuels*, vol. 32, p. 9399–9414, July 2018.

- [10] T. Chen, X. Ku, J. Lin et H. Ström, «Pyrolysis Simulation of Thermally Thick Biomass Particles Based on a Multistep Kinetic Scheme,» *Energy & Fuels*, vol. 34, p. 1940–1957, January 2020.
- [11] J. Zhang, T. Li, H. Ström et T. Løvås, «Grid-independent Eulerian-Lagrangian approaches for simulations of solid fuel particle combustion,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 387, p. 123964, May 2020.
- [12] M. Zhai, X. Li, D. Yang, Z. Ma et P. Dong, «Ash fusion characteristics of biomass pellets during combustion,» *Journal of Cleaner Production*, vol. 336, p. 130361, February 2022.
- [13] Y. Yao, A. Panahi, M. Schiemann et Y. A. Leventis, «Determination of size and porosity of chars during combustion of biomass particles,» *Combustion and Flame*, vol. 242, p. 112182, August 2022.
- [14] A. Xue, J. Pan, M. Tian et X. Yi, «Pyrolysis model of single biomass pellet in downdraft gasifier,» *Transactions of Tianjin University*, vol. 22, p. 174–181, April 2016.
- [15] W. A. M. K. P. Wickramaarachchi et M. Narayana, «Pyrolysis of single biomass particle using three-dimensional Computational Fluid Dynamics modelling,» *Renewable Energy*, vol. 146, p. 1153–1165, February 2020.
- [16] K. Wang, H. Zhang, S. Chu et Z. Zha, «Pyrolysis of single large biomass particle: Simulation and experiments,» *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 29, p. 375–382, January 2021.
- [17] A. Ullah, K. Hong, Y. Gao, A. Gungor et M. Zaman, «An overview of Eulerian CFD modeling and simulation of non-spherical biomass particles,» *Renewable Energy*, vol. 141, p. 1054–1066, October 2019.
- [18] H. Thunman, B. Leckner, F. Niklasson et F. Johnsson, «Combustion of wood particles—a particle model for eulerian calculations,» *Combustion and Flame*, vol. 129, p. 30–46, April 2002.
- [19] L. Sørum, M. G. Grønli et J. E. Hustad, «Pyrolysis characteristics and kinetics of municipal solid wastes,» *Fuel*, vol. 80, p. 1217–1227, July 2001.

- [20] A. Sharma, V. Pareek et D. Zhang, «Biomass pyrolysis—A review of modelling, process parameters and catalytic studies,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 50, p. 1081–1096, October 2015.
- [21] S. Septien, S. Valin, M. Peyrot, C. Dupont et S. Salvador, «Characterization of char and soot from millimetric wood particles pyrolysis in a drop tube reactor between 800\textdegreeC and 1400\textdegreeC,» *Fuel*, vol. 121, p. 216–224, April 2014.
- [22] G. F. G. Sánchez, J. L. C. Velasco, Y. J. Rueda-Ordoñez, D. A. F. Díaz et J. R. M. Morales, «Solid biomass combustion modeling: Bibliometric analysis and literature review of the latest developments in OpenFOAM based simulations,» *Bioresource Technology Reports*, vol. 15, p. 100781, September 2021.
- [23] J. Porteiro, J. L. Míguez, E. Granada et J. C. Moran, «Mathematical modelling of the combustion of a single wood particle,» *Fuel Processing Technology*, vol. 87, p. 169–175, January 2006.
- [24] J. Porteiro, E. Granada, J. Collazo, D. Patiño et J. C. Morán, «A Model for the Combustion of Large Particles of Densified Wood,» *Energy & Fuels*, vol. 21, p. 3151–3159, November 2007.
- [25] W. C. Park, A. Atreya et H. R. Baum, «Experimental and theoretical investigation of heat and mass transfer processes during wood pyrolysis,» *Combustion and Flame*, vol. 157, p. 481–494, March 2010.
- [26] I. P. on Climate Change, Éd., «Summary for Policymakers,» chez *Climate Change 2013 - The Physical Science Basis*, Cambridge University Press, p. 1–30.
- [27] S. M. Mousavi, H. Fatehi et X.-S. Bai, «Multi-region modeling of conversion of a thick biomass particle and the surrounding gas phase reactions,» *Combustion and Flame*, vol. 237, p. 111725, March 2022.
- [28] M. C. Melaaen, «NUMERICAL ANALYSIS OF HEAT AND MASS TRANSFER IN DRYING AND PYROLYSIS OF POROUS MEDIA,» *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, vol. 29, p. 331–355, March 1996.
- [29] R. Mehrabian, S. Zahirovic, R. Scharler, I. Obernberger, S. Kleditzsch, S. Wirtz, V. Scherer, H. Lu et L. L. Baxter, «A CFD model for thermal conversion of thermally

thick biomass particles,» *Fuel Processing Technology*, vol. 95, p. 96–108, March 2012.

- [30] H. Lu, W. Robert, G. Peirce, B. Ripa et L. L. Baxter, «Comprehensive Study of Biomass Particle Combustion,» *Energy & Fuels*, vol. 22, p. 2826–2839, July 2008.
- [31] H. Liu, C. Wang et A. Zhang, «Numerical simulation of the wood pyrolysis with homogenous/ heterogeneous moisture using FireFOAM,» *Energy*, vol. 201, p. 117624, June 2020.
- [32] X. Li et C. Yin, «A drying model for thermally large biomass particle pyrolysis,» *Energy Procedia*, vol. 158, p. 1294–1302, February 2019.
- [33] X. Li, C. Yin, S. K. Kær et T. Condra, «A detailed pyrolysis model for a thermally large biomass particle,» *Fuel*, vol. 278, p. 118397, October 2020.
- [34] K. Kwiatkowski, K. Bajer, A. Celińska, M. Dudyński, J. Korotko et M. Sosnowska, «Pyrolysis and gasification of a thermally thick wood particle – Effect of fragmentation,» *Fuel*, vol. 132, p. 125–134, September 2014.
- [35] E. J. Kansa, H. E. Perlee et R. F. Chaiken, «Mathematical model of wood pyrolysis including internal forced convection,» *Combustion and Flame*, vol. 29, p. 311–324, January 1977.
- [36] P. Kang, G. Zhang, Z. Ge, Z. Zha et H. Zhang, «Three-dimensional modelling and optimization of an industrial dual fluidized bed biomass gasification decoupling combustion reactor,» *Applied Energy*, vol. 311, p. 118619, April 2022.
- [37] M. L. Hobbs, P. T. Radulovic et L. D. Smoot, «Modeling fixed-bed coal gasifiers,» *AIChE Journal*, vol. 38, p. 681–702, May 1992.
- [38] Y. Haseli, J. A. van Oijen et L. P. H. de Goey, «A detailed one-dimensional model of combustion of a woody biomass particle,» *Bioresource Technology*, vol. 102, p. 9772–9782, October 2011.
- [39] M. J. Hagge et K. M. Bryden, «Modeling the impact of shrinkage on the pyrolysis of dry biomass,» *Chemical Engineering Science*, vol. 57, p. 2811–2823, July 2002.

- [40] I. Haberle, Ø. Skreiberg, J. Łazar et N. E. L. Haugen, «Numerical models for thermochemical degradation of thermally thick woody biomass, and their application in domestic wood heating appliances and grate furnaces,» *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 63, p. 204–252, November 2017.
- [41] M. A. Gómez, J. Porteiro, D. de la Cuesta, D. Patiño et J. L. Míguez, «Numerical simulation of the combustion process of a pellet-drop-feed boiler,» *Fuel*, vol. 184, p. 987–999, November 2016.
- [42] M. A. Gómez, J. Porteiro, S. Chapela et J. L. Míguez, «An Eulerian model for the simulation of the thermal conversion of a single large biomass particle,» *Fuel*, vol. 220, p. 671–681, May 2018.
- [43] G. Gentile, P. E. A. Debiagi, A. Cuoci, A. Frassoldati, E. Ranzi et T. Faravelli, «A computational framework for the pyrolysis of anisotropic biomass particles,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 321, p. 458–473, August 2017.
- [44] G. Gauthier, T. Melkior, M. Grateau, S. Thiery et S. Salvador, «Pyrolysis of centimetre-scale wood particles: New experimental developments and results,» *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, vol. 104, p. 521–530, November 2013.
- [45] A. Galgano et C. D. Blasi, «Modeling Wood Degradation by the Unreacted-Core-Shrinking Approximation,» *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 42, p. 2101–2111, April 2003.
- [46] A. Galgano et C. D. Blasi, «Modeling the propagation of drying and decomposition fronts in wood,» *Combustion and Flame*, vol. 139, p. 16–27, October 2004.
- [47] A. Galgano, C. D. Blasi, A. Horvat et Y. Sinai, «Experimental Validation of a Coupled Solid- and Gas-Phase Model for Combustion and Gasification of Wood Logs,» *Energy & Fuels*, vol. 20, p. 2223–2232, July 2006.
- [48] Grønli MG, Melaaen MC. Mathematical Model for Wood Pyrolysis - Comparison of Experimental Measurements with Model Predictions. *Energy & Fuels* 2000;14(4):791–800.

- [49] R.K. Jalan, V.K. Srivastava, «Studies on pyrolysis of a single biomass cylindrical pellet-kinetic and heat transfer effects», *Energy Conversion & Management*, vol. 40, p. 467–494, Mai 1998.
- [50] Gazéification : définition, procédé, principe, enjeux et énergie. juil. - 12:00 2011, <https://www.connaissancedesenergies.org/fiche-pedagogique/gazeification>.
- [51] Galgano A, Di Blasi C, Ritondale S, Todisco A. Numerical simulation of the glowing combustion of moist wood by means of a front-based model. *Fire and Materials* 2014;38(6):639–58.
- [52] Fogler HS. *Elements of Chemical Reaction Engineering*. New Jersey: Prentice Hall International Editions; 1986.
- [53] Ranzi E, Cuoci A, Faravelli T, Frassoldati A, Migliavacca G, Pierucci S, et al. Chemical kinetics of biomass pyrolysis. *Energy & Fuels* 2008;22(6):4292–300.
- [54] Zahirovic S. «CFD analysis of gas phase combustion and NO_x formation in biomass packed-bed furnaces: a contribution towards quantitative prediction of CO and NO_x emissions» [Dissertation]. Graz, Austria: Institut für Prozess und Partikeltechnik, Graz University of Technology, Austria; 2008.
- [55] Li, Xiyang / Yin, Chungun / Kær, Søren Knudsen / Condra, Thomas
«A detailed pyrolysis model for a thermally large biomass particle»
2020-10 Fuel , Vol. 278 Elsevier BV p. 118397
- [56] Spolek, G. A. / Plumb, O. A. «Capillary pressure in softwoods» 1981-09 *Wood Science and Technology* , Vol. 15, No. 3 Springer Science and Business Media LLC p. 189-199
- [57] énergies renouvelables:
<https://www.statistiques.developpement-durable.gouv.fr/>

- [58] David A. Tillman, Dao NB Duong et N. Stanley Harding « Modeling and Fuel Blending » 2012
- [59] Total Energies : chiffres sur les énergies / biomasse
<https://www.totalenergies.fr/particuliers/parlons-energie/dossiers-energie/energie-renouvelable>
- [60] Alexandre Preau. Etude de la pyrolyse de composés lignocellulosiques et modélisation de ce processus. Génie des procédés. Institut National Polytechnique de Lorraine, 2007.