



Ecole Nationale Polytechnique

Département : Génie Mécanique

Mémoire de Magister

Option : Energétique

Thème :

***CONTRIBUTION A L'ETUDE
DE LA PYROLYSE DE LA BIOMASSE***

Réalisé par :

Madjid TATA

Membres de jury :

Dr SAID RECHAK	Professeur à ENP	Président
Dr BOUZID BENKOUSSES	MC (A), ENP	Directeur du mémoire
Dr SALAH LARBI	Professeur à ENP	Examineur
Dr AMOR BOUHDJAR	Directeur de recherche au CDER	Examineur
Dr BOUSSAAD BOUMEDANE	MC à l'université de Blida	Examineur

ملخص

الدراسة التي قدمت في هذه المذكرة تتطرق إلى ظاهرة النقل الحراري و الكمي لكتلة حيوية معرضة لإشعاع حراري في وسط لا هوائي. باستعمال طريقة عددية، قمنا بدراسة تحولات القطعة الحيوية عند التحلل الحراري تحت عدة شروط ابتدائية و حدودية. تعرض هذه الجسيمة الحيوية في ثلاثة أشكال هندسية مختلفة: أسطوانية، كروي و منشوري. يتراوح نصف قطر كل جسيم ما بين: 10^{-2} و 20 ملم ، الحرارة الابتدائية تساوي: 303 K ، أما الحرارة النهائية فهي تتراوح ما بين: 643 K و 1200 K. هذه الشروط الحدودية يمكن أيضا أن يعبر عنها عن طريق المد الحراري الذي يتراوح ما بين: 10 kW.m^2 و 80 kW.m^2 ، (هذا المجال من المد الحراري يدرج في معدل المد الحراري الصادر من احتراق النباتات مثل أشجار الغابات). النموذج الرياضي المقترح لهذه الظاهرة يترجم في جملة من المعادلات التفاضلية المتكونة من أربعة معادلات خاصة بحفظ الأصناف الكيميائية للمادة و واحدة لحفظ الطاقة الحرارية. لحل هذا النوع من المعادلات التفاضلية، يتوجب علينا استعمال أساليب عددية بدأ بتبسيط المعادلات التفاضلية و تحويلها إلى معادلات جبرية باستعمال الفوارق النهائية. معادلات حفظ أصناف المادة الكيميائية تحل بأسلوب رونج كوتا (Runge_attuK)، أما معادلة حفظ الطاقة الحرارية فهي تحل عن طريق النموذج الضمني التام (tmemelatoT eticilpmi). نتائج المحاكاة استغلّت بإدخال مختلف نسب الرطوبة في المادة الحيوية و كذلك ظاهرة تقلص المادة لدراسة تأثيرهما على ظاهرة الانحلال الحراري. دراسة أخرى لمختلف نماذج الحركية الكيميائية لمعرفة مدى تأثير هذه النماذج على دقة نتائج المحاكاة. بالنسبة لدراسة فاعلية البرنامج، أغلبية النتائج المحصل عليها قورنت للنتائج التجريبية و العددية للباحثين المذكورين في الدراسات المقترحة سابقا. نتائج المقارنة أعطت تطابق جيد بين محاكاة الدراسة الحالية و الدراسات السابقة. عامل الرطوبة في المادة الحيوية أظهر تأثيرا واضحا في زمن البيروليز. أثبتت النتائج أن نموذج حركي كيميائي من الدرجة الأولى لا يستطيع أن يكون فعالا عند درجات حرارة أكثر من 700 K. نموذج حركي كيميائي من الدرجة الثالثة يسمح لنا بالحصول على نتائج أكثر دقة و لدرجات حرارة التي تفوق 900 K.

مفتاح الكلمات: التحلل الحراري، كتلة حيوية، بيروليز، الحركية الكيميائية، النقل الحراري، المحاكات

Résumé

L'étude présentée dans ce mémoire concerne la résolution d'un problème couplé de transfert de masse et de chaleur pour une particule de biomasse soumise à un flux de chaleur dans un milieu inerte par une approche numérique afin d'étudier le comportement de la dégradation thermique de cette particule sous différentes conditions. La particule de biomasse est considérée avec trois géométries différentes : cylindrique, sphérique et plane. La dimension de la particule varie entre 10^{-2} et 20 mm environ. La température initiale est supposée égale à 303K, quant à la température finale, elle a été prise entre 643K et 1200K. Ces conditions finales sont équivalentes aux flux de 10 à 80 kW.m^2 , (cet ordre de grandeur de flux représente la chaleur dégagée par un feu de végétation moyen). La modélisation mathématique du problème physique consiste en un système d'équations différentielles couplées et composé de quatre équations de conservation des espèces chimiques et une de transfert de chaleur. La résolution de ces équations nécessite l'application des méthodes numériques en commençant d'abord par la discrétisation des équations différentielles utilisant les différences finies. Les équations de conservation des espèces sont résolues par la méthode de Runge_Kutta d'ordre quatre et l'équation de transfert de chaleur est résolue par le schéma de résolution totalement implicite. Les résultats de simulation sont obtenus en fonction de la teneur en humidité. L'effet du rétrécissement de la particule lors du processus de dégradation, un paramètre déterminant, est pris en considération lors du développement du modèle de dégradation. Différents modèles cinétiques ont été aussi expérimentés numériquement pour étudier leurs impacts sur la précision des résultats. Pour la validation du code élaboré, les différents résultats obtenus ont été comparés à ceux expérimentaux et numériques de la littérature. Une bonne concordance est obtenue. L'étude de l'effet de l'humidité a montré une influence significative sur le temps de pyrolyse. L'étude sur les modèles cinétiques a montré que le modèle cinétique de premier ordre n'est valable que pour des températures inférieures à 700K, alors que celui du troisième ordre permet une meilleure précision pour des températures supérieures à 900K.

Mots clés : Dégradation thermique ; Biomasse ; pyrolyse ; cinétique chimique ; transfert de chaleur ; Simulation

Abstract

The present study concerns a resolution of a coupled problem of heat and mass transfer for a biomass particle submitted to heat flux in an inert environment. Using a numerical approach, a thermal degradation behavior has been studied under several conditions. Three geometries have been studied: cylinder, sphere and slab. The radius of the particle has been varied between 10^{-2} and 20 mm approximately. The initial temperature is 303 K and the final temperature has been varied from 303K to 1200K. These final conditions are also described as heat flux which varies from 10 to 80 kW.m⁻² (such a heat flux ranging is given by an average vegetable fire). The mathematical model consists on differential equations system composed of four mass conservation equations for chemical species and one heat conservation equation describing the heat transfer phenomena. To transform this system on simple algebraic equations, we used finite difference and we numerically resolved them using Runge_Kutta fourth order method for the four equations of mass conservation and full implicit scheme for the heat transfer equation. The moisture and the shrinkage are introduced to assess their impact on the biomass thermal degradation. Several kinetic models have been considered to study their influence on the results accuracy. For the program validation, the several results obtained were compared to the experimental and numerical results showed in the literature and a good compatibility was noticed. The moisture effect showed a significant influence on the pyrolysis time. The study on the kinetic models has proved that a first order kinetic model can't be used for final temperatures greater than 700K, whereas a third kinetic model gives better accuracy and can be applied for temperatures greater than 900 K.

Keywords: thermal degradation ; Biomass ; pyrolysis ; Kinetics ; Heat transfer ; Simulation

Remerciements

Je tiens à remercier Dr Benkoussas Bouzid qui a bien voulu diriger ce travail. Qu'il veuille trouver ici l'assurance de ma profonde gratitude pour son aide précieuse et pour la compétence avec laquelle il a dirigé cette étude.

Monsieur le Docteur Said RECHAK, professeur à ENP, m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du Jury, qu'il veuille trouver ici l'expression de ma gratitude pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail.

Je remercie Dr Salah LARBI, professeur à l'ENP, qui a bien voulu examiner ce travail.

Je remercie également Dr Amor BOUHDIJAR, Directeur de recherche au centre de développement des énergies renouvelables (CDER), de bien vouloir accepter d'examiner ce travail.

J'adresse mes remerciements au Dr Boussaad BOUMEDANE, Maître de conférences à l'université de Blida, qui a bien voulu accepter de juger ce travail.

Enfin, nous remercions tous ceux qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de cet humble travail, un grand merci.

DEDICACES :

Je dédie ce travail à mon père qui m'a toujours encouragé.

A ma douce mère qui m'a toujours comblé d'affection.

A mes chères sœurs et mes chers frères.

A tous mes neveux et mes nièces, pour qui, j'espère une grande réussite dans
leurs études.

A toutes les personnes qui me sont chères ainsi qu'à tous les étudiants qui
parcourront mon étude en espérant qu'elle leur sera bénéfique.

Tata Madjid

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 : Généralité sur la conversion de la biomasse	3
1.1. Introduction	4
1.2. Définition de la biomasse	4
1.2.1. Impact environnemental	5
1.3. Les filières de conversion énergétique de la biomasse	5
1.3.1. La conversion thermochimique	5
1.3.2. La conversion biochimique	7
1.4. Le processus de pyrolyse de la biomasse	8
1.5. Paramètres physiques susceptible d'influencer le processus de pyrolyse	10
1.6. Paramètres susceptible d'influencer la production des espèces de pyrolyse	11
1.7. La pyrolyse rapide et la pyrolyse lente	11
1.8. L'exploitation des produits de pyrolyse dans la production de puissance	12
1.8.1. Principe de fonctionnement	12
1.9. Conclusion	13
Chapitre 2 : Travaux antérieurs	14
2.1. Introduction	15
2.2. Modélisation numérique de la dégradation thermique des matériaux carbonés	15
2.3. Modélisation de la dégradation thermique de matériaux non-carbonés	21
2.4. Modèles cinétiques	22
2.4.1. Modèle global à une seule étape	22
2.4.2. Modèle à multi-réaction à une seule étape	23
2.4.3. Modèle semi-global à deux étapes	24
2.5. Etude énergétique des réactions de pyrolyse	26
2.6. Conclusion	27
Chapitre 3 : Modélisation mathématique	28
3.1. Introduction	29
3.2. Description du système	29
3.2.1. Modèle cinétique	29
3.3. Hypothèses du modèle développé	31
3.4. Les équations mathématiques régissant le processus de dégradation thermique	31
3.5. Conditions initiales et aux limites	34
3.6. Equations décrivant l'évolution en fonction du temps des volumes V_s , V_g et V	34
3.7. Equations mathématiques de conservation sous forme adimensionnelle	35
3.7.1. Choix des grandeurs adimensionnelles	35
3.8. Formulation des conditions initiales et aux limites sous forme adimensionnelle	36
3.9. Conclusion	37

Chapitre 4 : Résolution numérique	38
4.1. Introduction	39
4.2. Traitement numérique des équations de conservation de la masse	39
4.2.1. Principe de la méthode de résolution Runge-Kutta d'ordre quatre	39
4.2.2. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour la biomasse vierge...41	
4.2.3. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour le charbon ₁	42
4.2.4. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour le (Gaz + Volatils) ₁ 43	
4.2.5. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour le (Gaz + Volatils) ₂ 44	
4.3. Les valeurs et les paramètres utilisées dans la résolution numérique	45
4.4. Traitement numérique de l'équation de conservation de l'énergie	45
4.4.1. Discrétisation de l'équation différentielle (4-1)	45
4.4.2. Résolution de l'équation de la chaleur par la méthode totalement implicite	46
4.5. Processus de résolution	47
4.6. Organigramme de calcul	48
4.7. Conclusion	49
 Chapitre 5 : Résultats et interprétation	 50
5.1. Introduction	51
5.2. Validation	51
5.2.1. Validation expérimentale	51
5.2.2. Validation Numérique	54
5.3. Etude de la dégradation de la biomasse	58
5.4. Influence des paramètres physiques sur la dégradation thermique de la biomasse	64
5.4.1. Effet de la taille de la particule sur le processus de pyrolyse	64
5.4.2. Variation de la température à travers la particule de biomasse	65
5.4.3. Les régimes thermiquement épais et mince	66
5.4.4. Les produits des réactions de pyrolyse	70
5.4.5. Conversion de la masse en fonction du temps.....	70
5.4.6. Variation du temps de pyrolyse en fonction de la température	71
5.4.7. Pyrolyse de la biomasse humide	72
5.4.8. Effet de l'humidité sur le temps de pyrolyse	72
5.4.9. Flux massiques d'évaporation d'eau et des produits de pyrolyse	73
5.4.9.1. Influence de l'humidité sur les flux massiques	74
5.4.9.2. Influence de la géométrie sur le processus de dégradation	75
5.4.9.3. Influence du flux de chaleur externe sur le processus de dégradation ...	75
5.4.9.4. Effet de la taille de la particule sur le processus de dégradation	76
5.4.9.5. Régime thermiquement épais (2.5 mm)	77
5.5. Influence des différents modèles cinétiques sur la conversion de la biomasse	78
5.6. Conclusion	83
Conclusion générale	84
Annexe	87
Références bibliographiques	92

NOMENCLATURE

a_1, a_2, a_3 et a_{h_2o}	Facteurs pré-exponentiel	s^{-1}
b	Facteur de géométrie (Plane $b= 1$, Cylindre $b= 2$ et Sphère	
C_p	Chaleur spécifique	$kJ/(kg.K)$
D_{eG_1}	Diffusivité effective des gaz et volatils	m^2/s
e_{h_2o}, e_3	Energies d'activations	$J/mole$
h	Coefficient de transfert convectif	$W/(m^2.K)$
k_m	Constante de réaction pour le séchage	s^{-1}
k_1, k_2 et k_3	Constante de réactions pour les espèces chimiques	s^{-1}
k	Coefficient de conductivité thermique	$W/(m.K)$
L_v	Chaleur latente de vaporisation	kJ/kg
P	Pression des gaz	N/m^2
R	Distance radiale de la particule	m
R_m	Constante universelle des gaz parfaits	$J/(mole.K)$
R_s	Constante spécifique des gaz parfaits	$J/(K.g.K)$
t	Temps	S
T	Température	K
T_0	Température initiale	K
T_∞	Température infinie	K
u	Vitesse d'écoulement des gaz	m/s
V	Volume de la biomasse vierge	m^3
\bar{V}	Volume adimensionnel de la biomasse vierge	
V_g	Volume des gaz et volatils	m^3
\bar{V}_g	Volume adimensionnel des gaz et volatils	
V_s	Volume de l'espèce solide	m^3

\bar{V}_S	Volume adimensionnel du solide	
x	Distance radiale adimensionnelle	
ρ_B	Densité de la biomasse vierge	kg/m ³
$\bar{\rho}_B$	Densité adimensionnelle de la biomasse vierge	
ρ_{Bm}	Densité de la biomasse vierge humide	kg/m ³
$\bar{\rho}_{Bm}$	Densité adimensionnelle de la biomasse vierge humide	
ρ_{G_1}	Densité des gaz et volatils primaires	kg/m ³
$\bar{\rho}_{G_1}$	Densité adimensionnelle des gaz et volatils primaires	
ρ_{G_2}	Densité des gaz et volatils secondaire	kg/m ³
$\bar{\rho}_{G_2}$	Densité adimensionnelle des gaz et volatils secondaire	
ρ_{C_1}	Densité du charbon primaire	kg/m ³
$\bar{\rho}_{C_1}$	Densité adimensionnelle du charbon primaire	
ρ_{C_2}	Densité du charbon secondaire	kg/m ³
$\bar{\rho}_{C_2}$	Densité adimensionnelle du charbon secondaire	
θ	Température adimensionnelle de référence	
τ	Temps adimensionnel de référence	
ΔH	Chaleur de réaction	kJ/kg
σ	Constante de Stefan-Boltzmann	W/(m ² .K ⁴)
ε	Coefficient d'émissivité	
ϕ	Perméabilité	m ²
ν	Viscosité cinématique	m ² /s
μ	Viscosité Dynamique	kg/(m.s)
α	Diffusivité thermique	m ² /s

Table des figures

Fig. 1.1 : Images de Biomasse végétale	4
Fig. 1.2 : Les différents procédés de conversion thermochimique	7
Fig. 1.3 : Schéma récapitulatif des principales filières de transformation de la biomasse	8
Fig. 1.4 : Le processus de pyrolyse	8
Fig. 1.5 : Les différentes étapes de pyrolyse en fonction de la température	9
Fig. 1.6 : Processus de combustion d'une pièce de bois	9
Fig. 1.7 : Pyrolyse lente et rapide en fonction des conditions opératoires	11
Fig. 1.8 : Schéma de l'installation de la mini-centrale à gaz de pyrolyse	12
Fig. 3.1 : Schéma du modèle cinétique considéré	29
Fig. 3.2 : Processus de dégradation de la biomasse par pyrolyse	30
Fig. 4.1 : Présentation graphique pour le développement de la méthode RK4	40
Fig. 4.2 : Schéma progressif	46
Fig. 4.3 : Schéma centré	46
Fig. 4.4 : Schéma totalement implicite	47
Fig. 4.5 : Organigramme de calcul	48
Fig. 5.1 : Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction de la température ($R=3\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=643\text{K}$).....	52
Fig. 5.2 : Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps ($R=3\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=780\text{K}$).....	52
Fig. 5.3 : Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps ($R=7.5\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=773\text{K}$).....	53
Fig. 5.4 : Profil de température en fonction de la distance radiale pour une particule cylindrique ($R=11\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=643\text{K}$, Temps=4min)	54
Fig. 5.5 : Profil de température en fonction de la distance radiale pour une particule cylindrique ($R=11\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=753\text{K}$, Temps = 3 min)	54
Fig. 5.6 : Profil de température en fonction du temps au centre d'une particule cylindrique de rayon $R=3\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=643\text{K}$	56
Fig. 5.7 : Profil de température en fonction du temps au centre d'une particule cylindrique de rayon $R=3\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=780\text{K}$	56
Fig. 5.8 : Profil de température en fonction de la distance radiale d'une particule cylindrique de rayon $R=11\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=643\text{K}$, Temps=4minutes	57
Fig. 5.9 : Profil de température en fonction de la distance radiale d'une particule cylindrique de rayon $R=11\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=643\text{K}$, Temps=11 minutes	57
Fig. 5.10: Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique ($T_0=303\text{K}$, $T_f=679\text{K}$ ($\sim 10\text{kW/m}^2$), Humidité=0%)	58

Fig. 5.11 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=679\text{K}$ ($\sim 10\text{kW/m}^2$), Humidité=30%)	59
Fig. 5.12 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=679\text{K}$ ($\sim 10\text{kW/m}^2$), Humidité=50%).....	59
Fig. 5.13 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=747\text{K}$ ($\sim 20\text{kW/m}^2$), Humidité=30%).....	60
Fig. 5.14 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=747\text{K}$ ($\sim 20\text{kW/m}^2$), Humidité=50%).....	60
Fig. 5.15 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=956\text{K}$ ($\sim 50\text{kW/m}^2$), Humidité=30%).....	61
Fig. 5.16 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=956\text{K}$ ($\sim 50\text{kW/m}^2$), Humidité=50%).....	61
Fig. 5.17 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sphérique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=956\text{K}$ ($\sim 50\text{kW/m}^2$), Humidité=0%)	62
Fig. 5.18 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sphérique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=956\text{K}$ ($\sim 50\text{kW/m}^2$), Humidité=30%)	63
Fig. 5.19 : Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sphérique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_f=1148\text{K}$ ($\sim 100\text{kW/m}^2$), Humidité=30%) ...	63
Fig. 5.20 : Production du charbon en fonction de la température pour une particule cylindrique ($R=0.0125\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$)	64
Fig. 5.21 : Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps pour différents diamètres ($T_0=303\text{K}$, $T_f=900\text{K}$).....	65
Fig. 5.22 : Profil de température à la surface et au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps ($R=0.25\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=900\text{K}$).....	65
Fig. 5.23 : Profil de température en fonction du temps pour différentes positions d'une particule cylindrique ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=900$).....	66
Fig. 5.24 : Profil de température en fonction du temps au centre et à la surface d'une particule cylindrique pour différentes dimensions ($T_0=303\text{K}$, $T_f=900\text{K}$).....	67
Fig. 5.25 : Profil de conversion de la biomasse en fonction de la distance radiale pour différentes périodes ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=900\text{K}$, $Biot=0.1$)	68
Fig. 5.26 : Profil de conversion de la biomasse en fonction de la distance radiale pour différentes périodes ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=900\text{K}$, $Biot=50$)	69
Fig. 5.27 : Produits de pyrolyse finaux et temps de pyrolyse en fonction du nombre de Biot ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_f=900\text{K}$).....	69
Fig. 5.28 : Profil de conversion de la biomasse vers les différentes espèces en fonction de la distance radiale pour une particule cylindrique ($R = 0.02\text{m}$, $T_0 = 303\text{K}$, $T_f = 900\text{K}$, Temps = 100 s)	70
Fig. 5.29 : Conversion de la biomasse vers les différentes espèces en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour un temps de 550 s ($R= 0.02\text{m}$, $T_0= 303\text{K}$, $T_f= 900\text{K}$).....	71
Fig. 5.30 : Temps de pyrolyse en fonction de la température pour une particule cylindrique ($R= 0.0001\text{m}$, $T_0= 303\text{K}$)	71
Fig. 5.31 : Evolution de la dégradation thermique pour une particule cylindrique de rayon 0.02 m et une teneur de $\text{H}_2\text{O}= 10\%$	72

Fig. 5.32 : Effet de la teneur en humidité sur le temps de pyrolyse pour une particule de différents rayons	73
Fig. 5.33 : Evolution du flux massique de vaporisation et de pyrolyse pour une particule thermiquement mince (Teneur en humidité = 30%).....	73
Fig. 5.34 : Evolution des flux massique de la vapeur d'eau et de pyrolyse en fonction du temps pour différents pourcentage d'H ₂ O (R= 0.00025 m, Q _{ext} = 40 kW/m ²)	74
Fig. 5.35 : Evolution des processus de séchage et de pyrolyse en fonction du temps pour trois géométries de la particule (longueurs caractéristiques=0.25mm, teneur en eau= 30%)	75
Fig. 5.36 : Evolution des processus de séchage et de pyrolyse pour une particule cylindrique en fonction du temps pour différents flux de chaleurs externes (R=0.25mm, teneur en eau= 30%)	76
Fig. 5.37 : Evolution des flux massique en fonction du temps pour différentes dimensions de la particule (H ₂ O= 30%, Q _{ext} = 40 kW/m ²)	77
Fig. 5.38 : Evolution des flux massiques d'évaporation d'eau et des produits de pyrolyse pour une particule cylindrique en fonction du temps (R=2,5 mm, H ₂ O=30%, Q _{ext} =40 kW/m ²)	78
Fig. 5.39 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de température (R= 0.003 m, T ₀ = 303 K, T _f = 643 K)	79
Fig. 5.40 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de température (R= 0.0075 m, T ₀ = 303 K, T _f = 773 K)	79
Fig. 5.41 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de température (R= 0.003 m, T ₀ = 303 K, T _f = 780 K)	80
Fig. 5.42 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de température (R= 0.003 m, T ₀ = 303 K, T _f = 900 K)	80
Fig. 5.43 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de température en fonction de la distance radiale (R= 0.011 m, T ₀ = 303 K, T _f = 643 K, temps= 4minutes).....	81
Fig. 5.44 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de température en fonction de la distance radiale (R= 0.011 m, T ₀ = 303 K, T _f = 753 K, temps= 3 minutes).....	81
Fig. 5.45 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de température en fonction de la distance radiale (R= 0.011 m, T ₀ = 303 K, T _f = 643 K, temps= 11 minutes).....	82
Fig. 5.46 : Influence des modèles cinétiques sur le profil de conversion de la biomasse (R= 0.000915 m, T ₀ = 303 K, T _f = 679 K)	82
Fig. 5.47 : Influence des modèles cinétiques sur les concentrations des espèces produits (R= 0.02 m, T ₀ = 303 K, T _f = 900 K)	83

Introduction Générale

La production de la puissance à partir de la biomasse est au centre des intérêts scientifiques et industriels. Devant la diminution de la disponibilité du combustible fossile et son atteinte à la préservation de l'environnement par l'éjection des polluants issus des systèmes énergétiques conventionnels, cette puissance est une alternative propre et durable.

La conversion énergétique de la biomasse est considérée comme une action clé pour atteindre les objectifs de développement durable fixés par les signataires du Protocole de Kyoto, car elle permet de réduire l'utilisation de combustibles fossiles, tandis que le CO₂ libéré durant la conversion énergétique est compensé par le CO₂ absorbé durant le cycle de vie du végétal.

La conversion de la biomasse en général se fait avec deux principaux processus : la conversion biochimique, à savoir la digestion anaérobie, la fermentation et la photosynthèse et la conversion thermochimique dans laquelle on classe la combustion, la gazéification et la pyrolyse. La pyrolyse de la biomasse est un processus dans lequel la matière se dégrade sous l'effet de la chaleur. De nos jours, le phénomène de pyrolyse gagne une importance croissante, il n'est pas uniquement un processus indépendant, mais il est aussi une étape incontournable dans le processus de combustion. Il a beaucoup d'avantages par rapport à d'autres sources d'énergies fossiles et même renouvelables. Ce processus de pyrolyse donne comme produits solides le charbon de bois et comme produits liquides le goudron et d'autres liquides organiques telles que les huiles pyrolytiques. Il peut aussi produire des gaz tels que le méthane, l'éthane, le mono-oxyde de carbone. Ces produits sont intéressants du fait qu'il est possible de les utiliser comme sources d'énergies alternatives.

La chaîne de réactions de pyrolyse de la biomasse est extrêmement complexe, vu la formation d'un nombre de produits intermédiaires importants. Il n'y a pas donc, de mécanismes universels établis pour décrire le processus, de ce fait, plusieurs modèles cinétiques ont été suggérés et testés pour le prédire.

L'objectif de ce travail est d'élaborer un code de calcul pour étudier la dégradation thermique de la biomasse et l'effet de certains paramètres physiques tels que la teneur en humidité et le rétrécissement de la particule solide durant le phénomène de pyrolyse sur la conversion de la biomasse. Trois modèles cinétiques différents ont été expérimentés numériquement pour étudier leurs impacts sur la précision des prédictions.

L'étude a été abordée par une introduction générale dans laquelle nous avons situé la problématique suivie par un chapitre sur des généralités sur la conversion de la biomasse. Les différents types de conversion de la biomasse ont été décrits. La dégradation par pyrolyse a été particulièrement développée pour la biomasse.

Un deuxième chapitre est consacré à la présentation des travaux antérieurs pertinents sur le phénomène de la dégradation thermique en rapport avec la présente étude. La modélisation de la pyrolyse nécessite un modèle cinétique chimique, un modèle de transfert de chaleur et un modèle de transfert de masse. De ce fait, nous avons consacré le troisième chapitre pour la modélisation mathématique des différents modèles cités ci-dessus.

La modélisation mathématique a produit un système d'équations différentielles couplées, ce qui nécessite sa résolution avec des procédures numériques. La résolution numérique de ces équations différentielles est présentée dans un quatrième chapitre dans lequel nous avons défini les différents schémas de résolution numérique. Après un choix adéquat d'un schéma de résolution, les détails de la discrétisation des équations différentielles et de la résolution numérique sont développés. Nous terminons par présenter l'organigramme de calcul. Ce dernier est transformé en un code de calcul à l'aide du langage de programmation Fortran 90.

Une validation qualitative et quantitative du code de calcul est présentée dans un cinquième chapitre par des comparaisons des résultats obtenus avec ceux expérimentaux de Pyle et Zaror [1] et d'autres résultats numériques tels que, ceux de l'étude numérique de Babu et Chaurazia [2]. Les résultats présentent une bonne concordance avec l'étude expérimentale de Pyle et Zaror [1]. Les différents résultats obtenus relatifs à l'effet de l'humidité et du rétrécissement ont montré une nette amélioration par rapport aux résultats de Babu et Chaurazia dans lesquelles l'humidité a été négligée. L'étude de l'influence des modèles cinétiques sur le phénomène de dégradation a montré que le choix du modèle cinétique joue un rôle très important dans la convergence du système numérique et la précision des résultats.

Nous terminerons cette étude par une conclusion générale dans laquelle nous avons rappelé les principaux résultats et leurs interprétations, ainsi que les perspectives et les extensions possibles à la présente étude.

CHAPITRE 1

GENERALITES SUR LA CONVERSION DE LA BIOMASSE

1.1. Introduction

Dans ce qui suit nous décrivons le phénomène de pyrolyse de la biomasse ainsi que son impact sur l'industrie énergétique, et plus particulièrement la production d'une énergie renouvelable.

1.2. Définition de la biomasse

La biomasse est un terme utilisé pour toute matière organique d'origine végétale ou animale. La biomasse considérée à des fins énergétiques (que nous appellerons biomasse-énergie) englobe les végétaux provenant de cultures et des déchets. Les cultures énergétiques recouvrent des plantes très diverses telles que les oléagineux, les graminées comme le maïs et la canne à sucre (plantes riches en carbone), le bois, qui est le principal représentatif (figure 1.1).



Fig. 1.1 : Images de Biomasse végétale

La biomasse est une source d'énergie renouvelable, ne conduisant à aucune accumulation de gaz à effet de serre et pouvant contribuer à notre indépendance énergétique. Parmi les avantages de la biomasse nous citons :

- la réduction de la dépendance énergétique.
- la réduction des émissions de gaz à effet de serre.
- l'ouverture de nouveaux débouchés pour l'agriculture.

1.2.1. Impact environnemental

La biomasse se caractérise, généralement, par une faible teneur en cendres et son quasi absence de soufre. De plus le CO₂ rejeté par la combustion de la biomasse dans les centrales est réabsorbé par les végétaux pour leur croissance (photosynthèse). Faisant partie d'un véritable cycle, le CO₂ ne s'ajoute pas à celui déjà contenu dans la biosphère, contrairement au carbone issu des combustibles fossiles [3].

1.3. Les filières de conversion énergétique de la biomasse

Les principales filières de conversion de la biomasse sont : la conversion thermochimique et la conversion biochimique.

1.3.1. La conversion thermochimique

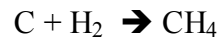
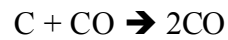
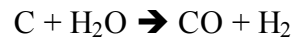
La thermochimie est une voie de conversion reposant sur un craquage des biomolécules sous l'effet de la chaleur. La chaleur peut être produite de façon endogène (par combustion d'une partie de la biomasse), ou exogène (à partir d'un flux externe). Selon les conditions de transformation (température, pression, teneur en agents oxydants, humidité), celle-ci produit différents composés solides, liquides ou gazeux, en proportions variables. Les principaux phénomènes de la thermochimie sont :

- **Pyrolyse** : C'est la décomposition de la biomasse sous l'effet de la chaleur et en absence d'agent oxydant, dont les produits sont un mélange de gaz légers incondensables, d'hydrocarbures lourds (goudron) et de coke (carbone fixe), leur proportion relative dépendant des conditions de traitement. Si cette biomasse est chauffé lentement et/ou à basse température, la production de coke sera favorisée. A l'inverse, si on chauffe rapidement et/ou à haute température la production de gaz sera favorisée.

En pyrolyse lente qui se fait généralement à basse température (400-500°C), le produit de la réaction de décomposition sera majoritairement solide (coke). Le coke est un produit qui peut être considéré comme un combustible secondaire si celui-ci n'est pas trop chargé en éléments polluants. Il peut également être gazéifié dans un dispositif séparé. Au contraire, en pyrolyse rapide (quelques secondes) à haute température (600-900°C) le produit majoritaire formé est un gaz combustible. Le mélange gazeux produit peut être craqué thermiquement pour produire un gaz condensable (goudron) directement utilisable, après épuration, en moteur à gaz et/ou en turbine à gaz [4].

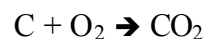
- **Gazéification** : c'est une dégradation thermique qui se fait dans une atmosphère en défaut d'air et enrichit en vapeur d'eau et dioxyde de carbone (agents réactionnels), les matières volatiles émises ne subiront pas de processus de combustion. Le carbone fixe se mettra à

réagir avec la vapeur d'eau et le CO₂ à des températures de 850-900°C dans des réactions endothermiques de transformation thermochimiques dites de gazéification, de type :



Les deux premières réactions sont favorisées à haute température (850-900°C) et à basse pression (~ 1 bar), tandis que la dernière est favorisée à basse température (700°C) et à haute pression (10-20 bars). Ces réactions sont endothermiques, l'apport d'énergie nécessaire est en général réalisé en brûlant une faible partie de la charge, soit à l'air, soit à l'oxygène. Le mélange gazeux produit peut être récupéré, éventuellement craqué thermiquement pour en supprimer les hydrocarbures lourds (goudrons), puis épuré et refroidi (chaudière de récupération) pour alimenter un moteur à gaz ou une turbine à gaz. A haute pression, et avec un enrichissement à l'hydrogène, on produira essentiellement du CH₄. Dans cette opération, le carbone fixe a été entièrement épuisé et le résidu solide produit est inerte [4].

- **La combustion :** Si l'atmosphère de traitement est oxydante c'est-à-dire, riche en oxygène, ces matières volatiles gazeuses s'enflamment, après un délai dit délai d'inflammation. La chaleur produite par la combustion rapide, du mélange air – gaz volatils permet alors de démarrer un processus de combustion à partir de la surface du carbone fixe résiduel. On a alors affaire à un processus d'oxydation hétérogène de type :



Les produits de ces réactions sont des inertes (cendres) et des gaz chauds incombustibles. La récupération d'énergie calorifique est effectuée par refroidissement des fumées à l'aide d'une chaudière permettant la production de vapeur d'eau pressurisée et surchauffée pour une conversion de la chaleur en puissance [4].

Dans le schéma de la figure 1.2 on montre les différents procédés de conversion thermochimique qui sont : la combustion, caractérisée par la présence d'un agent oxydant, représenté par la couleur rouge, la pyrolyse qui s'effectue sans l'agent oxydant, représentée par la couleur bleue et la gazéification qui se caractérise par une oxydation partielle, représentée par un mélange de couleur (Rouge et bleue).

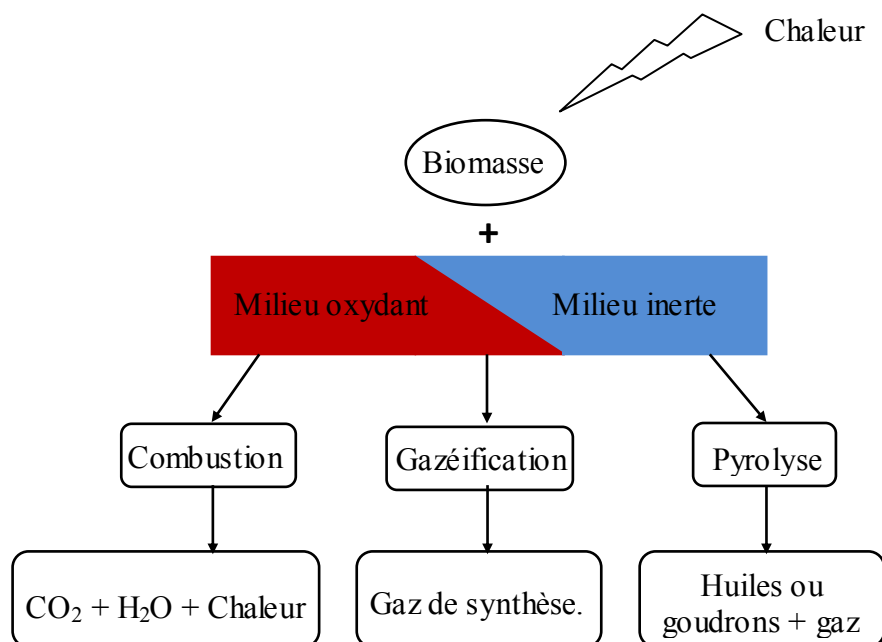


Fig. 1.2 : Les différents procédés de conversion thermo-chimique [5]

1.3.2. La conversion biochimique

Les différentes méthodes de conversion biochimique sont :

- **La digestion anaérobique** : c'est un procédé naturel de transformation de la matière organique par des bactéries en absence d'oxygène. C'est la "méthanisation" qui conduit à la formation d'un biogaz riche en méthane et utilisable comme source d'énergie. Elle peut également être conduite dans des digesteurs, enceintes confinées à l'intérieur desquelles les réactions de méthanisation sont optimisées et contrôlées. La méthanisation est utilisée comme moyen de traitement de déchets ou sous-produits organiques : boues de stations d'épuration, bio-déchets municipaux, effluents industriels, litière et fumiers. Elle permet en effet de transformer la matière organique facilement biodégradable, qui est à l'origine des pollutions organiques et des odeurs.
- **La Fermentation** : la fermentation alcoolique des hydrates de carbone contenus dans la biomasse conduit à la production de bioéthanol. Ce dernier peut être utilisé pur ou en mélange avec l'essence dans les moteurs à combustion interne.

Dans la figure 1.3, nous présentons un récapitulatif des procédés de production de l'énergie à partir de la biomasse.

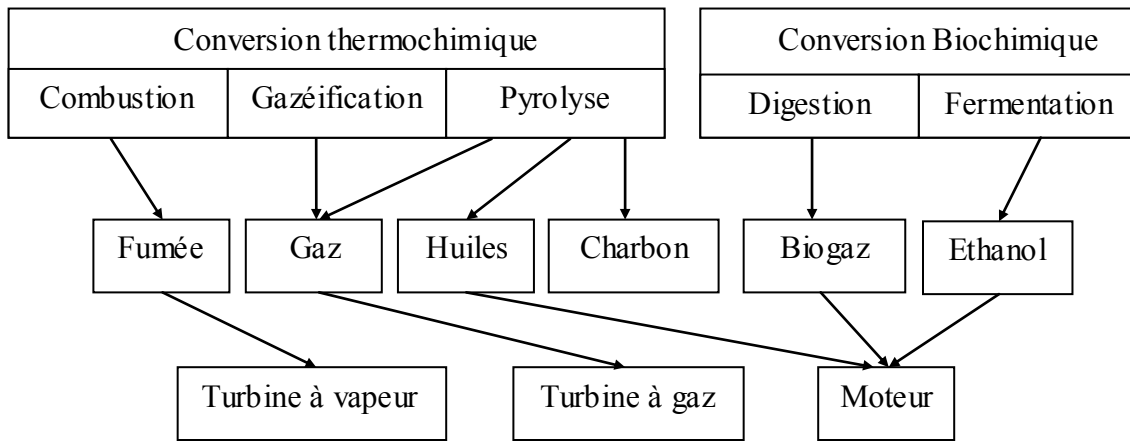


Fig.1.3 : Schéma récapitulatif des principales filières de transformation de la biomasse et de leurs utilisations.

Dans la présente étude, nous nous intéressons à la méthode de conversion thermochimique, et plus particulièrement à la pyrolyse de la biomasse.

1.4. Le processus de pyrolyse de la biomasse

La pyrolyse est une dégradation thermique du combustible solide. Elle produit essentiellement trois principales composantes : Gaz, goudron ou huiles pyrolytique et charbon. Le composant gaz consiste en des hydrocarbures légers, des mono-oxydes de carbone (CO) et des dioxydes de carbone (CO₂). Le goudron est un composant condensable composé d'une large variété d'espèces moléculaires, incluant les hydrocarbures, les acides organiques, l'aldéhyde, l'alcool, le phénol et autres. Il peut encore subir une réaction secondaire pour être décomposé en gaz et charbon. Le charbon est le carbone solide résiduel.

La figure 1.4 illustre le processus de pyrolyse et les différents produits qui en découlent.

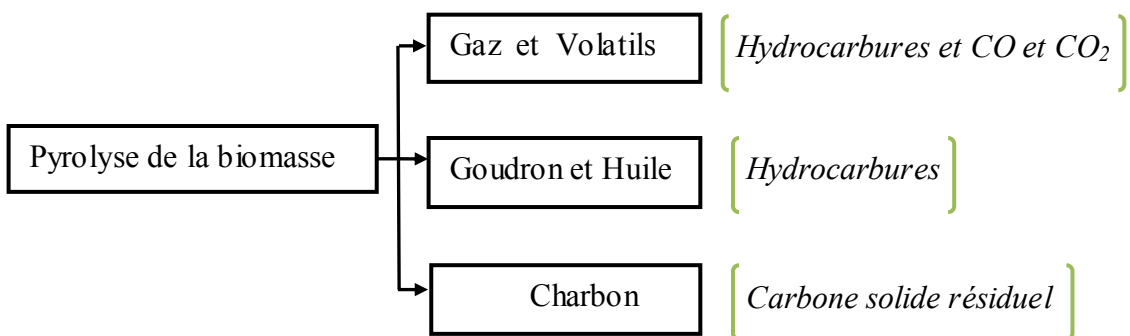


Fig.1.4 : Schéma d'un processus de pyrolyse

La figure 1.5 montre les différentes étapes de l'évolution de la dégradation thermique de la biomasse en fonction du temps.

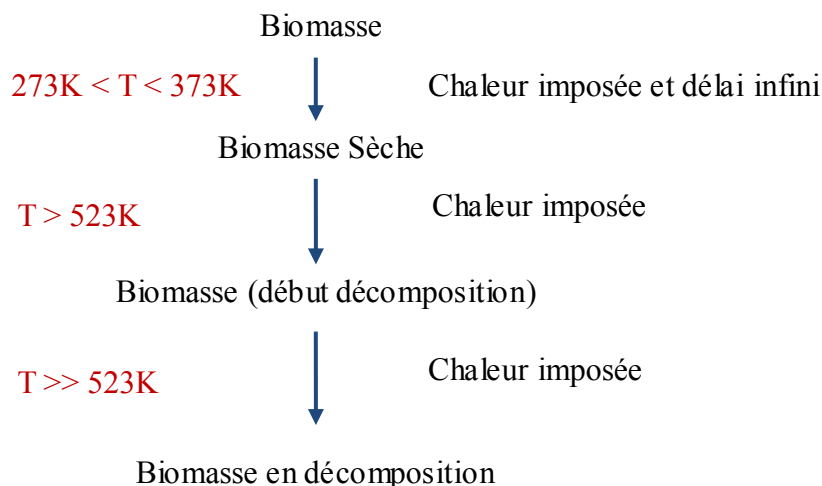


Fig.1.5 : Les différentes étapes de pyrolyse en fonction de la température [6]

La figure 1.6 représente un échantillon de bois dans un état d'oxydation produisant une flamme ainsi que la phase de séchage et de pyrolyse. Les produits de la phase gazeuse formés au front de pyrolyse s'écoulent vers l'extérieur à travers la couche de charbon chaude, et vers l'intérieur où se trouve la région non pyrolysée dans laquelle certains produits se condensent. La pyrolyse vers l'intérieur de la matière est accompagnée d'une diminution de température au cours du temps. Le flux massique et la composition des produits de la phase gazeuse changent avec les conditions de réaction et les propriétés physico-chimiques de la biomasse.

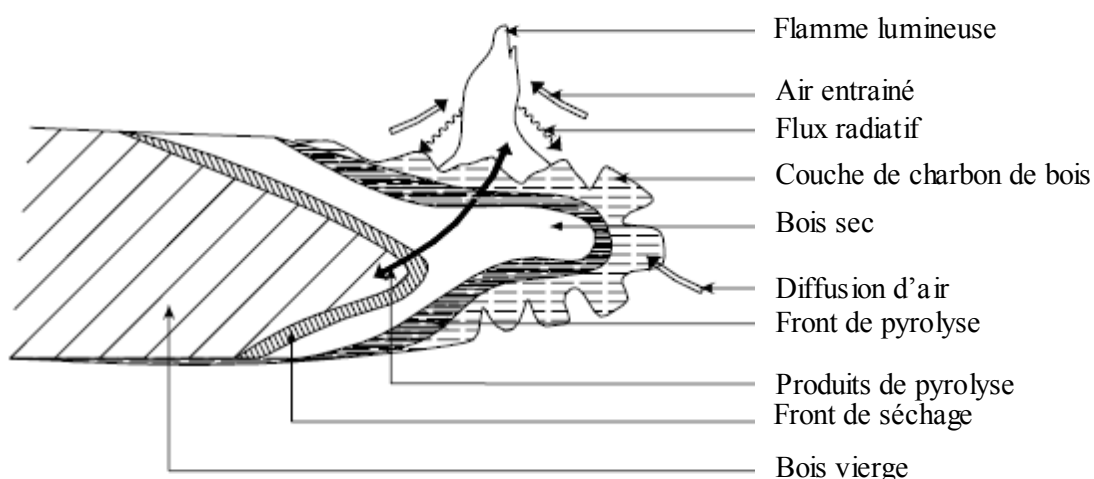


Fig.1.6 : Processus de combustion 'un morceau de bois [7]

Quand la biomasse vierge est exposée à un flux externe, sa masse diminue, à cause du phénomène de séchage, de pyrolyse et de la combustion du charbon produit. La phase de

combustion évolue dans le temps suivant le schéma présenté dans la figure 1.7. Durant la combustion des gaz produits par la pyrolyse, la flamme enveloppe totalement la surface de la biomasse.

Le charbon formé dans la couche externe à une conductivité thermique inférieure à celle de la biomasse vierge [7]. Il réduit le taux de transfert de chaleur vers l'extérieur de la biomasse où les gaz combustibles sont produits, ainsi le taux de pyrolyse diminue.

L'apport d'énergie thermique externe pour le processus de pyrolyse est nécessaire uniquement pour l'amorçage de la réaction. En effet, si le pouvoir calorifique des matériaux pyrolysés est suffisant, la chaleur nécessaire est fournie par la combustion des sous-produits (notamment les produits gazeux). La pyrolyse devient auto-thermique.

1.5. Paramètres physiques Susceptible d'influencer le processus de pyrolyse

- **La taille de la particule** : la taille de la particule est directement proportionnelle à la masse de la biomasse, par conséquent, elle peut augmenter le temps de dégradation. La production des espèces peut être plus importante.
- **La température externe, comme le flux de chaleur externe** est un paramètre déterminant, il peut accélérer ou ralentir le processus de dégradation par son intensité.
- **La conductivité thermique** : ce paramètre est directement lié au transfert de chaleur par conduction, plus la conductivité thermique est grande, plus le transfert de chaleur est important ce qui accélère la pyrolyse.
- **Le coefficient de transfert de chaleur par convection** est un paramètre qui est proportionnel au transfert de chaleur par convection, par conséquent, il peut avoir une influence sur la pyrolyse.
- **L'émissivité thermique** est un coefficient de l'équation de flux de chaleur par rayonnement, il varie proportionnellement au flux de chaleur.

1.6. Paramètres susceptibles d'influencer la production d'espèces de pyrolyse

Parmi les paramètres influençant la production des différentes espèces de pyrolyse, nous citons la température et la taille de la particule. Si la température externe augmente, les effets suivants peuvent être observés :

- Une augmentation du taux de pyrolyse.
- La couche de charbon augmente en absence de la combustion et celle de la biomasse diminue. Les températures internes des différentes couches augmentent.
- La production des gaz de pyrolyse augmente puis diminue ensuite elle reprend vers l'augmentation suite au craquage de la couche de charbon qui s'est formée.
- Le temps de pyrolyse diminue.

1.7. La pyrolyse rapide et la pyrolyse lente

On distingue deux types de pyrolyse : la pyrolyse rapide, dite pyrolyse flash, et la pyrolyse lente, dite Carbonisation. Dans la pyrolyse rapide, une température optimale avec un taux de chauffage sont choisis pour réduire le temps de pyrolyse afin de maximiser la production des huiles et des gaz. Dans la pyrolyse lente, le temps de pyrolyse varie entre des minutes et des journées. Elle est utilisée pour la production maximale du charbon. Les deux types de pyrolyse (rapide et lente) sont présentés sur le schéma de la figure 1.7.

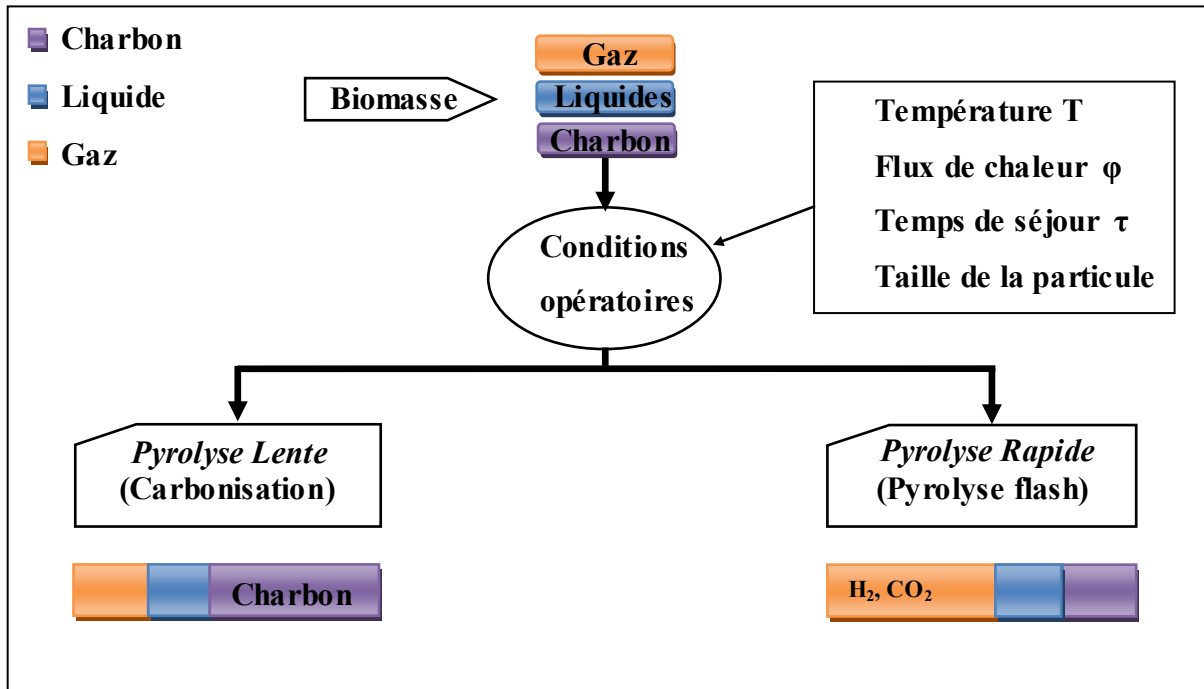


Fig.1.7 : Pyrolyse lente et rapide en fonction des conditions opératoires [7]

1.8. L'exploitation des produits de pyrolyse dans la production de puissance

Afin de mettre en évidence l'utilité de la pyrolyse de la biomasse, une mini-centrale de puissance utilisant comme source d'énergie les produits de pyrolyse de la biomasse est décrite dans la figure 1.8 [3].

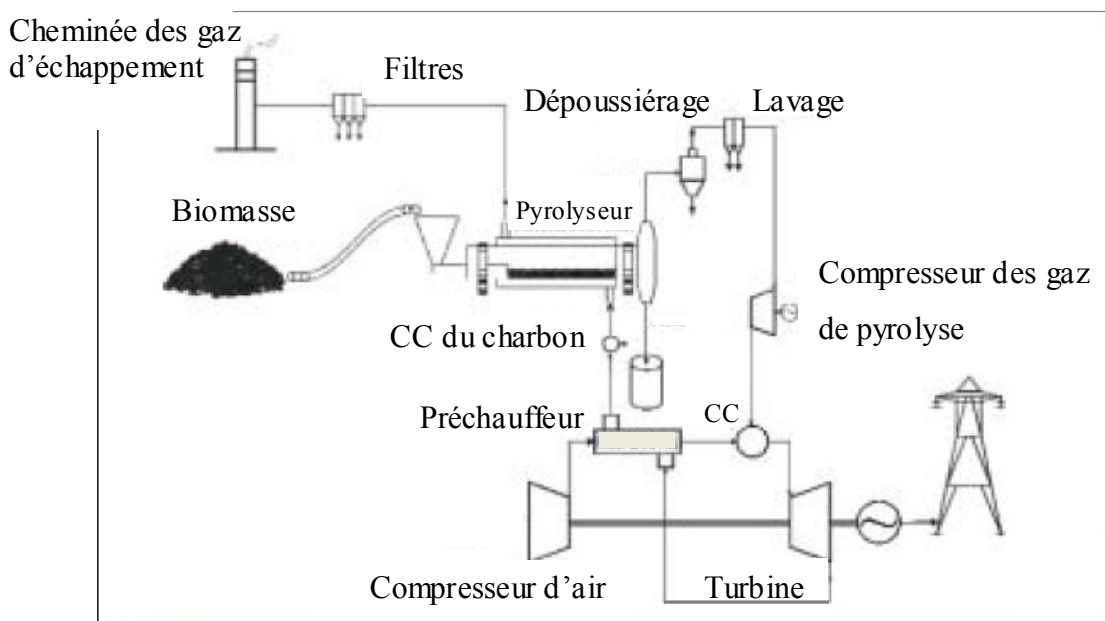


Fig. 1.8 : Schéma de l'installation de la mini-centrale à gaz de pyrolyse [3]

La mini-centrale représentée dans la figure 1.8 ci-dessus est constituée principalement d'une trémie de chargement de biomasse vierge, d'un pyrolyseur, d'une chambre de combustion spécifique pour le charbon, de deux compresseurs l'un pour l'air, l'autre pour les gaz de pyrolyse, d'une turbine et d'un préchauffeur, en plus les accessoires de dépoussiérage, de lavage et de filtrage.

1.8.1. Principe de fonctionnement

La Biomasse vierge est acheminée vers le pyrolyseur à travers la trémie. Ce pyrolyseur est un échangeur de chaleur constitué d'un cylindre rotatif à l'intérieur d'un cylindre fixe. La biomasse vierge est acheminée à l'aide d'une vis sans fin jusqu'au cylindre interne qui tourne pour favoriser le transfert de chaleur. Dans l'espace annulaire, entre le cylindre rotatif et le cylindre fixe, circule les gaz chauds provenant de l'échappement de la micro-turbine, leur température peut être augmentée par la postcombustion du charbon effectuée dans une chambre de combustion spécifique (CC du charbon).

À l'intérieur du réacteur, la biomasse, à une température d'environ 600°C et en l'absence totale ou quasi-totale d'oxygène, subit un processus de pyrolyse rapide pour obtenir du gaz de synthèse, de l'huile de pyrolyse à l'état de vapeur, du charbon et de la vapeur d'eau. La phase gazeuse est extraite du pyrolyseur et envoyée dans un système à cyclone de dépoussiérage pour éliminer les particules en suspension. Dans l'étage suivant, le gaz est refroidi pour condenser la vapeur d'eau et les goudrons en suspension et pour éliminer les éventuels composés chimiques agressifs qui pourraient endommager les organes mécaniques de la centrale. Le gaz de synthèse ainsi épuré est porté à la pression nécessaire par un compresseur

et injecté dans la chambre de combustion de la micro-turbine. Après avoir cédé sa chaleur au pyrolyseur, les fumées d'échappement de la micro-turbine sont envoyées avec les produits de combustion du charbon, au système de traitement et de filtration pour leur décontamination avant leur rejet dans l'atmosphère.

Tableau 1.1 : Performance d'une mini-centrale à gaz [3].

Puissance électrique nette	65 kW
Production annuelle d'électricité	400000 kWh
Rendement de conversion	18.8 %
Production annuelle évitée de CO ₂	290 tonnes

1.9. Conclusion

A l'issue de ces généralités sur le processus de pyrolyse de la biomasse, nous avons jugé qu'il est intéressant d'exploiter les potentialités d'un tel processus dans la production d'une énergie propre et moins chère par l'étude fondamentale de la dégradation thermique à des conditions opératoires données.

CHAPITRE 2

TRAVAUX ANTERIEURS

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons les différents travaux qui ont été réalisés sur les processus de séchage, de pyrolyse et de combustion de la biomasse. Certains travaux liés aux feux et à la propagation des fumés sont aussi inclus. Une description exhaustive des différents modèles cinétiques de dégradation thermique est aussi introduite.

2.2. Modélisation numérique de la dégradation thermique des matériaux carbonés

La modélisation de la dégradation thermique des matériaux en général et de la biomasse en particulier a été entreprise par plusieurs chercheurs durant ces dernières décennies [8-26], car c'est l'un des processus majeur dans la conversion de la biomasse et dans la dégradation des matériaux. Le développement de ces modèles de simulation de la dégradation thermique est basé sur un choix d'un modèle cinétique adéquat et l'utilisation des équations de conservation.

Parmi les premiers travaux dans le thème de la dégradation thermique, on cite celui de Bamford et al. [8]. Ils ont élaboré un modèle dans lequel l'équation de conduction de la chaleur dans le solide est utilisée. Un schéma cinétique de premier ordre est considéré pour décrire la cinétique du phénomène de pyrolyse. L'effet de la densité de la biomasse en dégradation en fonction du temps a été étudié. Ce modèle a été repris par plusieurs chercheurs pour étudier l'influence d'autres paramètres (Roberts et Clough [9], Tang et Neil [10], Tinney [11]). Aucune suggestion de nouveaux modèles cinétiques n'a été introduite par ces différents auteurs pour prédire la concentration des divers composants produit durant le processus de pyrolyse.

Les travaux sur la dégradation thermique les plus significatifs ont été réalisés par Kung [12]. Il a considéré une particule de bois chauffée sur une façade et thermiquement isolée et imperméable sur l'autre façade. La particule de bois est initialement à la température ambiante. L'auteur a examiné l'habilité du bois à générer un combustible volatil en fonction de la variation du flux de chaleur auquel il est soumis. Il a rapporté qu'une fois la couche externe est suffisamment chauffée, le phénomène de pyrolyse commence et il produit des gaz volatils et des résidus de charbon. En augmentant davantage la chaleur, la couche de bois qui a subi le phénomène de pyrolyse, devient de plus en plus petite, entraînant une accumulation d'une couche de charbon isolant le bois du milieu extérieur. Ce modèle est développé en s'appuyant sur les hypothèses simplificatrices suivantes : (1) le transfert de chaleur dans le bois se fait uniquement par conduction ; (2) le transfert des volatils se fait par convection ; (3) la loi d'Arrhenius du premier ordre décrit la décomposition de la matière active en volatil et en charbon ; (4) le processus de décomposition est endothermique. (5) L'effet de contraction ou d'expansion de la matière est négligé. (6) La possibilité d'une réaction chimique secondaire entre les gaz volatils et le charbon est ignorée. (7) Les volatils sont en équilibre thermique

avec le charbon résiduel. (8) Les fissures ou craquages mécaniques du charbon sont négligés, ce qui réduit le contact thermique entre les volatils et le charbon. (9) La variation de la chaleur spécifique et la conductivité thermique du bois en fonction de la température est négligée.

Les équations différentielles partielles établis dans ce modèle sont résolues uniquement par l'utilisation du schéma de Crank-Nicolson. Les résultats sont obtenus pour trois échantillons de bois d'épaisseurs 0.2, 2 et 10 mm. L'auteur a mis en évidence la forte influence de la convection des volatils et de la conduction dans le charbon sur le phénomène de pyrolyse. La décomposition endothermique a aussi un effet marqué sur le taux conversion. L'auteur a étudié aussi l'influence de l'épaisseur de l'échantillon sur le processus de pyrolyse. Il a conclu que pour un échantillon d'épaisseur 10 mm, le régime est thermiquement épais, alors que pour l'épaisseur de 0.2 mm, le régime est thermiquement mince. Il a aussi rapporté que le taux de pyrolyse augmente avec la conductivité thermique du charbon. Cette étude numérique n'a pas été validée expérimentalement. Il manque de données expérimentales telles que la conductivité thermique et les coefficients de transfert convectif ont été rapportées.

Un autre modèle pour simuler le processus de pyrolyse a été développé par Fan et al. [13], ces derniers ont incluse les effets de transfert de chaleur et de masse dans la particule. La réaction, cependant, est considérée être de premier ordre. Les concentrations des produits ne sont pas analysées dans ce modèle, puisque ce dernier est un simple modèle à une seule réaction. Il n'introduit pas les différentes espèces que peut produire le phénomène de pyrolyse.

Kansa et al. [14] ont inclut l'équation de mouvement des gaz de pyrolyse dans leur modèle. Mais, les réactions secondaires n'ont pas été considérées et la solution des équations de chaleur et de mouvement sont basées sur des conditions aux limites arbitraires.

L'étude expérimentale de Pyle et Zaror [1] a étudiée la pyrolyse de quatre types de bois traités par les sels (Na_2CO_3 , K_2CO_3 , NaCl , KCl) et une cellulose pur.

Des expérimentations avec différentes géométries et des modèles de réaction secondaire ont été utilisées. La biomasse a été pyrolysée sous la vapeur d'azote. Ils ont rapportés dans leur conclusion que le traitement par le sel modifie le taux de perte de masse. Le gaz inerte augmente le rendement du charbon. Un temps de séjour plus long des volatils dans la zone chaude donnait du charbon. Ces résultats montrent que les volatils primaires peuvent subir des réactions secondaires à travers des chemins compétitifs, ils sont soit polymérisés pour donner du charbon ou bien craqués pour donner des volatils légers.

Dans le modèle de Koufopoulos et al. [16], la variation de la densité en fonction du temps n'a pas été étudiée, ils ont uniquement résolu l'équation de transfert de chaleur dans leur modèle.

Ils ont introduit un coefficient de transfert de chaleur convectif en fonction des nombres de Reynolds et Prandtl à travers la relation empirique suivante :

$$h_{moyen} = 0,332 \left(\frac{k}{l} \right) Pr^{1/3} Re^{0,5}$$

L'évolution de l'outil informatique a permis un développement des modèles de simulation qui prédisent des phénomènes physiques plus complexes. Le modèle (CFD) développé par Novozhilov et al. [17] simule la propagation de l'oxydation d'une particule de bois. Les modèles (CFD) et de la pyrolyse solide développés ainsi que leur couplage sont décrits. Le modèle physique suppose un transfert de chaleur vers le bois uniquement par conduction et le bois vierge (supposé sec) se transforme en charbon et en gaz volatils. La combustion du charbon n'est pas incluse.

Quant à la résolution numérique, les équations sont discrétisées en utilisant les volumes finis. Le système d'équations algébriques obtenu est résolu par une méthode itérative. La conservation de la masse a été obtenue en utilisant l'algorithme de correction de pression SIMPLE. Le schéma de résolution totalement implicite est utilisé pour l'équation de l'énergie. Un pas d'espace de 0.1 mm et un pas de temps de 0.1s sont utilisés. Le travail a été validé par des données expérimentales d'une étude de dégradation thermique d'une particule exposée à un flux de chaleur constant et placée dans une atmosphère inerte, de Vovelle et al. [15].

Dans cette étude il a été montré que le terme de convection a un effet significatif sur le taux de perte de masse et le transport de volatils. Pour la plupart des résultats obtenus, l'erreur relative par rapport aux résultats expérimentaux est inférieure à 10%.

Les études de dégradation thermique des matériaux de construction occupent une place importante dans le domaine de génie civil. Une simulation par CFD et des tests expérimentaux sur l'évolution de la combustion d'un matériau d'un mur d'une chambre ont été réalisés par Zhenghua et al. [18]. Dans la simulation par CFD, le transfert de chaleur et de masse ainsi que la combustion sont considérés turbulents. La méthode de transfert discret (DT) est employée pour calculer le rayonnement. Le modèle d'absorptivité et d'émissivité sont employés pour prédire les propriétés de rayonnement des produits de combustion, tels que: les suies, le CO₂ et l'H₂O. Lesquelles sont généralement des espèces radiatives primaires dans la combustion des hydrocarbures. La température du solide a été déterminée par une solution numérique de l'équation de conduction thermique. Un modèle de pyrolyse simple et pratique, valable aussi bien pour les matériaux carbonés que les matériaux non-carbonés, a été développé pour décrire la dégradation du solide. Ce modèle de

pyrolyse a été testé avec les données expérimentales du Calorimètre sous différents niveaux de flux radiatifs (de 25 à 75 kW.m⁻²) et couplé au modèle CFD. Les simulations ont été réalisées pour différents maillages (de 17×21×18 jusqu'à 20×21×22 volumes de contrôle). Le flux de chaleur net, la température de la surface du mur, l'épaisseur du charbon, la température des gaz et le flux radiatif ont été comparés aux résultats expérimentaux. Une étude paramétrique sur le pas de temps et le pas d'espace a été faite et un pas de temps de 2s a été jugé acceptable pour la précision et la cohérence des résultats. Les résultats de cette étude sont obtenus avec les propriétés physiques du matériau constantes et la teneur en humidité négligeable.

Les matériaux considérés dans les études de dégradation thermique, on cite par exemple les polymères. Staggs [19] a introduit un modèle simple de transport de volatils dans un modèle de pyrolyse de polymère, en prenant en considération la variation du volume du matériau (rétrécissement et expansion). Le transport quantitative des volatils a été évalué. Il a été démontré dans ce travail que la production des gaz de pyrolyse est significative pour les faibles flux de chaleur, les conductivités thermiques des solides et les températures de décomposition modérées. Le modèle physique considéré est un échantillon en polymère en forme de disque d'un diamètre de 100 mm et d'une épaisseur de 15 mm, exposé horizontalement à sa surface supérieure à un flux de chaleur de 35 kW.m⁻². L'étude est uni-dimensionnelle. Quant aux conditions aux limites, à la base de l'échantillon, le flux des gaz et des volatils est nul. Les équations établies sont résolues en utilisant une méthode numérique standard avec un maillage non- uniforme. Les résultats ont montrés que l'expansion du volume de la matière durant la gazéification réduit le transfert de chaleur.

Di Blasi [20], s'est rendu compte qu'un modèle de transport détaillé combiné avec des schémas cinétiques complets sont nécessaires pour prédire le transfert de masse et de chaleur et les effets de la variation des propriétés physiques (densité, conductivité thermique, chaleur spécifique) dans la pyrolyse de la biomasse. Cependant, elle a utilisé différents schémas cinétiques dans lesquels la cellulose active est considérée être formé à partir de produits intermédiaires. Mais, il a été constaté par Koufopoulos et al. [16], qu'il est très difficile de définir physiquement la composition des intermédiaires, et par conséquent il est très difficile de mesurer leurs concentrations expérimentalement.

Généralement, le phénomène de pyrolyse de la biomasse solide est basé sur des transformations physico-chimiques. L'étude développée par Jalan et Srivastava [21], traite d'un modèle mathématique pour la description de la pyrolyse d'une particule de biomasse solide. Ces transformations physico-chimiques sont contrôlées par le transfert de chaleur. Les équations du modèle sont résolues pour un échantillon cylindrique. Elles sont discrétisées par la méthode des

différences finies. Le schéma de résolution totalement implicite est appliqué pour la résolution de l'équation de transfert de chaleur et la méthode de Runge_Kutta d'ordre 4 est utilisée pour la résolution des équations de conservation des espèces.

Les résultats obtenus par cette étude pour différentes dimensions de la particule concernent la prédiction des profils de température en fonction de la distance radiale. Ces profils ont été comparés avec les données expérimentales de la littérature.

Les espèces de bois, telles que le Sapin de Douglas, Bois rouge, chêne rouge et l'érable ont été utilisées pour étudier théoriquement et expérimentalement le comportement de la dégradation thermique de matériaux carbonés par Spearpoint et al. [23]. Chacun de ces échantillons est exposé horizontalement à un flux de chaleur incident variant de 25 à 75 kW/m². Les fibres de ces bois sont orientées soit parallèlement ou perpendiculairement au flux de chaleur incident. Les hypothèses prises par les auteurs sont les suivantes : (1) le combustible est composé de volatils et du charbon sur un front de pyrolyse infinitésimale et à une température de vaporisation fixe ; (2) Le solide est infiniment épais ; (3) Le bois vierge est dans un milieu inerte ; (4) Le charbon est aussi dans un milieu inerte ; (5) La flamme du flux de chaleur reste constante ; (6) La densité des volatils est très petite devant la densité du bois vierge et du charbon ; (7) Les propriétés de la matière sont constantes au-delà de la température considérée ; (8) Les volatils ne s'accumulent pas dans la couche du charbon, mais ils se produisent et s'évacuent immédiatement.

La perte de masse du solide, la température et la fraction de charbon, issues de la dégradation thermique sont mesurées. Un modèle intégral unidimensionnel décrivant la pyrolyse de ces bois soumis à des flux de chaleur constants a été développé. Les résultats numériques obtenus par le modèle intégral uni-dimensionnel et ceux obtenus expérimentalement sont confrontés.

Les auteurs ont tiré les conclusions suivantes : la combustion du charbon issu de la pyrolyse et des gaz de pyrolyse dépend des espèces constituant ces gaz, de l'orientation des fibres du bois et de la teneur en humidité dans le bois. La chaleur effective de gazéification basée sur la masse originale du bois est de l'ordre de 1,5 à 3 kJ/g le long des fibres et de 2,5 à 3,5 kJ/g à travers les fibres. La fraction du charbon de bois est montrée comme étant une fonction inverse du flux de chaleur incident. Mais cette fonction n'est pas universelle pour toutes les espèces de bois.

Pour la plupart des simulations numériques de prédiction des phénomènes des feux, les modèles de pyrolyse sont nécessaires. Un modèle de calcul de la quantité des gaz de pyrolyse dégagée dit intégral a été développé par Theunes et al. [24]. Il tient compte de la phase de refroidissement par convection. Les résultats obtenus par le modèle intégral ont été comparés à ceux rapportés par Theunes et al. [25] en utilisant le modèle de la grille mobile.

Les auteurs ont introduit en plus des considérations du modèle physique de Theunes et al. [25] un profil de température quadratique. La zone de pyrolyse est réduite à une surface de température fixe qui sépare la zone vierge de la zone carbonisée. Le modèle intégral donne de bons résultats pour des conditions aux limites fixes. Par contre, il présente des problèmes de variations subites dans le flux de chaleur incident au moment où les gaz de pyrolyse commencent à se libérer, ce qui induit des pics de production des gaz de pyrolyse. Ces pics sont considérés comme étant des erreurs numériques liés au choix du pas de temps. Ils ont été atténués en augmentant la précision dans le pas de temps.

Dans le but de mettre en évidence l'influence des paramètres physiques et thermiques tels que la conductivité thermique, le coefficient de transfert de chaleur par convection, l'émissivité et la température de réaction sur la dégradation thermique de la biomasse, un modèle de dégradation incluant une approche cinétique est développé par Babu et Chaurasia. [2]. La pyrolyse de la biomasse est considérée pour les géométries de particule plane, cylindrique et sphérique. Les hypothèses du modèle sont: (1) la conductivité thermique et la chaleur spécifique varient en fonction de la température, (2) le transfert de chaleur est supposé uniquement par conduction, (3) la phase gazeuse se produit en régime instationnaire, (4) le transfert de masse des espèces volatils se fait par convection et diffusion, (5) la porosité de la particule solide est négligée, (6) la matrice solide et le gaz en écoulement sont en équilibre thermique, (7) le système est uni-dimensionnel, (8) le rétrécissement et la teneur en humidité dans la matière sont négligés.

La pyrolyse est simulée par un schéma cinétique basé sur deux équations primaires et une réaction secondaire entre les gaz de pyrolyse et le charbon produit. Le système d'équations différentielles partielles est discrétisé par la méthode des différences finies. La résolution des équations algébriques issues de la discrétisation a été faite par le schéma totalement implicite pour l'équation de la chaleur et la méthode de Rang_Kutta d'ordre 4 pour les équations de conservation des espèces. Les simulations ont été faites pour différentes dimensions, variant de 0.0125 mm à 10 mm et pour des températures variant entre 303 et 1200 K. Le modèle a été validé par l'étude expérimentale de Pyle et al. [1]. Pour la conversion en régime thermiquement épais, les auteurs ont montré qu'une variation des paramètres de simulation tels que la conductivité thermique, le coefficient de transfert..., affecte principalement l'activité des réactions primaires. Ils ont conclu aussi que le temps de conversion augmente pour des conductivités thermiques élevées et des émissivités faibles. La plus grande influence est associée à la température et l'émissivité. Ils ont aussi montré que les paramètres tels que le nombre de Biot et la conductivité effective affectent la pyrolyse. L'influence des paramètres est plus élevée pour la géométrie plane et moindre pour la géométrie sphérique.

2.3. Modélisation de la dégradation thermique de matériaux non-carbonés

Un modèle mathématique décrivant la dégradation thermique d'un matériau non-carboné d'une épaisseur finie a été élaboré par Staggs [22]. Le matériau est exposé horizontalement à un flux de chaleur constant et uniforme. Le but de cette étude, est d'explorer les facteurs affectant la conversion de la matière en mettant l'accent particulièrement sur l'effet du rétrécissement du volume de l'échantillon.

Des approches numériques pour la solution du modèle mathématique ont été développées, en tenant compte des conditions de conductivité et d'adiabaticité parfaites au niveau de la surface de dessous de l'échantillon. Ces deux cas extrêmes, sont des cas idéals et limitent le taux de perte de masse. La surface de dessus est soumise à des flux de chaleur externes constants. Trois régimes de dégradation thermique (thermiquement épais, thermiquement non- mince et thermiquement mince) ont été identifiés et quantifiés.

Le problème a été résolu par la méthode du front fixe. L'équation de la chaleur est résolue en utilisant le schéma totalement implicite. Les dérivées spatiales sont discrétisées au second ordre avec un schéma centré et les dérivées temporaires sont discrétisées au premier ordre avec un schéma progressif. L'épaisseur du solide est calculée en chaque pas de temps en utilisant la sur-relaxation successive.

Comme on a déjà dit, deux types de conditions aux limites ont été suggérés au niveau de la face de dessous de l'échantillon, la première est la condition d'adiabaticité et la deuxième est la condition d'une température constante. L'auteur a constaté que le comportement de la dégradation thermique de la masse est pratiquement le même pour les deux types de conditions aux limites durant la première demi- période de processus de dégradation. Le régime thermiquement épais passe au régime thermiquement mince dans l'intervalle $6 \leq \lambda\delta/\varepsilon \leq 8$. δ est l'épaisseur du solide, λ est le flux de chaleur et ε est le rapport entre la chaleur latente et la chaleur sensible.

Pour $\lambda\delta/\varepsilon < 5$, le taux de perte de masse augmente rapidement à une valeur maximale dans le cas de la limite adiabatique et diminue jusqu'à zéro pour la limite de température fixe. Dans cette étude, le régime est thermiquement mince pour $L/L_c < 1$, thermiquement non- mince pour $1 < L/L_c < 3$ et thermiquement épais pour $L/L_c > 3$. L est l'épaisseur initiale du solide et L_c est la longueur critique de transition du régime thermiquement mince vers le régime thermiquement épais.

Le comportement du régime thermiquement épais est caractérisé par un taux de perte de masse pseudo-stationnaire où la perte de masse du solide se fait d'une manière constante et lente. Le comportement du régime thermiquement mince se manifeste par une rapide augmentation du taux de perte de masse. L'auteur a conclu que les conditions la surface de dessous n'a pas d'effet significatif sur le taux de perte de masse pour le régime thermiquement épais. Pour les régimes thermiquement

mince et thermiquement non- mince, la condition de la paroi de dessous influe considérablement sur le taux de perte de masse.

2.4. Modèles cinétiques

La modélisation et la simulation numérique ont pour objectif la compréhension des processus physico-chimiques du phénomène de dégradation thermique d'un matériau. Cette dégradation est décrite par des modèles cinétiques ayant des degrés de complexité différentes, allant d'un simple modèle à une seule étape à réaction globale jusqu'aux mécanismes de réaction multi-étapes

Les processus chimiques pour chaque matériau peuvent globalement être décrits en deux étapes, des réactions primaires de dégradation de la biomasse vierge et des réactions secondaires pour les produits issus de la dégradation.

En général, les modèles cinétiques peuvent être classés en trois principaux groupes :

- (1) *Modèle global à une seule étape*, où une réaction à une seule étape est utilisée pour décrire la dégradation.
- (2) *Modèle à une seule étape, multi-réactions*, est utilisé pour exprimer la distribution des produits de réaction. Ce modèle décrit la dégradation des solides en donnant du charbon et des espèces gazeuses.
- (3) *Modèle à deux étapes, semi-global*, dans lequel le mécanisme cinétique de dégradation du solide inclut les deux réactions primaire et secondaire.

2.4. 1. Modèle global à une seule étape

Le modèle du premier groupe propose un schéma cinétique très simple de dégradation thermique pour des matériaux cellulosiques. L'équation suivante représente une réaction globale à une seule étape :



Le taux de dégradation est proportionnel à la masse des résidus ou à la masse produite. Le processus de dégradation est décrit par la loi d'Arrhenius. Les premières études de dégradation thermique des matériaux cellulosiques ont utilisés principalement le modèle cinétique du premier groupe, Roberts [26]. Les travaux qui ont suivis sont pour la plupart expérimentaux menés à l'aide d'instrumentations telles que: la TGA (Thermo-Gravimetric Analyses), les réacteurs à lits fluidisés et le « tube Furnace ». Les résultats expérimentaux obtenus de la dégradation du combustible solide sont considérés sous les différentes fractions de gaz, condensat et charbon comme suit :



Où a, b et c sont des coefficients, exprimés en gramme de gaz, des espèces condensables et solide par gramme du solide en réaction.

2.4.2. Modèle à multi-réaction à une seule étape

Ce deuxième groupe tient compte de l'analyse de l'effet de température sur la dégradation thermique des petites particules de biomasse. Initialement, les gaz et volatils évoluent avec une même cadence. Pour des températures plus élevées, la production des volatils devienne plus grande. En continuant d'augmenter la température, la quantité des produits volatils atteint un maximum puis elle diminue pour finalement atteindre une valeur asymptotique. La diminution de la production des volatils à haute température est due à une production secondaire des volatils légers. Pour des températures entre 800-850 K, les volatils sont les produits de pyrolyse majoritaires où le monoxyde de carbone est prédominant. De faibles quantités de dioxyde de carbone, méthane, éthylène et aldéhyde sont aussi observées.

La plus part des études utilisant le modèle du deuxième groupe sont orientées vers la détermination de distribution des produits. Le présent modèle suppose que la biomasse vierge se décompose directement en (i) produits de réaction.



La cinétique est modélisée par une réaction de premier ordre unimoléculaire qui peut être exprimée comme suit :

$$\frac{dC_i}{dt} = A_i(C_i^* - C_i)\exp(-E_i / RT) \quad (2.4)$$

Où C_i est la concentration du produit (i) et A_i , E_i sont respectivement le facteur pré-exponentiel et l'énergie apparente d'activation. Les résultats théoriques obtenus à l'aide de ce modèle cinétique en utilisant les paramètres cinétiques adéquats concordent bien avec les mesures expérimentales. Cependant, à haute température et à temps de résidence long, l'effet des réactions secondaires n'est pas négligeable, en conséquence, un modèle cinétique rigoureux devrait inclure les réactions à multi-étapes aussi bien pour l'étape primaire de dégradation que pour l'étape secondaire.

2.4.3. Modèle semi-global à deux étapes

Les études sur ce troisième groupe sont axées sur les mécanismes de réaction semi-global incluant l'étape primaire et parfois l'étape secondaire du processus de dégradation.

L'un des premiers modèles semi-global proposé pour une dégradation primaire était celui de Kisler et Broido [27].



Selon les analyses de Kisler et Broido [27], la dégradation thermique de la cellulose commence à partir de 220°C par une élimination de l'eau pour produire de l'Anhydro-cellulose, alors qu'à haute température (environ 280°C), elle produit du condensat. L'Anhydro-cellulose subit ensuite une pyrolyse pour former les charbons et les gaz. Les réactions de déshydratation sont prédominantes à basse température. Les réactions de polymérisation sont prédominantes à haute température et elles mènent vers la formation des condensats.

Arseneau [28], a rapporté que pour un échantillon cellulosique mince, seule l'évaporation est observée, alors que pour un échantillon épais, une pyrolyse et un processus fortement exothermique ont été observés dans l'intervalle de température de 300 à 350°C. On conclut donc que l'Anhydro-cellulose est fortement réactive et subit rapidement des réactions de formations de charbon et des gaz. Le processus exothermique observé à haute température durant la pyrolyse de l'échantillon épais de cellulose est le résultat des réactions secondaires.

Des recherches sur la dégradation de la cellulose ont été menées aussi par Shafizadeh et al. [29] dans l'intervalle de température (260-340°C). Similairement au schéma cinétique représenté par les réactions (2-5), (2-6) et (2-7), deux principaux chemins sont mis en évidence, le premier chemin, dans lequel la basse température qui prédomine, conduit vers une baisse de degré de polymérisation, l'apparition de radicaux libres, l'élimination de l'eau et la formation des molécules légères de gaz et de résidus de charbon. Pour des températures supérieures à 300°C, le deuxième chemin commence et il devient rapidement dominant. La réaction primaire dans ce chemin conduit vers une dépolymérisation suivie par une déshydratation et formation du charbon et des gaz. Quand la température augmente, la réaction produisant les condensats accélère rapidement et diminue la formation du charbon et des gaz.

La cinétique chimique de pyrolyse de la cellulose pour ce modèle est représentée par le schéma suivant :



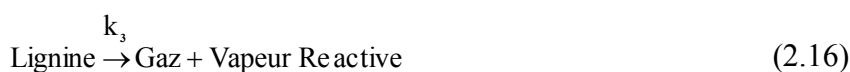
La dégradation primaire de la cellulose est décrite par la première étape de mécanisme de réaction pour la formation de la cellulose active. Dans cette étape on assiste à une forte réduction du degré de polymérisation ($E_1 = 242.4 \text{ kJ/mol}$, $A_1 = 2.8 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$). La dégradation de la cellulose active donne les espèces volatils, les gaz et le charbon ($E_2 = 196.5 \text{ kJ/mol}$, $A_2 = 3.28 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, $E_3 = 150.5 \text{ kJ/mol}$, $A_3 = 1.3 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$) [30].

Les deux schémas cinétiques [(2-5), (2-6), (2-7)] et [(2-8), (2-9), (2-10)] montrent la diminution de production du charbon quand la température de réaction augmente. Selon des résultats expérimentaux [31], la formation des gaz et des condensats sont compétitives avec celui du charbon. Cependant, il a été suggéré que le rapport de formation gaz/charbon ne peut être constant, à cause de la basse pression et la haute température qui favorise le craquage de la cellulose active en gaz, alors que la basse température favorise le couplage et l'aromatisation de la cellulose active en charbon.

Dans le but de confirmer les conclusions de Shafizadeh et Chin [29]. Agrawal [32] a tracé les courbes de concentration du charbon et du gaz en fonction de la température entre 300 et 400 °C. Il a conclu que ce rapport est indépendant de la température. Par conséquent, un schéma à trois réactions donnant séparément du condensat des gaz et du charbon a été proposé :

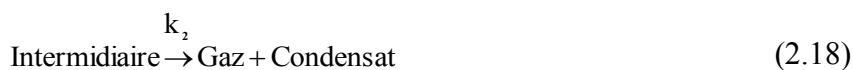
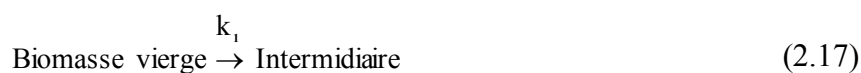


Un autre modèle semi-global avec une pyrolyse primaire de la lignine a été proposé par Antal [33]:



Dans ce modèle, le processus est essentiellement représenté, à basse température, par des réactions de déshydratation. A haute température, la formation d'une variété de monomères de lignine est décrite dans les équations (2.14) et (2.15) du modèle. Cette dernière phase est suivie d'une dégradation secondaire à travers des réactions de condensation pour des températures supérieures à 500°C. A un taux de chauffage très élevé, les réactions de fragmentation sont décrites par l'équation (2.16). Une formation du charbon secondaire est, cependant, possible par la condensation des vapeurs réactives.

La pyrolyse d'une petite particule de biomasse dans l'intervalle de température (200-700°C) a été considérée par Koufopoulos et al. [34]. Chaque constituant de cette particule de biomasse subit le processus de pyrolyse à travers le schéma cinétique représenté ci-dessous :



La première réaction décrit le changement dans la structure chimique du combustible solide, observé à basse température. Les deux autres réactions (2.18) et (2.19), représentent les transformations secondaires à haute température donnant du charbon, des gaz et des volatils (condensat) secondaires.

Diebold et al. [35] ont modélisé le craquage des condensats avec deux réactions en compétition pour former les gaz et les condensats secondaires, alors que Koufopoulos et al. [36] ont décrit la formation secondaire des gaz, des condensats et du charbon par l'interaction entre les produits de pyrolyse primaires. Boroson et al. [37] ont montré que la conversion des condensats est fortement dépendante de la température de réaction. Pour un temps de résidence égal à 1 s, la conversion peut atteindre 30% à 600°C et elle peut augmenter jusqu'à 88% à 740°C. Les auteurs ont aussi analysé la composition des gaz en évolution. Ils rapportent que le monoxyde de carbone est le produit majoritaire quel que soit la température.

2.5. Etude énergétique des réactions de pyrolyse

L'analyse thermique différentielle « Differential Thermal Analysis » (DTA) a été utilisée pour étudier la thermo-énergétique de la dégradation thermique des matériaux cellulosiques carbonés. En général, la pyrolyse des hémicelluloses et des lignines se fait selon un processus exothermique, alors

que la pyrolyse de la cellulose est endothermique à basse température et elle devient exothermique à haute température. La thermo-énergétique de pyrolyse de la cellulose dépend fortement de l'épaisseur de l'échantillon. Un échantillon de cellulose mince se dégrade d'une manière endothermique, alors que pour un échantillon épais, il commence par une dégradation endothermique suivi d'une dégradation exothermique.

Le changement énergétique durant la dégradation des matériaux cellulosiques, quand la température et la taille de la particule varient, est dû aux différents rôles joués par les réactions primaires et secondaires. A basse température et à faible temps de résidence des volatils, uniquement les réactions primaires endothermiques sont présentes, alors qu'à haute température, ce sont les réactions secondaires exothermiques qui se manifestent. Les récentes études [36] ont prouvées à travers des mesures de température et de temps que le processus est initialement endothermique puis il devient légèrement exothermique ; selon ces dernières, des chaleurs de réaction on été estimées à - 255 kJ/kg pour les réactions primaires et à 20 kJ /kg pour les réactions secondaires [30].

2.6. Conclusion

A l'issu de cette revue bibliographique, il découle de la description du phénomène de pyrolyse de la biomasse que l'étude du processus de dégradation thermique des matériaux cellulosiques (biomasse) est largement entreprise par plusieurs chercheurs afin de comprendre les différents phénomènes qui le gouvernent. Néanmoins, il demeure certains aspects liés à ce processus qui nous semblent peu exploités et nécessitent plus d'attention et de recherche.

Parmi les aspects nécessitant plus d'investigation, l'étude de la dégradation thermique de la biomasse humide ainsi que le phénomène de rétrécissement et/ou l'expansion de la matière durant ce processus. Ceci justifie le choix de notre thématique, nous souhaitons apporter plus de résultats sur cet aspect particulier.

Avant de s'investir dans cette thématique, nous avons présenté et étudié les différents modèles cinétiques qui sont généralement peu utilisés sous leur forme complexe. Seules les formes de modèles cinétiques simples sont exploitées. Nous avons classé ces modèles en trois groupes principaux : un modèle global à une seule étape composé d'une seule réaction de dégradation simple, un modèle à une seule étape multi-réactions dans lequel les espèces produites varient en fonction de la température et un modèle à deux étapes semi-global défini par deux réactions primaires et une réaction secondaire. Pour notre étude, nous avons opté pour le modèle le plus complexe du troisième groupe que nous avons jugé plus précis et plus proche de la réalité.

CHAPITRE 3

MODELISATION MATHEMATIQUE

3.1. Introduction

Ce chapitre est axé essentiellement sur l'étude et la modélisation mathématique du phénomène physico-chimique de la pyrolyse de la biomasse, en tenant compte du rétrécissement (Shrinkage) ainsi que la présence d'une teneur en eau dans la particule.

La formulation mathématique des étapes de dégradation thermique de la biomasse est introduite. Le système d'équations régissant les aspects chimiques et de transfert de chaleur sont présentés.

3.2. Description du système

3.2.1. Modèle cinétique

Le modèle cinétique considéré est un modèle semi-global à deux étapes incluant deux réactions primaire et une réaction secondaire. Il est schématisé dans la figure 3.1.

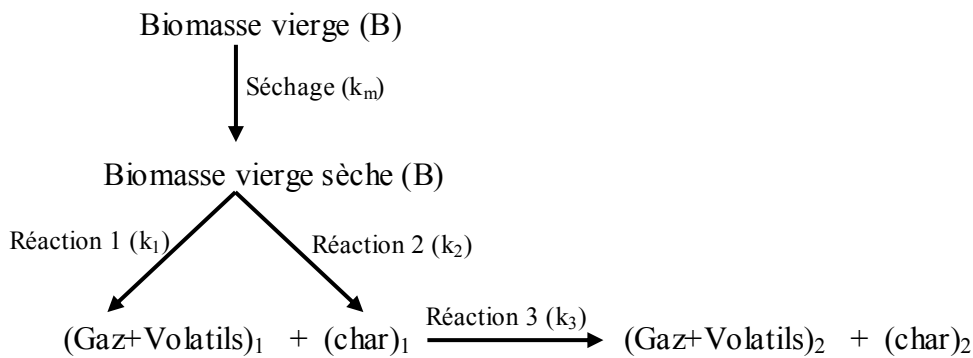


Fig. 3.1: Schéma du modèle cinétique considéré.

Dans le schéma ci-dessus, on distingue deux réactions primaires parallèles (réaction 1 et réaction 2) qui produisent les espèces (Gaz+Volatils)₁ et l'espèce charbon (Char)₁. Les espèces issues des deux réactions primaires (Gaz+Volatils)₁ et (char)₁ réagissent entre elles dans une réaction secondaire (réaction 3) pour donner les produits (Gaz+Volatils)₂ et (char)₂. Les échantillons étudiés sont de géométrie plane, cylindrique et sphérique. Un facteur de dimension est attribué pour chaque géométrie ($b = 1$ pour le parallélépipède, $b = 2$ pour le cylindre et $b = 3$ pour la sphère).

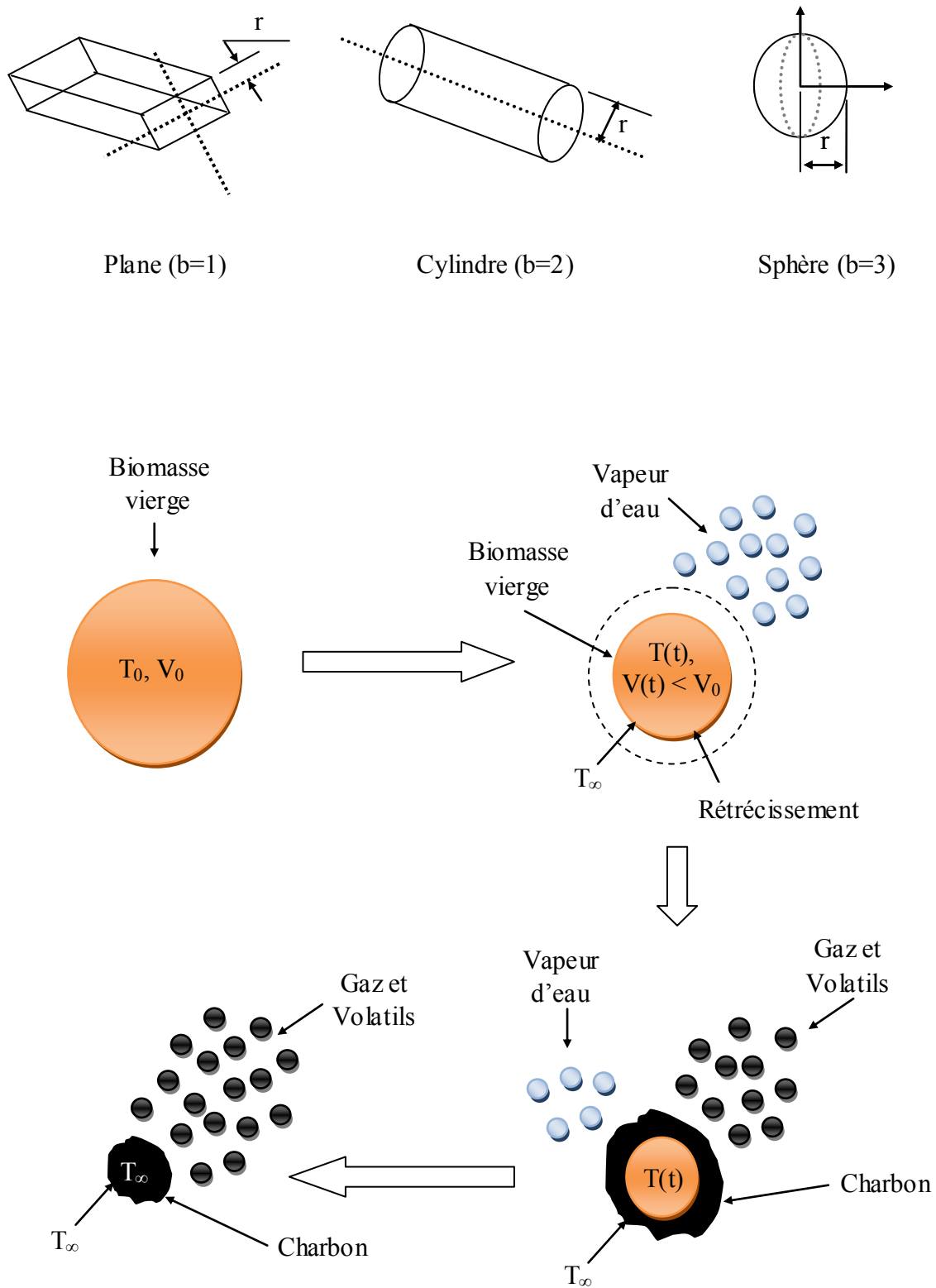


Fig.3.2 : Processus de dégradation de la biomasse par pyrolyse

3.3. Hypothèses du modèle développé

Les hypothèses simplificatrices du phénomène de pyrolyse de la biomasse sur lesquelles le modèle est développé sont les suivantes :

1. Le flux de chaleur incident est orienté radialement sur la particule et le rapport de la longueur sur la section transversale de la particule est suffisamment grand. Donc une étude unidimensionnelle sur la distance radiale de l'échantillon est adoptée. Les transferts de chaleur et de masse sont monodimensionnels [2].
2. Les équations de conservation sont considérées sous leur forme parabolique dont le terme transitoire signifie l'état instationnaire [2].
3. Le transfert de chaleur est supposé par conduction dans la particule, et par convection et rayonnement dans la phase gazeuse et à la paroi [2].
4. L'effet de porosité de la particule solide est négligé. La particule est supposée comme étant une matrice solide [2].
5. Les propriétés thermiques telles que la conductivité thermique et la chaleur spécifique varient en fonction de la température [2].
6. La biomasse sous sa forme naturelle contient une certaine teneur en humidité. Le processus de séchage est décrit par une loi de type Arrhenius de premier ordre. Les valeurs des constantes thermo-cinétiques sont prises des travaux de Benkoussas [38].
7. La vapeur d'eau due au processus de séchage et les produits gazeux de pyrolyse sont supposés en équilibre thermique avec la matrice solide.
8. Le volume de la particule varie en fonction du temps d'où la prise en compte du phénomène de rétrécissement de la particule durant le processus de pyrolyse [40].
9. Le transfert de masse par convection et diffusion est négligeable [40].

3.4. Les équations mathématiques régissant le processus de dégradation thermique

Le phénomène de séchage et de pyrolyse de la biomasse est régi par les équations de conservation de la masse et de l'énergie. Les équations établies prennent en compte le phénomène de rétrécissement qui induit une diminution du volume de la particule de la biomasse durant le processus de pyrolyse.

Les équations de conservation généralisées pour la teneur en eau dans la biomasse, les espèces gazeuses et solides issues des réactions primaires 1 et 2 (Gaz et Volatils)₁ et (Charbon)₁ et celles issues de la réaction secondaire 3 (Gaz et Volatils)₂ et (Charbon)₂ s'écrivent [2]:

- L'équation de séchage :

$$\frac{\partial(V\rho_{Bm})}{\partial t} = -(k_m)V\rho_B \quad (3-1)$$

- L'équation de conservation de la masse pour la biomasse sèche :

$$\frac{\partial(V\rho_B)}{\partial t} = -(k_1 + k_2)V\rho_B \quad (3-2)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils)₁ :

$$\frac{\partial(V_g\rho_{G_1})}{\partial t} + u\frac{\partial(V_g\rho_{G_1})}{\partial r} = D_{eG_1}\left(\frac{b-1}{r}\frac{\partial(V_g\rho_{G_1})}{\partial r} + \frac{\partial^2(V_g\rho_{G_1})}{\partial r^2}\right) + k_1V\rho_B - k_3\rho_{G_1}V_g \quad (3-3)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char)₁ :

$$\frac{\partial(V_g\rho_{C_1})}{\partial t} = k_2V\rho_B - k_3\rho_{C_1}V \quad (3-4)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils)₂ :

$$\frac{\partial(V_g\rho_{G_2})}{\partial t} = k_3(\rho_{G_1}V_g + \rho_{C_1}V) \quad (3-5)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char)₂ :

$$\frac{\partial(V\rho_{C_2})}{\partial t} = k_3(\rho_{G_1}V_g + \rho_{C_1}V) \quad (3-6)$$

- L'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial(C_p\rho T)}{\partial t} + u\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial r} = k\left(\frac{b-1}{r}\frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2}\right) + (-\Delta H)\left(-\frac{\partial\rho}{\partial t}\right) + \rho k_m L_V \quad (3-7)$$

Avec L_V : la chaleur latente de vaporisation de l'eau.

Les coefficients k_m , k_1 , k_2 et k_3 sont des constantes de réactions et leurs équations sont représentées comme suit :

$$k_m = a_{h_2o} \frac{1}{\sqrt{T}} \exp\left(\frac{-e_{h_2o}}{R_m T}\right)$$

$$k_1 = a_1 \exp\left(\frac{b_1}{T} + \frac{c_1}{T^2}\right)$$

$$k_2 = a_2 \exp\left(\frac{b_2}{T} + \frac{c_2}{T^2}\right)$$

$$k_3 = a_3 \exp\left(\frac{-e_3}{R_m T}\right)$$

L'équation de conservation de l'énergie est réécrite sous une forme faisant apparaître le terme de convection sous une forme simplifiée dans l'équation (3-8) par l'utilisation de la loi de Darcy et l'équation d'état.

La loi de Darcy pour les écoulements visqueux s'écrit : $u = -\frac{\phi}{\mu} \frac{\partial p}{\partial r}$ [2]

Le terme de convection dans l'équation (3-7) devient :

$$-\frac{\phi}{\mu} \frac{\partial p}{\partial r} \rho_{G_1} C_{pG_1} \frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{\phi}{\nu} \frac{\partial p}{\partial r} C_{pG_1} \frac{\partial T}{\partial r}$$

D'après l'équation d'état : $p_{G_1} = \rho_{G_1} R_s T_{G_1} \Rightarrow \rho_{G_1} = \frac{p_{G_1}}{R_s T_{G_1}}$

avec : $R_s = \frac{R_m}{M}$ et (M) est la masse molaire du gaz.

Alors : $-\frac{\phi}{\nu} \frac{\partial p}{\partial r} C_{pG_1} \frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{\phi R_s T_{G_1}}{\nu} \frac{\partial \rho_{G_1}}{\partial r} C_{pG_1} \frac{\partial T}{\partial r}$

Selon la loi de diffusivité de Knudsen [39] : $D_{eG_1} = \frac{\phi R_s T_{G_1}}{\nu}$

Donc l'équation de conservation de l'énergie devient :

$$\frac{\partial(C_p \rho T)}{\partial t} = k \left(\frac{b-1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) - \left(D_{eG_1} \frac{\partial \rho_{G_1}}{\partial r} \right) C_{pG_1} \frac{\partial T}{\partial r} + (\Delta H) \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho k_m L_V \quad (3-8)$$

En vertu des hypothèses précédentes, les équations de conservations pour la teneur en eau dans la biomasse, les espèces gazeuses et solides issues des réactions primaires 1 et 2 (Gaz et Volatils)₁ et (Charbon)₁ et celles issues de la réaction secondaire 3 (Gaz et Volatils)₂ et (Charbon)₂ s'écrivent :

- L'équation de séchage:

$$\frac{\partial(V \rho_{Bm})}{\partial t} = -(k_m) V \rho_B \quad (3-9)$$

- L'équation de conservation de la masse pour la biomasse vierge :

$$\frac{\partial(V \rho_B)}{\partial t} = -(k_1 + k_2) \rho_B V \quad (3-10)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils)₁ :

$$\frac{\partial(V \rho_{G_1})}{\partial t} = k_1 V \rho_B - k_3 \rho_{G_1} V_{G_1} \quad (3-11)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (charbon)₁ :

$$\frac{\partial(\rho_{C_1}V)}{\partial t} = k_2\rho_B V_S - k_3\rho_{C_1} V_S \quad (3-12)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils)₂ :

$$\frac{\partial(\rho_{G_2}V_g)}{\partial t} = k_3(\rho_{G_1}V_g + \rho_{C_1}V_S) \quad (3-13)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (charbon)₂ :

$$\frac{\partial(\rho_{C_2}V_S)}{\partial t} = k_3(\rho_{G_1}V_g + \rho_{C_1}V_S) \quad (3-14)$$

- L'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial(C_p\rho T)}{\partial t} = k\left(\frac{b-1}{r}\frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2}\right) + (-\Delta H)\left(-\frac{\partial\rho}{\partial t}\right) + \rho k_m L_V \quad (3-15)$$

3.5. Conditions initiales et aux limites

Les conditions initiales sont :

Pour : $t = 0$, $\rho_B = \rho_{B0}$, $\rho_{G_1} = \rho_{G_2} = \rho_{C_1} = \rho_{C_2} = 0$, $V = V_{B0}$, $V_g = 0$, $T(r,0) = T_0$

Les conditions aux limites sont :

$$t > 0, \quad r = 0, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)_{r=0} = 0$$

$$t > 0, \quad r = R, \quad k\left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)_{r=R} = h(T_\infty - T) + \sigma\varepsilon(T_\infty^4 - T^4)$$

Le flux de chaleur par oxydation du charbon est négligé.

3.6. Equations décrivant l'évolution en fonction du temps des volumes V_s , V_g et V

Au cours du processus de pyrolyse la diminution du volume de la particule solide, V_s , due au rétrécissement varie linéairement avec la masse de la biomasse. L'équation décrivant cette diminution de volume est :

$$\frac{V_s}{V_{S_0}} = \frac{m_B}{m_{B0}} + \frac{\alpha' m_C}{m_{B0}} \quad (3-16)$$

La fraction du volume de gaz, V_g , dégagée par le solide sous l'effet de la dégradation thermique est donnée par :

$$V_g = V_{g_0} + \beta'(V_{S_0} - V_s) \quad (3-17)$$

Elle varie linéairement avec la composition du milieu en dégradation. Les valeurs des coefficients α' et β' sont égales à 0 pour une totale désintégration de la particule et à 1 pour la dégradation sans rétrécissement (no shrinkage).

Le volume V_{g_0} représente le volume du gaz contenu initialement dans les pores de la particule qui est pris égal à zéro (porosité nulle).

3.7. Equations mathématiques de conservation sous forme adimensionnelle

3.7.1. Choix des grandeurs adimensionnelles

Pour mettre le système d'équations sous forme adimensionnelle, nous choisissons les grandeurs de références suivantes :

La longueur de référence est la distance radiale (R) de la particule.

$(T_\infty - T_0)$: Écart de température de référence.

$\frac{R^2}{\alpha}$: Le temps de référence.

ρ_{B_0} : Densité de référence.

V_{B_0} : Volume de référence.

D'où, les grandeurs adimensionnelles sont comme suit :

$$x = \frac{r}{R} \quad ; \quad \tau = \frac{t\alpha}{R^2} \quad ; \quad \theta = \frac{T - T_\infty}{T_0 - T_\infty} \quad ; \quad \bar{\rho}_B = \frac{\rho_B}{\rho_{B_0}} \quad ; \quad \bar{\rho}_{G_1} = \frac{\rho_{G_1}}{\rho_{B_0}} \quad ; \quad \bar{\rho}_{G_2} = \frac{\rho_{G_2}}{\rho_{B_0}}$$

$$\bar{\rho}_{C_1} = \frac{\rho_{C_1}}{\rho_{B_0}} \quad ; \quad \bar{\rho}_{C_2} = \frac{\rho_{C_2}}{\rho_{B_0}} \quad ; \quad \bar{\rho}_{Bm} = \frac{\rho_{Bm}}{\rho_{B_0}} \quad ; \quad \bar{V} = \frac{V}{V_{B_0}} \quad ; \quad \bar{V}_g = \frac{V_g}{V_{B_0}} \quad ; \quad \bar{V}_s = \frac{V_s}{V_{B_0}}$$

- L'équation de séchage:

$$\frac{\partial(\bar{V}_s \bar{\rho}_{Bm})}{\partial t} = -(k_m) \bar{V}_s \bar{\rho}_B \quad (3-18)$$

- L'équation de conservation de la masse pour la biomasse vierge :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_B \bar{V}_s)}{\partial t} = -(k_1 + k_2) \bar{\rho}_B \bar{V}_s \quad (3-19)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatile) ₁ :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_{G_1} \bar{V}_g)}{\partial t} = k_1 \bar{\rho}_B \bar{V}_s - k_3 \bar{\rho}_{G_1} \bar{V}_g \quad (3-20)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char) ₁ :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_{C_1} \bar{V}_s)}{\partial t} = k_2 \bar{\rho}_B \bar{V}_s - k_3 \bar{\rho}_{C_1} \bar{V}_s \quad (3-21)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatile)₂ :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_{G_2} \bar{V}_g)}{\partial t} = k_3(\bar{\rho}_{G_1} \bar{V}_g + \bar{\rho}_{C_1} \bar{V}_s) \quad (3-22)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char)₂ :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_{C_2} \bar{V}_s)}{\partial t} = k_3(\bar{\rho}_{G_1} \bar{V}_g + \bar{\rho}_{C_1} \bar{V}_s) \quad (3-19)$$

- L'équation de conservation de l'énergie :

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

Avec : $\left[(-\Delta H) \left(-\frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \right]$ est le terme source.

$\rho k_m L_v$: est le terme qui représente l'énergie de vaporisation de l'eau.

En introduisant les grandeurs adimensionnelles, on aura :

$$\left[\frac{T}{(T_0 - T_\infty)} \frac{\partial(\rho C_p)}{\partial t} + \frac{\alpha}{R^2} \rho C_p \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right] (T_0 - T_\infty) = \frac{k}{R^2} \left(\frac{b-1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) (T_0 - T_\infty) + (-\Delta H) \left(-\frac{\partial \rho}{\partial t} \right) + \rho k_m L_v$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{b-1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{R^2}{k} \left[\frac{(-\Delta H) + C_p T}{T_0 - T_\infty} \left(-\frac{\partial \rho}{\partial t} \right) + \frac{\rho k_m L_v}{T_0 - T_\infty} \right]$$

$$\tau = \frac{\alpha t}{R^2}, \quad x = \frac{r}{R}, \quad \theta = \frac{T - T_\infty}{T_0 - T_\infty} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{k}{\rho C_p}$$

$$\text{Avec : } -\frac{\partial \rho}{\partial t} = (k_1 + k_2) \rho_b$$

τ, x et θ Sont respectivement le temps, la distance et la différence de température adimensionnelle.

D'après la conservation de l'énergie, on a :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{b-1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{R^2}{K} Q'' \quad (3-20)$$

$$\text{Avec : } Q'' = \left[\left(\frac{(-\Delta H) + C_p T}{T_0 - T_\infty} \right) (k_1 + k_2) \rho_b + \frac{\rho k_m L_v}{T_0 - T_\infty} \right]_b$$

3.8. Formulation des conditions initiales et aux limites sous forme adimensionnelle

Les conditions initiales :

$$\text{Pour } \tau \leq 0 \Rightarrow \bar{\rho}_B = 1, \bar{\rho}_{G_1} = \bar{\rho}_{G_2} = \bar{\rho}_{C_1} = \bar{\rho}_{C_2} = 0, \bar{V} = 1, \bar{V}_g = 0 \quad \theta(x,0) = 1$$

Les conditions aux limites :

$$\tau > 0 \Rightarrow \quad x = 0 \quad , \quad \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{x=0} = 0$$

$$\begin{aligned} \tau > 0 \Rightarrow \quad x = 1 \quad - (T_\infty - T_0) k \left(\frac{\partial \theta}{R \partial x} \right)_{r=R} &= h(T_\infty - T) + \sigma \varepsilon (T_\infty^4 - T^4) \\ &= h(T_\infty - T) + \sigma \varepsilon (T_\infty - T)(T_\infty + T)(T_\infty^2 + T^2) \end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{r=R} = -\theta \underbrace{\left(\left(\frac{R}{k} \right) (h + \sigma \varepsilon (T_\infty^3 + T^2 T_\infty + T_\infty^2 T + T_\infty^3)) \right)}_{Bi_m}$$

$$\text{Alors : } \tau > 0 \Rightarrow \quad x = 1 \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\theta \cdot Bi_m$$

3.9. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons établi le mécanisme réactionnel du phénomène de pyrolyse de la biomasse ainsi que les équations du transfert de chaleur et de masse en prenant en compte l'effet du rétrécissement (Shrinkage) et de l'humidité. Dans ce qui suit, nous allons présenter les méthodes numériques utilisées pour la résolution du système d'équations différentielles obtenu.

CHAPITRE 4

RESOLUTION NUMERIQUE

4.1. Introduction

Le présent chapitre est consacré au traitement numérique du système d'équations obtenu. Les équations différentielles sont discrétisées pour obtenir les équations algébriques. Pour la résolution des équations de conservation de la masse des espèces chimiques (la biomasse vierge, le charbon de la réaction chimique primaire, le gaz et les volatils de la réaction chimique primaire et le charbon de la réaction chimique secondaire ainsi que le gaz et les volatils secondaires), nous optons pour la méthode de résolution de Runge Kutta d'ordre quatre. Pour la résolution de l'équation de conservation de l'énergie, nous appliquons un schéma de résolution totalement implicite. Un algorithme de calcul est enfin présenté.

4.2. Traitement numérique des équations de conservation de la masse

Les méthodes de Runge-Kutta sont des méthodes d'analyse numérique d'approximation de solutions d'équations différentielles. Ces méthodes reposent sur le principe de l'itération, c'est-à-dire qu'une première estimation de la solution est utilisée pour calculer une seconde estimation, plus précise, et ainsi de suite. Pour la présente étude, toutes les équations de conservation de la masse sont résolues par cette méthode.

4.2.1. Principe de la méthode de résolution Runge-Kutta d'ordre quatre

Le principe de la méthode de résolution de RK4 peut se résumer comme suit : si on considère un problème représenté par la fonction :

$$\rho' = f(t, \rho) \quad ; \quad \rho(t_0) = \rho_0 \quad (4-1)$$

La solution donnée par la méthode RK4 s'écrit :

$$\rho_{n+1} = \rho_n + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (4-2)$$

avec :

$$k_1 = f(t_n, \rho_n) ; k_2 = f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \rho_n + \frac{\Delta t}{2} k_1\right) ; k_3 = f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, \rho_n + \frac{\Delta t}{2} k_2\right) ; k_4 = f\left(t_n + \Delta t, \rho_n + \Delta t k_3\right)$$

La valeur (ρ_{n+1}) est approchée par la somme de la valeur actuelle (ρ_n) et du produit de la taille de l'intervalle (Δt) par la pente estimée. La pente est obtenue par une moyenne pondérée de k_1 , k_2 , k_3 et k_4 .

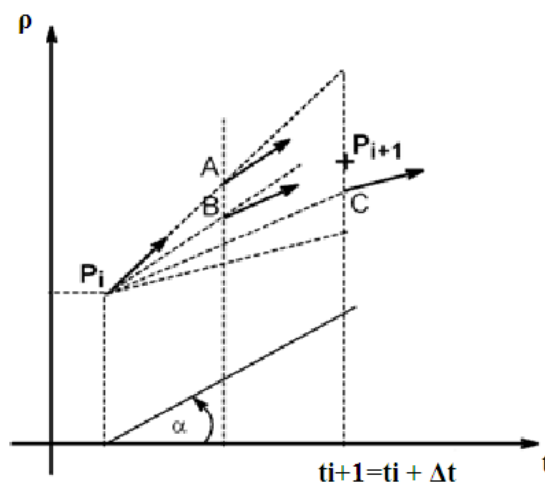
- k_1 est la pente au début de l'intervalle.

- k_2 est la pente au milieu de l'intervalle. k_1 est utilisée pour calculer la valeur de ρ au point $t_n + \Delta t / 2$.
- k_3 est de nouveau la pente au milieu de l'intervalle, mais obtenue cette fois en utilisant la pente k_2 pour calculer ρ .
- k_4 est la pente à la fin de l'intervalle, avec la valeur de ρ calculée en utilisant k_3 .

Dans la moyenne des quatre pentes, une importance plus grande est donnée aux pentes des points du milieu de l'intervalle d'où :

$$Pente = \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6} \quad (4-3)$$

La méthode de Runge-Kutta est une méthode d'ordre 4, qui génère une erreur à chaque pas de l'ordre de h^5 , alors que l'erreur totale accumulée est de l'ordre de t^4 .



$$tg\alpha = \frac{1}{6} \left[\left(\frac{d\rho}{dt} \right)_i + 2 \times \left(\frac{d\rho}{dt} \right)_{iA} + 2 \times \left(\frac{d\rho}{dt} \right)_{iB} + \left(\frac{d\rho}{dt} \right)_{iC} \right]$$

Fig. 4.1 Présentation graphique pour le développement de la méthode RK4

A titre de plus d'explication, si on considère une équation différentielle du premier ordre :

$$\frac{d\rho}{dt} = f(t, \rho) \quad (4-4)$$

La méthode RK4 utilise plusieurs points intermédiaires pour calculer la valeur de y_{i+1} à partir de la valeur de ρ_i . Le point intermédiaire A d'abscisse $t_i + \Delta t / 2$ a comme ordonnée :

$$\rho_{iA} = \rho_i + \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_i \times \frac{\Delta t}{2} \text{ soit } \rho_{iA} - \rho_i = \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_i \times \frac{\Delta t}{2} = \frac{k_1}{2} \quad (4-5)$$

5)

et le point B :

$$\rho_{iB} = \rho_i + \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iA} \times \frac{\Delta t}{2} \text{ soit } \rho_{iB} - \rho_i = \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iA} \times \frac{\Delta t}{2} = \frac{k_2}{2} \quad (4-6)$$

6)

L'ordonnée d'un point C d'abscisse $t_i + \Delta t$ s'obtient à l'aide de la relation :

$$\rho_{iC} = \rho_i + \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iB} \times \frac{\Delta t}{2} \text{ soit } \rho_{iC} - \rho_i = \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iB} \times \frac{\Delta t}{2} = k_3 \quad (4-7)$$

Donc $\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iC}$ est la valeur de $\left(\frac{d\rho}{dt}\right)$ au point C.On pose $\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iC} \times \Delta t = k_4$ L'ordonnée de ρ_{i+1} du point d'abscisse $t_i + \Delta t$ s'obtient alors par la relation :

$$\rho_{i+1} = \rho_i + \frac{1}{6} \left[\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_i + 2 \times \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iA} + 2 \times \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iB} + \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_{iC} \right] \times \Delta t \quad (4-8)$$

qui s'écrit finalement :

$$\rho_{i+1} = \rho_i + \frac{1}{6} [k_1 + 2 \times k_2 + 2 \times k_3 + k_4] \quad (4-9)$$

4.2.2. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour la biomasse vierge

La résolution de l'équation adimensionnée de la conservation de la masse (biomasse) (3-19) est résumée dans le tableau (4.1).

Tableau 4.1 : résolution de l'équation de la conservation de la biomasse vierge.

P_i	$\left\{ \begin{array}{l} \Delta \tau \\ \bar{\rho}_B \end{array} \right.$ $\frac{\partial(\bar{\rho}_B \bar{V})}{\partial \tau} \Big _i = -(k_1 + k_2) \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} = \frac{L_1}{\Delta \tau}$
A	$\frac{\partial(\bar{\rho}_B \bar{V})}{\partial \tau} \Big _{iA} = -(k_1 + k_2) \left(\bar{\rho}_{Bi} \bar{V} + \frac{L_1}{2} \right) = \frac{L_2}{\Delta \tau}$

B	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_B \bar{V})}{\partial \tau} \right _{iB} = -(k_1 + k_2) \left(\bar{\rho}_{Bi} \bar{V} + \frac{L_2}{2} \right) = \frac{L_3}{\Delta \tau}$
C	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_B \bar{V})}{\partial \tau} \right _{iC} = -(k_1 + k_2) (\bar{\rho}_{Bi} \bar{V} + L_3) = \frac{L_4}{\Delta \tau}$

Avec :

$$\begin{aligned}
 L_1 &= -(k_1 + k_2) \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} \Delta \tau \\
 L_2 &= -(k_1 + k_2) \left(\bar{\rho}_{Bi} \bar{V} + \frac{L_1}{2} \right) \Delta \tau \\
 L_3 &= -(k_1 + k_2) \left(\bar{\rho}_{Bi} \bar{V} + \frac{L_2}{2} \right) \Delta \tau \\
 L_4 &= -(k_1 + k_2) (\bar{\rho}_{Bi} \bar{V} + L_3) \Delta \tau
 \end{aligned}$$

D'où :

$$\bar{V}(\tau + d\tau) \bar{\rho}_B(\tau + d\tau) = \bar{V}(\tau) \bar{\rho}_B(\tau) + \frac{1}{6} [L_1 + 2(L_2 + L_3) + L_4] \quad (4-10)$$

Cette équation peut s'écrire :

$$\bar{m}_B(\tau + d\tau) = \bar{m}_B(\tau) + \frac{1}{6} [L_1 + 2(L_2 + L_3) + L_4] \quad (4-11)$$

4.2.3. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour le charbon issu de la réaction primaire

Tableau 4.2 : résolution de l'équation de la conservation pour le charbon primaire.

P _i	$\left\{ \begin{array}{l} \Delta \tau \\ \bar{\rho}_{C1} \end{array} \right.$ $\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{C1} \bar{V})}{\partial \tau} \right _i = k_2 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} = \frac{P_1}{\Delta \tau}$
A	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{C1} \bar{V})}{\partial \tau} \right _{iA} = \left(k_2 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{P_1}{2} \right) = \frac{P_2}{\Delta \tau}$
B	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{C1} \bar{V})}{\partial \tau} \right _{iB} = \left(k_2 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{P_2}{2} \right) = \frac{P_3}{\Delta \tau}$
C	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{C1} \bar{V})}{\partial \tau} \right _{iC} = \left(k_2 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + P_3 \right) = \frac{P_4}{\Delta \tau}$

Avec :

$$\begin{aligned}
 P_1 &= (k_2 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V}) \Delta \tau \\
 P_2 &= \left(k_2 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{P_1}{2} \right) \Delta \tau \\
 P_3 &= \left(k_2 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{P_2}{2} \right) \Delta \tau \\
 P_4 &= (k_2 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + P_3) \Delta \tau
 \end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}_{C1}(\tau + d\tau) \bar{V}(\tau + d\tau) &= \bar{\rho}_{C1}(\tau) \bar{V}(\tau) + \frac{1}{6} [P_1 + 2(P_2 + P_3) + P_4] \\
 \bar{m}_{C1}(\tau + d\tau) &= \bar{m}_{C1}(\tau) + \frac{1}{6} [P_1 + 2(P_2 + P_3) + P_4]
 \end{aligned}$$

4.2.4. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour le (Gaz + Volatil) issu de la deuxième réaction primaire (ρ_{G1})

Tableau 4.3 : résolution de l'équation de la conservation pour les Gaz et volatils primaires.

P _i	$ \begin{aligned} &\left\{ \begin{array}{l} \Delta \tau \\ \bar{\rho}_{G1} \end{array} \right. \\ &\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g)}{\partial \tau} \right _i = k_1 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} = \frac{s_1}{\Delta \tau} \end{aligned} $
A	$ \left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g)}{\partial \tau} \right _{iA} = \left(k_1 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{s_1}{2} \right) = \frac{s_2}{\Delta \tau} $
B	$ \left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g)}{\partial \tau} \right _{iB} = \left(k_1 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{s_2}{2} \right) = \frac{s_3}{\Delta \tau} $
C	$ \left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g)}{\partial \tau} \right _{iC} = (k_1 \bar{\rho}_B \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + s_3) = \frac{s_4}{\Delta \tau} $

Avec :

$$\begin{aligned}
 s_1 &= (k_1 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V}) \Delta \tau \\
 s_2 &= \left(k_1 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{s_1}{2} \right) \Delta \tau \\
 s_3 &= \left(k_1 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + \frac{s_2}{2} \right) \Delta \tau \\
 s_4 &= (k_1 \bar{\rho}_{Bi} \bar{V} - k_3 \bar{\rho}_{G1} \bar{V}_g \bar{\rho}_{C1} \bar{V} + s_3) \Delta \tau
 \end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned}\bar{\rho}_{G1}(\tau + d\tau)\bar{V}_g(\tau + d\tau) &= \bar{\rho}_{G1}(\tau)\bar{V}_g(\tau) + \frac{1}{6}[s_1 + 2(s_2 + s_3) + s_4] \\ \bar{m}_{G1}(\tau + d\tau) &= \bar{m}_{G1}(\tau) + \frac{1}{6}[s_1 + 2(s_2 + s_3) + s_4]\end{aligned}$$

4.2.5. Résolution de l'équation de conservation de la masse pour le (Gaz + Volatil) issu de la réaction secondaire (ρ_{G2})

Tableau 4.4 : résolution de l'équation de la conservation pour les Gaz et volatils secondaires.

P _i	$\begin{cases} \Delta\tau \\ \bar{\rho}_{G2} \\ \left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G2}\bar{V}_g)}{\partial\tau} \right _i = k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V} = \frac{R_1}{\Delta\tau} \end{cases}$
A	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G2}\bar{V}_g)}{\partial\tau} \right _{iA} = \left(k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V} + \frac{R_1}{2} \right) = \frac{R_2}{\Delta\tau}$
B	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G2}\bar{V}_g)}{\partial\tau} \right _{iB} = \left(k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V} + \frac{R_2}{2} \right) = \frac{R_3}{\Delta\tau}$
C	$\left. \frac{\partial(\bar{\rho}_{G2}\bar{V}_g)}{\partial\tau} \right _{iC} = \left(k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V} + R_3 \right) = \frac{R_4}{\Delta\tau}$

Avec :

$$\begin{aligned}R_1 &= (k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V})\Delta\tau \\ R_2 &= \left(k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V} + \frac{R_1}{2} \right)\Delta\tau \\ R_3 &= \left(k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V} + \frac{R_2}{2} \right)\Delta\tau \\ R_4 &= (k_3\bar{\rho}_{G1}\bar{V}_g\bar{\rho}_{C1}\bar{V} + R_3)\Delta\tau\end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned}\bar{\rho}_{G2}(\tau + d\tau)\bar{V}_g(\tau + d\tau) &= \bar{\rho}_{G2}(\tau)\bar{V}_g(\tau) + \frac{1}{6}[R_1 + 2(R_2 + R_3) + R_4] \\ \bar{m}_{G2}(\tau + d\tau) &= \bar{m}_{G2}(\tau) + \frac{1}{6}[R_1 + 2(R_2 + R_3) + R_4]\end{aligned}$$

4.3 .Les valeurs et les paramètres utilisés dans la résolution numérique [2]

Propriétés	Valeurs
Coefficient de transfert de chaleur par convection	$h = 8,4 \text{ W/m}^2 \text{ K}$
Chaleur spécifique du bois	$C_p = 1112,0 + 4,85(T - 273), \text{ (J/kgK)}$
Chaleur spécifique du charbon	$C_p = 1003,2 + 2,09(T - 273), \text{ (J/kgK)}$
Conductivité thermique du bois	$k_B = 0,13 + 0,0003(T - 273), \text{ (W/mK)}$
Conductivité thermique du charbon	$k_C = 0,08 - 0,0001(T - 273), \text{ (W/mK)}$
Conductivité thermique des gaz	$k_G = 25,77 \times 10^{-3} \text{ (W/mK)}$
Constante de réaction (vaporisation)	$K_m = A_{h_2o} \times 1/\sqrt{T} \exp\left[-\frac{E_{h_2o}}{R_c \times T}\right] \text{ 1/s [1]}$ Où, $A_{h_2o} = 10^5 ; E_{h_2o} = 7000$
Constante de réaction 1	$k_1 = A_1 \exp[(D_1/T) + (L_1/T^2)], \text{ 1/s}$ Où, $A_1 = 9,973 \times 10^{-5} \text{ 1/s} ; D_1 = 17254,4 \text{ K}$ $L_1 = -9\ 061\ 227 \text{ K}^2$
Constante de réaction 2	$k_2 = A_2 \exp[(D_2/T) + (L_2/T^2)] \text{ 1/s}$ Où, $A_2 = 1,068 \times 10^{-3} \text{ 1/s} ; D_2 = 10224,4 \text{ K} ;$ $L_2 = -6\ 123\ 081 \text{ K}^2$
Constante de réaction 3	$k_3 = A_3 \exp[(-E_3/R_c T)] \text{ 1/s}$ Où, $A_3 = 5,7 \times 10^5 \text{ 1/s} ; E_3 = 81\ 000 \text{ J/mol}$
Chaleur de réaction	$\Delta H = -255\ 000 \text{ J/kg}$
Densité initiale du bois	$\rho_0 = 650 \text{ kg/m}^3$
Diffusivité thermique initiale du bois	$\alpha = 1,79 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

4.4. Traitement numérique de l'équation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{b-1}{x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + Q'' \quad (4-1)$$

4.4.1. Discrétisation de l'équation aux dérivées partielles (4-1)

Remplaçons les dérivées partielles par leurs valeurs approchées dans l'équation (4-1) en utilisant le développement de Taylor.

Pour la discrétisation du terme transitoire, nous utilisons un schéma progressif, figure (4.2):

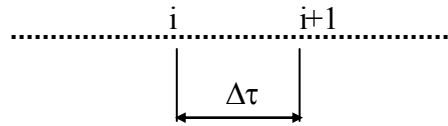


Fig. 4.2 : Schéma progressif

Il devient :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\theta_i^{m+1} - \theta_i^m}{\Delta \tau} \quad (4-2)$$

Pour la discrétisation des dérivées partielles spatiales, nous optons pour le schéma centré, figure (4.3) :

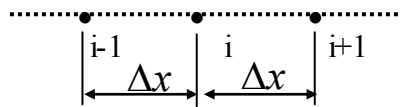


Fig. 4.3 Schéma centré

Le développement de Taylor nous permet d'écrire pour :

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \Delta x \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \phi(\Delta x^2) \quad (4-3)$$

$$\theta_{i-1} = \theta_i - \Delta x \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \phi(\Delta x^2) \quad (4-4)$$

La soustraction de (4-2) de (4-3) donne :

$$\theta_{i+1} - \theta_{i-1} = 2\Delta x \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (4-5)$$

L'addition de (4-2) et (4-3) donne :

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = \frac{\theta_{i+1} + \theta_{i-1} - 2\theta_i}{\Delta x^2} \quad (4-6)$$

En remplaçant les équations (4-2), (4-5) et (4-6) dans (4-1), on aura :

$$\frac{\theta_i^{m+1} - \theta_i^m}{\Delta \tau} = \frac{b-1}{x} \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_{i-1}}{2\Delta x} \right) + \frac{\theta_{i+1} + \theta_{i-1} - 2\theta_i}{\Delta x^2} + Q'' \quad (4.7)$$

4.4.2. Résolution de l'équation de la chaleur par le schéma totalement implicite

La méthode totalement implicite consiste à résoudre les équations paraboliques discrétisées en fonction des valeurs inconnues de l'instant $(t+dt)$. C'est-à-dire que l'équation discrétisée s'écrit comme suit : $a_p(t+dt) T_p(t+dt) = a_E(t+dt) T_E(t+dt) + a_W(t+dt) T_W(t+dt) + a_p(t) T_p(t)$

Le choix de cette méthode est basé sur fait qu'elle ne nécessite pas de définition de critère de

convergence et elle est toujours stable ($\forall \Delta\tau$ et Δx). Ce schéma est représenté dans la figure (4.4).

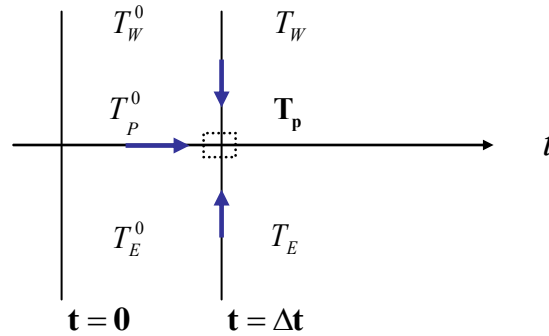


Fig.4.4 Schéma totalement implicite

Calcul des coefficients a, b, c et d :

L'équation (4-7) s'écrit sous la forme :

$$a\theta_p = b\theta_b + c\theta_c + d \quad (4-8)$$

avec :

$$\theta_p = \theta_i^{m+1}, \quad \theta_b = \theta_{i+1}^{m+1}, \quad \theta_c = \theta_{i-1}^{m+1}, \quad \theta_0 = \theta_i^m$$

et

$$a = \frac{1}{\Delta\tau} + \frac{2}{\Delta x^2}, \quad b = \frac{b-1}{x \cdot 2\Delta x} + \frac{1}{\Delta x^2}, \quad c = \frac{1}{\Delta x^2} - \frac{b-1}{2\Delta x \cdot x}, \quad d = Q'' + \frac{\theta_0}{\Delta\tau}$$

Pour $x=0$ $a=1$, $b=1$, $c=d=0$

$$\text{Pour } x=b \quad \frac{\theta_i^{m+1} - \theta_{i-1}^{m+1}}{\Delta x} = -Bi_m \cdot \theta_i^{m+1} \quad \Leftrightarrow \quad (1 + \Delta x Bi_m) \theta_i^{m+1} = \theta_{i-1}^{m+1}$$

$$a = (1 + \Delta x Bi_m), \quad c=1, \quad b=d=0$$

4.5. Processus de résolution

Pour effectuer un calcul à l'instant $(n+1)dt$, nous considérons les valeurs obtenues au pas de temps précédent, c'est-à-dire : ρ_B^n , ρ_{G1}^n , ρ_{G2}^n , ρ_{C1}^n , ρ_{C2}^n , T^n . Une première itération donne les valeurs des concentrations des espèces en utilisant la méthode de résolution Range_kutta d'ordre 4 : ρ_B^{n+1} , ρ_{G1}^{n+1} , ρ_{G2}^{n+1} , ρ_{C1}^{n+1} , ρ_{C2}^{n+1} . Ensuite on calcul les valeurs de la température (T^{n+1}), en utilisant la méthode basée sur le schéma totalement implicite. Ces nouvelles valeurs sont comparées aux précédentes et la solution est considérée comme bonne lorsqu'on atteint la température finale. Une fois la convergence est confirmée,

le programme affiche les valeurs moyennes de concentration des espèces, les températures en chaque nœud et les températures au centre.

4.6. Organigramme de calcul

La figure montre l'organigramme de calcul utilisé.

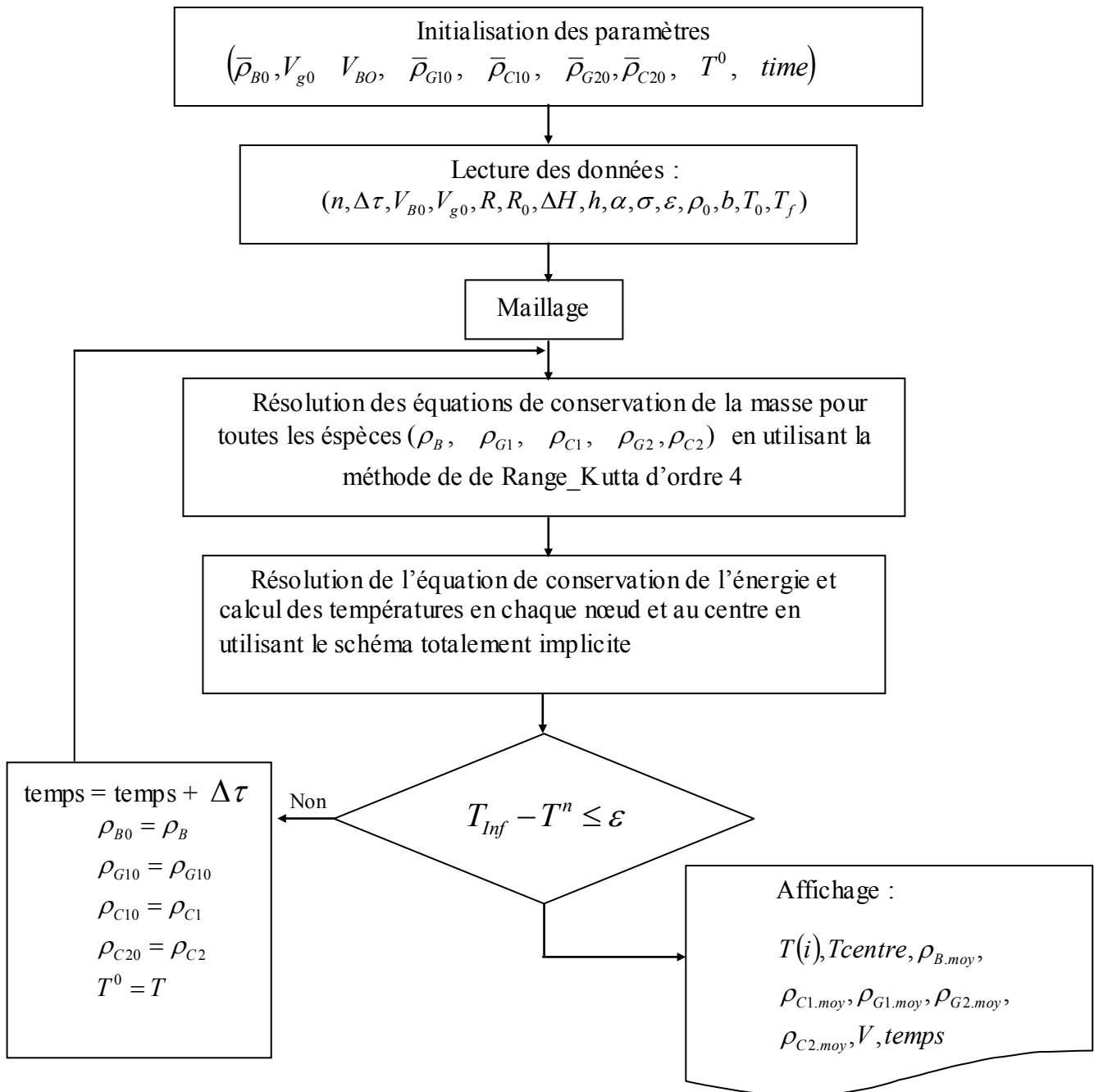


Fig.4.5. Organigramme de calcul.

4.7. Conclusion

Dans ce chapitre Nous avons utilisé la méthode des différences finies pour discrétiser le système d'équations différentielles. Nous avons ensuite établi la résolution numérique des équations discrétisées de la cinétique chimique du phénomène de la pyrolyse de la biomasse ainsi que l'équation de transfert de chaleur. La méthode Range_Kutta d'ordre 4 est adoptée pour résoudre les équations de conservation de la masse pour les espèces considérées. Nous avons utilisé aussi le schéma de résolution totalement implicite pour l'équation parabolique de l'énergie.

Après cette présentation des méthodes de résolution numérique, nous allons passer au chapitre suivant où nous présenterons la validation du code de calcul ainsi que les résultats avec leurs interprétations.

CHAPITRE 5

RESULTATS ET INTERPRETATION

5.1. Introduction

Dans ce chapitre nous présentons la validation quantitative du code de calcul développé dans le cadre de cette étude par comparaison avec les résultats obtenus expérimentalement par Pyle et Zaror [1] et numériquement par Jalan et Srivastava [21], Bamford [8], Babu et Chaurasia [2].

Nous présentons également les résultats concernant l'influence de certains paramètres sur les phénomènes de séchage et de pyrolyse de la biomasse tels que la teneur en humidité, le rétrécissement ainsi que les différents modèles cinétiques.

5.2. Validation

5.2.1 Validation expérimentale

Le modèle de pyrolyse proposé est validé par rapport aux conditions et résultats expérimentaux de Pyle et al. [1]. Ils considèrent une particule de bois en forme cylindrique de rayon variant de 3 à 11 mm, soumis à un flux de chaleur de température variant entre 643 et 900K (~ 10 et 40 kW/m^2).

Nous présentons dans la figure 5.1 la variation de la température au centre d'une particule cylindrique de rayon égal à 3 mm en fonction du temps. Ce résultat est obtenu pour une particule soumise à un flux de chaleur de température $T_{\text{inf}} = 643 \text{ K}$. Dans la mesure où les expériences ont été effectuées dans un milieu non oxydant, seuls les processus de séchage et de pyrolyse interviennent dans la dégradation.

La figure 5.2, montre aussi le profil de température au centre d'une particule cylindrique de rayon égal à 3mm en fonction du temps mais soumise à un flux de chaleur correspondant à la température de 780K. Les résultats sont comparés au profil obtenu par les données expérimentales aux mêmes températures de 643K et 780K de Pyle et Zaror [1]. A travers les figures 5.1 et 5.2, on montre que les résultats du présent modèle, qui inclus la teneur en humidité et le rétrécissement de la particule dans la modélisation, sont en bonne concordance avec ceux obtenus expérimentalement par Pyle et Zaror [1].

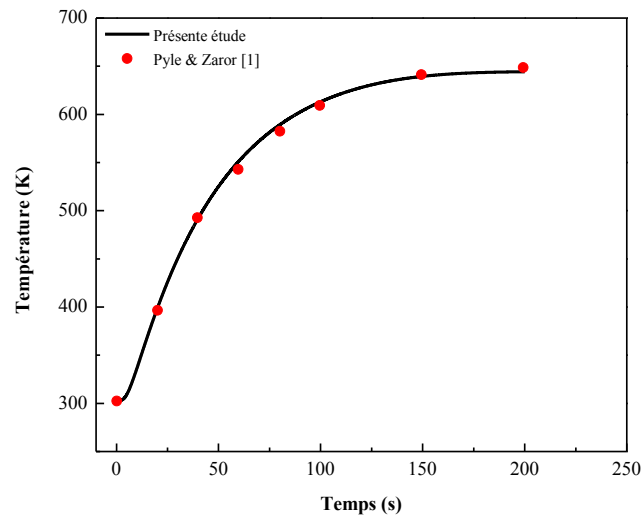


Fig.5.1. Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps ($R=3\text{ mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=643\text{K}$)

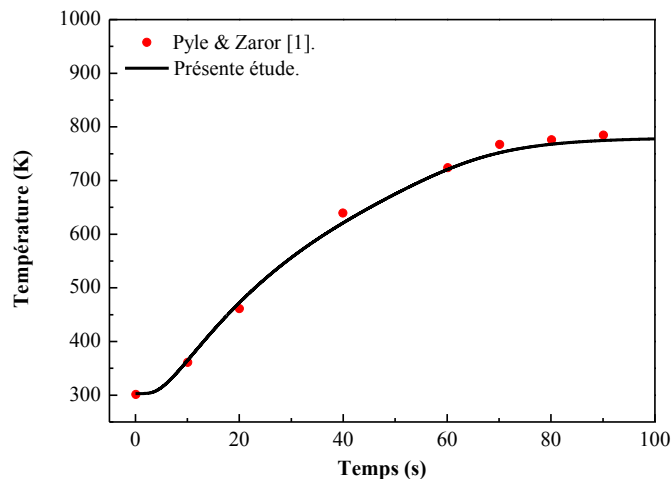


Fig.5.2. Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps ($R=3\text{ mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=780\text{K}$)

Le présent modèle a été aussi validé à travers les résultats de pyle et Zaror [1] de la figure 5.3 pour une particule cylindrique de rayon égal à 7,5mm. L'expérimentation a été réalisée à une température initiale de 303K et une température infinie de 773K. On remarque bien que le présent modèle prédit bien l'évolution de la température dans la particule pour des rayons plus grands (régime thermiquement épais).

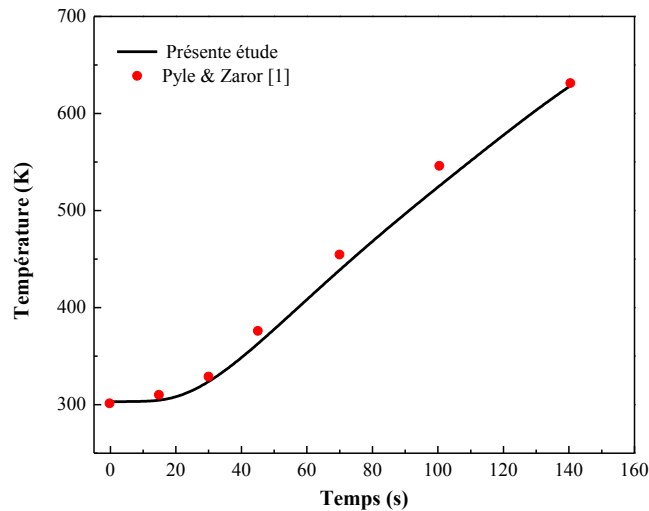


Fig.5.3. Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps ($R=7.5\text{ mm}$, $T_0=303\text{ K}$, $T_\infty=773\text{ K}$).

Pour renforcer la validité de nos simulations, nous avons encore réalisé plusieurs comparaisons de nos résultats avec ceux toujours de Pyle et Zaror [1] pour l'évolution de la température en fonction de la distance radiale de la particule à des conditions diverses. La géométrie considérée est toujours cylindrique.

La figure 5.4 représente l'évolution de la température en chaque point de la distance radiale pour les températures de la particule initiale de 303 K et infinie de 643 K et pour un rayon de 11mm. Le temps de simulation est égal à 4 minutes.

Nous remarquons que la courbe noire correspondant aux résultats de la présente étude est très proche à celle de l'étude expérimentale de Pyle et Zaror [1], ce qui confirme la cohérence des résultats donnés par le présent code de calcul.

Une comparaison similaire a été faite mais pour $T_\infty = 753\text{ K}$ et un temps de simulation de 4 minutes. La figure 5.5 montre l'évolution de la température en fonction de la distance radiale. Cette évolution prédit assez bien qualitativement et quantitativement le processus de dégradation obtenu expérimentalement par les auteurs cités précédemment.

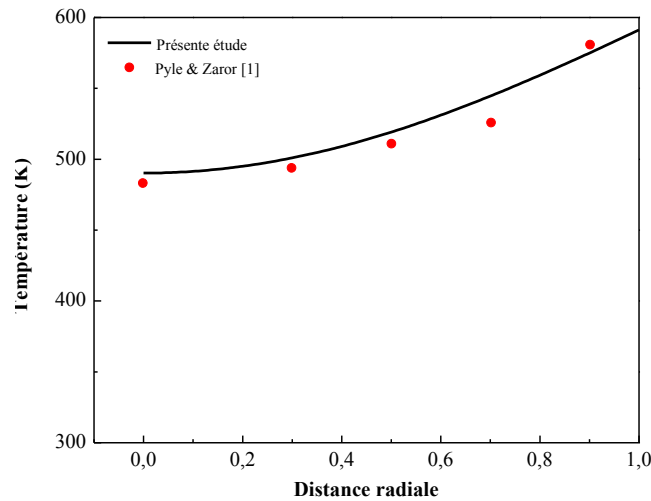


Fig.5.4. Profil de température en fonction de la distance radiale pour une particule cylindrique ($R=11$ mm, $T_0=303$ K, $T_\infty=643$ K, Temps=4 min).

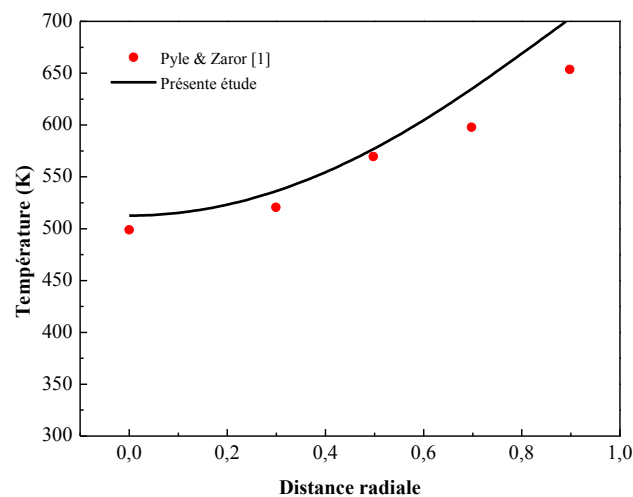


Fig.5.5. Profil de température en fonction de la distance radiale pour une particule cylindrique ($R= 11$ mm, $T_0=303$ K, $T_\infty=753$ K, Temps = 3 min).

5.2.2. Validation Numérique

Les résultats de la présente étude ont été comparés à des résultats numériques obtenus par Babu et Chaurasia [2], Jalan et Srivastava [21] et Bamford [8].

Babu et Chaurasia [2] ont étudié la pyrolyse convective-radiative de la biomasse pour différentes géométries. Ils ont utilisé un schéma cinétique à deux réactions primaires et une réaction secondaire. Les longueurs caractéristiques de la particule qui varient entre 0.0125 à 11mm sont considérées avec une gamme de température de 303 à 2100 K. Les hypothèses utilisées pour le développement de leur modèle sont : (1) les propriétés thermiques et de transport (porosité, conductivité thermique, chaleur spécifique, diffusivité massique) varient avec

la conversion, (2) le transfert de chaleur se fait par les trois modes (conduction, convection et rayonnement), (3) l'évolution de la phase gazeuse se fait dans des conditions d'état instationnaire, (4) le transport de la masse des espèces volatils se fait par convection et diffusion, (5) la pression et la vitesse des gaz produits de pyrolyse varient dans l'espace (le long du rayon de la particule poreuse), (6) l'équilibre thermique local existe entre la matrice solide et les gaz en écoulement, (7) le système est unidimensionnel, (8) la teneur en humidité dans la particule ainsi que le rétrécissement sont négligeable. Le système d'équations différentielles est discrétisé par la méthode des différences finies et résolu par la méthode de Range_Kutta pour les équations de conservation des espèces et le schéma de résolution totalement implicite pour l'équation de conservation de l'énergie.

L'étude réalisée par Jalan et Srivastava [21] inclut un schéma cinétique à plusieurs réactions de pyrolyse primaire et secondaire. L'équation de conservation d'énergie prend en considération les réactions non iso-thermiques. La forme de la particule est cylindrique. Le schéma numérique de résolution utilisé est un schéma à différences finies. La méthode de range-Kutta est employée pour résoudre les équations de conservation des espèces. Dans cette étude, les auteurs n'ont pas considérés la teneur en humidité dans la particule et son rétrécissement durant la dégradation.

Dans le but d'une validation numérique du code de calcul développé dans cette étude, nous avons mené des simulations aux mêmes conditions que les travaux de Babu et Chaurasia [2] ainsi que Jalan et Srivastava [21]. Les résultats de ces simulations sont tracés avec ceux des auteurs cités ci-dessus dans les figures 5.6, 5.7, 5.8 et 5.9.

Dans les figures 5.6 et 5.7, nous comparons les températures au centre d'une particule cylindrique de rayon 3 mm et de température initiale égale à 303K. On remarque d'après les deux figures que nos résultats, obtenus avec la considération de l'effet du rétrécissement, sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux de Pyle et Zaror [1] et concordent aussi bien avec les résultats numériques de Babu et Chaurasia [2] et Jalan et Srivastava [21] obtenus avec des hypothèses simplificatrices citées dans les paragraphes précédents. Ce qui explique l'importance de l'effet du rétrécissement sur le processus de dégradation surtout pour les flux de chaleurs externes plus élevés, figure 5.7. Plus le flux de chaleur externe appliqué est important, plus le rétrécissement est augmenté, ceci se manifeste par une différence dans les résultats assez remarquable quand la particule atteint des températures élevées (à partir de 600 K).

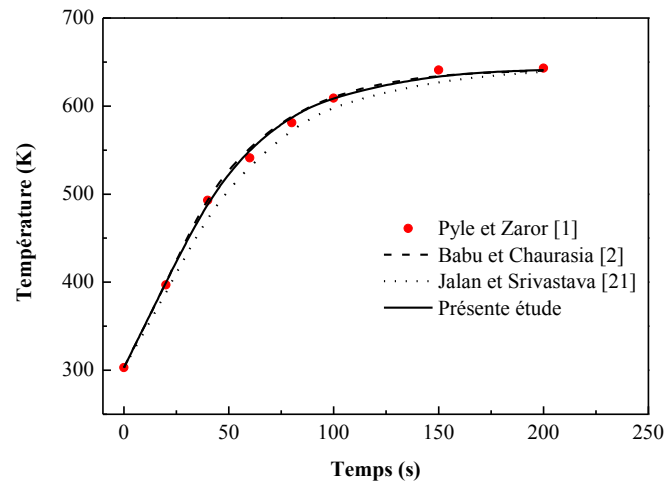


Fig.5.6 : Profil de température en fonction du temps au centre d'une particule cylindrique de rayon $R=3\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=643\text{K}$.

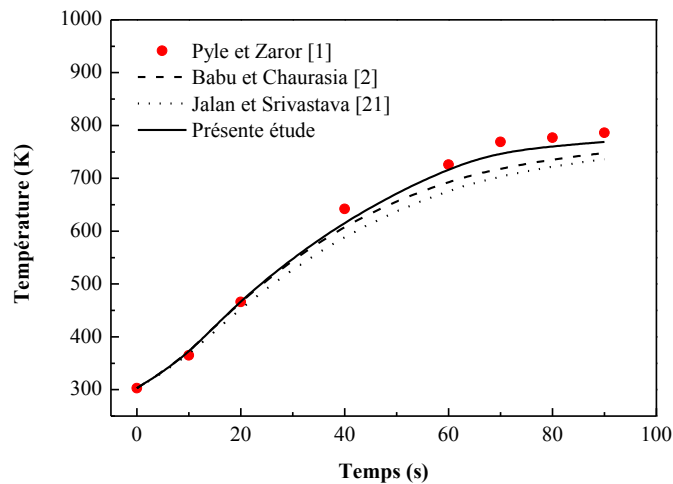


Fig.5.7 : Profil de température en fonction du temps au centre d'une particule cylindrique de rayon $R=3\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=780\text{K}$.

Nous avons aussi représenté dans les figures 5.8 et 5.9 la distribution de la température locale pour différentes positions de la distance radiale d'une particule cylindrique de rayon égal à 11mm, prise à la température initiale égale à 303K et soumise à un flux de chaleur de température infinie équivalente égale à 643K. Cette distribution de température est confrontée aux distributions obtenues expérimentalement par Pyle et Zaror [1] et numériquement par Babu et Chaurasia [2], Jalan et Srivastava [21] et Bamford [8]. D'après les deux figures nous remarquons que les résultats issus de notre code de calcul qui inclut l'effet du rétrécissement de la particule sont plus proches de ceux obtenus expérimentalement par Pyle et Zaror [1] que de ceux obtenus numériquement par Babu et Chaurasia [2], Jalan et Srivastava [21] et Bamford [8].

Ceci encore justifie la nécessité d'introduire le phénomène de rétrécissement dans la modélisation car il améliore beaucoup plus les résultats.

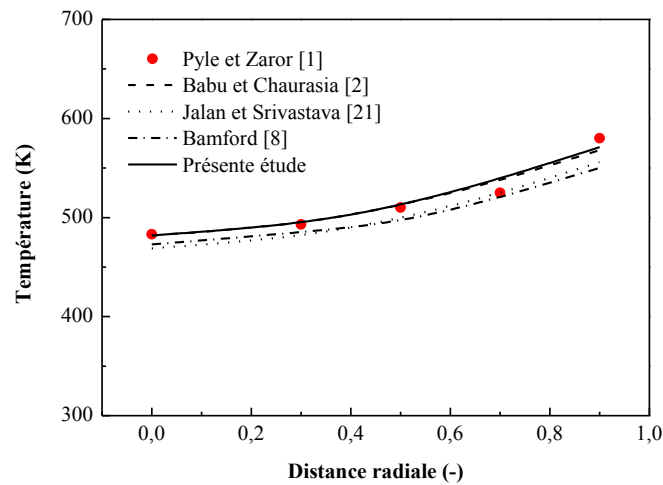


Fig.5.8 : Profil de température en fonction de la distance radiale d'une particule cylindrique de rayon $R=11$ mm, $T_0=303$ K, $T_\infty=643$ K, Temps=4 minutes.

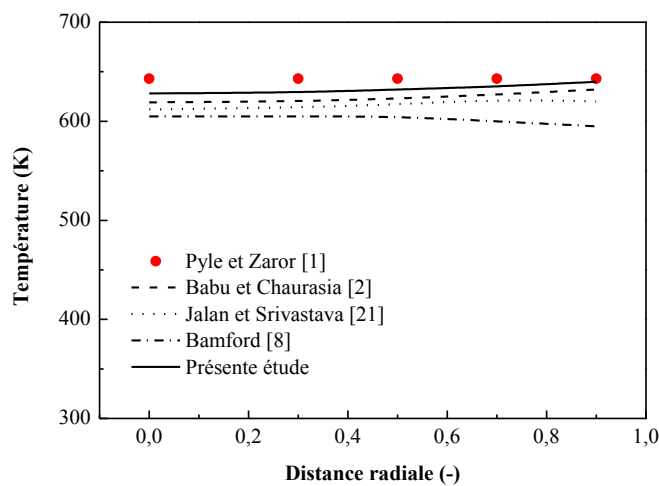


Fig.5.9 : Profil de température en fonction de la distance radiale d'une particule cylindrique de rayon $R=11$ mm, $T_0=303$ K, $T_\infty=643$ K, Temps=11 minutes.

5.3 Etude de la dégradation thermique de la biomasse

Dans le but de mettre en évidence le phénomène de dégradation thermique de la biomasse, nous avons mené une série de simulations numériques à des conditions diverses. Dans la figure 5.10, nous illustrons le profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique sèche de rayon égal à 2,5 et 9,15 mm. Les températures initiale et infinie considérées sont 303 K et 679 K (~ 10 kW/m²). Nous constatons sur la figure que la pyrolyse ne commence qu'à partir de 40 s pour la particule de rayon 2,5 mm et elle est plus rapide, par contre

elle commence à partir de 100s pour la particule de rayon 9,15 mm avec une progression plus lente. Du fait que la pyrolyse doit débiter à la température d'environ 500 K, donc la particule va nécessiter plus de temps pour se chauffer à cette température pour la particule de taille plus grande. La conversion commence et progresse jusqu'à atteindre son maximum quand la température de la particule est voisine de 679 K. Nous remarquons aussi que le temps de conversion est plus important pour les particules de taille plus grande. Cela est dû à la masse importante de biomasse à préchauffer.

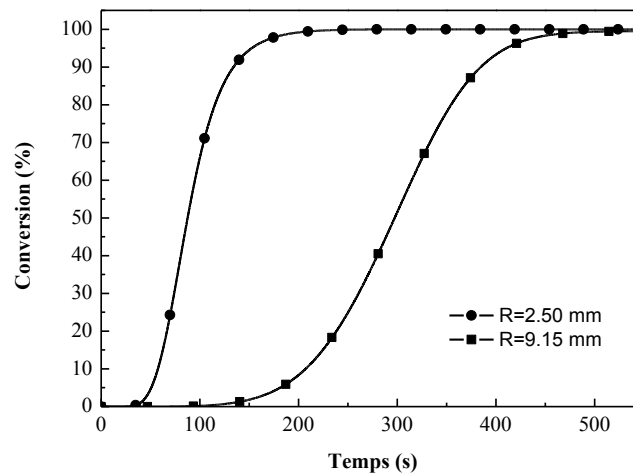


Fig.5.10: Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique ($T_0=303K$, $T_\infty=679K$ ($\sim 10kW/m^2$), teneur en hum=0%).

Les chercheurs cités au chapitre recherche bibliographique ont développés des modèles de pyrolyse de la biomasse à l'échelle de la particule sous différentes considérations. Ils sont inclus dans des modèles globaux de propagation des fronts de flamme dans le cas des feux de végétation et dans les lits fluidisés pour la production de la chaleur, où ils considèrent, dans le but de les simplifier, un ensemble de particules se comportant de la même manière relativement à la dégradation thermique. Afin d'enrichir les banques de données relatives à la dégradation thermique de la biomasse, dans le but de leur utilisation dans les modèles globaux, nous avons réalisé des simulations pour mettre en évidence le comportement de la particule isolée sous plusieurs considérations géométriques et thermocinétiques.

Les figures 5.11 et 5.12 présentent le profil de conversion de la biomasse d'une particule cylindrique de tailles 2,5 mm, 7,5 mm et 10 mm, en fonction du temps, exposées à la température infinie de 679 K ($\sim 10kW/m^2$). Les deux résultats sont obtenus pour des teneurs d'humidité de 30%, (figure 5.11) et de 50%, (figure 5.12). Le temps de pyrolyse pour les deux cas varie. La variation est relativement plus importante en fonction de la taille de la particule que

de la teneur en humidité. Ceci est dû au fait que, pour les particules thermiquement épaisses, le cas de la taille de la particule pour ces résultats, les deux phénomènes séchage et pyrolyse se réalisent successivement. Il n'y a pas de partage de flux de chaleur pour les deux processus. Logiquement, le temps de pyrolyse devrait être le même pour des teneurs d'humidité différentes. Il y a seulement augmentation dans le temps de séchage.

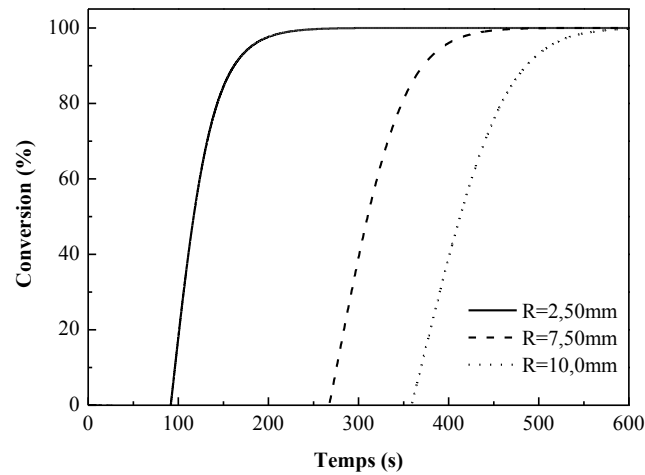


Fig.5.11. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_\infty=679\text{K}$ ($\sim 10\text{kW/m}^2$), teneur en hum=30%).

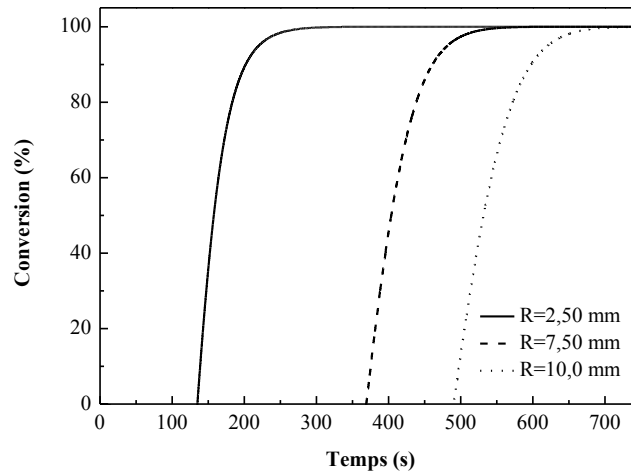


Fig.5.12. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_\infty=679\text{K}$ ($\sim 10\text{kW/m}^2$), teneur en hum =50%)

Les deux figures 5.13 et 5.14 illustrent l'évolution de la conversion de la biomasse en fonction du temps pour des particules cylindrique de différentes dimensions (2,5mm, 7,5mm et 10mm). Les températures initiales et infinie sont successivement égales à 303K et 747K ($\sim 20\text{kW/m}^2$). On remarque sur ces deux figures que la conversion commence plus tôt et sa période

est plus réduite pour des flux de chaleur externes plus élevés. De ce fait on constate que le flux de chaleur externe accélère le processus de dégradation et réduit le temps d'évolution.

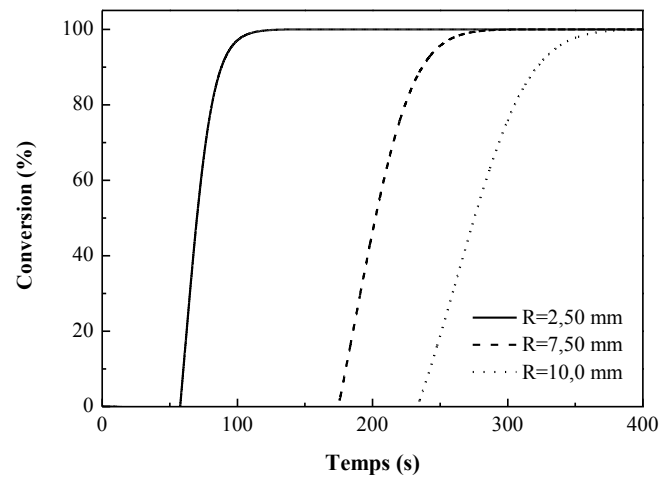


Fig.5.13. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_\infty=747\text{K}$ ($\sim 20\text{kW/m}^2$), teneur en hum =30%)

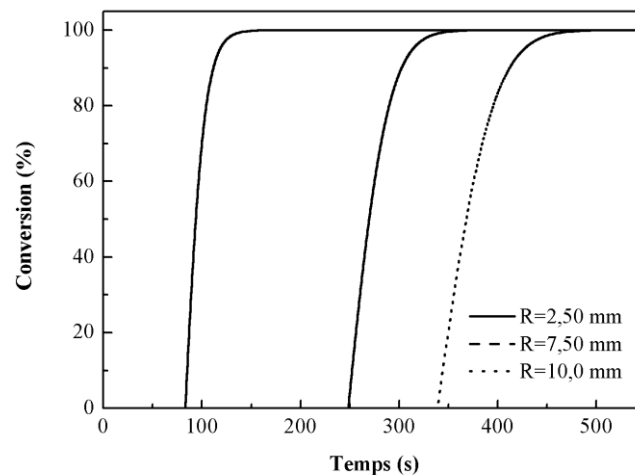


Fig.5.14. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_\infty=747\text{K}$ ($\sim 20\text{kW/m}^2$), teneur en hum =50%)

Les figures 5.15 et 5.16 présentent la conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différentes tailles. (2,5mm, 7,5mm et 10mm). Les températures initiales et infinies sont successivement égales à 303K et 956K $\sim 50\text{kW/m}^2$ et la teneur en humidité égale à 30% pour la première figure et 50% pour la deuxième figure. Ces conditions de simulation sont similaires à ceux d'un feu de forêt naturel, ce qui va nous permettre d'avoir une idée sur la dégradation thermique d'une particule de biomasse dans ce genre de situation. On remarque sur ces deux figures que la dégradation thermique en général prend beaucoup de temps

pour les particules humides. Ce qui permet de dire que pour une forêt avec une biomasse humide, une énergie énorme avec un temps de dégradation important sont nécessaire pour amorcer et maintenir un feu.

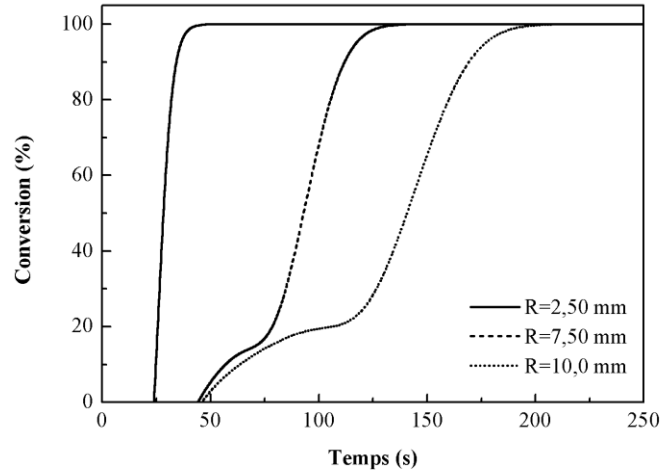


Fig.5.15. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_\infty=956\text{K}$ ($\sim 50\text{kW/m}^2$), teneur en hum =30%)

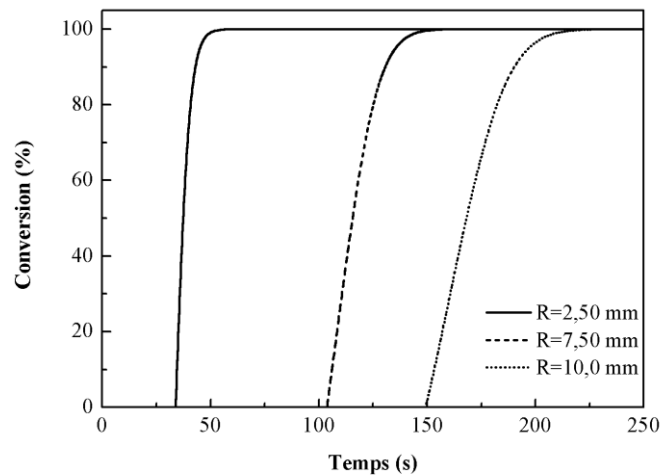


Fig.5.16. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différents rayons ($T_0=303\text{K}$, $T_\infty=956\text{K}$ ($\sim 50\text{kW/m}^2$), teneur en hum =50%)

Dans l'industrie de récupération des déchets, on est souvent confronté à des produits avec des caractéristiques variables du point de vue composition, granulométrie, géométrie, taille et teneur en humidité. Ce type de traitement nécessite donc des systèmes à lit fluidisé avec un minimum de consommation d'énergie. Un système de traitement par lit fluidisé permet aussi de récupérer des produits alimentaires périmés et d'en faire par conditionnement thermique des aliments pour bétail ou des engrais organiques. Un tel système de lit fluidisé est souvent chargé avec des

particules de biomasse de granulométrie très variée, allant de 2,5mm jusqu'à 10mm. Ce genre de lit est souvent équipé d'un système de secouage permettant d'atteindre un transfert de chaleur élevé ainsi qu'une vitesse de réaction physico-chimique optimale. La température de fonctionnement des lits fluidisés varie entre 300K et 1000K.

La figure 5.17 illustre l'évolution de la conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sèche et de géométrie sphérique et pour différentes tailles, allant de 3 à 10mm. Cette géométrie et cette gamme de dimensions sont des conditions similaires pour un lit fluidisé de particule de biomasse. On remarque sur la figure que plus la taille de la particule est importante plus le temps de pyrolyse est élevé. On remarque aussi que la phase de préchauffage est significativement réduite pour ce genre de géométrie, ce qui explique le choix de la géométrie sphérique dans les études des lits fluidisés.

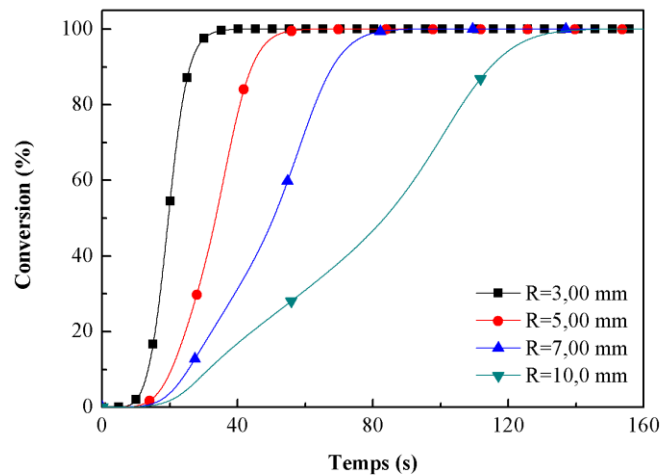


Fig.5.17. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sphérique et pour différents rayons ($T_0=303K$, $T_\infty=956K$ ($\sim 50kW/m^2$), teneur en hum=0%)

Les figures 5.18 et 5.19 illustrent le profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sphérique de dimensions 2,5 mm et 5 mm. La température initiale est de 303K et la teneur en humidité est de 30%. La particule de biomasse est soumise à des flux de chaleurs externes différents, 50kW pour la figure 5.18 et 100kW pour la figure 5.19. On remarque sur les deux figures que le temps de conversion plus élevé pour des particules plus grandes. On remarque aussi que la pyrolyse est retardée, elle ne commence pas de zéro, cela est dû à la présence de la phase de séchage qui précède le processus de pyrolyse. Durant le séchage de la particule, la totalité de l'énergie fournie sera consommée par le processus d'évaporation. Après un certain temps de séchage, 18s pour la première figure et 11s pour la deuxième figure, nous aurons le début de la phase de pyrolyse, cette dernière continue de progresser jusqu'à atteindre

100% de conversion après lequel le régime devient établi. En Comparant les deux figures, 5.18 et 5.19, nous constatons une diminution de la phase d'évaporation pour des flux de chaleurs externes élevés et pour une même teneur en humidité, nous remarquons aussi par comparaison des deux figures que la période d'évolution est plus faible pour des flux de chaleurs externes plus élevés. De ce fait, nous pouvons dire que l'augmentation des flux de chaleurs externes induit une accélération de la phase d'évaporation ainsi que celle de pyrolyse.

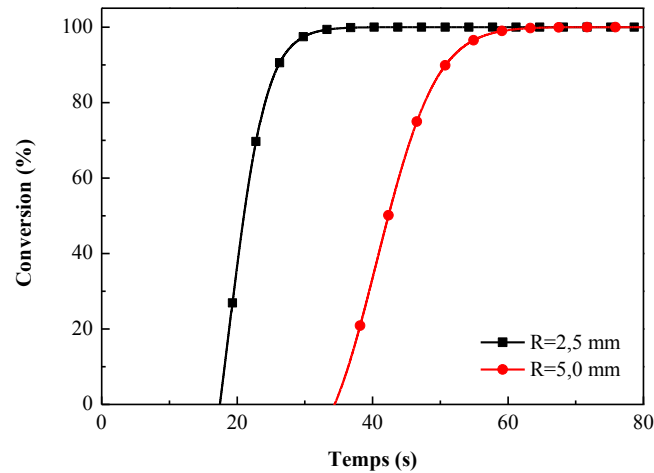


Fig.5.18. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sphérique et pour différents rayons ($T_0=303K$, $T_\infty=956K$ ($\sim 50kW/m^2$), teneur en hum =30%)

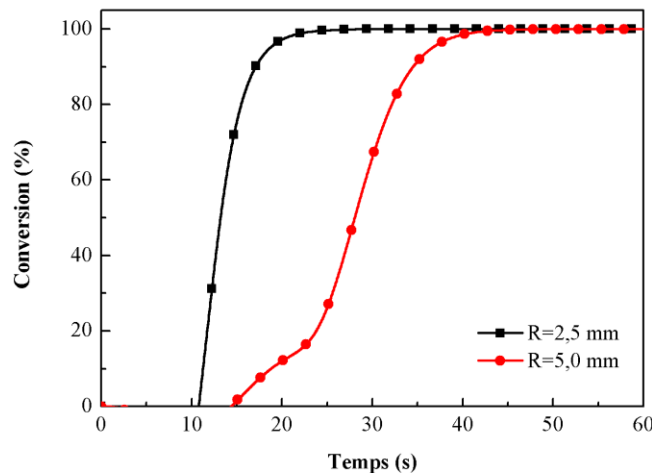


Fig.5.19. Profil de conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule sphérique et pour différents rayons ($T_0=303K$, $T_\infty=1148K$ ($\sim 100kW/m^2$), teneur en hum =30%).

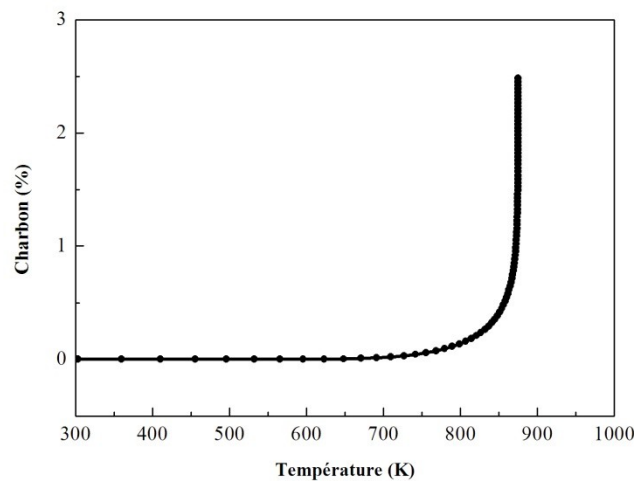


Fig.5.20. Production du charbon en fonction de la température pour une particule cylindrique ($R=0.0125$ mm, $T_0=303$ K).

La figure 5.20 représente la production de l'espèce de charbon pour une particule Cylindrique de rayon $R= 0.0125$ mm. La simulation est faite pour les température allant de 303 k (Température initiale) jusqu'à 875 k. on remarque que la production du charbon est négligeable devant les autres espèces (Gaz et Volatils) et cela est du à la dimension très faible de l'échantillon et à la température élevée au quelle il est soumis. Ces deux condition initiales favorise la production des gaz et des volatils plutôt que du charbon.

5.4. INFLUENCE DES PARAMETRES PHYSIQUES SUR LA DEGRADATION THERMIQUE DE LA BIOMASSE

5.4.1. Effet de la taille de la particule sur le processus de pyrolyse

La figure 5.21 montre l'évolution de la température au centre de la particule cylindrique en fonction du temps et pour différents diamètres. On commence d'un diamètre égal à 0,1 mm jusqu'à un diamètre de 0.5mm. Le temps nécessaire pour avoir une température uniforme de 900 K sur toute la particule de rayon 0,1mm est de 0. 3s alors qu'il est de 10s pour un rayon de 0.5mm.

De ce fait, on remarque que plus on diminue la taille de la particule, plus le temps pour atteindre la température uniforme est faible.

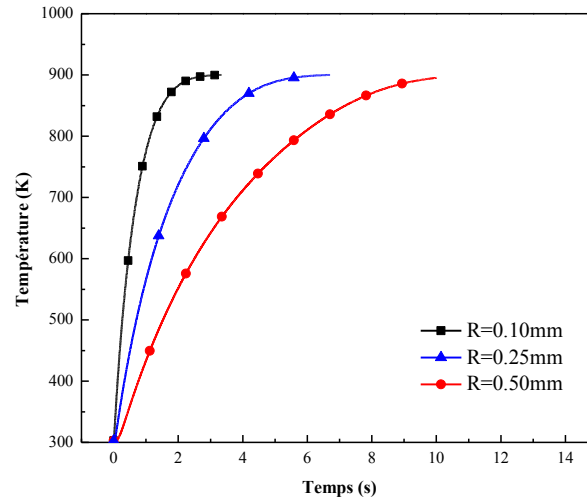


Fig.5.21. Profil de température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps pour différents diamètres ($T_0=303\text{K}$, $T_\infty=900\text{K}$).

5.4.2. Variation de la température à travers la particule de biomasse

La figure 5.22 montre le profil de température durant un régime thermiquement mince et pour une particule cylindrique de rayon 0.25 mm exposée à une température infinie de 900K. On remarque sur la figure que la température au centre ($R=0\text{mm}$) et celle à la surface ($R=0.25\text{mm}$) sont très proche, une très faible différence sépare les deux courbes, ce qui explique l'aspect thermiquement mince de la simulation. Le temps de pyrolyse pour ce cas est de 5.5s, une telle période de pyrolyse induit un court temps de résidence des gaz et volatils primaires, ce qui résulte par une faible concentration des produits issus de la réaction secondaire.

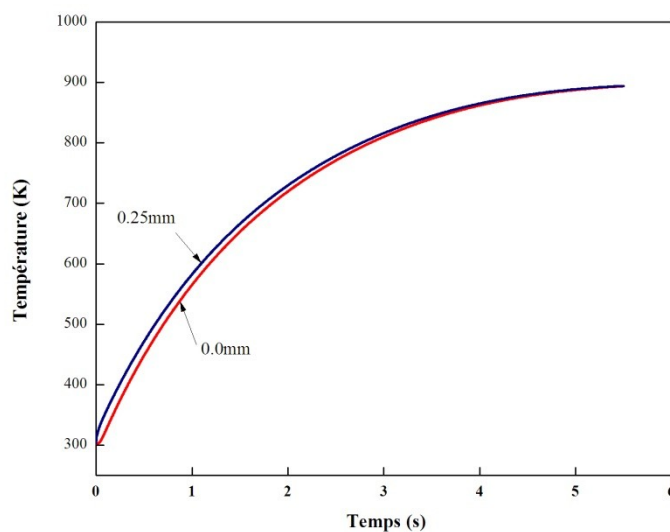


Fig.5.22. Profil de température à la surface et au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps ($R=0.25\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=900\text{K}$).

La figure 5.23 illustre l'évolution de la température en fonction du temps pour différentes positions dans la particule cylindrique de rayon 0.02m, allant de la surface jusqu'au centre. Le profil de température prend uniquement 50s pour atteindre la température finale à la surface de la particule. Par contre, pour le profil de température au centre de la particule, il prend beaucoup plus de temps pour atteindre la température finale.

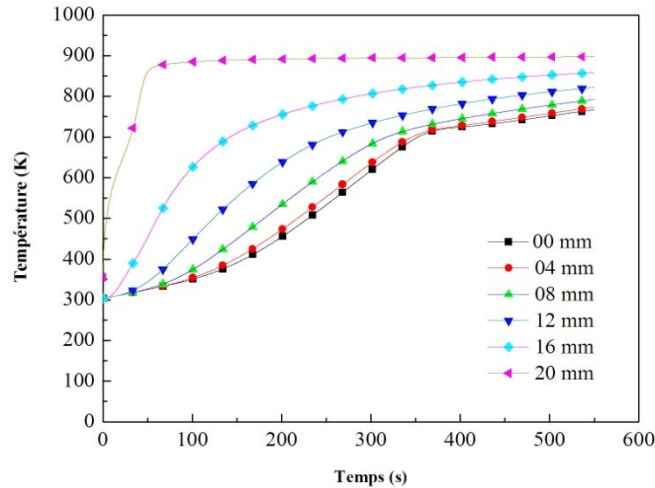


Fig.5.23. Profil de température en fonction du temps pour différentes positions d'une particule cylindrique ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=900$).

5.4.3. Les régimes thermique ment épais et mince

La figure 5.24 présente l'évolution de la température en fonction du temps pour différents rayons d'une particule cylindrique allant de 0,1 mm à 1 mm. La température initiale est de 303 K et la température infinie est égale à 900 K. Chaque rayon de particule est représenté par une perle de courbes, l'une présente l'évolution de la température au centre de la particule qui est désignée par la lettre (C) et l'autre c'est la courbe de la variation de la température à la surface de la particule qui est désignée par la lettre (S). Les profils de température obtenus au centre et à la surface de la particule de rayon égal à 0.1 mm sont quasiment superposés et identique. Le même résultat est observé pour les particules de rayons 0.25 et 0.40 mm respectivement. La température est uniforme dans toute la particule et ne varie qu'en fonction du temps, le régime est donc thermiquement mince. A partir d'un rayon supérieur à 0.40 mm, une nette différence de température est remarquée. La température est non uniforme dans la particule, le régime est donc thermiquement épais.

D'après la figure 5.24, on peut conclure que la transition entre le régime thermiquement mince e le régime thermiquement épais s'effectue au voisinage d'un rayon de 0.4 mm.

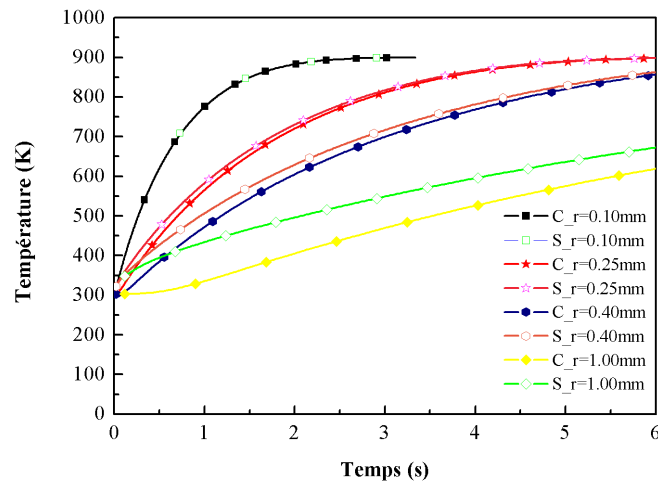


Fig.5.24. Profil de température en fonction du temps au centre et à la surface d’une particule cylindrique pour différentes dimensions ($T_0=303K$, $T_\infty=900K$).

Une autre méthode pour distinguer les deux régimes, thermiquement épais et thermiquement mince, est appelée le critère de Biot qui est basé sur la relation suivante : $Biot = \frac{h \times l}{k}$

Avec ;

h : Coefficient de convection thermique.

l : Longueur caractéristique.

k : Coefficient de conduction thermique.

Pour $Biot \ll 0.1$: Régime thermiquement mince $T(t)$.

Pour $Biot \geq 0.1$: Régime thermiquement épais $T(x,t)$.

L’introduction du nombre de Biot dans le code de calcul nous permet d’avoir une idée sur le régime. Le tableau I suivant nous donne le nombre de Biot pour différentes tailles des particules :

Tableau I : Nombre de Biot en fonction de la taille de la particule.

Nombre de Biot	Taille (Rayon (mm))
0.0048	0. 1
0.018	0. 25
0.036	0. 3
0.144	0. 4

D'après le tableau ci-dessus et pour un rayon de la particule égal à 0.1 mm, le nombre de Biot égal à 0.0048 qui est très petit devant 0.1, ce qui explique la présence du régime thermiquement mince. Pour un rayon de 0.4 mm, le nombre de Biot égal à 0.144 qui est légèrement supérieur à 0.1, ce qui confirme la présence du régime thermiquement épais.

Le profil de conversion de la biomasse en fonction de la distance radiale est représentée par la figure 5.25 pour une faible valeur du nombre de Biot=0.1, et par la figure 5.26 pour une valeur élevée du nombre de Biot=50. Les deux figures ont été simulées pour une particule cylindrique de rayon : 20 mm, Température initiale : 303K et température infinie : 900K. La conversion de la biomasse pour un nombre de Biot=50 présente un temps de pyrolyse égal à 599s, se temps de pyrolyse est inférieur à celui du nombre de Biot égal à 0.1, qui est de 625s. Cela est due au fait que les faibles nombre de Biot pour une dimension de particule donnée correspond à un faible taux de transfert de chaleur. Par conséquent, les réactions qui sont contrôlées par le transfert de chaleur seront favorisées.

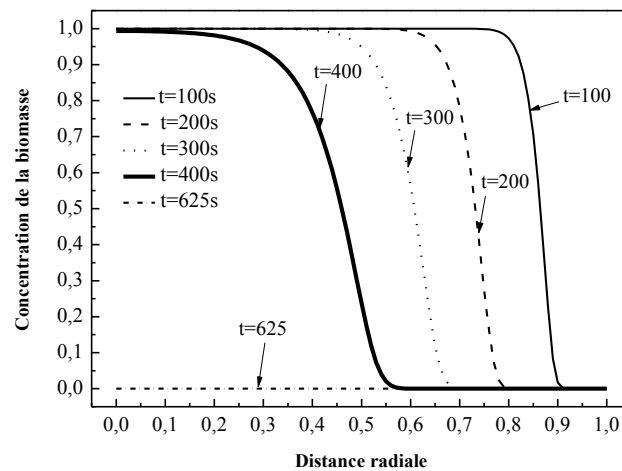


Fig.5.25. Profil de conversion de la biomasse en fonction de la distance radiale pour différentes périodes ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=900\text{K}$, $Biot=0.1$).

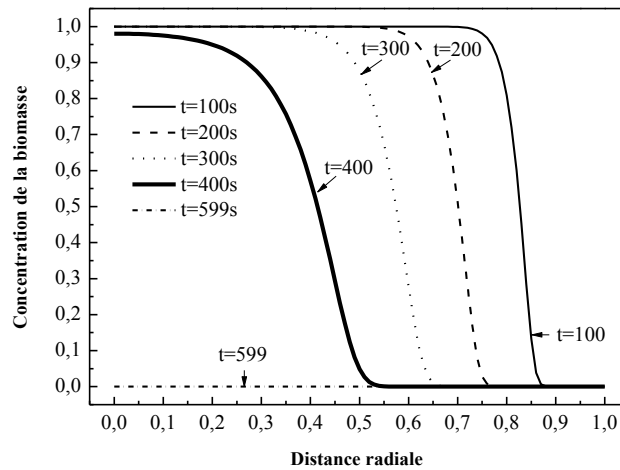


Fig.5.26. Profil de conversion de la biomasse en fonction de la distance radiale pour différentes périodes ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=900\text{K}$, $Biot=50$).

L’objectif principal de la pyrolyse des solides en général est d’optimiser le rendement des produits de pyrolyse. Dotant plus, il est aussi important de savoir l’effet du nombre de Biot sur le rendement des produits dans la particule solide. La figure 5.27 montre le rendement de production des produits de pyrolyse ainsi que le temps de pyrolyse en fonction du nombre de Biot. Une légère diminution pour le temps de pyrolyse est observée quand le nombre de Biot augmente.

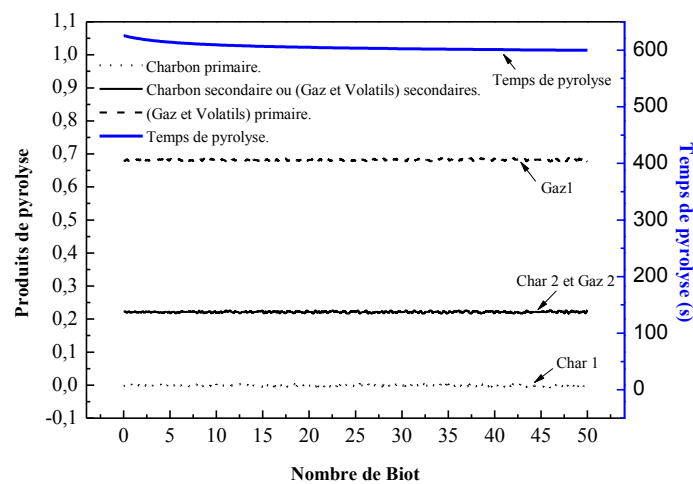


Fig.5.27. Produits de pyrolyse finaux et temps de pyrolyse en fonction du nombre de Biot ($R=20\text{mm}$, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=900\text{K}$).

5.4.4. Les produits des réactions de pyrolyse

La figure 5.28 présente l'évolution de la conversion de la biomasse le long du rayon de la particule et après un temps égal à 100 s. cette conversion mène vers la production de divers espèces à savoir ; le charbon, des gaz et des volatils. On remarque sur la figure que la matière est toujours vierge jusqu'à la position de 0,7 (adimensionnelle). À partir de cette position la concentration en biomasse vierge diminue pour donner naissance aux autres espèces. On remarque aussi que la concentration du charbon est très faible devant la concentration des gaz et volatils, ce qui confirme les résultats de la figure 5.20. Un tracer d'une droite verticale traversant les courbes des différentes espèces nous permet de faire la somme des différentes concentrations, cette somme doit être égale à la concentration initiale de la biomasse, car il n'y a ni pertes ni production, tout se transforme. La courbe du charbon primaire représente une faible concentration au niveau des couches internes de la biomasse, pour les couches externes, le charbon primaire est presque nul, cela est dû par le fait que le charbon primaire est transformé vers des produits secondaires à travers des réactions secondaires. La concentration des gaz et volatils secondaires est égale à zéro pour 100 secondes de simulation, ce qui veut dire que leurs apparition devrait être à un temps supérieur.

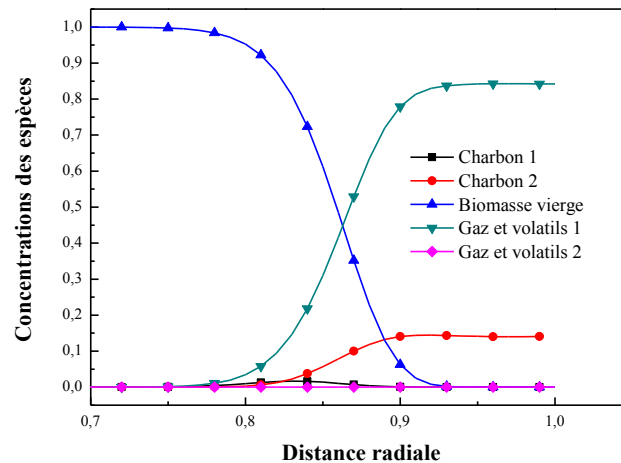


Fig.5.28. Profil de conversion de la biomasse en fonction de la distance radiale pour une particule cylindrique ($R = 20$ mm, $T_0 = 303$ K, $T_\infty = 900$ K, Temps = 100 s).

5.4.5. Conversion de la masse en fonction du temps

La figure 5.29 représente la conversion de la biomasse vers les différentes espèces pour un rayon de la particule cylindrique égal à 20 mm, une température initiale égale à 303K et une température infinie égale à 900 K. sur cette figure, on remarque bien que la dégradation

thermique commence à partir d'un temps égal à 25s, et 90% de la biomasse vierge sera convertie en charbon et gaz et volatils pour un temps égal à 550s.

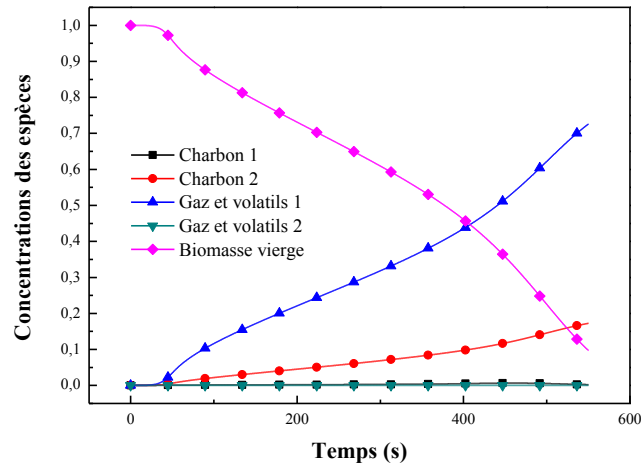


Fig.5.29. Conversion de la biomasse vers les différentes espèces en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour un temps de 550 s ($R= 20$ mm, $T_0= 303$ K, $T_\infty= 900$ K).

5.4.6. Variation du temps de pyrolyse en fonction de la température

La figure 5.30 illustre la variation du temps de pyrolyse en fonction de la température infinie pour une particule de biomasse cylindrique de rayon égal à 0,1 mm et de température initiale égale à 303K. En variant la température finale au quelle est soumise la particule de biomasse de 700K à 950K, On remarque sur la figure que plus la température infinie est grande plus le temps de pyrolyse est faible. De ce faite, on constate que la température infinie accélère le processus de pyrolyse.

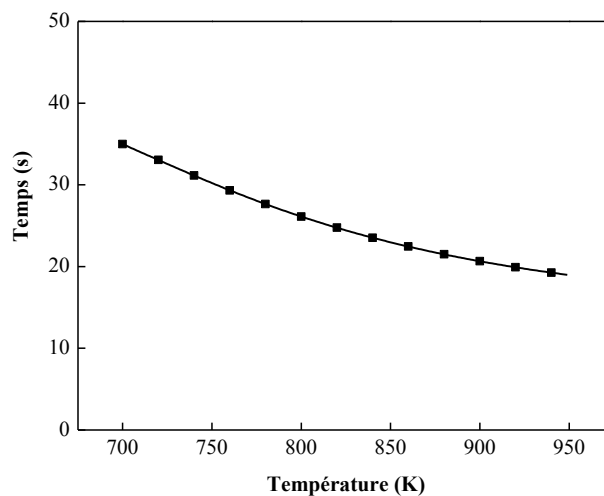


Fig. 5.30. Temps de pyrolyse en fonction de la température pour une particule cylindrique ($R= 0.1$ mm, $T_0= 303$ K).

5.4.7. Pyrolyse de la biomasse humide

La figure 5.31 illustre l'évolution de la dégradation thermique par pyrolyse de la biomasse humide en fonction du temps pour une particule cylindrique de rayon égal à 20 mm, de température initiale égale à 303K et de température infinie égale à 643K. La teneur en H₂O considérée est de 10%. Sur la figure, on observe une diminution linéaire du taux d'humidité pendant les premières secondes (50s), puis on aura l'apparition des produits de pyrolyse, en commençant par les gaz et volatils primaires, le charbon primaire, puis le charbon secondaire et gaz et volatils secondaires. Le phénomène de séchage continue de progresser au même temps que la production des espèces et donc, on a un effet de chevauchement entre la phase de séchage et la phase de production des espèces de pyrolyse. Le séchage se poursuit jusqu'à atteindre le temps de 450s où la particule de biomasse est complètement séchée. Juste après, la production des espèces prend une allure plus accélérée, cela est due au fait que la phase de séchage consomme beaucoup d'énergie par rapport à celle nécessaire à la production des espèces de pyrolyse. Une fois le séchage de la particule est terminé, l'énergie fournie sera complètement consacrée à la production des espèces de pyrolyse, se qui explique l'accélération de production des espèces vers la fin du processus.

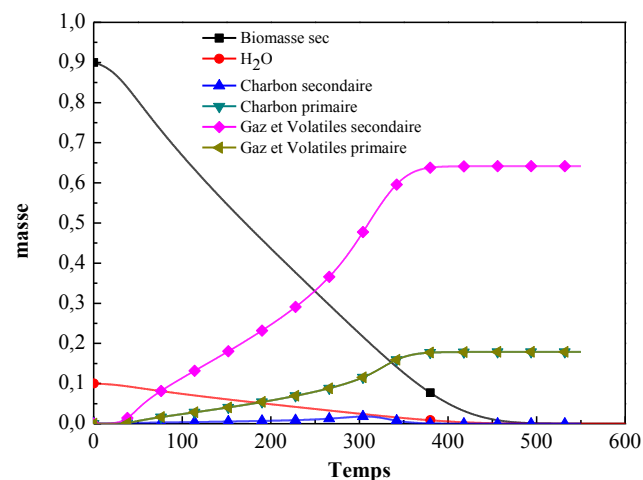


Fig. 5.31. Evolution de la dégradation thermique pour une particule cylindrique de rayon 20 mm et une teneur en hum.

5.4.8. Effet de l'humidité sur le temps de pyrolyse

La figure 5.32 représente la variation du temps de pyrolyse en fonction de la teneur en humidité pour une particule cylindrique de différents rayons soumise à un flux de chaleur externe de 40 kW/m². On remarque que le temps de pyrolyse augmente avec l'augmentation de la teneur en humidité dans la particule d'une manière uniforme.

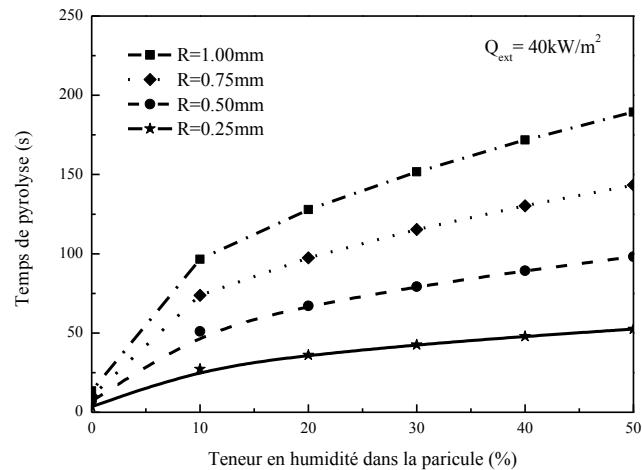


Fig.5.32 : Effet de la teneur en humidité sur le temps de pyrolyse pour une particule de différents rayons.

5.4.9. Flux massiques d'évaporation d'eau et des produits de pyrolyse

L'évolution des flux massiques de vaporisation et de pyrolyse est montrée dans la figure 5.33 pour une particule cylindrique de bois de type « Sapin » de rayon 0.25 mm, soumise à un flux de chaleur radial de 40 kW/m^2 . La teneur en humidité de 30% dans la particule est considérée. La pyrolyse ne commence qu'après que l'évaporation atteigne son maximum à 5s. La diminution du flux massique d'évaporation permet l'accélération du flux massique de pyrolyse. Ce phénomène s'explique par le fait que le flux de chaleur externe absorbé durant la phase de décroissance de l'évaporation devient moindre, le processus est faiblement endothermique.

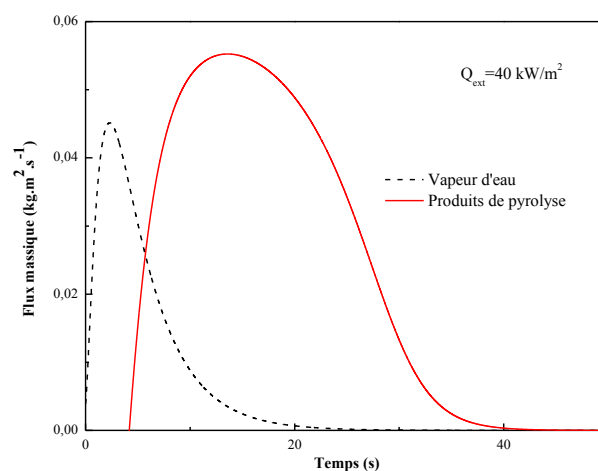


Fig.5.33 : Evolution du flux massique de vaporisation et de pyrolyse pour une particule thermiquement mince (Teneur en humidité = 30%).

A ce stade de l'évolution, la phase de pyrolyse commence et s'accélère pour atteindre un maximum après 15 secondes environ. La phase de décroissance s'étale sur une durée de 25s. Les durées de l'évaporation et de la pyrolyse sont respectivement égales à 25s et 45s. On remarque qu'il y a un chevauchement partiel des phénomènes de séchage et de pyrolyse. C'est-à-dire que la pyrolyse commence avant que le séchage se termine.

5.4.9.1. Influence de la teneur d'eau sur les flux massiques d' H_2O et les produits de pyrolyse

Les flux massiques d'évaporation d'eau et de pyrolyse ont été tracés pour différents pourcentage d'eau en fonction du temps, tout en fixant le rayon de la particule cylindrique à 0.25 mm et le flux de chaleur externe à $40 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$.

Sur la figure 5.34. On remarque que plus la teneur en eau augmente, plus l'aire de chevauchement entre les deux courbes augmente et plus le temps de pyrolyse augmente. On observe aussi sur la courbe un décalage de la cloche de pyrolyse vers l'avant (c.-à-d. que la pyrolyse est retardée) et une diminution de son pic pour des pourcentages d'eau plus élevés.

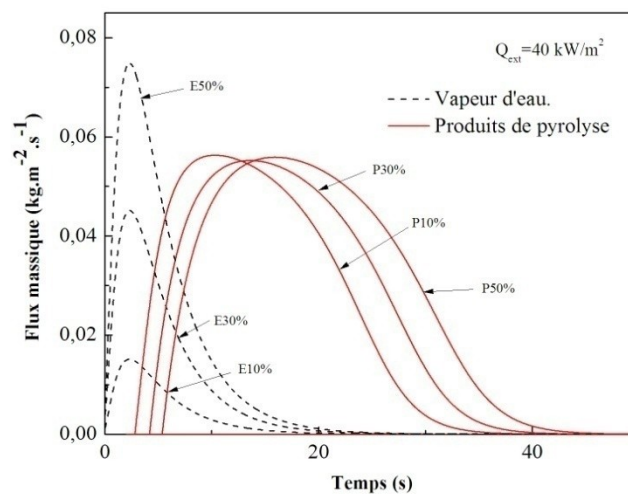


Fig. 5.34. Evolution des flux massique de la vapeur d'eau et de pyrolyse en fonction du temps pour différents pourcentage d' H_2O ($R = 0.25 \text{ mm}$, $Q_{\text{ext}} = 40 \text{ kW}/\text{m}^2$).

Quant à la courbe d'évaporation de $\text{L}'\text{H}_2\text{O}$, sa période augmente légèrement avec l'augmentation de la teneur d'eau mais une forte augmentation de son pic signalant des valeurs de flux d'évaporation plus élevées.

5.4.9.2. Influence de la géométrie de la particule sur le processus de dégradation

Les géométries, plane, cylindrique et sphérique d'une particule de biomasse ont été considérées pour étudier l'influence de la géométrie sur le phénomène de séchage et de pyrolyse. La particule de longueur caractéristique égale à 0,25 mm, avec une teneur en eau de 30%, soumise à un flux de chaleur externe de 40 kW/m² est numériquement expérimentée. L'évolution des flux massiques en fonction du temps, obtenue pour les trois géométries, est représentée dans la figure 5.35.

On remarque que les temps de séchage et de pyrolyse pour les trois géométries de la particule sont quasiment les mêmes. Pour le séchage, il est d'environ 20s et pour la pyrolyse, il est égal à environ 45s. Un léger décalage dans le processus de pyrolyse est observable pour la géométrie plane. Le processus de pyrolyse commence quand l'évaporation atteint son maximum pour les géométries sphérique et cylindrique, par contre pour la géométrie plane, il commence quand l'évaporation est en phase de décroissance.

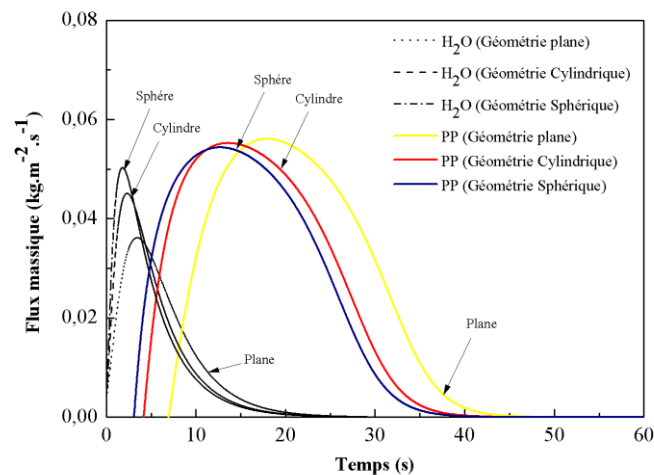


Fig.5.35 : Evolution des processus de séchage et de pyrolyse en fonction du temps pour trois géométries de la particule (longueurs caractéristiques=0.25mm, teneur en eau= 30%).

5.4.9.3. Influence du flux de chaleur externe sur le processus de dégradation

La figure 5.36. illustre la variation des flux massiques d'évaporation d'eau et des produits de pyrolyse en fonction du temps pour une particule cylindrique soumise à différentes valeurs du flux de chaleur externe, allant de 30 jusqu'à 80 kW.m⁻².s⁻¹. Les valeurs du rayon de référence et de la teneur en humidité sont fixées à 0,25 mm et 30% de teneur en humidité. A partir de la figure 5.36, on constate une diminution du temps de pyrolyse et une accélération des flux massiques pour des flux de chaleur externes plus élevés. De même pour les courbes d'évaporation d'eau. On remarque aussi que plus on augmente le flux de chaleur, plus l'aire de

chevauchement entre le séchage et la pyrolyse diminue. Pour des flux de chaleur égaux à 80 kW/m^2 , le débit massique des vapeurs d'eau est plus accéléré, il atteint des valeurs d'environ $0,12 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$, par contre celui des produits de pyrolyse ne dépasse pas les $0,07 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$. Pour des flux de chaleur plus faibles, de l'ordre de 30 kW/m^2 , le débit massique des produits de pyrolyse est plus accéléré, il atteint des valeurs de $0,04 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ et celui de la vapeur est d'environ $0,03 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$. De ce fait, on peut dire que les flux de chaleur externe élevés accélèrent le processus de séchage, par contre, pour les faibles flux de chaleur, la pyrolyse est favorisée par rapport au séchage. On remarque aussi que plus on diminue le flux de chaleur externe, plus les deux processus de séchage et de pyrolyse sont retardés et leur période est allongée.

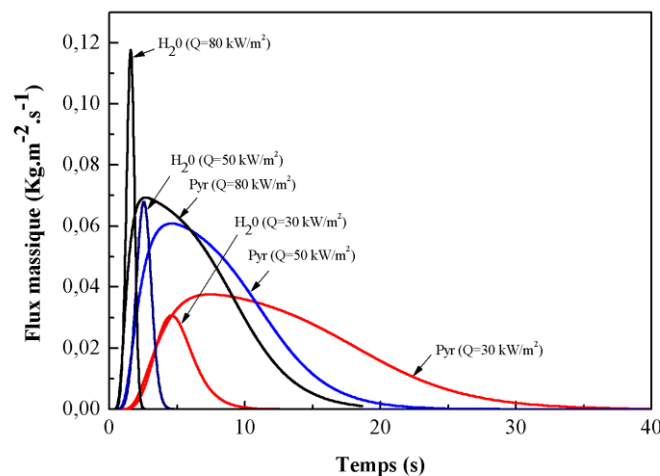


Fig.5.36 : Evolution des processus de séchage et de pyrolyse pour une particule cylindrique en fonction du temps pour différents flux de chaleurs externes ($R=0,25 \text{ mm}$, teneur en hum= 30%).

5.4.9.4. Effet de la taille de la particule sur le processus de dégradation thermique

La figure 5.37 présente l'évolution des flux massiques d'eau et des produits de pyrolyse en fonction du temps pour une particule cylindrique et pour différentes dimensions, allant de 0,25 à 2,5 mm. La teneur d'eau et le flux de chaleur externe sont constants. On remarque sur la figure que plus la dimension de la particule est élevée, plus le temps de pyrolyse est plus important. Par contre, l'intensité du flux de pyrolyse diminue avec l'augmentation du rayon. Le décalage de la cloche de pyrolyse vers l'avant signifie que la pyrolyse est retardée pour des dimensions plus élevées. On remarque aussi que le chevauchement entre le séchage et la pyrolyse diminue et il est presque nul pour des dimensions supérieures à 2,5 mm. Quant au séchage de la particule, la période d'évaporation d' H_2O augmente légèrement avec

l'augmentation de la dimension, alors que son intensité diminue d'une manière significative pour les dimensions élevées.

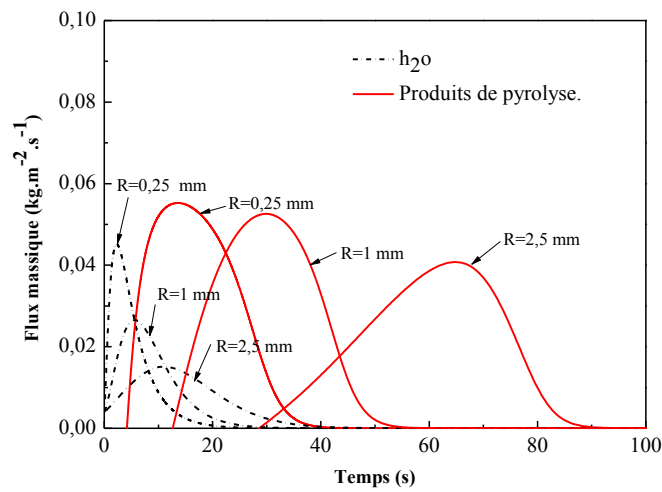


Fig. 5.37. Evolution des flux massique en fonction du temps pour différentes dimensions de la particule ($\text{H}_2\text{O}= 30\%$, $Q_{\text{ext}}= 40 \text{ kW/m}^2$).

5.4.9.5. Régime thermiquement épais (2.5 mm)

La figure Fig.5.38 présente l'évolution du flux massique de vaporisation et de pyrolyse en fonction du temps pour une particule cylindrique de rayon 2.5 mm. Sa teneur en eau de 30%. Elle est soumise à un flux de chaleur de $40 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$. Dans la mesure où on a montré que le régime thermiquement épais s'effectue pour les rayons de particule supérieures à 0.4 mm, donc les résultats présentés concernent une dégradation thermique en régime thermiquement épais. On observe que les deux processus (séchage et pyrolyse) se réalisent successivement. Les temps de séchage et de pyrolyse sont élevés en comparaison au cas thermiquement mince. Cela s'explique par le fait qu'il y a une grande quantité d'eau à évaporer pour une taille plus grande de la particule. En utilisant une même loi de séchage pour les deux régimes, l'évaporation s'effectue avec la même vitesse, donc pour une particule de taille plus grande, le temps de séchage devient plus élevé.

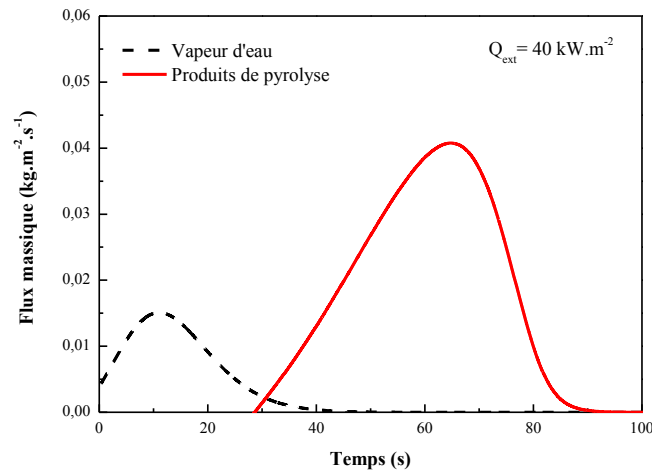


Fig.5.38 : Evolution des flux massiques d'évaporation d'eau et des produits de pyrolyse pour une particule cylindrique en fonction du temps ($R=2,5$ mm, teneur en hum =30%, $Q_{\text{ext}}=40$ kW/m²)

5.5. INFLUENCE DES DIFFERENTS MODELES CINETIQUES SUR LA CONVERSION DE LA BIOMASSE

Comme il a été déjà défini dans le chapitre « travaux antérieurs », les modèles cinétiques sont classés en trois groupes : modèles globaux à une seule étape, modèles à une seule étape multi-réaction et modèles à deux étapes semi-global. Pour faciliter la présentation des résultats, nous allons définir les trois types cités précédemment par : Modèle I, Modèle II et Modèle III.

Les figures 5.39, 5.40, 5.41 et 5.42 représentent la variation de la température au centre d'une particule cylindrique en fonction du temps pour les différents modèles cités ci-dessus. Les températures infinies varient entre 643 et 900 K et les rayons de la particule varient entre 3 et 7,5 mm. Pour la figure 5.39, dont la température infinie est de 643 K, toutes les courbes sont superposées et les trois modèles donnent des résultats satisfaisants par rapport aux résultats expérimentaux de Pyle et Zaror [1]. Dans la figure 5.40, où la température infinie est de 773 K, la courbe du modèle I commence à prendre une allure différente à partir de 550 K. Par contre, les deux autres modèles (II et III) restent alignés sur la courbe de référence.

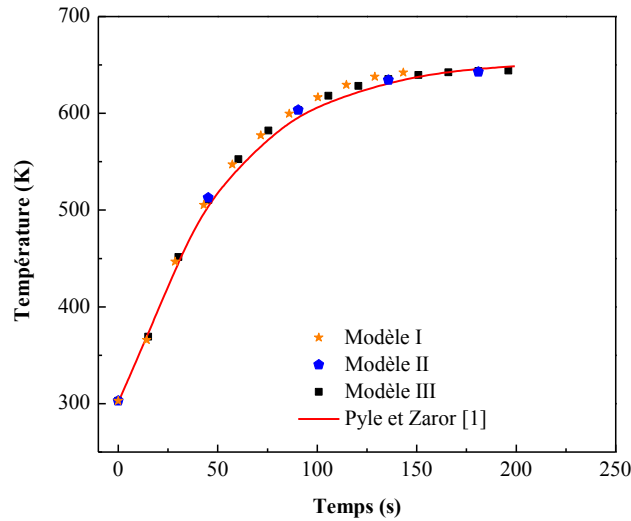


Fig. 5.39. Influence des modèles cinétiques sur la température (R=3 mm, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=643\text{K}$)

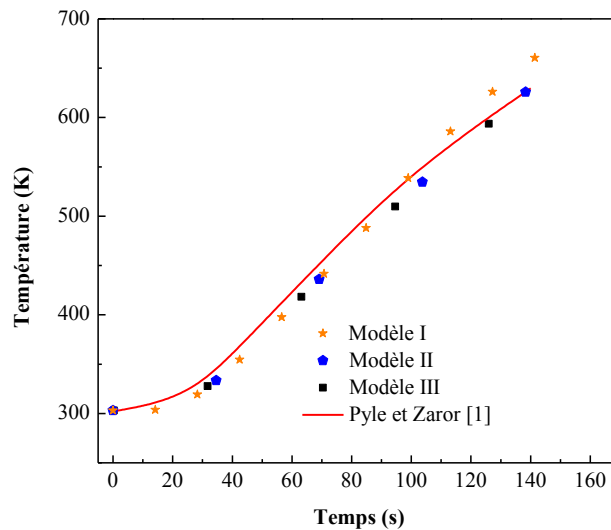


Fig. 5.40. Influence des modèles cinétiques sur la température (R=7.5mm, $T_0=303\text{K}$, $T_\infty=773\text{K}$)

Pour des températures infinies plus élevées (900 K) comme il est représenté dans la figure 5.41, les résultats issus du modèle I sont complètement différents et le système ne converge plus. Pour les modèles II et III, les courbes se superposent jusqu'à 850 K. La courbe du modèle II prend une allure différente à partir de cette température.

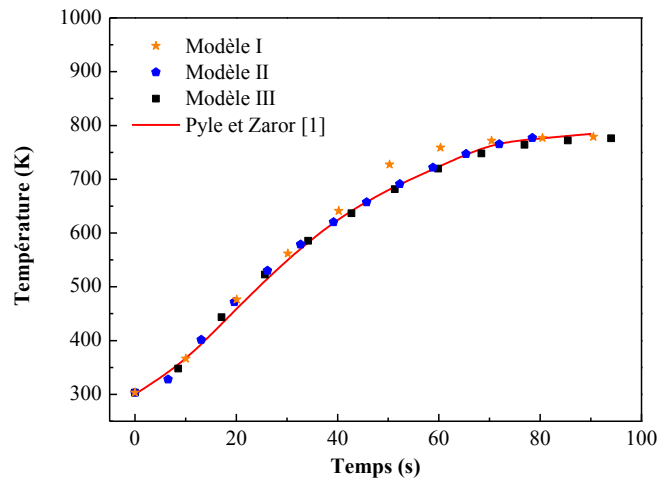


Fig. 5.41. Influence des modèles cinétiques sur la température
(R= 3 mm, T₀= 303 K, T_∞= 780 K)

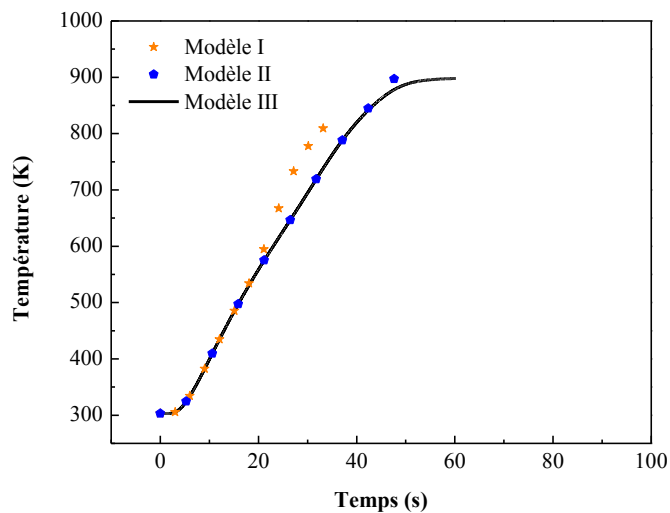


Fig. 5.42. Influence des modèles cinétiques sur la température
(R= 3 mm, T₀= 303 K, T_∞= 900 K)

Des résultats des quatre figures ci-dessus, on constate que les modèles cinétiques influent sensiblement sur la dégradation exprimée en termes de l'évolution de la température. Le modèle I est valable pour des températures inférieures à 643 K. Le modèle II peut aller jusqu'à 850 K et pour les températures supérieures à 900 K, le troisième modèle est nécessaire pour simuler le comportement des réactions secondaires.

Les figures 5.43, 5.44 et 5.45 illustrent l'évolution de la température en fonction de la distance radiale pour une particule cylindrique et pour les différents modèles. Le comportement de la

dégradation est similaire à celui présenté dans les figures précédentes. Les trois modèles donnent de bons résultats pour des températures inférieures à 643 K. La figure 5.43 et 5.45 sont tracées pour la même dimension et la même température infinies. Les modèles cinétiques ne sont pas influencés par le temps de pyrolyse. Pour une température infinie de 753 K (figure 5.44), la courbe du modèle I est nettement décalée des autres courbes et elle s'est éloignée de la courbe de référence.

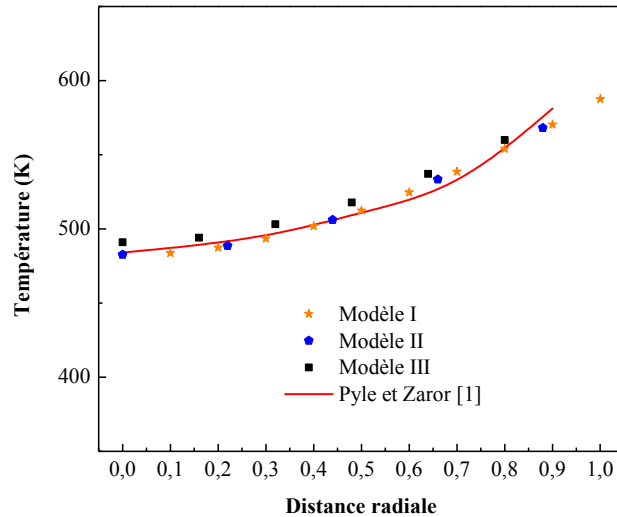


Fig. 5.43. Influence des modèles cinétiques sur le profil de température en fonction de la distance radiale ($R= 11$ mm, $T_0= 303$ K, $T_\infty= 643$ K, temps= 4 minutes)

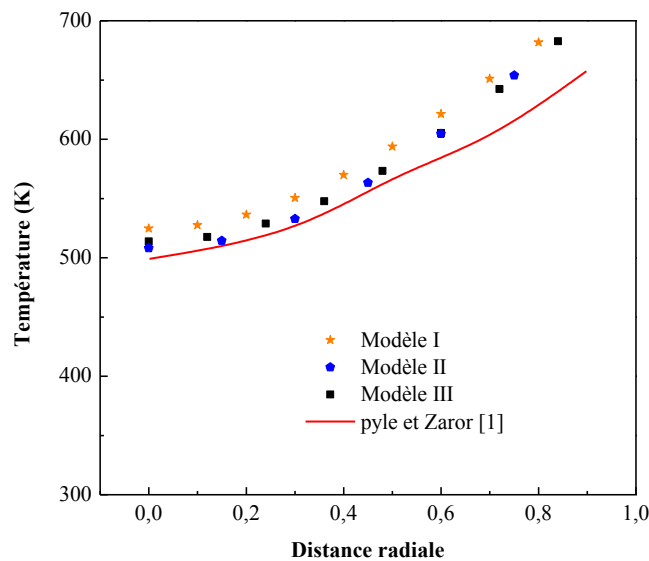


Fig. 5.44. Influence des modèles cinétiques sur le profil de température en fonction de la distance radiale ($R= 11$ mm, $T_0= 303$ K, $T_\infty= 753$ K, temps= 3 minutes)

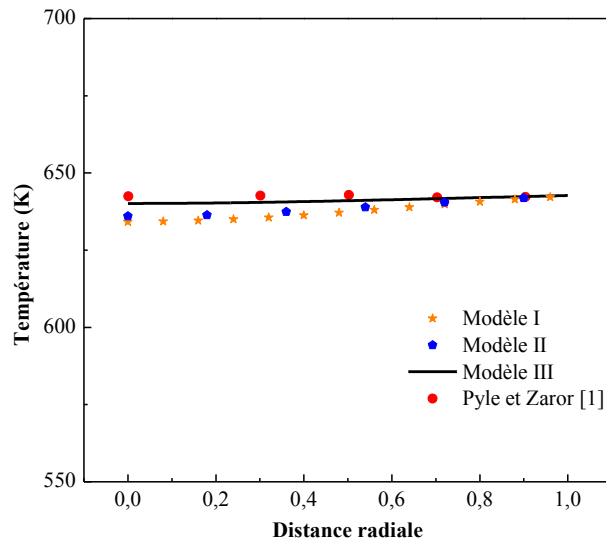


Fig. 5.45. Influence des modèles cinétiques sur le profil de température en fonction de la distance radiale ($R= 11$ mm, $T_0= 303$ K, $T_\infty= 643$ K, temps= 11 minutes)

Les figures 5.46 et 5.47 représentent l'évolution de la conversion de la biomasse en fonction du temps pour une particule cylindrique en utilisant les trois modèles (I, II et III). Pour la figure 5.46, les deux courbes obtenues avec les modèles I et III sont décalées, mais ils convergent vers la même valeur, c'est-à-dire que les espèces produites sont différentes en proportion mais leurs sommes sont les mêmes. Quant à la courbe du modèle II, elle a le même comportement que celle du modèle III jusqu'à 85% du taux de conversion où la courbe décroît, cette allure est expliquée par le fait que les réactions secondaires commencent à apparaître et une fraction des espèces primaires va être consommée pour donner des espèces secondaires.

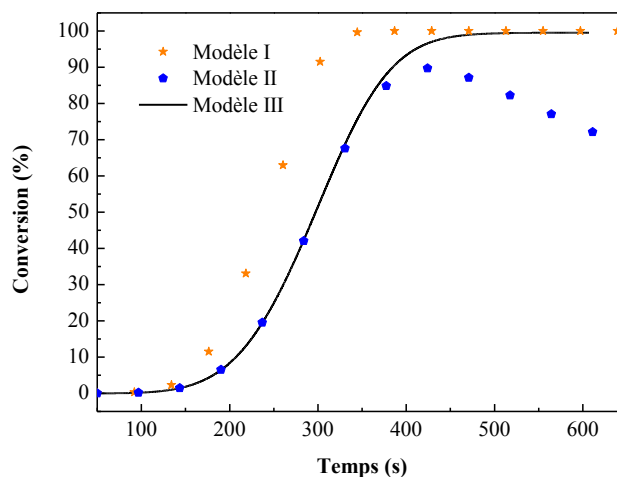


Fig.5.46. Influence des modèles cinétiques sur le profil de conversion de la biomasse ($R= 0.915$ mm, $T_0= 303$ K, $T_\infty= 679$ K).

La figure 5.47 illustre la variation des produits de pyrolyse en fonction du temps pour une particule cylindrique de diamètre 20 mm et pour une température finale égale à 900 K. Les résultats issus du modèle I sont moins précis et la convergence n'y est pas, ceux du modèle II sont croissants. Pour les deux espèces (charbon et gaz), les courbes ont le même comportement, ils atteignent un maximum à 540 s puis ils commencent à prendre une allure décroissante mais avec un comportement différent et cela est due au fait de l'existence des réactions secondaires. Quant au modèle III, l'évolution est plus complète et logique. L'espèce gazeuse est le produit majoritaire, ce qui est évident vue la température élevée qui favorise la production des espèces gazeuses. Pour un temps de pyrolyse égal à 600 s, la conversion pour le modèle III est bien complète et toute la biomasse vierge est convertit en produits de pyrolyse.

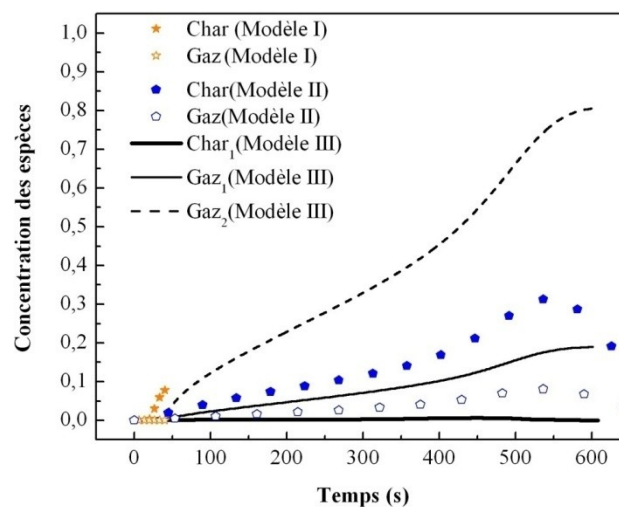


Fig. 5.47. Influence des modèles cinétiques sur les concentrations des espèces produites ($R=20$ mm, $T_0=303$ K, $T_\infty=900$ K).

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons validé notre code de calcul en lui adaptant des systèmes considérés dans la littérature de : *Jalan et Srivastava* [21], *Bamford* [8], *Babu et Chaurasia* [2] et l'étude expérimentale de *Pyle et Zaror* [1]. Pour la comparaison des résultats, nous avons choisi la variation de la température au centre de la particule en fonction du temps et la variation de la température locale en fonction de la distance radiale. La validation est faite qualitativement et quantitativement. Elle a illustrée une concordance très acceptable quantitativement. L'erreur relative moyenne est de l'ordre de 2 %. Nous avons aussi exploité notre code de calcul pour tracer les évolutions de la température en fonction du temps, du temps de pyrolyse en fonction de la température finale et de la conversion de la biomasse. Le point de transition entre les régimes thermiquement épais et thermiquement mince a été identifié. La teneur en eau dans la biomasse a une influence sur le temps de pyrolyse ainsi que le rendement de conversion. Les modèles cinétiques ont aussi une influence sur la conversion.

Conclusion générale

Ce travail a été consacré à l'étude de l'influence simultanée de la teneur en humidité et du rétrécissement sur le phénomène de pyrolyse d'une particule solide de biomasse ainsi que l'influence des autres paramètres physico-chimiques et des différents modèles cinétiques sur le processus de dégradation. Le système d'équations décrivant le processus de dégradation a été discrétisé par les différences finies et résolu par la méthode de Rung-Kutta d'ordre 4 pour les équations de la cinétique chimique et par le schéma de résolution totalement implicite pour l'équation de transfert de chaleur.

L'étude introductive et descriptive du phénomène de pyrolyse de la biomasse évoquée dans le premier chapitre nous a permis d'apprécier l'utilité de cette biomasse qui est considéré comme énergie renouvelable vu son émission très limitée du dioxyde de carbone dans l'atmosphère.

Nous avons validé notre code de calcul en lui adaptant des systèmes numérique et expérimentaux considérés dans la littérature. Pour la comparaison des résultats, nous avons choisi la variation de la température au centre de la particule en fonction du temps et la variation de la température locale en fonction de la distance radiale. La validation est faite qualitativement et quantitativement. Elle a illustrée une concordance très acceptable quantitativement. L'erreur relative moyenne est de l'ordre de 2 %.

Après la validation du code de calcul, une étude détaillée de l'effet de différents paramètres sur le processus de dégradation a été réalisée et a menée aux conclusions suivantes:

- La conversion de la biomasse ne commence qu'après un certain temps (t) qui varie selon les conditions initiales. Durant ce laps de temps, on a la présence de la phase de préchauffage ainsi que le début de séchage de la particule solide de biomasse.
- La conversion de la biomasse pour des particules de petites dimensions (de l'ordre de 0.01mm) et qui est soumise à des températures élevées, produit essentiellement des gaz et des volatils.
- Le point de transition entre les deux régimes, thermiquement épais et mince, pour des températures initiale et infinie égales respectivement à 303K et 900K, se fait pour un rayon d'une particule cylindrique de l'ordre de 0.4mm. L'introduction du critère de Biot dans le programme de calcul a bien confirmé le point de transition qui se produit bien au nombre de Biot égal à 0,1.

- La variation du nombre de Biot influe sur le temps de pyrolyse ainsi que le rendement de conversion, plus le nombre de Biot augmente plus le temps de pyrolyse diminue et plus la conversion de la biomasse s'accélère, cela est due au fait que le transfert de chaleur favorise la dégradation thermique.
- La température infinie à laquelle est soumise la particule de biomasse influe sur la dégradation thermique. Plus la température infinie augmente, plus le temps de pyrolyse diminue et plus la production des gaz sont favorisée.
- Pour les cas de simulation dont le régime est thermiquement mince, le temps de pyrolyse est très court, ce qui implique que le temps de résidence du charbon et des gaz et volatils primaires est très faible, résultant d'une faible concentration des produits issus des réactions secondaires.
- La dégradation thermique d'une particule de biomasse humide consomme beaucoup d'énergie par rapport à une particule sèche, cela est dû à la phase de séchage qui nécessite un flux de chaleur incident suffisant pour extraire toute la quantité d'eau contenue dans la particule de biomasse.
- Pour un flux de chaleur incident fixe, le temps de pyrolyse augmente avec l'augmentation de la teneur en humidité et il est plus significatif pour des particules de biomasse de tailles plus élevées.
- Le phénomène de dégradation thermique par pyrolyse pour une particule de biomasse humide commence toujours par une phase de séchage de la quantité d'eau contenue dans la biomasse, ensuite une phase dans laquelle nous avons la coexistence des deux phénomènes de séchage et de pyrolyse qui est appelée phase de chevauchement et en fin la phase de pyrolyse qui se poursuit jusqu'à la fin du processus de dégradation.
- L'augmentation de la teneur en humidité dans la biomasse engendre une augmentation de la phase de chevauchement et retarde le phénomène de pyrolyse.
- La géométrie de la particule a aussi un effet sur la pyrolyse. Le temps de pyrolyse le plus grand est obtenu par la géométrie plane, alors que le temps le plus court est pour une géométrie sphère.
- L'aire de chevauchement entre la phase de séchage et la phase de pyrolyse diminue avec l'augmentation de la taille de la particule.
- Les modèles cinétiques ont une influence sur les résultats de la dégradation. Le modèle I est valable pour des températures inférieures à 643K. Pour des températures supérieures, le modèle I ne donne pas de résultats précis. Le modèle II peut aller

jusqu'à 850 K et pour des températures supérieures à 900 K, un modèle de troisième groupe est nécessaire pour simuler le comportement des réactions secondaires.

En perspective, nous proposons d'appliquer ces résultats de simulation dans des réacteurs expérimentaux afin de voir les différentes étapes de ce phénomène et de valider encore une fois cette étude numérique par une étude expérimentale.

Faire l'extension de l'étude numérique vers le bidimensionnel voire tridimensionnel est jugé intéressant afin de voir l'influence de la deuxième et la troisième coordonnée de l'espace sur le processus de pyrolyse.

ANNEXE

Les modèles cinétiques

1. Modèle I

Le modèle global à une seule étape est basé sur une réaction globale et simple à une seule étape pour décrire la dégradation. Ce processus est proportionnel au taux de la masse résiduelle ou bien à celui de la masse convertie.



k est la constante de réaction qui est régit par une loi D'Arrhenius de premier ordre évoluant en fonction de la température et qui s'écrit sous la forme suivante : $k = A \text{EXP}(-E/RT)$

où : A et E sont des constantes qui peuvent prendre différentes valeurs vue la complexité du processus de dégradation thermique et la variété des espèces de biomasse. Pour notre cas nous avons pris les constantes pour l'espèce de bois : $E=125,4 \text{ kJ.mol}^{-1}$, $A=10^8 \text{ s}^{-1}$, ils sont valable pour une gamme de température de pyrolyse allant de 321 jusqu'à 720 K [41].

1.1. Le schéma cinétique

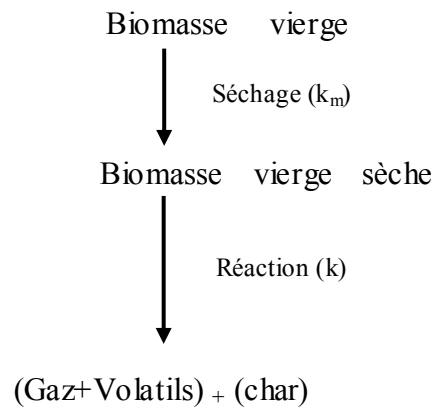


Fig.1: Schéma cinétique pour le modèle I.

Dans le schéma ci-dessus, la particule de la biomasse est soumise à un flux de chaleur externe. Après avoir évaporé la teneur en eau contenue dans la particule, une réaction à une seule étape simple produit les espèces (Gaz+Volatils) et l'espèce charbon (Char) à travers la constante de réaction k .

1.2. Les équations mathématiques régissant le processus de dégradation thermique

Les équations de conservation généralisées pour la teneur en eau dans la biomasse, les espèces gazeuses et solides issues de la réaction (Gaz et Volatils) et (Charbon) s'écrivent :

- L'équation de séchage :

$$\frac{\partial(V\rho_B)}{\partial t} = -(k_m)V\rho_B \quad (2)$$

- L'équation de conservation de la masse pour la biomasse sèche :

$$\frac{\partial(V\rho_B)}{\partial t} = -(k_1)V\rho_B \quad (3)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils) :

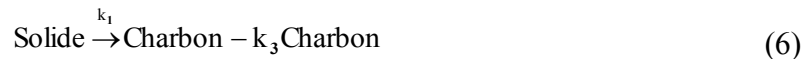
$$\frac{\partial(V_g\rho_G)}{\partial t} = k_1V_g\rho_B \quad (4)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char) :

$$\frac{\partial(V_s\rho_C)}{\partial t} = k_1V_s\rho_B \quad (5)$$

2. Modèle II

Le modèle à une seule étape, multi-réactions, est utilisé pour exprimer la distribution des produits de réaction. Ce modèle décrit la dégradation des solides en donnant du charbon et des espèces gazeuses. Il est systématiquement relié à l'effet de la température sur la dégradation thermique. Pour des températures élevées, la production des condensats augmente puis diminue. Cette diminution est due aux réactions secondaires qui convertissent les condensats en des volatils léger par craquage. Les gaz augmentent aussi pour les températures élevées ce qui est une conséquence des réactions secondaires.



Avec : k_1 et k_2 sont les constantes de réaction. k_3 est la constante des réactions secondaires de craquage des volatils ou bien de polymérisation du charbon dont le facteur pré-exponentiel et l'énergie d'activation s'écrivent comme suit : $A = 5.52 \times 10^{11} (\text{s}^{-1})$, $E = 189.7 \text{ KJ.mole}^{-1} . \text{K}^{-1}$ [30].

2.1. Schéma cinétique

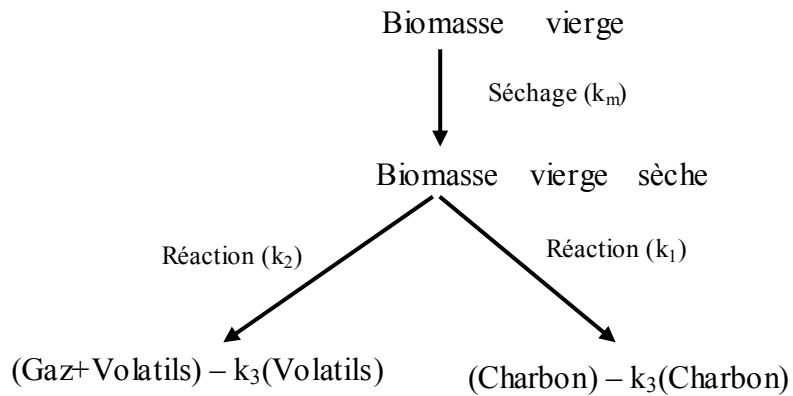


Fig.2 : Schéma cinétique pour le modèle II.

La figure 2 présente un schéma cinétique pour le modèle du deuxième groupe dans lequel nous avons deux réactions parallèles, l'une pour produire du charbon et l'autre pour les gaz et volatils.

2.2. Les équations mathématiques régissant le processus de dégradation thermique

Les équations de conservation des espèces gazeuses et solides (Gaz et Volatils) et (Charbon) sont présentées ci-dessous, tout en incluant la perte de masse aux réactions secondaires du craquage des espèces volatils vers des gaz légers ou la polymérisation du charbon vers des gaz.

- L'équation de séchage :

$$\frac{\partial(V\rho_B)}{\partial t} = -(k_m)V\rho_B \quad (8)$$

- L'équation de conservation de la masse pour la biomasse sèche :

$$\frac{\partial(V\rho_B)}{\partial t} = -(k_1 + k_2)V\rho_B \quad (9)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils) :

$$\frac{\partial(V_g\rho_G)}{\partial t} = k_1V_g\rho_B - k_3V_g\rho_G \quad (10)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char) :

$$\frac{\partial(V_s\rho_C)}{\partial t} = k_2V_s\rho_B - k_3V_g\rho_G \quad (11)$$

3. Modèle III

Comme il a été déjà présenté dans le chapitre « modélisation mathématique », le modèle dit semi global à deux étapes comporte deux réactions primaires parallèles (réaction 1 et réaction 2) qui produisent les espèces (Gaz+Volatils)₁ et l'espèce charbon (Char)₁. Les espèces issues des deux réactions primaires (Gaz+Volatils)₁ et (char)₁ réagissent entre eux dans une réaction secondaire (réaction 3) pour donner les produits (Gaz+Volatils)₂ et (char)₂.



Avec : k_1 et k_2 sont les constantes de réactions des espèces primaires et k_3 est la constante de réaction pour les espèces secondaires.

3.1. Schéma cinétique

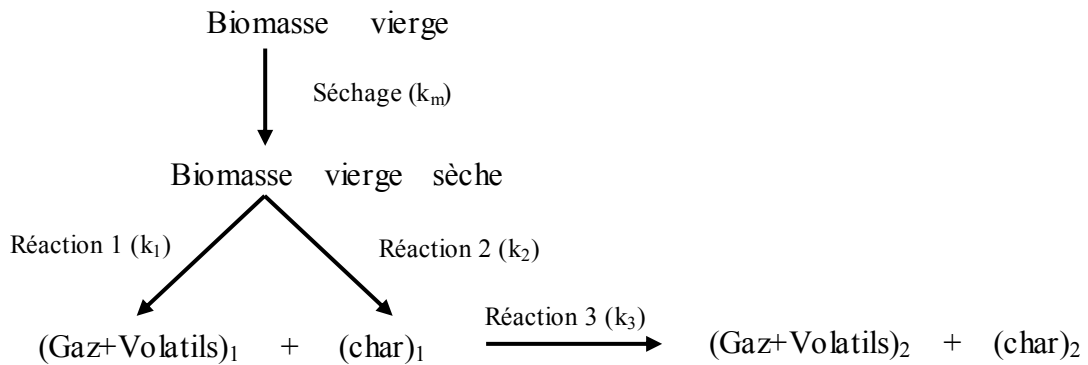


Fig.3 : Schéma cinétique pour le modèle III.

Le modèle cinétique présenté dans la figure 3 est un modèle semi-global à deux étapes incluant deux réactions primaires et une réaction secondaire.

3.2. Les équations mathématiques

Les équations de conservation généralisées pour la teneur en eau dans la biomasse, les espèces gazeuses et solides issues des réactions primaires 1 et 2 (Gaz et Volatils)₁ et

(Charbon)₁ et celles issues de la réaction secondaire 3 (Gaz et Volatils)₂ et (Charbon)₂ s'écrivent :

- L'équation de séchage :

$$\frac{\partial(V\rho_{Bm})}{\partial t} = -(k_m)V\rho_{Bm} \quad (15)$$

- L'équation de conservation de la masse pour la biomasse sèche :

$$\frac{\partial(V\rho_B)}{\partial t} = -(k_1 + k_2)V\rho_B \quad (16)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils)₁ :

$$\frac{\partial(V_g\rho_{G_1})}{\partial t} = k_1V\rho_B - k_3\rho_{G_1}V_g \quad (17)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char)₁ :

$$\frac{\partial(V_g\rho_{C_1})}{\partial t} = k_2V\rho_B - k_3\rho_{C_1}V \quad (18)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (gaz+volatils)₂ :

$$\frac{\partial(V_g\rho_{G_2})}{\partial t} = k_3(\rho_{G_1}V_g + \rho_{C_1}V) \quad (19)$$

- L'équation de conservation de la masse pour le (char)₂ :

$$\frac{\partial(V\rho_{C_2})}{\partial t} = k_3(\rho_{G_1}V_g + \rho_{C_1}V) \quad (20)$$

Références bibliographiques

- [1] D.L.Pyle, C.A.Zaror, Heat transfer and kinetics in the low-temperature pyrolysis of solids. *Chemical Engineering Science*. Vol: 39. pp: 147–158 (1984).
- [2] B. V. Babu, A.S. Chaurasia, Dominant design variables in pyrolysis of biomass particles of different geometries in thermally thick regime, *Chemical Engineering Science*, Vol: 59, pp: 611 – 622 (2004).
- [3] G. Bidini, U. Desiderie, F. Fantozzig, Produire une énergie électrique décentralisée par pyrolyse de la biomasse. Article, *Bois Energie*. N° 1, 39-41, Département d'Ingénierie Industrielle, Université de Pérouse (Italie), (2003).
- [4] G. Antonini, M. Hazi, Pyrolyse - Gazéification de déchets solides, *Etude Ademe / Procedis*, pp : 7-31, (2004).
- [5] G. Mauveil, Densification énergétique de la biomasse. Article, *Assemblée Scientifique de la fédération de recherche Jacques Villermaux*, (2006).
- [6] H.Jeanmart, P.Tchouate, Conversion de la biomasse, filières thermochimiques, *Etude, BEPITA, Université Catholique de Louvain, Belgique*, (2006).
- [7] Stefanie Kohler, Valorisation thermochimique de la biomasse, Article, *Laboratoire des Sciences du Génie Chimique*, (2005).
- [8] C.H.Bamford, J.Crank, D.H.Malan, The combustion of wood. Article, Part I. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Vol: 42, pp: 166–182 (1946).
- [9] A.F.Roberts, G.Clough, Thermal degradation of wood in an inert atmosphere. Article, *Proceedings of the ninth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh*, pp: 158–167 (1963).
- [10] W.K.Tang, W.K.Neil, Effect of Flame-retardants on pyrolysis and combustion of cellulose. *Journal of Polymer Science*. Vol: 6, pp: 65–81 (1964).

- [11] E.R. Tinney, The combustion of wood dowels in heated air. In: Proceedings of the 10th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, pp: 925–930 (1965).
- [12] H.C.KUNG, A Mathematical Model of Wood Pyrolysis, Combustion And Flame, Vol: 18, pp:185-195 (1972).
- [13] L.T. Fan, L.S. Fan, K.Miyanami, T.Y.Chen, W.P.Walawender, A mathematical model for pyrolysis of a solid particle -effects of the Lewis number. The Canadian Journal of Chemical Engineering. Vol: 55, pp : 47–53 (1977).
- [14] E.J.Kansa, H.E.Perlee, R.F.Chaiken, Mathematical model of wood pyrolysis including internal forced convection. Combustion and Flame. Vol: 29, pp: 311–324 (1977).
- [15] C.Vovelle, R.Akrich, J.I.Delfau, Mass loss rate measurements on solid materials under radiative heating, Combustion Science Technology, Vol: 36, pp: 1-18 (1984).
- [16] C.A.Koufopoulos, N.Papayannakos, G.Maschio, A.Lucchesi, Modelling of the pyrolysis of biomass particles. Studies on kinetics, thermal and heat transfer effects. The Canadian Journal of Chemical Engineering. Vol: 69, pp: 907–915 (1991).
- [17] V.Novozhilov, B. Moghtadri, D.F.Fletcher, J.H.Kent, Computational fluid dynamics modeling of wood combustion, Fire Safety Journal, Vol: 27, pp: 69-84, (1996).
- [18] Zhenghua Yan, G.Göran Holmstedt, CFD and Experimental Studies of Room Fire Growth on Wall Lining Materials, Fire Safety Journal, Vol: 27, pp: 201-238 (1996).
- [19] J. E. J. Staggs, A Discussion of Modelling Idealised Ablative Materials with Particular Reference to Fire Testing, Fire Safety Journal, Vol: 28, pp: 47-66 (1997).
- [20] C.Di Blasi, Influences of physical properties on biomass devolatilization characteristics. Fuel. Vol: 76. pp: 957–964 (1997).

- [21] R. K. Jalan, V. K. Srivastava, Studies on pyrolysis of a single biomass cylindrical pellet— kinetic and heat transfer effects, *Energy Conversion and Management*, Vol: 40, Issue 5, pp: 467-494, (1999).
- [22] J.E.J. Staggs, A simple model of polymer pyrolysis including transport of volatiles, *Fire Safety Journal*, Vol: 34, pp: 69-80 (2000).
- [23] M. J. SPEARPOINT, J. G. QUINTIERE, Predicting the Burning of Wood Using an Integral Model, *COMBUSTION AND FLAME*, Vol: 123, pp: 308–324 (2000).
- [24] E. Theuns, B. Merci, J. Vierendeels et P. Vandevelde, Extension and evaluation of the integral model for transient pyrolysis of charring materials, *FIRE AND MATERIALS, Fire Mater*, Vol: 29, pp:195–212 (2005).
- [25] E. Theuns, J. Vierendeels, P. Vandevelde, A moving grid model for the pyrolysis of charring, *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, Vol 12, pp: 541–559 (2002).
- [26] A.F. Roberts, A review of kinetics data for the pyrolysis of wood and related substances. *Combustion Flame*. Vol: 14. pp: 261 (1970).
- [27] F.J. Kislser, A. Broido, Char yield on pyrolysis of cellulose. *Pyrodynamics*. Vol: 2. pp:151 (1965).
- [28] D.F. Arseneau, J. Can, Competitive Reactions in the Thermal Decomposition of Cellulose. *Chem*. Vol: 49. pp: 632 (1971).
- [29] F. Shafizadeh, P.P.S. Chin, Thermal deterioration of wood, *ACS. Symposium. Ser.* Vol: 43. pp: 57 (1977).
- [30] Colomba Di Blazi, Modeling and simulation of combustion processes of charring and non-charring solid fuels, *Energy Combustion Science*, Vol: 19, pp: 71-104 (1993).

- [31] D.S.Scott, J.Piskorz, M.A.Bergougnou, R.Graham, R.P.Overend, The role of temperature in the fast pyrolysis of cellulose and wood, *Industrial & engineering chemistry research*. Vol: 27. pp: 8 (1988).
- [32] R.K.Agrawal, J.Can, Kinetics of reactions involved in pyrolysis of cellulose, *Chemistry Engineer*. Vol: 66. pp: 413 (1988).
- [33] M.J. Antal, Biomass Pyrolysis: a Review of the Literature. Part I - Carbohydrate pyrolysis. In: K.W. Boer, J.A.Duffie, editors. *Advances in Solar Energy*, Vol: 1, Boulder (CO): American Solar Energy, pp: 61-111 (1982).
- [34] C.A. Koufopoulos, G. Maschio, A. Lucchesi, Kinetic modeling the pyrolysis of biomasse and biomasse components, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. Vol: 67, pp: 75-84 (1989).
- [35] J.P. Diebold. The Cracking Kinetics of Depolymerized Biomass Vapors in a Tubular Reactor. MSc Thesis, Dept. Chem. Petroleum-Refining Eng. Colorado School of Mines, Golden (1985).
- [36] C.A.Koufopoulos, N.Papayannakos, G.Maschio, A.Lucchesi. Modelling of the pyrolysis of Biomass Particles. Studies on Kinetics, Thermal and heat transfer effects. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. Vol: 69. pp: 907-915 (1991).
- [37] M.L.Boroson, J.B.Howard, J.P.Longwell, W.A.Peters . Product Yield and Kinetics from the vapour phase cracking of Wood Pyrolysis Tars. *AICHE Journal*. Vol: 35. pp: 120-128 (1989).
- [38] B.Benkoussas, J.L. Consalvi, B. Porterie, N. Sardoy, J.C. Loraud, Modelling thermal degradation of woody fuel particles, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol: 46, pp: 319-327 (2007).
- [39] G.Rambaut, S. Mauran, N.Mazet, Modélisation de transfert de vapeur d'eau à faible pression à travers un milieu poreux réactif, Eurotherm Seminar N° 81, Reactive heat transfer in porous media, Jiun 2007.

[40] V.B.Babu, A.S. Chaurasia, Heat transfer and kinetics in the pyrolysis of shrinking biomasse particles, Chemical Engineering Science, Vol: 59, PP: 1999-2012 (2004).

[41] P. F. Nolan, D. J. Brown, and E. Rothwell, Vapor-phase thermal analysis of pyrolysis products from cellulosic materials. Fourteenth Symposium (International) on Combustion, P. 1143, The Combustion Institute, Pittsburgh (1973).

[42] STEPHEN M. OLENICK et DOUGLAS J. CARPENTER, An Updated International Survey of Computer Models for Fire and Smoke, Combustion Science & Engineering, Vol: 13, (2003).

[43] M. Tata, B. Benkousas, Contribution à l'Etude de la Dégradation Thermique de la Biomasse : Source Energétique Renouvelable, Congrès Algérien de Mécanique (2011).