



HAL
open science

Simulation numérique de la combustion du bois dans une chaudière automatique de 400 kW

Tudor Florea

► **To cite this version:**

Tudor Florea. Simulation numérique de la combustion du bois dans une chaudière automatique de 400 kW. Sciences de l'ingénieur [physics]. Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambrésis, 2010. Français. NNT : 2010VALE0030 . tel-03009675

HAL Id: tel-03009675

<https://uphf.hal.science/tel-03009675v1>

Submitted on 17 Nov 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE VALENCIENNES ET DU HAINAUT CAMBRÉSIS

*Laboratoire d'accueil : Département Énergétique Industrielle
de l'École des Mines de Douai*

THÈSE DE DOCTORAT

Présentée pour l'obtention du grade de DOCTEUR

Spécialité : Génie Mécanique et Énergétique

Par

Tudor FLOREA

Sujet :

SIMULATION NUMERIQUE DE LA COMBUSTION DU BOIS DANS UNE CHAUDIERE AUTOMATIQUE DE 400 kW

Directeur de thèse : Professeur Bernard BAUDOIN

Soutenue publiquement le 29 septembre 2010 devant la commission d'examen :

Rapporteurs

Yann ROGAUME

Professeur, ENSTIB/LERMAB Épinal

Gilles CABOT

HdR, Université de Rouen

Examineurs

Jean-Michel MOST

Professeur, LCD-UPR CNRS 9028 Poitiers

Bernard BAUDOIN

Professeur, École des Mines de Douai

Sébastien CAILLAT

Enseignant-Chercheur, École des Mines de Douai

Benoît TAUPIN

Docteur, Veolia R&I

Marie-Sophie CABOT

Professeure Associée, Université de Rouen

Valérie LEROY-

Docteure, Université de Corse

CANCELLIERI

Invités

François NICOL

Directeur du Dépt. Énergétique et Procédés, Veolia

Karim MATI

R&I

Yann FLANDIN

Docteur, Veolia R&I

Pierre PLION

Spécialiste biomasse, Direction technique, Dalkia

David GAMBIER

Docteur, EDF R&D

Docteur, Maguin S.A.S

UNIVERSITÉ DE VALENCIENNES ET DU HAINAUT CAMBRÉSIS

*Laboratoire d'accueil : Département Énergétique Industrielle
de l'École des Mines de Douai*

THÈSE DE DOCTORAT

Présentée pour l'obtention du grade de DOCTEUR

Spécialité : **Génie Mécanique et Énergétique**

par

Tudor FLOREA

Sujet :

SIMULATION NUMÉRIQUE DE LA COMBUSTION DU BOIS DANS UNE CHAUDIÈRE AUTOMATIQUE DE 400 kW

Directeur de thèse : Professeur Bernard BAUDOIN

Soutenue publiquement le 29 septembre 2010 devant la commission d'examen :

Rapporteurs

Yann ROGAUME
Gilles CABOT

Professeur, ENSTIB/LERMAB Épinal
HdR, Université de Rouen

Examineurs

Jean-Michel MOST
Bernard BAUDOIN
Sébastien CAILLAT
Benoît TAUPIN
Marie-Sophie CABOT
Valérie LEROY-CANCELLIERI

Professeur, LCD-UPR CNRS 9028 Poitiers
Professeur, École des Mines de Douai
Enseignant-Chercheur, École des Mines de Douai
Docteur, Veolia R&I
Professeure Associée, Université de Rouen
Docteure, Université de Corse

Invités

François NICOL
Karim MATI
Yann FLANDIN
Pierre PLION
David GAMBIER

Directeur du Dépt. Énergétique et Procédés, Veolia R&I
Docteur, Veolia R&I
Spécialiste biomasse, Direction technique, Dalkia
Docteur, EDF R&D
Docteur, Maguin S.A.S

Părinților, surorii și fraților mei

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du département Énergétique Industrielle de l'École des Mines de Douai sous la direction de M. Bernard BAUDOIN auquel j'exprime ma gratitude pour m'avoir accueilli dans son équipe et de m'avoir aidé, notamment dans les moments les plus difficiles.

Je tiens à remercier tout particulièrement MM. Sébastien CAILLAT et Benoît TAUPIN, mes encadrants à l'École des Mines de Douai et au Centre de Recherche de Limay du groupe VEOLIA. Leurs conseils, leurs remarques et leurs corrections m'ont beaucoup aidé. J'ai considérablement appris à leurs côtés !

Je me dois de manifester ma reconnaissance à MM. Gilles CABOT et Yann ROGAUME pour avoir accepté la tâche de rapporteurs. La validation scientifique qu'ils ont conférée à mon travail est d'une valeur inestimable.

Je remercie également Mmes Valérie LEROY-CANCELLIERI, Marie-Sophie CABOT et MM. Jean-Michel MOST, Yann FLANDIN, Pierre PLION et David GAMBIER, honorables membres du jury, pour avoir pris le temps de lire ce travail et de faire partager leurs avis.

Je tiens à remercier, à nouveau, M. Yann ROGAUME pour sa disponibilité, sa gentillesse et son intérêt pour mon cheminement depuis le début. Ses remarques et conseils m'ont permis, entre autres, de mieux comprendre la formation des matières volatiles.

Monsieur Karim MATI a su se montrer accessible et surtout a apporté son aide très précieuse au développement du mécanisme cinétique de la combustion des matières volatiles ; qu'il en soit ici remercié.

Je tiens à remercier M. Jean-Philippe VERMEULEN, Enseignant-Chercheur à l'École des Mines de Douai, pour sa prévenance, sa disponibilité et pour avoir largement partagé ses connaissances, en particulier dans le domaine des méthodes numériques.

Je remercie également M. François NICOL, responsable du département Énergétique et Procédés du Centre de Recherche de Limay du groupe VEOLIA, pour la confiance qu'il m'a accordée durant la dernière étape de ce travail. Ses encouragements et son optimisme communicatif m'ont permis de finir mon travail de thèse et de prendre en main le poste de chercheur avec beaucoup de détermination.

J'exprime ma reconnaissance à Mme Elisabeth KERVELLA et MM. Romain LEVEL, Lyazid OUAZZAR et Didier SOCHON pour leur aide, leur implication et leur bonne humeur au cours des essais expérimentaux.

Il y a deux personnes au sein du département Énergétique Industrielle de l'École des Mines de Douai que je tiens à remercier tout particulièrement pour leur amabilité et leur

disponibilité : Marie-Françoise FACON, qui a corrigé l'orthographe de tous mes documents réalisés durant cette période, et Nadine LEVEQUE, qui m'a beaucoup aidé dans les démarches administratives. Je n'oublierai jamais leur sympathie et leur jovialité!

Je remercie tous les membres du département Énergétique Industrielle de l'École des Mines de Douai. L'ambiance agréable de travail et les discussions riches en enseignements m'ont permis de travailler avec le cœur plus léger.

Je rends hommage, de tout cœur, à mes collègues, stagiaires, doctorants ou permanents, de l'équipe combustion du département Énergétique Industrielle de l'École des Mines de Douai : Sébastien CAILLAT, Pablo LORENZANA MEIRE, Thomas LE BRIS, Lat Grand NDIAYE, Kristyna STIOVOVA, Nelson ALFONZO, Peter MOLČAN et Florent LE GLÉAU.

Je tiens à remercier pour leur amitié et leur effort Joëlle ROUKOS, Sandip PAUL et Hyacinthe SAWADOGO, mes collègues au sein du bureau de l'Association des Doctorants de Mines de Douai (ADMID). Je remercie également Nicolas CHASTAN, Samir TABLOUL, Mohamed SAGHIR BA, Christophe BRESCIANI, François TOUCHALEAUME, Sira UHALTE NOGES, Rindra RAMY-RATIARSON, Guillaume GRONDIN, Gautier BASTIDE, Sylvain CHARDIGNY, Vincent DUBROMEZ, Isabelle BISOTTO, Rabie NACEREDDINE, Ouafa BOULOUMOU, Fanfei ZENG, ainsi que tous les autres doctorants et post-doctorants de l'École des Mines de Douai, pour leur soutien, leur confiance et leur amitié. Je ne pourrai jamais oublier les bons moments passés ensemble!

J'associe, bien sûr, à mes remerciements, M. Jean-Claude DURIEZ, Directeur de l'École des Mines de Douai, Mme Anne BEAUVAL, Directrice de la recherche de l'École des Mines de Douai, et son adjoint, M. Alain DE METS pour le soutien spécifique qu'ils ont accordé à l'ADMID.

Je remercie MM. Jean-Claude BARA, Directeur adjoint de l'École des Mines de Douai, et Emmanuel DEQUEKER, responsable des relations internationales de l'École des Mines de Douai pour leurs conseils, leur confiance et leur sympathie.

Je tiens à remercier M. Gheorghe ȘINDILARU, professeur au sein du département Génie Nucléaire de la Faculté ENERGETICA de l'Université POLITEHNICA de Bucarest, pour ses conseils et son amitié. Sans lui, mon aventure en France n'aurait pas été possible.

Je tiens à dédier quelques mots de reconnaissance à la mémoire de feu Mme Maria HONCIUC, professeure à l'Université POLITEHNICA de Bucarest. Elle a initié ma formation d'ingénieur-chercheur. Je n'oublierai jamais sa contribution!

Je remercie de tout mon cœur Cosmin COSTIN, Alexandru GONCIARIUC, Bogdan GRIGORE, Viorel MUNTEANU, Alin PETRESCU et Adrian-Eugen PIȚIGOI pour leur soutien et leur amitié. Un grand merci à vous!

Je tiens à adresser mes remerciements et à exprimer mes sentiments les meilleurs à la famille CROSETTI.

Il n'y a pas assez des mots pour exprimer ma gratitude et mon attachement éternels à Sébastien CAILLAT, à Claire, son épouse, et Sarah, leur fille; à Paulette et Georges ROSEVEGUE; à Benoît TAUPIN et sa famille. Votre présence a profondément changé ma vie!

Enfin, je remercie ma famille pour le soutien et l'amour qu'elle me porte.

Table des matières

Remerciements	i
Table des matières	iii
Liste des figures	v
Liste des tableaux	vii
Notations	ix
Introduction	1
1 Technologies de combustion des solides	3
1.1 Chaudières automatiques	3
1.1.1 Foyers à grilles fixes	4
1.1.2 Foyers à grilles mobiles	5
1.1.3 Foyers volcan	7
1.1.4 Foyers à lit fluidisé	9
1.1.5 Installations à combustible pulvérisé	10
1.2 Régulation des chaudières automatiques	10
2 Combustion des solides	13
2.1 Propriétés des combustibles solides	14
2.2 Combustion homogène	18
2.3 Combustion hétérogène	20
3 Modélisation numérique de la combustion des solides	23
3.1 Généralités	24
3.1.1 Conversion thermique d'une particule	24
Séchage	24
Dévolatilisation	25
Combustion hétérogène	28
3.1.2 Conversion thermique d'un lit de particules	31
3.1.3 Phase gazeuse	33
3.2 Modélisation de la combustion en phase gazeuse	37
3.2.1 Modèle « κ - ϵ Realizable »	40
3.2.2 Modèle de « Eddy Dissipation Concept »	42
Mécanismes cinétiques	44
3.2.3 Modèle de rayonnement : P-1	45
3.2.4 Conclusions	46
3.3 Modélisation de la combustion d'un lit de particules	46
3.4 Conclusions	57

4 Techniques expérimentales	59
4.1 Description de l'installation expérimentale	59
4.2 Mesures globales	60
4.3 Mesures locales	63
4.3.1 Mesure de température	63
4.3.2 Mesure de vitesse par Anémométrie Doppler Laser appliquée à la chau- dière à bois	64
Ensemencement	66
Sources d'erreur de mesure	68
Accès optiques	69
Référentiel	70
4.3.3 Analyse des gaz	71
4.4 Conditions d'essais	74
5 Résultats	77
5.1 Étude expérimentale	77
5.1.1 Mesures globales	77
5.1.2 Températures locales	81
5.1.3 Vitesses locales	85
5.1.4 Concentrations locales des gaz	91
5.1.5 Conclusion	97
5.2 Étude numérique	98
5.2.1 Combustion homogène	98
Effet de la distribution d'air secondaire	100
Effet du mécanisme cinétique de combustion	102
Analyse de l'écoulement	104
5.2.2 Calcul 2D du transfert thermique au sein du lit combustible	111
Conclusions et perspectives	113
Annexes	119
A Propriétés thermophysiques des gaz	119
B Mécanismes cinétiques	125
Bibliographie	129

Liste des figures

1	Schéma de principe d'un foyer à grilles fixes	5
2	Schéma de principe de foyers à grilles mobiles	6
3	Schéma d'un foyer à grilles de type spreader stocker	7
4	Schéma de principe d'un foyer volcan	8
5	Schéma d'une installation volcan à grille rotative	8
6	Schéma de principe de foyers à lit fluidisé	9
7	Schéma de principe d'un brûleur à swirl	10
8	Exemple de logique de régulation	11
9	Section représentative d'une particule de bois en combustion	13
10	Régimes de conversion d'une particule de résidu carboné	20
11	Régimes de conversion dans un lit fixe	22
12	Modèle de pyrolyse à une étape	26
13	Modèle de pyrolyse avec des réactions en compétition	26
14	Modèles de pyrolyse avec des réactions secondaires	27
15	Couplage CFD - Codes 1D/2D	36
16	Disposition des différentes zones de conversion thermique au sein d'un lit de particules	46
17	Géométrie considérée pour le modèle de lit	50
18	Diagramme de calcul	58
19	Installation d'essai (CReeD)	59
20	Intérieur du foyer et conduites d'arrivée d'air	60
21	Placement des fils chauds	61
22	Modifications de l'installation d'essai	62
23	Montage des thermocouples	63
24	Schéma de principe de la technique ADL	64
25	Montage expérimental pour la mesure de vitesse	65
26	Illustration des voies de formation des cendres dans un foyer à grille	66
27	Exemple d'agrégat de suie observé à l'aide d'un microscope (TEM)	67
28	Distribution du diamètre aérodynamique des particules	68
29	Vitesse de thermophorèse calculée pour différentes températures des produits de combustion en fonction du gradient de température	69
30	Détail d'un accès optique	70
31	Positionnement des accès	70
32	Référentiel des profils de mesure	71
33	Sonde de prélèvement de fumées refroidie	71
34	Montage expérimental pour l'analyse de gaz	72
35	Schéma du spectroscope d'absorption IRTF	72
36	Points de prélèvement pour l'analyse locale des gaz	74
37	Distribution d'air secondaire	75
38	Évolution des paramètres des fumées pour l'essai E1C1	78
39	Évolutions de la température du foyer et des concentrations des gaz	79
40	Évolution des températures de l'eau et du foyer	80

41	Régimes de fonctionnement (E2C3)	81
42	Profils de température E1C1	82
43	Profils de température E1C2	82
44	Profils de température E2C1	83
45	Profils de température E2C2	83
46	Profils de température E3C1	84
47	Exemple de signaux temporels pour le profil P5	85
48	Profil moyen de vitesse sur l'accès P1	87
49	Profil moyen de vitesse sur l'accès P2	87
50	Profil moyen de vitesse sur l'accès P3	88
51	Profil moyen de vitesse sur l'accès P4	88
52	Profil moyen de vitesse sur l'accès P5	89
53	Profil moyen de vitesse sur l'accès P5 distribution d'air symétrique	89
54	Profil moyen de vitesse sur l'accès P6	90
55	Profil moyen de vitesse sur l'accès P6 distribution d'air symétrique	90
56	Structures supposées de l'écoulement	91
57	Concentrations des gaz au point P1A	93
58	Concentrations des gaz au point P1C	94
59	Concentrations des gaz au point P1D	94
60	Concentrations des gaz au point P1E	95
61	Concentrations des gaz au point P2A	95
62	Concentrations des gaz au point P3B	96
63	Concentrations des gaz au point P3C	96
64	Domaine de calcul	99
65	Profils des fractions massiques et de la température à la surface du lit pour les calculs N1C1 et N1C12	100
66	Cartographies de températures calculées en fonction de l'alimentation en air secondaire	101
67	Profils de température selon la configuration d'air secondaire	101
68	Cartographies de températures calculées pour deux schémas réactionnels	103
69	Profils de température	103
70	Profils des vitesses moyennes calculés et mesurés	105
71	Cartographie des vitesses moyennes calculées et lignes de courant	105
72	Lignes de courant dans les plans P3 et P5	106
73	Fraction volumique de CO	107
74	Fraction volumique de CH ₄	108
75	Fraction volumique de CO ₂	109
76	Fraction volumique de O ₂	110
77	Géométrie considérée pour le calcul du transfert thermique au sein du lit	111
78	Cartographies de température au sein du lit	112

Liste des tableaux

1	Différents types d'installations de combustion automatiques	4
2	Analyses élémentaires de quelques essences d'arbres et de biomasses	15
3	Analyses immédiates de différents bois, biomasses et charbons	16
4	Paramètres de réaction pour le séchage	24
5	Paramètres de réaction pour la dévolatilisation du bois	28
6	Paramètres de réaction pour l'oxydation du résidu carboné	29
7	Expressions pour f dans l'équation générale de conservation	34
8	Coefficients pour le calcul des intégrales de collision	39
9	Constantes du modèle « κ - ϵ Realizable »	41
10	Paramètres de réaction pour le mécanisme semi-global	45
11	Caractéristiques techniques du dispositif ADL utilisé	66
12	Incertitudes de mesure du dispositif IRTF	73
13	Paramètres d'essai	74
14	Concentrations et températures moyennes des gaz mesurées au sein du foyer .	97
15	Liste des calculs réalisés	99
16	Débits et températures moyennes de l'air et du bois	99
17	Analyses immédiates du combustible	100
18	Analyse élémentaire du combustible	100
19	Composition des matières volatiles	100
20	Concentrations des fumées en fonction de la distribution d'air secondaire . . .	102
21	Concentrations des fumées	104
22	Conditions aux limites pour le calcul du transfert thermique au sein du lit . .	112
23	Coefficients pour le calcul de la chaleur spécifique et l'enthalpie	121
24	Paramètres Lennard - Jones	124
25	Enthalpies de formation	124
26	Mécanisme cinétique KM	125
27	Mécanisme cinétique LE	126

Notations

A	Facteur pré-exponentiel	selon l'ordre de réaction
a	Coefficient d'absorption	–
b	Exposant de la concentration molaire d'oxygène dans la loi de la vitesse de réaction	–
Bi	Nombre de Biot	–
c	Exposant de la concentration molaire d'eau dans la loi de la vitesse de réaction	–
C	Concentration massique	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
c_p	Chaleur spécifique à pression constante	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
D	Coefficient de diffusion massique	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
d	Diamètre	m
d	Densité par rapport à l'eau, éq. 16	–
Da	Nombre de Damköler	–
E	Énergie	J
E_a	Énergie d'activation	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
f	Rapport CO/CO_2	–
f_c	Fréquence de coupure	Hz
G	Rayonnement incident	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$
g	Constante gravitationnelle	$\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$
G_b	Production de turbulence due aux forces thermo-gravitationnelles	$\text{N} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
G_κ	Production d'énergie cinétique de turbulence	$\text{N} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
h	Enthalpie sensible	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
H	Enthalpie totale	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
H_b	Humidité sur brut	%
H_l	Hauteur du lit	m
H_s	Humidité sur sec	%
h_f°	Enthalpie de formation	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
h_{gs}	Coefficient de transfert de chaleur par convection	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
h'_{gs}	Coefficient de transfert de masse	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
I	Flux de chaleur radiatif	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$
K	Constante du milieu poreux	m^{-1}
k	Constante de vitesse de réaction	selon l'ordre de réaction
k_B	Constante de Boltzmann	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$
L	Longueur	m
L_v	Chaleur latente de vaporisation	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
l	Longueur caractéristique	m

l^*	Fraction occupée par les structures fines	–
Le	Nombre de Lewis	–
M	Masse molaire	$\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$
MV	Teneur en matières volatiles	%
m	Masse	kg
\dot{m}	Débit massique	$\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$
m''	Flux massique	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
N	Terme source, éq. 57	$\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$
N_{tours}	Nombre de tours de vis	tr
n	Exposant indiquant la géométrie ($n = 0$ pour une plaque, $n = 1$ pour un cylindre et $n = 2$ pour une sphère)	–
n	Ordre de réaction, éq. 34	–
p	Pression	Pa
Pe	Nombre de Peclet	–
Pr	Nombre de Prandtl	–
Q	Densité de chaleur	$\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$
q_r	Densité de chaleur radiative	$\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$
R	Constante universelle des gaz parfaits	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
R	Vitesse de réaction	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$
\mathcal{R}	Réfectivité	–
r	Rayon	m
Re	Nombre de Reynolds	–
S	Entropie	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
S	Surface	m^2
S_H	Terme source d'énergie	$\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$
S_{ij}	Tenseur de déformation	s^{-1}
S_p	Surface volumétrique des particules au sein du lit	$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$
S_u	Terme source de quantité de mouvement	$\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$
Sc	Nombre de Schmidt	–
s	Surface spécifique	$\text{m}^2 \cdot \text{m}^{-3}$
t	Temps	s
T	Température	K
Th	Module de Thiele	–
u	Vitesse	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
V	Volume	m^3
w_{gr}	Vitesse de la grille	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
X	Fraction molaire	–
x, y, z	Coordonnées cartésiennes	m
y	Fraction massique fournie par les analyses de combustible	–
Y	Fraction massique	–
Z	Efficacité des partenaires de collision	–

Lettres grecques

α	Perméabilité	m^2
β	Coefficient d'expansion thermique	K^{-1}
β_a	Absorbance	m^{-1}

β_r	Exposant de la température, éq. 128	-
$\Delta_r H$	Chaleur de réaction	$J \cdot kg^{-1}$
δ	Longueur caractéristique des pores	$m \cdot m^{-1}$
δ_{ij}	Tenseur de Kronecker (si $i = j$, $\delta_{ij} = 1$ et si $i \neq j$, $\delta_{ij} = 0$)	-
ϵ	Taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence	$m^2 \cdot s^{-3}$
ϵ_{L-J}	Paramètre d'énergie dans le potentiel Lennard-Jones	J
ϵ_l	Porosité du lit	-
ϵ_p	Porosité de la particule	-
ϵ_s	Émissivité	-
γ	Coefficient stoechiométrique du CO_2 , éq. 147	-
η	Constante, éq. 145	-
κ	Énergie cinétique de turbulence	$m^2 \cdot s^{-2}$
λ	Conductivité thermique	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
μ	Viscosité dynamique	$Pa \cdot s$
ν	Viscosité cinématique	$m^2 \cdot s^{-1}$
θ	Facteur de rétrécissement	-
ρ	Masse volumique	$kg \cdot m^{-3}$
σ	Contrainte normale	$N \cdot m^{-2}$
σ	Écart type, éq. 30	-
σ_b	Constante de Stefan-Boltzmann	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$
σ_{ig}	Paramètre de longueur pour l'espèce gazeuse i dans le potentiel de Lennard-Jones	Å
σ_s	Coefficient de diffusion	-
τ	Contrainte de cisaillement	$N \cdot m^{-2}$
τ_{ij}	Contrainte visqueuse	$N \cdot m^{-2}$
τ^*	Échelle temporelle caractéristique du transfert de masse entre les structures fines et leur voisinage	s
Ω_{act}	Fraction couverte de cendres	-
$\hat{\Omega}_{ij}$	Taux moyen de rotation	s^{-1}
$\Omega^{(1,1)}, \Omega^{(2,2)}$	Intégrales de collision	-
ψ	Coefficient stoechiométrique de l' O_2 , éq. 31	-
ζ	Inverse de la surface interne	$m^3 \cdot m^{-2}$

Indices inférieurs

0	Initial
$A1$	Air primaire
abs	Absorbé
$allum$	Allumage
app	Apparent
atm	Atmosphérique
bh	Bois humide
$C(s)$	Carbone solide
C_f	Carbone fixe
c	Résidu carboné
cr	Critique
dev	Dévolatilisation

<i>eff</i>	Effectif
<i>ext</i>	Extérieur(e)
<i>g</i>	Gaz
<i>goud</i>	Goudrons
<i>gs</i>	Gaz-Solide
<i>H_b, h, hum</i>	Humidité
<i>i, j, k</i>	Directions i, j, k
<i>l</i>	Lit
<i>lam</i>	Laminaire
<i>MV</i>	Matières volatiles
<i>m</i>	Mélange, massique, moyen
<i>p</i>	Particule
<i>pas</i>	Par pas de vis
<i>por</i>	Pores
<i>pyr</i>	Pyrolyse
<i>r</i>	Réduit
<i>ray</i>	Rayonnement
<i>s</i>	Solide
<i>t</i>	Turbulent
<i>th</i>	Thermique
<i>vap</i>	Vaporisation
<i>vol</i>	Volatiles
<i>x, y, z</i>	Directions x, y, z

Indices supérieurs

-	Moyenne de Reynolds
=	Grandeur tensorielle
→	Grandeur vectorielle
~	Moyenne de Favre
*	Relatif aux structures fines
°	État standard (298,15 K et 101 325 Pa)
<i>max</i>	Maximum

Abréviations et sigles

ADEME	Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Énergie
ADL	Anémométrie Doppler Laser
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
COV	Composés Organiques Volatiles
CP	Combustible Pulvérisé
CPG	Chromatographie en Phase Gazeuse
CReeD	Centre de Recherches pour l'Environnement, l'Énergie et le Déchet du groupe Veolia
DAEM	<i>Distributed Activation Energy Model</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
ED	<i>Eddy Dissipation</i>
EDC	<i>Eddy Dissipation Concept</i>

GFC	Groupement Français de Combustion
HAP	Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques
IRTF	Spectroscopie Infrarouge à Transformées de Fourier
ISAT	<i>In-Situ Adaptive Tabulation</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LFB	Lit Fluidisé Bouillonnant
LFC	Lit Fluidisé Circulant
PCI	Pouvoir Calorifique Inférieur
PCS	Pouvoir Calorifique Supérieur
PDF	<i>Probabilistic Density Function</i>
PID	Proportionnel Intégral Dérivé
PSR	<i>Perfectly Stirred Reactor</i>
RANS	<i>Reynolds Average Navier-Stokes Simulation</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SOR	<i>Successive Over Relaxation</i>
UE	Union Européenne
WSGGM	<i>Weighted Sum of Gray Gases Model</i>

Introduction

Les sources renouvelables d'énergie, telles que la biomasse en général et le bois-énergie plus particulièrement, font l'objet, dans le contexte énergétique d'aujourd'hui, d'un intérêt de plus en plus important, notamment en raison du désir de diminuer les émissions de gaz à effet de serre. L'objectif de la Commission européenne est de diminuer les émissions de ces gaz dans l'Union Européenne (UE) de 20 % en 2020 par rapport à 1990 [79]. Le bois-énergie contribue à la diminution de ces émissions puisque, à la différence des énergies fossiles, le bilan en gaz carbonique est nul lors de sa combustion. L'évolution de cette filière a montré une augmentation importante pendant les dernières années. Par exemple la part de biomasse dans la consommation brute d'énergie dans l'UE était de 5,4 % en 2007 [80], soit 64 % de plus par rapport à 1996. L'utilisation du bois pour la production d'électricité est également en croissance rapide (+ 16,1 % entre 2004 et 2005 soit 44,1 TWh en 2005 selon [47]) grâce à la cogénération et à la co-combustion.

La France est un des pays européens qui produit le plus d'énergie primaire à partir du bois (avec une production de l'ordre de 9 à 9,5 Mtep la France reste le premier producteur européen de bois-énergie [47, 7, 82]) essentiellement grâce au chauffage domestique (environ 7,4 Mtep [47, 82]). Afin de maintenir la consommation domestique de bois à l' hauteur de 8 Mtep/an et d'améliorer de 10 % le rendement énergétique et la performance environnementale des chaudières individuelles, d'une part et d'encourager l'installation des nouvelles chaudières collectives ou industrielles d'autre part, l'Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Énergie (ADEME) a lancé la deuxième phase, 2000 - 2006, du « programme bois-énergie ». Le résultat de cette politique se traduit dans les secteurs collectif, industriel et tertiaire par l'installation de 1 828 chaufferies [1] au lieu des 1 000 prévues, dont 480 chaufferies industrielles alors que 400 étaient prévues. La troisième phase (2007 - 2010) est en déroulement, avec un objectif de 2,9 Mtep supplémentaires de bois, en soutenant les projets les plus performants, en l'occurrence les installations biomasse de plus de 1 MW [1, 6]. À part l'aspect environnemental, la filière bois-énergie a des influences sur le développement de l'emploi et sur l'économie. Cette filière représente ainsi l'équivalent de 20 000 emplois en France (Source ADEME). L'utilisation du bois permet de réduire les importations des ressources fossiles et donc d'améliorer la balance des paiements. C'est un combustible compétitif dans de très nombreux cas. Autre avantage, son prix n'est pas soumis aux fluctuations des cours internationaux des monnaies et des carburants.

Cependant, si la biomasse représente une solution viable pour réduire le problème des émissions de CO₂ dans la production de chaleur et d'électricité, par la nature très variable des combustibles issus de la biomasse - humidité, granulométrie, composition chimique - l'exploitation des installations automatiques alimentées au bois exige des compétences et un soin irréprochables. Un manque de soin dans l'exploitation de ce type d'installation peut conduire à la non-conformité des rejets polluants en matière de CO, COV, HAP et particules. D'où la nécessité de trouver les meilleurs moyens (du point de vue technico-économique) de conception et de diagnostic (investigation) pour ces applications. Ainsi, la simulation numérique s'avère un outil remarquable pour mieux dimensionner une nouvelle installation ou mieux paramétrer les données de fonctionnement d'une chaudière. Même si ces problèmes peuvent être surmontés par des essais expérimentaux, l'accès à certaines zones de l'installation n'est

pas toujours possible. De plus les coûts et le temps requis sont importants. La simulation numérique permet d'éviter ces inconvénients, une fois que les modèles mathématiques sont validés.

Notre travail s'inscrit dans ce cadre, car l'objectif est de mettre en place un modèle numérique, à l'aide des essais expérimentaux, qui décrit le mieux possible la combustion du bois dans une chaudière automatique. Afin de s'attaquer aux problématiques expérimentales et numériques, un état de l'art sur les différentes installations automatiques de combustion est présenté, car les émissions sont dépendantes de leur type et de la qualité de combustion obtenue par leur conduite (régulation). Ensuite, les différents phénomènes physico-chimiques et étapes de la combustion du bois, ainsi que leurs formalismes mathématiques sont détaillés, comme les propriétés du combustible, telles que l'humidité, le pouvoir calorifique, la masse volumique, etc. Les méthodes numériques et les schémas de discrétisation des équations de bilan sont ensuite décrits pour le lit combustible (différences finies) et pour la phase gaz (volumes finis), ainsi que les modèles de turbulence (phase gaz), de cinétique chimique et de transfert de chaleur par rayonnement. Cette partie est suivie par la présentation de l'installation étudiée et les techniques expérimentales de mesure employées pour évaluer la pertinence des calculs numériques. Il s'agit d'une chaudière de 400 kW_{th} à bois broyé fabriquée par la société Compte et installée au Centre de Recherche du groupe Veolia Environnement, basé à Limay (78). Les mesures réalisées concernent des débits (tube Pitot moyenné), températures (thermocouples), vitesses (Anémométrie Doppler Laser ou ADL) et concentrations de gaz (Spectroscopie Infrarouge à Transformées de Fourier ou IRTF). Ensuite, la modélisation numérique est abordée.

Les résultats expérimentaux numériques et ainsi obtenus sont analysés et discutés. Nous finirons avec les conclusions générales et les perspectives.

Chapitre 1

Technologies de combustion des solides

Sommaire

1.1	Chaudières automatiques	3
1.1.1	Foyers à grilles fixes	4
1.1.2	Foyers à grilles mobiles	5
1.1.3	Foyers volcan	7
1.1.4	Foyers à lit fluidisé	9
1.1.5	Installations à combustible pulvérisé	10
1.2	Régulation des chaudières automatiques	10

Les différents appareils de chauffage au bois peuvent être classés selon plusieurs critères : le type de chargement (manuel ou automatique), le type de chauffage (appoint ou relié à un réseau) et le type de combustion [97].

Les appareils à chargement manuel sont généralement des dispositifs de petite puissance (cheminées, poêles, inserts) alimentés en bûches et dont le fonctionnement dépend beaucoup de l'utilisateur. Les appareils à chargement automatique utilisent le plus souvent des combustibles divisés (granulés, plaquettes, etc.) et peuvent être de puissances plus importantes, avec une combustion mieux maîtrisée.

Les appareils d'appoint (poêles, inserts, cheminées, cuisinières) sont utilisés pour réduire les consommations du système principal de chauffage et transmettent la chaleur à de l'air par convection et rayonnement autour de l'appareil. Certains appareils peuvent être reliés au réseau de chauffage central. C'est le cas des chaudières.

Les différentes technologies de combustion dépendent principalement du combustible utilisé, de la taille de l'appareil et du parcours des gaz dans la chambre de combustion. Seuls les installations automatiques seront présentées ici.

1.1 Chaudières automatiques

Les chaudières automatiques utilisent des combustibles divisés (plaquettes, sciures, granulés) et sont munies d'un système de régulation ayant l'avantage de permettre une combustion continue, mieux contrôlée, peu polluante et avec des rendements élevés (entre 70 et 95 %). Le Tableau 1 rassemble des installations de combustion automatiques associées à leur domaine d'application. Selon la vitesse relative entre l'air et les particules combustibles on distingue généralement trois catégories d'installations à :

- lit fixe ;
- lit fluidisé ;
- combustible pulvérisé (CP).

Dans la première catégorie on retrouve les foyers de type volcan et à grille fixe ou mobile (avec ou sans avant-foyer). Les foyers volcan et ceux à grille fixe, comme les avant-foyers, conviennent pour les applications de petite et moyenne puissance et pour des combustibles à faible teneur en cendres. Pour les moyennes et grandes puissances, les foyers à grille mobile sont préférés. Les chaudières à lit fluidisé bouillonnant (LFB) ou circulant (LFC), ainsi que les installations à CP sont généralement réservées aux grandes puissances, notamment pour la cocombustion avec du charbon [31]. Enfin, il existe également des foyers où le principe du foyer volcan et du foyer à grille sont combinés, c'est le cas des foyers volcan à grille rotative, et des foyers à grille mobile avec un système d'introduction du combustible par projection (*spreader stoker* en anglais).

Tableau 1 – Différents types d'installations de combustion automatiques [31, 81, 84, 116]

Type d'installation	Puissance (MW)	Combustible
Foyer volcan	0,02 – 6	Plaquettes forestières, plaquettes de sous-produits de transformation du bois ($H_b^* = 5 - 50 \%$, $A^{**} < 1 \%$)
Foyer à grille mobile	0,15 – 25	Tout combustible bois ($H_b = 5 - 60 \%$, $A < 50 \%$)
Avant-foyer	0,02 – 1,5	Plaquettes de sous-produits de transformation secs ($H_b = 5 - 35 \%$, $A < 5 \%$)
Foyer volcan à grille rotative	2 – 25	Plaquettes forestières très humides ($H_b = 40 - 65 \%$, $A < 5 \%$)
Foyer à lit fluidisé bouillonnant	5 – 15	$d^{***} < 10 \text{ mm}$ ($H_b = 5 - 60 \%$)
Foyer à lit fluidisé circulant	15 – 500	$d < 10 \text{ mm}$ ($H_b = 5 - 60 \%$)
Installation à bois pulvérisé	5 – 10	$d < 5 \text{ mm}$ (en général $H_b < 20 \%$)
Installation de cocombustion à CP ($> 10 \%$ de bois)	100 – 1000	Bois, $d < 2 - 4 \text{ mm}$ ($H_b < 20 \%$)

* Humidité sur brut; ** Taux de cendres; *** Diamètre; +* en masse

1.1.1 Foyers à grilles fixes

Les systèmes à grilles fixes sont constitués de grilles (horizontales ou inclinées) sur lesquelles le combustible est amené (à l'aide d'un système d'introduction) et à travers laquelle l'air primaire est insufflé (Fig. 1a). L'air secondaire est injecté dans la chambre de combustion au-dessus du lit combustible afin de favoriser la combustion du mélange gazeux sortant du lit. La simplicité de cette technologie garantit une grande robustesse, mais le manque de mouvement du combustible peut conduire à une conversion hétérogène du lit et par conséquent à une combustion incomplète.

Les différences entre les solutions proposées par les constructeurs se font principalement au niveau de la géométrie du foyer, des mode d'injection de l'air secondaire et de l'air tertiaire, ainsi que sur le mode de transport du combustible entre le silo de stockage et la chaudière. L'acheminement du combustible est ainsi assuré par un système de transfert, qui relie le silo de stockage avec une trémie d'alimentation (située à proximité du foyer), et un système d'introduction qui alimente, à proprement dit, le foyer. Il y a deux classes de transferts : par vis sans fin (ou vis d'Archimède) et par tapis (à bande ou à racleurs). Le système par tapis est utilisé pour des combustibles de taille très variable afin d'éviter le risque de blocage. Pour le système d'introduction, le choix dépend du combustible utilisé (comme pour le système de transfert) et également du type de foyer. On distingue ainsi deux possibilités : par vis sans fin

ou par un poussoir hydraulique. La première solution convient pour tous les types de foyers et pour des combustibles homogènes en taille, tandis que la deuxième est réservée aux foyers à grilles et pour des combustibles de granulométrie variable [97, 128].

L'alimentation en combustible de la chaudière a un impact direct sur la qualité de la combustion (car elle est intégrée dans la logique de régulation de l'installation) et sur l'aspect sécurité (la séparation physique entre les systèmes de transfert et d'introduction à l'aide d'une trémie présente une garantie contre les éventuelles remontées de feu en cas de coupure accidentelle d'électricité par exemple).

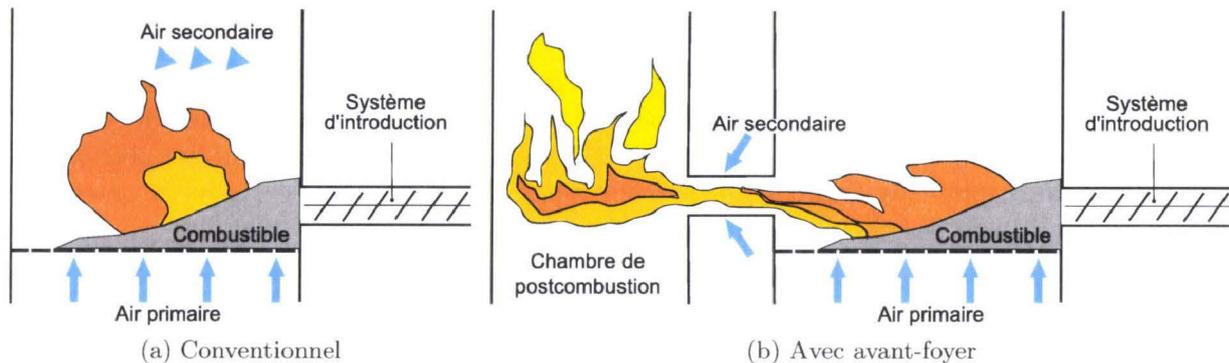


Figure 1 - Schéma de principe d'un foyer à grilles fixes [97]

Les chaudières installées sur les sites de type menuiserie présentent souvent un foyer à grilles, pour des puissances inférieures à 100 kW ce sont des foyers à grilles fixes, avec avant-foyer. Le principe de fonctionnement est illustré dans la Figure 1b et il se caractérise par la séparation de la phase de dégradation thermique du combustible, qui libère les gaz combustibles au niveau du foyer, de la phase de combustion de ces gaz avec de l'air secondaire dans la chambre de postcombustion. Le système avant-foyer peut être utilisé aussi bien pour la conversion des chaudières à combustibles fossiles (à gaz ou fioul) en installations de combustion pour la biomasse, par le remplacement du brûleur avec un foyer à grilles [109]. Il faut cependant noter que des problèmes d'étanchéité de liaison peuvent apparaître.

1.1.2 Foyers à grilles mobiles

L'inconvénient majeur des systèmes à grilles fixes est l'hétérogénéité du lit combustible, d'où le développement des foyers à grilles mobiles. Ainsi, la grille sert à transporter le combustible et les cendres et à homogénéiser le lit de combustible, afin d'améliorer le passage de l'air primaire et la combustion du résidu carboné. Pour assurer un bon comportement mécanique à haute température, la grille est refroidie soit à l'air soit à l'eau. Dans le cas du refroidissement à l'eau, le flux d'air primaire est limité aux besoins de la combustion, ce qui permet d'avoir une répartition entre l'air primaire et l'air secondaire plus flexible. Selon le type du mouvement on peut distinguer trois catégories principales de grilles [116, 128] :

- à chaîne sans fin : la grille imprime au combustible un mouvement rectiligne, pendant la dégradation thermique, entre le système d'introduction et le système d'évacuation des cendres. La hauteur du lit (de la couche) de combustible a un impact important sur la qualité de la combustion, car ce type de mouvement n'assure pas l'homogénéité du lit ;
- conventionnelles : dans ce cas la grille a un mouvement de va-et-vient, ce qui permet l'attisage et le mélange du combustible, afin d'améliorer la qualité de la conversion du carbone. Dans la plupart des cas une rangée de grilles sur deux est mobile, ainsi, la rangée mobile pousse le combustible vers une rangée fixe, puis la partie mobile revient

en arrière en laissant le combustible tomber sur la rangée fixe avant de le repousser en avançant, etc. ;

- à vibrations : la grille vibre et étale ainsi le combustible uniformément. Ce type de grille a moins de composants en mouvement que les autres grilles mobiles (d'où une meilleure fiabilité et moins de maintenance). De plus, la conversion du carbone est encore améliorée.

Dans les foyers à grilles mobiles, l'injection de l'air secondaire se fait au-dessus du lit combustible, comme dans le cas des systèmes à grilles fixes, afin d'achever la combustion des gaz sortants du lit. La façon dont l'air de combustion (primaire, secondaire et éventuellement tertiaire) est injecté joue un rôle très important sur la qualité de la combustion. Selon la direction d'avancement du combustible et la circulation des gaz au sein du foyer on différencie les installations à co-courant, à contre-courant et à courant croisé (Cf. Fig. 2). Dans les foyers à co-courant la direction principale et le sens d'écoulement des gaz coïncident avec l'avancement du combustible, ce qui est bien adapté pour les combustibles peu humides et dont la température de fusion des cendres est basse [84]. Les foyers à contre-courant permettent de brûler des combustibles très humides (jusqu'à 60 % d'humidité sur brut) grâce à l'inversement du sens de circulation des gaz, comme illustré dans la Figure 2c.

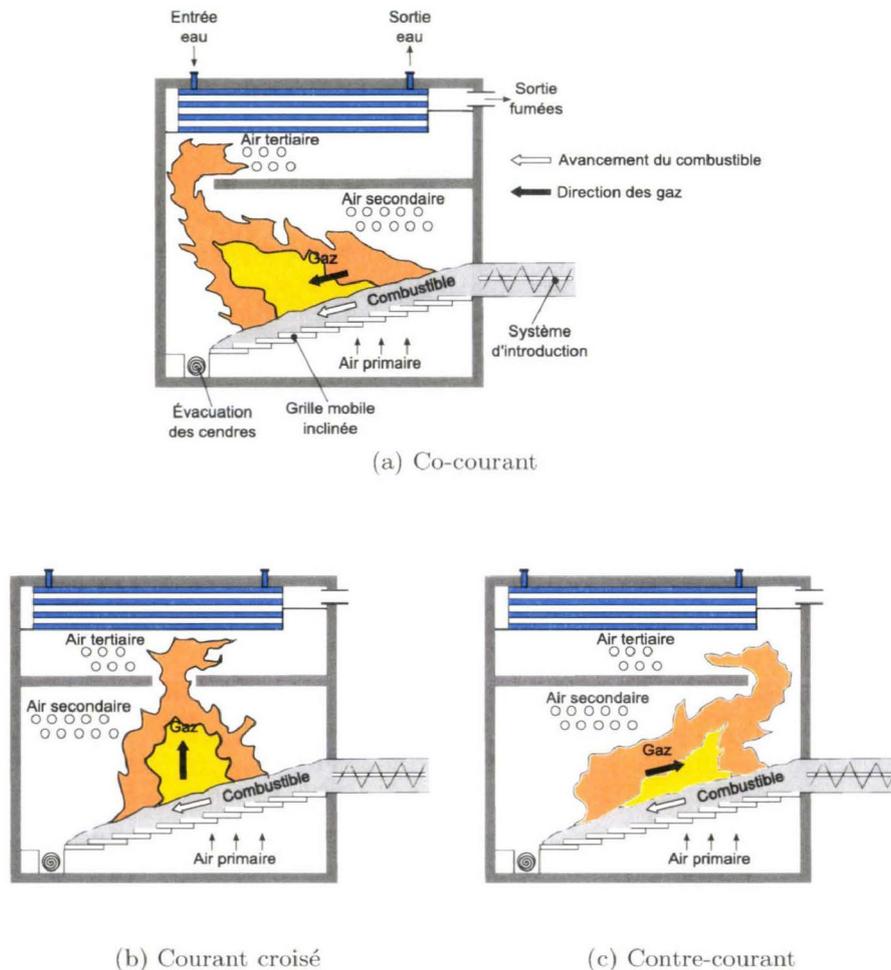


Figure 2 – Schéma de principe de foyers à grilles mobiles

L'introduction du combustible dans les foyers à grilles mobiles se fait généralement par vis sans fin ou poussoir hydraulique (comme pour les foyers à grilles fixes). Une alternative à ces deux types d'alimentation est l'introduction par projection, comme dans le cas des installations de type spreader stoker. Ainsi, les particules de combustible sont projetées dans la chambre de combustion, au-dessus de la grille, soit par voie pneumatique (Cf. Fig. 3)

soit mécanique (à l'aide d'un dispositif à pales rotatives [4]). Les particules fines brûlent en suspension, tandis que les plus grosses tombent et sont étalées uniformément sur la surface de la grille, afin de former un lit de combustible sec (ou partiellement dévolatilisé) de faible épaisseur. Cette technique d'alimentation permet d'aboutir à une meilleure conversion du carbone avec une surface de grille minimale.

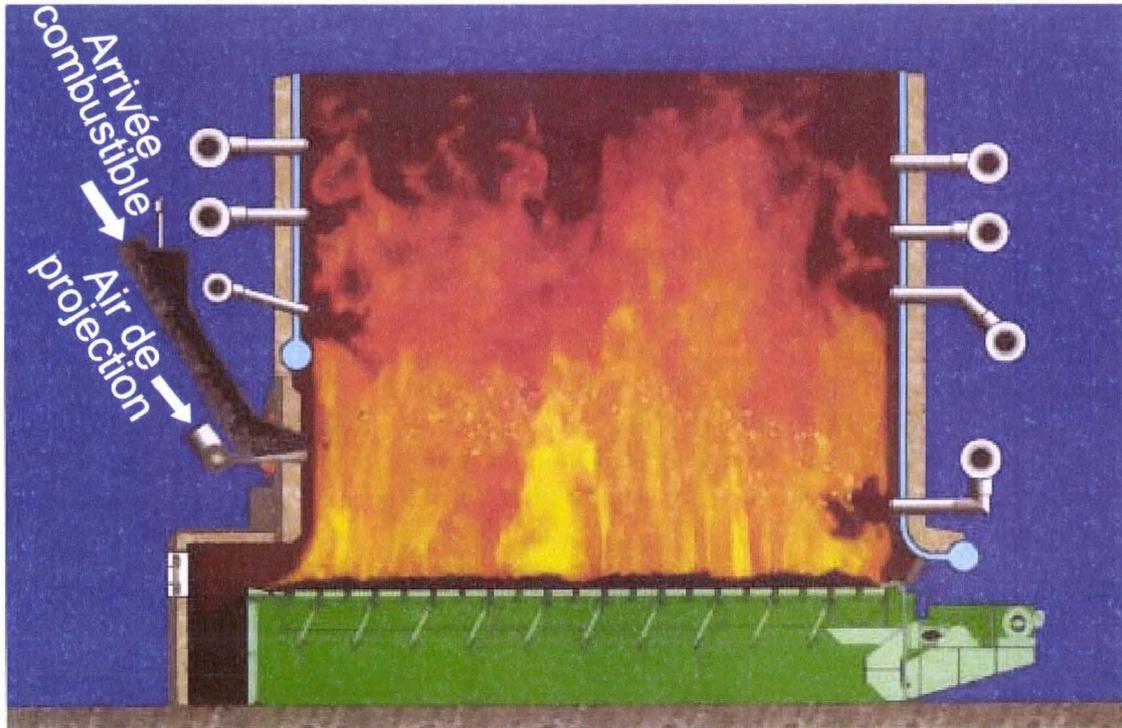


Figure 3 – Schéma d'un foyer à grilles de type spreader stocker [2]

Si les foyers à grilles conviennent parfaitement pour des combustibles à forte teneur en cendres et présentent des coûts d'investissement et d'exploitation attractifs (pour des puissances allant jusqu'à 20 MW [116]), il faut préciser que leur fonctionnement demande un excès d'air important (25 % ou au-delà [128]), ce qui se répercute sur le rendement de l'installation. Également, un bon contrôle d'émissions polluantes lors d'un fonctionnement à charge partielle réclame un système de régulation sophistiqué.

1.1.3 Foyers volcan

L'introduction du combustible dans les foyers volcan se fait par-dessous la chambre du foyer à l'aide d'une vis sans fin. Les particules de combustible sont amenées ainsi dans une enceinte évasée ayant la forme d'un volcan (Cf. Fig. 4). L'air primaire est injecté tout autour du tas de combustible, tandis que l'injection d'air secondaire se fait au-dessus du lit combustible, dans la chambre de combustion, comme dans le cas des foyers à grilles.

Les foyers volcan représentent une solution économique, du point de vue des coûts d'investissement et d'exploitation, pour des applications de petite et moyenne puissances (< 6 MW). Cette solution convient parfaitement pour des combustibles à faible teneur en cendres (et avec une haute température de fusion des cendres) et pour des diamètres de particules inférieurs à 5 cm [116]. Les avantages de cette technique sont le contrôle simple de l'installation et le bon comportement à charge partielle.

Pour les combustibles particulièrement humides (jusqu'à 65 % d'humidité sur brut) il existe la solution des foyers volcan à grilles rotatives. Cette technique combine le principe des foyers volcan et celui des foyers à grilles mobiles. Ainsi, l'introduction du combustible se fait comme dans le cas des foyers volcan (ce qui limite le diamètre des particules à 5 cm). Ensuite,

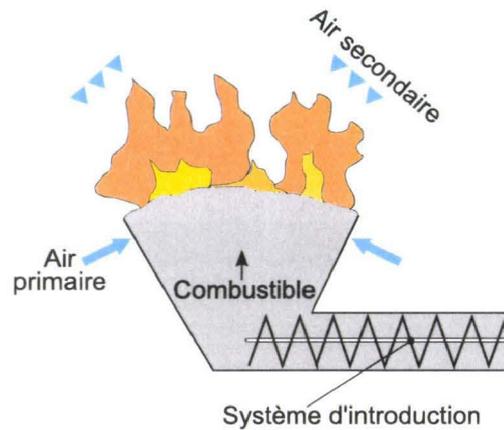


Figure 4 – Schéma de principe d'un foyer volcan

le combustible arrive sur une grille comportant des sections coniques et concentriques, qui tournent dans une direction opposée l'une par rapport à l'autre, comme montré dans la Figure 5. Par conséquent, un bon mélange est obtenu entre le combustible humide et celui en combustion. Les particules solides avancent au fur et à mesure vers la dernière section de la grille, afin que les cendres tombent dans un bassin d'eau, situé au-dessous de la grille.

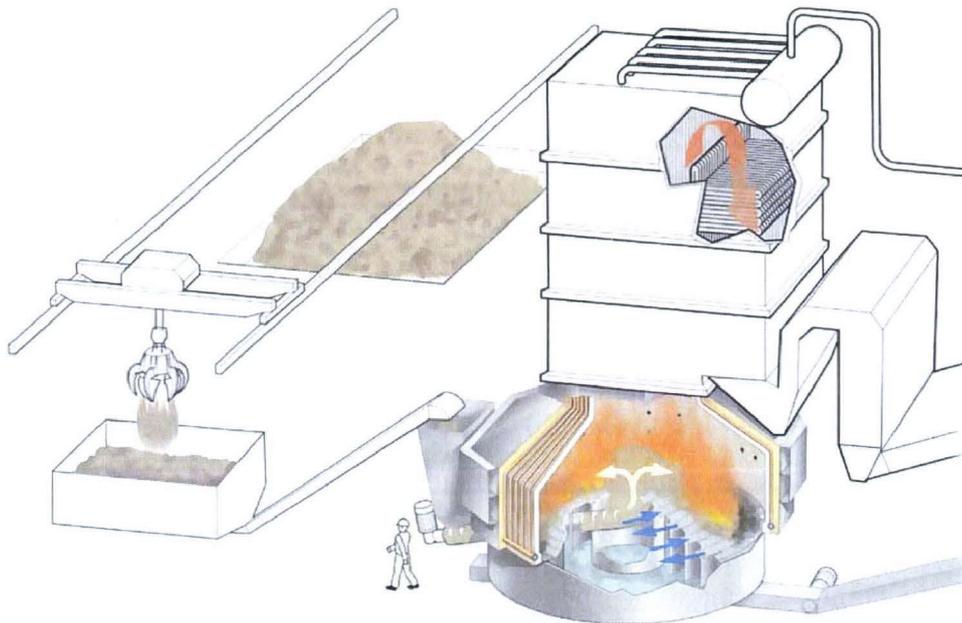


Figure 5 – Schéma d'une installation volcan à grille rotative [123]

L'air primaire est fourni au-dessous de la grille et les gaz sortant du lit se mélangent avec l'air secondaire et brûlent dans une chambre de combustion (horizontale ou verticale) placée en aval du foyer. La solution avec chaudière horizontale est préférée pour la production d'eau chaude ou de la vapeur dans des applications de type chaufferie, avec des puissances nominales comprises entre 3 et 17 MW_{th}. La version avec chambre de combustion verticale (Cf. Fig. 5) est utilisée dans les applications de cogénération avec une gamme de puissance thermique de 7,7 – 13,5 MW_{th} et une production d'électricité de 1,0 – 4,5 MW [116].

1.1.4 Foyers à lit fluidisé

Le principe de foyers à lit fluidisé consiste à faire brûler le combustible dans un lit de particules inertes (sable, silice ou dolomite) en suspension. Le matériau inerte représente 90 – 98 % du lit et joue le rôle d'un accumulateur thermique car il absorbe une partie de la chaleur de combustion, ce qui garantit une distribution de température homogène. L'air primaire est injecté par-dessous le foyer avec une vitesse suffisante pour la fluidisation du lit (Cf. Fig. 6).

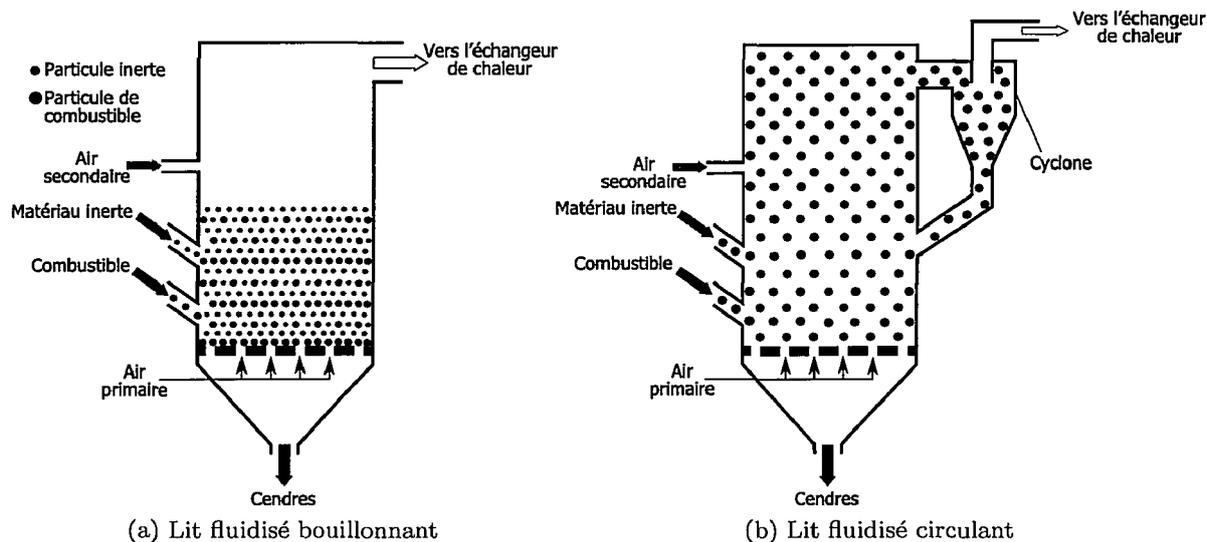


Figure 6 – Schéma de principe de foyers à lit fluidisé

Selon l'état du lit, on peut différencier les foyers à lit fluidisé bouillonnant (LFB) et les foyers à lit fluidisé circulant (LFC). Dans les foyers à LFB la masse du mélange combustible - inertes est confinée dans la partie inférieure du foyer, comme illustré dans la Figure 6a. Le diamètre des particules de combustible est limité à 80 mm, tandis que la granulométrie des particules inertes peut varier entre 0,5 et 1 mm, ce qui correspond à une vitesse de fluidisation de 1 – 2 m/s [116]. L'air secondaire est injecté dans la partie supérieure du foyer d'une manière étagée afin de limiter les émissions de NO_x .

Les foyers à LFC se caractérisent par l'entraînement des particules solides dans l'écoulement des gaz (Cf. Fig. 6b). Ce mouvement est assuré en augmentant la vitesse de l'air primaire (5 – 10 m/s) et en réduisant le diamètre des particules (0,2 – 0,4 mm pour les inertes et 0,1 – 40 mm pour le combustible [116]). Un cyclone est placé à la sortie du foyer pour récupérer les particules solides afin de les réinjecter au sein du lit circulant. Cette technique permet d'intensifier la turbulence et par conséquent d'améliorer le transfert de chaleur. En contrepartie, les fumées sortantes du cyclone présentent un taux de poussières plus élevé que dans le cas des foyers à LFB. De plus, la granulométrie requise pour le combustible se traduit par des coûts supplémentaires.

Pour conclure, les foyers à lit fluidisé conviennent pour une grande variété de combustible (biomasse, charbon, déchets et mélanges). Un faible excès d'air est nécessaire (10 – 30 % [116]), ce qui augmente le rendement et diminue le volume des fumées. Un autre avantage est la possibilité d'injection des additifs pour le traitement des fumées directement dans le foyer (par exemple l'ajout de chaux pour l'abattement des SO_x). Les inconvénients des foyers à lit fluidisé sont les coûts d'investissement (système de préparation du combustible, brûleurs à gaz ou à fioul pour le démarrage, filtres des poussières de haute performance, etc.) et d'exploitation assez élevés. Par conséquent, cette technologie est réservée aux applications de grande puissance (au-delà de 20 MW_{th}).

1.1.5 Installations à combustible pulvérisé

Les installations à combustible pulvérisé se caractérisent par une injection pneumatique des particules de combustible de faible granulométrie (Cf. Tableau 1, page 4), afin d'aboutir à une combustion rapide. Ce qui permet une variation rapide et un bon contrôle de la charge. L'injection du combustible dans le foyer peut être tangentielle, comme dans le cas des fours à mouffles [84, 116], ou axiale dans un brûleur de type cyclone (ou brûleur à swirl). Le démarrage est assuré par un brûleur (supplémentaire pour les fours à mouffles) à gaz ou à fioul.

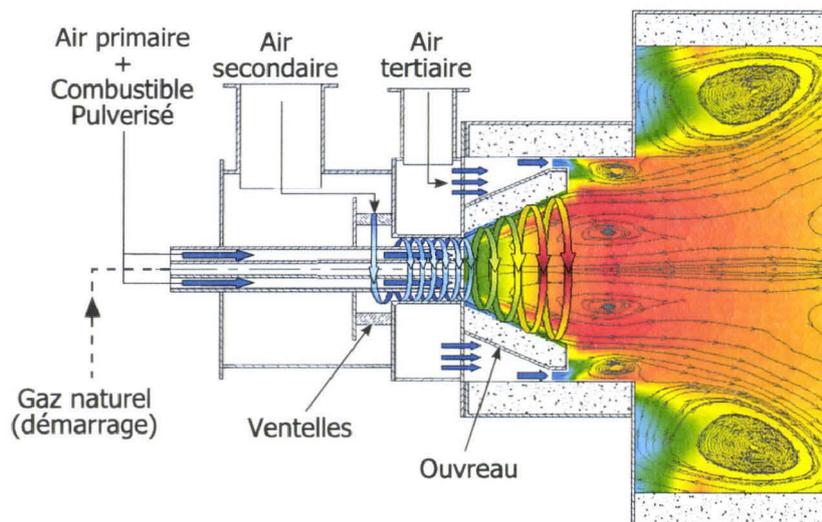


Figure 7 – Schéma de principe d'un brûleur à swirl [30]

La Figure 7 décrit le principe de fonctionnement d'un brûleur à swirl. Deux tubes concentriques servent pour l'alimentation en gaz naturel pendant le démarrage (le tube intérieur) et pour l'injection du combustible pulvérisé (l'espace annulaire entre les deux tubes). L'air secondaire passe par un système de ventelles, qui lui imprime un mouvement de rotation, avant de rentrer dans le foyer, autour du flux d'air primaire et de combustible. Enfin, l'air tertiaire est fourni à l'extérieur de l'ouveau. Un étagement d'air efficace se traduit par de faibles émissions de NO_x .

La qualité demandée pour le combustible (notamment la granulométrie et l'humidité) fait que les installations à bois pulvérisé sont utilisées notamment dans l'industrie de seconde transformation du bois [84].

1.2 Régulation des chaudières automatiques

La conduite des installations automatiques de combustion se fait à l'aide des circuits de régulation. Une bonne conduite se traduit par une logique de régulation qui permet d'atteindre les meilleures performances énergétiques et environnementales, en toute sécurité, pour une technique de combustion donnée. Différentes logiques de régulation sont proposées par les constructeurs de chaudières. Ici, est seulement décrit le système de contrôle le plus souvent utilisé pour les foyers de moyenne puissance et à grilles mobiles. Ainsi, les paramètres suivis sont : la dépression au sein du foyer, la puissance thermique (ou la charge) et la concentration d' O_2 dans les fumées. Le principe de cette logique de régulation est illustré dans la Figure 8.

Un manomètre différentiel mesure la dépression dans le foyer. La valeur mesurée est comparée ensuite par un PID¹ avec la valeur de consigne. Si la pression mesurée est inférieure

1. L'utilisation des PID (pour « Proportionnel Intégral Dérivé ») permet de compenser les phénomènes de retard et d'inertie

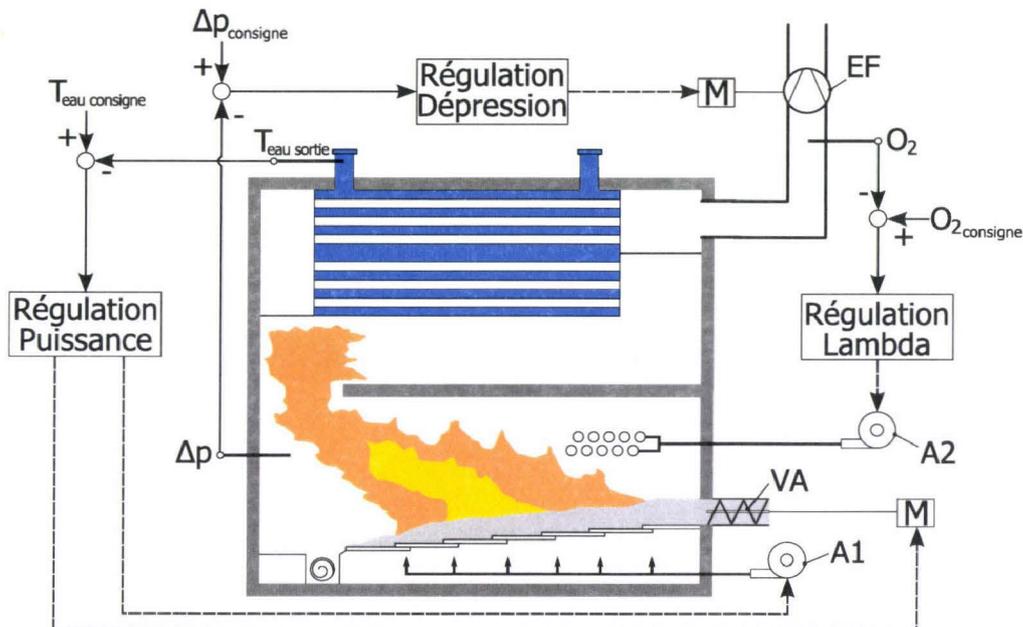


Figure 8 – Exemple de logique de régulation : A1 - ventilateur d'air primaire ; A2 - ventilateur d'air ; EF - extracteur de fumées ; M - moteur électrique ; VA - vis d'alimentation en combustible

à la consigne, le PID commande l'augmentation de la vitesse d'extraction des fumées. Inversement, si la valeur mesurée est supérieure à la consigne, le PID diminue la vitesse de rotation de l'extracteur de fumées. La régulation de la pression du foyer permet de maintenir les conditions de combustion constantes et d'éviter les fuites des fumées dans la chaufferie. S'il s'agit d'une installation de production d'eau chaude, la puissance thermique de la chaudière est contrôlée via la température d'eau à la sortie de la chaudière. La température de consigne correspond à la température nominale de départ dans le réseau de chauffage. Un deuxième PID reçoit la valeur mesurée et la compare avec la consigne. Ensuite, il commande la vis d'alimentation en bois et le ventilateur d'air primaire, afin de répondre au besoin de chaleur.

La qualité de la combustion est vérifiée en mesurant le taux d' O_2 dans les fumées, le plus souvent à l'aide d'une sonde de type Lambda. Ainsi, un troisième PID compare la mesure avec la consigne afin de réguler le débit d'air secondaire. La valeur de consigne est calculée à partir de la valeur théoriquement optimale de l'excès d'air. Cette valeur est dépendante de la nature du combustible et correspond à un taux théorique de CO minimum dans les fumées. Plus de détails sur les principes de régulation peuvent être trouvés dans Nussbaumer et Good [84]. On peut également citer les travaux de Bernard [12] sur l'optimisation de la régulation.

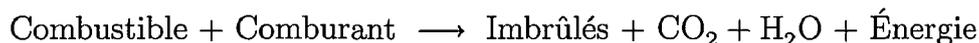
Chapitre 2

Combustion des solides

Sommaire

2.1	Propriétés des combustibles solides	14
2.2	Combustion homogène	18
2.3	Combustion hétérogène	20

La combustion est un ensemble complexe de réactions chimiques, généralement exothermiques, réalisée par l'oxydation rapide des éléments combustibles. Globalement, le mécanisme de la combustion peut être écrit sous la forme suivante :



Derrière cette formulation on trouve les quatre phases spécifiques à la combustion des solides :

- le chauffage et le séchage ;
- la pyrolyse ou la « dévolatilisation » ;
- la combustion homogène en phase gazeuse des matières volatiles ;
- la combustion hétérogène du carbone fixe (coke végétal).

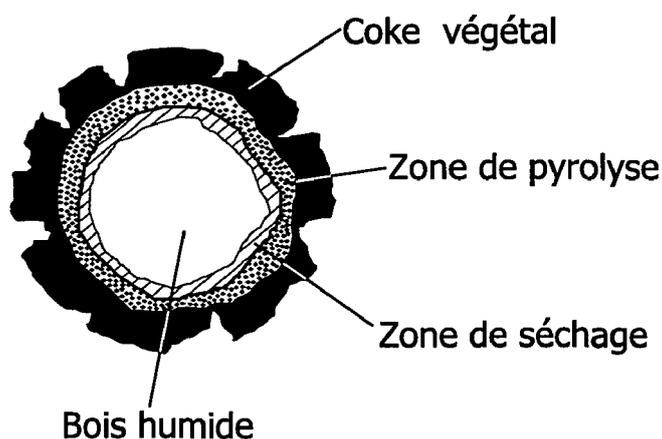


Figure 9 – Section représentative d'une particule de bois en combustion

On peut observer le déroulement de ces quatre étapes sur une particule de bois qui brûle (Figure 9). Le centre est constitué du bois brut, entouré par une zone où le séchage a déjà été réalisé, puis vient la zone de pyrolyse et enfin la partie extérieure correspondant à la zone où la pyrolyse est finie (coke végétal). Tout près de la particule se trouvent les matières volatiles dégagées pendant la pyrolyse, qui se mélangent avec l'oxygène environnant afin de réagir (dans ce cas on parle de la combustion en phase gazeuse non-prémélangée ou d'une flamme de diffusion).

Durant la phase de séchage, l'eau contenue dans le bois change d'état au fur et à mesure de

l'accroissement de la température. Cette étape est généralement finie avant que le bois atteigne les températures auxquelles la dégradation thermique des hémicelluloses commence, soit 120-200 °C [12, 39]. À partir de cette température la pyrolyse commence. Vers une température d'environ 250 °C la cellulose commence à se dégrader et lorsque la température augmente, le dégagement de gaz devient important et on voit apparaître les gaz combustibles (H_2 , CO et CH_4) et les produits condensables aromatiques (phénols, crésols, vanilline, etc.). La quantité des gaz qui se dégagent dépend fortement de la vitesse de chauffe et de la température. Vers 320 °C, la quantité de gaz produit est suffisante pour atteindre la limite d'inflammabilité dans l'air. En même temps le charbon de bois (coke végétal) se forme.

Selon la granulométrie, la vitesse de chauffe et la température, les fractions des différents produits de pyrolyse (gaz, liquides ou solides) changent. Ainsi pour des faibles granulométries et à une température inférieure à 600 °C les produits obtenus sont le CO_2 , H_2O et les goudrons, tandis qu'à partir de 700 °C on retrouve le CO et H_2 . La zone de pyrolyse avance dans le bois brut et les produits de la pyrolyse migrent vers la surface au travers du coke végétal. Lorsque les matières volatiles se mélangent avec l'oxygène présent dans l'air, que la limite d'inflammabilité est atteinte et que les conditions locales de turbulence le permettent, la combustion en phase gazeuse s'amorce.

Le débit des matières volatiles atteint un maximum au cours du temps et puis il commence à diminuer. Par conséquent O_2 , CO_2 et H_2O peuvent arriver à la surface du charbon de bois plus facilement. À ce moment la combustion hétérogène du coke végétal commence. Les gaz s'adsorbent sur la surface pour réagir avec le carbone fixe. En général le produit principal de l'oxydation du carbone fixe est le CO, qui quitte la surface du solide afin de donner une combustion homogène.

2.1 Propriétés des combustibles solides

Pour une meilleure maîtrise de la combustion ainsi que pour modéliser ce phénomène il est nécessaire de bien connaître les propriétés du combustible. Pour un combustible solide les propriétés suivantes sont toujours requises : humidité, analyses immédiate et élémentaire, masse volumique, pouvoir calorifique, chaleur spécifique et conductivité thermique.

Humidité

L'humidité du bois est un facteur très important car elle joue sur l'ensemble des caractéristiques du bois et par conséquent sur la qualité de la combustion (tenue et stabilité de la flamme, bilan énergétique et rendement). L'humidité peut apparaître sous trois formes : l'eau libre, l'eau adsorbée et l'eau liée. Dans des conditions d'humidité inférieures au point de saturation des fibres, l'eau dans le bois se trouve sous forme d'eau adsorbée sur les fibres et d'eau liée, plus particulièrement sur les fonctions hydroxyles de la cellulose et des hémicelluloses. Ce domaine d'humidité est appelé le domaine hygroscopique. Au-delà de ce domaine, l'eau, dite libre, apparaît dans les cavités du bois par effet capillaire. L'humidité peut être évaluée comme le rapport de la masse d'eau sur la masse de bois humide (on parle de l'humidité sur brut, H_b , dans ce cas) ou sur la masse de bois sec (l'humidité sur sec, H_s) :

$$H_b = \frac{m_{bois}^{humide} - m_{bois}^{sec}}{m_{bois}^{humide}} \quad (1)$$

$$H_s = \frac{m_{bois}^{humide} - m_{bois}^{sec}}{m_{bois}^{sec}} \quad (2)$$

Lorsqu'on parle du bois combustible on emploie l'humidité sur brut tandis que les professionnels de l'ameublement utilisent plutôt l'humidité sur sec.

La mesure d'humidité totale des combustibles solides est normalisée. Ainsi, on peut se

rapporter aux normes ISO 589 pour le charbon [40], NF EN 14774-1 et 3 pour les biocombustibles solides ou encore NF EN 14346 pour les déchets².

L'humidité est fortement variable au cours du temps en fonction des conditions de stockage de la biomasse. Ainsi l'humidité sur brut peut varier de plus de 50 % pour le bois fraîchement coupé jusqu'à 10-15 % pour le bois stocké à l'intérieur après un séchage forcé. Cette forte variation demande une mesure d'humidité pour chaque nouvelle charge de bois.

Composition

Les analyses immédiate et élémentaire fournissent des données, telles que le taux de matières volatiles, de cendres, la composition en termes de C, H, O, N et S, qui permettent de faire un lien entre la masse de combustible brûlé et la quantité des produits de combustion (la quantité de chaleur dégagée comprise). Les compositions élémentaires de quatre essences différentes de bois et de trois types de biomasse sont présentées dans le Tableau 2.

Tableau 2 - Analyses élémentaires de quelques essences d'arbres et de biomasses [12, 43]

Essence	Rapport massique (%)				
	C	H	O	N	S
Chêne noir	49,0	6,0	43,5	0,2	0,02
Pin Douglas	50,6	6,2	43,0	0,1	0,02
Aulne rouge	49,6	6,1	43,8	0,1	0,07
Peuplier	48,5	5,9	43,7	0,5	0,01
Noyau de pêche	49,1	6,3	43,5	0,5	0,02
Déchets de coton	42,8	5,1	35,4	1,5	0,55
Son de riz	38,3	4,4	35,5	0,8	0,06
Moût de raisin	54,9	5,8	32,1	2,1	0,21

Les déchets de coton et les noyaux de pêches ont des compositions proches de celle du bois même si elles contiennent davantage d'azote. Le moût de raisin et les déchets de coton ont des teneurs en azote et en soufre beaucoup plus importantes que le bois, d'où les émissions plus élevées de NO_x et SO_x par rapport à la combustion du bois. Couramment le soufre et l'azote contenus dans le bois sont négligés devant le carbone, l'oxygène et l'hydrogène. Cette approximation conduit à la formulation globale du bois suivante [39] :



qui permet d'estimer le débit d'air stœchiométrique ou le pouvoir calorifique. Néanmoins, les concentrations d'azote ou de soufre ne peuvent plus être négligées si on veut étudier la formation des oxydes d'azote ou de soufre, même si elles sont faibles.

L'évolution de la combustion du bois anhydre est déterminée par les taux de matières volatiles et de carbone fixe. Le Tableau 3 regroupe les analyses immédiates de différents bois, biomasses et charbons minéraux. Le bois contient en moyenne 87 % de matières volatiles et 12,7 % de carbone fixe, l'écart entre les espèces étant très faible. Par rapport aux bois, les autres biomasses et les charbons contiennent moins de matières volatiles et plus de carbone fixe et de cendres. La connaissance du taux de cendres et de leur composition est importante si on s'intéresse aux problèmes d'encrassement des chaudières.

2. Une des techniques de mesure d'humidité (utilisée assez souvent pour le bois) décrites dans ces normes consiste à sécher l'échantillon à température constante (105 °C) dans une étuve ventilée jusqu'à poids constant.

Tableau 3 – Analyses immédiates de différents bois, biomasses et charbons [12, 43]

Essence	Matières volatiles (%)	Carbone fixe (%)	Cendres (%)	PCS (kJ/kg)
Chêne noir	85,6	13,0	1,4	18 650
Pin Douglas	87,3	12,6	0,1	20 370
Aulne rouge	87,1	12,5	0,4	19 300
Peuplier	82,3	16,4	1,3	20 096
Noyau de pêche	79,1	19,8	1,1	19 420
Déchets de coton	75,4	15,4	9,2	15 580
Son de riz	63,6	15,8	20,6	14 890
Moût de raisin	74,4	21,4	4,2	21 810
Charbon bitumineux de Pennsylvanie	6,2	79,4	11,9	34 900
Charbon sub-bitumineux du Wyoming	40,7	54,4	4,9	23 300

Les méthodes de détermination des analyses immédiate et élémentaire sont également normalisées. Ci-dessous sont listées les normes recommandées pour les biocombustibles solides :

- XP CEN/TS 15148 (Méthode pour la détermination de la teneur en matières volatiles) ;
- XP CEN/TS 14775 (Méthode de détermination de la teneur en cendre) ;
- XP CEN/TS 15104 (Détermination de la teneur totale en carbone, hydrogène et azote - Méthodes instrumentales) ;
- XP CEN/TS 15289 (Détermination de la teneur totale en soufre et en chlore).

Le taux de carbone fixe est calculé selon la relation [40] :

$$\text{Carbone fixe}(\%) = 100 - [H_b(\%) + \text{cendres}(\%) + \text{MV}(\%)] \quad (4)$$

où MV est la teneur en matières volatiles. En ce qui concerne la teneur en oxygène, celle-ci est le plus souvent déterminée par différence à partir des autres éléments selon [40] :

$$\text{O} = 100 - \text{cendres} - \text{C} - \text{H} - \text{N} - \text{S} \quad (5)$$

où les valeurs sont exprimées en pourcentage sur sec.

Masse volumique

Le bois présente une structure poreuse et par conséquent sa masse volumique peut varier en fonction de l'échelle de mesure. Par exemple, au niveau des cellules du bois anhydre la masse volumique est de l'ordre 1500 kg/m^3 [12], on parle alors de la masse volumique absolue. Pour le bois massif la masse volumique se trouve entre 200 et 1350 kg/m^3 , pour l'ensemble des essences, qui se réduit encore, à l'échelle du mètre cube, pour un tas de bois broyé ($100\text{-}300 \text{ kg/m}^3$) et dans ce cas on parle de la masse volumique apparente (la détermination de la masse volumique apparente des biocombustibles solides se fait selon la norme XP CEN/TS 15103). Ces différences mettent en évidence le vide existant dans le bois massif et l'espace libre entre les particules de bois fragmenté dans un tas. L'aspect poreux du bois se maintient durant la combustion, ainsi la masse volumique du charbon de bois varie entre 300 et 500 kg/m^3 [40] (nettement inférieure à 1800 kg/m^3 , la masse volumique absolue du carbone amorphe [72]).

Pouvoir calorifique

Ce paramètre peut être déterminé soit par mesure normalisée en bombe calorimétrique (norme XP CEN/TS 14918 Biocombustibles solides - Méthode pour la détermination du pouvoir calorifique) soit par des formules basées sur les analyses élémentaire et immédiate. Selon l'état de l'eau dans les fumées (liquide ou vapeur) et l'origine de cette eau (l'hydrogène contenu dans le combustible anhydre et l'humidité), on peut définir :

- Le pouvoir calorifique supérieur (PCS) : dans ce cas l'eau produite par la combustion est condensée et le combustible sec. Le PCS de bois varie peu selon l'essence (voir Tableau 3, page 16) et approche les 20 000 kJ/kg. On peut approcher sa valeur à l'aide d'une relation qui est utilisée assez couramment [39] :

$$\text{PCS} = 47500 Y_C - 2380 \text{ (kJ/kg)} \quad (6)$$

avec Y_C la fraction massique de carbone.

- Le pouvoir calorifique inférieur anhydre ($\text{PCI}_{\text{anhydre}}$) : dans ce cas l'eau formée par la combustion se trouve dans l'état de vapeur, sachant que le combustible est toujours sec. Le PCI anhydre peut s'exprimer soit par rapport au PCS soit par rapport à la composition élémentaire [39] :

$$\text{PCI}_{\text{anhydre}} = \text{PCS} - L_v Y_C \frac{M_{\text{H}_2\text{O}}}{2M_{\text{H}}} \text{ (kJ/kg)} \quad (7)$$

$$\text{PCI}_{\text{anhydre}} = 34030 Y_C + 121640 Y_{\text{H}} - 12540 Y_{\text{O}} \text{ (kJ/kg)} \quad (8)$$

où : L_v est la chaleur latente de vaporisation de l'eau, Y_{H} est la fraction massique de l'hydrogène et Y_{O} celle de l'oxygène.

- Le PCI ou PCI humide : dans ce cas on prend en compte l'eau contenue dans le combustible (humidité sur brut, H_b). L'énergie prise en compte dans le calcul du PCI est alors celle du PCI anhydre selon la relation suivante :

$$\text{PCI} = (1 - H_b) \text{PCI}_{\text{anhydre}} - H_b L_v \text{ (kJ/kg)} \quad (9)$$

ou encore, en fonction du PCS et de l'analyse élémentaire [40] :

$$\text{PCI} = [\text{PCS} - 212 H - 0,8 (O + N)] \times (1 - 0,01 H_b) - 24,4 H_b \text{ (kJ/kg)} \quad (10)$$

avec les teneurs en H, O et N exprimées en pourcentage sur sec.

Chaleur spécifique

La chaleur spécifique du bois dépend de sa température et de son humidité, mais elle est pratiquement indépendante de sa masse volumique. La variation de la chaleur spécifique du bois anhydre peut être donnée par la relation suivante [39, 105] :

$$c_{p_{\text{anhydre}}} = 0,003867 T + 0,1031 \text{ (kJ/kg K)} \quad (11)$$

ou encore [63] :

$$c_{p_{\text{anhydre}}} = 0,004206 T - 0,0377 \text{ (kJ/kg K)} \quad (12)$$

avec la température T en K. Pour le bois humide la capacité thermique massique est égale à la somme des chaleurs spécifiques du bois sec et de celle de l'eau pondérées par leurs masses respectives [39] :

$$c_{p_{\text{humide}}} = \frac{(c_{p_{\text{anhydre}}} - c_{p_{\text{eau}}} H_s)}{1 + H_s} \text{ (kJ/kg K)} \quad (13)$$

Cette relation prend en compte seulement l'eau libre et, par conséquent, la valeur de la chaleur spécifique du bois humide ainsi calculée est inférieure à la valeur réelle. Afin de tenir compte de cet écart (et donc de l'énergie de liaison de l'eau adsorbée sur les fibres de bois), la correction suivante est proposée [63] :

$$c_{p\text{humide}} = \frac{c_{p\text{anhydre}} + 4,19 H_s}{1 + H_s} + (0,02355 T - 1,32 H_s - 6,191) H_s \text{ (kJ/kg K)} \quad (14)$$

avec l'humidité sur sec :

$$H_s = \frac{H_b}{1 - H_b} \quad (15)$$

Conductivité thermique

Finalement, la conductivité thermique du bois dépend de la masse volumique apparente du bois et de son humidité. Elle n'est pas la même dans les trois directions de l'espace, car le bois est un matériau anisotrope. Néanmoins, la conductivité thermique dans la direction radiale peut être considérée égale à celle qui correspond à la direction tangentielle. Selon Deglise [39] on peut utiliser l'expression suivante pour la conductivité thermique transverse du bois à température ambiante :

$$\lambda_{\text{radial,tangential}} = d (0,200 + 0,0052 H_s) + 0,024 \text{ (W/m K)} \quad (16)$$

avec d la densité du bois par rapport à l'eau et H_s l'humidité sur sec exprimé en %. La conductivité thermique est aussi affectée par la teneur en eau. Pour en tenir compte on peut faire appel à la corrélation de MacLean [75] :

$$\lambda_{\text{radial,tangential}} = 0,0237 + 2 \times 10^{-4} \rho_{\text{bois}}^{\text{sec}} \left(1 + 2 \frac{H_b}{1 - H_b} \right) \text{ si } H_b < 0,3 \quad (17a)$$

$$\lambda_{\text{radial,tangential}} = 0,0237 + 2 \times 10^{-4} \rho_{\text{bois}}^{\text{sec}} \left(1 + 2,5 \frac{H_b}{1 - H_b} \right) \text{ si } H_b \geq 0,3 \quad (17b)$$

avec $\rho_{\text{bois}}^{\text{sec}}$ la masse volumique du bois sec, en kg/m^3 .

La conductivité thermique axiale est environ 2,5 fois plus élevée que celle transverse. Thunman et Leckner [112] proposent un modèle plus élaboré pour calculer la conductivité thermique du bois dans les différentes phases de la combustion en tenant compte de la structure et de l'alignement des fibres du bois.

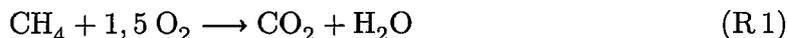
On remarque que la façon dont les propriétés du bois sont calculées (parfois on fait appel à des relations empiriques) peut introduire des incertitudes importantes.

2.2 Combustion homogène

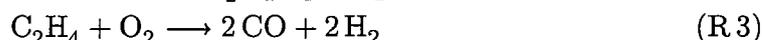
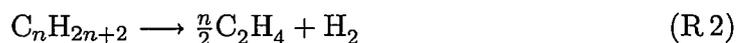
Les matières volatiles dégagées pendant l'étape de dévolatilisation quittent le solide et sont entraînées par l'écoulement des gaz entourant la particule de combustible. En présence d'air (ou d'oxygène) les gaz de dévolatilisation peuvent s'enflammer si la qualité de leur mélange avec le comburant et si la température du milieu sont suffisantes. À ce moment, la combustion en phase gaz (ou homogène ou vive) se déclenche et elle se maintiendra tant que les conditions ci-dessus sont respectées et si, toutefois, la turbulence le permet. La cinétique chimique de cette étape est assez complexe. Par conséquent il y a plusieurs approches pour décrire la

cinétique chimique de la combustion en phase gazeuse des hydrocarbures, en fonction du degré de précision souhaité :

- La cinétique chimique globale implique souvent une seule réaction qui (pour un hydrocarbure) conduit à la formation du CO_2 et H_2O . Par exemple pour le méthane on a :



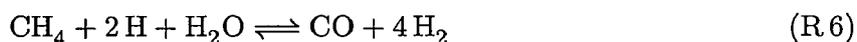
Cette approche donne seulement des informations globales sur le dégagement de chaleur, elle est incapable de prévoir l'évolution des espèces intermédiaires stables, dont les polluants. Le travail de Hautman *et al.* [57] améliore le mécanisme cinétique global en considérant plusieurs étapes, afin de tenir compte de la formation de CO et H_2 :



Ce mécanisme permet d'avoir une représentation médiocre des profils de concentrations dans les flammes.

- La cinétique chimique semi-globale consiste à distinguer deux étapes : une première étape où le combustible est oxydé en CO et H_2 suivie par une étape qui décrit en détail (environ 30 réactions élémentaires [68, 114]) l'oxydation des systèmes H_2/O_2 et CO/O_2 . Cette approche donne une bonne représentation des concentrations de CO , CO_2 , H_2 , H_2O , H , O , OH , O_2 .
- La cinétique chimique détaillée est un ensemble de réactions chimiques élémentaires où toutes les espèces (molécules, atomes, radicaux) et toutes les réactions possibles thermodynamiquement doivent être représentées. Ainsi, les profils de concentrations des espèces moléculaires et radicalaires, dont les polluants, sont bien décrits. Par contre, le nombre de réactions est assez élevé : pour le CH_4 , par exemple, le mécanisme comporte environ 300 réactions élémentaires ou plus [114, 121]. Ainsi, le mécanisme GRI-MechTM 3.0 [3] fait appel à 325 réactions, le mécanisme GDF-Kin[®] [9, 8] compte environ 1000 réactions ou encore le mécanisme développé à l'Université Polytechnique de Milan [93] comporte 9173 réactions élémentaires.

Les mécanismes globaux et quasi-globaux (appelés également des mécanismes réduits) sont généralement déduits à partir d'un mécanisme détaillé. La démarche consiste à définir d'abord un mécanisme cinétique de départ (mécanisme « squelettique »³) à partir d'un mécanisme détaillé. Ensuite, le mécanisme squelettique est utilisé pour déterminer la cinétique globale en faisant appel à des approximations (telle que l'hypothèse de l'état quasi-stationnaire) [50, 70, 74, 88]. Ainsi, Leroy *et al.* [71] ont utilisé le mécanisme détaillé GRI-Mech comme point de départ pour obtenir un mécanisme squelettique à 49 réactions afin d'aboutir à la cinétique chimique globale suivante :



3. Expression surtout utilisée en anglais (*skeletal mechanism*), équivalente à mécanisme réduit (Cf. Dictionnaire de la combustion du GFC). Utilisée ici pour la distinguer des mécanismes global et semi-global.

Les mécanismes détaillés sont utilisés plutôt pour étudier la combustion du point de vue de la cinétique chimique (c'est-à-dire en dehors d'une application technique précise) sans tenir compte de certains phénomènes (comme la turbulence par exemple), tandis que les mécanismes réduits ou les méthodes statistiques (tabulation des cinétiques détaillées) sont préférés, en raison du temps de calcul, pour la simulation numérique d'installations de combustion en tenant compte de tous les aspects physico-chimiques.

2.3 Combustion hétérogène

La conversion d'une particule de résidu carboné fait intervenir les étapes suivantes :

- transport des gaz vers la surface extérieure de la particule ;
- diffusion des gaz dans la particule (phénomène limité par la porosité de la particule) ;
- réactions chimiques intrinsèques des gaz avec le carbone fixe (réactions surfaciques impliquant un mécanisme d'absorption - désorption) ;
- diffusion éventuelle des produits de réaction dans la particule ;
- dispersion des produits en phase gazeuse.

Le mécanisme cinétique est discuté plus en détail par Di Blasi [20] et Bews *et al.* [13], mais généralement les réactions globales intervenant dans la conversion du carbone fixe sont les suivantes [22, 114] :



Les réactions de gazéification (R 12 et R 13) sont généralement beaucoup plus lentes que celles d'oxydation (R 10 et R 11). Par contre, dans les régions pauvres en oxygène les réactions de gazéification deviennent plus importantes.

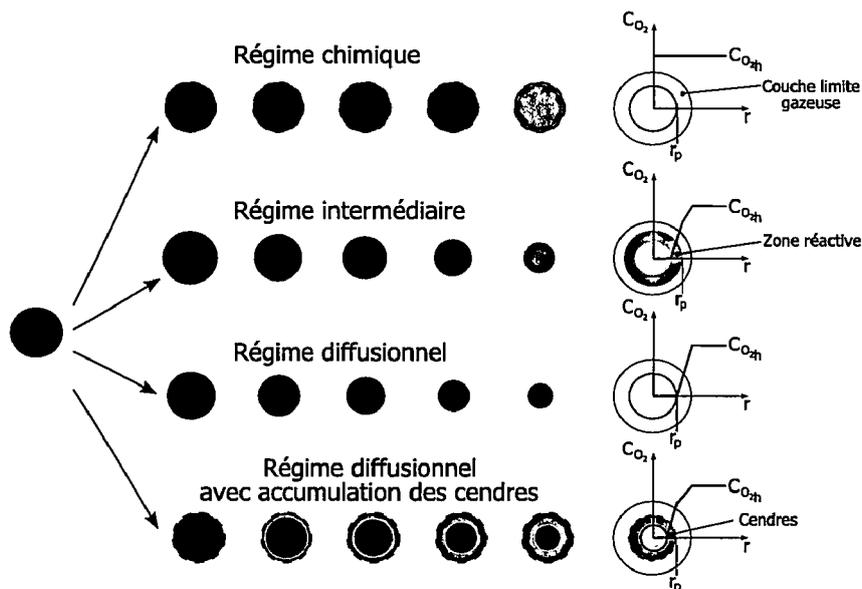


Figure 10 - Régimes de conversion d'une particule de résidu carboné : r_p - rayon de la particule ; $C_{O_2\infty}$ - concentration d'oxygène loin de la particule

Les cendres formées pendant la conversion du résidu carboné peuvent être soit considérées uniformément distribuées dans la particule, soit regroupées (accumulées) dans une couche

poreuse située à la surface de la particule (composée essentiellement de carbone fixe). Dans le second cas, les cendres influencent la vitesse de la conversion, car la couche qu'elles forment représente une résistance à la diffusion des gaz.

Selon la vitesse relative de chaque étape de transformation, on peut différencier trois régimes de conversion (ou de combustion, si on se limite seulement aux réactions d'oxydation), schématisés dans la Figure 10 :

- régime chimique : la cinétique chimique contrôle la vitesse de conversion. Dans ce cas le transport des réactants vers la particule et leur diffusion au sein de la particule sont plus rapides que les réactions chimiques. Ce qui se traduit par une concentration des réactants constante dans la particule et la conversion avance en fonction de la surface disponible (qui évolue par l'élargissement des pores). La masse volumique de la particule diminue tandis que sa taille demeure constante. Ce régime, également appelé « à conversion progressive du grain », intervient généralement à des températures modérées (800 °C) ;
- régime diffusionnel : correspond à une cinétique chimique très rapide ; par conséquent, la conversion est régie par le transfert externe des réactants gazeux. La transformation a lieu à la surface extérieure de la particule, qui rétrécit avec une masse volumique constante. Dans ce cas, la vitesse d'oxydation/conversion dépend peu de la température, le facteur majeur étant l'apport d'oxygène/des gaz. Ce régime, appelé également « à cœur rétrécissant », apparaît à des températures élevées et/ou lorsque la porosité de la particule est proche de zéro ;
- régime intermédiaire : la vitesse de la cinétique chimique et celle de la diffusion des gaz sont proches (ont le même ordre de grandeur). C'est équivalent à une zone de conversion diffuse. Pour les grosses particules (plaquettes) elle se trouve au voisinage de la surface extérieure. Dans ce cas les particules rétrécissent avec une masse volumique constante. Pour les particules fines (combustible pulvérisé) les gaz peuvent diffuser dans toute la particule, alors la masse volumique et la taille de la particule diminuent simultanément [89].

La vitesse de conversion dépend alors de la concentration des gaz, la température, la nature de l'écoulement, de la granulométrie et de la porosité.

Afin de déterminer le régime de combustion hétérogène, on peut faire appel au module de Thiele, Th , qui représente le rapport entre les vitesses de la cinétique chimique et de la diffusion massique [38, 113] :

$$Th = r_p \sqrt{\frac{R_{C(s)}}{D_{\text{eff}}}} \quad (18)$$

où r_p est le rayon de la particule, $R_{C(s)}$ la vitesse de réaction et D_{eff} le coefficient effectif de diffusion des gaz dans la particule :

$$D_{\text{eff}} = \epsilon_p^2 D \quad (19)$$

avec ϵ_p la porosité de la particule et D le coefficient de diffusion. Ainsi, $Th > 1$ correspond au régime de conversion progressive et $Th < 1$ au régime du cœur rétrécissant.

Les considérations précédentes peuvent être étendues à l'échelle d'un lit de particules. On peut tracer alors un diagramme, permettant de distinguer les différents régimes de conversion d'un lit fixe et des particules qui le constituent, en faisant appel au nombre de Damköler, Da , et au module de Thiele. Les limites entre les régimes de conversion sont représentées par $Da = 1$ [86] :

$$\frac{k l_l}{D_l} = \zeta \frac{l_p}{l_l} \quad (20)$$

et $Th = 1$:

$$\frac{k l_l}{D_l} = \frac{D_p \zeta l_l}{D_l l_p l_p} \quad (21)$$

avec : k la constante de vitesse de réaction, l la longueur caractéristique (indice p pour la particule et l pour le lit), ζ l'inverse de la surface interne (prend en compte la structure poreuse de la particule), D_p et D_l les coefficients de diffusion au sein de la particule et du lit.

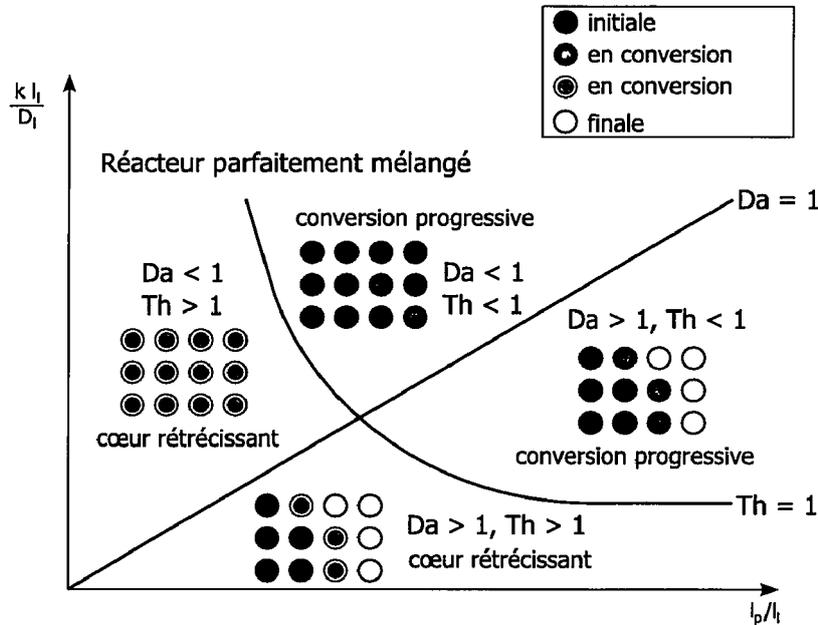


Figure 11 - Régimes de conversion dans un lit fixe [86]

Le diagramme illustré dans la Figure 11 montre quatre régimes de conversion bien distincts. Pour une cinétique chimique lente sur l'ensemble du lit, la conversion est contrôlée par le transport au sein du lit ($Da < 1$). La concentration des gaz est alors uniforme dans le lit et par conséquent à la surface des particules. L'absence des gradients (et donc d'un front d'avancement bien défini) renvoie à un réacteur parfaitement mélangé. Pour ce régime on peut identifier les modes de conversion des particules selon la valeur du module de Thiele (cf. page 21). La conversion à $Da < 1$ ne dépend pas de la masse du combustible.

À $Da > 1$ le transfert des gaz vers les particules prévaut devant la diffusion des gaz dans le lit. Ce qui se traduit par l'apparition d'un front de conversion au sein du lit. C'est-à-dire, seulement une fraction des particules réagissent, en fonction de la direction d'avancement du front. Comme dans le cas précédent, on peut retrouver les régimes de conversion des particules en fonction du module de Thiele. Le régime $Da > 1$ dépend de la masse du lit, car un changement de la masse modifie la vitesse du front d'avancement.

Pour conclure, la combustion du bois se fait en quatre étapes : deux endothermiques (séchage et pyrolyse) et deux exothermiques (réactions homogènes et hétérogènes). La pyrolyse dépend fortement de la granulométrie, de la vitesse de chauffe et de la température. La distribution de température dépend du transfert de chaleur (rayonnement, convection et conduction) et de la cinétique chimique (les taux de réactions) qui, à son tour, dépend des conditions de mélange, c'est-à-dire de l'écoulement des gaz. Les vitesses des gaz dépendent de leurs masses volumiques et donc de la température. On remarque alors un « cercle » des phénomènes interdépendants qui jouent sur la combustion du bois.

Chapitre 3

Modélisation numérique de la combustion des solides

Sommaire

3.1	Généralités	24
3.1.1	Conversion thermique d'une particule	24
	Séchage	24
	Dévolatilisation	25
	Combustion hétérogène	28
3.1.2	Conversion thermique d'un lit de particules	31
3.1.3	Phase gazeuse	33
3.2	Modélisation de la combustion en phase gazeuse	37
3.2.1	Modèle « κ - ϵ Realizable »	40
3.2.2	Modèle de « Eddy Dissipation Concept »	42
	Mécanismes cinétiques	44
3.2.3	Modèle de rayonnement : P-1	45
3.2.4	Conclusions	46
3.3	Modélisation de la combustion d'un lit de particules	46
3.4	Conclusions	57

Dans le chapitre antérieur les phénomènes physico-chimiques qui interviennent dans la combustion du bois ont été présentés. Ces phénomènes peuvent être décrits par des équations mathématiques. La simulation numérique repose sur la résolution de ces équations en utilisant des méthodes numériques. Vu la complexité du processus de combustion, la résolution directe de ces équations est très difficile ou demande une puissance de calcul trop grande. Ainsi, des hypothèses simplificatrices sont introduites pour diminuer la complexité (comme l'hypothèse de Boussinesq pour la turbulence). Dans ce cas il s'agit d'un modèle mathématique et on parle de la modélisation numérique. En fonction de la spécificité de chaque application (bois bûches ou broyé, chaudière manuelle ou automatique, lits fixes ou fluidisés, etc.) et des hypothèses faites il y a plusieurs modèles/approches numériques disponibles dans la littérature. Ces approches seront présentées dans la première partie de ce chapitre, d'abord pour une seule particule, puis pour un lit de combustible (interaction phase solide - phase gaz) et finalement pour la phase gaz. Les deux derniers paragraphes détaillent les modèles utilisés pour ce travail.

3.1 Généralités

3.1.1 Conversion thermique d'une particule

Séchage

Dans le cas de la biomasse, le contenu en humidité peut être égal à la masse du bois sec, par conséquent la phase de séchage devient importante pour la combustion du point de vue énergétique et en terme de temps de séjour. Les trois formes sous lesquelles l'eau existe dans une particule combustible joue sur le mécanisme de séchage. Comme l'enthalpie de vaporisation de l'eau liée est supérieure à l'énergie de liaison, on peut supposer que d'abord l'eau libre s'évapore dans les cavités de la particule. Dans ce cas le séchage peut être sous-divisé en quatre étapes : chauffage de la particule, évaporation de l'eau libre, désorption et évaporation de l'eau adsorbée et finalement la séparation de l'eau liée. Le taux de séchage dépend du transfert thermique dans la particule, donc le taux de séchage est en croissance à la surface de la particule afin d'atteindre une valeur constante à l'intérieur. À ce moment l'avancement du séchage est limité par le transfert de chaleur à l'intérieur de la particule. Vers la fin du séchage le taux d'évaporation de l'eau adsorbée et liée diminue.

Certains auteurs [11, 29, 14, 46, 63, 110] décrivent le séchage par une loi de type Arrhenius :

$$R_{vap} = A_{vap} e^{-\frac{E_{a_{vap}}}{RT}} Y_h \rho_{bh} \quad (22)$$

avec A_{vap} , $E_{a_{vap}}$, T , Y_h et ρ_{bh} le facteur pré-exponentiel, l'énergie d'activation, la température, la fraction massique d'eau et la masse volumique du bois humide. Cette approche a l'avantage d'une énergie d'activation qui prend en compte la dépendance de la température et d'être stable du point de vue numérique. Néanmoins, l'utilisation des paramètres cinétiques (A_{vap} et $E_{a_{vap}}$) est problématique pour des conditions autres que celles pour lesquelles ces paramètres ont été déterminés. Dans le Tableau 4 sont regroupées les valeurs généralement utilisées pour ces paramètres.

Tableau 4 – Paramètres de réaction pour le séchage

A_{vap} (1/s)	$E_{a_{vap}}$ (J/mol)	Réfs.
$1,60 \times 10^{27}$	207 860	[63, 110]
$6,00 \times 10^{05}$	48 220	[11]
$5,13 \times 10^{10}$	88 000	[29, 46]

Peters [86] et Saastamoinen [102] proposent une autre méthode pour compenser cet inconvénient. Cette méthode est basée sur l'équilibre thermodynamique entre l'énergie disponible pour l'évaporation et la quantité d'eau vaporisée, ce qui correspond à la quantité de chaleur au-dessus de la température de vaporisation. Autrement dit toute augmentation de la température au-dessus de la température de vaporisation est utilisée pour le séchage. Dans ce cas le terme source est défini par :

$$R_{vap} = \begin{cases} \frac{(T - T_{vap}) \rho c_p}{L_v \delta t} & \text{si } T \geq T_{vap}, \\ 0 & \text{si } T < T_{vap}. \end{cases} \quad (23)$$

La relation ci-dessus est en effet une fonction de Dirac et les équations deviennent raides, ce qui nécessite des techniques appropriées pour la résolution. Peters [86] montre que cette approche prédit mieux la phase de séchage par rapport au modèle précédent, notamment pour les particules épaisses (≈ 5 mm) et confirme que l'approche basée sur une cinétique

chimique reste limitée aux conditions pour lesquelles les paramètres ont été déterminés. À part l'aspect de la stabilité du calcul, la méthode basée sur une fonction de Dirac (Éq. 23) pose encore des problèmes car elle traite le séchage que pour une seule température de vaporisation (100 °C \Leftrightarrow pression = 1 atm) alors que la vapeur d'eau peut être dégagée à des températures (correspondant à des pressions partielles inférieures à la pression atmosphérique) inférieures à 100 °C. Une réécriture de l'équation 23, pour chaque pression partielle des vapeurs d'eau, est toutefois possible pour résoudre ce problème, mais cela augmente la complexité du calcul. Yang *et al.* [125, 126, 127] et Shin et Choi [107] traitent la phase de séchage, pour une température inférieure à 100 °C, comme un transfert de masse de la particule vers le gaz qui l'entoure afin de rendre le calcul plus stable :

$$R_{vap} = \begin{cases} s_p h'_{gs} (C_{eau,s} - C_{eau,g}) & \text{si } T_s < 100 \text{ °C,} \\ Q_{cr}/L_v & \text{si } T_s = 100 \text{ °C.} \end{cases} \quad (24)$$

avec s_p la surface de la particule, h'_{gs} le coefficient de transfert de masse convectif, T_s la température de la particule, $C_{eau,s}$ et $C_{eau,g}$ les concentrations d'eau sur la surface de la particule et dans le gaz entourant. La chaleur absorbée par la particule comprend le transfert par convection et rayonnement :

$$Q_{cr} = s_p [h_{gs} (T_g - T_s) + \epsilon_s \sigma_b (T^4 - T_s^4)] \quad (25)$$

Les coefficients convectifs de transfert de masse et de chaleur s'écrivent [120] :

$$h'_{gs} = \frac{D_g (2 + 1,1 Sc^{1/3} Re^{0,6})}{d_p} \quad (26)$$

et

$$h_{gs} = \frac{\lambda (2 + 1,1 Pr^{1/3} Re^{0,6})}{d_p} \quad (27)$$

où D_g est le coefficient de diffusion massique.

Dévolatilisation

La composition des gaz de pyrolyse ainsi que le taux de dégagement dépendent fortement de la vitesse de chauffe et de la température, ce qui rend d'une grande complexité la cinétique détaillée de dévolatilisation, qui est d'ailleurs peu connue. Par conséquent, les modèles de pyrolyse sont limités à un mécanisme global. Ce mécanisme peut être décrit par des modèles à une étape, des modèles avec des réactions en compétition et des modèles avec des réactions secondaires.

Les modèles à une seule étape considèrent que le combustible solide se décompose en matières volatiles et en char (Figure 12). Thunman *et al.* [110], Yang *et al.* [126], Hostikka et McGrattan [59] et Benkoussas *et al.* [11] ont utilisé ce modèle avec des résultats satisfaisants, bien que le modèle à une étape utilise un seul facteur pré-exponentiel et une seule énergie d'activation pour décrire le dégagement de l'ensemble des matières

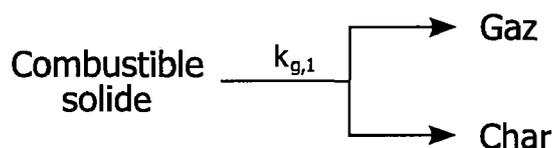


Figure 12 – Modèle de pyrolyse à une étape

volatiles. Par conséquent, la composition des matières volatiles est obtenue à partir des résultats expérimentaux. Pour tenir compte de l'évolution individuelle de chaque espèce présente dans les volatiles, le modèle à une étape a été modifié en utilisant une approche basée sur la distribution d'énergie d'activation en fonction des précurseurs de l'espèce gazeuse i (*Distributed Activation Energy Model* ou DAEM) [99]. Cette approche suppose que la distribution de la réactivité puisse être représentée par des réactions parallèles et indépendantes, chacune avec sa propre énergie d'activation, alors la distribution de la réactivité est donnée par une distribution continue d'énergies d'activation. Autrement dit, l'évolution d'un produit de dévolatilisation i implique une infinité de réactions indépendantes, chacune contribuant à la formation de ce produit :

$$\frac{dY_i}{dt} = -k_{pyr_i} Y_{i,0} \quad \text{où} \quad k_{pyr_i} = A_{pyr_i} e^{-\frac{E_{a_{pyr_i}}}{R T(t)}} \quad (28)$$

En supposant que le nombre des réactions est suffisamment grand, la distribution d'énergie peut s'écrire sous la forme d'une fonction $f_i(E)$. Alors la fraction des précurseurs du produit i avec des énergies comprises entre E et $E + dE$ est $Y_{i,0} f_i(E) dE$ et la quantité totale de l'espèce i dégagée jusqu'au temps t est :

$$Y_i = Y_{i,0} \int_0^\infty e^{-\int_0^t k(E) dt} f_i(E) dE \quad (29)$$

La fonction $f_i(E)$ est considérée comme une distribution gaussienne avec une énergie d'activation moyenne $E_{a_{i,0}}$ et un écart type σ_i :

$$f_i(E) = \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} e^{\left[-\frac{(E - E_{a_{i,0}})^2}{2\sigma_i^2} \right]} \quad (30)$$

En utilisant cette approche Rostami *et al.* [99] ont obtenu des résultats ayant un bon accord avec les essais expérimentaux pour la pyrolyse de la cellulose. Yang *et al.* [125] ont utilisé aussi ce modèle afin de simuler l'incinération des déchets.

Les modèles avec des réactions en compétition tiennent compte de la formation des goudrons (Figure 13), qui est en effet en compétition avec la formation des volatiles, d'où le nom de ces modèles. Cette approche donne des résultats moins précis que le modèle

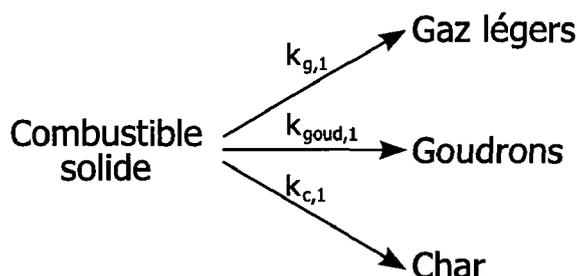


Figure 13 – Modèle de pyrolyse avec des réactions en compétition

DAEM [86, 87, 129], mais d'un point de vue qualitatif elle montre un bon accord avec les résultats expérimentaux.

Les modèles avec des réactions secondaires prennent en compte les réactions des goudrons (Figure 14). Ainsi, les hydrocarbures lourds de dévolatilisation peuvent se décomposer soit en gaz légers (CO , CH_4 , H_2 , etc.), soit en gaz légers avec formation de résidu carboné selon une seule vitesse de réaction (la constante de vitesse $k_{g,2}$ cf. Figure 14b) ou avec des vitesses de réactions distinctes pour la formation des gaz et celle du char ($k_{g,2}$ et $k_{c,2}$ cf. Figure 14c). Ces modèles conviennent notamment à haute température quand la dégradation thermique devient possible.

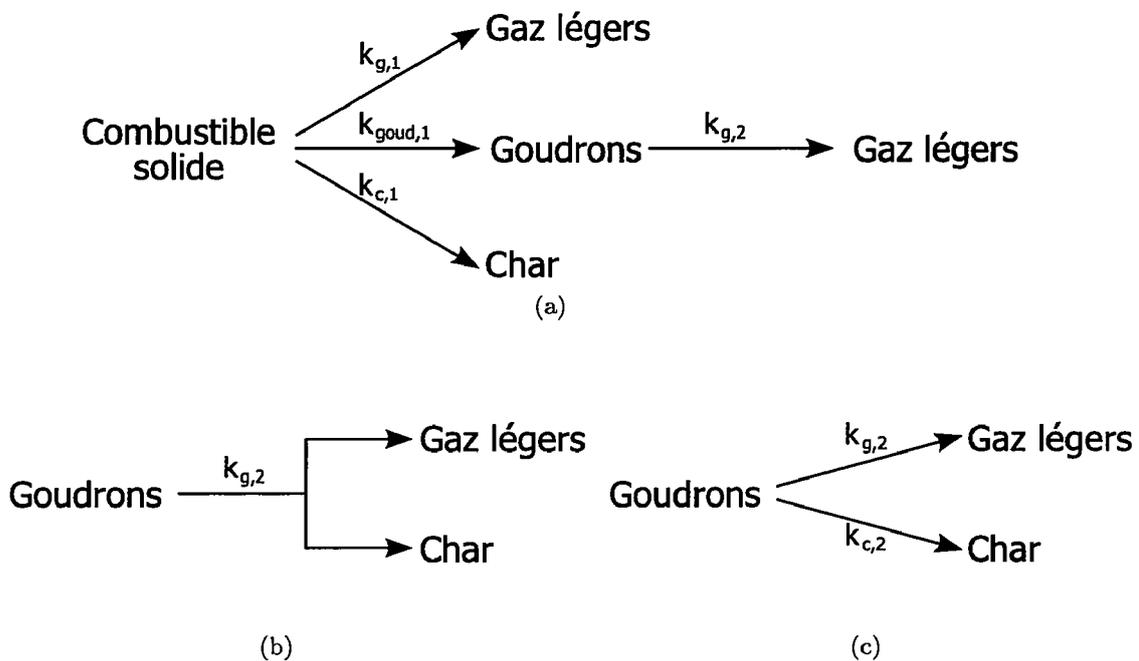


Figure 14 – Modèles de pyrolyse avec des réactions secondaires

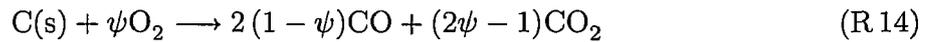
Quel que soit le modèle, les paramètres cinétiques sont toujours déterminés à partir des essais expérimentaux (par exemple les travaux de Raveendran *et al.* [94] ou Branca *et al.* [24, 26]), de même, dans tous les cas et quelle que soit la nature du combustible on retrouve toujours le CO et le CO_2 dans les gaz de dévolatilisation. Les autres gaz, tel que H_2 , CH_4 , C_2H_6 , etc., sont représentés en fonction du combustible (charbon, bois, déchets, etc.) et du degré de précision souhaité. Dans le Tableau 5 sont donnés, à titre d'exemple, les paramètres cinétiques de dévolatilisation pour deux modèles à une étape et deux modèles avec des réactions en compétition. Plus de détails concernant la pyrolyse de la biomasse peuvent être trouvés dans les travaux de Di Blasi *et al.* [15, 16, 17, 18, 19, 21] et Branca *et al.* [23, 25].

Tableau 5 – Paramètres de réaction pour la dévolatilisation du bois

Modèle	Constante de vitesse $k = A \exp[-E_a/(R T)]$ avec A en (1/s) et E_a en (kJ/mol)	Réfs.
Kung <i>et al.</i>	$k_{g,1} = 5,25 \times 10^7 \exp[-125,6/(R T)]$	[67]
Balci <i>et al.</i>	$k_{g,1} = 1,35 \times 10^9 \exp[-123,1/(R T)]$	[10]
Grønli	$k_{g,1} = 1,3 \times 10^8 \exp[-140/(R T)]$ $k_{goud,1} = 2 \times 10^8 \exp[-133/(R T)]$ $k_{c,1} = 1,08 \times 10^7 \exp[-121/(R T)]$ $k_{g,2} = 2,3 \times 10^4 \exp[-80/(R T)]$	[55]
Di Blasi	$k_{g,1} = 4,4 \times 10^9 \exp[-153/(R T)]$ $k_{goud,1} = 1,1 \times 10^{10} \exp[-148/(R T)]$ $k_{c,1} = 3,3 \times 10^6 \exp[-112/(R T)]$	[19]

Combustion hétérogène

Les réactions décrivant la combustion du résidu carboné (réactions R.10 et R.11, page 20) peuvent être combinées tel que :



avec :

$$\psi = \frac{2 + f}{2(1 + f)} \quad (31)$$

et

$$f = \frac{CO}{CO_2} \quad (32)$$

Le rapport f est basé sur des corrélations obtenues à partir des essais expérimentaux. Hayhurst et Parmar [58] présentent un état de l'art concernant le rapport CO/CO_2 qui met en évidence une faible cohérence entre les valeurs de ce rapport obtenues pour différents types de matrices carbonées. Ce qui s'explique, non seulement par les différences entre les conditions d'essais, mais aussi par la nature et la morphologie des résidus carbonés étudiés (porosité, impureté, etc.).

La constante de vitesse de réaction due à la diffusion massique peut s'écrire pour une particule sphérique, si l'effet de la couche limite gazeuse entourant la particule (écoulement de Stefan) est négligé, de la façon suivante :

$$k_d = \frac{Sh D_{O_2,m}}{d_p} C_{O_2} \quad (33)$$

où Sh est le nombre de Sherwood, $D_{O_2,m}$ le coefficient de diffusion de l'oxygène dans le mélange gazeux, d_p le diamètre de la particule et C_{O_2} la concentration massique d'oxygène. Plusieurs corrélations sont disponibles dans la littérature pour le nombre de Sherwood [73, 113, 120].

La constante de vitesse due à la cinétique chimique s'écrit :

$$k_c = A_c e^{-\frac{E_{ac}}{RT}} p_{O_2}^n \quad (34)$$

avec p_{O_2} la pression partielle de l'oxygène et n l'ordre de réaction. Les paramètres A_c, E_{a_c} et n sont déterminés par voie expérimentale, on peut citer ici comme exemple le travail de Bews *et al.* [13] sur l'ordre de réaction. Concernant le facteur pré-exponentiel et l'énergie d'activation, quelques valeurs sont données dans le Tableau 6.

Tableau 6 – Paramètres de réaction pour l'oxydation du résidu carboné

A_c (kg/m ² s Pa ⁿ)	E_{a_c}/R (K)	n	Réfs.
$8,60 \times 10^{-1}$	18 000	1,0	[36]
$4,60 \times 10^{-4}$	7 577	1,0	[62]
$8,56 \times 10^{-2}$	2 237	0,5	[65]

Si l'ordre de réaction est considéré égal à l'unité, on peut exprimer la constante de vitesse comme :

$$k_{C(s)} = \frac{1}{\frac{1}{k_c} + \frac{1}{k_d}} \quad (35)$$

Et finalement, la vitesse de réaction :

$$R_{C(s)} = \frac{\pi d_p^2 M_C k_{C(s)} p_{O_2}}{\psi} \quad (36)$$

avec M_C la masse molaire du carbone.

Les phénomènes décrits ci-dessus représentent, du point de vue mathématique, des termes sources pour les équations de conservation. Les bilans de matière, d'énergie et d'espèces pour le gaz existant dans les cavités de la particule ont la forme suivante pour une seule dimension :

$$\frac{\partial (\epsilon_p \rho_g)}{\partial t} + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} (r^n \epsilon_p \vec{u}_g \rho_g) = - \sum R_{s,i} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\epsilon_p \rho_g c_{p_g} T_g)}{\partial t} + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} (r^n \epsilon_p \vec{u}_g \rho_g c_{p_g} T_g) &= \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n \epsilon_p \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + \\ &+ s_{por} h_{gs} (T_s - T_g) - \\ &- \sum \left(R_{s,i} \int_{T_g}^{T_s} c_{p_g,i} dT \right) \end{aligned} \quad (38)$$

$$\frac{\partial (\epsilon_p \rho_g Y_{g,i})}{\partial t} + \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} (r^n \epsilon_p \vec{u}_g \rho_g Y_{g,i}) = \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n \epsilon_p D_{i,m} \rho_g \frac{\partial Y_{g,i}}{\partial r} \right) - R_{s,i} \quad (39)$$

avec :

- ϵ_p la porosité de la particule ;
- \vec{u}_g la vitesse des gaz ;
- $\rho_g, c_{p_g}, \lambda_g$ et T_g la masse volumique, la chaleur spécifique, la conductivité thermique et la température du mélange de gaz ;
- $R_{s,i}$ la vitesse de la réaction hétérogène i ;
- s_{por} la surface des pores ;
- h_{gs} le coefficient de transfert de chaleur par convection ;
- T_s la température du solide ;
- $c_{p_g,i}$ et $Y_{g,i}$ la chaleur spécifique et la fraction massique de l'espèce gazeuse i ;
- $D_{i,m}$ le coefficient de diffusion massique de l'espèce i dans le mélange.

L'exposant n prend en compte la géométrie de la particule ($n = 0$ pour une plaque, $n = 1$ pour un cylindre et $n = 2$ pour une sphère). L'hypothèse du comportement unidimensionnel de la particule permet de réduire la complexité du calcul et elle est toujours acceptée.

Le dernier terme dans l'équation 38 représente l'apport enthalpique des gaz émis lors du séchage, de la dévolatilisation et de la consommation du résidu carboné.

La cinétique chimique en phase gazeuse n'est pas représentée, car le diamètre des pores est trop faible (de l'ordre du μm [86]) pour que les réactions homogènes se développent.

La vitesse des gaz peut être déduite soit à partir de la loi de Darcy [113] :

$$\vec{u}_g = -\frac{\alpha_p}{\mu_g} \frac{\partial p}{\partial r} \quad (40)$$

soit en convertissant l'ensemble des vitesses de réaction sur le volume du solide dans un flux sortant par la surface du volume considéré [86] :

$$\vec{u}_g = \frac{V \sum R_{s,i}}{S \rho_g} \quad (41)$$

avec α_p la perméabilité de la particule, μ_g la viscosité dynamique du mélange gazeux, p la pression, V le volume et S la surface.

La pression et la masse volumique sont déterminées à partir de l'équation d'état, sous l'hypothèse des gaz parfaits :

$$p = C_g R T \quad (42)$$

et

$$\rho_g = C_g \sum M_i X_i \quad (43)$$

avec C_g la concentration molaire des gaz, M_i la masse molaire de l'espèce i et X_i la fraction molaire de l'espèce i .

Les équations de conservation pour le solide (dans le référentiel de la particule) s'écrivent :

$$\frac{\partial [(1 - \epsilon_p) \rho_s]}{\partial t} = \sum R_{s,i} \quad (44)$$

$$\frac{\partial [(1 - \epsilon_p) \rho_s c_{p_s} T_s]}{\partial t} = \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + s_{por} h_{gs} (T_g - T_s) + \sum (R_{s,i} \Delta_r H_{s,i}) + Q_{ray} \quad (45)$$

$$\frac{\partial [(1 - \epsilon_p) \rho_s Y_{s,i}]}{\partial t} = R_{s,i} \quad (46)$$

avec λ_s la conductivité thermique du solide, $\Delta_r H_{s,i}$ la chaleur de la réaction hétérogène i et Q_{ray} la contribution du transfert de chaleur par rayonnement.

L'évolution de la morphologie de la particule est décrite par le changement de la porosité [86] :

$$\frac{\partial \epsilon_p}{\partial t} = \frac{M_s \sum R_{s,i}}{\rho_s \delta} \quad (47)$$

avec M_s la masse molaire du solide et δ la longueur caractéristique des pores.

Il en résulte ainsi $5 + i_s + i_g$ équations à dérivées partielles non linéaires (plus l'équation des gaz parfaits et l'expression de la vitesse des gaz) à résoudre pour décrire la conversion thermique d'une particule. Ce système d'équations peut être simplifié si le gaz et le solide sont considérés à l'équilibre thermique et/ou si le transfert thermique radiatif est négligé.

3.1.2 Conversion thermique d'un lit de particules

Les gaz dégagés pendant le séchage, la dévolatilisation et la combustion hétérogène, ainsi que l'air primaire arrivent dans les espaces vides existant entre les particules qui forment le lit. De plus, la présence de l'air primaire peut favoriser le déclenchement des réactions homogènes dans ces espaces. Donc, pour modéliser la conversion thermique d'un lit de particules il faut décrire le transport du gaz entre les particules solides et également le mouvement de ces particules. Généralement le comportement du lit est assimilé à un milieu poreux caractérisé par les interactions solide-gaz et par une porosité ϵ_l . Ce qui correspond à l'approche Eulérienne⁴. Ainsi, les équations bilan pour la phase gazeuse sont :

- la continuité :

$$\frac{\partial (\epsilon_l \rho_g)}{\partial t} + \nabla (\epsilon_l \rho_g \vec{u}_g) = - \sum R_{s,i} \quad (48)$$

- la quantité du mouvement :

$$\frac{\partial (\epsilon_l \rho_g \vec{u}_g)}{\partial t} = -\nabla p + F(\vec{u}_g) \quad (49)$$

Le terme $F(\vec{u}_g)$ tient compte du régime d'écoulement dans un milieu poreux [86] :

$$F(\vec{u}_g) = \begin{cases} -\frac{\mu_g \vec{u}_g}{\alpha_l} & \text{si } \text{Re} < 10 \text{ (Darcy)} \\ -\frac{\mu_g \vec{u}_g}{\alpha_l} - \frac{\rho_g K |\vec{u}_g| \vec{u}_g}{2} & \text{si } \text{Re} \geq 10 \text{ (Forchheimer)} \end{cases} \quad (50)$$

où le nombre de Reynolds est basé sur $\sqrt{\alpha_l}$, α_l étant la perméabilité du lit et K une constante [86, 105] :

$$\text{Re} = \frac{u_g \sqrt{\alpha_l}}{\nu_g} \quad (51)$$

$$\alpha_l = \frac{d_p^2}{150} \frac{\epsilon_l^3}{(1 - \epsilon_l)^2} \quad (52)$$

$$K = \frac{3,5 (1 - \epsilon_l)}{d_p} \frac{1}{\epsilon_l^3} \quad (53)$$

avec ν_g la viscosité cinématique du gaz ;

- l'énergie :

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\epsilon_l \rho_g c_{p_g} T_g)}{\partial t} + \nabla (\epsilon_l \rho_g \vec{u}_g c_{p_g} T_g) &= \nabla (\epsilon_l \lambda_g \nabla T_g) + s_l h_{gs} (T_s - T_g) + \\ &+ \nabla \sum (\epsilon_l \rho_g c_{p_g,i} T_g D_{i,m} \nabla Y_{g,i}) - \\ &- F(\vec{u}_g) \vec{u}_g + \sum (\epsilon_l R_{g,i} \Delta_r H_{g,i}) - \\ &- \sum \left(R_{s,i} \int_{T_g}^{T_s} c_{p_g,i} dT \right) + Q_{ray} \end{aligned} \quad (54)$$

avec s_l la surface spécifique du lit et $\Delta_r H_{g,i}$ la chaleur de la réaction homogène i ;

4. L'approche Eulérienne consiste à observer le mouvement dans un repère fixe, non lié au milieu en mouvement. Dans la modélisation des écoulements diphasiques, un modèle Eulérien utilise deux jeux d'équations différentielles presque symétriques, un pour chaque phase (cf. Dictionnaire de la combustion du GFC).

– le transport des espèces :

$$\frac{\partial (\epsilon_l \rho_g Y_{g,i})}{\partial t} + \nabla (\epsilon_l \rho_g \vec{u}_g Y_{g,i}) = \nabla (\epsilon_l \rho_g D_{i,m} \nabla Y_{g,i}) - R_{s,i} + \epsilon_l R_{g,i} \quad (55)$$

Les équations concernant la phase solide s'écrivent de la même manière :

$$\frac{\partial \rho_{app,s}}{\partial t} + \nabla (\rho_{app,s} \vec{u}_s) = \sum R_{s,i} \quad (56)$$

$$\frac{\partial (\rho_{app,s} \vec{u}_s)}{\partial t} + \nabla (\rho_{app,s} \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\nabla (\bar{\sigma} + \bar{\tau}) + \rho_{app,s} \vec{g} + N \quad (57)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho_{app,s} c_{p_s} T_s)}{\partial t} + \nabla (\rho_{app,s} \vec{u}_s c_{p_s} T_s) = & \nabla (\lambda_s \nabla T_s) + s_l h_{g_s} (T_g - T_s) + \\ & + \sum (R_{s,i} \Delta_r H_{s,i}) + Q_{ray} \end{aligned} \quad (58)$$

$$\frac{\partial (\rho_{app,s} Y_{s,i})}{\partial t} + \nabla (\rho_{app,s} \vec{u}_s Y_{s,i}) = \nabla [D_s \nabla (\rho_{app,s} Y_{s,i})] + R_{s,i} \quad (59)$$

avec la masse volumique apparente du solide :

$$\rho_{app,s} = (1 - \epsilon_l) \rho_s \quad (60)$$

$\bar{\sigma}$ et $\bar{\tau}$ représentent la contrainte normale et le cisaillement. Le coefficient de mélange des particules dans le lit, D_s , et le terme N (qui tient compte du mouvement des particules provoqué par le mécanisme de la grille ou d'autres sources [125]) traduisent le brassage du lit. Yang *et al.* [127] estiment D_s à partir des mesures expérimentales et montrent que ce coefficient dépend des propriétés physiques du combustible, du type de foyer et des conditions de fonctionnement. D'autres études portant sur la description du brassage peuvent être trouvées dans les travaux de Shin et Choi [107] et Ryu *et al.* [101].

En ajoutant l'équation d'état, une relation permettant de décrire l'évolution de la porosité du lit (Sharma [105] en propose plusieurs) et une pour l'évolution de la particule (rétrécissement et/ou masse volumique, selon le régime de conversion) on obtient un système de $7 + i_s + i_g$ équations non linéaires, dont $4 + i_s + i_g$ à dérivées partielles. Des simplifications peuvent être apportées en négligeant la conductivité thermique, la diffusion massique et le rayonnement des gaz, par exemple. Les deux premières hypothèses peuvent être vérifiées à l'aide du nombre de Peclet thermique (Pe_{th}) et le nombre de Peclet relatif au transfert de masse (Pe_m) :

$$Pe_{th} = \frac{\rho_g u_g d_p c_{p_g}}{\lambda_g} \quad (61)$$

et

$$Pe_m = \frac{u_g d_p}{D_{i,m}} \quad (62)$$

Ainsi, si $Pe_{th} \gg 1$, le terme $\nabla (\epsilon_l \lambda_g \nabla T_g)$ peut être négligé. De même, si $Pe_m \gg 1$ le terme $\nabla (\epsilon_l \rho_g D_{i,m} \nabla Y_{g,i})$ devient négligeable devant le transfert de masse par convection.

Enfin, les systèmes d'équations décrivant la conversion du lit et la conversion d'une particule isolée doivent être couplés. Un exemple de couplage est montré par Johansson *et al.* [63]. Néanmoins, ce couplage n'est plus nécessaire lorsque les particules sont considérées thermiquement minces⁵. Ce critère est évalué à l'aide du nombre de Biot thermique :

5. C'est-à-dire homogènes en température.

$$\text{Bi}_{th} = \frac{h_{gs} d_p}{2 \lambda_s} \quad (63)$$

Si $\text{Bi}_{th} < 0,1$ le transfert thermique par conduction prévaut devant celui convectif. Dans ce cas la distribution de température au sein de la particule peut être donc considérée homogène. Bryden *et al.* [29] utilisent pour le calcul du Bi_{th} un coefficient de transfert convectif effectif, qui prend en compte le transfert thermique radiatif. Thunman *et al.* [111] tiennent compte de l'effet de l'écoulement de Stefan dans le calcul du coefficient effectif de transfert de chaleur par convection. Dans ces conditions, l'hypothèse de la particule thermiquement mince peut être acceptée si $\text{Bi}_{th} < 0,2$ [22].

3.1.3 Phase gazeuse

Les gaz dégagés lors de la conversion thermique du lit réagissent avec l'air secondaire fourni au-dessus du lit de combustible. La simulation de la phase gaz en dehors du lit revient donc à la résolution des équations de la mécanique des fluides pour un écoulement réactif monophasique :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (64)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] + \rho g_i + S_u \quad (65)$$

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j H}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{ig} \left(h_{ig} \rho D_{i,m} \frac{\partial Y_{ig}}{\partial x_j} \right) + u_i \tau_{ij} \right] + Q_{ray} + S_H \quad (66)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{ig}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_{ig}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{i,m} \frac{\partial Y_{ig}}{\partial x_j} \right) + R_{ig} \quad (67)$$

plus l'équation d'état :

$$p = \rho R T \sum_{ig} \frac{Y_{ig}}{M_{ig}} \quad (68)$$

avec :

- δ_{ij} le tenseur de Kronecker (si $i = j$, $\delta_{ij} = 1$ et si $i \neq j$, $\delta_{ij} = 0$) ;
- H l'enthalpie totale :

$$H = h + \sum_{ig} h_{f_{ig}}^o Y_{ig} + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (69)$$

- où $h_{f_{ig}}^o$ est l'enthalpie de formation pour l'espèce ig ;
- h l'enthalpie sensible du mélange :

$$h = \sum_{ig} h_{ig} Y_{ig} \quad (70)$$

où l'enthalpie sensible de l'espèce ig est :

$$h_{ig} = \int_{T_{ref}}^T c_{p_{gi}} dT \quad (71)$$

– τ_{ij} la contrainte visqueuse :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (72)$$

– Q_{ray} la contribution du transfert de chaleur par rayonnement.

Le système formé par les équations 64 - 67 peut être écrit sous une forme condensée :

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho f)}{\partial t}}_{\text{Accumulation}} + \underbrace{\frac{\partial(\rho u_j f)}{\partial x_j}}_{\text{Convection}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Lambda_f \frac{\partial f}{\partial x_j} \right)}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{S_f}_{\text{Source}} \quad (73)$$

avec f donnée dans le Tableau 7.

Tableau 7 - Expressions pour f dans l'équation générale de conservation (ég. 73)

f	Équation	Terme diffusif	Terme source
1	Continuité	0	0
u_x u_y u_z	Quantité du mouvement	Effet de la viscosité	Forces volumiques (pesanteur, force centrifuge, électromagnétique, etc.)
h (ou T)	Énergie	Conduction thermique, dissipation visqueuse, diffusion massique	Effet des forces volumiques, transfert thermique radiatif, chaleur de réaction
Y_i	Transport des espèces	Diffusion massique	Création/destruction due aux réactions chimiques

La résolution directe de ces équations ou la DNS (*Direct Numerical Simulation*) reste encore inaccessible pour les applications concernant la combustion dans des systèmes complexes à cause de la limitation des ressources informatiques. La méthode de résolution la plus répandue consiste à décomposer les grandeurs d'intérêt, telles que la vitesse, la température, etc., en une composante moyenne et une fluctuante :

$$f = \bar{f} + f' \quad (74)$$

avec la composante moyenne :

$$\bar{f} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} f dt \quad (75)$$

et la moyenne de la fluctuation :

$$\bar{f}' = 0 \quad (76)$$

Dans ce cas on parle de la moyenne temporelle ou de la moyenne de Reynolds. Pour les écoulements réactifs, la moyenne pondérée par la masse volumique (ou la moyenne de Favre) est préférée [90] :

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (77)$$

avec :

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} \rho f dt \quad (78)$$

et

$$\tilde{f}'' = 0 \quad (79)$$

Ainsi le système d'équations 64 - 67 devient, pour un écoulement monophasique et incompressible en régime permanent [34, 90] :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (80)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\tau_{ij}} - \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{u}_i'' \right) + \bar{\rho} g_i + \bar{S}_u \quad (81)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{h}'' \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{ig} \overline{h_{ig} \rho D_{i,m} \frac{\partial Y_{ig}}{\partial x_j}} \right) + \\ &= + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}} - \sum_{ig} \overline{h_{f,ig}'' R_{ig}} + \bar{S}_h \end{aligned} \quad (82)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_{ig}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_{i,m} \frac{\partial Y_{ig}}{\partial x_j}} - \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{Y}_{ig}'' \right) - \bar{R}_{ig} \quad (83)$$

avec l'équation de l'énergie écrite pour l'enthalpie sensible. Afin d'assurer la fermeture du système, les termes du type $\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{f}''$ sont approximés [34, 90] :

- le tenseur de Reynolds est approximé à partir de l'hypothèse de Boussinesq par :

$$\overline{\rho u_j'' u_i''} = \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{u}_i'' = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \kappa \quad (84)$$

avec μ_t la viscosité dynamique turbulente et κ l'énergie cinétique de turbulence :

$$\kappa = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \overline{u_k'' u_k''} \quad (85)$$

- le flux turbulent d'enthalpie est donné par :

$$\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{h}'' = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \quad (86)$$

- le flux turbulent pour les espèces s'écrit :

$$\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{Y}_{ig}'' = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_{ig}}{\partial x_j} \quad (87)$$

Les expressions pour la viscosité dynamique turbulente (μ_t) et les nombres de Prandtl (Pr_t) et de Schmidt (Sc_t) turbulents dépendent du modèle de turbulence.

Cette approche de résolution s'appelle la simulation numérique des équation de Navier-Stokes moyennées ou la RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation*). Une autre méthodologie de calcul a été développée afin d'obtenir plus d'informations que la RANS avec les ressources informatiques développées dans les dernières années. Cette méthode propose de

calculer directement les grandes échelles (d'où son nom : la simulation des grandes échelles ou la LES - *Large Eddy Simulation*), qui sont isolées par filtrage spécial [33, 90], et de modéliser les autres échelles. Des résultats encourageants ont été obtenus par Hostikka et McGrattan [59] qui ont utilisé la LES pour simuler la propagation d'un incendie dans une pièce partiellement remplie avec du bois. Néanmoins, l'utilisation de la LES reste encore limitée au niveau de la combustion, toujours à cause de la puissance de calcul demandée, ce qui fait que la RANS soit préférée, bien qu'elle ne puisse pas fournir autant d'informations que la DNS ou la LES. Ces approches de résolution sont intégrées dans des codes de mécanique des fluides numérique ou CFD (Computational Fluid Dynamics) comme Fluent, StarCD, Saturne ou OpenFoam par exemple. Ces codes de calcul utilisent la méthode des volumes finis pour la résolution, avec des méthodes appropriées de discrétisation des équations différentielles. Ces codes ont été conçus au départ pour la résolution des écoulements des fluides et donc ils ne traitent pas d'une manière satisfaisante les grosses particules solides (bien que dans la plupart des cas la formulation du milieu poreux et l'approche Lagrangienne⁶ des particules solides existent), même s'ils peuvent être modifiés, dans une certaine limite pour les codes qui font l'objet d'une licence. Par conséquent, la démarche la plus souvent utilisée [27, 61, 83, 104, 110, 126, 127] consiste à modéliser séparément le lit combustible à l'aide d'un code 1D ou 2D et d'importer ensuite les résultats dans un code de CFD (Figure 15). Cette démarche permet d'aboutir à des modèles plus élaborés pour la phase solide.

Une autre voie possible est l'approche Lagrangienne du transport des particules, c'est-à-dire que les équations pour les particules solides sont résolues par un code de CFD sous leurs formes Lagrangiennes, ce qui permet un traitement individuel des particules, sachant que pour la phase gaz la résolution se fait en utilisant l'écriture Eulérienne. Bien que cette approche convienne mieux, il faut qu'elle soit abordée avec précaution car la plupart des codes de calcul ne traitent pas les interactions entre les particules solides, notamment les collisions ; de plus, les codes doivent être adaptés/modifiés en fonction de la nature du combustible (bois, déchets, paille, etc.) s'il ne s'agit pas du charbon.

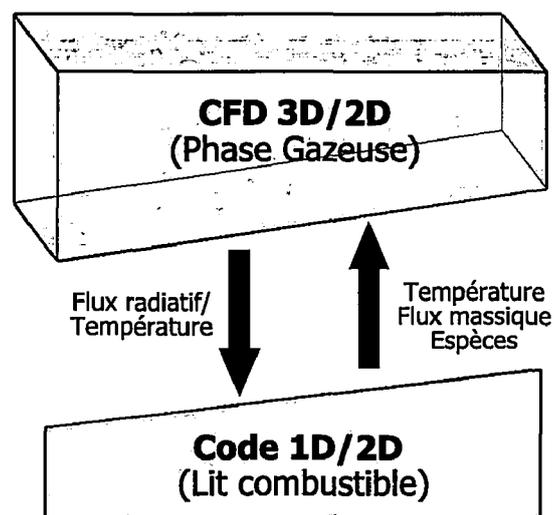


Figure 15 – Couplage CFD - Codes 1D/2D

Pour conclure, la plupart des études sur la modélisation de la combustion du bois ont été menées en utilisant la RANS. Les démarches consistent soit à traiter séparément la phase

6. L'approche Lagrangienne consiste à observer le mouvement dans un repère qui suit ce mouvement. Dans la modélisation des écoulements diphasiques, un modèle Lagrangien utilise les équations de Navier-Stokes pour la phase continue et un suivi de mouvement d'un certain nombre d'inclusions représentant la phase dispersée (cf. Dictionnaire de la combustion du GFC).

solide et la phase gazeuse, ce qui permet d'aboutir à des modèles plus élaborés pour la phase solide, soit à modéliser l'ensemble des phénomènes dans un seul calcul.

Dans le cadre de notre travail, l'approche reposant sur le couplage code CFD - code 2D a été choisie. Les modèles retenus pour la simulation de la phase gazeuse sont présentés dans le paragraphe suivant et le modèle bidimensionnel proposé pour décrire la conversion thermique du lit combustible est discuté dans le dernier paragraphe de ce chapitre. Il faut mentionner ici que, du point de vue chronologique, le travail concernant la simulation numérique a été divisé en deux étapes :

1. Simulation numérique de la phase gazeuse ;
2. Développement du modèle pour la phase solide.

Afin d'achever la première étape, la température, le flux massique et les concentrations des gaz au niveau de la surface du lit combustible ont été nécessaires. Ces distributions ont été obtenues à partir de l'approche proposée par Huttunen *et al.* [61]. La deuxième étape est en cours de développement, par conséquent le couplage avec le code CFD n'est pas réalisé.

3.2 Modélisation de la combustion en phase gazeuse

Les simulations numériques de la combustion homogène ont été réalisées à l'aide du code de calcul Fluent, qui utilise la méthode des volumes finis pour la discrétisation des équations de conservation à dérivées partielles [85, 117]. Pour l'approche RANS en régime permanent et pour un écoulement monophasique, incompressible et réactif, le code Fluent résout les équations moyennées⁷ écrites sous la forme suivante :

- continuité :

$$\nabla (\rho \vec{u}) = 0 \quad (88)$$

- quantité du mouvement :

$$\nabla (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla (\overline{\tau_{eff}}) + \rho \vec{g} \quad (89)$$

- énergie :

$$\nabla (\rho \vec{u} h) = \nabla \left[\lambda_{eff} \nabla T + \sum_{ig} (h_{ig} D_{eff} \nabla Y_{ig}) + (\overline{\tau_{eff}} \vec{u}) \right] - \sum_{ig} (h_{f,ig}^o R_{ig}) + Q_{ray} \quad (90)$$

- transport des espèces :

$$\nabla (\rho \vec{u} Y_{ig}) = \nabla (D_{eff} \nabla Y_{ig}) + R_{ig} \quad (91)$$

et la loi des gaz parfaits :

$$\rho = \frac{p}{R T \sum_{ig} \left(\frac{Y_{ig}}{M_{ig}} \right)} \quad (92)$$

7. Afin de faciliter l'écriture, les symboles $\tilde{}$ et $\bar{}$ désignant les grandeurs moyennées n'apparaîtront plus à partir de ce point.

avec λ_{eff} et D_{eff} la conductivité thermique et le coefficient de diffusion massique effectifs donnés par :

$$\lambda_{eff} = \lambda + \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \quad (93)$$

et

$$D_{eff} = \rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (94)$$

Les expressions pour la contrainte visqueuse effective ($\overline{\tau_{eff}}$), la viscosité dynamique turbulente (μ_t) et les nombres de Prandtl (Pr_t) et de Schmidt (Sc_t) turbulents sont liées au modèle de turbulence.

On note que l'équation de l'équation de l'énergie (éq. 90) est écrite pour l'enthalpie sensible, car la contribution de l'énergie cinétique est considérée négligeable dans les écoulements réactifs incompressibles. Également, l'énergie apportée par la dissipation visqueuse est négligeable devant celle due aux réactions de combustion. Par conséquent, le terme $\overline{\tau_{eff}} \vec{u}$ ne sera pas pris en compte.

Les propriétés thermophysiques pour les espèces, et donc pour le mélange gazeux, sont données en fonction de la température. Ainsi la chaleur spécifique pour l'espèce i est donnée sous forme polynomiale pour plusieurs intervalles de température :

$$c_{p_{ig}} = \begin{cases} a_{1,ig} + a_{2,ig} T + a_{3,ig} T^2 + \dots & \text{si } T_{min} \leq T < T_{max,1} \\ A_{1,ig} + A_{2,ig} T + A_{3,ig} T^2 + \dots & \text{si } T_{max,1} \leq T < T_{max,2} \\ \vdots & \vdots \end{cases} \quad (95)$$

Les coefficients a_{ig} (et A_{ig}) sont donnés dans la littérature [50, 68, 114] ou peuvent être importés directement dans le code Fluent à partir de fichiers en format Chemkin. Ainsi, la chaleur spécifique, exprimée en J/mol K, de l'espèce ig est calculée selon :

$$\frac{c_{p_{ig}}}{R} = \begin{cases} a_{1,ig} + a_{2,ig} T + a_{3,ig} T^2 + a_{4,ig} T^3 + a_{5,ig} T^4 & \text{si } 300 \text{ K} \leq T < 1000 \text{ K} \\ A_{1,ig} + A_{2,ig} T + A_{3,ig} T^2 + A_{4,ig} T^3 + A_{5,ig} T^4 & \text{si } 1000 \text{ K} \leq T < 5000 \text{ K} \end{cases} \quad (96)$$

avec les coefficients polynomiaux obtenus à partir du mécanisme GRI-MechTM 3.0 [3] et donnés dans l'Annexe A, page 119. La chaleur spécifique du mélange est :

$$c_p = \sum_{ig} c_{p_{ig}} Y_{ig} \quad (97)$$

La viscosité dynamique de l'espèce ig est calculée à partir de la théorie cinétique des gaz [68] :

$$\mu_{ig} = 2,67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_{ig} T}}{\sigma_{ig}^2 \Omega^{(2,2)}} \quad (98)$$

où σ_{ig} est le paramètre de longueur pour l'espèce ig dans le potentiel Lennard-Jones. L'intégrale de collision peut s'exprimer selon [52, 68] :

$$\Omega^{(2,2)} = A T_r^B + C \exp(D T_r) + E \exp(F T_r) \quad (99)$$

avec les coefficients A, B, C, D, E, F donnés dans le Tableau 8 et la température réduite :

$$T_r = \frac{T}{\epsilon_{L-J_{ig}}/k_B} \quad (100)$$

où $\epsilon_{L-J_{ig}}$ est le paramètre d'énergie pour l'espèce ig dans le potentiel Lennard-Jones et k_B la constante de Boltzmann. Les rapports $\epsilon_{L-J_{ig}}/k_B$ sont pris du mécanisme GRI-MechTM 3.0 [3] et donnés dans l'Annexe A, page 119. La viscosité dynamique du mélange est alors :

$$\mu = \sum_{ig} \frac{X_{ig} \mu_{ig}}{\sum_{jg} X_{ig} \phi_{ig,jg}} \quad (101)$$

où

$$\phi_{ig,jg} = \left[8 \left(1 + \frac{M_{ig}}{M_{jg}} \right) \right]^{1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_{ig}}{\mu_{jg}} \right)^{1/2} \left(\frac{M_{jg}}{M_{ig}} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (102)$$

avec X_{ig} la fraction molaire de l'espèce ig .

Tableau 8 - Coefficients pour le calcul des intégrales de collision [52, 68]

	A	B	C	D	E	F	G	H
$\Omega^{(1,1)}$	1,06036	-0,1561	0,193	-0,47635	1,03587	-1,52996	1,76474	-3,89411
$\Omega^{(2,2)}$	1,16145	-0,14874	0,52487	-0,7732	2,16178	-2,43787	-	-

La conductivité thermique de l'espèce ig est calculée également à partir de la théorie cinétique des gaz :

$$\lambda_{ig} = \mu_{ig} \left(c_{p_{ig}} + \frac{5}{4} \frac{R}{M_{ig}} \right) \quad (103)$$

Pour le mélange on a :

$$\lambda = \sum_{ig} \frac{X_{ig} \lambda_{ig}}{\sum_{jg} X_{ig} \phi_{ig,jg}} \quad (104)$$

Dans le même esprit, le coefficient de diffusion massique de l'espèce ig dans l'espèce jg est calculé à partir de la relation suivante [52, 68] :

$$D_{ig,jg} = 0,001858 \frac{\left[T^3 \frac{M_{ig} + M_{jg}}{M_{ig} M_{jg}} \right]^{1/2}}{p \sigma_{ig,jg} \Omega^{(1,1)}} \quad (105)$$

avec :

$$\sigma_{ig,jg} = \frac{\sigma_{ig} + \sigma_{jg}}{2} \quad (106)$$

et :

$$\Omega^{(1,1)} = A T_r^B + C \exp(D T_r) + E \exp(F T_r) + G \exp(H T_r) \quad (107)$$

où :

$$T_r = \frac{T}{\epsilon_{L-J_{ig,jg}}/k_B} \quad (108)$$

et :

$$\epsilon_{L-J_{ig,jg}} = \sqrt{\epsilon_{L-J_{ig}} \epsilon_{L-J_{jg}}} \quad (109)$$

Les coefficients pour le calcul de $\Omega^{(1,1)}$ sont donnés dans le Tableau 8. Finalement, le coefficient de diffusion massique de l'espèce ig dans le mélange est donné par :

$$D_{i,m} = \frac{1 - X_{ig}}{\sum_{jg, jg \neq ig} (X_{jg}/D_{ig,jg})} \quad (110)$$

Revenant au système d'équations 88 - 92, il reste à expliciter la contrainte visqueuse effective (et implicitement la viscosité turbulente), les termes sources dus aux réactions de combustion homogène et au transfert thermique radiatif.

3.2.1 Modèle « κ - ϵ Realizable »

En ce qui concerne la turbulence, le code Fluent propose plusieurs modèles RANS pour la combustion, tel que la classe κ - ϵ (Standard, RNG ou Realizable) ou RSM (*Reynolds Stress Model*). Ce dernier convient pour des écoulements à forte rotation (comme dans le cas des brûleurs de CP à swirl). Les modèles κ - ϵ sont les plus utilisés pour décrire les écoulements turbulents réactifs. Les formalismes de ces modèles sont traités en détails ailleurs [34, 49, 53, 69, 90, 106, 117, 124] ; ici on se limite à présenter seulement le modèle κ - ϵ Realizable, qui a été choisi suite à une étude précédente [48]. Ainsi, l'expression de la viscosité turbulente est donnée par la relation de Prandtl - Kolmogorov :

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (111)$$

La contrainte visqueuse effective est dans ce cas :

$$\tau_{ijeff} = \mu_{eff} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (112)$$

avec la viscosité dynamique effective :

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (113)$$

Afin de déterminer l'énergie cinétique turbulente (κ) et son taux de dissipation (ϵ), deux équations de conservation supplémentaires sont introduites :

$$\frac{\partial (\rho \kappa u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + G_\kappa + G_b - \rho \epsilon \quad (114)$$

et

$$\frac{\partial (\rho \epsilon u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho \epsilon C_1 S - \rho C_2 \left(\frac{\epsilon^2}{\kappa + \sqrt{\nu \epsilon}} \right) \quad (115)$$

où

$$C_1 = \max \left(0, 43 ; \frac{\eta}{\eta + 5} \right) , \eta = S \frac{\kappa}{\epsilon} \text{ et } S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (116)$$

avec :

– S_{ij} le tenseur de déformations :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (117)$$

– G_κ la génération d'énergie cinétique turbulente :

$$G_\kappa = \mu_t S^2 \quad (118)$$

– G_b la production de turbulence due aux forces thermo-gravitationnelles :

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (119)$$

où g_i est la composante de la pesanteur sur la direction i et β le coefficient d'expansion thermique :

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (120)$$

C_μ est calculé à partir de la relation suivante :

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{\kappa}{\epsilon} \sqrt{S_{ij} S_{ij} + \hat{\Omega}_{ij} \hat{\Omega}_{ij}}} \quad (121)$$

avec :

$$A_s = \sqrt{6} \cos \phi \quad (122)$$

où

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1} \left(\sqrt{6} W \right) , W = \frac{S_{ij} S_{jk} S_{ki}}{\hat{S}^3} \text{ et } \hat{S} = \sqrt{S_{ij} S_{ij}} \quad (123)$$

A_0 est une constante et $\hat{\Omega}_{ij}$ le taux moyen de rotation vu à partir d'un repère tournant à une vitesse angulaire ω . Les constantes du modèle sont données dans le Tableau 9.

Tableau 9 - Constantes du modèle « κ - ϵ Realizable » [49]

A_0	C_2	Pr_t	Sc_t	σ_κ	σ_ϵ
4,04	1,90	0,85	0,70	1,00	1,20

3.2.2 Modèle de « Eddy Dissipation Concept »

Plusieurs approches existent pour modéliser la cinétique chimique. La plus simple repose sur la loi d'Arrhenius et elle ne tient donc pas compte de l'interaction chimie - turbulence. Magnussen et Hjerteger [77] proposent un modèle de cinétique basé sur la turbulence (le modèle d'*Eddy Dissipation* en anglais). L'avantage de celui-ci est qu'il demande moins de temps de calcul par rapport au premier, mais il est limité à des mécanismes réactionnels globaux, car la vitesse de réaction est la même pour toutes les réactions. À partir de ce modèle, un autre (appelé *Eddy Dissipation Concept* ou EDC) a été développé [76, 78], qui permet de modéliser des mécanismes cinétiques détaillés (avec les vitesses de réaction gouvernées par la loi d'Arrhenius) en tenant compte de l'effet de la turbulence. L'inconvénient majeur de ce modèle est, vu la taille des mécanismes détaillés, le temps de calcul requis. Ce problème est évité par les approches statistiques, qui utilisent une fonction de densité de probabilité (*Probabilistic Density Function* ou PDF) [30, 34, 90]. L'approche PDF permet de tabuler la cinétique chimique, en réduisant ainsi considérablement le temps de calcul, mais elle est implémentée dans le code de calcul sous les hypothèses des réactions à l'équilibre et de diffusion turbulente identique pour toutes les composantes du mélange gazeux. La dernière supposition se traduit par un nombre de Lewis égal à l'unité pour toutes les espèces :

$$Le_{ig} = \frac{\lambda}{\rho c_p D_{i,m}} = 1 \quad (124)$$

Cependant, ces hypothèses ne sont pas toujours vérifiées, notamment dans le cas de la formation/destruction des NO_x ou du CO. Par conséquent, bien que le modèle PDF semble le plus attirant, le choix a été fait entre les trois premiers modèles. Ainsi, le modèle EDC a été retenu suite à une étude précédente [48]. Le formalisme du modèle EDC est présenté ci-dessous.

Pour une réaction chimique réversible :

$$\sum_{ig=1}^N \nu'_{ig,r} A_{ig} \xrightleftharpoons[k_{b,r}]{k_{d,r}} \sum_{ig=1}^N \nu''_{ig,r} A_{ig} \quad (125)$$

la vitesse de réaction (exprimée en $\text{mol/m}^3 \text{ s}$) s'écrit :

$$R_{ig,r} = Z (\nu''_{ig,r} - \nu'_{ig,r}) \left(k_{d,r} \prod_{jg=1}^N C_{jg,r}^{\eta'_{jg,r}} - k_{b,r} \prod_{jg=1}^N C_{jg,r}^{\nu''_{jg,r}} \right) \quad (126)$$

avec :

- N le nombre total d'espèces ;
- $\nu'_{ig,r}$ le coefficient stœchiométrique du réactant ig dans la réaction r ;
- $\nu''_{ig,r}$ le coefficient stœchiométrique du produit ig dans la réaction r ;
- A_{ig} symbole désignant l'espèce ig ;
- $k_{d,r}$ la constante directe de vitesse pour la réaction r ;
- $k_{b,r}$ la constante inverse de vitesse pour la réaction r ;
- $C_{jg,r}$ la concentration molaire de l'espèce jg participant dans la réaction r ;
- $\eta'_{jg,r}$ l'exposant du réactant jg dans la réaction r ;
- Z l'efficacité nette des partenaires de collision :

$$Z = \sum_{jg}^N Z_{jg,r} C_{jg} \quad (127)$$

ou $Z_{jg,r}$ est l'efficacité du partenaire de collision jg dans la réaction r et C_{jg} la concentration molaire du partenaire de collision.

La constante directe de vitesse pour la réaction r est donnée par la loi d'Arrhenius :

$$k_{d,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-\frac{E_{a,r}}{RT}} \quad (128)$$

avec A_r le facteur pré-exponentiel, β_r l'exposant de la température et $E_{a,r}$ l'énergie d'activation pour la réaction r . Lorsqu'elles ne sont pas fournies les constantes inverses sont calculées à partir de celles directes selon :

$$\frac{k_{d,r}}{k_{b,r}} = \exp\left(\frac{\Delta S_r^o}{R} - \frac{\Delta H_r^o}{RT}\right) \left(\frac{p_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{ig=1}^N (\nu''_{ig,r} - \nu'_{ig,r})} \quad (129)$$

où :

$$\frac{\Delta S_r^o}{R} = \sum_{ig=1}^N (\nu''_{ig,r} - \nu'_{ig,r}) \frac{S_{ig}^o}{R} \quad (130)$$

et

$$\frac{\Delta H_r^o}{RT} = \sum_{ig=1}^N (\nu''_{ig,r} - \nu'_{ig,r}) \frac{h_{f,ig}^o}{RT} \quad (131)$$

avec S_{ig}^o l'entropie à l'état standard (298,15 K et 101325 Pa) et $h_{f,ig}^o$ l'enthalpie de formation de l'espèce ig .

La cinétique chimique se déroule à l'échelle moléculaire, ce qui correspond, dans un écoulement turbulent, à l'échelle des petites structures turbulentes (ou échelle de Kolmogorov). Dans le cadre du modèle EDC les réactions sont supposées avoir lieu seulement dans ces petites structures. La fraction de l'écoulement occupée par les structures fines est selon Gran et Magnussen [54] :

$$l^* = \left(\frac{3 c_1}{4 c_2^2}\right)^{1/4} \left(\frac{\nu \epsilon}{\kappa^2}\right) \quad (132)$$

avec $c_1 = 0,134$ et $c_2 = 0,5$ les constantes du modèle et ν la viscosité cinématique, où le symbole * désigne les grandeurs relatives aux structures fines. La fraction volumique de ces structures est donnée par l^{*3} . L'échelle temporelle caractéristique du transfert de masse entre les structures fines et leur environ s'écrit [54] :

$$\tau^* = \left(\frac{c_2}{3}\right)^{1/2} \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \quad (133)$$

Les réactions de combustion dans les structures fines ont lieu à pression constante et se déroulent sur la durée τ^* selon la loi d'Arrhenius (eq. 128). La cinétique chimique est intégrée numériquement (découplée des autres équations, c'est-à-dire eqs. 88 - 92, page 37) en utilisant l'algorithme ISAT (*In-Situ Adaptive Tabulation* [91]). Cette technique repose sur la création d'un tableau dynamique au cours du calcul (*in-situ*) des autres équations (c'est-à-dire eqs. 88 - 92). Ce tableau est utilisé pour stocker les résultats de l'intégration de la cinétique chimique. Ainsi, au début de la simulation numérique, le tableau dynamique étant vide, la cinétique chimique est calculée par intégration directe (ce processus est lourd, les ressources informatiques nécessaires sont directement proportionnelles à la taille du mécanisme cinétique). Chaque intégration représente un point d'entrée dans le tableau dynamique. Avant de démarrer un nouveau calcul de la cinétique chimique, une interrogation du tableau se fait

et si les paramètres thermochimiques fournis par les équations de transport (éqs. 88 - 92) se trouvent entre les valeurs déjà stockées dans le tableau, une interpolation est effectuée à la place de l'intégration, ce qui réduit le temps de calcul. Dans le cas contraire une nouvelle intégration de la cinétique chimique est réalisée.

Enfin, l'expression du terme source dans l'équation de transport pour l'espèce ig (eq. 91) est :

$$R_{ig} = \frac{\rho l^{*2}}{\tau^* (1 - l^{*3})} (Y_{ig}^* - Y_{ig}) \quad (134)$$

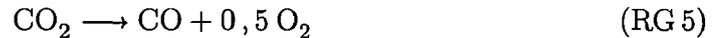
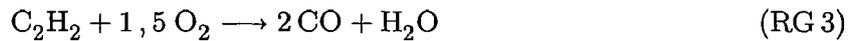
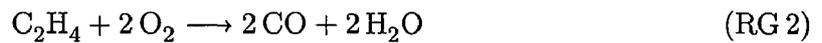
avec Y_{ig}^* la fraction massique de l'espèce ig dans la structure fine à la fin des réactions.

Mécanismes cinétiques

Comme mentionné dans le paragraphe 2.2, page 18, la précision du calcul de la distribution des espèces chimiques dépend du mécanisme réactionnel. La majorité des travaux concernant la modélisation de la combustion des solides dans des installations industrielles ou semi-industrielles, en utilisant le modèle ED ou EDC, font appel à une cinétique chimique simplifiée (entre deux et six réactions) ; on peut citer comme exemples les travaux suivants [46, 51, 61, 63, 66, 73, 83, 101, 107, 125, 126, 129]. Cependant, cette approche n'est pas capable de reproduire d'une manière satisfaisante la formation/destruction de certains polluants, tels que les NO_x ou le CO. Afin d'étudier l'effet de la cinétique chimique, deux mécanismes réactionnels ont été choisis dans un premier temps :

- un mécanisme semi-global à six réactions et 9 espèces ;
- un mécanisme réduit à 40 réactions et 17 espèces.

Le mécanisme semi-global comporte les réactions suivantes :



Les vitesses de réaction (exprimées en $\text{mol}/\text{m}^3 \text{ s}$) sont calculées à partir de :

$$R_g = A e^{-\frac{E_a}{RT}} [\text{Combustible}]^a [\text{O}_2]^b \quad (135)$$

avec les paramètres de réaction donnés dans le Tableau 10. La réaction RG 4 est influencée par la concentration de vapeur d'eau, dans ce cas la vitesse de réaction s'écrit :

$$R_{RG4} = A e^{-\frac{E_a}{RT}} [\text{CO}]^a [\text{O}_2]^b [\text{H}_2\text{O}]^c \quad (136)$$

avec A , E_a , a et b données dans le Tableau 10 et $c = 0,5$ [36, 113].

Tableau 10 – Paramètres de réaction pour le mécanisme semi-global

Réaction	A	E_a (J/kmol)	a	b	Réfs.
RG 1	$1,50 \times 10^{08}$	$2,008 \times 10^8$	0,7	0,80	[44, 113]
RG 2	$7,50 \times 10^{07}$	$1,247 \times 10^7$	0,1	1,65	[113, 114]
RG 3	$2,46 \times 10^{08}$	$1,247 \times 10^7$	0,5	1,25	[113]
RG 4	$1,30 \times 10^{08}$	$1,255 \times 10^8$	1,0	0,50	[36, 113]
RG 5	$7,50 \times 10^{08}$	$3,866 \times 10^8$	1,0	–	[36]
RG 6	$1,00 \times 10^{11}$	$4,198 \times 10^7$	1,0	1,00	[63, 73]

Le mécanisme cinétique réduit (ci-après désigné par KM) a été déterminé à partir du mécanisme détaillé de Dagaut *et al.* [37]. Ainsi, un système de 40 réactions élémentaires et 17 espèces, comprenant le schéma réactionnel $H_2/CO/O_2$ complet, a été déduit. La constante de vitesse est donnée dans ce cas par l'équation 128, page 43. Les réactions ainsi que leurs paramètres sont listés dans le Tableau 26 (Cf. Annexe B, page 125).

En général, la validation d'un mécanisme cinétique réduit est laborieuse, car elle demande une analyse de sensibilité de chaque espèce et réaction présentes dans le mécanisme détaillé de départ et négligées dans le mécanisme réduit. Par conséquent, un autre mécanisme réduit, proposé par Leroy *et al.* [71] a été identifié dans la littérature. Ce mécanisme (ci-après désigné par LE) a été déjà soumis à cette étape de validation. L'inconvénient de ce mécanisme est le nombre supérieur d'espèces et réactions (22 espèces et 49 réactions), sachant que le code de calcul CFD introduit une nouvelle équation de transport pour chaque espèce supplémentaire, ce qui augmente d'une manière significative le temps de calcul. Afin de l'évaluer, le mécanisme KM a été confronté au schéma réactionnel LE (Tableau 27, cf. Annexe B, page 126). Les résultats sont présentés dans le Chapitre 5, page 106.

3.2.3 Modèle de rayonnement : P-1

L'aspect phénoménologique du transfert de chaleur par rayonnement rend difficile sa résolution numérique. Les problématiques et la théorie concernant la modélisation du transfert thermique radiatif sont disponibles dans la littérature [32, 35, 60, 108, 118, 119]. Le modèle P-1, qui repose sur la méthode des harmoniques sphériques [108, 119], a été retenu ici en raison de sa robustesse et du temps de calcul requis.

Dans le cadre du modèle P-1, le flux de chaleur radiatif s'exprime :

$$q_r = -\frac{1}{3(a + \sigma_s)} \nabla G \quad (137)$$

où a est le coefficient d'absorption, σ_s le coefficient de diffusion et G le rayonnement incident. L'équation de transport pour G est :

$$\nabla q_r + a(4\sigma_b T^4 - G) = 0 \quad (138)$$

avec σ_b la constante de Stefan-Boltzmann. L'équation 138 est utilisée pour calculer l'intensité locale de rayonnement. Le terme source, Q_{ray} , dans l'équation de conservation d'énergie (eq. 90, page 37) est dans ce cas :

$$Q_{ray} = -\nabla q_r = a(G - 4\sigma_b T^4) \quad (139)$$

Le coefficient d'absorption est déterminé à l'aide du modèle dit de la somme pondérée des gaz gris [41] (*Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model* ou WSGGM), qui calcule ce coefficient à partir de la composition chimique du mélange des gaz et des coefficients d'absorption de chaque espèce. Les derniers sont déterminés en fonction de la température et des pressions

partielles de H_2O et CO_2 . Les gaz diatomiques, tels que N_2 , O_2 , H_2 , etc. sont transparents au rayonnement infrarouge et par conséquent leur contribution est négligée. Également, l'effet de la diffusion peut être négligé [45].

3.2.4 Conclusions

Pour conclure, les équations à dérivées partielles (éqs. 88 - 91, page 37 et 114 - 115, page 40), la loi des gaz parfaits (éq. 92, page 37), les relations pour le calcul des propriétés thermophysiques (éqs. 96 - 109) et la méthodologie adoptée concernant la cinétique chimique permettent de calculer la vitesse, la température, les fractions massiques et la masse volumique des gaz. Une relation supplémentaire est introduite pour déterminer la pression en la reliant avec la vitesse. Un état de l'art sur les méthodes de couplage pression - vitesse peut être trouvé dans les travaux de Patankar [85] ou Versteeg et Malalasekera [117]. Dans le cadre de notre travail, l'algorithme SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) a été choisi pour sa rapidité et sa robustesse [45].

Finalement, la précision du calcul dépend du schéma de discrétisation employé [85, 117]. Le schéma amont de deuxième ordre a été choisi, car il offre un bon compromis entre la précision et le temps de calcul.

3.3 Modélisation de la combustion d'un lit de particules

Comme mentionné précédemment, le flux massique, la température et les concentrations des gaz au niveau de la surface du lit combustible ont été obtenus, dans un premier temps, à partir de l'approche proposée par Huttunen *et al.* [61], qui est décrite ci-après.

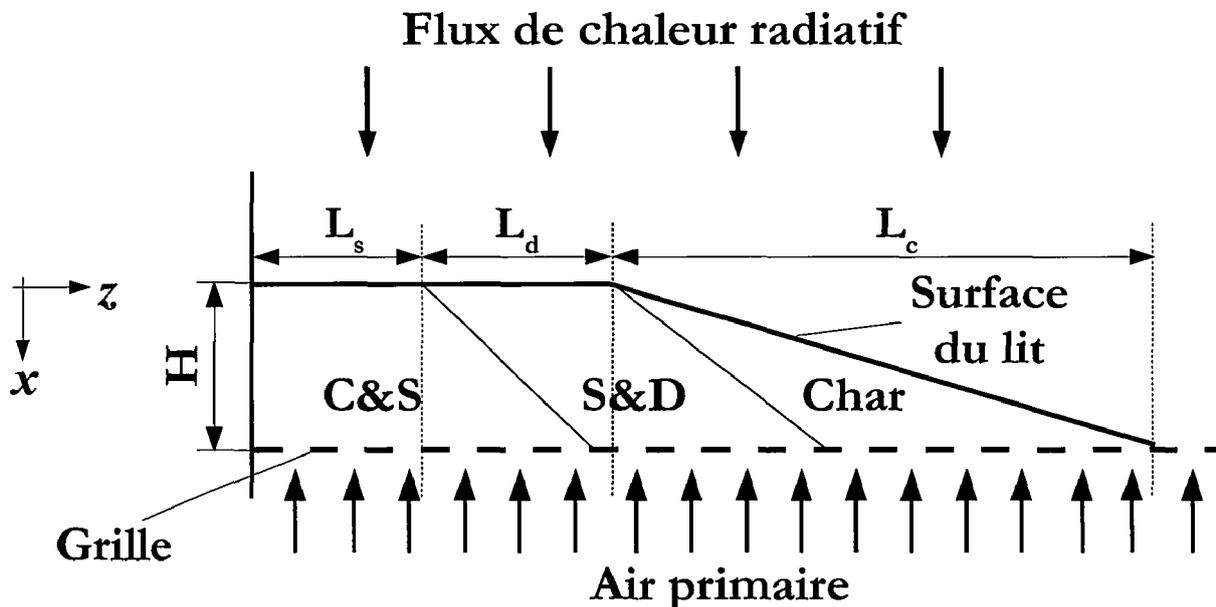


Figure 16 – Disposition des différentes zones de conversion thermique au sein d'un lit de particules. C&S - zone de chauffage et séchage; S&D - zone de séchage et dévotilisation; Char - zone de combustion du résidu carboné. Le combustible rentre par la gauche

Les différentes étapes de la conversion thermique du lit combustible sont illustrées dans la Figure 16. Les particules de bois rentrant dans le foyer sont chauffées et séchées (zone C&S) principalement par transfert thermique radiatif. Le mélange gazeux quittant la surface du lit au long de la zone de séchage est composé de la vapeur et de l'air primaire, fourni en dessous de la grille. Le front de séchage avance également selon la hauteur du lit combustible (qui

est constante durant cette étape) et une couche de bois séché - d'épaisseur δ_s - va se former. Par conséquent, la chaleur fournie par rayonnement à la surface du lit est transmise par conduction thermique à travers la couche de bois sec afin d'assurer le séchage du combustible humide qui se trouve sous cette couche, ce qui se traduit par la formulation suivante :

$$\rho_{sec} H_s R_{vap} \frac{d\delta_s}{dt} = \frac{\lambda_{sec}}{\delta} (T_s - T_{vap}) = q_{rad} \quad (140)$$

où ρ_{sec} est la masse volumique du bois sec ; H_s l'humidité sur sec ; r_{vap} la chaleur latente de vaporisation ; δ_s l'épaisseur de la couche de bois sec ; λ_{sec} la conductivité thermique du bois sec ; T_s la température de la surface du lit ; $T_{vap}=100$ °C la température de vaporisation et q_{rad} le flux de chaleur radiatif. Le premier terme correspond à la quantité de chaleur nécessaire pour le séchage, le deuxième à la conduction thermique et le troisième au flux de chaleur absorbé par rayonnement à la surface du lit. Le flux massique de vapeur libérée peut s'exprimer par :

$$m''_{vap} = \rho_{app,s} H_s w_{gr} \frac{d\delta_s}{dz} \quad (141)$$

avec w_{gr} la vitesse de la grille. La longueur de séchage, L_s , est obtenue à partir de la condition $T_s(z) = T_{allum}$. Une fois la température d'allumage, T_{allum} , atteinte, le dégagement des matières volatiles commence (zone S&D, cf. Figure 16). Le flux massique des matières volatiles peut s'exprimer en fonction de la vitesse d'allumage, w_{allum} :

$$m''_{vol} = MV \rho_{app,s} w_{allum} \quad (142)$$

avec la quantité de chaleur nécessaire pour la dévolatilisation :

$$q_{vol} = MV m''_{sec} \Delta_r H_{vol} \quad (143)$$

où MV est la fraction massique de matières volatiles, m''_{sec} le flux massique de bois sec et ΔH_{vol} l'énergie de dévolatilisation. L'expression de la vitesse d'allumage (déterminée expérimentalement par Saastamoinen *et al.* [102] dans des fours pilotes à grilles et lits fixes) est :

$$w_{allum} = (0,516 - 0,517 H_s) \left(\frac{d_p}{12,5} \right)^{-0,025} \frac{450}{\rho_{sec} c_{psec}} \frac{2000}{T_{allum} - T_0} \frac{330}{T_{allum} - T_0} \quad (144)$$

avec d_p le diamètre moyen d'une particule de bois (en mm), c_{psec} la chaleur spécifique du combustible sec et T_0 la température initiale du combustible humide. Une partie des matières volatiles est supposée réagir au sein du lit combustible, son expression est donnée par :

$$m''_{vol,react} = \min \left(\frac{\eta m''_{O_2}}{m''_{O_2,st}}, m''_{vol} \right) \quad (145)$$

où m''_{O_2} est le flux massique d'oxygène (dérivé du flux d'air primaire), $\eta = 0,5$ [61] une constante et $m''_{O_2,st}$ l'oxygène nécessaire pour la combustion stœchiométrique des matières volatiles. Au long de la zone de dévolatilisation, la température, le flux massique et les fractions massiques des espèces sont considérés indépendants par rapport à la hauteur (coordonnée z). La longueur de la zone de dévolatilisation peut être estimée par la relation suivante [61] :

$$L_d = H_l \frac{w_{gr}}{w_{allum}} \quad (146)$$

La hauteur du lit, H_l , est considérée constante pendant la dévolatilisation.

La phase de dévolatilisation est suivie par la combustion du résidu carboné (zone Char, cf. Figure 16). Si le temps de séjour est suffisamment long pour que le carbone organique

brûle complètement avant la fin de la grille, une zone occupée par des cendres se formera et sera traversée seulement par le flux d'air primaire. La combustion du résidu carboné est décrite par la réaction suivante :



avec :

$$\gamma = \frac{1}{1 + f} \quad (147)$$

et f le rapport CO/CO_2 (Cf. éq. 32, page 28). Le nombre de moles de CO_2 , selon Huttunen *et al.* [61], a une valeur constante égale à $\gamma = 0,2$. Le modèle du « cœur rétrécissant » est considéré pour le régime de conversion des particules. Dans ce cas la hauteur du lit diminue aussi selon :

$$H_l = H_{l_0} \left(\frac{d_p}{d_{p_0}} \right)^3 \quad (148)$$

où l'indice 0 désigne l'état initial. La variation du taux d'oxygène au sein du lit due à la combustion hétérogène s'écrit :

$$\frac{d(m_g'' Y_{O_2})}{dx} = - \frac{k_{C(s)} S_p Y_{O_2}}{H_l} \quad (149)$$

avec $S_p = 6(1 - \epsilon_l)H_l/d_p$ la surface volumétrique des particules et $k_{C(s)}$ la constante de vitesse effective de la réaction d'oxydation du carbone organique :

$$k_{C(s)} = \frac{1}{\frac{1}{k'_d} + \frac{1}{k_c}} \quad (150)$$

où k'_d et k_c sont les constantes de vitesse de réaction correspondant à la diffusion massique et à la cinétique chimique. Pour une taille moyenne des particules d'environ 20 μm , l'hypothèse du régime diffusionnel (c.-à-d. $1/k_c \rightarrow 0$) peut être acceptée [61]. Ainsi, la constante de vitesse effective devient :

$$k_{C(s)} = k'_d = \frac{3}{4(1 + \gamma)} k_d \quad (151)$$

où k_d est déterminée à partir de l'équation 33, page 28.

Sous l'hypothèse de la variation linéaire du flux massique des gaz [61], c.-à-d. :

$$m_g'' = m_{g_0}'' + m_{C(s)}'' \frac{x}{H_l} \quad (152)$$

la fraction massique d'oxygène à la fin de la zone de combustion hétérogène peut être calculée à partir de :

$$Y_{O_2,s} = k'_{C(s)} Y_{O_2,0} - \frac{1}{2\xi} + \sqrt{\left(k'_{C(s)} Y_{O_2,0} - \frac{1}{2\xi} \right)^2 + k'_{C(s)} Y_{O_2,0} \left(\frac{1}{\xi} - Y_{O_2,0} \right)} \quad (153)$$

avec :

$$\xi = \frac{3}{4(1 + \gamma)} \quad (154)$$

où m''_{g_0} est le flux massique initial des gaz, $m''_{C(s)}$ le flux massique du résidu carboné, $Y_{O_2,0}$ la fraction massique d'oxygène initiale et $k'_{C(s)} = \exp(-k_{C(s)} S_p \rho_g / m''_{g_0})$ avec ρ_g la masse volumique des gaz.

Le profil de température au long du lit ainsi que les fractions massiques des espèces sont estimés à partir du bilan énergétique basé sur la chaleur de vaporisation de l'humidité, les énergies de dévolatilisation et de combustion des matières volatiles et du résidu carboné et le rayonnement absorbé à la surface du lit. Les résultats ainsi obtenus seront utilisés comme données d'entrée dans le code CFD pour le calcul de la phase gazeuse.

On remarque que l'approche décrite ci-dessus ne fait pas appel aux équations de conservation (Cf. paragraphe 3.1.2, page 31), elle est plutôt basée sur des bilans globaux. Par conséquent, cette approche n'est pas capable de décrire l'évolution de la conversion thermique du lit au niveau local, bien qu'elle puisse fournir des résultats acceptables à l'échelle globale (sur l'ensemble du lit). Afin de surmonter cet inconvénient, un autre modèle est proposé ici, qui consiste à résoudre les équations de conservation de masse, d'énergie et d'espèces en deux dimensions (longueur (x) et hauteur (z) du lit, cf. Figure 17, page 50) en utilisant l'approche Eulérienne et sous les hypothèses suivantes :

- régime permanent ;
- porosité du lit constante ;
- effet de l'écoulement de Stefan négligé ;
- conduction thermique des gaz négligeable ;
- diffusion massique des gaz négligeable ;
- rayonnement des gaz négligeable ;
- le phénomène de brassage n'est pas pris en compte ;
- particules thermiquement minces ;
- régime intermédiaire pour la conversion thermique des particules.

Ainsi, en posant :

$$m''_s = \rho_{app,s} \vec{u}_s \quad (155)$$

et :

$$m''_g = \rho_g \vec{u}_g \quad (156)$$

les équations de conservation (prises en compte par le modèle) pour la phase solide (éqs. 56, 58 et 59, page 32) deviennent :

$$\nabla m''_s = \sum_{is} R_{s,i} \quad (157)$$

$$\nabla (m''_s c_{p,s} T_s) = \nabla (\lambda_{eff,s} \nabla T_s) + h_{gs} s_l (T_g - T_s) + \sum_{is} (R_{s,i} \Delta_r H_{s,i}) + Q_{ray} \quad (158)$$

$$\nabla (m''_s Y_{is}) = R_{s,i} \quad (159)$$

De même, les équations pour la phase gazeuse (éqs. 48, 54 et 55, page 31) deviennent :

$$\nabla (\epsilon_l m_g'') = - \sum_{is} R_{s,i} \quad (160)$$

$$\begin{aligned} \nabla (\epsilon_l m_g'' c_{pg} T_g) &= h_{gs} s_l (T_s - T_g) + \sum_{ig} (\epsilon_l R_{g,i} \Delta_r H_{g,i}) - \\ &= - \sum_{ig} R_{s,i} [h_{ig}(T_s) - h_{ig}(T_g)] \end{aligned} \quad (161)$$

$$\nabla (\epsilon_l m_g'' Y_{ig}) = \epsilon_l R_{g,i} - R_{s,i} \quad (162)$$

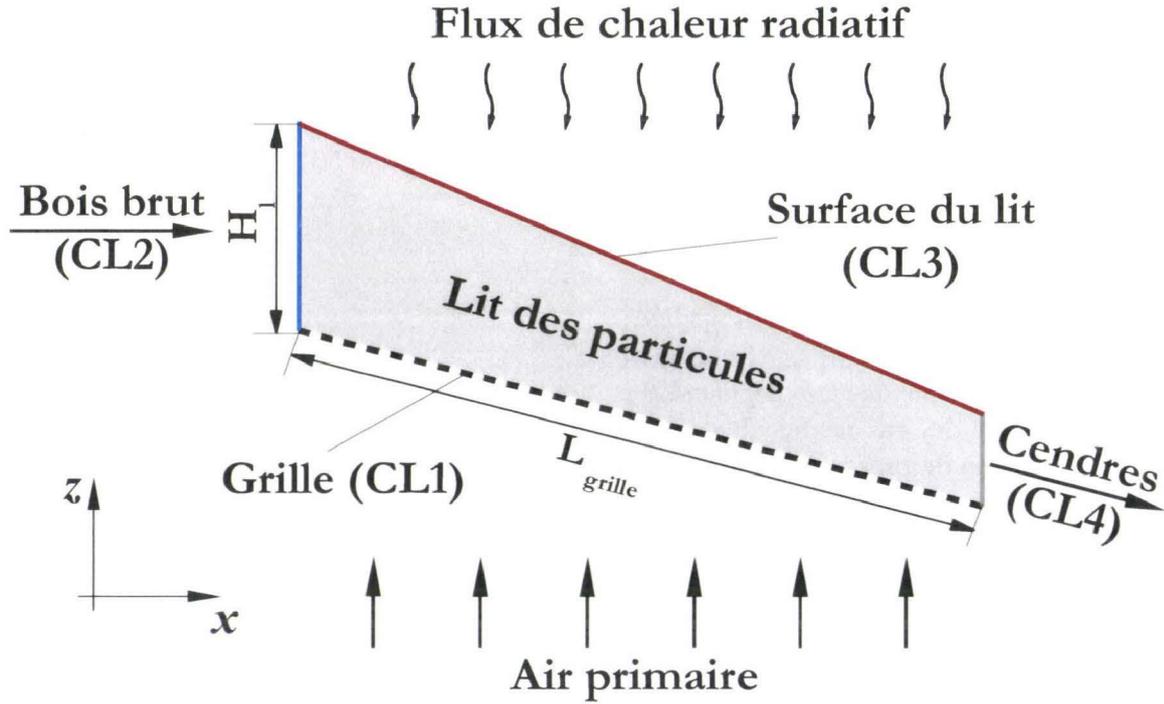


Figure 17 – Géométrie considérée pour le modèle de lit. CL - conditions aux limites

Quatre constituants sont considérés pour la phase solide : humidité, solide sec, résidu carboné et cendres. Le mélange des gaz comporte neuf espèces : H_2O , O_2 , CH_4 , C_2H_4 , C_2H_2 , H_2 , CO_2 , CO et N_2 .

Le terme dû aux réactions hétérogène est :

$$\sum_{is} R_{s,i} = -R_{vap} - R_{dev} (1 - y_{C_{f,sec}}) - R_{C(s)} \quad (163)$$

avec $y_{C_{f,sec}}$ le taux de carbone fixe sur sec, fourni par l'analyse immédiate du combustible.

Le séchage est décrit par la loi d'Arrhenius [29, 46] :

$$R_{vap} = 5,13 \times 10^{10} e^{-\frac{88000}{R T_s}} Y_{H_b} \rho_{app,s} \quad (164)$$

où T_s est la température du solide et Y_{H_b} la fraction massique d'humidité. La chaleur latente de vaporisation est : $L_{vap} = -2440$ kJ/kg.

Le modèle de Balci [86] (Cf. Tableau 5, page 28) est utilisé pour décrire la dévolatilisation. Ainsi, on a :

$$R_{dev} = 1,35 \times 10^9 e^{-\frac{123100}{R T_s}} Y_{sec} \rho_{app,s} \quad (165)$$

avec Y_{sec} la fraction massique de solide sec. La dévolatilisation est considérée comme un processus endothermique avec la chaleur de réaction : $\Delta_r H_{dev} = -4500$ kJ/kg.

L'oxydation du résidu carboné est décrite par la réaction R.14, page 28. Le rapport CO/CO_2 est calculé à partir de la corrélation d'Arthur [58] :

$$f = 2510 e^{-\frac{6240}{T_s}} \quad (166)$$

La constante de vitesse due à la diffusion massique est donnée par [113] :

$$k_d = \frac{Sh D_{O_2,m}}{d_p} \quad (167)$$

avec le nombre de Sherwood [113] :

$$Sh = 2 + 0,6 Re^{0,5} Sc^{1/3} \quad (168)$$

où le nombre de Schmidt est :

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g D_{O_2,m}} \quad (169)$$

et le nombre de Reynolds [5] :

$$Re = \frac{m_g'' d_p}{\mu_g (1 - \epsilon_l)} \quad (170)$$

La masse volumique des gaz, ρ_g , est calculée à partir de l'équation 92, page 37. Les propriétés thermophysiques (Cf. Annexe A) nécessaires pour le calcul de k_d sont déterminées à la pression atmosphérique et à une température moyenne T_m :

$$T_m = \frac{T_s + T_g}{2} \quad (171)$$

avec T_g la température des gaz.

La constante de vitesse due à la cinétique chimique est calculée selon Johansson *et al.* [63] :

$$k_c = 1,175 T_s e^{-\frac{9000}{T_s}} \quad (172)$$

Afin de tenir compte de l'effet de la présence des cendres sur la cinétique d'oxydation, le facteur suivant est introduit [98] :

$$\Omega_{act} = \frac{Y_{C(s)}}{Y_{C(s)} + Y_{cendres}} \quad (173)$$

avec $Y_{C(s)}$ et $Y_{cendres}$ les fractions massiques de résidu carboné et de cendres. Dans ce cas la constante de vitesse s'écrit :

$$k_{C(s)} = \frac{1}{\frac{1}{k_c \Omega_{act}} + \frac{1}{k_d}} \quad (174)$$

Il en résulte pour la vitesse de réaction [113] :

$$R_{C(s)} = \frac{s_l M_C X_{O_2} C_g k_{C(s)}}{\psi} \quad (175)$$

avec la surface spécifique :

$$s_l = \frac{6(1 - \epsilon_l)}{d_p} \quad (176)$$

La concentration molaire des gaz C_g est calculée à partir de la loi des gaz parfaits. La chaleur dégagée lors de l'oxydation du résidu carboné est calculée selon :

$$\begin{aligned} \Delta_r H_{C(s)} &= (2\psi - 1) \left[h_{CO_2}(T_s) - h_{CO_2}(298, 15) + h_{f_{CO_2}}^o \right] + \\ &= 2(1 - \psi) \left[h_{CO}(T_s) - h_{CO}(298, 15) + h_{f_{CO}}^o \right] - \\ &= -\psi \left[h_{O_2}(T_s) - h_{O_2}(298, 15) + h_{f_{O_2}}^o \right] - \\ &= - \left[h_{C(s)}(T_s) - h_{C(s)}(298, 15) + h_{f_{C(s)}}^o \right] \end{aligned} \quad (177)$$

avec les enthalpies de formation données dans le Tableau 25, page 124 (Cf. Annexe A).

Le coefficient de transfert thermique par convection entre les particules et le gaz est donné par :

$$h_{gs} = \frac{Nu \lambda_g}{d_p} \quad (178)$$

Le nombre de Nusselt s'écrit [113] :

$$Nu = 2 \epsilon_l + 0,295 Re^{0,625} Pr^{0,33} \quad (179)$$

Comme pour la constante de vitesse k_d , les propriétés thermophysiques des gaz sont calculées à la pression atmosphérique et à la température moyenne T_m .

La contribution du transfert thermique radiatif est déterminée à partir de la relation suivante :

$$Q_{ray} = \frac{d(I_{abs} - I_p)}{dz} \quad (180)$$

où I_{abs} est la densité de flux de rayonnement absorbée par le lit et I_p la densité de flux rayonné par les particules. L'absorption du rayonnement incident peut être décrite à partir d'une loi de type Beer-Lambert [64] :

$$\frac{dI_{abs}}{dz} = \beta_a I_o (1 - \mathcal{R}) e^{\beta_a z} \quad (181)$$

De même pour le flux rayonné :

$$\frac{dI_p}{dz} = \beta_a \sigma_b T_s^4 e^{\beta_a z} \quad (182)$$

où I_o est la densité de flux de rayonnement incident à la surface du lit, β_a l'absorbance et \mathcal{R} la réflectivité (ici $\mathcal{R} = 0$). Selon Shin et Choi [107] l'absorbance peut être calculée à partir de :

$$\beta_a = -\frac{1}{d_p} \ln(\epsilon_l) \quad (183)$$

Le terme source intervenant dans l'équation de transport des espèces, écrite pour la phase solide (éq. 159, page 49), est explicité, pour chaque constituant, ci-dessous :

- Humidité :

$$R_{s,1} = -R_{vap} \quad (184)$$

- Combustible sec :

$$R_{s,2} = -R_{dev} \quad (185)$$

- Résidu carboné :

$$R_{s,3} = \underbrace{y_{Cf,sec} R_{dev}}_{\text{formation}} - \underbrace{R_{C(s)}}_{\text{consommation}} \quad (186)$$

- Cendres :

$$R_{s,4} = 0 \quad (187)$$

Les gaz de dévolatilisation réagissent avec l'air primaire selon le schéma réactionnel semi-global décrit dans le paragraphe 3.2.2 (réactions RG 1 - RG 6, page 44). Les chaleurs de réaction sont calculées selon une expression similaire à l'équation 177 :

$$\begin{aligned} \Delta_r H_{g,i} &= \sum_{\text{produits}} \nu''_{ig,r} \left[h_{ig,r}(T_g) - h_{ig,r}(298, 15) + h_{f_{ig,r}}^o \right] - \\ &= - \sum_{\text{réactants}} \nu'_{ig,r} \left[h_{ig,r}(T_g) - h_{ig,r}(298, 15) + h_{f_{ig,r}}^o \right] \end{aligned} \quad (188)$$

où $\nu'_{ig,r}$ et $\nu''_{ig,r}$ sont les coefficients stœchiométriques du réactant et du produit ig dans la réaction r . Comme mentionné précédemment, les relations pour le calcul de l'enthalpie ainsi que les enthalpies de formation sont données dans l'Annexe A, page 119. Les termes sources pour les espèces gazeuses (Cf. éq. 162, page 50) sont donnés par :

H₂O :

$$\begin{aligned} \epsilon_l R_{g,1} - R_{s,1} &= \epsilon_l M_{H_2O} (2 R_{RG1} + R_{RG2} + R_{RG3} + R_{RG6}) + R_{vap} + \\ &= +y_{H_2O} y_{MV,s} R_{dev} \end{aligned} \quad (189)$$

O₂ :

$$\begin{aligned} \epsilon_l R_{g,2} - R_{s,2} &= -\epsilon_l M_{O_2} [1,5 R_{RG1} + 2 R_{RG2} + R_{RG3} + 0,5 (R_{RG4} - R_{RG5}) + \\ &= +R_{RG6}] - \psi \frac{M_{O_2}}{M_C} R_{C(s)} \end{aligned} \quad (190)$$

CH₄ :

$$\epsilon_l R_{g,3} - R_{s,3} = -\epsilon_l M_{CH_4} R_{RG1} + y_{CH_4} y_{MV,s} R_{dev} \quad (191)$$

C_2H_4 :

$$\epsilon_l R_{g,4} - R_{s,4} = -\epsilon_l M_{C_2H_4} R_{RG2} + y_{C_2H_4} y_{MV,s} R_{dev} \quad (192)$$

C_2H_2 :

$$\epsilon_l R_{g,5} - R_{s,5} = -\epsilon_l M_{C_2H_2} R_{RG3} + y_{C_2H_2} y_{MV,s} R_{dev} \quad (193)$$

H_2 :

$$\epsilon_l R_{g,6} - R_{s,6} = -\epsilon_l M_{H_2} R_{RG6} + y_{H_2} y_{MV,s} R_{dev} \quad (194)$$

CO_2 :

$$\begin{aligned} \epsilon_l R_{g,7} - R_{s,7} &= \epsilon_l M_{CO_2} (R_{RG4} - R_{RG5}) + y_{CO_2} y_{MV,s} R_{dev} + \\ &= + (2\psi - 1) \frac{M_{CO_2}}{M_C} R_{C(s)} \end{aligned} \quad (195)$$

CO :

$$\begin{aligned} \epsilon_l R_{g,8} - R_{s,8} &= \epsilon_l M_{CO} [R_{RG1} + 2(R_{RG2} + R_{RG3}) - R_{RG4} + R_{RG5}] + \\ &= + y_{CO} y_{MV,s} R_{dev} + 2(1 - \psi) \frac{M_{CO}}{M_C} R_{C(s)} \end{aligned} \quad (196)$$

N_2 :

$$\epsilon_l R_{g,9} - R_{s,9} = 0 \quad (197)$$

où $y_{MV,s}$ est le taux de matières volatiles sur sec (fourni par l'analyse immédiate) et les fractions massiques y_{H_2O} , y_{CH_4} , $y_{C_2H_4}$, $y_{C_2H_2}$, y_{H_2} , y_{CO_2} et y_{CO} sont données par la composition des matières volatiles.

La chaleur spécifique de la phase solide est calculée selon :

$$c_{p_s} = c_{p_{humide}} + Y_{C(s)} c_{p_{C(s)}} + Y_{cendres} c_{p_{cendres}} \quad (198)$$

avec :

- la chaleur spécifique du bois humide donnée par l'équation 13 (page 17), où la chaleur spécifique du bois anhydre est déterminée à partir de l'équation 11 ;
- la chaleur spécifique du résidu carboné [29, 105] :

$$c_{p_{C(s)}} = 1,39 + 0,36 \times 10^{-3} T_s \quad (199)$$

- la chaleur spécifique des cendres [113] :

$$c_{p_{cendres}} = 2000 \left[\frac{J}{kg \cdot K} \right] \quad (200)$$

La conductivité thermique effective de la phase solide est donnée par :

$$\lambda_{eff,s} = (1 - \epsilon_l) \lambda_{cond} + \lambda_{ray} \quad (201)$$

où :

– la conductivité thermique intrinsèque est exprimée en fonction des conductivités du bois (Cf. éq. 17, page 18), du résidu carboné et des cendres, pondérée par leurs fractions massiques :

$$\lambda_{cond} = 2 \times 10^{-4} \rho_{bois}^{sec} [2 Y_{H_b} + Y_{sec} (1 + 0,0237)] + Y_{C(s)} \lambda_{C(s)} + Y_{cendres} \lambda_{cendres} \quad (202)$$

avec la conductivité thermique du résidu carboné [28] :

$$\lambda_{C(s)} = 0,1046 \left[\frac{W}{m \cdot K} \right] \quad (203)$$

et celle des cendres [95] :

$$\lambda_{cendres} = 0,0015 T_s^{1,1} \quad (204)$$

– la contribution du transfert thermique radiatif est prise en compte, selon Sharma [105], par :

$$\lambda_{ray} = 4 \sigma_b \Omega_s d_p T_s^3 \quad (205)$$

avec :

$$\Omega_s = \frac{8}{9(1 - \epsilon_l) [1 + 3(1 - \epsilon_l) - 1,5(1 - \epsilon_l)^2]} \quad (206)$$

La porosité du lit de particules est définie par :

$$\epsilon_l = 1 - \frac{\rho_{app,0}}{\rho_{s,0}} = cte. \quad (207)$$

où la masse volumique apparente initiale, $\rho_{app,0}$, est déterminée par voie expérimentale et la masse volumique initiale du bois est estimée à partir de :

$$\rho_{s,0} = \frac{1}{\frac{H_b}{\rho_{eau}} + \frac{1 - H_b}{\rho_{bois}^{sec}}} \quad (208)$$

avec $\rho_{eau} = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{bois}^{sec} = 600 \text{ kg/m}^3$ [129] et l'humidité sur brut, H_b , fournie par l'analyse immédiate. La masse volumique du solide pendant la conversion thermique est calculée à partir de la relation suivante :

$$\rho_s = \frac{1}{\sum_{is=1}^4 \frac{Y_{is}}{\rho_{is}}} \quad (209)$$

où les valeurs pour les masses volumiques du résidu carboné et des cendres sont obtenues à partir de la littérature [56, 100] : $\rho_{C(s)} = 299 \text{ kg/m}^3$ et $\rho_{cendres} = 1810 \text{ kg/m}^3$. La masse volumique apparente de la phase solide pendant la conversion thermique s'écrit alors :

$$\rho_{app,s} = (1 - \epsilon_l) \rho_s \quad (210)$$

La variation du diamètre moyen des particules est donnée par :

$$d_p = d_{p,0} \theta^{1/3} \quad (211)$$

où $d_{p,0}$ est le diamètre moyen initial. Le facteur de rétrécissement est calculé selon :

$$\begin{aligned}\theta &= 1 - \theta_{séchage} H_b \frac{1 - \frac{Y_{H_b}}{H_b}}{1 - H_b} - \theta_{dev} (1 - Y_{H_b} - Y_{sec}) - \\ &= -\theta_{C(s)} (1 - Y_{H_b} - Y_{sec} - Y_{C(s)})\end{aligned}\quad (212)$$

avec :

- le rétrécissement pendant le séchage [63] : $\theta_{séchage} = 0, 1$;
- le rétrécissement pendant la dévolatilisation [63, 113] :

$$\theta_{dev} = (1 - \theta_{pyr}) \left(1 - \theta_{séchage} \frac{H_b}{1 - H_b} \right) \quad (213)$$

où $\theta_{pyr} = 0, 5$;

- le rétrécissement durant l'oxydation du résidu carboné :

$$\theta_{C(s)} = \left(1 - \theta_{séchage} \frac{H_b}{1 - H_b} - \theta_{dev} \right) \left(1 - \frac{y_{cendres,sec}}{y_{C_f,sec}} \right) \quad (214)$$

La variation de la hauteur du lit s'écrit :

$$H_l = H_{l,0} \theta \quad (215)$$

Afin d'approcher la résolution numérique du système d'équations 157 - 162, il faut préciser les conditions sur les frontières du domaine (ou les conditions aux limites, cf. Figure 17, page 50) pour le gaz et les particules solides. Ainsi, au niveau de la grille (CL1) pour la phase gazeuse sont imposés le flux massique, la température et la composition de l'air primaire. Pour la phase solide, une seule condition, imposée pour l'équation de l'énergie (éq. 158), est nécessaire :

$$\lambda_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial z} = h_{ext} (T_{A1} - T_s) \quad (216)$$

où le coefficient de transfert thermique par convection, h_{ext} est calculé à partir de l'équation 178 à la pression atmosphérique et à la température moyenne :

$$T_{m,ext} = \frac{T_{A1} + T_s}{2} \quad (217)$$

où T_{A1} est la température de l'air primaire.

Au niveau de l'entrée du combustible (CL2), les valeurs du flux massique, de la température et de la composition du bois humide (c'est-à-dire l'humidité sur brut et la fraction du bois sec), ainsi que la hauteur du lit, sont fixées. Pour le gaz, le flux massique et la composition de l'air primaire sont utilisés avec la température égale à celle du bois humide.

À la surface (CL3) et à la fin (CL4) du lit seulement l'équation de l'énergie pour la phase solide nécessite des conditions aux limites. Celles-ci sont :

- à la surface du lit :

$$\lambda_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial z} = I_o - \sigma_b T_s^4 \quad (218)$$

- à la fin du lit :

$$\lambda_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial x} = 0 \quad (219)$$

avec la densité du flux de rayonnement, I_o , obtenue à partir du calcul CFD. Ainsi, le système d'équations à dérivées partielles (éqs. 157 - 162) est discrétisé en utilisant la méthode de différences finies, selon le schéma amont de premier ordre [92]. La méthode de la sur-relaxation successive (ou SOR : *Successive Over Relaxation*) [92] est employée pour la résolution. Les étapes de l'ensemble du calcul sont illustrées dans la Figure 18. L'approche utilisée ici comporte trois boucles itératives : une pour le couplage CFD - Modèle de lit et deux dans le cadre de la simulation numérique de la conversion thermique du lit des particules. La première étape correspond au début de la première boucle itérative. Ainsi, un profil supposé pour la distribution de la densité de flux de rayonnement (I_o) au long de la surface du lit est utilisé afin de démarrer le calcul de la combustion en lit fixe (Modèle 2D, cf. Figure 18). Ce calcul commence avec le chargement des routines nécessaires pour l'interface graphique, la détermination des propriétés thermophysiques et des termes sources. Ensuite, les données d'entrée (flux massiques, températures et compositions du bois et de l'air primaire ; la hauteur du lit au début de la grille, la longueur et l'angle d'inclinaison de la grille) sont saisies. Cette étape est suivie par deux boucles itératives imbriquées : une pour le calcul de la hauteur du lit au long de la grille ($H_l(x)$) et la seconde pour le calcul des distributions de température, flux et fractions massiques (pour les deux phases, gazeuse et solide) au sein du lit. Ainsi, si la différence entre les distributions de température, flux et concentrations massiques calculées à deux itérations successives (k et $k + 1$) est supérieure à un seuil imposé (10^{-6} pour la température, 10^{-4} pour le flux massique et 10^{-6} pour les fractions massiques) une nouvelle itération est effectuée. Dans le cas contraire un nouveau profil pour la hauteur du lit au long de la grille (H_l^{k+1}) est calculé et comparé ensuite avec le profil de départ (H_l^k). Si cette différence est supérieure au seuil demandé (10^{-3} pour l'hauteur du lit) une nouvelle itération est exécutée, sinon les dernières valeurs calculées sont enregistrées et exportées vers l'étape suivante. Ainsi, le profil d'hauteur du lit est utilisé pour générer le maillage 3D du foyer, qui, à son tour, est utilisé, avec les profils de température, de flux et des fractions massiques des gaz à la surface du lit, pour le calcul CFD de la combustion homogène en phase gazeuse. Cette étape permet d'obtenir une nouvelle distribution de la densité de flux radiatif à la surface du lit (I_o^{k+1}) qui est comparée avec le profil supposé au départ (I_o^k). Si la différence est supérieure à la tolérance souhaitée (10^{-3} pour I_o) le calcul recommence avec la première étape, en remplaçant le profil de densité de flux radiatif à l'itération k avec le profil qui vient d'être calculé, autrement dit en posant $I_o^k = I_o^{k+1}$. Dans le cas contraire, le calcul est considéré fini et les résultats obtenus sont analysés.

Comme mentionné précédemment, le couplage entre le code Fluent et le Modèle 2D n'est pas encore achevé, car le Modèle 2D est en phase de test. Des résultats partiels, concernant le transfert thermique au sein du lit en conditions non-réactives, obtenus avec la version test du Modèle 2D seront néanmoins présentés par la suite.

3.4 Conclusions

Pour conclure, les simulations numériques de la combustion homogène en phase gazeuse ont été menées en prenant appui sur l'approche de Huttunen *et al.* [61] pour déterminer les profils de température, flux et concentrations massiques des gaz à l'entrée du domaine de calcul (c'est-à-dire à la surface du lit). Dans ce cas, la géométrie de la surface du lit des particules est estimée à partir des observations expérimentales. Ainsi, la hauteur du lit est considérée égale à 150 mm au niveau de la vis d'alimentation et à 5 mm à la fin de la grille.

Le Modèle 2D est développé sous les hypothèses des particules thermiquement minces, du régime intermédiaire pour la conversion thermique des particules et ne prend pas en compte le phénomène de brassage.

Toutes les simulations numériques sont réalisées sous l'hypothèse du régime permanent. Les résultats obtenus sont discutés dans le Chapitre 5.

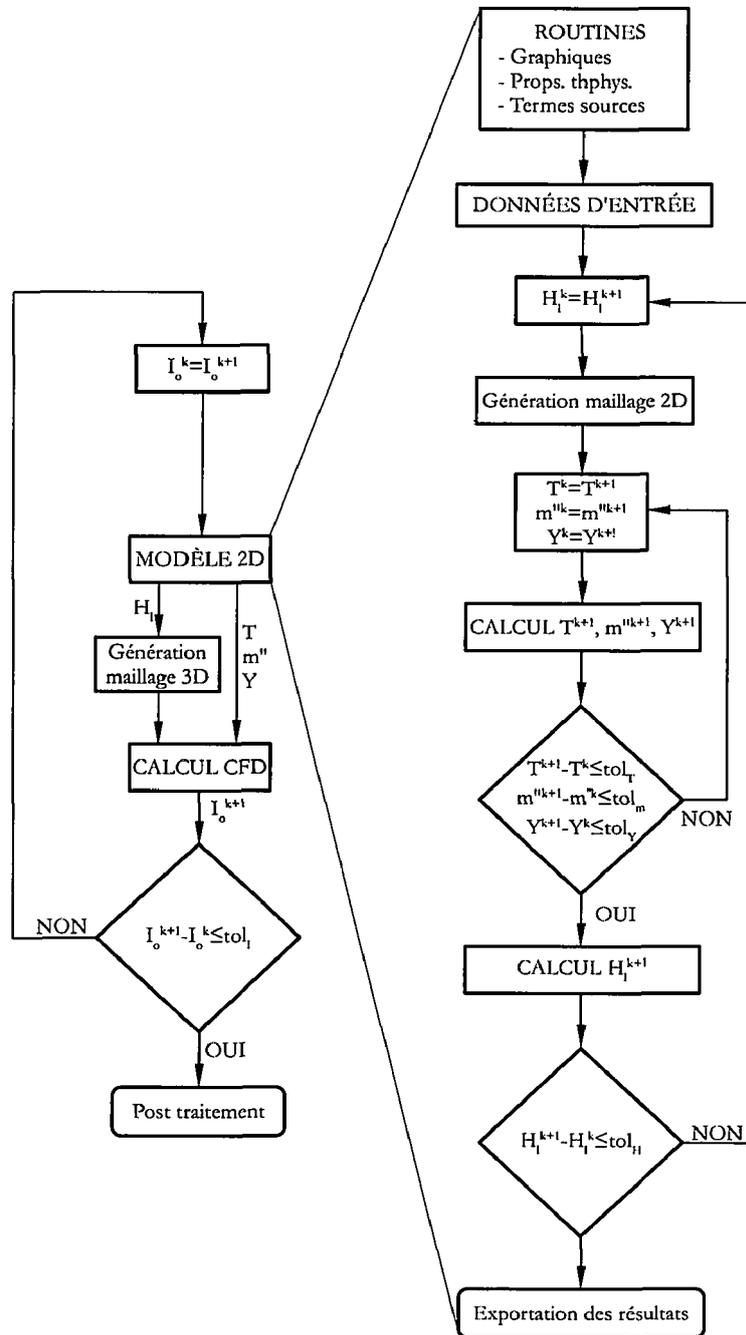


Figure 18 – Diagramme de calcul

Chapitre 4

Techniques expérimentales

Sommaire

4.1	Description de l'installation expérimentale	59
4.2	Mesures globales	60
4.3	Mesures locales	63
4.3.1	Mesure de température	63
4.3.2	Mesure de vitesse par Anémométrie Doppler Laser appliquée à la chaudière à bois	64
	Ensemencement	66
	Sources d'erreur de mesure	68
	Accès optiques	69
	Référentiel	70
4.3.3	Analyse des gaz	71
4.4	Conditions d'essais	74

4.1 Description de l'installation expérimentale

Les essais expérimentaux ont été menés sur l'installation de combustion du CReeD (Centre de Recherches pour l'Environnement, l'Énergie et le Déchet), qui est le centre de recherches de Veolia Environnement dédié aux divisions Énergie et Propreté du groupe, basé à Limay (78). La configuration initiale de cette installation (Figures 19 et 22a) comporte le système de stockage et d'alimentation du combustible, le système d'alimentation d'air, une chaudière Compte de 400 kW_{th}, à bois broyé et à grille mobile, les systèmes d'évacuation des fumées et des mâchefers, de dissipation de chaleur et de mesure et contrôle.



(a) Halle d'essai



(b) Silos de stockage biomasse

Figure 19 – Installation d'essai (CReeD)

La chaudière est conçue pour la production d'eau chaude à partir de la biomasse. Les dimensions extérieures sont égales à 2,9 m × 1,5 m × 3 m (longueur × largeur × hauteur). L'épaisseur des parois varie entre 0,16 m au niveau de la porte de visite à 0,38 m au niveau des parois latérales. Le principe de fonctionnement de la chaudière repose sur la technologie des foyers à grilles mobiles, version co-courant (cf. paragraphe 1.1.2, page 5). On donne ci-dessous les éléments caractéristiques de l'installation étudiée concernant les circuits de combustible, d'air de combustion, des fumées et des cendres.

Le bois est stocké dans deux silos (cf. Figure 19b) et il est transporté par quatre vis sans fin, deux horizontales et deux inclinées, vers une trémie de mélange (cf. Figure 22). Ensuite le bois est injecté dans la chambre de combustion sur la grille mobile à l'aide d'une vis d'alimentation prévue avec un compteur de tours. La grille est composée de sept rangées (dont une sur deux est fixe) de maillons identiques mis bout à bout. Chaque rangée a sept maillons, chacun de ceux-ci possède trois rangées de trous (Figure 20).

L'air nécessaire à la combustion est fourni par deux ventilateurs, un pour l'air primaire et le deuxième pour l'air secondaire et tertiaire. Le trajet entre les ventilateurs et les arrivées d'air dans la chaudière est présenté dans la Figure 20. L'air primaire est fourni au-dessous de la grille et arrive dans le lit de bois à travers les espaces présents entre les maillons. L'air secondaire arrive dans la chambre de combustion par 32 trous de diamètre 42,5 mm disposés sur deux rangées d'un côté et de l'autre de celle-ci. Les fumées formées dans la chambre de combustion arrivent au-dessus de la voûte du foyer où l'air tertiaire est injecté par 16 trous disposés sur deux rangées d'un côté et de l'autre de la chaudière afin d'assurer une meilleure combustion. Ensuite les gaz traversent les tubes d'échange de chaleur, qui sont refroidis par une enveloppe d'eau, pour arriver dans le filtre multicyclone à 8 entrées - où les cendres volantes sont retenues - et finalement dans la cheminée (cf. Figure 22a).

Le flux de chaleur récupéré par l'eau est transféré dans un échangeur thermique eau - eau afin d'être dissipé par l'aéro-refroidisseur. Finalement, les mâchefers tombent dans une cavité située après la grille et sont extraits par une vis sans fin.

La régulation de l'installation se fait selon la logique décrite dans le paragraphe 1.2, page 10. La chaîne de mesure est divisée en deux parties : une destinée aux mesures globales et une autre pour les mesures locales.

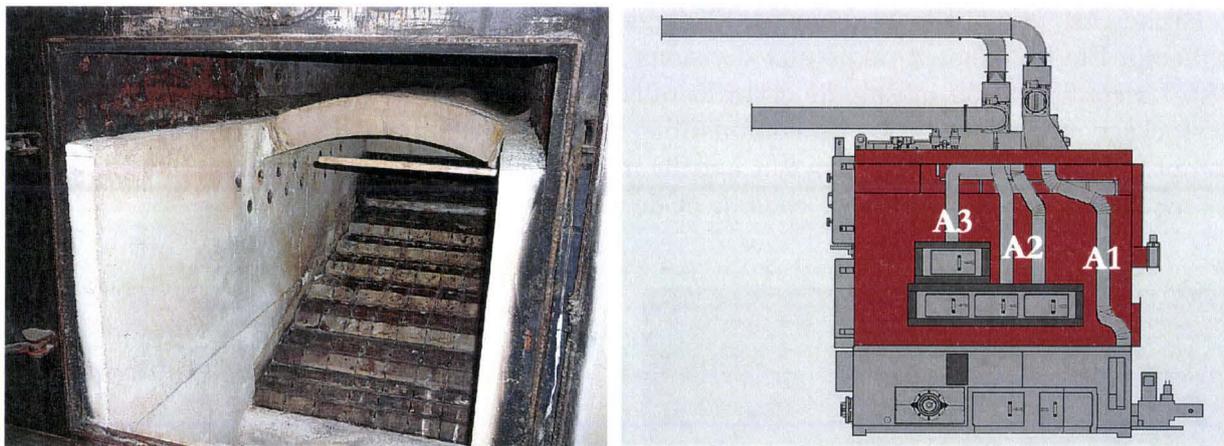


Figure 20 – Intérieur du foyer (gauche) et conduites d'arrivée d'air (droite : A1 air primaire ; A2 air secondaire ; A3 air tertiaire) (CReeD)

4.2 Mesures globales

Les mesures globales comprennent les débits de biomasse, d'air, de fumées et d'eau ; la pression atmosphérique, la température et l'humidité de l'air ambiant ; la température et la

pression au sein du foyer ; les températures d'eau à l'entrée/sortie de la chaudière et finalement l'analyse des fumées.

Le débit de biomasse est estimé à partir du nombre de tours de vis enregistré pendant une période Δt par le compteur monté au niveau de la vis d'alimentation, la masse de biomasse comprise entre deux pas de vis et la période Δt considérée selon la relation :

$$\dot{m}_{bois} = \frac{N_{tours} m_{pas}}{\Delta t} \quad (220)$$

où N_{tours} est le nombre de tours de vis et m_{pas} la masse de biomasse comprise entre deux pas de vis. Les débits volumiques d'air sont déterminés à l'aide de fils chauds montés dans les conduites d'aspiration des ventilateurs. Les fils chauds sont placés pour permettre la mesure de la vitesse moyenne indépendamment du régime d'écoulement, le schéma de principe du montage des fils chauds est présenté dans la Figure 21. Le rayon de la conduite d'aspiration d'air primaire et secondaire est égal à 97,5 mm ce qui donne la position théorique des fils chauds à 68,25 mm de l'axe. La position réelle se trouve autour de cette valeur ce qui introduit une incertitude supplémentaire sur la mesure de vitesse.

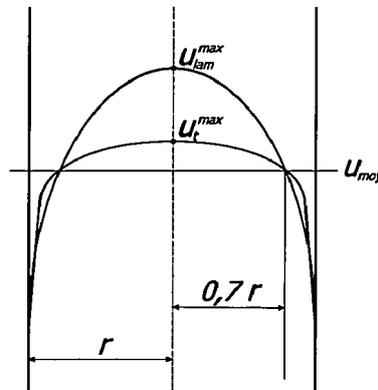


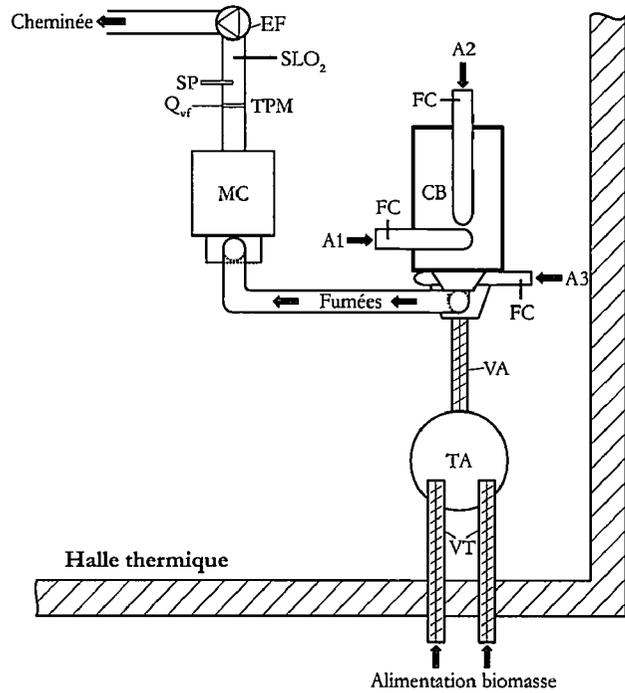
Figure 21 – Placement des fils chauds : u_{moy} - vitesse moyenne, u_{lam}^{max} - vitesse maximale en régime laminaire, u_t^{max} - vitesse maximale en régime turbulent, r - rayon de la conduite

Les débits volumiques d'air sont ensuite déterminés en multipliant les valeurs des vitesses mesurées par les fils chauds avec la section de passage des conduites d'aspiration. Finalement, les débits massiques sont obtenus à partir des débits volumiques et de la densité de l'air à la température ambiante et à la pression atmosphérique.

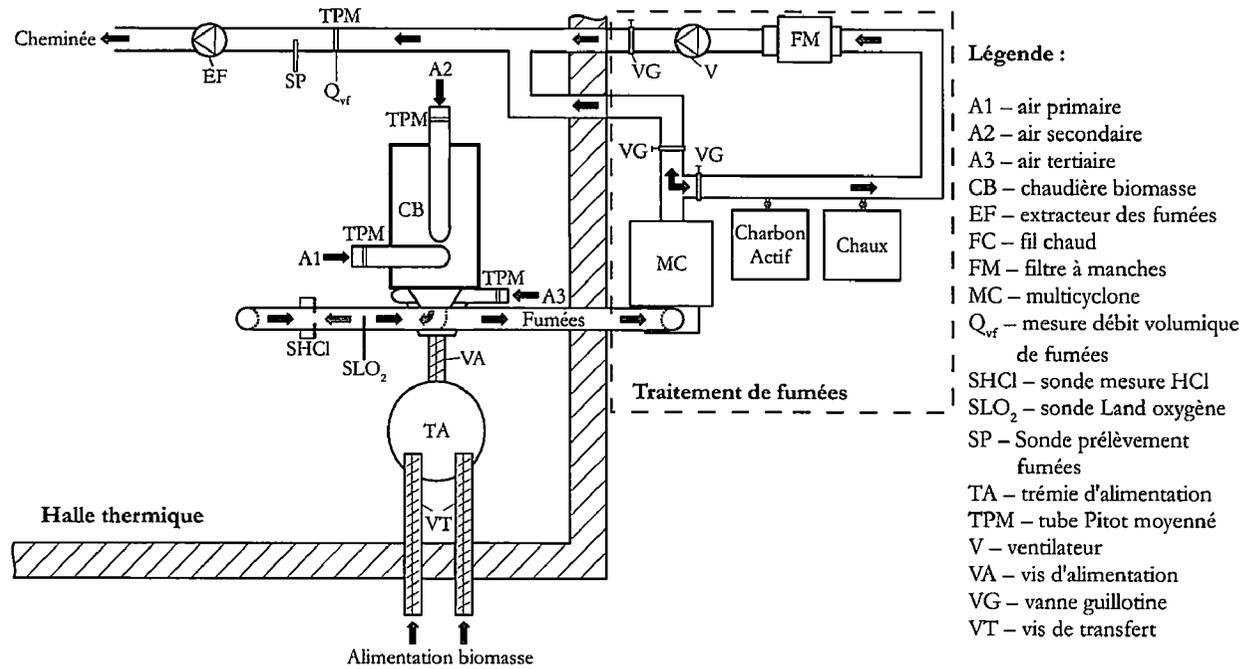
Le débit de fumées est mesuré à l'aide d'un tube Pitot moyenné monté en aval du multicyclone. La température au sein du foyer est mesurée avec un thermocouple de type K et la pression avec un manomètre différentiel. Les concentrations des gaz dans les fumées sont mesurées à l'aide d'un analyseur Horiba ENDA-600 prévu avec des cellules de mesure pour les NO_x , imbrûlés (THC), SO_2 , CO, CO_2 et O_2 . La sonde de prélèvement est montée entre le multicyclone et le tube Pitot moyenné.

Tous les capteurs présentés ci-dessus envoient des signaux vers un automate programmable prévu avec un convertisseur Analogique/Numérique (résolution 12 bits) et qui permet d'afficher et de stocker les valeurs globales mesurées en temps réel.

Des modifications majeures ont été apportées à l'installation de combustion, notamment pour le circuit des fumées. La Figure 22 montre le schéma de l'installation avant et après les modifications. Ainsi, le multicyclone a été déplacé à l'extérieur de la halle d'essai. Un système d'injection de charbon actif et de chaux hydratée et un filtre à manches ont y été ajoutés afin d'achever le système de traitement de fumées (cf. Figure 22b). Un jeu de vannes à guillotines permet d'isoler le système d'injection de réactifs, le filtre à manches et le ventilateur associé. La conséquence directe de ce changement sur la circulation des fumées est l'augmentation des



(a) Installation avant les modifications



(b) Installation après les modifications

Figure 22 – Modifications de l'installation d'essai

Légende :

- A1 – air primaire
- A2 – air secondaire
- A3 – air tertiaire
- CB – chaudière biomasse
- EF – extracteur des fumées
- FC – fil chaud
- FM – filtre à manches
- MC – multicyclone
- Q_{vf} – mesure débit volumique de fumées
- SHCl – sonde mesure HCl
- SLO₂ – sonde Land oxygène
- SP – Sonde prélèvement fumées
- TA – trémie d'alimentation
- TPM – tube Pitot moyenné
- V – ventilateur
- VA – vis d'alimentation
- VG – vanne guillotine
- VT – vis de transfert

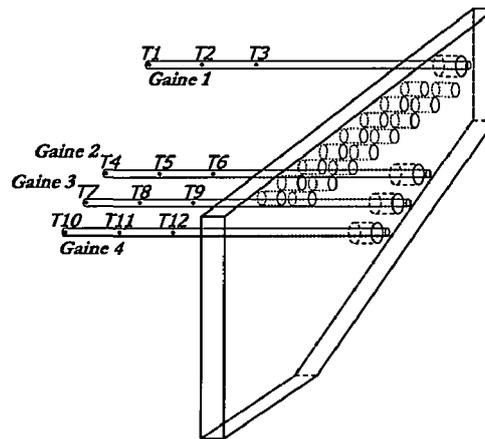


Figure 23 – Montage des thermocouples

perdes de charges linéaires (le trajet est plus long) et singulières (il y a un nombre supérieur des vannes et des coudes). Ce qui entraîne également une diminution de la température des fumées au niveau de la sonde de prélèvement des fumées, notamment pendant les saisons froides. C'est-à-dire que les valeurs des concentrations de gaz ne sont plus corrélées avec la température qui est mesurée immédiatement à la sortie de la chaudière. Les autres changements apportés concernent les mesures d'acide chlorhydrique (HCl) et des vitesses d'air.

Dans la nouvelle configuration un analyseur de HCl à été monté à la sortie de la chaudière. Cet analyseur est muni d'un système d'injection d'air afin de protéger ses composants optiques contre les poussières présentes dans les fumées. Ce qui constitue une source d'air parasite supplémentaire qui dilue encore plus les fumées. Par conséquent, la sonde d'O₂ (SLO₂, cf. Figure 22) qui est utilisée pour la régulation d'air secondaire, a été placée en amont de l'analyseur de HCl afin d'éviter une régulation basée sur une fausse concentration d'O₂. Cependant la sonde de prélèvement des fumées (SP, cf. Figure 22) reste placée en aval du système de traitement des fumées, car l'espace disponible à la sortie de la chaudière ne permet pas de la monter en amont de l'analyseur de HCl. Dans ce cas, l'utilisation d'un analyseur portable équipé avec une sonde de prélèvement moins encombrante (Horiba PG 250 par exemple) doit être utilisé afin de mesurer les concentrations globales des gaz de combustion (CO, CO₂, O₂, NO_x, etc.) non-dilués par les infiltrations d'air parasites du trajet des fumées. Un autre aspect concerne la mesure des vitesses de l'air de combustion. Les fils chauds utilisés dans la configuration précédente (FC, cf. Figure 22a) ont été remplacés par des tubes de Pitot moyennés (TPM, cf. Figure 22b) afin d'enlever les incertitudes liées à leur emplacement.

4.3 Mesures locales

4.3.1 Mesure de température

Le champ de température dans la chambre de combustion est mesuré dans un premier temps à l'aide des thermocouples de type N placés dans 4 gaines en acier réfractaire remplies de résine thermorésistante. La longueur d'une gaine est égale à 1 m. Chaque gaine contient 3 thermocouples, l'espacement entre les thermocouples est d'environ 200 mm. Le montage des gaines au sein du foyer est schématisé dans la Figure 23. La première série de thermocouples (Gaine 1) est placée entre la vis d'alimentation et les arrivées d'air secondaire. La dernière gaine (Gaine 4) est positionnée sous les dernières arrivées d'air secondaire et au-dessus du lit combustible, vers la fin de la grille. La distance entre la paroi du four et le bout d'une gaine est d'environ 520 mm (où la largeur du foyer est égale à 735 mm). Les valeurs de température mesurée sont enregistrées à l'aide de deux modules d'acquisitions. Bien que cette solution permet une mise en œuvre simple, elle n'assure pas un bon degré de précision, car

les thermocouples ne sont pas corrigés par rapport au transfert thermique par rayonnement et leur emplacement dans les gaines est mal connu. Par conséquent une autre approche a été utilisée pour la dernière campagne d'essai. Ainsi, un seul thermocouple de type N a été placé dans une sonde de prélèvement des gaz (cf. paragraphe) afin d'assurer un écran par rapport au transfert thermique radiatif.

4.3.2 Mesure de vitesse par Anémométrie Doppler Laser appliquée à la chaudière à bois

La mesure de la vitesse de l'écoulement figure parmi les plus importantes mais aussi les plus complexes à réaliser : les hautes températures, des amplitudes de vitesse faibles, des accès restreints ne permettent pas d'utiliser, de manière fiable, des techniques conventionnelles (tube de Pitot ou autre). Compte tenu de ces conditions, nous avons proposé d'utiliser une technique de diagnostic laser, l'ADL, permettant d'obtenir avec un maximum de précision et de manière non intrusive, les vitesses de l'écoulement en quelques points de la chaudière. Ces mesures étant d'une originalité certaine, nous prendrons la peine de les expliquer de manière détaillée. Cette partie expose donc le dispositif expérimental et les conditions adoptés pour ces mesures.

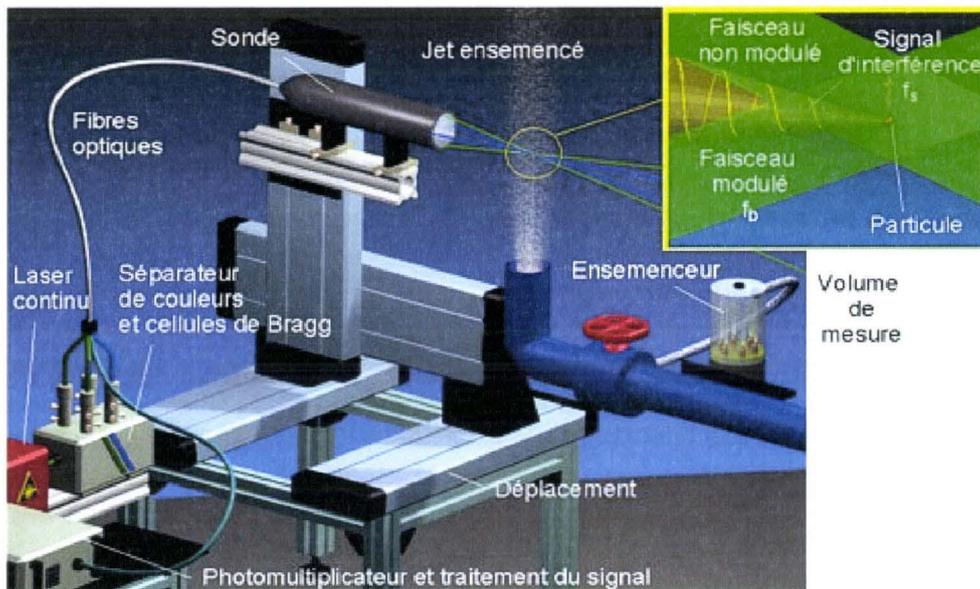


Figure 24 – Schéma de principe de la technique ADL (Source Areelis)

L'Anémométrie Doppler Laser (ADL) est une méthode optique permettant de mesurer localement la vitesse de l'écoulement avec un taux d'échantillonnage temporel élevé. Son principe consiste à faire interférer deux faisceaux laser à l'endroit de l'écoulement où l'on désire faire la mesure (cf. Figure 24). Les particules ensemencées dans l'écoulement traversent le volume de mesure formé par les faisceaux, celles-ci diffusent un signal lumineux, modulé par l'interférence des lasers. Ce signal est collecté à l'aide d'un tube photomultiplicateur et sa fréquence f_s est directement proportionnelle à la vitesse u de la particule dans l'écoulement. La direction du vecteur vitesse correspond à celle du plan contenant les deux faisceaux.

La chaîne de mesure utilisée est un système composé de différents éléments, comme illustré dans la Figure 25. La source lumière est un laser continu de 5 W, de type Argon. Il est parfaitement adapté à la technique ADL car son faisceau présente trois longueurs d'onde nettement distinctes ; en revanche il est encombrant et fragile. Il a besoin d'une puissance électrique relativement élevée et doit être refroidi par un débit d'eau stable, ce qui rend

sa mise en place délicate en milieu industriel. Un séparateur de couleur, muni d'une cellule de Bragg, permet de décomposer le rayonnement laser en deux paires de faisceaux (vert et bleu) qui sont dirigées vers la sonde de mesure grâce à des fibres optiques. Pour cette campagne, nous avons eu recours à une lentille dissociée de la sonde pour avoir une plus grande distance focale (750 mm) et ainsi parcourir la moitié de la largeur du foyer. Le signal d'interférence est collecté en rétrodiffusion par la sonde et renvoyé par fibre optique vers des photomultiplicateurs munis de filtres (un par couleur). Ce signal est analysé et filtré par une unité de traitement électronique commandée par un PC. La sonde optique est positionnée sur un déplacement automatique 3 axes pour balayer plusieurs points de mesure et ainsi générer des profils de vitesse moyenne. A titre informatif le Tableau 11 résume les principales caractéristiques du matériel utilisé pour les mesures d'ADL.



Figure 25 – Description de la chaîne ADL et de sa mise en place sur la chaudière à bois du CReeD

Tableau 11 – Caractéristiques techniques du dispositif ADL utilisé

Chaîne de mesure		PDA-ADL Dantec			
Temps d'acquisition (s)		100			
Taille d'échantillon maximum		5000			
Fréquence cellule de Bragg, f_b (MHz)		40			
Vitesse		Composantes u_x et u_y		Composante u_z	
Longueur d'onde (nm)		514,5		488	
Focale (mm)		750		750	
Angle inter faisceaux ($^\circ$)		3,055		3,055	
Longueur du volume de mesure (mm)		6		6	
Filtre (MHz)		1,2 (-5 à 5 m/s)		1,2 (-5 à 5 m/s)	
Interfranges (μm)		9,6		9,1	

Ensemencement

Bien que non intrusive, la technique de mesure fonctionne classiquement avec des particules, de préférence sphériques, qui sont ajoutées à l'écoulement. Généralement, pour les écoulements réactifs les particules adoptées sont de l'oxyde de zirconium étuvé qui ont une température de fusion de 2700 K et une granulométrie comprise entre 0,5 et 5 μm . Dans notre configuration, l'ensemencement n'était pas réalisable. En effet, du fait du volume très important du foyer, il était très difficile d'injecter un traceur (particules de petite taille résistantes à la combustion) : la quantité aurait dû être importante et aurait probablement perturbé le fonctionnement de la chaudière. Nous avons donc utilisé les caractéristiques naturelles de la flamme de bois. La mesure s'est donc faite à partir des particules qui circulent naturellement dans le foyer. L'inconvénient est que l'échantillonnage n'est pas du tout contrôlé et peut varier d'un point à l'autre. De surcroît, les caractéristiques des particules qui ont permis ces mesures ne nous étaient pas du tout connues. L'idéal aurait été d'établir les caractéristiques granulométriques des particules existantes dans le foyer à cet endroit, cependant ce type de mesure ne nous était pas accessible pour des raisons de prélèvement et d'obtention de données précises. Nous avons donc pris le parti de nous référer aux données existantes sur ce type d'information.

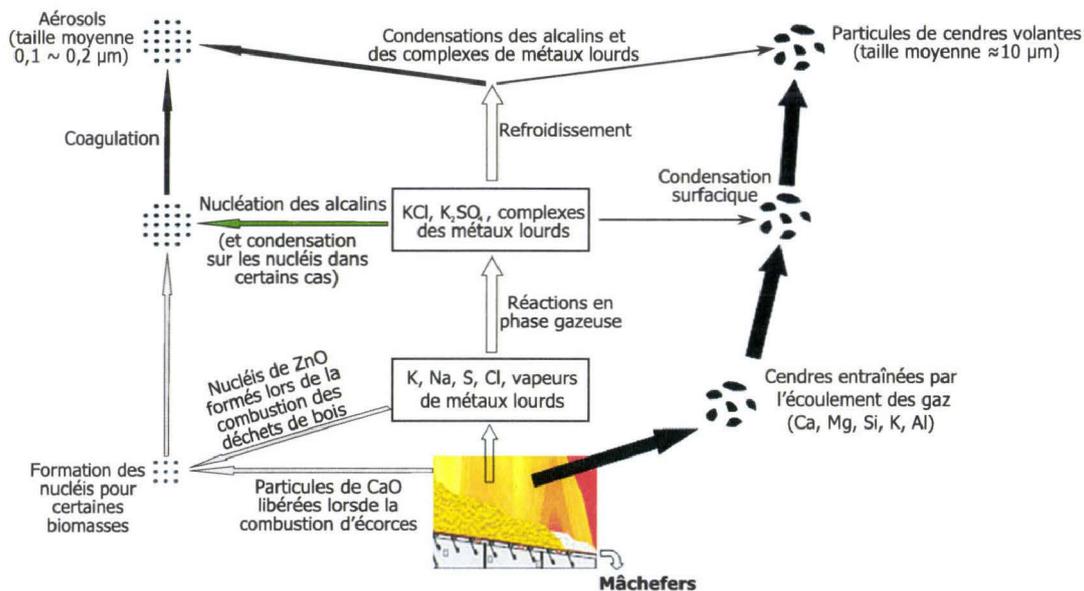


Figure 26 – Illustration des voies de formation des cendres dans un foyer à grille [128]

Pour les chaudières à grille, la partie des résidus de combustion la plus importante est constituée par les cendres sous foyer (ou les mâchefers). Cependant, la combustion sur grille libère des particules (aérosols et cendres volantes). Ce sont ces particules qui ont rendus possibles ces mesures. En reprenant le schéma de la Figure 26 proposé par Yin *et al.* [128] concernant la formation des cendres, nous pouvons remarquer que les particules aériennes sont formées de deux manières différentes. Ceci conduit à une distribution bimodale de la taille des particules. Nous avons donc deux classes de particules :

- les particules fines pour lesquelles le principal mécanisme de formation est la nucléation puis l'agglomération. Il s'agit des premières particules formées à travers la phase gazeuse à partir des réactions mettant en jeu des hydrocarbures insaturés comme les HAP. Cette phase correspond à la transformation du système moléculaire en un système particulaire pour donner naissance aux nucléis dont le diamètre est de l'ordre du nanomètre. Ensuite, par un mécanisme de croissance de surface et notamment par la condensation des vapeurs de métaux alcalins ces particules vont croître et collisionner entre elles pour former des structures agrégatives de taille plus importante de l'ordre de 100 nanomètres, un exemple de ce type d'agrégat est donné sur la Figure 27 ;

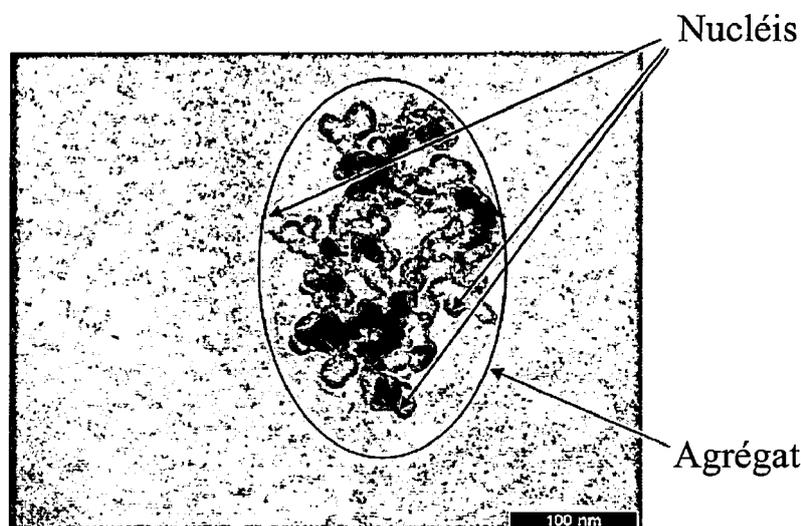


Figure 27 - Exemple d'agrégat de suie observé à l'aide d'un microscope (TEM) [115]

- les particules plus grossières correspondent au mode grossier (« coarse mode ») ce sont des résidus de cendres non volatilés qui donnent naissance aux particules de cendres volantes, leur taille avoisine les 10 μm . Ces particules entrent dans la nomenclature des PM10.

Certains travaux portent spécifiquement sur la formation de ces particules à haute température dans les conditions d'une combustion de lit de biomasse compact. L'étude de Wiinikka *et al.* [122] sur un lit fixe donne des résultats sur la granulométrie des particules au voisinage du lit et à différentes hauteurs au-dessus de l'injection d'air secondaire. Dans cette étude, on trouve que la concentration de particules en sortie du lit est très élevée puisqu'elle décroît rapidement en s'éloignant de la surface du lit. Pour l'ADL, nos mesures sont en général effectuées dans un proche voisinage du lit ; cependant, le processus n'est pas celui d'un lit fixe et la formation des aérosols sera différente selon les différentes zones du processus de combustion hétérogène. Toutefois, nous nous fonderons sur les résultats des mesures réalisées dans l'étude de Wiinikka *et al.* [122] pour estimer la taille des particules ayant servi à réaliser les mesures ADL. Ainsi, la Figure 28 présente la distribution de taille aérodynamique des particules représentée en fonction de leur concentration massique. Sur ces résultats la distribution bimodale est bien remarquable et la fraction massique est quasiment équivalente entre les particules fines et les grosses particules. Nous pouvons donc estimer que deux classes de

particules coexistent dans notre écoulement :

- les particules fines dont le diamètre aérodynamique est compris entre 40 et 200 nm ;
- les particules grosses dont le diamètre aérodynamique est compris entre 300 nm et 2 μm .

On notera que la contribution des fines est plus importante au voisinage du lit (Port 1, cf. Figure 28). Pour évaluer la pertinence de cet ensemencement naturel nous pouvons donc estimer, avec toutes les réserves envisageables, que les mesures sont réalisées sur des particules ayant un diamètre aérodynamique moyen d'environ 0,1 μm .

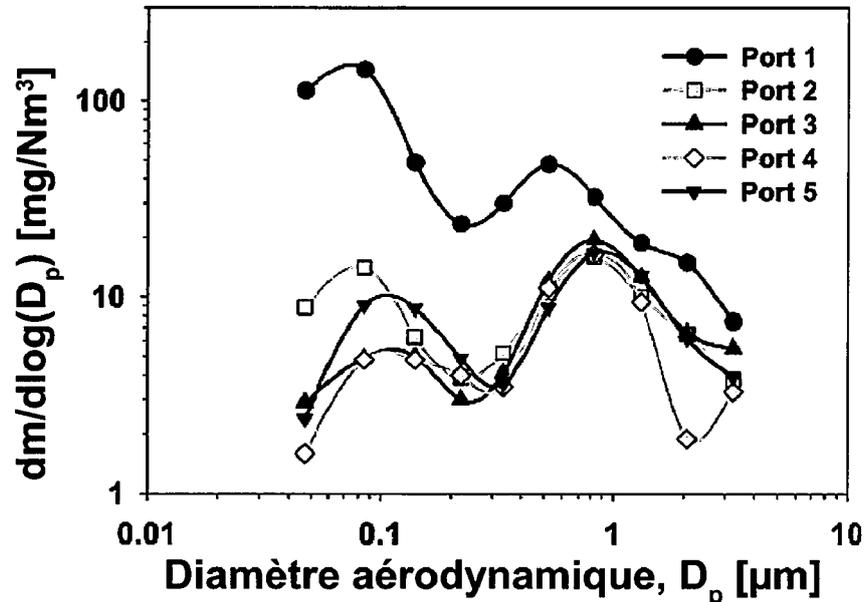


Figure 28 – Distribution du diamètre aérodynamique des particules selon Wiinikka et al. [122]

Sources d'erreur de mesure

Statistique

Du fait du matériel utilisé ces mesures ont été réalisées en mode « coïncidence », c'est-à-dire que seules les particules dont la vitesse est mesurable simultanément dans les deux composantes sont prises en compte, ceci réduit considérablement le nombre d'échantillons mais accorde une validité maximale aux mesures instantanées. Nous aurons donc inévitablement un biais statistique sur les mesures correspondant à des localisations où la présence de particules est faible.

Taille et géométrie des particules

Nous avons vu que les particules sur lesquelles sont réalisées ces mesures ont un diamètre aérodynamique moyen allant de 0,05 μm à 2 μm . ces dimensions sont largement inférieures à la l'interfrange de l'interférence lumineuse dans le volume de mesure, ces particules permettent donc l'accès à des mesures de vitesse avec cette technique (de mesure). Cependant, cette technique est adaptée à des particules sphériques ; or, la géométrie de ces agrégats s'écarte de la forme sphérique ; cependant nous ne sommes pas en mesure de quantifier le biais engendré par ce problème. On notera malgré tout que les particules d'oxyde de zirconium utilisées habituellement en combustion n'ont pas une forme sphérique non plus ; elles se présentent sous forme de paillettes.

Thermophorèse

La présence des gradients de température liés à la combustion génère des forces de thermophorèse importantes, pouvant dévier une particule ensemencée de son trajet dans l'écoulement. Dans nos conditions, les produits de combustion au dessus du lit n'excèdent pas des

températures de 1200 K et les gradients de température sont inférieurs à 1000 K/mm. Pour ces niveaux de température et ces valeurs maximales de gradient thermique on peut constater sur la Figure 29 que la vitesse de thermophorèse n'excède pas 0,1 m/s ; ceci affecte la précision de nos mesures mais peut être considéré comme négligeable devant l'ordre de grandeur des vitesses mesurées.

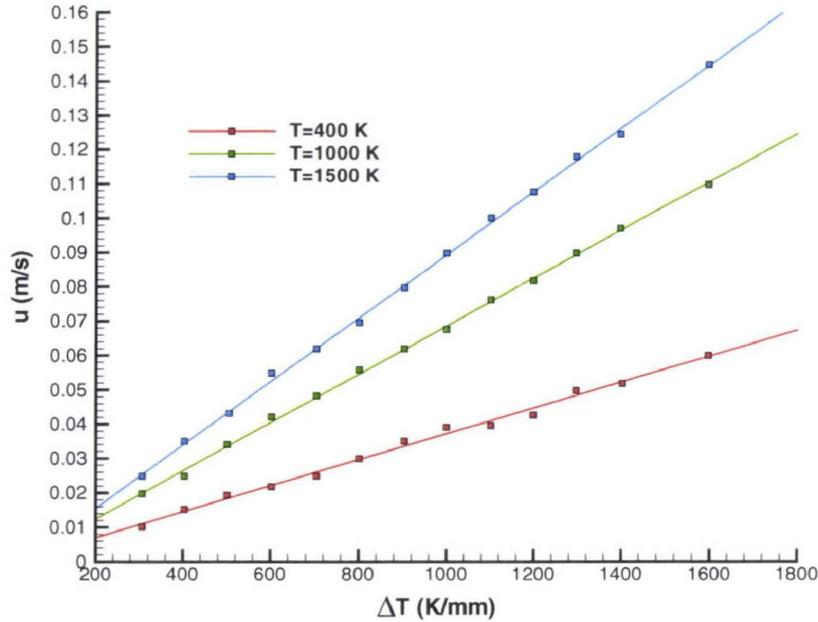


Figure 29 – Vitesse de thermophorèse calculée pour différentes températures des produits de combustion en fonction du gradient de température [42]

Aptitudes des particules à suivre l'écoulement

Une particule en mouvement dans un fluide est soumise à la force due à la traînée visqueuse du mouvement relatif entre la particule et le fluide agissant sur celle-ci. Cette force est directement reliée à la vitesse relative particule/fluide par la loi de Stokes. Ceci impose des limites sur la réponse de la mise en mouvement des particules soumises à une fluctuation de vitesse. La fréquence de coupure pour une particule de diamètre aérodynamique connu est donnée par la relation suivante [103] :

$$f_c = 0,1 \frac{\mu_g}{r_p^2 \rho_p} \quad (221)$$

Or, la viscosité dynamique de l'air à 1200 K est $\mu_{air} = 4,63 \times 10^{-5}$ kg/m s, le rayon moyen des petites particules est de l'ordre de $r_p = 0,05 \mu\text{m}$, et la masse volumique des fines est d'environ $\rho_p = 100 \text{ kg/m}^3$. Dans ces conditions nos particules peuvent suivre des fluctuations supérieures à 10 kHz. Nous ne serons donc pas impactés par ce problème sur nos mesures.

Accès optiques

La chaudière est équipée de plusieurs possibilités d'ouverture, d'environ 5 cm de diamètre. Les mesures ne peuvent être réalisées que par ces accès le long de leur axe. Des hublots en verre ont été installés pour éviter d'avoir une entrée d'air supplémentaire perturbant le fonctionnement de la chaudière (sauf pour l'accès de la porte déjà munie d'un hublot). La Figure 30 illustre le détail de ces différents accès optiques.

Référentiel

Les profils de mesure ont été réalisés à travers les accès notés de 1 à 6 dans la Figure 31. Chaque profil se compose d'une vingtaine de positions espacées de 20 mm. Chaque position est définie par le croisement des faisceaux. Le maillage ainsi obtenu est représenté sur la Figure 32. Chaque point est visité pendant un temps d'acquisition de 100 secondes. Les profils obtenus sur les accès 1 à 5 sont orientés vers le centre du foyer (axe y). L'origine est prise au niveau de la paroi rouge extérieure de la chaudière.



Figure 30 – Détail d'un accès optique

Les composantes mesurées u_x et u_z sont dans le plan perpendiculaire à l'axe y . u_x , composante longitudinale de la chaudière est orientée vers l'extérieur (à l'inverse d'un trièdre direct pour que les vitesses soient dans le sens de l'écoulement principal) u_z , composante verticale est dirigée du bas vers le haut du système. Les profils obtenus sur l'accès 6 sont orientés vers le centre du foyer (axe x). L'origine est prise au niveau de la paroi plate extérieure de la porte de la chaudière. Les composantes mesurées u_y et u_z sont dans le plan perpendiculaire à l'axe x .

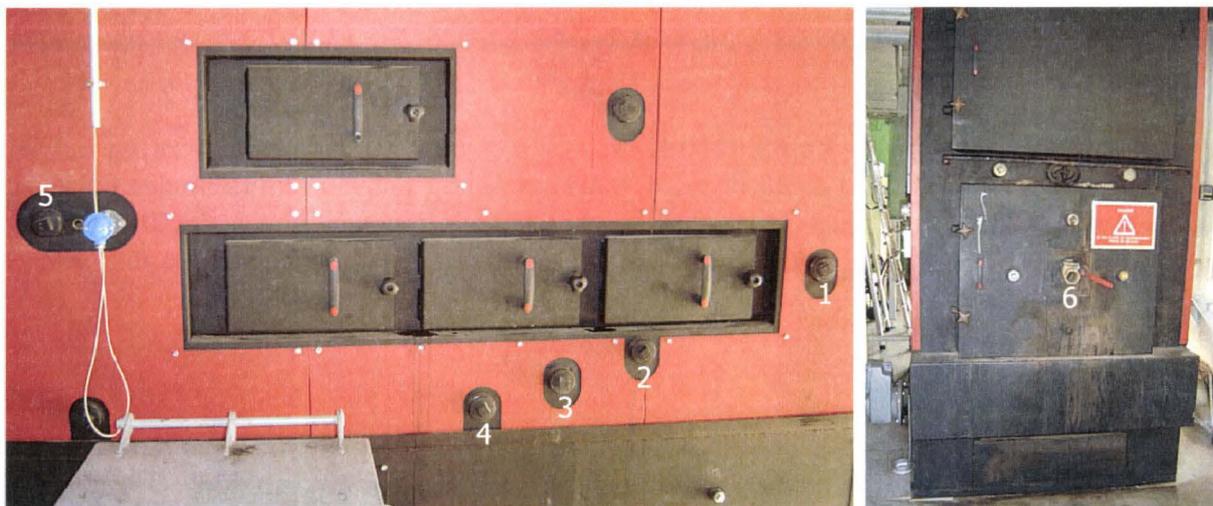


Figure 31 – Positionnement des accès

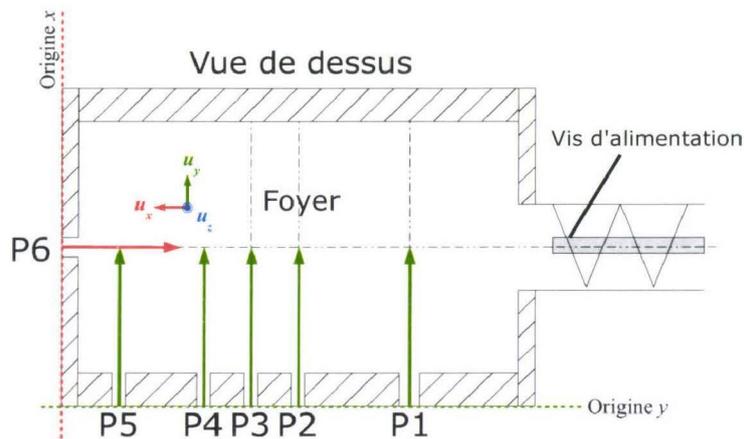


Figure 32 – Référentiel des profils de mesure

4.3.3 Analyse des gaz

La chaîne de mesure des concentrations de gaz est composée d'une sonde de prélèvement refroidie à eau chaude (80 °C pour éviter au maximum les problèmes de condensation et préserver la sonde face à la température du foyer), cette sonde est illustrée sur la Figure 33. Un thermocouple de type K placé dans la sonde, avec un retrait de 1 cm de la sortie de la canule de prélèvement, permet de réaliser une mesure de température écranée du milieu où l'échantillon est prélevé. L'autre extrémité de la sonde est raccordée à une ligne chauffée de prélèvement. Ensuite l'échantillon passe par le spectromètre Infrarouge à Transformées de Fourier (IRTF) ou il est analysé, cette mesure n'ayant aucun impact sur l'échantillon, celui-ci est utilisé en sortie de l'analyseur IRTF ou il passe par la valise de conditionnement avant d'être analysé par l'analyseur d'oxygène paramagnétique et enfin par le chromatographe. Le schéma de la Figure 34 présente la sonde et l'ensemble du montage expérimental pour l'analyse de gaz.

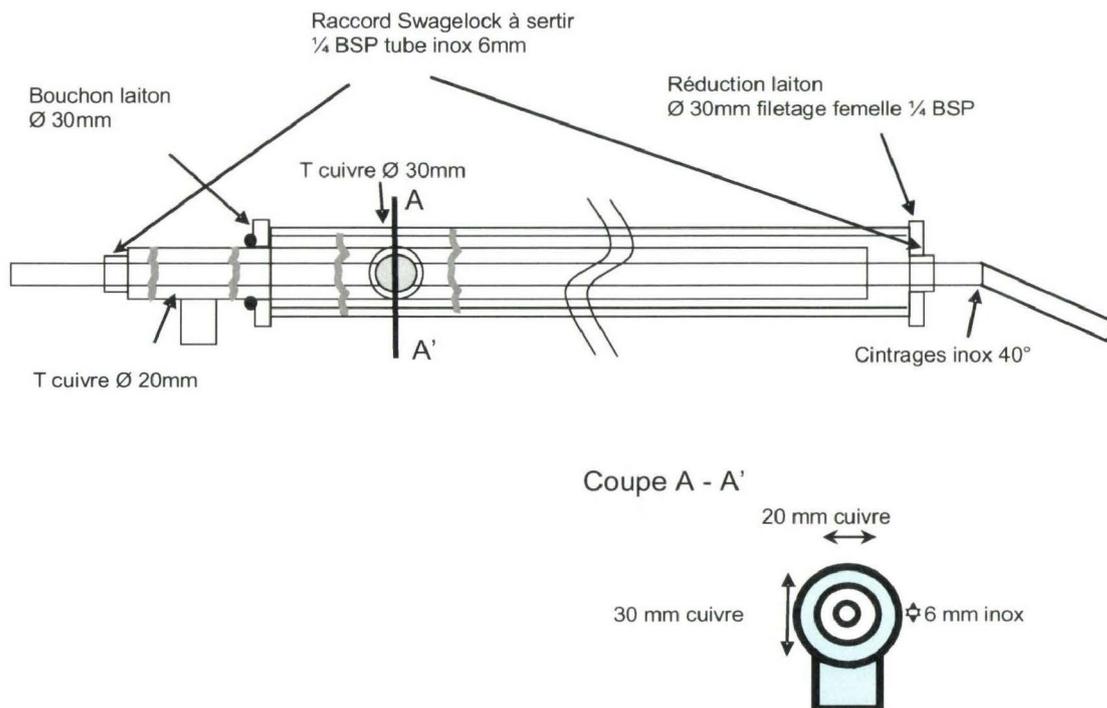


Figure 33 – Sonde de prélèvement de fumées refroidie (sans échelle)

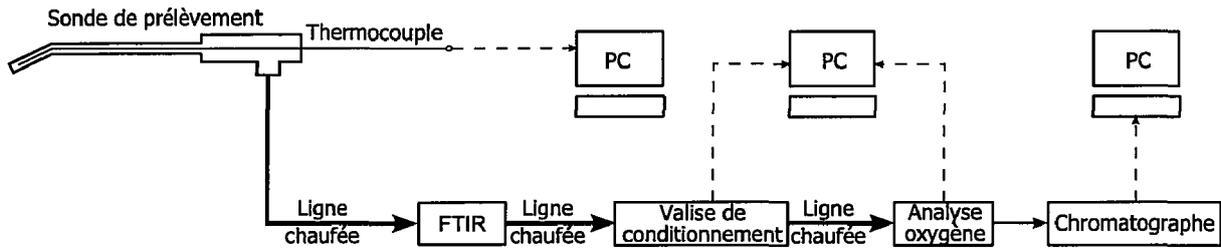


Figure 34 – Montage expérimental pour l'analyse de gaz

La spectroscopie Infrarouge à Transformées de Fourier (IRTF) est fondée sur l'absorption d'un rayonnement infrarouge par les gaz analysés sur un domaine spectral correspondant au domaine d'énergie de vibration des molécules. Le dispositif utilise un interféromètre Michelson (cf. Figure 35). Le système est constitué d'une source, une lampe à vapeur de mercure, un miroir mobile D, un miroir fixe C et un récepteur qui perçoit le flux $\varphi(t)$ qui constitue l'interférogramme. On en déduit la luminance de la source pour une radiation $L(\nu)$, c'est à dire le spectre de la source, par transformation de Fourier. Le faisceau infrarouge est dirigée vers l'interféromètre pour moduler chaque longueur d'onde du faisceau à une fréquence différente. Dans l'interféromètre, le faisceau arrive sur une lame séparatrice B. La moitié du faisceau est alors dirigé sur le miroir fixe C, le reste est dirigé sur le miroir mobile D. Quand les deux faisceaux se recombinaient, des interférences destructives ou constructives apparaissent en fonction de la position du miroir mobile. Le faisceau modulé est alors réfléchi des deux miroirs vers l'échantillon, où des absorptions interviennent. Le faisceau transmis arrive ensuite sur le détecteur pour être converti en signal électrique.

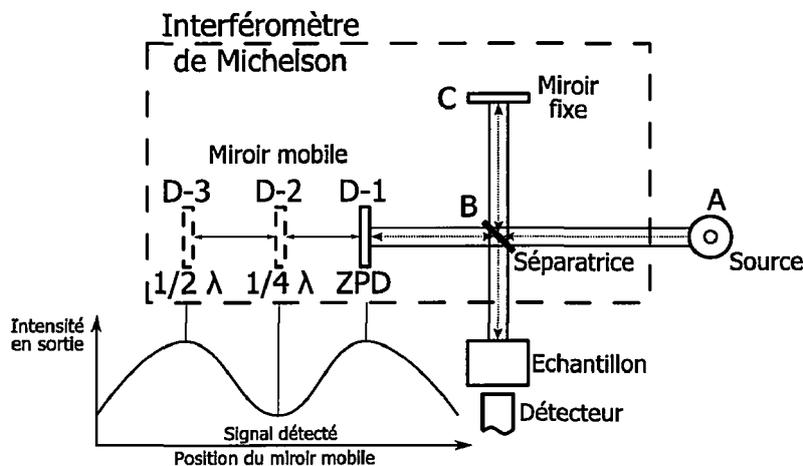


Figure 35 – Schéma du spectroscope d'absorption IRTF

Les longueurs d'onde, auxquelles l'échantillon absorbe, sont caractéristiques des groupes chimiques présents. Toutes les vibrations des molécules ne donnent pas lieu à une absorption de la lumière infrarouge, ceci dépend de la géométrie de la molécule en particulier de sa symétrie. Les gaz diatomiques ou mono atomiques (par exemple N_2 , O_2 , H_2 , Cl_2) et les gaz nobles n'absorbent pas dans le spectre infrarouge. Ce sont les seuls gaz non mesurables avec cette technique. La position des bandes d'absorption va dépendre de la différence d'électro-négativité des atomes et de leur masse. Par conséquent, à un gaz de composition chimique et de structure donnée va correspondre un ensemble de bandes d'absorption caractéristiques permettant de l'identifier. L'intensité de l'absorption est reliée à sa concentration.

Le dispositif IRTF portable utilisé est un analyseur multigaz GASMET DX 4000 avec une échelle spectrale allant de 700 à 4200 cm^{-1} . La résolution de l'appareil est de 8 cm^{-1} et le chemin optique est de 50 m . La pompe prélève des échantillons avec un débit de l'ordre de

3 L/min. Cet analyseur permet d'analyser les gaz suivants : H_2O , CO_2 , CO , N_2O , NO , NO_2 , SO_2 , HCl , HF , NH_3 , CH_4 , C_3H_8 ainsi que la plupart des gaz (HCN , CO , hydrocarbures de 1 à 16, aromatiques/cycliques, acides et dérivés, aldéhydes, cétones, alcools, éthers, etc.) à l'exception des gaz rares, des gaz diatomiques et du H_2S . Le dispositif utilise un algorithme FFT (*Fast Fourier Transform*) pour générer le spectre à partir de l'interférogramme. Le spectre de transmission est calculé en divisant le spectre de l'échantillon par celui du bruit de fond. Le spectre d'absorbance est calculé à partir de celui de transmission. Les concentrations des composants présents dans l'échantillon de gaz sont calculées à l'aide du logiciel CALCMET à partir du spectre d'absorbance.

L'incertitude sur les mesures est de 2 à 3 % de la valeur lue suivant les gaz (5 % pour HF), comme indiqué dans le Tableau 12 et la limite de détection est de 2 à 5 ppm dans la configuration de base. L'ensemble du système demande une stabilisation thermique d'environ 4 h et on observe une baisse de ligne de base d'à peine 1 % sur une utilisation en continu pendant une semaine ce qui est gage d'une bonne stabilité. Par ailleurs, le spectre d'un composant en très forte concentration est inexploitable par écrasement des spectres d'autres composés : 35 - 40 % représente la limite.

L'analyse de l' O_2 (0 - 25 % vol.) est effectuée à l'aide de l'ensemble composé d'un analyseur d'oxygène paramagnétique portable PAROX2100 (avec une incertitude de 0,2 % de l'échelle) et d'un groupe de conditionnement de l'échantillon (filtrage et condensation) PSS-5/3.

Tableau 12 - Incertitudes de mesure du dispositif IRTF

Espèce	Échelle	Incertitude (% de la valeur lue)
H_2O	0 - 25 %vol	2
CO_2	0 - 20 %vol	
CO	0 - 600 mg/ Nm^3	
N_2O	0 - 200 mg/ Nm^3	
NO	0 - 500 mg/ Nm^3	
NO_2	0 - 400 mg/ Nm^3	
SO_2	0 - 500 mg/ Nm^3	
NH_3	0 - 40 mg/ Nm^3	3
HCl	0 - 1000 mg/ Nm^3	3
CH_4	0 - 80 mg/ Nm^3	2
HF	0 - 50 mg/ Nm^3	5
C_3H_8	0 - 100 mg/ Nm^3	2

La chromatographie en phase gazeuse (CPG) est, comme toutes les techniques de chromatographie, une technique qui permet de séparer des molécules d'un mélange éventuellement très complexe de nature très diverse. Elle s'applique principalement aux composés gazeux ou susceptibles d'être vaporisés par chauffage sans décomposition. Elle est de plus en plus utilisée dans les principaux domaines de la chimie.

Le mélange à analyser est vaporisé à l'entrée d'une colonne, qui renferme une substance active solide ou liquide appelée phase stationnaire, puis il est transporté à travers celle-ci à l'aide d'un gaz porteur (ou gaz vecteur). Les différentes molécules du mélange vont se séparer et sortir de la colonne les unes après les autres après un certain laps de temps qui est fonction de l'affinité de la phase stationnaire avec ces molécules.

Le dispositif utilisé pour cette campagne est un analyseur VARIAN CP 4900, il intègre 3 colonnes donc trois voies analytiques. Pour cette étude seul l'hydrogène était mesuré avec cet appareil. Pour ces mesures nous ne disposons que d'un étalonnage pour l'hydrogène (étalons

de 5 % H₂/QS N₂ et 25 % H₂/QS N₂). Cet appareil est relié en aval du groupe de conditionnement de l'échantillon (filtrage et condensation) PSS-5/3 qui dessert l'analyseur d'oxygène paramagnétique.

Pour ce qui est des incertitudes avec cet appareil, celles-ci sont évaluées à 0,1 % sur la mesure de l'air du pic mesuré, par le passage de 9 fois un gaz étalon à 25 % d'hydrogène (donc 0,05 % près sur l'étalon). Nous avons donc une incertitude maximale qui est celle de la pleine échelle 25 % soit une valeur à 1,25 % près.

La sonde de prélèvement a été placée au sein du foyer à travers les accès 1-5, utilisés pour les mesures de vitesse (cf. Figure 31, page 70). Chaque profil se compose de 5 points espacés d'environ 144 mm. Le maillage ainsi obtenu est illustré dans la Figure 36. la distance entre la paroi et le premier point (A), ainsi que celle entre le dernier point (E) et la paroi, est d'environ 80 mm.

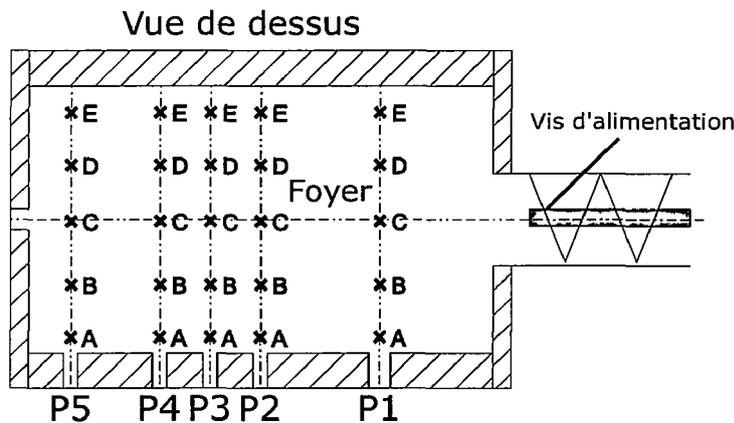


Figure 36 - Points de prélèvement pour l'analyse locale des gaz

4.4 Conditions d'essais

Les paramètres variés pour les différents essais sont : la distribution d'air secondaire (symétrique ou asymétrique, cf. Figure 37) ; la valeur de consigne du taux d'oxygène dans les fumées ; la charge des variateurs de vitesse de rotation des ventilateurs et de la vis d'alimentation, l'ouverture des volets d'air (0 % complètement fermé - 100 % complètement ouvert) ; le débit réel du bois par rapport à la valeur nominale et la charge de la chaudière. Le Tableau 13 regroupe les valeurs de ces paramètres pour chaque jour d'essai. Dans tous les cas le débit d'air tertiaire était nul. Le schéma d'alimentation en air secondaire est montré Figure 37.

Tableau 13 - Paramètres d'essai

Essai	Alim. Air2 (A2)	% O ₂	Variateurs (%)				Volets (%)			Charge (%)
			Air1 (A1)	A2	Vis foyer		A1		A2	
					Var.	Débit	Volet 1	Volet 2		
E1C1	sym.	11	80	50	60	50	60	50	50	60
E1C2	asym.	10	100	60	60	50	70	70	50	60
E2C1	asym.	11	100	100	38	38	100	100	100	100
E2C2	sym.	11			40	40				
E2C3	sym. ^a	8			36	36				
E3C1	sym. ^b		40	50	50	46	60	40	40	100

^aL'arrivée « X » ouverte à la fin de l'essai, fermée le reste du temps (cf. Fig. 37c) ;

^bL'arrivée « X » ouverte.

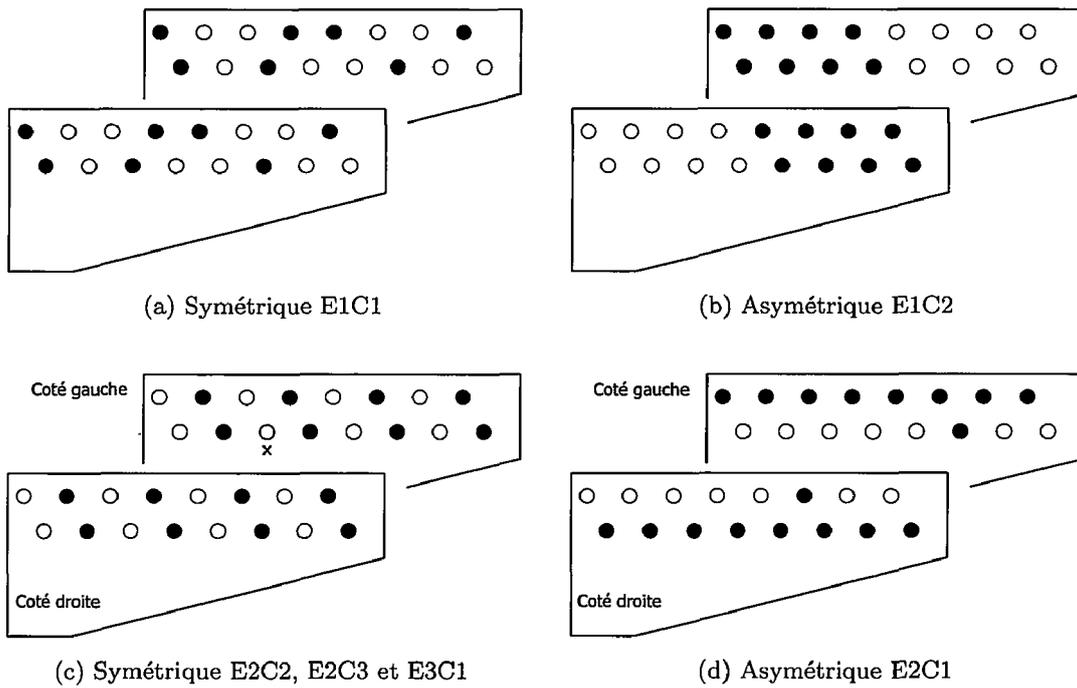


Figure 37 - Distribution d'air secondaire

Chapitre 5

Résultats

Sommaire

5.1	Étude expérimentale	77
5.1.1	Mesures globales	77
5.1.2	Températures locales	81
5.1.3	Vitesses locales	85
5.1.4	Concentrations locales des gaz	91
5.1.5	Conclusion	97
5.2	Étude numérique	98
5.2.1	Combustion homogène	98
	Effet de la distribution d'air secondaire	100
	Effet du mécanisme cinétique de combustion	102
	Analyse de l'écoulement	104
5.2.2	Calcul 2D du transfert thermique au sein du lit combustible	111

5.1 Étude expérimentale

5.1.1 Mesures globales

Les mesures globales donnent des informations sur le comportement de l'installation. Pour que les données expérimentales soient utilisables pour déterminer les conditions aux limites et pour la validation du modèle numérique le régime de fonctionnement permanent doit être atteint. Cette condition n'a pas été vérifiée pour les essais E1C1 (cf. Figure 38) et E1C2 ce qui nous a poussé à identifier des intervalles de régime quasi-stationnaire afin d'obtenir les valeurs moyennées nécessaires pour le calcul numérique qui caractérisait donc seulement ces courtes périodes de régime quasi-stationnaire et non pas le régime permanent de fonctionnement (spécifique à l'exploitation des installations industrielles). Concernant les mesures globales enregistrées pour les essais E2C1 - E2C3, les évolutions de la température du foyer, des concentrations de NO_x , CO_2 et O_2 , ainsi que des températures de l'eau aux sorties de la chaudière (T_{eau}) et de l'échangeur de chaleur (T_{sr1}) sont présentées dans les Figures 39 et 40 et seront analysées par la suite.

Les variations de ces paramètres montrent que le régime permanent n'est pas atteint lorsque l'essai est fait seulement sur une journée (9 heures) (cf. Fig. 39a et 39b), bien que les taux d' O_2 et de CO_2 semblent stables sur certaines périodes. Pour que le régime soit établi il faut atteindre minimum six heures, comme le montre la Figure 39c (qui présente seulement les variations sur une période de quatorze heures de l'intervalle total d'essai E2C3). Ces considérations sont confirmées par la température de l'eau aux sorties de la chaudière et de l'échangeur de chaleur (cf. Fig. 40).

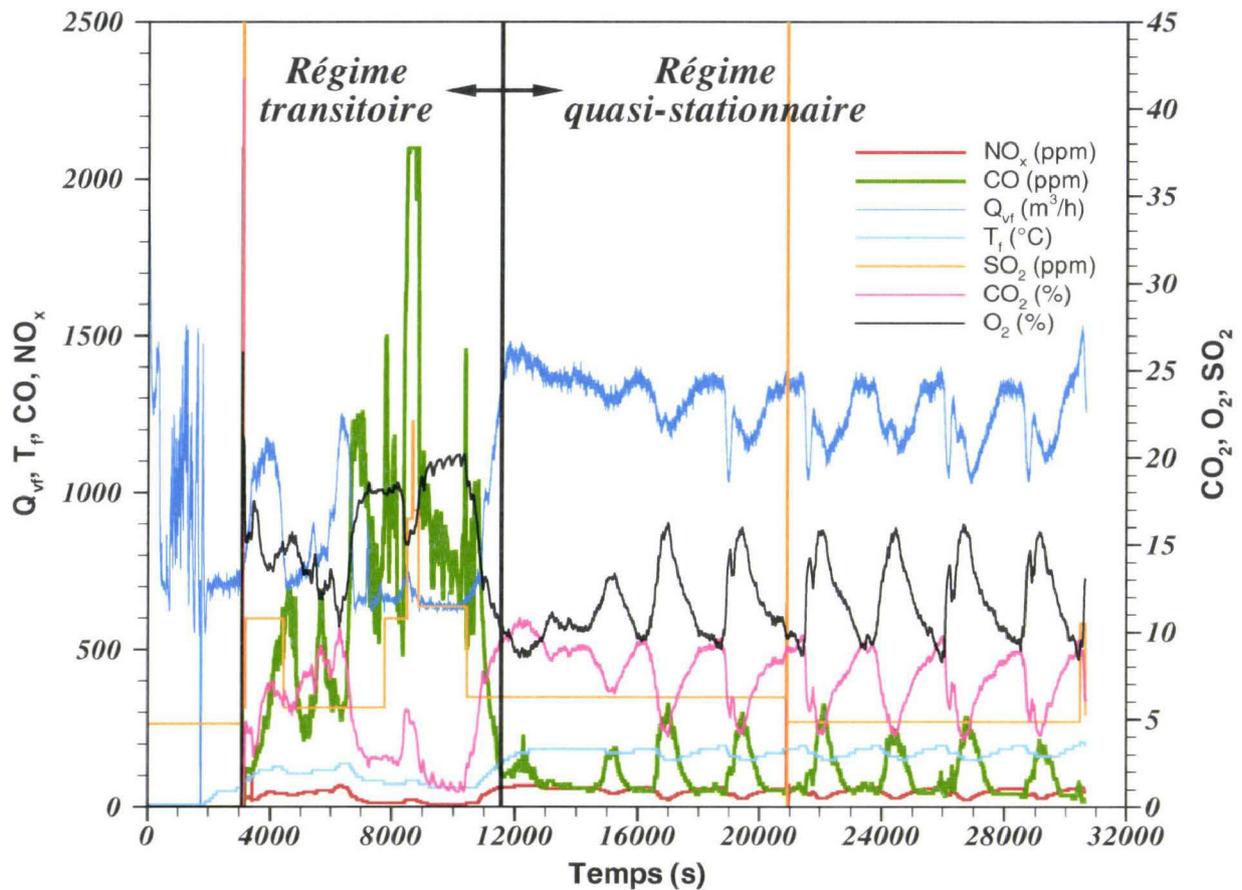


Figure 38 – Évolution des paramètres des fumées pour l'essai E1C1

La variation du taux de NO_x est en phase avec la variation de la température du foyer pour les deux derniers essais (cf. Fig. 39b et 39c), ce qui n'est pas le cas pour l'essai E2C1 (cf. Fig. 39a). Cette évolution peut être expliquée par les distributions d'air différentes (symétrique et asymétrique) et probablement par le déplacement du front de flamme vers la vis d'extraction des cendres. Une distribution d'air secondaire asymétrique pourrait créer un milieu réducteur localement dans le foyer et ainsi limiter les émissions de NO_x . À son tour, cette zone réductrice pourrait être conditionnée par l'écoulement, qui joue également sur la température et qui est directement proportionnel aux flux d'air. Ceux-ci dépendent du système de régulation et donc des grandeurs utilisées dans ce but : températures du foyer, des fumées et de l'eau à la sortie de la chaudière qui jouent sur les débits de bois et d'air primaire et le taux d' O_2 qui régit le débit d'air secondaire. Or, c'est l'air secondaire qui crée des zones de recirculation au sein du foyer. Autrement dit, lorsque le taux d' O_2 s'approche (diminue, c.-à-d. il y a un manque d'oxygène) de la valeur de consigne (cf. Tableau 13, page 74) le système de régulation ouvre progressivement le volet d'air secondaire, ce qui va générer des structures de recirculation au sein du foyer. L'augmentation du débit d'air va assurer une meilleure combustion des matières volatiles, au niveau global, ce qui va provoquer une augmentation des températures. De plus, si dans cette configuration de l'écoulement il y a localement des milieux réducteurs une diminution du taux de NO_x doit être attendue. Cependant, ces considérations restent toujours dans le contexte du régime transitoire, car malheureusement le régime stationnaire n'est pas atteint pour la distribution asymétrique d'air secondaire.

La Figure 41, page 81, met en évidence les régimes de fonctionnement et l'importance de la durée minimale d'essai (36 heures) afin d'aboutir à un intervalle significatif de régime stationnaire.

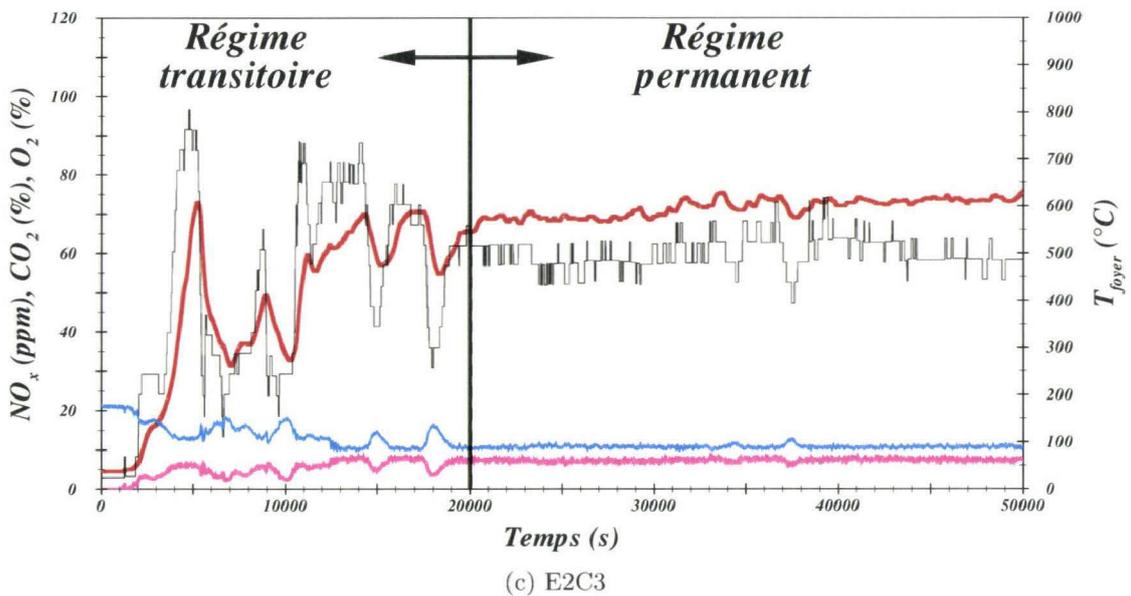
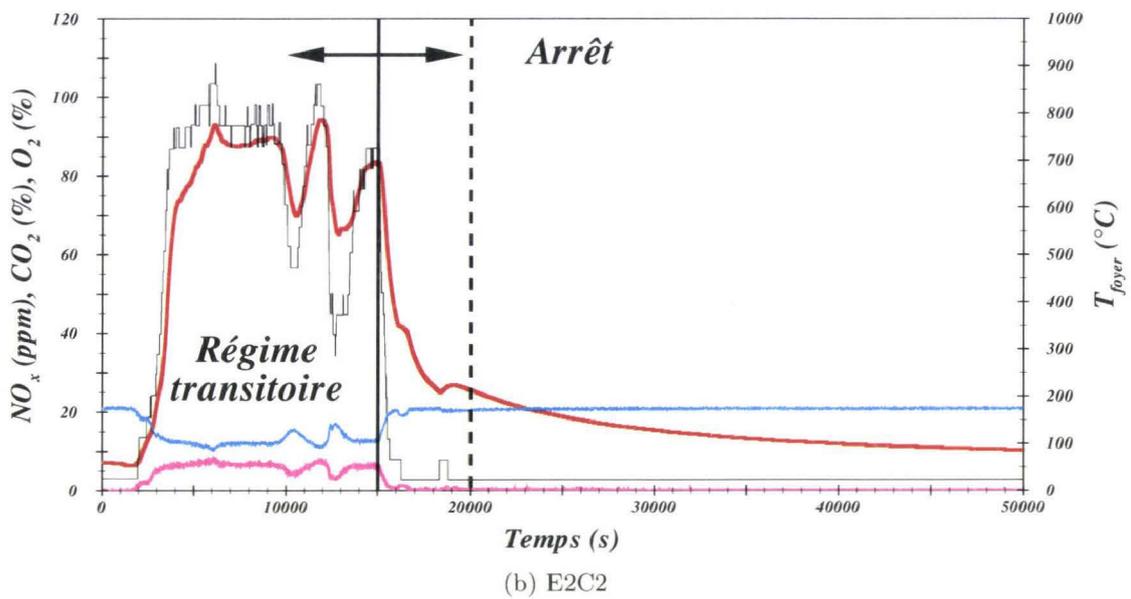
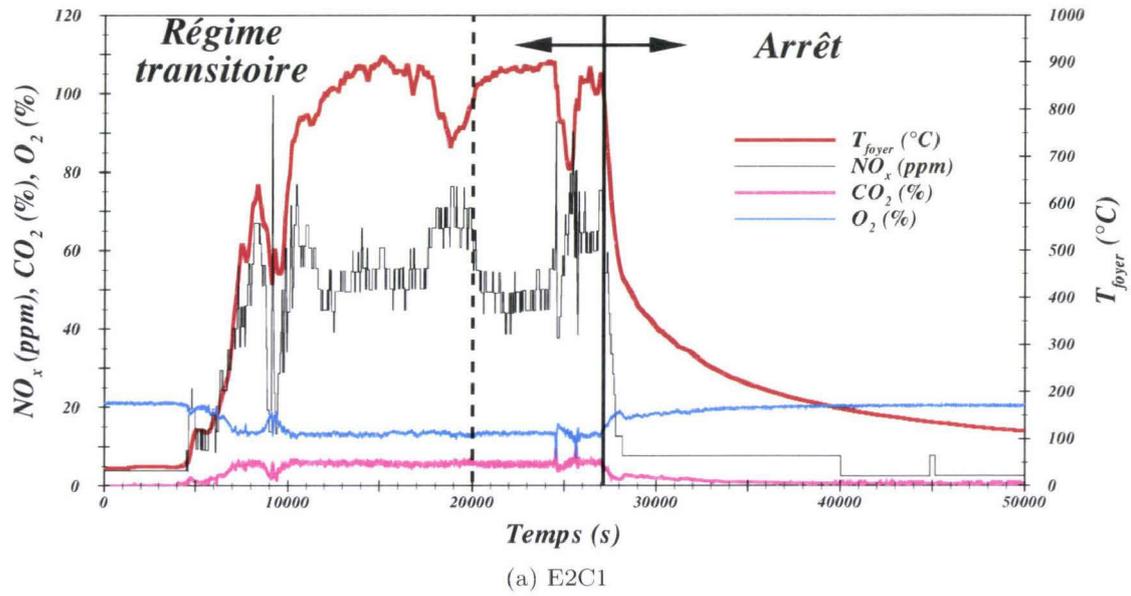
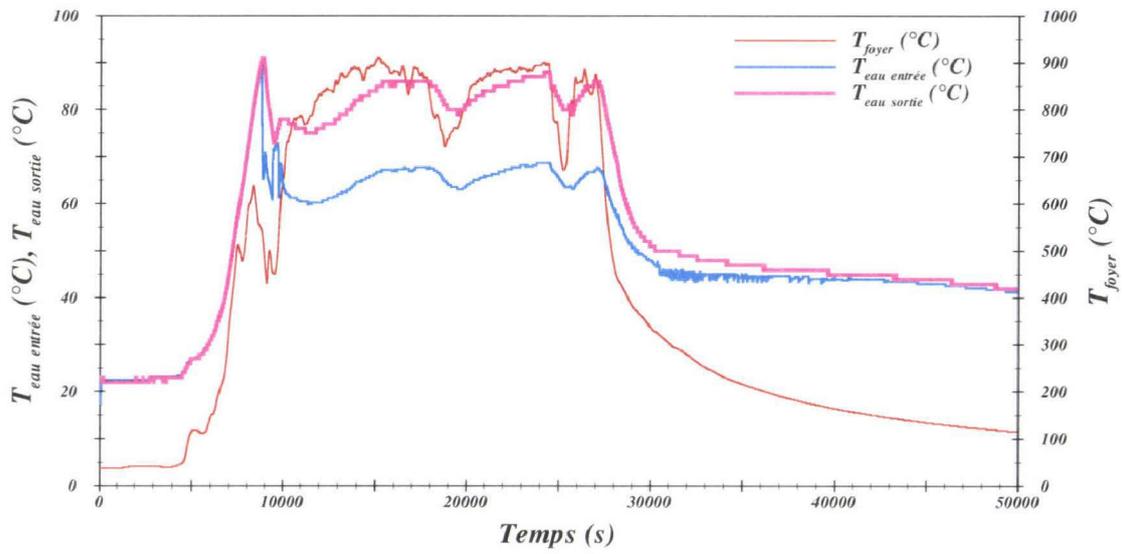
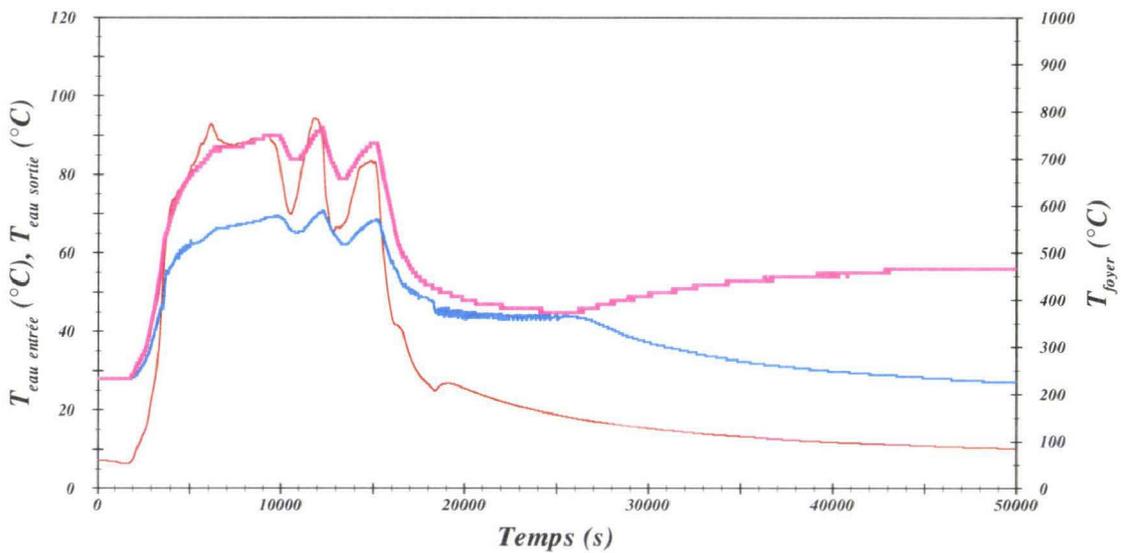


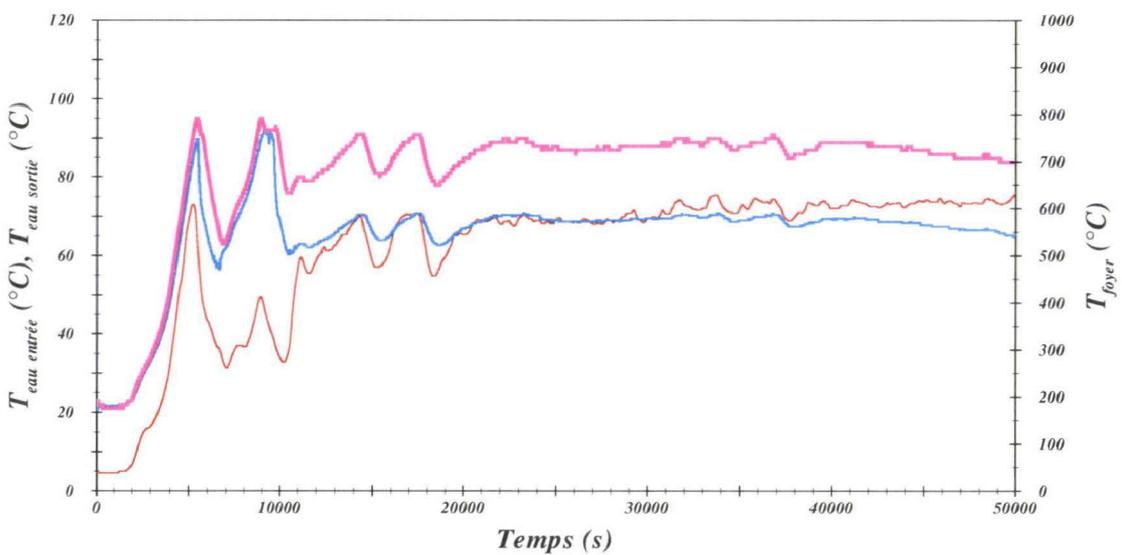
Figure 39 – Évolutions de la température du foyer et des concentrations des gaz



(a) E2C1



(b) E2C2



(c) E2C3

Figure 40 – Évolution des températures de l'eau (T_{sr1} - entrée; T_{eau} - sortie chaudière) et du foyer (T_{foyer})

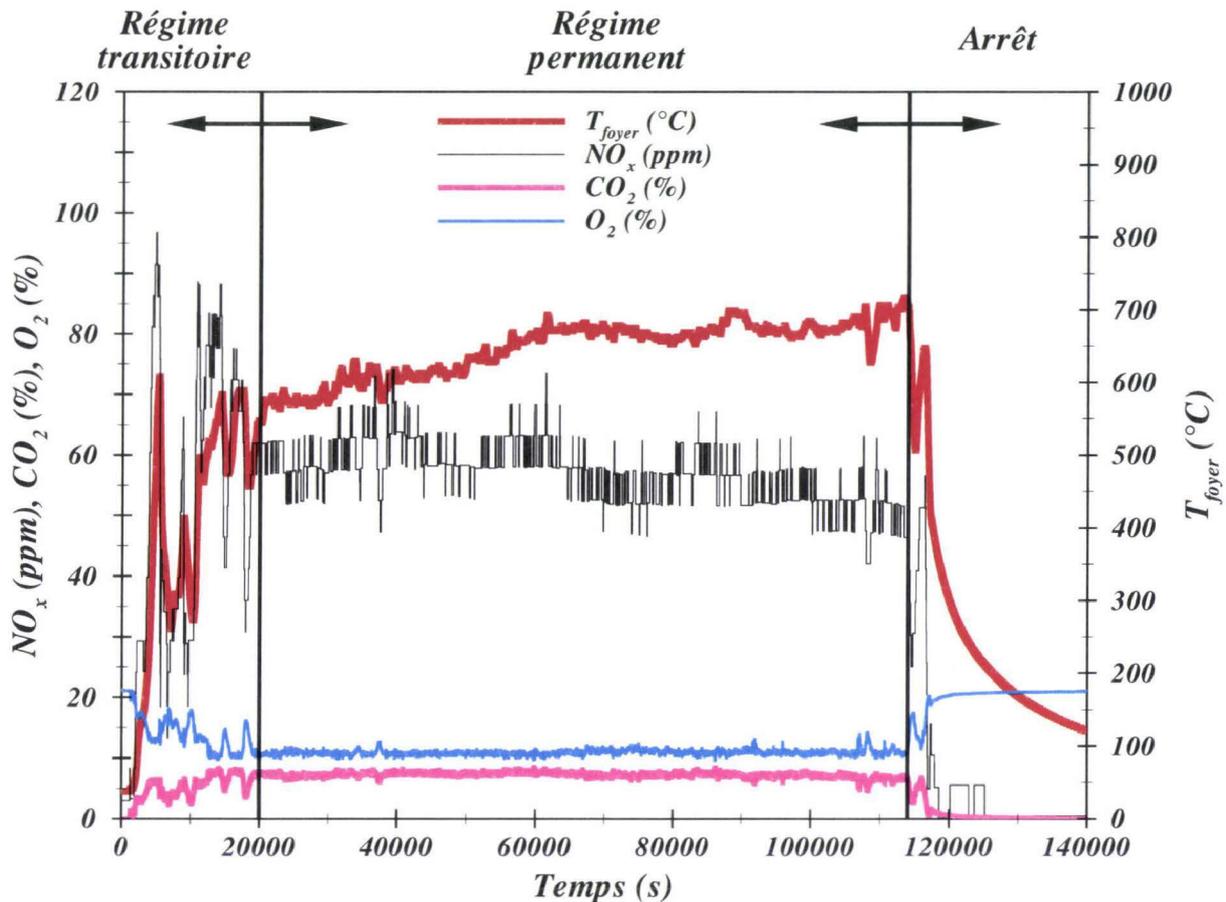


Figure 41 – Régimes de fonctionnement (E2C3)

5.1.2 Températures locales

Les profils de température au sein du foyer sont présentés dans les Figures 42–46, page 82 *sq.* Pour les essais E1C1, E1C2, E2C1 et E2C2 l'emplacement des thermocouples est donné dans la Figure 23, page 63. En ce qui concerne l'essai E3C1, la température a été mesurée à l'aide du thermocouple placé dans la sonde de prélèvement des gaz (cf. Figure 33, page 71).

On remarque que les évolutions de la température au sein du foyer pour l'essai E1C1 (cf. Figure 42) présentent des oscillations similaires que celles des paramètres globaux correspondants (cf. Figure 38, page 78). Les régimes de démarrage et d'arrêt sont bien mis en évidence dans les Figures 42 et 43. Également, les profils correspondant aux essais E2C1 et E2C2 (cf. Figures 44 et 45) montrent que le régime stationnaire n'est pas atteint dans ces cas.

La croissance graduelle de la température enregistrée au long du four pour la distribution asymétrique (cf. Figure 37d, page 75) d'air secondaire indique (cf. Figure 44, page 83) un allumage au milieu de la grille. Ainsi, la Gaine 1 se situe au niveau de la zone de séchage, la Gaine 2 enregistre les températures au-dessus de la zone de début de dévolatilisation, la Gaine 3 correspond à la zone de dévolatilisation et finalement la Gaine 4 à la fin de dévolatilisation et début de la combustion homogène.

Dans les autres cas, exception faite de l'essai E3C1, le niveau de température se situe, au bout de deux heures, entre 700 °C et 1100 °C pour tous les profils. Ce qui indique que les zones de séchage et dévolatilisation sont confinées entre l'emplacement de la Gaine 1 et de la vis d'alimentation en bois.

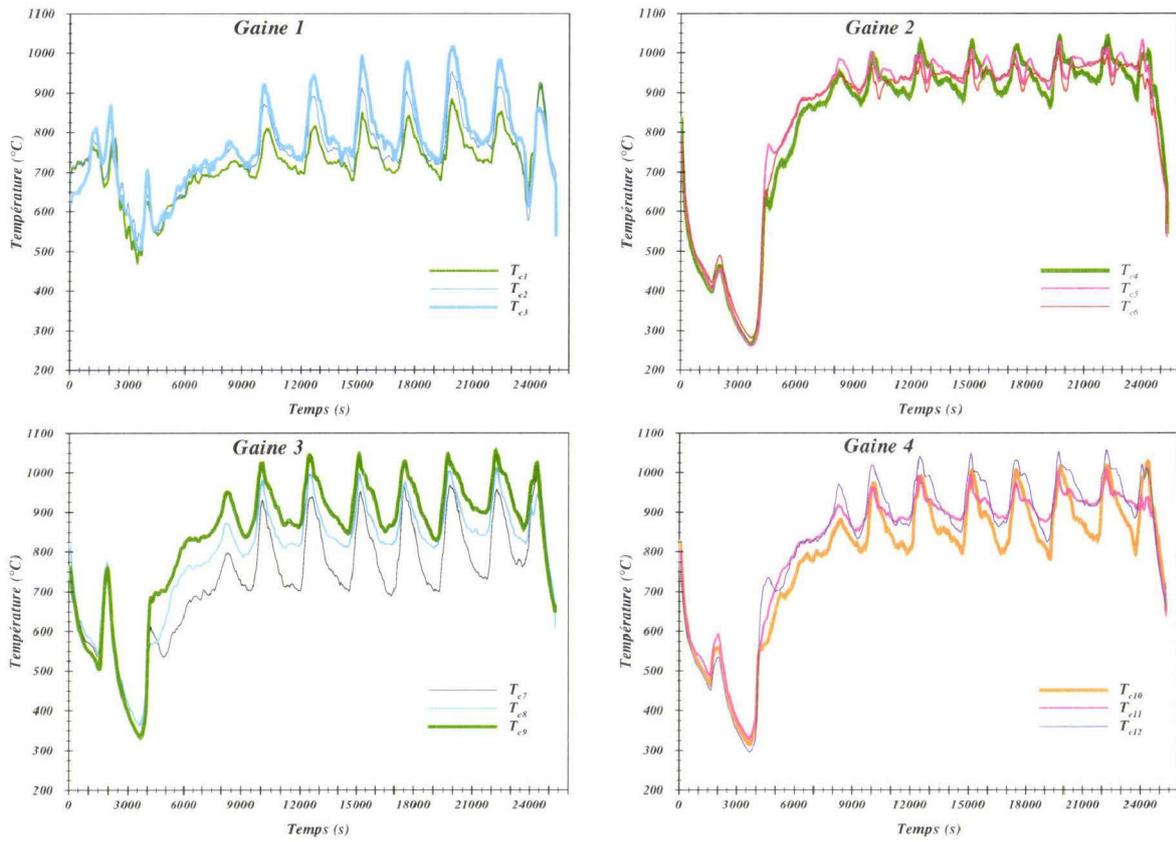


Figure 42 – Profils de température E1C1

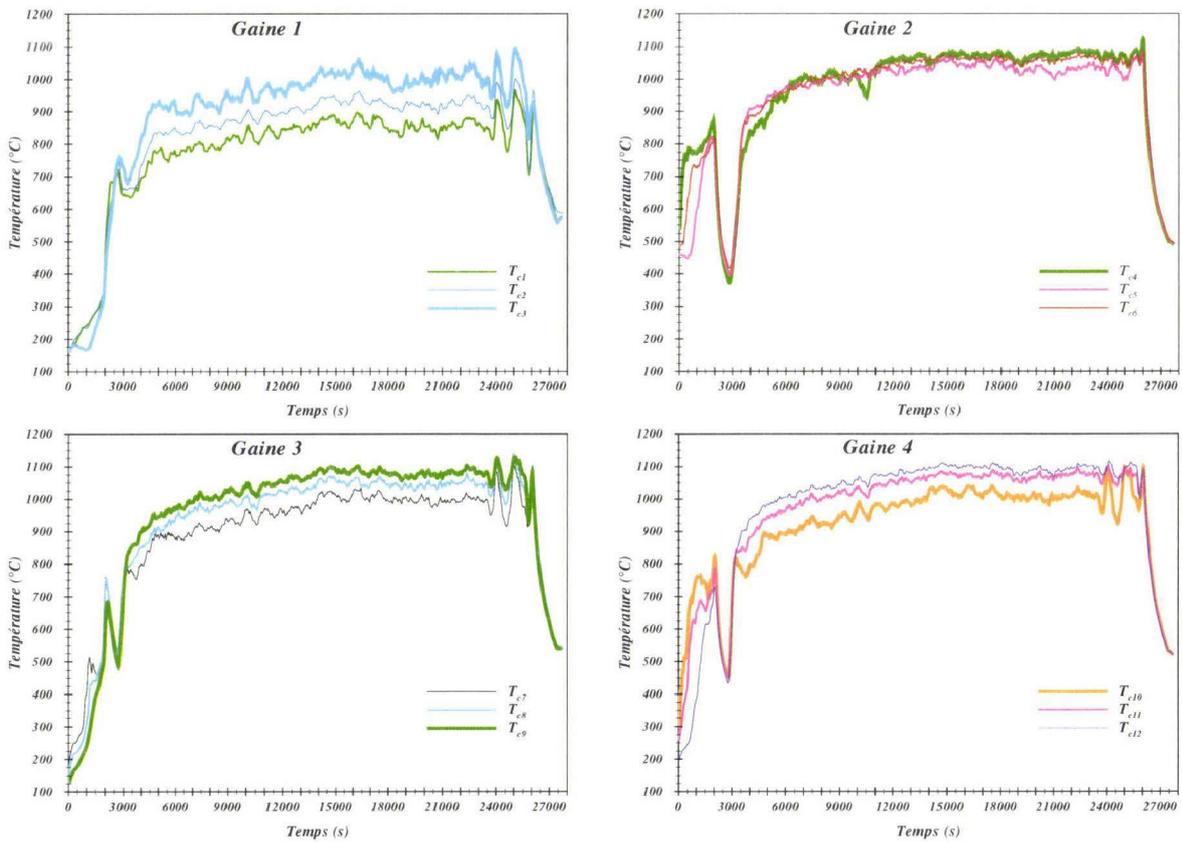


Figure 43 – Profils de température E1C2

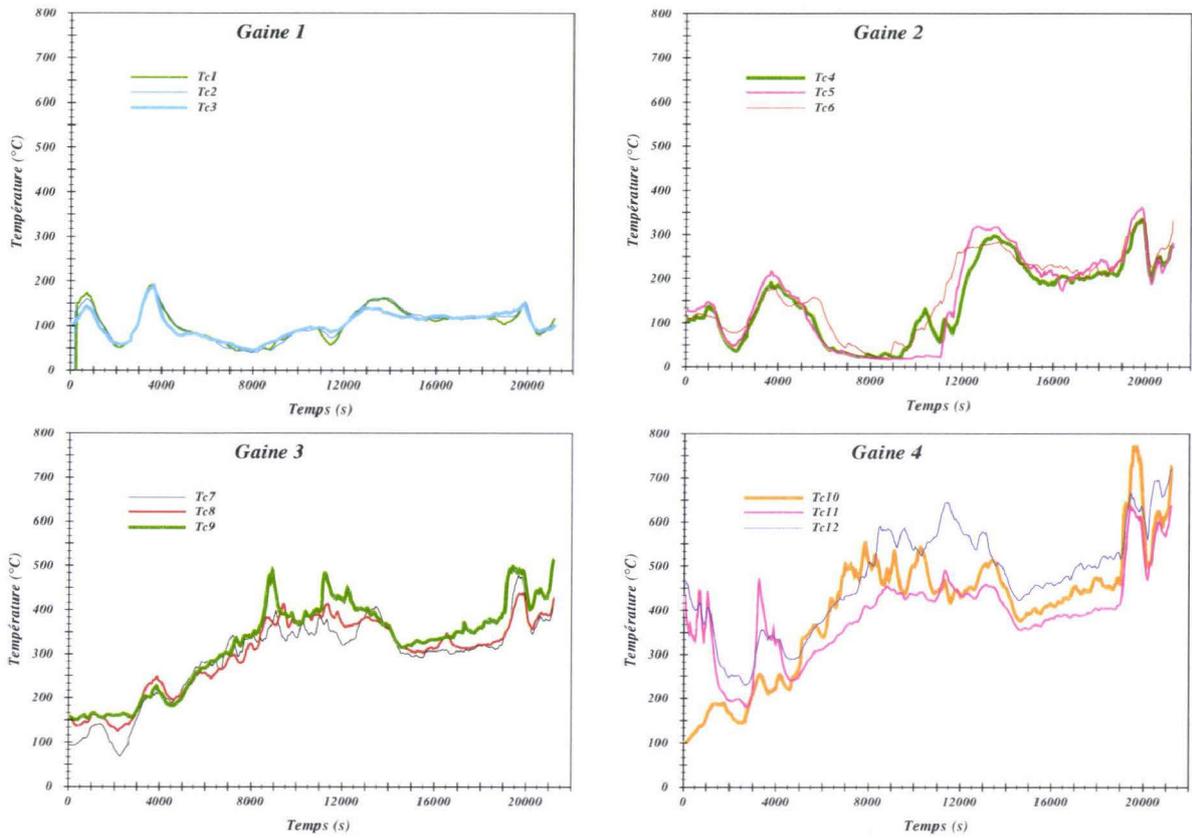


Figure 44 – Profils de température E2C1

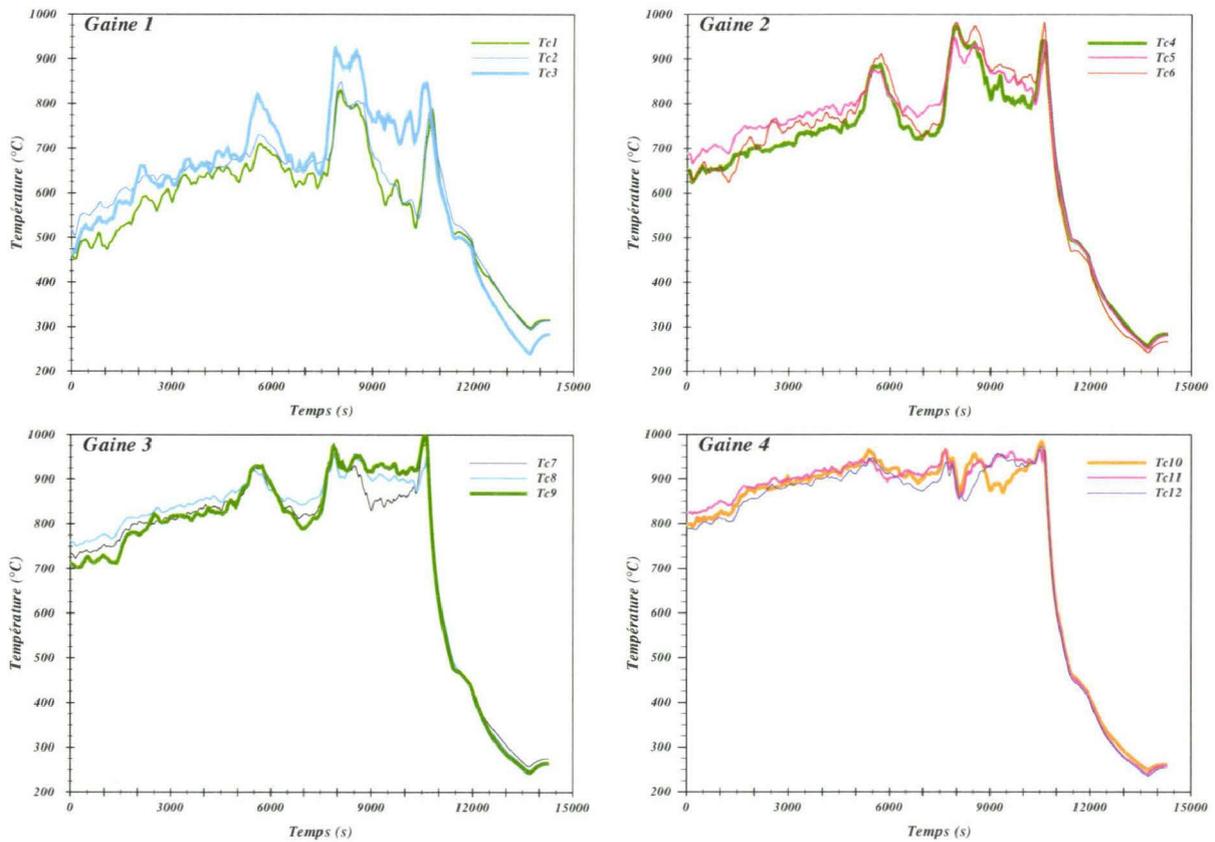


Figure 45 – Profils de température E2C2

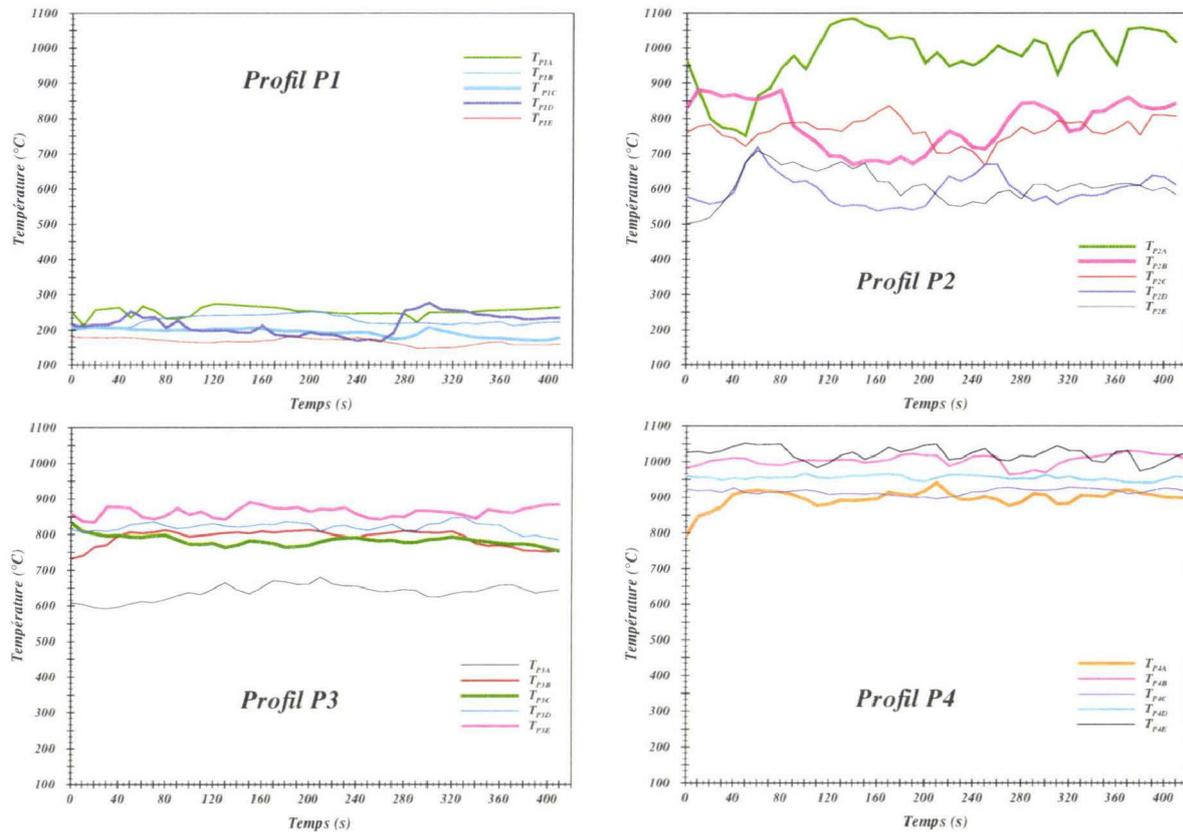


Figure 46 – Profils de température E3C1

Généralement, les températures sont plus élevées dans les régions proches des parois (cf. Figures 42–45) qu’au centre du foyer (au niveau de la surface du lit combustible). Ceci peut indiquer que les flammes se développent plutôt près des parois, fait observé d’ailleurs visuellement par le hublot de la porte du foyer. Ce qui se traduit encore par une abondance d’air primaire dans ces régions plus importante que dans les zones centrales. Donc, l’air primaire est susceptible de rentrer dans le foyer plutôt par l’espace existant entre les bords de la grille et les parois du foyer⁸.

Les profils illustrés dans la Figure 46 ont été mesurés, comme précisé au début du paragraphe, à l’aide du thermocouple placé dans la sonde de prélèvement des gaz (cf. Figure 34, page 72). Les mesures ont été réalisées⁹ selon le schéma présenté dans la Figure 36, page 74. Ainsi, les températures enregistrées dans ce cas indiquent que le front d’allumage se situe (au long de la grille) entre les positions correspondant aux profils P1 et P2. Également, le nombre supérieur des points de mesure met mieux en évidence la dissymétrie transversale de la température (et implicitement des zones de réaction), car les températures aux points P1A et P2A sont supérieures aux valeurs enregistrées aux points P1E et P2E. De plus, cette tendance est inversée pour les profils P3 et P4.

Pour conclure, les températures mesurées au-dessus du lit de combustible montrent que la distribution d’air secondaire a peu d’impact à ce niveau. Ces mesures mettent également en évidence une dissymétrie transversale, liée à l’hétérogénéité qui caractérise le lit de combustible et à la circulation de l’air primaire.

8. La taille de cet espace varie au long de la grille entre environ 3 et 7 mm.

9. Il faut mentionner que les mesures concernant le profil P5 n’ont pas pu être réalisées en raison de l’indisponibilité de l’installation.

5.1.3 Vitesses locales

Les mesures de vitesse ont été réalisées en mode « coïncidence », c'est-à-dire que seules les particules dont la vitesse est mesurable simultanément dans les deux composantes sont prises en compte. Ce qui réduit considérablement le nombre d'échantillons mais accorde une validité maximale aux mesures instantanées.

Comme mentionné précédemment, chaque profil se compose d'une vingtaine de positions espacées de 20 mm. Pour chaque position, le système analyse le signal (« burst ») des particules passant à l'intérieur du volume de mesure défini par le croisement des faisceaux pendant un temps d'acquisition, ici de 100 secondes. Seuls les signaux, satisfaisant différents critères de validité (p. ex. rapport signal/bruit) pour les deux composantes simultanément, sont enregistrés. Le taux de validité variait ici de 10 à 20 %. Ainsi, pour chaque position, nous obtenons un signal temporel de vitesse pour chaque composante tel que celui présenté en exemple Figure 47 qui met bien en évidence la nature turbulente de l'écoulement.

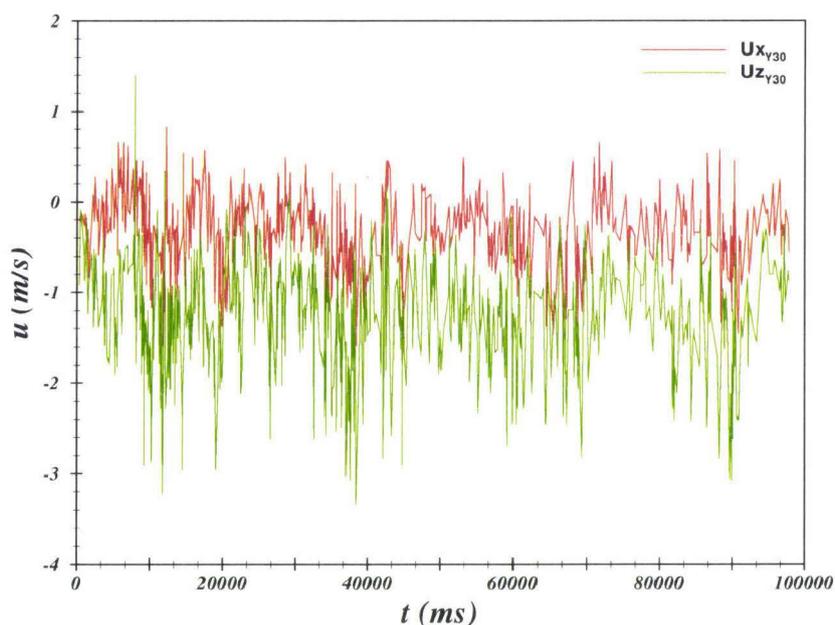


Figure 47 - Exemple de signaux temporels pour le profil P5 à la position $y = 30$ mm

Les profils moyens sont enfin construits à partir des signaux temporels en faisant une moyenne d'ensemble et non pas une moyenne temporelle. En effet, le nombre d'échantillons, et en conséquence la fréquence d'échantillonnage, est généralement trop faible pour avoir une réelle signification statistique.

Pour avoir une correspondance avec le fonctionnement de la chaudière, l'heure de début de chaque profil (fournie par la chaîne de mesure) est indiquée. Sachant que chaque acquisition de point durait 100 secondes, la durée de mesure d'un profil est d'environ 30 minutes. Les mesures sont effectuées dans l'ordre des x ou y décroissants (c'est-à-dire que le temps indiqué correspond au début de la mesure du point au centre de la chaudière).

Chaque profil correspond à un accès de mesure représenté dans la Figure 31 (page 70). Pour les positions 5 et 6, des mesures supplémentaires ont été réalisées en ouvrant l'arrivée « X » (cf. Figure 37c, page 75) d'air (donnant alors une configuration d'arrivée d'air symétrique) pour évaluer l'influence de celle-ci. La deuxième mesure (configuration symétrique) sur l'accès 6 n'a pas été menée à terme du fait de l'arrêt de la chaudière.

Les résultats sont présentés dans les Figures 48–55. À part les profils moyens des deux composantes de vitesse, un histogramme est également ajouté pour indiquer le nombre de valeurs de vitesse enregistrées ayant servi au calcul de la moyenne. Ce nombre, N_s permet à la fois de fournir une information sur la quantité locale de particules en suspension et sur la qualité

statistique de chaque point de mesure.

La distance focale de la lentille est égale à 750 mm et elle est comptée à partir des origines des axes du référentiel choisi (cf. Figure 32, page 71), c'est-à-dire à l'extérieur de la chaudière. Les profils illustrés ci-dessous présentent sur l'abscisse seulement la distance à l'intérieur du foyer (0 correspond à la paroi interne du foyer). La longueur utile est donc égale à la différence entre la distance focale de la lentille et l'épaisseur de la paroi (380 mm pour le côté - accès P1 à P5 - et 160 mm pour la porte - accès P6). Par conséquent, une valeur négative sur l'axe x correspond à un emplacement à l'intérieur de l'accès.

D'une manière générale, les vitesses aux points étudiés sont au maximum de 2 à 2,5 m/s pour la composante longitudinale u_x . Dans la majeure partie du foyer, cette composante est toujours positive indiquant un seul sens d'écoulement du fond du foyer vers la porte, conformément à ce qui était attendu.

Pour les vitesses verticales, les amplitudes maximales sont de l'ordre de 1,5 à 2 m/s. Dans la plupart des cas, les vitesses changent de signe le long de la direction transverse indiquant la présence d'une zone de recirculation.

Les vitesses transverses u_y , uniquement mesurées sur l'axe (accès 6, Fig. 54, page 90), sont pratiquement nulles. Dans la configuration dissymétrique, nous pouvons observer un sensible accroissement de la vitesse à 0,5 m/s vers la gauche du foyer, cohérent avec le fait que le côté droit présente une arrivée d'air supplémentaire. Mais le manque de points de comparaison ne permet pas de conclure sur la valeur significative de cette différence.

Pour l'accès 1 (cf. Figure 48), au fond du foyer, nous obtenons un profil longitudinal u_x avec des vitesses très faibles au centre (0,5 m/s) et maximales à proximité de la paroi (2,5 m/s). Les vitesses verticales u_z sont positives et relativement élevées par rapport au reste du foyer et tendent à devenir nulles au centre du foyer. Les informations sont ici insuffisantes pour conclure sur une structure particulière (recirculation) de l'écoulement, mis à part un profil global concave orienté à 45° vers le haut et la sortie du foyer.

Pour l'accès 3 (cf. Figure 50, page 88), l'écoulement longitudinal présente une structure concave avec un maximum à près de 2,5 m/s en $y = 480$ mm. La paroi étant à environ 380 mm, la « couche limite » fait donc environ une dizaine de centimètre. Au centre, ces vitesses sont de l'ordre de 1 m/s. Le changement de signe de la vitesse verticale de 1 m/s près des parois et - 0,5 m/s au centre signale, soit la base d'une recirculation, soit une recirculation aplatie. C'est cette dernière supposition qui semble la plus probable du fait que l'on se situe sous les arrivées d'air latérales (cf. Figure 56, page 91).

L'accès 2 (cf. Figure 49) présente pratiquement le même profil que celui du 3. La différence est qu'il est plus irrégulier du fait d'un faible ensemencement (ceci signifie aussi que les circulations de particules sont peu importantes à ce niveau du foyer).

Pour l'accès 4 (Fig. 51, page 88), le profil longitudinal a la particularité d'être quasiment plat au cœur du foyer. La décroissance de vitesse près de la paroi reste de l'ordre de 10 cm. Les vitesses verticales sont nulles au centre de la chaudière mais nous avons une remontée de particules proche de la paroi.

Les principales différences entre les profils 2, 3 et 4 sont probablement dues à l'écart relatif entre l'accès de mesure et les arrivées d'air latérales.

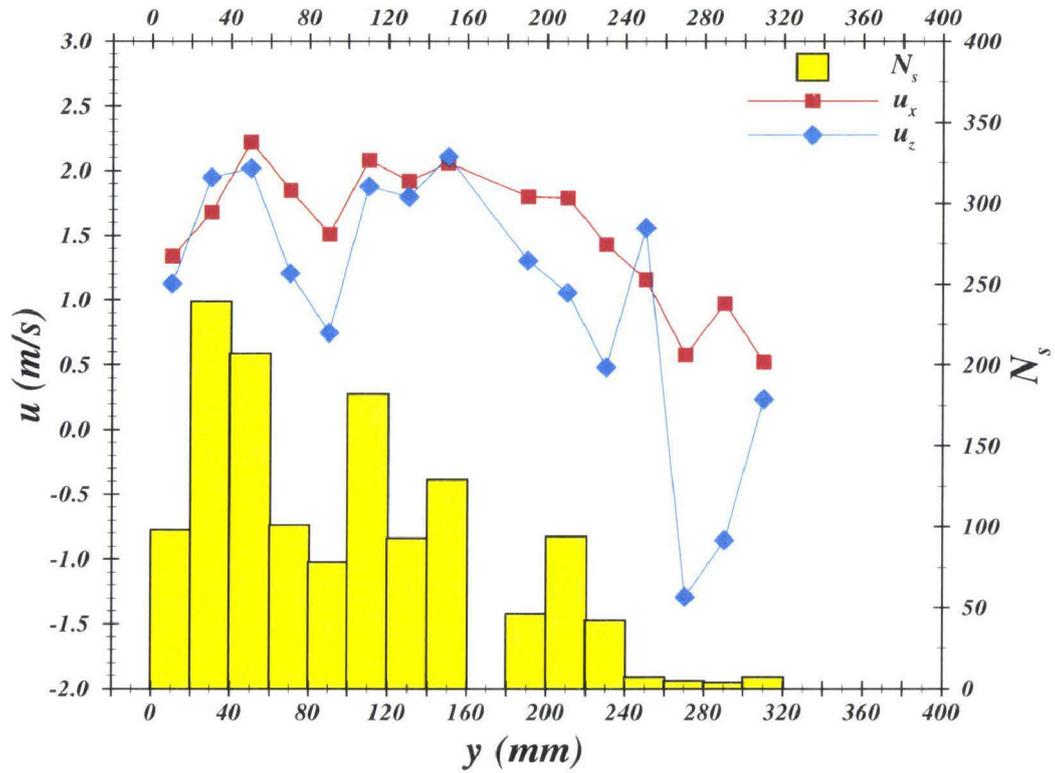


Figure 48 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P1

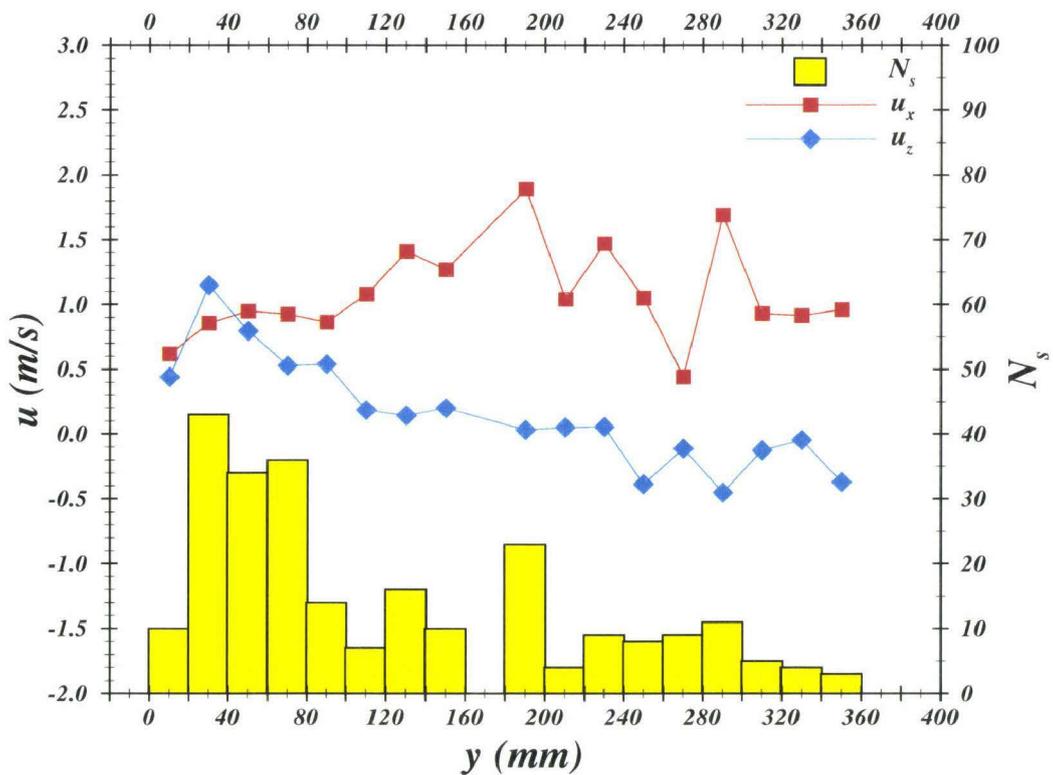


Figure 49 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P2

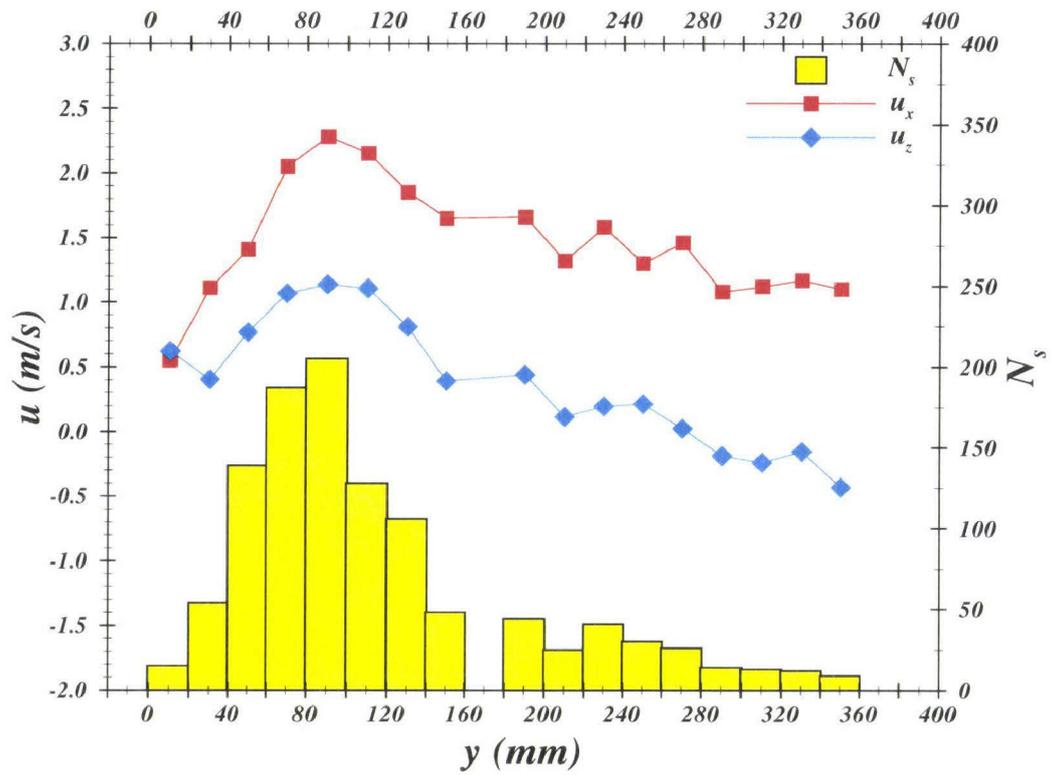


Figure 50 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P3

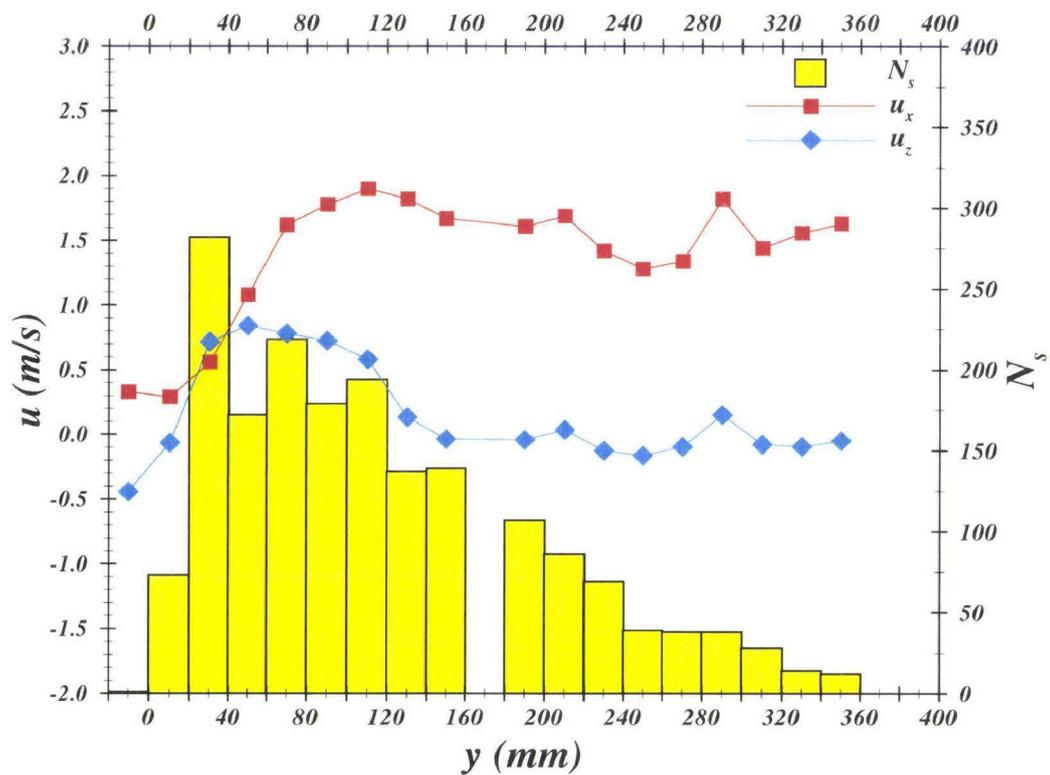


Figure 51 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P4

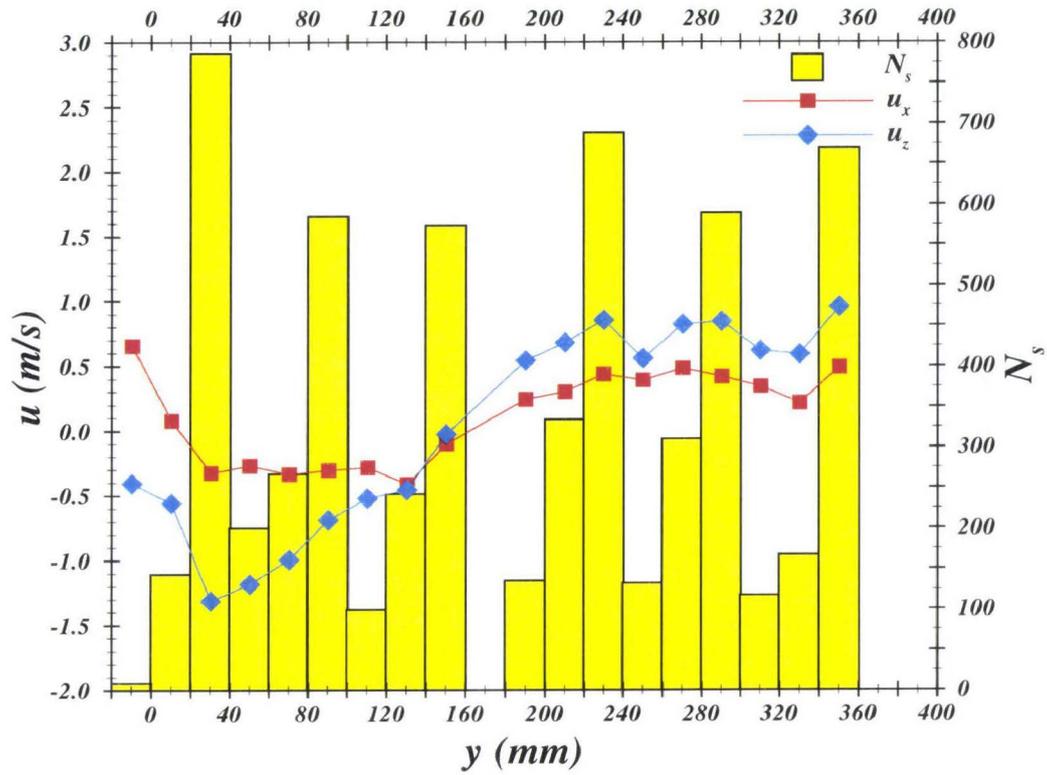


Figure 52 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P5

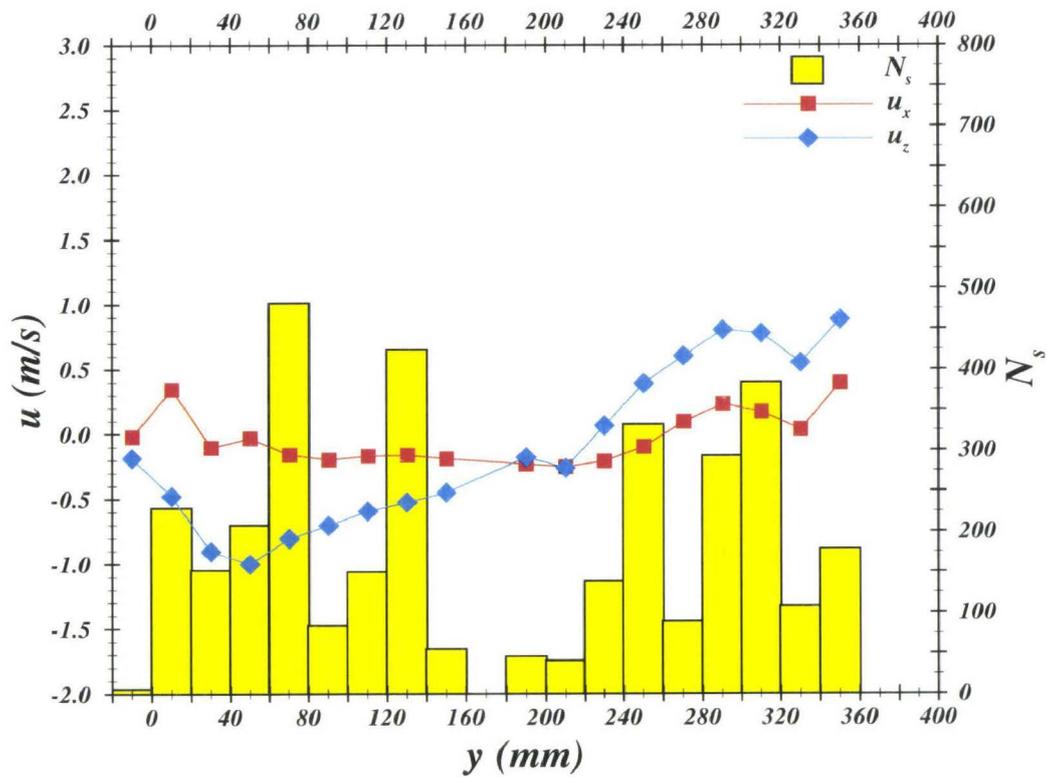


Figure 53 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P5 distribution d'air symétrique

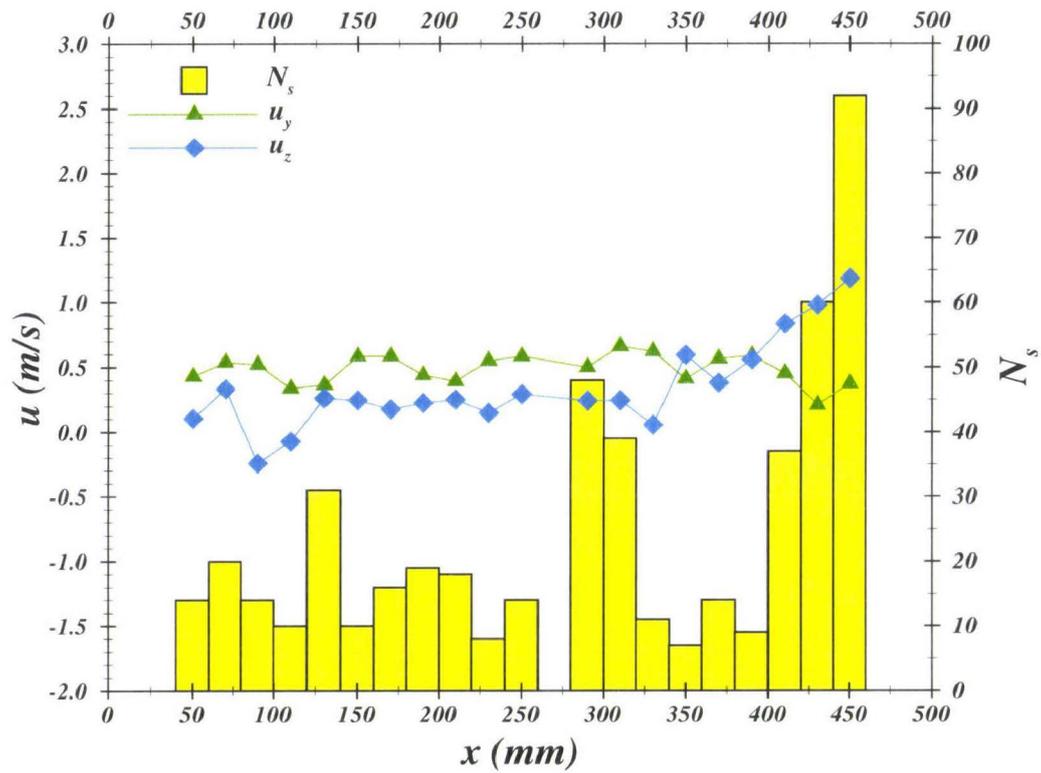


Figure 54 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P6

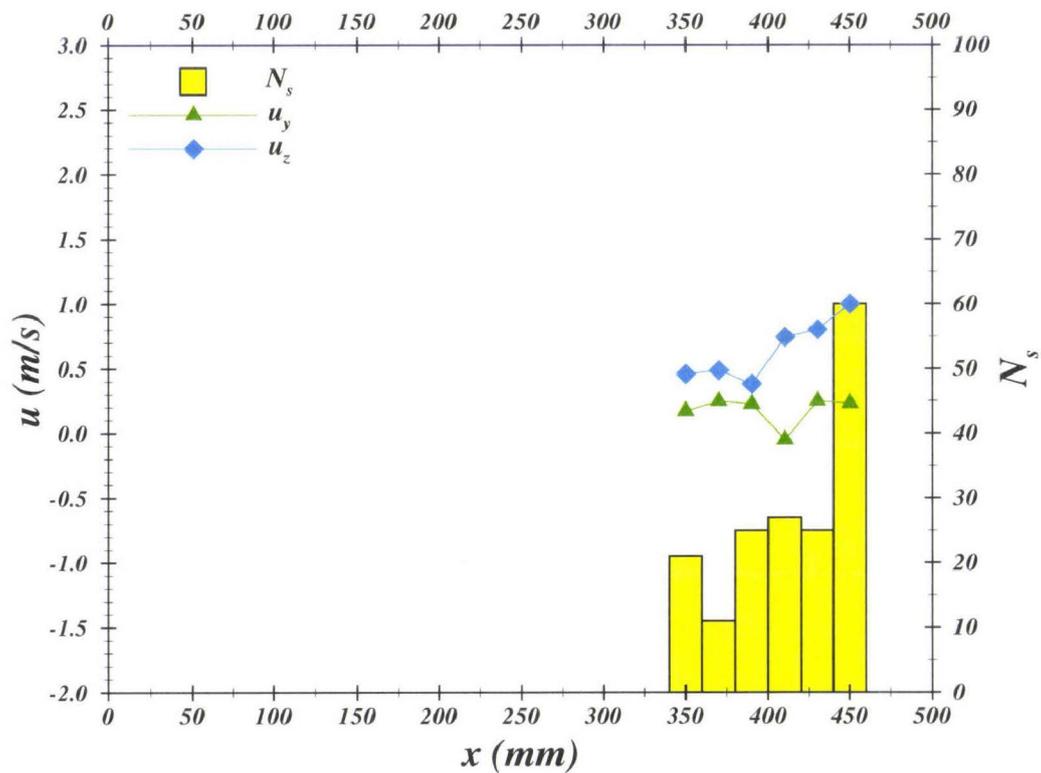


Figure 55 – Profil moyen de vitesse sur l'accès P6 distribution d'air symétrique

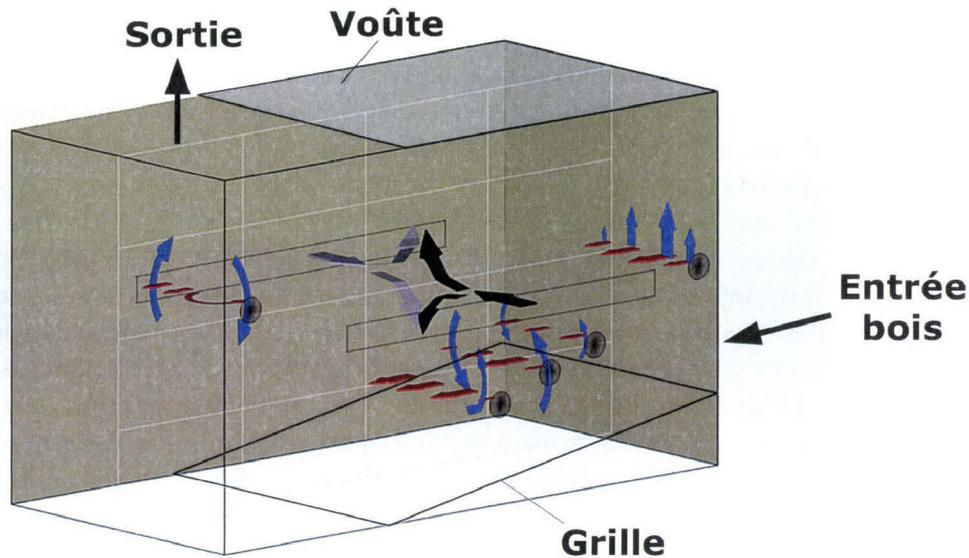


Figure 56 – Structures supposées de l'écoulement

Pour l'accès 5 (cf. Figure 52, page 89), proche de la porte du foyer, le profil présente une structure différente des autres points étudiés. La vitesse longitudinale devient plus faible (0,5 m/s maximum), ce qui est attendu du fait de la hauteur plus élevée par rapport à la base du foyer. Les mesures révèlent la présence de faibles écoulements de retour (- 0,3 m/s) près des parois latérales et de la porte. Le sens de la recirculation est inversé par rapport aux accès 1 à 3 du fait que la mesure est réalisée au-dessus de l'arrivée d'air. Les vitesses extrêmes de u_z sont sensiblement plus élevées - 1,5 à près de 1 m/s.

Le fait d'avoir une dissymétrie des arrivées d'air a pour conséquence la plus significative, un décalage de 5 cm environ du centre de la zone de recirculation (entre 120 et 160 mm de la paroi pour le cas dissymétrique et entre 180 et 220 mm pour le cas symétrique (cf. Figures 52 et Fig. 53, page 89).

5.1.4 Concentrations locales des gaz

Les gaz ont été prélevés selon le schéma donné dans la Figure 36, page 74. Sur les 25 points visés au départ seulement 7 ont été exploitables. En effet, les concentrations dépassaient souvent les valeurs limites du dispositif FTIR. Les zones exploitées tiennent compte de cet inconvénient, mais avec une incertitude qui peut aller jusqu'à 20 %. Dans ces conditions, les gaz suivants ont été détectés : CO, CH₄, C₂H₄, C₂H₂, C₃H₈, H₂O, CO₂, NO, NO₂, N₂O, HCl, O₂, H₂, formaldéhyde, acroléine, cétane, acides formique et acétique. Pour l'analyse d'H₂, 10 points ont été exploitables. Entre les points traités par la spectroscopie infrarouge et ceux par chromatographie en phase gazeuse seulement deux coïncident. Les résultats ainsi obtenus sont illustrés dans les Figures 57–63, page 93 *sq.*. Sur le profil P1 on remarque la forte concentration des espèces hydrocarbonées, CO, O₂, l'absence du CO₂ et le niveau bas de température. Ce qui correspond à la phase de dévolatilisation. Sur le point P1C (cf. Figure 58, page 94) on observe une pente descendante (avec des fluctuations de faible amplitude) des concentrations de H₂O, formaldéhyde, acides formique et acétique. Vu les conditions de mesure et la complexité des phénomènes en jeu, il est difficile de se prononcer sur la cause de ces tendances. On pourrait avancer l'hypothèse d'une dilution à l'air primaire, mais les données d'O₂ manquent pour ce point. Cette évolution pourrait être également liée à la chimie de

dévolatilisation.

En avançant au long de la grille (points P2A, P3B et C) on note une diminution des concentrations d'hydrocarbonés et d'O₂ accompagnée d'une augmentation des NO_x, du CO₂ et de la température. Ce qui indique la présence des fronts de flamme, notamment pour le point P2A (cf. Figure 61, page 95). Cependant, on observe que certains composants, tel que le CO, H₂, C₂H₄ et la formaldéhyde, montrent une concentration assez élevée. Ceci, en plus des fortes fluctuations, met en évidence d'une part le caractère instationnaire des flammes et d'autre part le fait que les conditions optimales pour une combustion complète ne sont pas atteintes à ce niveau du foyer (c'est-à-dire entre la grille et les arrivées d'air secondaire).

Le Tableau 14, page 97, regroupe les valeurs moyennes et les écarts types des concentrations et de la température des gaz. Ainsi, on peut constater que les gaz combustibles majoritaires sont le CO, la formaldéhyde, le CH₄, l'acroléine, le C₂H₄ et l'acide acétique. À ce niveau il faut remarquer la présence de H₂ de l'ordre du pourcentage volumique, bien que les valeurs présentées ici (cf. Figures 57 et 61) se trouvent à la limite de précision du chromatographe. On observe également la présence du cétane dans tous les cas, avec une teneur moyenne qui peut aller jusqu'à 250 mg/m_N³. Cependant, on note l'absence des espèces hydrocarbonées ayant un nombre d'atomes de carbone compris entre 4 et 15.

Quant aux émissions polluantes¹⁰, mis à part le CO, les résultats montrent une concentration locale des NO_x plutôt faible, avec un maximum de la valeur moyenne des deux composants (NO et NO₂) d'environ 390 mg/m_N³, valeur enregistrée au point P2A qui correspond au maximum de la température. Le SO₂ se trouve au-dessous de la limite de détection. Même constat pour la teneur en HCl, qui est d'ailleurs affectée par de fortes interférences. Enfin, il faut noter que la présence du NH₃ et des composés aromatiques (et cycliques) n'a pas été détectée.

10. Nous tenons à rappeler que notre travail n'est pas orienté vers la formation/destructions des polluants autres que le CO.

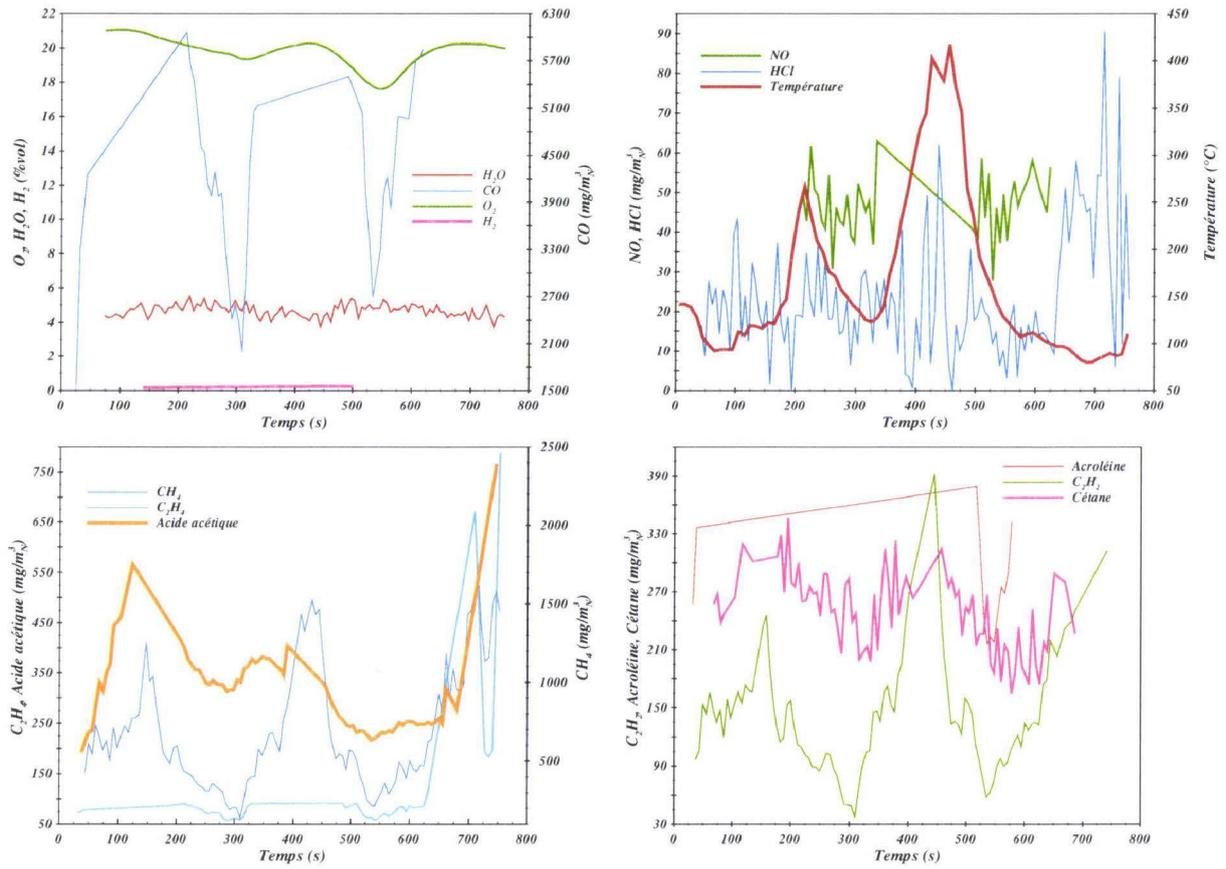


Figure 57 – Concentrations des gaz au point P1A

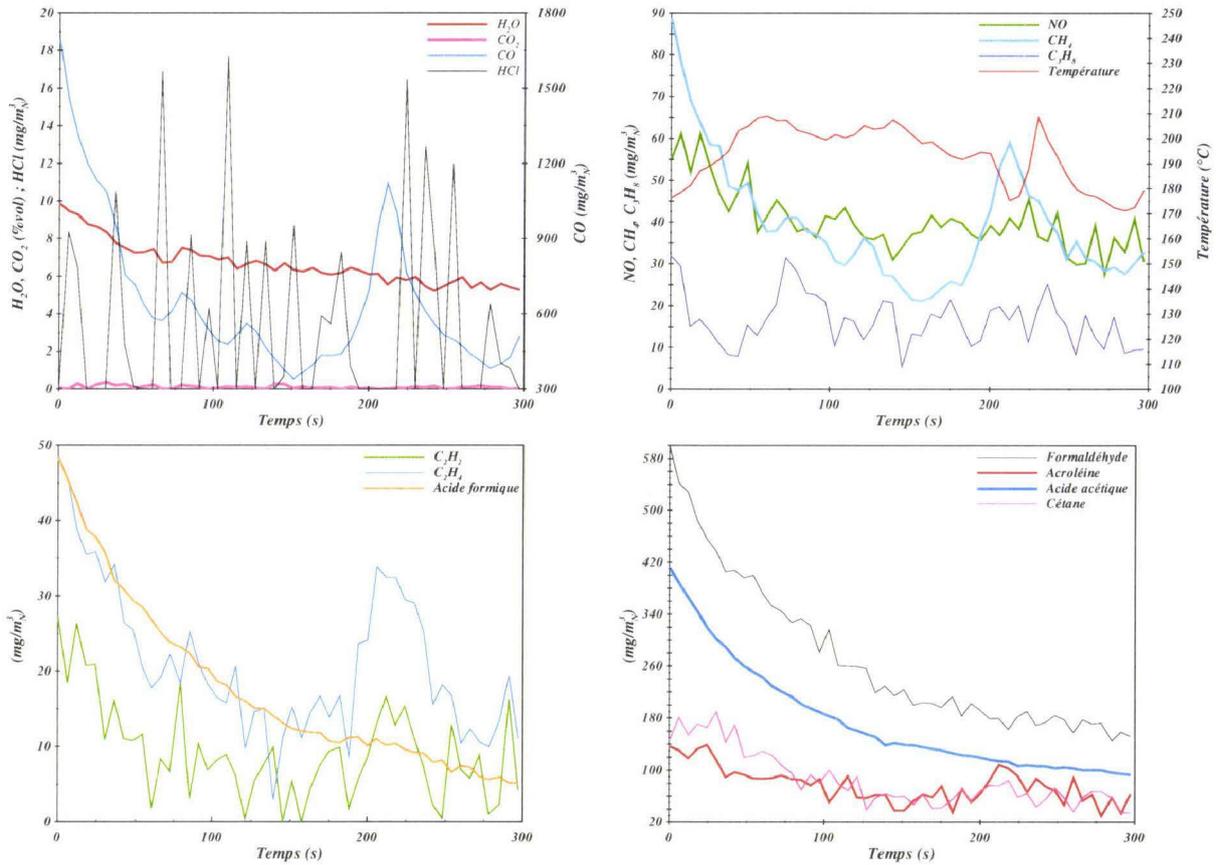


Figure 58 – Concentrations des gaz au point P1C

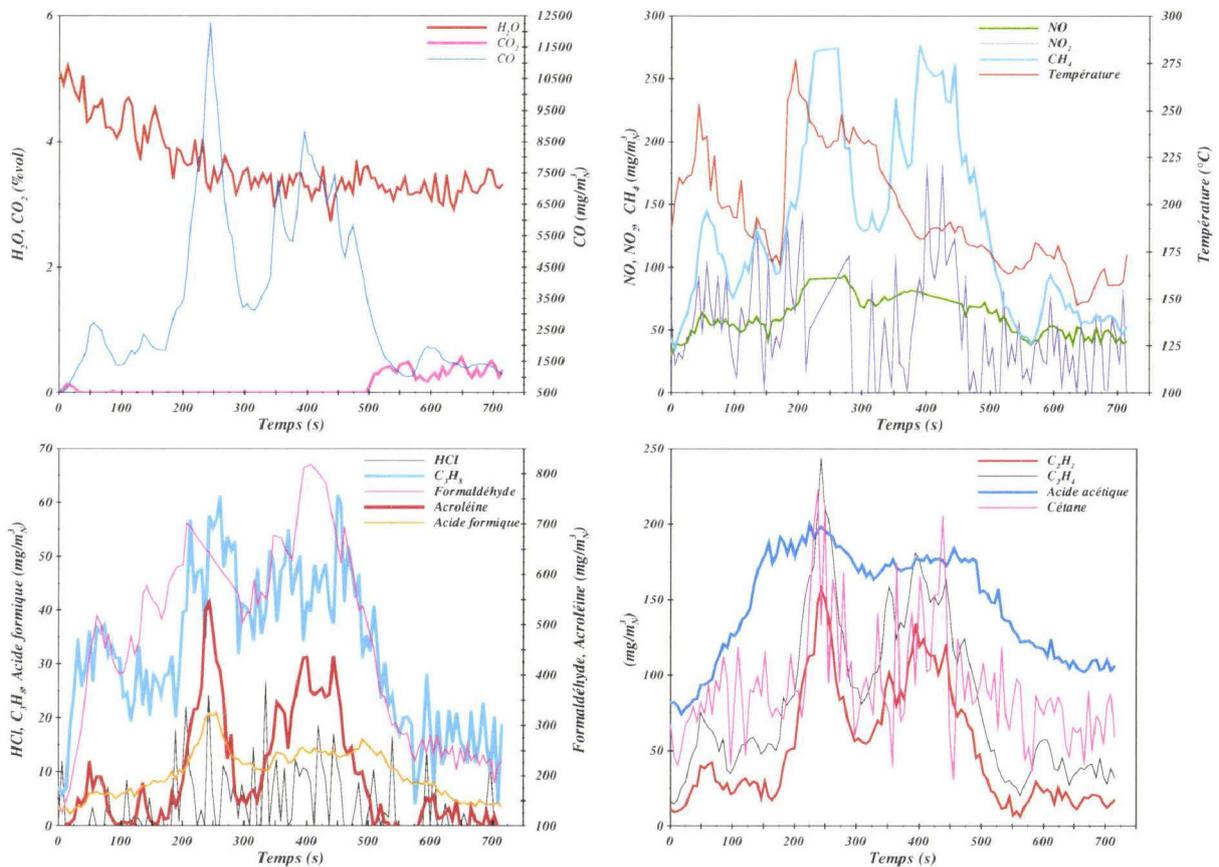


Figure 59 – Concentrations des gaz au point P1D

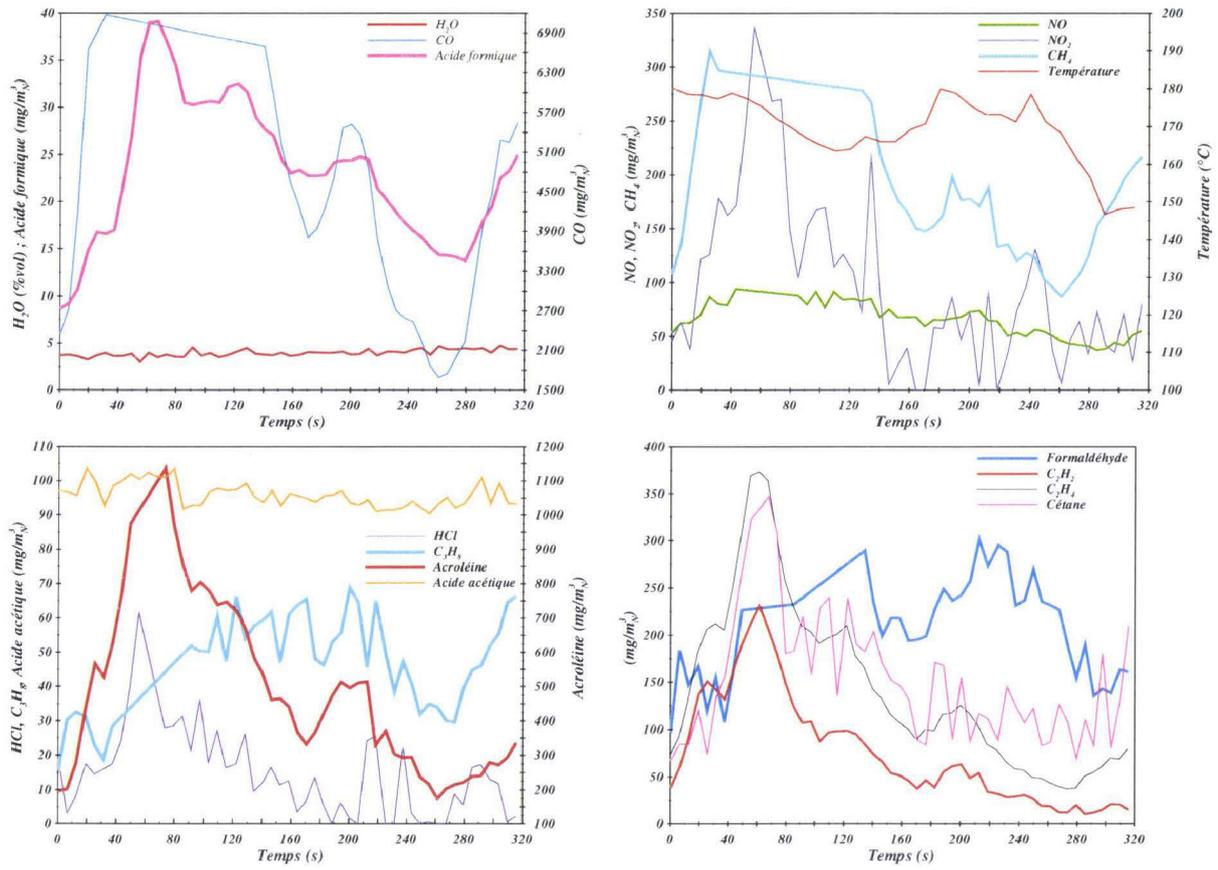


Figure 60 – Concentrations des gaz au point P1E

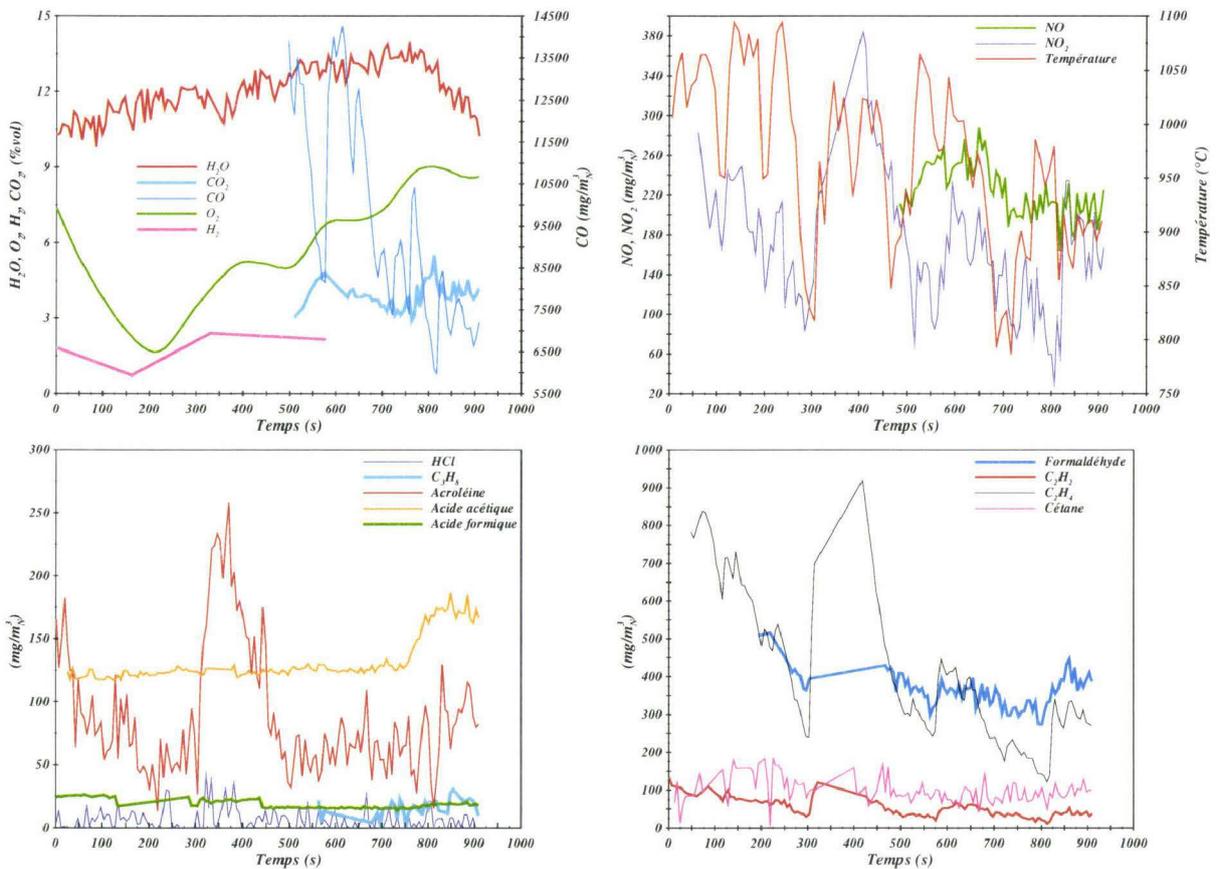


Figure 61 – Concentrations des gaz au point P2A

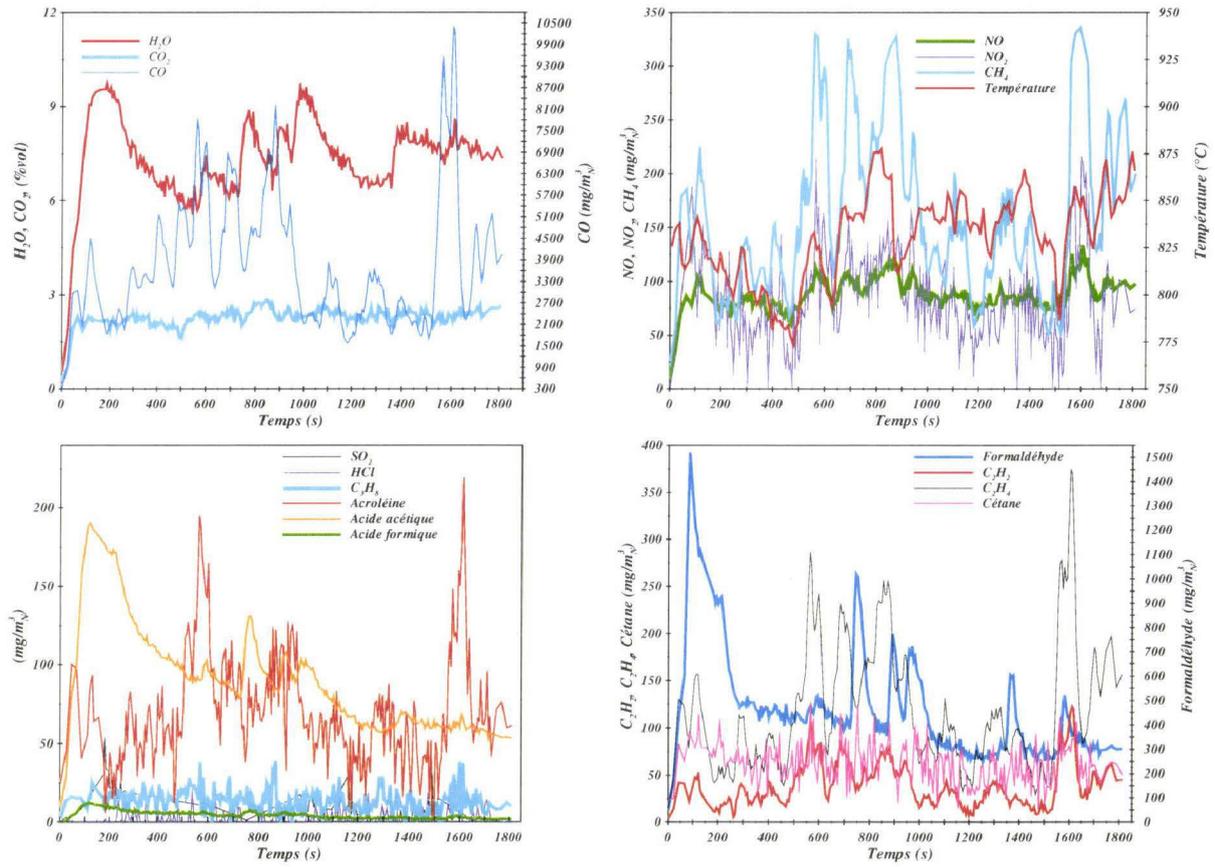


Figure 62 – Concentrations des gaz au point P3B

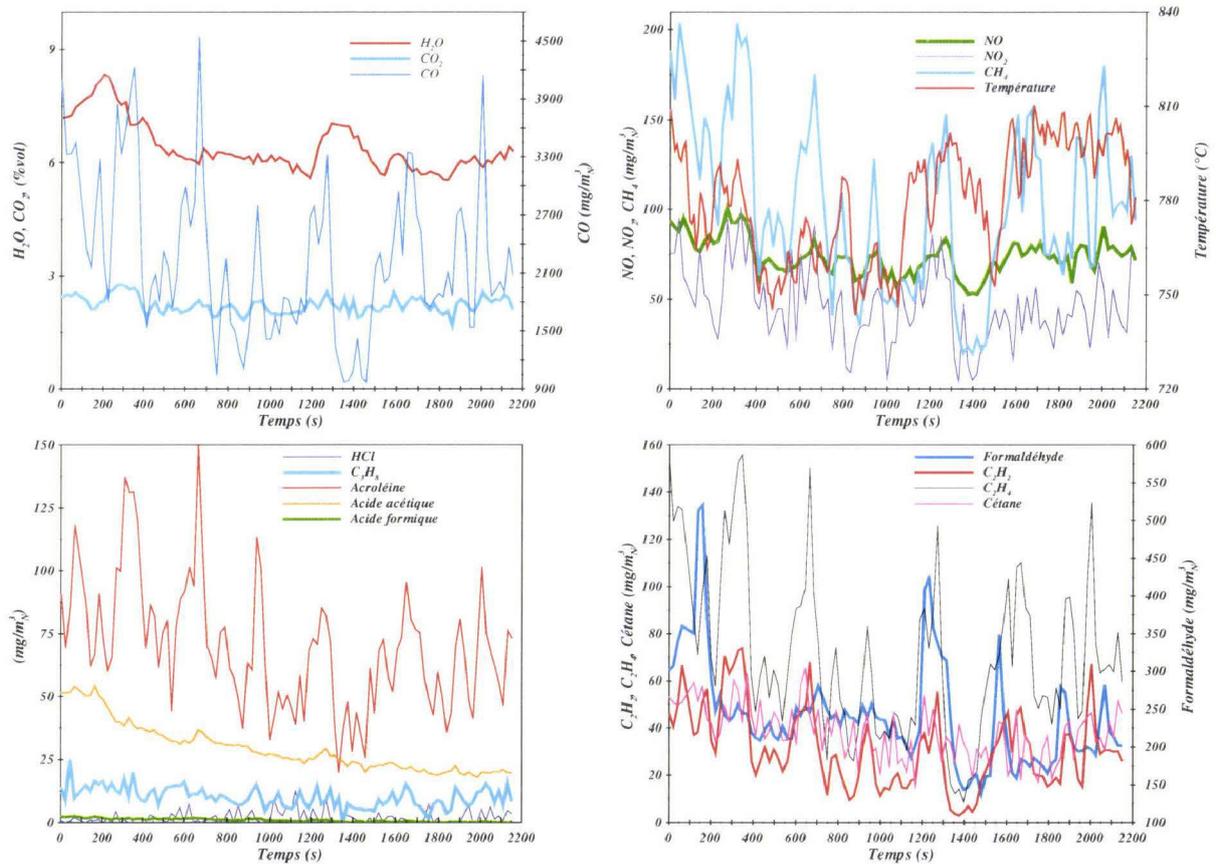


Figure 63 – Concentrations des gaz au point P3C

valeurs moyennées serviront comme support pour l'analyse de ces calculs, comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant.

5.2 Étude numérique

Les résultats numériques concernent principalement la modélisation de la combustion des matières volatiles au-dessus du lit combustible. Dans ce cadre, l'étude numérique de la combustion en phase gazeuse a été effectuée en trois étapes. Ainsi, dans un premier temps la capacité du code de calcul à reproduire un changement de la distribution d'air secondaire a été analysée. La deuxième étape se traduit par l'étude de sensibilité au schéma réactionnel, suivie par les analyses de l'écoulement. En complément, des résultats partiels obtenus à l'aide du modèle de lit (décrit dans le paragraphe 3.3, page 49) seront présentés à la fin du paragraphe. Il faut mentionner qu'en l'état actuel du développement, le modèle de lit n'est capable de permettre de calculer que le transfert thermique.

5.2.1 Combustion homogène

Les modèles utilisés pour la simulation numérique de la combustion en phase gazeuse sont décrits dans le paragraphe 3.2, page 37. La géométrie du domaine de calcul et le maillage sont illustrés dans la Figure 64, page 99. Le domaine de calcul prend en compte seulement le foyer de la chaudière (la partie comprise entre le lit combustible et la voûte), car c'est ici que la combustion des matières volatiles se déroule¹¹. Ainsi, la longueur du domaine de calcul est égale à 2,678 m, la largeur est de 0,735 m et la hauteur 1,033 m. La position de la surface du lit a été considérée horizontale au niveau du caisson d'alimentation et située à une hauteur égale à 150 mm par rapport à la grille. Entre le début et la fin de la grille la surface du lit est inclinée avec une hauteur de 5 mm par rapport à la grille, au niveau de la dernière rangée des maillons.

Le domaine de calcul, ainsi défini, a été divisé en 535 200 mailles hexaédriques (cf. Figure 64b, page 99), avec la taille moyenne d'une cellule de calcul égale à $10 \times 10 \times 10$ mm. Afin de réduire le plus possible l'influence du maillage sur les résultats, avec un temps de calcul raisonnable, nous avons choisi l'adaptation dynamique du maillage en fonction des gradients de température et de fractions molaires de CO et O₂. C'est-à-dire que le maillage de départ est affiné au cours du calcul avec une fréquence choisie au préalable (toutes les 100 itérations dans notre cas) seulement dans les régions de forts gradients. Le volume minimum d'une maille a été limité à 1 mm³, afin de garder le temps de calcul dans des seuils acceptables. Ainsi, dans tous les cas, le maillage n'a pas dépassé 1 500 000 cellules à la fin du calcul.

Une fois cette technique de maillage définie, au total quatre calculs numériques ont été réalisés afin d'étudier les différents aspects suivants :

- effet de la distribution d'air secondaire ;
- impact du mécanisme cinétique de combustion ;
- structure de l'écoulement.

Le Tableau 15, page 99, recense les quatre calculs avec les conditions opératoires associées et les essais expérimentaux correspondants. Les conditions aux limites ont été déterminées à partir des valeurs expérimentales moyennées (cf. Chapitre 4, page 59). Elles concernent les débits, les fractions massiques et les températures des gaz rentrant dans le domaine de calcul ; les flux thermiques appliqués aux parois et la pression imposée à la sortie du domaine de calcul. Ainsi, la surface du lit combustible représente l'entrée du mélange matières volatiles - air primaire (cf. Figure 64a). À ce niveau des profils de température, flux et fractions massiques

11. On note ici que les conduites d'alimentation et les caissons de distribution d'air secondaire n'ont pas été pris en compte, car une étude expérimentale à froid précédente a montré que le flux d'air secondaire est uniformément repartit entre les 32 arrivées.

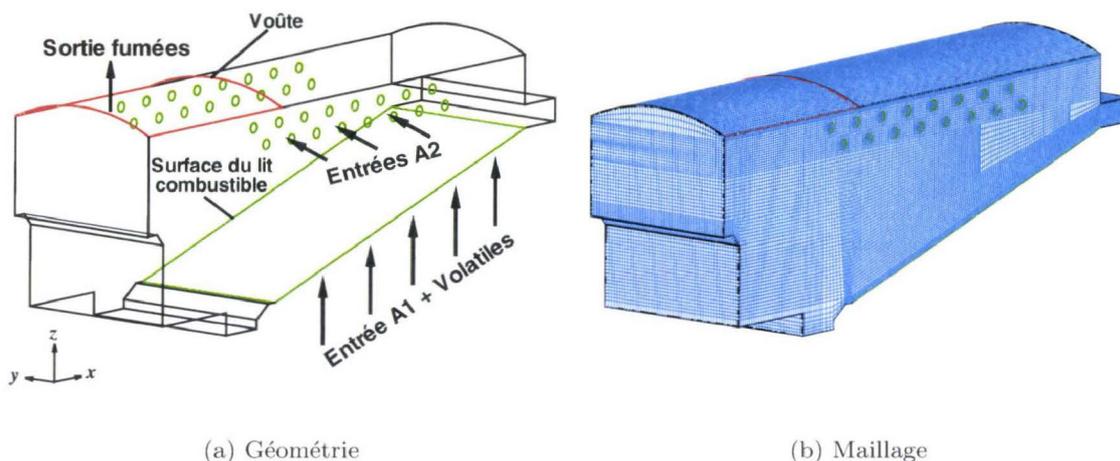


Figure 64 – Domaine de calcul

Tableau 15 – Liste des calculs réalisés

Calcul	Distribution d'air secondaire	Mécanisme réactionnel	Essai expérimental
N1C1	Symétrique	Semi-global	E1C1
N1C12	Symétrique	KM	E1C1
N1C2	Asymétrique	Semi-global	E1C2
N2C3	Symétrique	KM	E2C3

ont été imposés comme conditions. Ces profils ont été obtenus à partir de l'approche proposée par Huttunen *et al.* [61] (cf. § 3.3, page 46) en fonction des débits moyens d'air primaire et de bois mesurés (cf. Tableau 16) et des analyses du combustible. Les analyses immédiates et élémentaires ont été réalisées par le Centre d'Analyses Environnementales du groupe Veolia. Le Tableau 17 donne les analyses immédiates du combustible pour chaque cas. En ce qui concerne l'analyse élémentaire, les résultats ont montré peu de différences entre les cas étudiés ; par conséquent, elle a été considérée identique pour l'ensemble des calculs (cf. Tableau 18). Pour l'analyse des matières volatiles, en l'absence des données expérimentales, la composition proposée par Yann Rogauze [96] a été utilisée dans tous les cas (cf. Tableau 19). La Figure 65 donne, à titre d'exemple, les profils des concentrations massiques et de température imposés à la surface du lit pour les calculs N1C1 et N1C12.

Tableau 16 – Débits et températures moyennes de l'air et du bois

	Débit			Température (K)	
	Air (kg/h)		Bois (kg/h)	Air	Bois
	A1	A2*			
N1C1	325,8	314,2	149,6	290	288
N1C12					
N1C2	248,8	513,6	172,6	286	288
N2C3	598,5	50,9	75,5	304	298

* Le débit d'air secondaire est uniformément reparti entre les arrivées d'air.

Tableau 17 – Analyses immédiates sur sec, exprimées en % massique

	Volatiles	Carbone fixe	Humidité
N1C1	70,1	14,4	15,5
N1C12			
N1C2			
N2C3	60,9	10,7	28,4

Tableau 18 – Analyse élémentaire du combustible

Élément	C	H	O
% massique	50,6	6,2	43,2

Tableau 19 – Composition des matières volatiles [96]

Gaz	CO	H ₂	H ₂ O	CH ₄	CO ₂	C ₂ H ₄	C ₂ H ₂
% vol.	36,2	23,6	16	15,4	6,1	1,7	0,9

Enfin, il reste les conditions aux limites à appliquer aux parois et à la sortie du domaine de calcul. Compte tenu du fait que les parois du foyer sont constituées de béton réfractaire, elles sont considérées adiabatiques dans tous les cas. En ce qui concerne la sortie, une pression relative de - 100 Pa a été imposée pour l'ensemble des calculs. En effet, cette valeur représente la consigne qui a été utilisée par le système de régulation de chaudière pendant les essais.

Les résultats des calculs sont discutés dans les sous-paragrophes suivants.

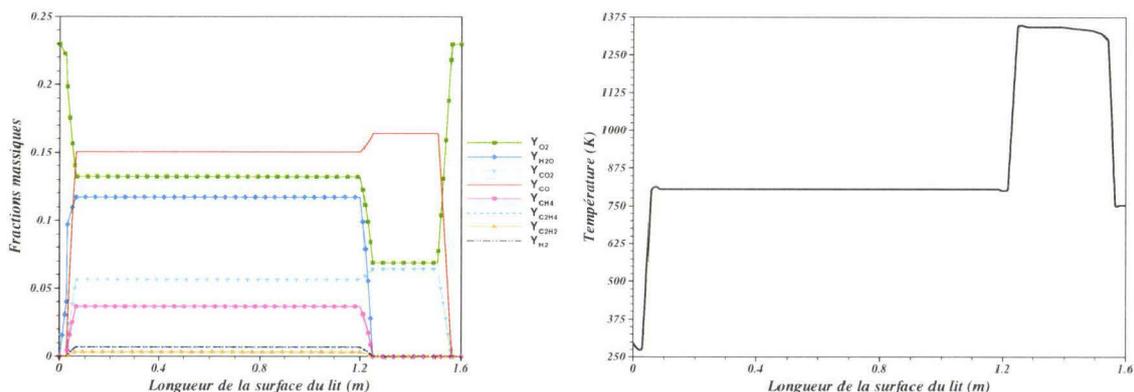


Figure 65 – Profils des fractions massiques (à gauche) et de la température (à droite) imposés à la surface du lit pour les calculs N1C1 et N1C12

Effet de la distribution d'air secondaire

Le champ de température à l'intérieur du foyer est illustré dans la Figure 66, page 101, pour les deux distributions d'air secondaire étudiées. On observe que la région de haute température se décale vers la surface du lit pour l'admission symétrique (cf. Figure 66a). En d'autres termes le mélange des gaz est amélioré, ainsi l'air frais et les matières volatiles

rentrent en contact plus rapidement et donc plus près de la surface du lit. Cette tendance peut être mieux observée sur la Figure 67, qui montre les profils de température calculés et mesurés sur la longueur du four. On remarque une diminution de la température, qu'elle soit mesurée ou calculée, dans le cas de l'alimentation symétrique. Ce qui confirme le décalage de la zone de réaction vers la surface du lit. On note également que les valeurs calculées présentent le même ordre de grandeur que celles mesurées.

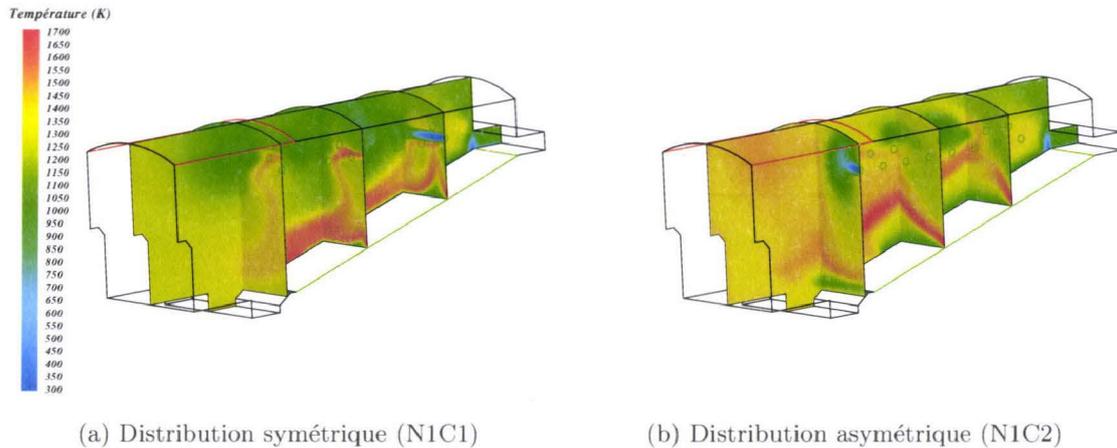


Figure 66 – Cartographies de températures calculées en fonction de l'alimentation en air secondaire

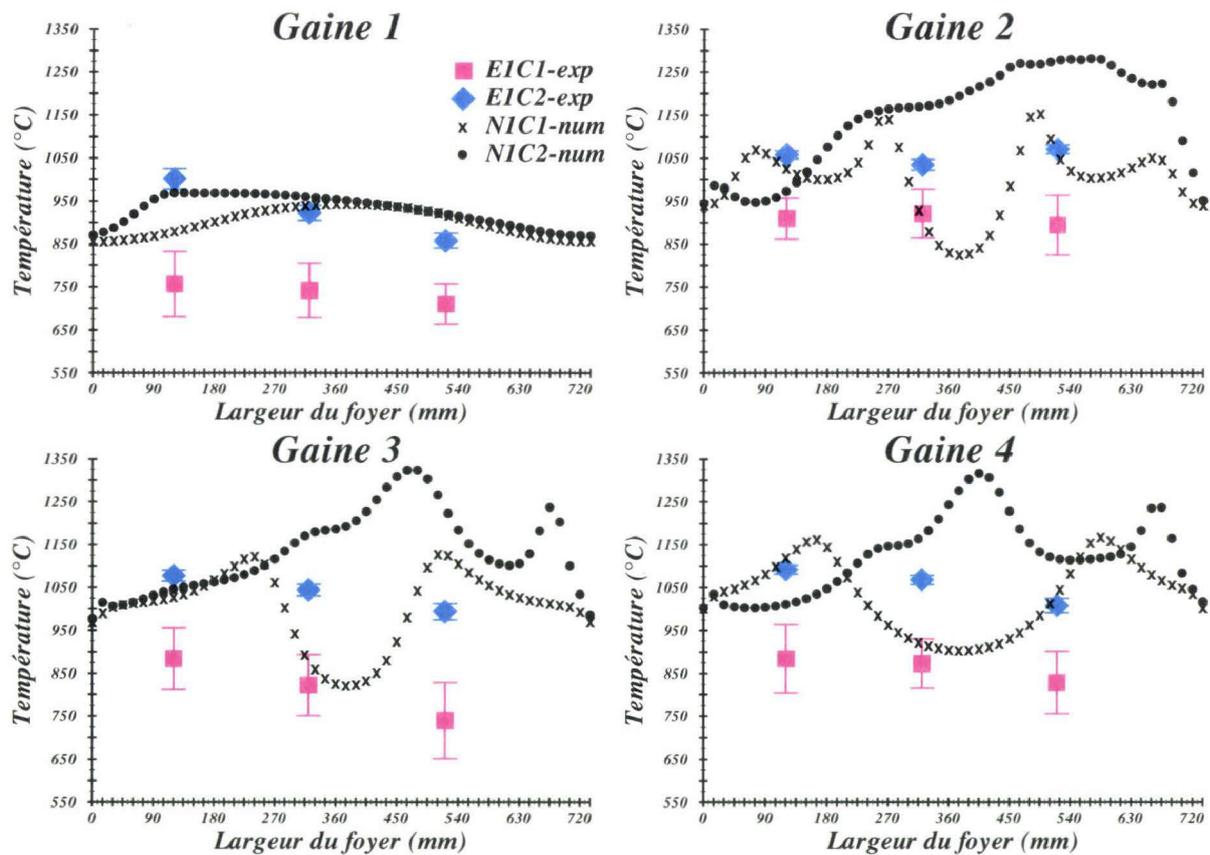


Figure 67 – Profils de température selon la configuration d'air secondaire

En ce qui concerne les concentrations des gaz, les valeurs moyennes mesurées et calculées sont données dans le Tableau 20. Il est à noter que l'analyse expérimentale de la composition

des fumées était faite sur des échantillons prélevés en aval du filtre multi-cyclone, tandis que les concentrations calculées étaient rapportées à la sortie du domaine de calcul. À la lecture des valeurs expérimentales, la première constatation est que le passage d'une alimentation asymétrique à une alimentation symétrique entraîne une réduction de la concentration de CO par un facteur trois. La deuxième constatation est l'écart important entre la concentration de CO mesurée et celle calculée. Ceci est dû en partie à la fraction massique de CO utilisée comme condition d'entrée pour le calcul. Cette valeur d'entrée est probablement supérieure à la concentration réelle à la sortie du lit. Ceci peut s'expliquer par l'approche utilisée pour déterminer les flux sortant du lit (cf. § 3.3, pages 46–49). D'autre part, cette différence n'est pas neutre par rapport au mécanisme cinétique employé pour décrire la combustion (cf. § 3.2.2, page 44).

Tableau 20 – Concentrations des fumées en fonction de la distribution d'air secondaire

Valeurs		O ₂ (%)	CO ₂ (%)	CO* (mg/m _N ³)
Calculées	N1C1	7,8	9,3	3 990
	N1C2	6,4	9,8	8 722
Mesurées	E1C1	11,3	8,1	163
	E1C2	11,2	8,9	540

* Valeurs corrigées à 11 % d'O₂.

Cependant, la tendance liée au changement de la configuration de l'air secondaire est bien capturée par le modèle numérique, qui donne approximativement le même facteur de réduction. On relèvera, par ailleurs que la concentration en CO₂ montre une légère diminution ; en effet, le rapport global quantité d'air sur quantité de combustible est plus important dans le cas de la distribution symétrique. Ceci est d'ailleurs confirmé, sur les valeurs calculées, par l'augmentation du taux d'O₂. Cette évolution de la concentration moyenne d'O₂ n'est pas observée expérimentalement. En effet, celle-ci est corrélée avec le système de régulation de la chaudière qui adapte le débit d'air secondaire pour maintenir le taux d'O₂ dans les fumées égal à la valeur de consigne. Bien qu'il y ait quelques fluctuations au cours du temps, la moyenne restera donc constante sur la durée du régime établi.

Pour conclure, cette étude montre que la distribution d'air secondaire exerce une forte influence sur la combustion des matières volatiles. Ainsi, en passant d'une alimentation de type asymétrique à une alimentation de type symétrique l'émission de CO peut être réduite par un facteur trois. Une autre conséquence est le décalage de la zone de haute température et par extension de la zone de réaction. Le calcul numérique reproduit ce décalage de température, l'ordre de grandeur étant le même que pour les valeurs mesurées. En contrepartie, les résultats numériques surestiment la fraction massique de CO. Cependant, le modèle numérique est capable de reproduire, d'un point de vue qualitatif, la diminution d'émissions de CO.

Effet du mécanisme cinétique de combustion

Les résultats présentés dans le paragraphe précédent ont montré que le modèle numérique reposant sur un mécanisme réactionnel semi-global surestime la concentration de CO. Afin d'évaluer le rôle de la cinétique chimique un calcul, N1C12, a été effectué dans les mêmes conditions que le calcul N1C1, mais en utilisant le mécanisme cinétique réduit KM (cf. Tableau 26, page 125). Les températures prédites avec les deux mécanismes cinétiques sont présentées dans la Figure 68, page 103. Pour les mêmes conditions de calcul, la zone de haute

température est plus confinée dans le cas du mécanisme réduit, ce qui indique une réactivité supérieure par rapport au mécanisme cinétique global. La Figure 69 montre les profils de température mesurés et calculés. On observe que les profils calculés avec le mécanisme réduit sont décalés vers la surface du lit. Ainsi, au niveau de la gaine 1, le profil obtenu avec le mécanisme KM est plus proche des valeurs mesurées. On note également que dans le cas de la cinétique chimique à 40 réactions les deux pics de température disparaissent en avançant le long de foyer, de la gaine 2 à la gaine 4. En effet, la prise en compte des espèces radicalaires, plus diffusives dans le cas du mécanisme cinétique réduit, améliore la qualité du mélange. Par conséquent, les réactions ont lieu plus tôt et d'une manière plus uniforme.

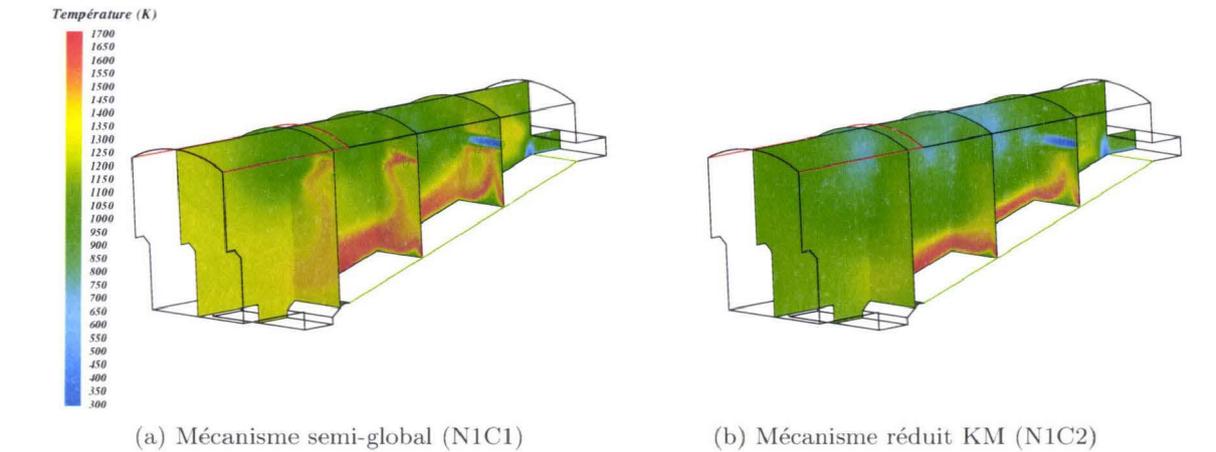


Figure 68 – Cartographies de températures calculées pour deux schémas réactionnels

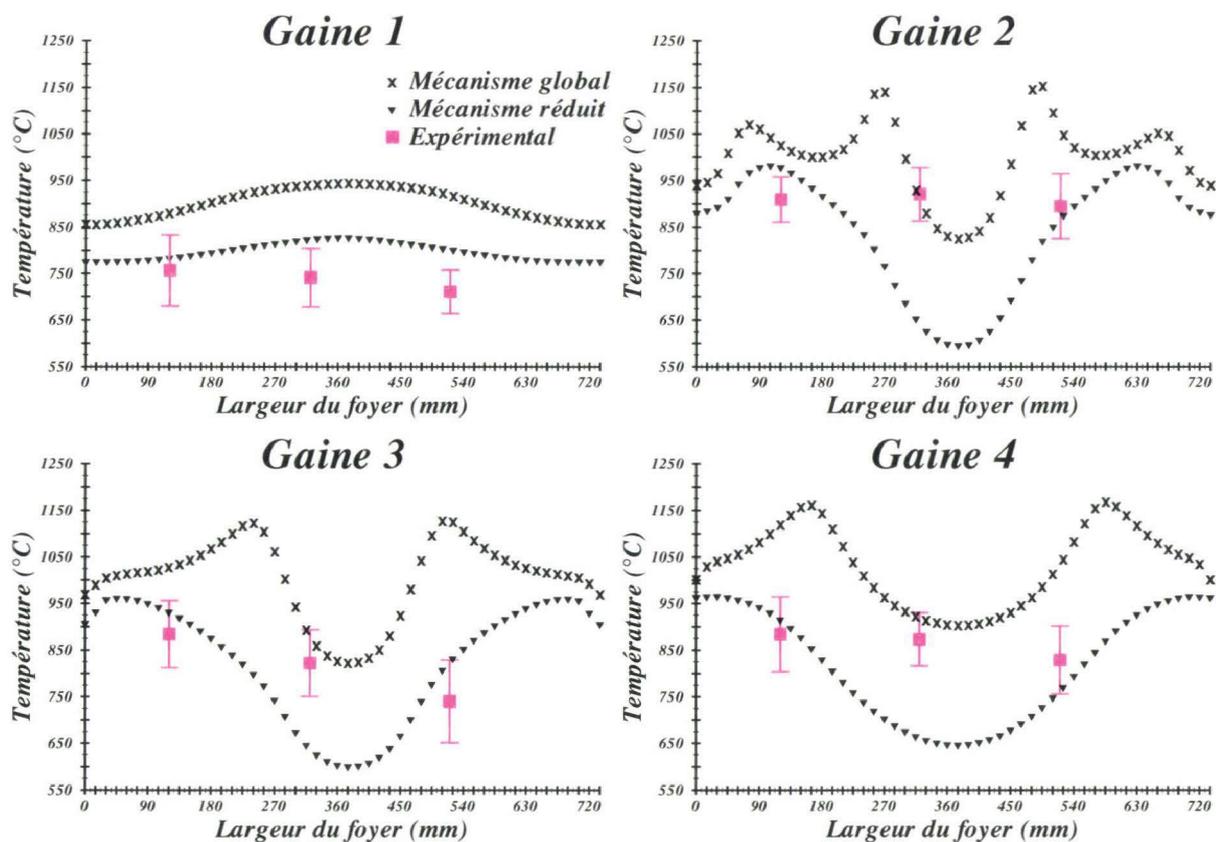


Figure 69 – Profils de température

La cinétique chimique plus rapide du mécanisme réduit est confirmée par les concentrations, notamment par la différence du taux de CO et d'O₂, enregistrées entre les deux mécanismes réactionnels, comme montré dans le Tableau 21 (ainsi qu'il est mentionné dans le paragraphe précédent, les valeurs calculées sont des moyennes à la sortie du domaine de calcul et les valeurs expérimentales ont été mesurées à la sortie de la chaudière). On note ici l'incohérence du mécanisme semi-global, probablement due aux paramètres des réactions, qui montre plus de CO₂ et moins d'O₂ pour un taux de CO plus élevé. La précision donnée par la cinétique chimique à 40 réactions est nettement supérieure, les différences par rapport aux valeurs expérimentales étant d'environ 1 %. En revanche, ce gain en précision est accompagné d'un coût supplémentaire en terme de temps de calcul. La durée de la simulation est d'environ trois fois plus longue dans le cas du schéma réactionnel KM, en utilisant les mêmes ressources informatiques.

Tableau 21 – Concentrations des fumées

Valeurs	O ₂ (%)	CO ₂ (%)	CO* (mg/m _N ³)
Mécanisme semi-global	7,8	9,3	3 990
Mécanisme réduit KM	10,8	8,0	291
Mesurées	11,3	8,1	163

* Valeurs corrigées à 11 % d'O₂.

Analyse de l'écoulement

La comparaison des profils de vitesse moyenne mesurés et calculés est illustrée sur la Figure 70, page 105. Les valeurs calculées montrent le même ordre de grandeur et la même tendance que les valeurs mesurées. Ainsi, pour le profil P1 les valeurs mesurées des composantes u_x et u_z sont quasiment confondues. Ceci est bien reproduit par le calcul, d'un point de vue qualitatif. Pour les profils mesurés P2 – P4, la composante longitudinale u_x est supérieure à la composante ascensionnelle u_z , tendance également prédite par le calcul. En général, on observe un bon accord entre les valeurs expérimentales et numériques loin de la paroi du four (300 – 360 mm pour les profils P1 – P5 et 400 mm pour le profil P6), notamment pour la composante u_z . Dans la région proche de la paroi (15 – 150 mm) les profils expérimentaux P1, P3 et P4 présentent un maximum, indiquant ainsi un écoulement préférentiel de l'air primaire entre le bord de la grille et la paroi du foyer. Le calcul numérique ne reproduit pas cette évolution car les conditions aux limites imposées à la surface du lit n'en tiennent pas compte. En effet, le flux massique du mélange air primaire - matières volatiles appliqué à ce niveau est constant sur la largeur du four (direction y , cf. Figure 71, page 105). Pour le profil P5 la situation est différente car cette fois-ci on ne se situe pas au-dessus du lit combustible. Les valeurs mesurées dans la région proche de la paroi indiquent la présence d'une recirculation, ce qui n'est pas visible sur le profil calculé. Cependant, les résultats numériques montrent une recirculation à ce niveau, comme illustré dans les Figures 71b et 72b. En d'autres termes, les zones de recirculation prédites par le calcul numérique sont plus confinées qu'en réalité.

Pour l'analyse du profil P6 on va prendre appui, en partie, sur les valeurs expérimentales obtenues en configuration asymétrique (arrivée « X » d'air secondaire fermée, cf. Figure 37c, page 75). On garde à l'esprit que la différence entre l'alimentation en air secondaire avec l'arrivée « X » fermée et ouverte se traduit par un décalage (comme montré sur le profil P5, Figure 70) et que le calcul a été effectué pour « X » ouverte. Ainsi, on observe que la composante u_y présente une valeur calculée nulle au long du profil, ce qui est en accord avec les valeurs mesurées qui fluctuent autour de zéro. La composante ascensionnelle augmente en s'éloignant de la paroi. Cette accélération est moins marquée pour les résultats calculés.

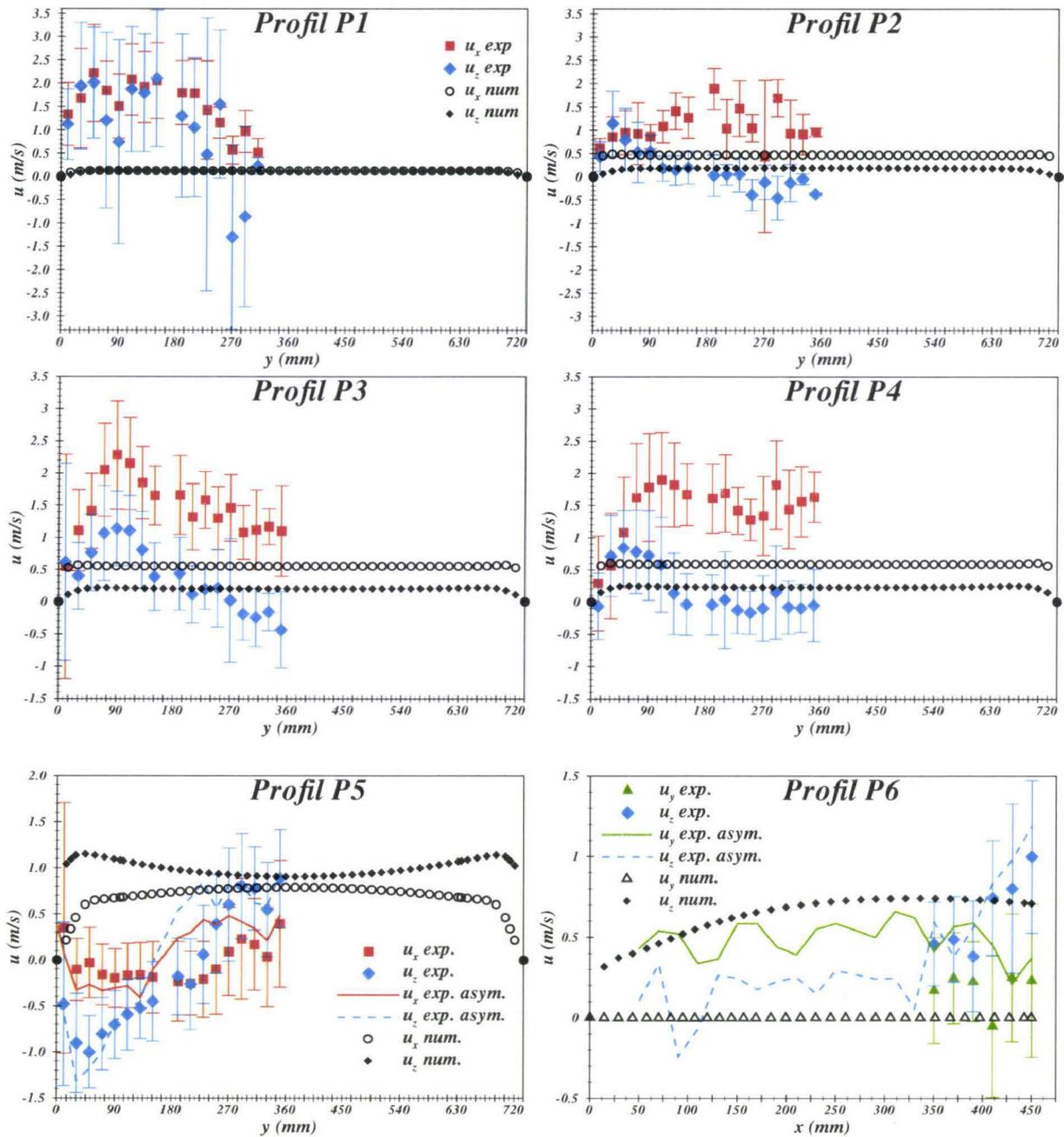


Figure 70 – Profils des vitesses moyennes calculés et mesurés (les barres d'erreur représentent l'écart type)

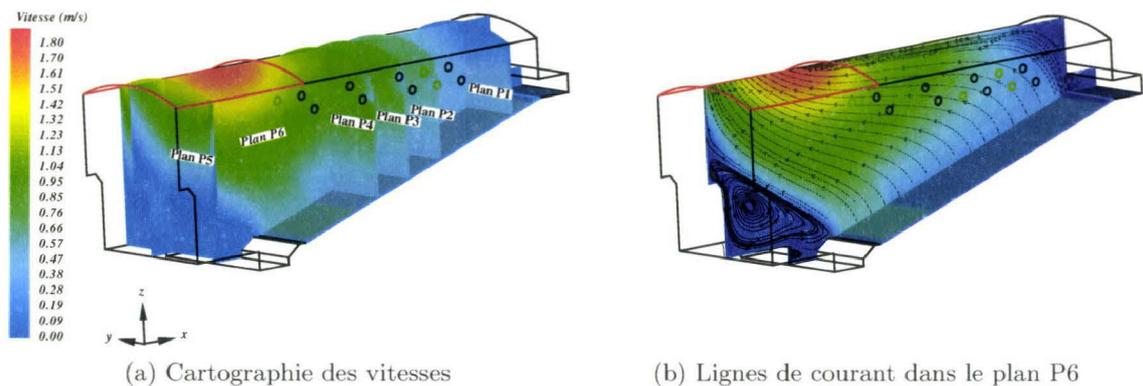


Figure 71 – Cartographie des vitesses moyennes calculées et lignes de courant

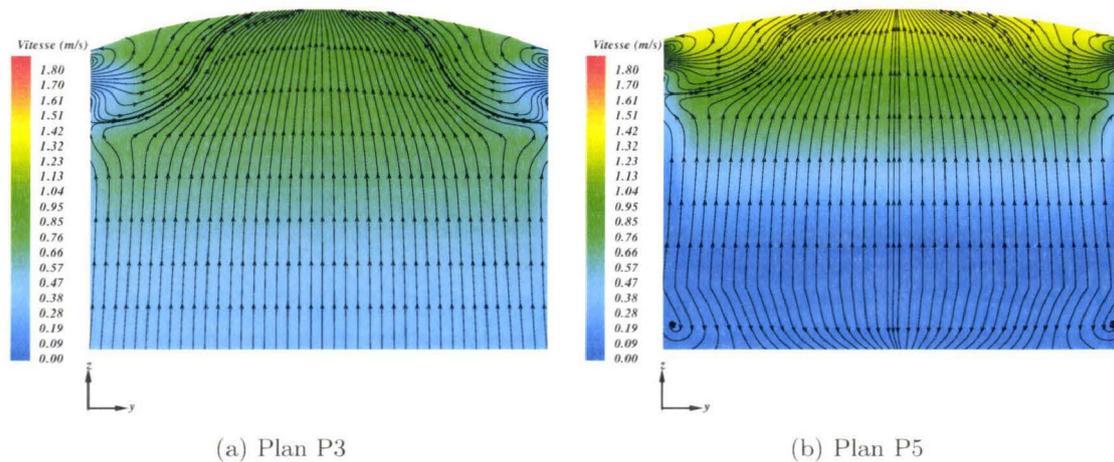


Figure 72 – Lignes de courant dans les plans P3 et P5

La cartographie du module de vitesse moyenne calculée (cf. Figure 71a) montre une valeur maximale à la sortie du domaine de calcul. Cette évolution semble confirmée par les mesures. Cependant, compte tenu que la répartition des vitesses n'est pas uniforme à ce niveau, il serait probablement plus pertinent d'agrandir le domaine de calcul en ajoutant le trajet complet des fumées (chambre de post-combustion, tubes des fumées, caisson de sortie et une partie du conduit de fumées).

Les lignes de courant illustrées dans les Figures 71b et 72 font apparaître les principales zones de recirculation¹². On remarque ainsi que l'emplacement des grosses structures tourbillonnaires calculées correspond globalement à ce qui est indiqué par les mesures expérimentales (cf. Figure 56, page 91).

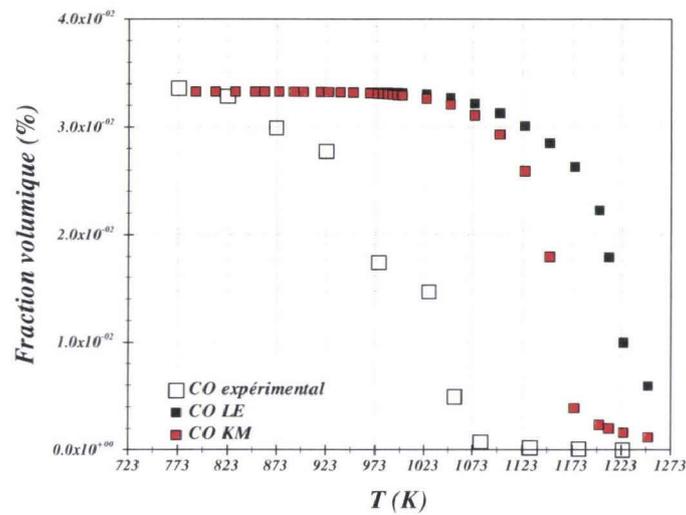
Trois études numériques ont été présentées dans ce sous-paragraphe. La première a montré que les modèles choisis sont capables de reproduire un changement de la distribution d'air secondaire, bien que le schéma réactionnel donnait des résultats différents au niveau des émissions gazeuses. La deuxième étude a justement démontré l'importance de la cinétique chimique sur la précision du calcul de la composition des fumées. Enfin, la troisième étude nous a permis de juger la qualité des résultats numériques en ce qui concerne l'écoulement.

Pour finir, on donne ici un complément relatif au schéma réactionnel KM. Comme évoqué dans le paragraphe 3.2.2 (deux derniers alinéas, page 45) les résultats du mécanisme cinétique KM et ceux du schéma LE (cf. Tableau 27, page 126) ont été comparés avec les données expérimentales obtenues par Leroy *et al.* [71] dans un réacteur parfaitement mélangé, sous les conditions suivantes :

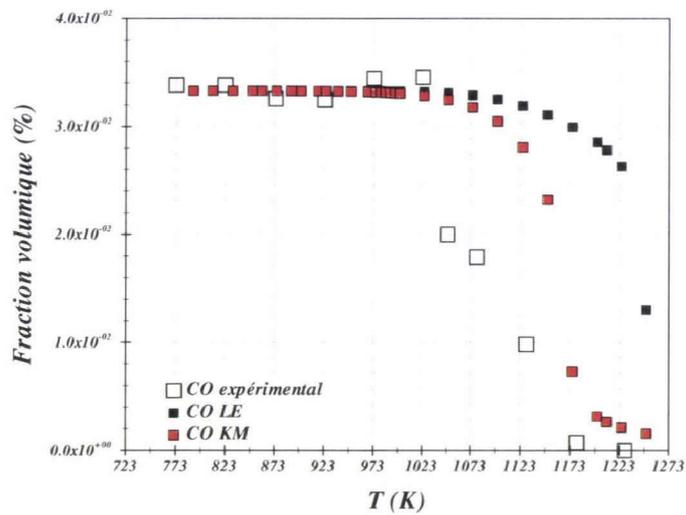
- régime permanent ;
- mélange gazeux : $\text{CH}_4/\text{CO}/\text{CO}_2/\text{O}_2/\text{N}_2/\text{Ar}$ à trois richesses différentes $\phi = 0,6/1,0/1,4$;
- temps de séjour des gaz dans le réacteur : 1,3 s ;
- température des gaz à l'entrée du réacteur entre 723 et 1273 K.

Les calculs ont été effectués à l'aide du module PSR (« *Perfectly Stirred Reactor* » Réacteur Parfaitement Agité, en anglais) du code CHEMKIN II. Les résultats sont présentés dans les Figures 73 – 76.

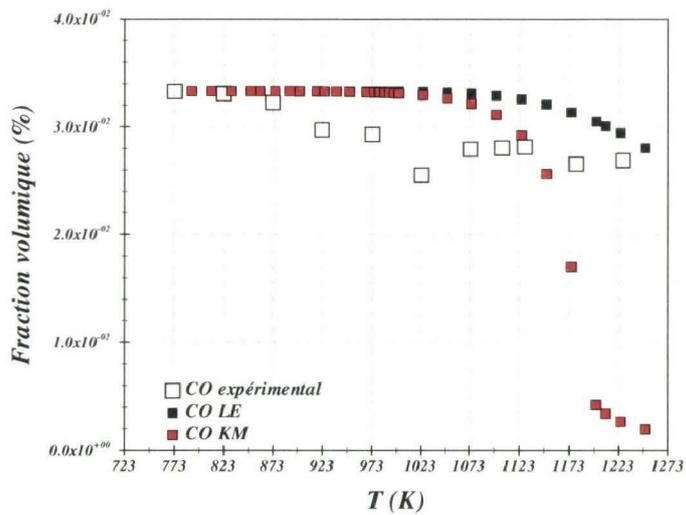
¹². Les lignes de courant dans les plans P1, P2 et P4 ne sont pas représentées car elles sont similaires à celles du plan P3.



(a) $\phi = 0,6$

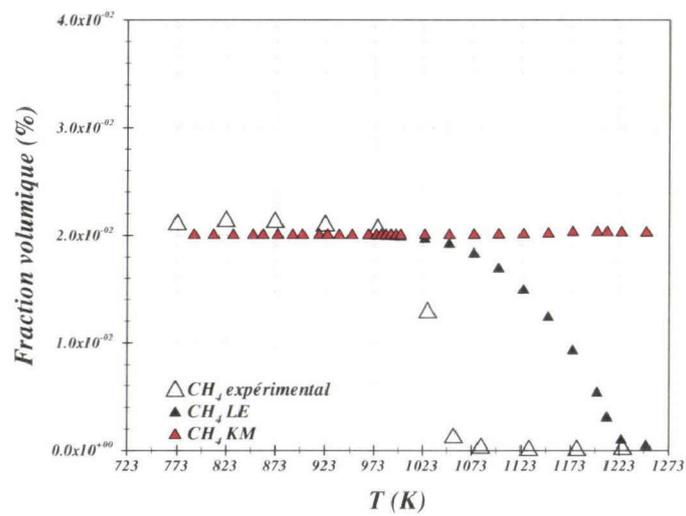
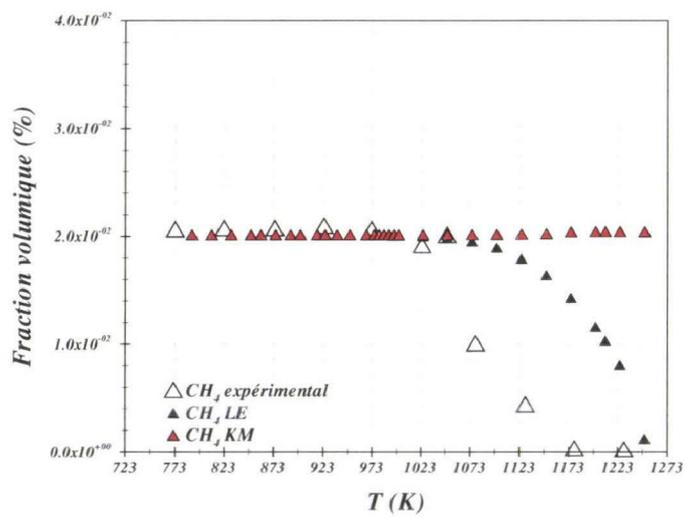
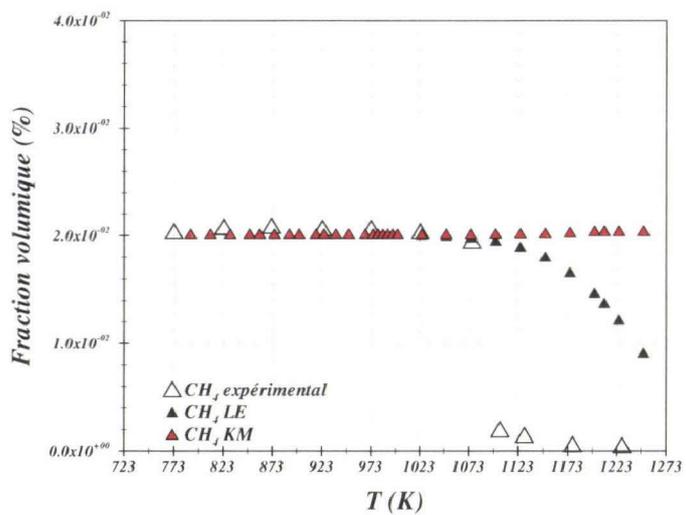


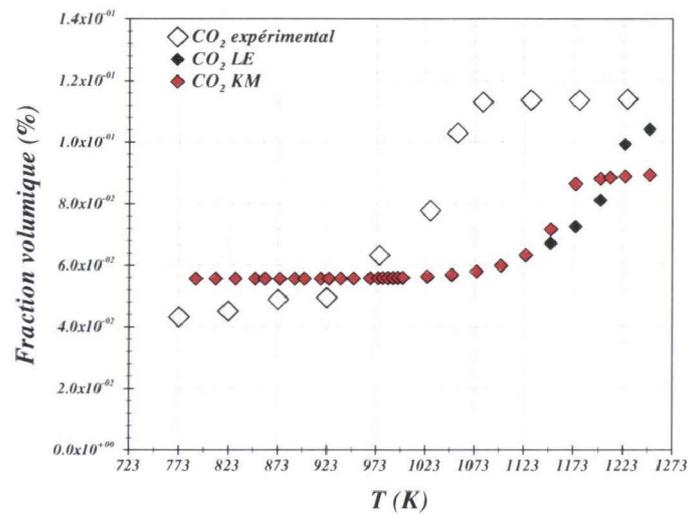
(b) $\phi = 1,0$



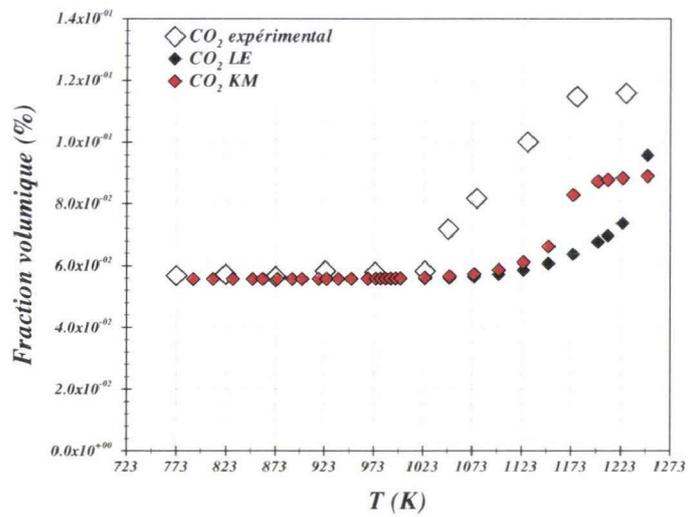
(c) $\phi = 1,4$

Figure 73 – Résultats expérimentaux et numériques pour la fraction volumique de CO

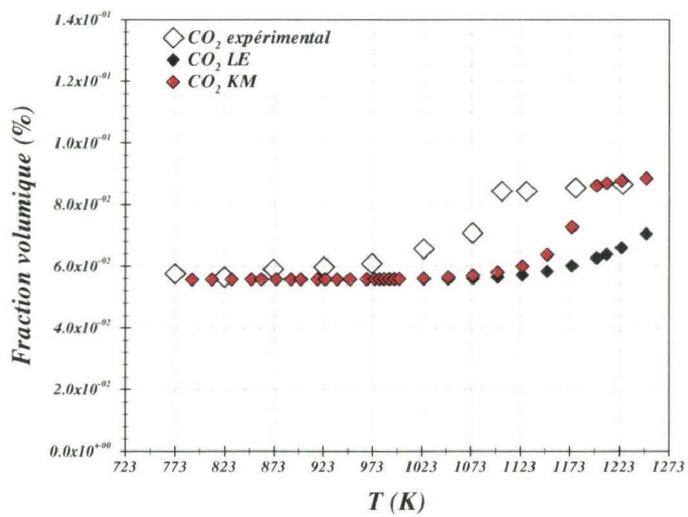
(a) $\phi = 0,6$ (b) $\phi = 1,0$ (c) $\phi = 1,4$ Figure 74 – Résultats expérimentaux et numériques pour la fraction volumique de CH_4



(a) $\phi = 0,6$

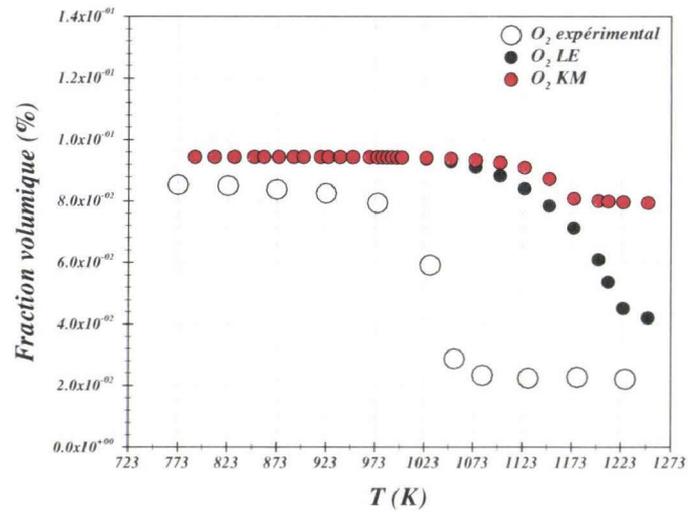
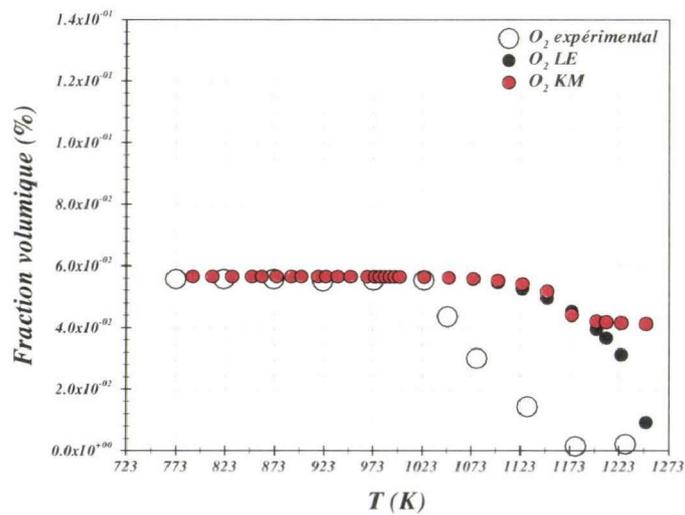
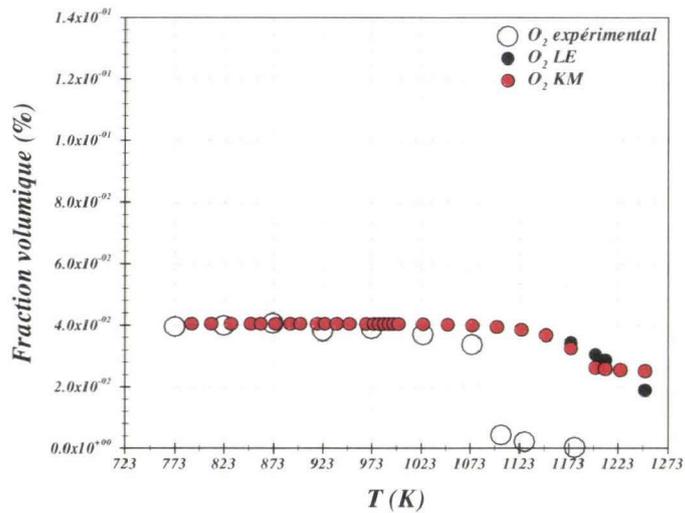


(b) $\phi = 1,0$



(c) $\phi = 1,4$

Figure 75 – Résultats expérimentaux et numériques pour la fraction volumique de CO_2

(a) $\phi = 0,6$ (b) $\phi = 1,0$ (c) $\phi = 1,4$ Figure 76 – Résultats expérimentaux et numériques pour la fraction volumique de O_2

Le mécanisme KM est plus réactif que le schéma LE en ce qui concerne le CO et montre une meilleure prédiction pour des richesses inférieures ou égales à la stœchiométrie (cf. Fi-

gures 73a et 73b, page 107). En revanche, à partir de 1150 K et à des richesses supérieures à l'unité (cf. Figure 75c) il n'est plus en accord avec les données expérimentales.

La fraction volumique de méthane calculée avec le mécanisme KM ne montre aucune évolution avec la température ou la richesse (cf. Figure 74) ; les résultats obtenus sont dans un bon accord avec les données expérimentales seulement à basses températures (700 – 1000 K).

La fraction volumique de CO_2 est légèrement sous-estimée par le mécanisme KM à faibles richesses (cf. Figure 75), mais elle reste dans un bon accord avec les valeurs expérimentales.

Le taux d'oxygène est surestimé par le mécanisme KM (cf. Figure 76).

D'une manière générale, le mécanisme cinétique KM est dans un bon accord avec les données expérimentales à basses températures et faibles richesses, notamment pour la fraction volumique de CO. Le mécanisme LE montre un bon comportement pour toutes les espèces sur tout le domaine de température et pour les trois richesses étudiées. Ainsi, le mécanisme LE devrait être utilisé pour les futures simulations, étant donné que les conditions de température et de richesse sont assez variables au sein du foyer.

5.2.2 Calcul 2D du transfert thermique au sein du lit combustible

Les résultats présentés ci-dessous concernent le calcul du transfert thermique au sein du lit à l'aide du modèle décrit dans le paragraphe 3.3, page 49. La géométrie considérée pour ce cas test est donnée dans la Figure 77. Vu que les transformations thermochimiques ne sont pas prises en compte, la hauteur du lit, égale à 0,2 m, est constante. De même pour le diamètre des particules, qui est considéré ici égal à 14 mm. Le domaine ainsi défini est discrétisé en 200 points de calcul uniformément espacés sur les deux directions.

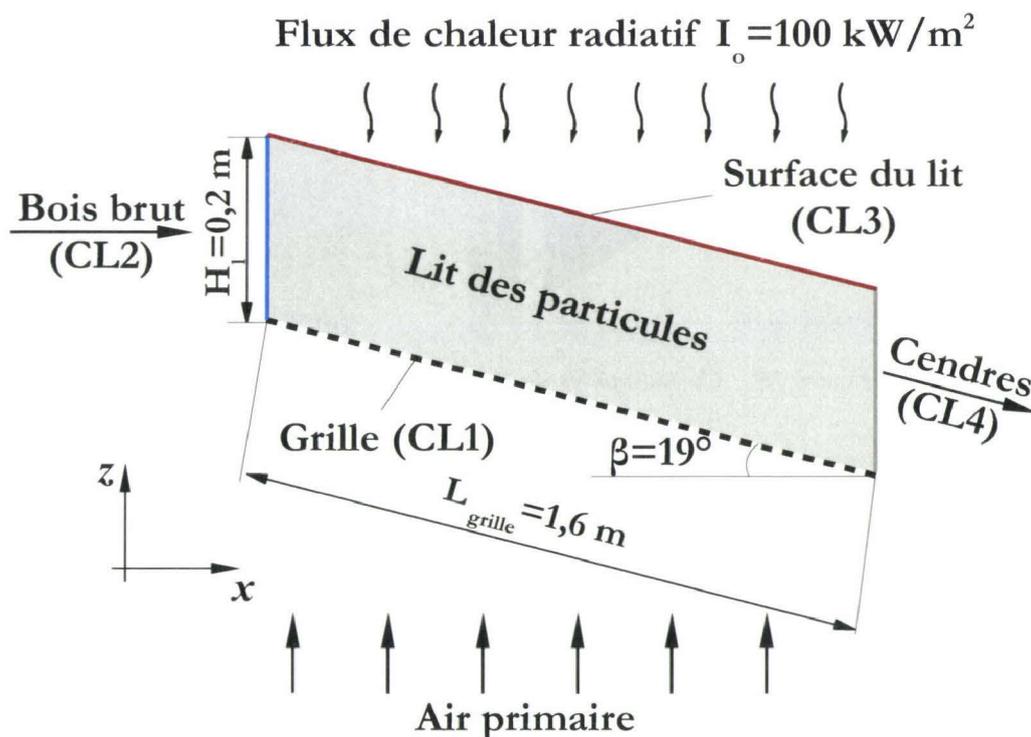


Figure 77 – Géométrie considérée pour le calcul du transfert thermique au sein du lit

Les conditions aux limites pour les deux phases sont listées dans le Tableau 22. Les compositions du gaz (ici air humide) et du solide (ici humidité et matière sèche) doivent être spécifiées, bien qu'elles restent constantes sur tout le domaine de calcul, car elles interviennent dans les équations de bilan.

Tableau 22 – Conditions aux limites pour le calcul du transfert thermique au sein du lit

Frontière	Phase solide	Phase gazeuse
CL1	$\lambda_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial z} = h_{ext} (T_{A1} - T_s)$	$m''_{A1} = 0,14 \text{ kg/m}^2\text{s}$ $T_{A1} = 323 \text{ K}$ $Y_{H_2O} = 0,91 \text{ \%}, Y_{O_2} = 23,08 \text{ \%}, Y_{N_2} = 76,01 \text{ \%}$
CL2	$m''_{bois} = 0,17 \text{ kg/m}^2\text{s}$ $T_{bois} = 304 \text{ K}$ $Y_{hum} = 28,3 \text{ \%}, Y_{sec} = 71,7 \text{ \%}$	$m''_{A1} = 0,14 \text{ kg/m}^2\text{s}$ $T_{A1} = T_{bois}$ $Y_{H_2O} = 0,91 \text{ \%}, Y_{O_2} = 23,08 \text{ \%}, Y_{N_2} = 76,01 \text{ \%}$
CL3	$\lambda_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial z} = I_o - \sigma_b T_s^4$	—
CL4	$\lambda_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial x} = 0$	—

Le champ de température ainsi calculé pour les deux phases est illustré dans la Figure 78. On peut observer que l'ordre de grandeur des températures calculées est en accord avec le flux de chaleur radiatif imposé à la surface du lit et avec les propriétés thermophysiques des deux phases. Le sens du transfert thermique est également bien respecté. Ainsi, au niveau de la grille le gaz réchauffe le solide et en avançant vers la surface du lit la chaleur commence à être transférée du solide vers le gaz.

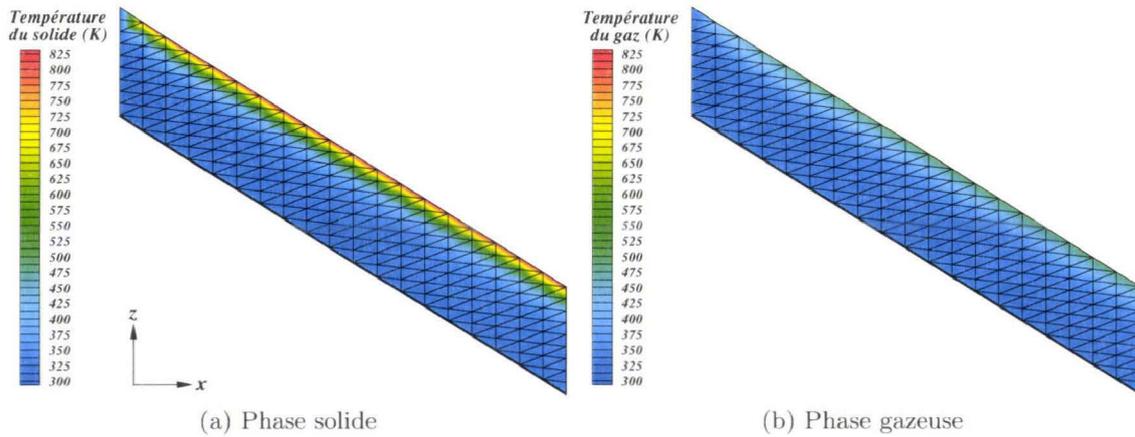


Figure 78 – Cartographies de température au sein du lit

Compte tenu de ces résultats, on peut considérer cette étape du développement comme achevée. La suite sera consacrée au traitement de la non linéarité introduite par les termes sources dus au séchage, à la dévolatilisation, à l'oxydation du résidu carboné et aux réactions homogènes.

Conclusions et perspectives

Le travail présenté ici est orienté vers la mise en place, à l'aide d'essais expérimentaux, d'un modèle numérique qui décrit le mieux possible la combustion du bois dans une chaudière automatique à grilles mobiles.

Les différentes technologies de combustion des solides ont été d'abord décrites pour donner un aperçu du fonctionnement des chaudières automatiques. Ensuite, les aspects phénoménologiques liés à la combustion du bois en lit fixe ont été présentés, afin de s'attaquer aux formalismes mathématiques décrivant la conversion thermique d'un lit de particules et les écoulements turbulents réactifs. Cette étape a permis d'orienter le choix vers l'approche reposant sur le couplage code CFD – code 2D. Ainsi, le code de calcul Fluent a été utilisé pour la modélisation de la phase gazeuse. Ce code résout les équations de bilan à dérivées partielles en utilisant la méthode des volumes finis. Les modèles numériques permettant de décrire la turbulence, les réactions chimiques et le transfert de chaleur par rayonnement ont été détaillés à ce niveau.

En ce qui concerne la phase solide, deux approches ont été mises en avant. D'abord l'approche fondée sur l'étude de Huttunen *et al.* [61] a été introduite. Cette méthode ne fait pas appel aux équations à dérivées partielles, étant basée sur des bilans globaux. Ceci la rend incapable de décrire l'évolution de la combustion en lit fixe au niveau local, bien qu'elle puisse fournir des résultats acceptables à l'échelle globale. Afin de surmonter cet inconvénient, nous avons proposé un modèle qui consiste à résoudre les équations de bilan à dérivées partielles en utilisant la méthode des différences finies.

L'installation étudiée et les techniques expérimentales utilisées dans le cadre de ce travail ont été ensuite présentées. Il s'agit d'une chaudière de 400 kW_{th} à grille mobile, alimentée avec du bois broyé et fabriquée par la société Compte. Les essais expérimentaux ont été menés au Centre de Recherches pour l'Environnement, l'Énergie et le Déchet (CReeD) basé à Limay (78), qui est le centre de recherches de Veolia Environnement dédié aux divisions Énergie et Propreté du groupe.

Deux types de mesures ont été réalisées : globales et locales. La première catégorie concerne les débits de combustible, d'air comburant, de fumées et d'eau ; la température et l'humidité de l'air ambiant ; la température et la pression au niveau du foyer ; les températures d'eau à l'entrée/sortie de la chaudière et finalement l'analyse des gaz de combustion. Ces mesures ont été effectuées avec les instruments qui équipent normalement l'installation.

Les mesures locales concernent les profils de température, de vitesses et de concentrations des gaz au sein du foyer. Ainsi, la température locale a été mesurée à l'aide de 12 thermocouples placés dans 4 gaines en acier réfractaire. Compte tenu des conditions extrêmes existant dans la chambre de combustion, nous avons fait appel à la technique de diagnostic laser ADL pour les mesures de vitesse. Cette méthode nous a permis d'obtenir avec un maximum de précision, et de manière non intrusive, les vitesses de l'écoulement en quelques points du foyer. On notera, par ailleurs, que le fait d'avoir utilisé cette technique avec succès sur une installation de taille semi-industrielle, est d'une originalité certaine.

En ce qui concerne la composition locale des gaz, nous avons conçu une sonde de prélèvement refroidie à eau chaude et munie d'un thermocouple, afin de récolter les gaz en quelques points

de la chambre de combustion. Les gaz ainsi prélevés ont été analysés à l'aide d'un spectromètre Infrarouge à Transformées de Fourier, un analyseur d'oxygène paramagnétique et un chromatographe. Ainsi, 18 espèces gazeuses ont pu être analysées.

Ces techniques ont servi pour réaliser six essais expérimentaux pour différentes conditions opératoires. Alors, cinq essais ont été effectués pour des distributions d'air secondaire symétriques et un seul pour une alimentation asymétrique en air secondaire.

Les mesures globales ont permis de mettre en évidence les régimes de fonctionnement. Ainsi, la durée minimale d'essais nécessaire pour aboutir à un intervalle significatif de régime stationnaire est de 36 heures.

Les températures mesurées au-dessus du lit de combustible montraient des valeurs plus élevées dans les régions proches des parois qu'au centre du foyer. Ceci peut s'expliquer par une abondance d'air primaire plus importante dans ces régions que dans les zones centrales. Autrement dit, l'air primaire est susceptible de rentrer dans le foyer plutôt par l'espace existant entre les bords de la grille et les parois du foyer. Ces mesures ont également mis en évidence une dissymétrie transversale, liée à l'hétérogénéité qui caractérise le lit combustible.

Les valeurs instantanées des vitesses mesurées au sein du foyer ont permis de bien mettre en évidence la nature turbulente de l'écoulement. Les valeurs moyennées ne dépassent pas 2,5 m/s pour la composante longitudinale, 2 m/s pour la verticale et elles sont quasiment nulles pour la composante transverse. De même, ces mesures ont servi pour déduire la structure de l'écoulement et l'épaisseur de la « couche limite », estimée à environ 10 cm.

En ce qui concerne la composition locale des gaz, seulement 7 points de mesure ont été exploitables sur les 25 visés au départ, car les concentrations dépassaient souvent les limites du dispositif IRTF. Les zones exploitées tiennent compte de cet inconvénient, mais avec une incertitude qui peut aller jusqu'à 20%. On a constaté ainsi que certains composants, tels que le CO, H₂, C₂H₄ et la formaldéhyde montrent une concentration assez élevée. Ceci, en plus des fortes fluctuations, met en évidence d'une part le caractère instationnaire des flammes et d'autre part le fait que les conditions optimales de combustion ne sont pas atteintes à ce niveau du foyer (c'est-à-dire entre la grille et les arrivées d'air secondaire). Il faut remarquer la présence de l'hydrogène de l'ordre du pourcentage volumique et celle du cétane. Cependant, il convient de noter l'absence du NH₃, du SO₂, des composés aromatiques/cycliques et celle des espèces hydrocarbonées ayant un nombre d'atomes de carbone compris entre 4 et 15.

Les mesures expérimentales ont servi ensuite comme support pour l'analyse des calculs numériques, qui concernent principalement la modélisation de la combustion des matières volatiles au-dessus du lit de combustible. Ainsi, trois études numériques ont été réalisées afin d'évaluer si les modèles choisis sont capables de décrire l'effet de la distribution d'air secondaire, l'impact du mécanisme cinétique de combustion et la structure de l'écoulement. On note que les conditions aux limites imposées sur la frontière du domaine de calcul désignant la surface du lit ont été obtenues à partir de l'approche de Huttunen *et al.* [61].

La première étude a montré que, en passant d'une distribution d'air secondaire de type asymétrique à une distribution de type symétrique, l'émission de CO peut être réduite par un facteur trois. Une autre conséquence était le décalage de la zone de haute température. Le calcul numérique s'est révélé capable de reproduire ce décalage de la température, l'ordre de grandeur étant le même que pour les valeurs mesurées. En contrepartie, le mécanisme cinétique semi-global à six réactions surestimait la fraction massique de CO et montrait une incohérence en ce qui concerne la composition des fumées. Néanmoins, le modèle numérique s'est avéré capable de reproduire la diminution des émissions de CO.

Suite à ces constats, une deuxième étude numérique a été réalisée afin d'évaluer le rôle du mécanisme cinétique. Ainsi, les résultats obtenus avec la cinétique chimique semi-globale ont été comparés avec ceux fournis par le mécanisme réactionnel KM, qui compte 40 réactions. Ce dernier s'est montré beaucoup plus précis en ce qui concerne les teneurs en CO, O₂ et CO₂,

les différences par rapport aux valeurs expérimentales étant d'environ 1 %. En revanche, ce gain en précision était accompagné par une augmentation approximative de trois fois de la durée de simulation, en utilisant les mêmes ressources informatiques.

Enfin, la troisième étude portait sur l'analyse des résultats de simulation concernant l'écoulement. En général, un bon accord entre les valeurs numériques et expérimentales a été observé sur l'axe du foyer. Par contre, dans la région proche de la paroi (15 – 150 mm) les profils expérimentaux présentent un pic, indiquant ainsi un écoulement préférentiel de l'air primaire entre la grille et la paroi du foyer. Ceci a été également indiqué par les mesures locales de température. Le calcul numérique n'a pas reproduit cette évolution, car les conditions aux limites imposées à la surface du lit n'en tenaient pas compte. On a également pu constater que l'emplacement des zones de recirculation prédit par le modèle correspondait globalement à ce qui était indiqué par les mesures expérimentales.

À la fin de cette partie nous sommes revenus au mécanisme cinétique KM afin de porter un regard plus critique d'un point de vue purement chimique. Pour ce faire, le mécanisme KM a été comparé avec les résultats du schéma réactionnel LE (qui compte 49 réactions) et les résultats expérimentaux de Leroy *et al.* [71]. Les calculs ont été réalisés à l'aide du module PSR du code CHEMKIN II. Les résultats ont montré que le mécanisme KM est plus réactif que le schéma LE. Cependant, la cinétique KM se trouve dans un bon accord avec les données expérimentales à basses températures et à faibles richesses de mélange. D'autre part, le schéma réactionnel LE montre un bon comportement dans tous les cas. Compte tenu de ces éléments et vu la variabilité des conditions de température et de richesse au sein du foyer, il conviendrait d'utiliser le schéma cinétique LE pour les futures simulations numériques. Dans la dernière partie de notre travail, nous présentons des résultats partiels obtenus à l'aide du modèle de lit bidimensionnel que nous avons proposé. Ces résultats concernent seulement, en l'état actuel du développement du code, le transfert thermique au sein d'un lit de particules solides. Nous avons pu constater que l'ordre de grandeur des températures calculées pour les deux phases (solide et gazeuse) et le sens du transfert thermique correspondent bien à ce qui était attendu. On peut donc considérer cette étape du développement comme franchie. La suite sera consacrée au traitement de la non linéarité introduite par les termes sources dus aux transformations thermochimiques, afin de pouvoir se consacrer au couplage avec le code CFD.

Sur un autre plan, les résultats des mesures de concentrations locales des gaz mériteraient d'être confortés par des campagnes expérimentales supplémentaires, avec un accent sur l'influence de la distribution d'air. Ces essais complémentaires devraient être réalisés à l'aide d'un dispositif IRTF haute résolution, couplé à un diluteur électronique de gaz pour éviter les problèmes liés à la saturation de l'appareil de mesure.

Les résultats de ces campagnes de mesure pourront être ensuite utilisés pour analyser la capacité du code CFD et du mécanisme réactionnel LE, pour décrire la distribution des espèces gazeuses au sein du foyer, en tenant compte des hypothèses faites sur les conditions aux limites. À ce niveau, il conviendrait d'une part de chercher une solution expérimentale permettant de mieux quantifier la distribution d'air primaire sous la grille et, d'autre part, d'agrandir le domaine de calcul, afin de tenir compte du trajet hydraulique de l'air secondaire et du parcours complet des fumées jusqu'à la sortie de la chaudière.

Ces éléments réunis permettraient d'appliquer la méthodologie numérique proposée dans ce travail à d'autres géométries de foyer, voire à des chambres de combustion de taille industrielle.

À long terme, on pourrait envisager l'utilisation des schémas réactionnels détaillés en prenant appui sur des modèles statistiques, de type PDF amélioré par exemple, ou encore l'intégration du modèle de lit dans un code CFD.

Annexes

Annexe A

Propriétés thermophysiques des gaz

Chaleur spécifique

- pour une espèce :

$$\frac{c_{p,ig}}{R} = a_{1,ig} + a_{2,ig} T + a_{3,ig} T^2 + a_{4,ig} T^3 + a_{5,ig} T^4$$

- pour un mélange :

$$c_p = \sum_{ig} c_{p,ig} Y_{ig}$$

Enthalpie spécifique

- pour une espèce :

$$\frac{h_{ig}}{R} = a_{1,ig} T + \frac{a_{2,ig}}{2} T^2 + \frac{a_{3,ig}}{3} T^3 + \frac{a_{4,ig}}{4} T^4 + \frac{a_{5,ig}}{5} T^5 + a_{6,ig}$$

- pour un mélange :

$$h = \sum_{ig} h_{ig} Y_{ig}$$

Les coefficients $a_{j,ig}$ avec $j = \overline{1,6}$ sont données dans le Tableau 23.

Viscosité dynamique

- pour une espèce :

$$\mu_{ig} = 2,67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_{ig} T}}{\sigma_{ig}^2 \Omega^{(2,2)}}$$

- pour un mélange :

$$\mu = \sum_{ig} \frac{X_{ig} \mu_{ig}}{\sum_{jg} X_{jg} \phi_{ig,jg}}$$

Avec [52, 68] :

$$\Omega^{(2,2)} = 1,16145 T_r^{-0,14874} + 0,52487 \exp(-0,7732 T_r) + 2,16178 \exp(-2,43787 T_r)$$

$$T_r = \frac{T}{\epsilon_{L-J_{ig}}/k_B}$$

$$\phi_{ig,jg} = \left[8 \left(1 + \frac{M_{ig}}{M_{jg}} \right) \right]^{1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_{ig}}{\mu_{jg}} \right)^{1/2} \left(\frac{M_{jg}}{M_{ig}} \right)^{1/4} \right]^2$$

Conductivité thermique

– pour une espèce :

$$\lambda_{ig} = \mu_{ig} \left(c_{p_{ig}} + \frac{5}{4} \frac{R}{M_{ig}} \right)$$

– pour un mélange :

$$\lambda = \sum_{ig} \frac{X_{ig} \lambda_{ig}}{\sum_{jg} X_{ig} \phi_{ig,jg}}$$

Coefficient de diffusion massique

– pour la diffusion de l'espèce ig dans l'espèce jg :

$$D_{ig,jg} = 0,001858 \frac{\left[T^3 \frac{M_{ig} + M_{jg}}{M_{ig} M_{jg}} \right]^{1/2}}{p \sigma_{ig,jg} \Omega^{(1,1)}}$$

– pour la diffusion de l'espèce ig dans un mélange :

$$D_{i,m} = \frac{1 - X_{ig}}{\sum_{jg, jg \neq ig} (X_{jg} / D_{ig,jg})}$$

Avec [52, 68] :

$$\sigma_{ig,jg} = \frac{\sigma_{ig} + \sigma_{jg}}{2}$$

$$\Omega^{(1,1)} = 1,06036 T_r^{-0,1561} + 0,193 \exp(-0,47635 T_r) + 1,03587 \exp(-1,52996 T_r) + 1,76474 \exp(-3,89411 T_r)$$

$$T_r = \frac{T}{\epsilon_{L-J_{ig,jg}} / k_B}$$

$$\epsilon_{L-J_{ig,jg}} = \sqrt{\epsilon_{L-J_{ig}} \epsilon_{L-J_{jg}}}$$

Les paramètres de longueur, σ_{ig} , et d'énergie, $\epsilon_{L-J_{ig}}$, dans le potentiel Lennard-Jones sont donnés dans le Tableau 24.

Tableau 23 – Coefficients pour le calcul de la chaleur spécifique et l'enthalpie [3]

Espèce	T (K)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
O	300–1000	2,56942078E+00	-8,59741137E-05	4,19484589E-08	-1,00177799E-11	1,22833691E-15	2,92175791E+04
	1000–5000	3,16826710E+00	-3,27931884E-03	6,64306396E-06	-6,12806624E-09	2,11265971E-12	2,91222592E+04
O ₂	300–1000	3,28253784E+00	1,48308754E-03	-7,57966669E-07	2,09470555E-10	-2,16717794E-14	-1,08845772E+03
	1000–5000	3,78245636E+00	-2,99673416E-03	9,84730201E-06	-9,68129509E-09	3,24372837E-12	-1,06394356E+03
H	300–1000	2,50000001E+00	-2,30842973E-11	1,61561948E-14	-4,73515235E-18	4,98197357E-22	2,54736599E+04
	1000–5000	2,50000000E+00	7,05332819E-13	-1,99591964E-15	2,30081632E-18	-9,27732332E-22	2,54736599E+04
H ₂	300–1000	3,33727920E+00	-4,94024731E-05	4,99456778E-07	-1,79566394E-10	2,00255376E-14	-9,50158922E+02
	1000–5000	2,34433112E+00	7,98052075E-03	-1,94781510E-05	2,01572094E-08	-7,37611761E-12	-9,17935173E+02
OH	300–1000	3,09288767E+00	5,48429716E-04	1,26505228E-07	-8,79461556E-11	1,17412376E-14	3,85865700E+03
	1000–5000	3,99201543E+00	-2,40131752E-03	4,61793841E-06	-3,88113333E-09	1,36411470E-12	3,61508056E+03
H ₂ O	300–1000	3,03399249E+00	2,17691804E-03	-1,64072518E-07	-9,70419870E-11	1,68200992E-14	-3,00042971E+04
	1000–5000	4,19864056E+00	-2,03643410E-03	6,52040211E-06	-5,48797062E-09	1,77197817E-12	-3,02937267E+04
HO ₂	300–1000	4,57317000E+00	4,33614000E-03	-1,47469000E-06	2,34890000E-10	-1,43200000E-14	-1,80070000E+04
	1000–5000	3,38875000E+00	6,56923000E-03	-1,48500000E-07	-4,62581000E-09	2,47151000E-12	-1,76631000E+04
H ₂ O ₂	300–1000	4,01721090E+00	2,23982013E-03	-6,33658150E-07	1,14246370E-10	-1,07908535E-14	1,11856713E+02
	1000–5000	4,30179801E+00	-4,74912051E-03	2,11582891E-05	-2,42763894E-08	9,29225124E-12	2,94808040E+02
CH ₃	300–1000	2,28571772E+00	7,23990037E-03	-2,98714348E-06	5,95684644E-10	-4,67154394E-14	1,67755843E+04
	1000–5000	3,67359040E+00	2,01095175E-03	5,73021856E-06	-6,87117425E-09	2,54385734E-12	1,64449988E+04
CH ₄	300–1000	7,48514950E-02	1,33909467E-02	-5,73285809E-06	1,22292535E-09	-1,01815230E-13	-9,46834459E+03
	1000–5000	5,14987613E+00	-1,36709788E-02	4,91800599E-05	-4,84743026E-08	1,66693956E-11	-1,02466476E+04
CO	300–1000	2,71518561E+00	2,06252743E-03	-9,98825771E-07	2,30053008E-10	-2,03647716E-14	-1,41518724E+04
	1000–5000	3,57953347E+00	-6,10353680E-04	1,01681433E-06	9,07005884E-10	-9,04424499E-13	-1,43440860E+04

(continué sur la page suivante)

Tableau 23 (suite)

Espèce	T (K)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
CO ₂	300-1000	3,85746029E+00	4,41437026E-03	-2,21481404E-06	5,23490188E-10	-4,72084164E-14	-4,87591660E+04
	1000-5000	2,35677352E+00	8,98459677E-03	-7,12356269E-06	2,45919022E-09	-1,43699548E-13	-4,83719697E+04
HCO	300-1000	2,77217438E+00	4,95695526E-03	-2,48445613E-06	5,89161778E-10	-5,33508711E-14	4,01191815E+03
	1000-5000	4,22118584E+00	-3,24392532E-03	1,37799446E-05	-1,33144093E-08	4,33768865E-12	3,83956496E+03
CH ₂ O	300-1000	1,76069008E+00	9,20000082E-03	-4,42258813E-06	1,00641212E-09	-8,83855640E-14	-1,39958323E+04
	1000-5000	4,79372315E+00	-9,90833369E-03	3,73220008E-05	-3,79285261E-08	1,31772652E-11	-1,43089567E+04
CH ₃ O	300-1000	3,77079900E+00	7,87149700E-03	-2,65638400E-06	3,94443100E-10	-2,11261600E-14	1,27832520E+02
	1000-5000	2,10620400E+00	7,21659500E-03	5,33847200E-06	-7,37763600E-09	2,07561000E-12	9,78601100E+02
C ₂ H ₂	300-1000	4,14756964E+00	5,96166664E-03	-2,37294852E-06	4,67412171E-10	-3,61235213E-14	2,59359992E+04
	1000-5000	8,08681094E-01	2,33615629E-02	-3,55171815E-05	2,80152437E-08	-8,50072974E-12	2,64289807E+04
C ₂ H ₃	300-1000	3,01672400E+00	1,03302292E-02	-4,68082349E-06	1,01763288E-09	-8,62607041E-14	3,46128739E+04
	1000-5000	3,21246645E+00	1,51479162E-03	2,59209412E-05	-3,57657847E-08	1,47150873E-11	3,48598468E+04
C ₂ H ₄	300-1000	2,03611116E+00	1,46454151E-02	-6,71077915E-06	1,47222923E-09	-1,25706061E-13	4,93988614E+03
	1000-5000	3,95920148E+00	-7,57052247E-03	5,70990292E-05	-6,91588753E-08	2,69884373E-11	5,08977593E+03
C ₂ H ₅	300-1000	1,95465642E+00	1,73972722E-02	-7,98206668E-06	1,75217689E-09	-1,49641576E-13	1,28575200E+04
	1000-5000	4,30646568E+00	-4,18658892E-03	4,97142807E-05	-5,99126606E-08	2,30509004E-11	1,28416265E+04
C ₂ H ₆	300-1000	1,07188150E+00	2,16852677E-02	-1,00256067E-05	2,21412001E-09	-1,90002890E-13	-1,14263932E+04
	1000-5000	4,29142492E+00	-5,50154270E-03	5,99438288E-05	-7,08466285E-08	2,68685771E-11	-1,15222055E+04
HCCO	300-1000	5,62820580E+00	4,08534010E-03	-1,59345470E-06	2,86260520E-10	-1,94078320E-14	1,93272150E+04
	1000-5000	2,25172140E+00	1,76550210E-02	-2,37291010E-05	1,72757590E-08	-5,06648110E-12	2,00594490E+04
N ₂	300-1000	2,92664000E+00	1,48797680E-03	-5,68476000E-07	1,00970380E-10	-6,75335100E-15	-9,22797700E+02
	1000-5000	3,29867700E+00	1,40824040E-03	-3,96322200E-06	5,64151500E-09	-2,44485400E-12	-1,02089990E+03
Ar	300-1000	2,50000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	-7,45375000E+02
	1000-5000	2,50000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	0,00000000E+00	-7,45375000E+02

(continué sur la page suivante)

Tableau 23 (suite)

Espèce	T (K)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
C(s)	300-1000	1,45569246E+00	1,71706380E-03	-6,97584100E-07	1,35283160E-10	-9,67649050E-15	-6,95128087E+02
	1000-5000	-3,10872070E-01	4,40353690E-03	1,90394120E-06	-6,38546970E-09	2,98964250E-12	-1,08650790E+02

Tableau 24 – Paramètres Lennard - Jones [3, 52, 68]

Espèce	ϵ_{L-J}/k_B (K)	σ (Å)
Ar	136,5	3,33
C ₂ H ₂	209,0	4,1
C ₂ H ₃	209,0	4,1
C ₂ H ₄	280,8	3,971
C ₂ H ₅	252,3	4,302
C ₂ H ₆	252,3	4,302
CH ₂ O	498,0	3,59
CH ₃	144,0	3,8
CH ₃ O	417,0	3,69
CH ₄	141,4	3,746
CO	98,1	3,65
CO ₂	244,0	3,763
H	145,0	2,05
H ₂	38,0	2,92
H ₂ O	572,4	2,605
H ₂ O ₂	107,4	3,458
HCCO	150,0	2,5
HCO	498,0	3,59
HO ₂	107,4	3,458
N ₂	97,53	3,621
O	80,0	2,75
O ₂	107,4	3,458
OH	80,0	2,75

Tableau 25 – Enthalpies de formation [50, 93, 114]

Espèce	h_f° (J/mol)
O ₂	0
H ₂	0
H ₂ O	-241 826
CH ₄	-74 873
CO	-110 527
CO ₂	-393 522
C ₂ H ₂	226 731
C ₂ H ₄	52 467
N ₂	0
C(s)	0

Annexe B

Mécanismes cinétiques

Tableau 26 - Mécanisme cinétique KM. $k = A T^{\beta_r} \exp[-E_a/(RT)]$

	Réactions	A	β_r	E_a (cal/mol)
1	$H + H + M^a \rightleftharpoons H_2 + M$	7,31E+017	-1,000	0
2	$O + O + M \rightleftharpoons O_2 + M$	1,14E+017	-1,000	0
3	$O + H + M \rightleftharpoons OH + M$	6,20E+016	-0,600	0
4	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1,70E+013	0,000	47 780
5	$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	3,87E+004	2,700	6 260
6	$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	1,85E+014	0,000	16 812
7	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	8,00E+017	-0,800	0
8	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	8,62E+021	-2,000	0
9	$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	2,16E+008	1,510	3 430
10	$H_2O + O \rightleftharpoons OH + OH$	1,50E+010	1,140	17 260
11	$HO_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + O_2$	2,89E+013	0,000	- 497
12	$HO_2 + O \rightleftharpoons OH + O_2$	1,81E+013	0,000	- 400
13	$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	4,28E+013	0,000	1 411
14	$H + HO_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1,69E+014	0,000	874
15	$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O$	3,01E+013	0,000	1 721
16	$HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	4,08E+002	3,321	1 979
17	$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$	5,80E+014	0,000	9 557
18	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	1,70E+012	0,000	3 750
19	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2O + OH$	1,00E+013	0,000	3 590
20	$H_2O_2 + O \rightleftharpoons HO_2 + OH$	2,80E+013	0,000	6 400
21	$OH + OH \rightleftharpoons H_2O_2$	1,33E+016	-1,462	61
22	$CO + HO_2 \rightleftharpoons CO_2 + OH$	1,50E+014	0,000	23 650
23	$CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H$	4,40E+006	1,500	- 740
24	$CO + O + M \rightleftharpoons CO_2 + M$	2,83E+013	0,000	-4 540
25	$CO + O_2 \rightleftharpoons CO_2 + O$	2,53E+012	0,000	47 700
26	$HCO + M \rightleftharpoons H + CO + M$	1,85E+017	-1,000	17 000
27	$HCO + OH \rightleftharpoons CO + H_2O$	1,00E+014	0,000	0
28	$HCO + O \rightleftharpoons CO + OH$	3,00E+013	0,000	0
29	$HCO + O \rightleftharpoons CO_2 + H$	3,00E+013	0,000	0
30	$HCO + H \rightleftharpoons CO + H_2$	7,22E+013	0,000	0
31	$HCO + O_2 \rightleftharpoons CO + HO_2$	2,11E+009	1,120	- 620

(continué sur la page suivante)

Tableau 26 (suite)

	Réactions	A	β_r	E_a (cal/mol)
32	$\text{HCO} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{CH}_4$	1,20E+014	0,000	0
33	$\text{HCO} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH} + \text{H}$	3,00E+013	0,000	0
34	$\text{HCO} + \text{HCO} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{CO}$	1,80E+013	0,000	0
35	$\text{HCO} + \text{HCO} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{CO} + \text{CO}$	3,00E+012	0,000	0
36	$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HO}_2$	4,04E+013	0,000	56 913
37	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	4,38E+011	0,000	14 656
38	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2$	1,26E+008	1,600	2 170
39	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HCO}$	1,20E+008	1,400	530
40	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{CO}$	4,84E-004	4,000	-2 000

^a Les efficacités des partenaires de collision sont : $Z(\text{H}_2\text{O})=16,25$; $Z(\text{CO})=1,875$;
 $Z(\text{CO}_2)=3,75$; $Z(\text{CH}_4)=16,25$

Tableau 27 - Mécanisme cinétique LE [71]. $k = A T^{\beta_r} \exp[-E_a/(RT)]$

	Réactions	A	β_r	E_a (cal/mol)
1	$\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{OH}$	3,87E+04	2,7	6 260
2	$\text{O} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}_2$	2,00E+13	0,0	0
3	$\text{O} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3$	1,02E+09	1,5	8 600
4	$\text{O} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{H} + \text{CH}_2\text{O}$	5,06E+13	0,0	0
5	$\text{O} + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{HCO}$	3,96E+13	0,0	3 540
6	$2\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{M}$	1,20E+17	-1,0	0
7	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{OH}$	2,65E+16	-0,7	17 041
8	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	1,13E+19	-0,8	0
9	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{Ar} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{Ar}$	7,00E+17	0,8	0
10	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{N}_2$	2,60E+19	-1,2	0
11	$\text{H} + 2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{O}_2$	2,08E+19	-1,2	0
12	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	8,40E+13	0,0	635
13	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{H}_2$	4,48E+13	0,0	1 068
14	$\text{H} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$	6,60E+08	1,6	10 840
15	$\text{H} + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2$	5,74E+07	1,9	2 742
16	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M}^a \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	2,80E+18	-0,9	0
17	$\text{H} + \text{CH}_2\text{O} (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} (+\text{M})$	5,40E+11	0,5	2 600
18	$\text{H} + \text{CH}_3 (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{CH}_4 (+\text{M})$	1,39E+16	-0,5	536
19	$2\text{OH} \rightleftharpoons \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	3,57E+04	2,4	-2 110
20	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	2,16E+08	1,5	3 430
21	$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	1,45E+13	0,0	0
22	$\text{OH} + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	1,00E+08	1,6	3 120
23	$\text{OH} + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	3,43E+09	1,2	-447
24	$\text{OH} + \text{CO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO}_2$	4,76E+07	1,2	70
25	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{CH}_4$	1,00E+13	0,0	0
26	$\text{HO}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_3\text{O}$	3,78E+13	0,0	0
27	$\text{HO}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CO}_2$	1,50E+14	0,0	23 600
28	$\text{O}_2 + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{HCO}$	1,00E+14	0,0	40 000
29	$\text{O}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{O} + \text{CO}_2$	2,50E+12	0,0	47 800

(continué sur la page suivante)

Tableau 27 (suite)

	Réactions	A	β_r	E_a (cal/mol)
30	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$	1,35E+13	0,0	400
31	$\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO} + \text{M}$	1,87E+17	-1,0	17 000
32	$\text{HCCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + 2 \text{CO}$	3,20E+12	0,0	854
33	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{CH}_3\text{O}$	3,56E+13	0,0	30 480
34	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CH}_2\text{O}$	2,31E+12	0,0	20 315
35	$\text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{CH}_4$	3,32E+03	2,8	5 860
36	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O}$	4,28E-13	7,6	-3 530
37	$2 \text{CH}_3(+ \text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_6(+ \text{M})$	6,77E+16	-1,2	654
38	$\text{O} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{C}_2\text{H}_5$	8,98E+07	1,9	5 690
39	$\text{H} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	1,15E+08	1,9	7 530
40	$\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	3,54E+06	2,1	870
41	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_4$	6,14E+06	1,7	10 450
42	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{C}_2\text{H}_4$	8,40E+11	0,0	3 875
43	$\text{H} + \text{C}_2\text{H}_4(+ \text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5(+ \text{M})$	5,40E+11	0,5	1 820
44	$\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	3,60E+06	2,0	2 500
45	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_4$	2,27E+05	2,0	9 200
46	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$	1,34E+06	1,6	- 384
47	$\text{H} + \text{C}_2\text{H}_2(+ \text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3(+ \text{M})$	5,60E+12	0,0	2 400
48	$\text{O} + \text{C}_2\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{HCCO}$	1,35E+07	2,0	1 900
49	$\text{O} + \text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HCO}$	1,25E+07	1,8	220

^aLes efficacités des partenaires de collision sont : $Z(\text{H}_2\text{O})=6$; $Z(\text{CO})=1.5$;

$Z(\text{CO}_2)=2$; $Z(\text{CH}_4)=2$; $Z(\text{H}_2)=2$; $Z(\text{C}_2\text{H}_6)=3$; $Z(\text{Ar})=0.7$

Bibliographie

- [1] La valorisation énergétique du bois en France : le programme bois-énergie. DGEMP-DIDEME. http://www.developpement-durable.gouv.fr/energie/renou/biomasse/fle_biom.htm, novembre 2009.
- [2] Detroit Stoker Company. <http://www.detroitstoker.com/index.cfm>, janvier 2010.
- [3] GRI-Mech Homepage. <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech>, janvier 2010.
- [4] Société Fama. Le spreader stoker mécanique. http://www.fama.fr/fama_spreader_mecanique.htm, janvier 2010.
- [5] E. ACHENBACH. Heat and flow characteristics of packed beds. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 10(1), pages 17 – 27, 1995. DOI : 10.1016/0894-1777(94)00077-L.
- [6] ADEME. Orientations du programme biomasse énergie 2007 - 2010. *Pollution Atmosphérique. Le bois énergie : enjeux écologiques et de santé environnementale*, pages 175–176, mars 2009.
- [7] Nadine ALLEMAND. La biomasse, le bois et les déchets de bois - définitions. *Pollution Atmosphérique. Le bois énergie : enjeux écologiques et de santé environnementale*, pages 19–22, mars 2009.
- [8] A. EL BAKALI, P. DAGAUT, L. PILLIER, P. DESGROUX, J. F. PAUWELS, A. RIDA, et P. MEUNIER. Experimental and modeling study of the oxidation of natural gas in a premixed flame, shock tube, and jet-stirred reactor. *Combustion and Flame*, 137(1-2), pages 109 – 128, 2004. DOI : 10.1016/j.combustflame.2004.01.004.
- [9] A. EL BAKALI, L. PILLIER, P. DESGROUX, B. LEFORT, L. GASNOT, J.F. PAUWELS, et I. da COSTA. NO prediction in natural gas flames using GDF-Kin[®]3.0 mechanism NCN and HCN contribution to prompt-NO formation. *Fuel*, 85(7-8), pages 896 – 909, 2006. DOI : 10.1016/j.fuel.2005.10.012.
- [10] S. BALCI, T. DOGU, et H. YÜCEL. Pyrolysis kinetics of lignocellulosic materials. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 32, pages 2573 – 2579, 1993.
- [11] B. BENKOUSSAS, J.-L. CONSALVI, B. PORTERIE, N. SARDOY, et J.-C. LORAUD. Modelling thermal degradation of woody fuel particles. *International Journal of Thermal Sciences*, 46(4), pages 319 – 327, 2007. DOI : 10.1016/j.ijthermalsci.2006.06.016.
- [12] Claude BERNARD. Caractérisation et optimisation de la combustion du bois fragmenté. Thèse de doctorat, *Université Henri Poincaré-Nancy I*, 2005.
- [13] I. M. BEWS, A. N. HAYHURST, S. M. RICHARDSON, et S. G. TAYLOR. The order, Arrhenius parameters, and mechanism of the reaction between gaseous oxygen and solid carbon. *Combustion and Flame*, 124(1-2), pages 231 – 245, 2001. DOI : 10.1016/S0010-2180(00)00199-1.
- [14] C. DiColomba Di BLASI, Carmen BRANCA, Silvio SPARANO, et Barbara La MANTIA. Drying characteristics of wood cylinders for conditions pertinent to fixed-bed countercurrent gasification. *Biomass and Bioenergy*, 25(1), pages 45 – 58, 2003. DOI : 10.1016/S0961-9534(02)00180-0.

- [15] Colomba Di BLASI. Heat transfer mechanisms and multi-step kinetics in the ablative pyrolysis of cellulose. *Chemical Engineering Science*, 51(10), pages 2211 – 2220, 1996. DOI : 10.1016/0009-2509(96)00078-4, Chemical Reaction Engineering : From Fundamentals to Commercial Plants and Products.
- [16] Colomba Di BLASI. Influences of model assumptions on the predictions of cellulose pyrolysis in the heat transfer controlled regime. *Fuel*, 75(1), pages 58 – 66, 1996. DOI : 10.1016/0016-2361(95)00203-0.
- [17] Colomba Di BLASI. Influences of physical properties on biomass devolatilization characteristics. *Fuel*, 76(10), pages 957 – 964, 1997. DOI : 10.1016/S0016-2361(97)00096-3.
- [18] Colomba Di BLASI. Comparison of semi-global mechanisms for primary pyrolysis of lignocellulosic fuels. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 47(1), pages 43 – 64, 1998. DOI : 10.1016/S0165-2370(98)00079-5.
- [19] Colomba Di BLASI. Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(1), pages 47 – 90, 2008. DOI : 10.1016/j.pecs.2006.12.001.
- [20] Colomba Di BLASI. Combustion and gasification rates of lignocellulosic chars. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(2), pages 121 – 140, 2009. DOI : 10.1016/j.pecs.2008.08.001.
- [21] Colomba Di BLASI, Carmen BRANCA, Antonio SANTORO, et Elier Gonzalez HERNANDEZ. Pyrolytic behavior and products of some wood varieties. *Combustion and Flame*, 124(1-2), pages 165 – 177, 2001. DOI : 10.1016/S0010-2180(00)00191-7.
- [22] G. L. BORMAN et K. W. RAGLAND. Combustion engineering. *McGraw-Hill International Editions*, 1998.
- [23] Carmen BRANCA, Alessandro ALBANO, et Colomba Di BLASI. Critical evaluation of global mechanisms of wood devolatilization. *Thermochimica Acta*, 429(2), pages 133 – 141, 2005. DOI : 10.1016/j.tca.2005.02.030.
- [24] Carmen BRANCA et Colomba Di BLASI. Kinetics of the isothermal degradation of wood in the temperature range 528-708 K. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 67(2), pages 207 – 219, 2003. DOI : 10.1016/S0165-2370(02)00062-1.
- [25] Carmen BRANCA et Colomba Di BLASI. Global intrinsic kinetics of wood oxidation. *Fuel*, 83(1), pages 81 – 87, 2004. DOI : 10.1016/S0016-2361(03)00220-5.
- [26] Carmen BRANCA, Colomba Di BLASI, et Carmine RUSSO. Devolatilization in the temperature range 300-600 K of liquids derived from wood pyrolysis and gasification. *Fuel*, 84(1), pages 37 – 45, 2005. DOI : 10.1016/j.fuel.2004.07.007.
- [27] C. BRUCH et T. NUSSBAUMER. CFD modelling of wood furnaces. Dans Biomass for Energy and Industry. 10th European Conference and Technology, pages 1366 – 1369, Würzburg, Germany, 8 - 11th June 1998.
- [28] Christian BRUCH, Bernhard PETERS, et Thomas NUSSBAUMER. Modelling wood combustion under fixed bed conditions. *Fuel*, 82, pages 729 – 738, 2003.
- [29] Kenneth M. BRYDEN, Kenneth W. RAGLAND, et Christopher J. RUTLAND. Modeling thermally thick pyrolysis of wood. *Biomass and Bioenergy*, 22(1), pages 41 – 53, 2002. DOI : 10.1016/S0961-9534(01)00060-5.
- [30] Francisco CADAVID. Simulation numérique de la réduction des émissions de NO_x dans un four pilote de 4 MW et une chaudière tangentielle de 609 MW à charbon pulvérisé. Thèse de doctorat, *Université de Valenciennes et du Hainaut Cambrésis et École des Mines de Douai*, 2004.
- [31] Sébastien CAILLAT, Esperanza PERDRIX, Karim TABET, et Benoît TAUPIN. Cocombustion de charbon et de biomasse. Cas des chaudières industrielles. *Techniques de l'Ingénieur*, BE 8 752, 2010.

- [32] M. G. CARVALHO, T. FARIAS, et P. FONTES. Predicting Radiative Heat Transfer in Absorbing, Emitting, and Scattering Media Using the Discrete Transfer Method. Dans W. A. FIVELAND *et al.*, éditeur, *Fundamentals of Radiation Heat Transfer*, volume 160, pages 17 – 26. *ASME HTD*, 1991.
- [33] Patrick CHASSAING. Turbulence en mécanique des fluides : analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l’usage de l’ingénieur. *Editions Cépaduès*, 2000.
- [34] Jerzy CHOMIAK. Turbulent reacting flows. Graduate course book, *Chalmers University of Technology*, Göteborg, Sweden, March 2000.
- [35] E. H. CHUI et G. D. RAITHBY. Computation of Radiant Heat Transfer on a Non-Orthogonal Mesh Using the Finite-Volume Method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 23, pages 269 – 288, 1993.
- [36] J. COOPER et W. L. H. HALLETT. A numerical model for packed-bed combustion of char particles. *Chemical Engineering Science*, 55(20), pages 4451 – 4460, 2000. DOI : 10.1016/S0009-2509(00)00097-X.
- [37] Philippe DAGAUT, Marcelline REUILLON, Jean-Claude BOETTNER, et Michel CATHONNET. Kerosene combustion at pressures up to 40 atm : Experimental study and detailed chemical kinetic modeling. *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion*, 25(1), pages 919 – 926, 1994. DOI : 10.1016/S0082-0784(06)80727-7.
- [38] Marcio L. de SOUZA-SANTOS. Solid Fuels Combustion and Gasification. Modeling, Simulation, and Equipment Operation. *Marcel Dekker, Inc.*, 2004.
- [39] Xavier DEGLISE et André DONNOT. Bois énergie. *Techniques de l’Ingénieur*, BE 8 535, 2004.
- [40] Alain DELOYE. Combustibles solides. Charbon. Échantillonnage et essais, caractérisation. *Techniques de l’Ingénieur*, BE 8 532, 2007.
- [41] M.K. DENISON et R.W. WEBB. The spectral line weighted-sum-of-gray-gas model – a review. Dans M.P. MENGÜÇ, éditeur, *Radiative Transfer–I*, pages 193 – 208, New York, 1996. *Begell House*.
- [42] O. DESGARDIN. Effets des hétérogénéités de richesse sur la structure Locale des flammes turbulentes. Thèse de doctorat, *INSA de Rouen*, 2006.
- [43] Eugene S. DOMALSKI, Thomas L. Jobe JR., et Thomas A. MILNE. Thermodynamic data for biomass conversion and waste incineration. *National Bureau of Standards and The Solar Energy Research Institute*, September 1986.
- [44] F.L. DRYER et I. GLASSMAN. High-temperature oxidation of CO and CH₄. *Fourteenth Symposium (International) on Combustion*, 14(1), pages 987 – 1003, 1973. DOI : 10.1016/S0082-0784(73)80090-6.
- [45] A.M. EATON, L.D. SMOOT, S.C. HILL, et C.N. EATOUGH. Components, formulations, solutions, evaluation, and application of comprehensive combustion models. *Progress in Energy & Combustion Science*, 25, pages 387 – 436, 1999.
- [46] A. ELFASAKHANY et X. S. BAI. Modelling of pulverised wood combustion : a comparison of different models. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 6(4/5), pages 188 – 199, 2006.
- [47] Systèmes Solaires. Baromètre biomasse solide, No. 176, décembre 2006.
- [48] Tudor FLOREA, Kristyna STIOVOVA, Sébastien CAILLAT, Marie-Sophie CABOT, et Bernard BAUDOIN. Différents approches sur la modélisation de la turbulence et de la combustion dans une chaudière à bois bûches de petite puissance. Dans VIII^{ème} Colloque Interuniversitaire Franco-Québécois sur la Thermique des Systèmes, pages 481 – 487, Montréal, Canada, 28 - 30 mai 2007.

- [49] Fluent Inc. Fluent 6.3 User's Guide, September 2006.
- [50] Irvin GLASSMAN et Richard Y. YETTER. Combustion. *Academic Press. Elsevier Inc.*, 4th edition, 2008.
- [51] K. GOERNER et Th. KLASSEN. Modelling, simulation and validation of the solid biomass combustion in different plants. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 6(4/5), pages 225 – 234, 2006.
- [52] Jean GOSSE. Propriétés de transport des gaz à pression modérée. *Techniques de l'Ingénieur*, K 425.
- [53] Inge R. GRAN et Bjørn F. MAGNUSSEN. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 1. Influence of turbulence modeling and boundary conditions. *Combustion Science and Technology*, 119, pages 171 – 190, 1996.
- [54] Inge R. GRAN et Bjørn F. MAGNUSSEN. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 2. Influence of combustion modeling and finite-rate chemistry. *Combustion Science and Technology*, 119, pages 191 – 217, 1996.
- [55] M. GRØNLI. A theoretical and experimental study of the thermal degradation of biomass. Phd thesis, *NTNU Trondheim*, 1996.
- [56] Murlidhar GUPTA, Jin YANG, et Christian ROY. Density of softwood bark and softwood char : procedural calibration and measurement by water soaking and kerosene immersion method. *Fuel*, 81, pages 1379 – 1384, 2002.
- [57] D.J. HAUTMAN, F.L. DRYER, K.P. SCHUG, et I. GLASSMAN. A multiple-step overall kinetic mechanism for the oxidation of hydrocarbons. *Combustion Science and Technology*, 25, pages 219 – 235, 1981.
- [58] A. N. HAYHURST et M. S. PARMAR. Does solid carbon burn in oxygen to give the gaseous intermediate CO or produce CO₂ directly? Some experiments in a hot bed of sand fluidized by air. *Chemical Engineering Science*, 53(3), pages 427 – 438, 1998. DOI : 10.1016/S0009-2509(97)00334-5.
- [59] Simo HOSTIKKA et K. B. MCGRATTAN. Large eddy simulation of wood combustion. Dans Interflam 2001. Proceedings of the 9th International Fire Science & Engineering Conference, volume 2, pages 755 – 762, Edinburgh, Scotland, 17 - 19th September 2001. *Interscience Communications Ltd.*
- [60] H. C. HOTTEL et A. F. SAROFIM. Radiative transfer. *McGraw-Hill*, New York, 1959.
- [61] M. HUTTUNEN, L. KJÄLDMAN, et J. SAASTAMOINEN. Analysis of Grate Firing of Wood with Numerical Flow Simulation. *IFRF Combustion Journal*, (200401), March 2004.
- [62] Santiago JIMÉNEZ, Pilar REMACHA, Juan C. BALLESTEROS, Antonio GIMÉNEZ, et Javier BALLESTER. Kinetics of devolatilization and oxidation of a pulverized biomass in an entrained flow reactor under realistic combustion conditions. *Combustion and Flame*, 152(4), pages 588 – 603, 2008. DOI : 10.1016/j.combustflame.2007.10.001.
- [63] R. JOHANSSON, H. THUNMAN, et B. LECKNER. Influence of intraparticle gradients in modeling of fixed bed combustion. *Combustion and Flame*, 149(1-2), pages 49 – 62, 2007. DOI : 10.1016/j.combustflame.2006.12.009.
- [64] T. KASHIWAGI. A radiative ignition model of a solid fuel. *Combustion Science and Technology*, 8, pages 225 – 236, 1974.
- [65] Priyanka KAUSHAL, Tobias PRÖLL, et Hermann HOFBAUER. Model development and validation : Co-combustion of residual char, gases and volatile fuels in the fast fluidized combustion chamber of a dual fluidized bed biomass gasifier. *Fuel*, 86(17-18), pages 2687 – 2695, 2007. DOI : 10.1016/j.fuel.2007.03.032.
- [66] T. KLASON et X. S. BAI. Combustion process in a biomass grate fired industry furnace : a CFD study. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 6(4/5), pages 278 – 286, 2006.

- [67] H.C. KUNG. A mathematical model of wood pyrolysis. *Combustion and Flame*, 18, pages 185 – 195, 1972.
- [68] Kenneth K. KUO. Principles of combustion. *John Wiley & Sons, Inc.*, 2nd edition, 2005.
- [69] B.E. LAUNDER et B.I. SHARMA. Application of the energy dissipation of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, pages 131 – 138, 1974.
- [70] Vincent LEPAGE. Élaboration d'une méthode de réduction des schémas cinétiques détaillés. Application aux mécanismes de combustion du gaz naturel et du n-décane. Thèse de doctorat, *Université Paris VI*, septembre 2000.
- [71] Valérie LEROY, Eric LEONI, et Paul-Antoine SANTONI. Reduced mechanism for the combustion of evolved gases in forest fires. *Combustion and Flame*, 154(3), pages 410 – 433, 2008. DOI : 10.1016/j.combustflame.2008.04.014.
- [72] David R. LIDE, éditeur. Handbook of Chemistry and Physics. *CRC Press*, 74th edition, 1993 - 1994.
- [73] Pengyun LIN, Junjie JI, Yonghao LUO, et Yuan WANG. A non-isothermal integrated model of coal-fired traveling grate boilers. *Applied Thermal Engineering*, 29(14-15), pages 3224 – 3234, 2009. DOI : 10.1016/j.applthermaleng.2009.04.028.
- [74] Tianfeng LU et Chung K. LAW. Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(2), pages 192 – 215, 2009. DOI : 10.1016/j.peccs.2008.10.002.
- [75] J. D. MACLEAN. Thermal conductivity of wood. *Transactions American Society of Heating and Ventilating Engineers*, 47, pages 323 – 354, 1941.
- [76] B. F. MAGNUSSEN. On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow. St. Louis, 1981. 19th AIAA Meeting.
- [77] B.F. MAGNUSSEN et B.H. HJERTAGER. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. Dans The 16th International Symposium on Combustion. *The Combustion Institute*, 1976.
- [78] B.F. MAGNUSSEN, B.H. HJERTAGER, J.G. OLSEN, et D. BHADURI. Effects of turbulent structure and local concentrations on soot formation and combustion in C₂H₂ diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, 17(1), pages 1383 – 1393, 1979. DOI : 10.1016/S0082-0784(79)80130-7, Seventeenth Symposium (International) on Combustion.
- [79] Commission européenne. Climate Action. <http://ec.europa.eu/climateaction/>, novembre 2009.
- [80] Eurostat. Proportion des énergies renouvelables dans la consommation brute d'énergie intérieure. <http://epp.eurostat.ec.europa.eu/>, novembre 2009.
- [81] Institut des Bioénergies (ITEBE). <http://www.itebe.org/portail/affiche.asp?num=352&arbo=1>, décembre 2009.
- [82] Ministère de l'Écologie, de l'Énergie, du Développement durable et de la Mer. Observations et Statistiques. Tableau de bord bois-énergie. La production et la consommation de bois en France. http://www.statistiques.developpement-durable.gouv.fr/article.php3?id_article=1072, novembre 2009.
- [83] V. NOVOZHILOV, B. MOGHTADERI, D. F. FLETCHER, et J. H. KENT. Computational fluid dynamics modelling of wood combustion. *Fire Safety Journal*, 27(1), pages 69 – 84, 1996. DOI : 10.1016/S0379-7112(96)00022-7.
- [84] Th. NUSSBAUMER et J. GOOD. Technique de combustion. *ITEBE bio e-train*, 2006.

- [85] Suhas V. PATANKAR. Numerical heat transfer and fluid flow. Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences. *Hemisphere Publishing Corporation*, 1980.
- [86] Bernhard PETERS. Thermal Conversion of Solid Fuels. *WITT Press*, 2003.
- [87] Bernhard PETERS et Christian BRUCH. A flexible and stable numerical method for simulating the thermal decomposition of wood particles. *Chemosphere*, 42(5-7), pages 481 – 490, 2001. DOI : 10.1016/S0045-6535(00)00220-4.
- [88] N. PETERS. Fifteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion. Dans Ercoftac Summer School, Aachen, Germany, september 14 - 28 1992. *RWTH Aachen*.
- [89] Séverine PILLET. Réalisation d'un système expérimental pour caractériser la combustion et les émissions d'oxydes d'azote des combustibles solides : application aux charbons et à la biomasse. Thèse de doctorat, *Université d'Orléans*, décembre 2004.
- [90] Thierry POINSOT et Denis VEYNANTE. Theoretical and numerical combustion. *Edwards*, 2nd edition, 2005.
- [91] S. B. POPE. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in-situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modeling*, 1, pages 41 – 63, 1997.
- [92] William H. PRESS, Saul A. TEUKOLSKY, William T. VETTERLING, et Brian P. FLANNERY. Numerical Recipes : the art of scientific computing. *Cambridge University Press*, 3rd edition, 2007.
- [93] E. RANZI, M. DENTE, A. GOLDANIGA, G. BOZZANO, et T. FARAVELLI. Lumping procedures in detailed kinetic modeling of gasification, pyrolysis, partial oxidation and combustion of hydrocarbon mixtures. *Progress in Energy and Combustion Science*, 27(1), pages 99 – 139, 2001. DOI : 10.1016/S0360-1285(00)00013-7.
- [94] K. RAVEENDRAN, Anuradda GANESH, et Kartic C. KHILAR. Pyrolysis characteristics of biomass and biomass components. *Fuel*, 75(8), pages 987 – 998, 1996. DOI : 10.1016/0016-2361(96)00030-0.
- [95] H.R. REZAEI, R.P. GUPTA, G.W. BRYANT, J.T. HART, G.S. LIU, C.W. BAILEY, T.F. WALL, S. MIYAMAE, K. MAKINO, et Y. ENDO. Thermal conductivity of coal ash and slags and models used. *Fuel*, 79, pages 1697 – 1710, 2000.
- [96] Yann ROGAUME. La combustion des solides. Application au bois. Cours de Master. *ENSTIB Epinal, France*, 2005.
- [97] Yann ROGAUME. Production de chaleur à partir du bois. *Techniques de l'Ingénieur*, BE 8 747, 2005.
- [98] L. ROSENDAHL. Extending the modelling framework for gas - particle systems. Applications of multiparameter shape descriptions to non-conventional solid fuels in reacting and non-reacting environments. Denmark, 1998. *Institute of Energy Technology. Aalborg University*.
- [99] A. A. ROSTAMI, M. R. HAJALIGOL, et S. E. WRENN. A biomass pyrolysis sub-model for CFD applications. *Fuel*, 83(11-12), pages 1519 – 1525, 2004. DOI : 10.1016/j.fuel.2003.09.024, Fundamental Mechanisms of Biomass, Pyrolysis and Oxidation.
- [100] Jennifer S. RYAN et William L. H. HALLETT. Packed bed combustion of char particles : experiments and an ash model. *Chemical Engineering Science*, 57, pages 3873 – 3882, 2002.
- [101] Changkook RYU, Donghoon SHIN, et Sangmin CHOI. Effect of fuel layer mixing in waste bed combustion. *Advances in Environmental Research*, 5(3), pages 259 – 267, 2001. DOI : 10.1016/S1093-0191(00)00060-5.

- [102] J. J. SAASTAMOINEN, R. TAIPALE, M. HORTTANAINEN, et P. SARKOMAA. Propagation of the ignition front in beds of wood particles. *Combustion and Flame*, 123(1-2), pages 214 – 226, 2000. DOI : 10.1016/S0010-2180(00)00144-9.
- [103] J. C. SACCADURA. Étude expérimentale des flammes non-prémélangées hydrogène-oxygène. Caractérisation des champs dynamiques et scalaires. Thèse de doctorat, *Université de Rouen*, 1997.
- [104] R. SCHARLER, I. OBERNBERGER, G. LÄNLE, et J. HEINZLE. CFD analysis of air staging and flue gas recirculation in biomass grate furnaces. Dans Proceedings of the 1st World Conference on Biomass for Energy and Industry, Sevilla, Spain, June 2000.
- [105] Avdhesh Kr. SHARMA. Modeling fluid and heat transport in the reactive, porous bed of downdraft (biomass) gasifier. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 28(6), pages 1518 – 1530, 2007. DOI : 10.1016/j.ijheatfluidflow.2007.02.002, Revised and extended papers from the 5th conference in Turbulence, Heat and Mass Transfer, 'The 5th conference in Turbulence, Heat and Mass Transfer.
- [106] T.-H. SHIH, W. W. LIOU, A. SHABIR, Z. YANG, et J. ZHU. A New k- ϵ Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows - Model Development and Validation. *Computers Fluids*, 24(3), pages 227 – 238, 1995.
- [107] Donghoon SHIN et Sangmin CHOI. The combustion of simulated waste particles in a fixed bed. *Combustion and Flame*, 121(1-2), pages 167 – 180, 2000. DOI : 10.1016/S0010-2180(99)00124-8.
- [108] R. SIEGEL et J. R. HOWELL. Thermal Radiation Heat Transfer. *Hemisphere Publishing Corporation*, Washington D.C., 1992.
- [109] A. STREHLER. Technologies of wood combustion. *Ecological Engineering*, 16(Supplement 1), pages 25 – 40, 2000. DOI : 10.1016/S0925-8574(00)00049-5.
- [110] H. THUNMAN, B. LECKNER, F. NIKLASSON, et F. JOHNSON. Combustion of wood particles – a particle model for eulerian calculations. *Combustion and Flame*, 129(1-2), pages 30 – 46, 2002. DOI : 10.1016/S0010-2180(01)00371-6.
- [111] Henrik THUNMAN, Kent DAVIDSSON, et Bo LECKNER. Separation of drying and devolatilization during conversion of solid fuels. *Combustion and Flame*, 137(1-2), pages 242 – 250, 2004. DOI : 10.1016/j.combustflame.2004.02.008.
- [112] Henrik THUNMAN et Bo LECKNER. Thermal conductivity of wood-models for different stages of combustion. *Biomass and Bioenergy*, 23(1), pages 47 – 54, 2002. DOI : 10.1016/S0961-9534(02)00031-4.
- [113] Henrik THUNMAN et Bo LECKNER. Thermo Chemical Conversion of Biomass and Wastes. Dans Nordic graduate school BiofuelGS-2, Chalmers, Göteborg, Sweden, 19-23 November 2007.
- [114] Stephen R. TURNS. An introduction to combustion : Concepts and applications. *McGraw-Hill International Editions, Mechanical Engineering Series*, 2nd edition, 2000.
- [115] P. VAN-HULLE. Caractérisation des aérosols émis par la combustion des hydrocarbures. Thèse de doctorat, *Université de Rouen*, 2002.
- [116] Sjaak van LOO et Jaap KOPPEJAN, éditeurs. The handbook of biomass combustion and co-firing. *Earthscan*, 2008.
- [117] H. K. VERSTEEG et W. MALALASEKERA. An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method. *Longman Group Ltd*, 1995.
- [118] R. VISKANTA. Overview of convection and radiation in high temperature gas flows. *International Journal of Engineering Science*, 36, pages 1677 – 1699, 1998.
- [119] R. VISKANTA et M. P. MENGÜÇ. Radiation heat transfer in combustion systems. *Progress in Energy & Combustion Science*, 13(2), pages 97 – 160, 1987.

-
- [120] Noriaki WAKAO et Seiichirō KAGUEL. Heat and mass transfer in packed beds. *Gordon & Breach*, London, 1982.
- [121] Charles K. WESTBROOK et Frederick L. DRYER. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10(1), pages 1–57, 1984. DOI : 10.1016/0360-1285(84)90118-7.
- [122] Henrik WIINIKKA, Rikard GEBART, Christoffer BOMAN, Dan BOSTRÖM, Anders NORDIN, et Marcus ÖIMAN. High-temperature aerosol formation in wood pellets flames : Spatially resolved measurements. *Combustion and Flame*, 147(4), pages 278–293, 2006. DOI : 10.1016/j.combustflame.2006.08.009.
- [123] WÄRTSILÄ. Wärtsilä Biopower’s Biograte. Towards a more sustainable world. *Twentyfour7. Wärtsilä stakeholder magazine*, pages 44–45, April 2006.
- [124] V. YAKHOT et S. A. ORSZAG. Renormalization Group Analysis of Turbulence : I. Basic Theory. *Journal of Scientific Computing*, 1(1), pages 1–51, 1986.
- [125] Y. B. YANG, Y. R. GOIL, R. ZAKARIA, V. NASSERZADEH, et J. SWITTHENBANK. Mathematical modelling of MSW incineration on a travelling bed. *Waste Management*, 22(4), pages 369–380, 2002. DOI : 10.1016/S0956-053X(02)00019-3.
- [126] Yao Bin YANG, Robert NEWMAN, Vida SHARIFI, Jim SWITTHENBANK, et John ARISS. Mathematical modelling of straw combustion in a 38 MWe power plant furnace and effect of operating conditions. *Fuel*, 86(1-2), pages 129–142, 2007. DOI : 10.1016/j.fuel.2006.06.023.
- [127] Y.B. YANG, C.N. LIM, J. GOODFELLOW, V.N. SHARIFI, et J. SWITTHENBANK. A diffusion model for particle mixing in a packed bed of burning solids. *Fuel*, 84(2-3), pages 213–225, 2005. DOI : 10.1016/j.fuel.2004.09.002.
- [128] Chungun YIN, Lasse A. ROSENDAHL, et Søren K. KÆR. Grate-firing of biomass for heat and power production. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(6), pages 725–754, 2008. DOI : 10.1016/j.pecs.2008.05.002.
- [129] H. ZHOU, A.D. JENSEN, P. GLARBORG, P.A. JENSEN, et A. KAVALIAUSKAS. Numerical modeling of straw combustion in a fixed bed. *Fuel*, 84(4), pages 389–403, 2005. DOI : 10.1016/j.fuel.2004.09.020.

Simulation numérique de la combustion du bois dans une chaudière automatique de 400 kW

Tudor FLOREA

Résumé

Ce travail présente la mise en place, à l'aide de mesures expérimentales, d'un outil numérique qui décrit le mieux possible la combustion du bois dans une chaudière automatique à grille mobile de moyenne puissance. Deux types de mesure ont été réalisées : globales et locales. La première catégorie concerne les paramètres de fonctionnement de l'installation. Les mesures locales concernent les profils de température, de vitesse (diagnostique optique par laser) et de concentrations des gaz au sein du foyer. L'ensemble de ces mesures a permis de mettre en évidence les régimes de fonctionnement, la nature turbulente de l'écoulement et le caractère instationnaire des flammes. Ces mesures ont servi ensuite comme support pour l'analyse des calculs numériques. L'approche utilisée pour modéliser le foyer repose sur un couplage code de mécanique des fluides numérique - code 2D. L'étude numérique a été d'abord orientée vers la simulation de la combustion des matières volatiles au-dessus du lit de combustible, à l'aide du logiciel Fluent. Une cinétique chimique semi-globale (6 réactions) a été employée dans un premier temps. Ces éléments ont permis d'évaluer l'impact de la distribution d'air secondaire. Ainsi, en passant d'une distribution asymétrique à symétrique, l'émission de CO peut être réduite par un facteur trois. Le calcul numérique est capable de reproduire les tendances observées expérimentalement, mais la cinétique semi-globale surestime le taux de CO. Suite à ces constats, un schéma réactionnel réduit (40 réactions) a été proposé. Celui-ci s'est montré beaucoup plus précis en ce qui concerne les teneurs en CO, O₂ et CO₂. Quant à l'écoulement, un bon accord entre les valeurs de vitesse expérimentales et numériques a été observé sur l'axe du foyer. Également, l'emplacement des zones de recirculation prédit par calcul correspond globalement à ce qui est indiqué par voie expérimentale. En complément, la cinétique à 40 réactions a été confrontée, en utilisant le code CHEMKIN II, aux résultats expérimentaux et au mécanisme réactionnel à 49 réactions (22 espèces) de Leroy *et al.* (2008). Le premier s'avère plus réactif que le dernier. Cependant, le schéma cinétique à 40 réactions se trouve dans un bon accord avec les données expérimentales à basse température (700 - 1000 K) et faible richesse (0,6 - 1).

Mots-clés : Combustion, Biomasse, Anémométrie Doppler Laser, Modélisation Numérique, Cinétique Chimique.

Numerical simulation of wood combustion in a 400 kW boiler

Tudor FLOREA

Abstract

This work presents the implementation of a numerical tool, which can predict as best as possible the woodchips combustion within a medium power reciprocating grate boiler. In order to do so, several global and local measurements were conducted. The first category concerns the operating parameters of the installation. The local measurements concern the profiles of temperature, velocity and gas concentrations inside the furnace. The measurements allowed the ascertaining the operating regimes, the turbulent nature of the flow and the unsteadiness of the flames. Later, these measurements served to analyze the numerical simulations. The approach used for the furnace modelling is based on the computational fluid dynamics code - 2D code coupling. The numerical study was firstly oriented towards the volatiles combustion above the fuel bed, using the code Fluent. A semi-global reaction mechanism (6 reactions, 9 species) was first used. These elements allowed us to evaluate the impact of the secondary air distribution. Thus, the CO emission can be reduced by a factor of three when the secondary air configuration is changed from asymmetrical to symmetrical. The numerical computation is able to reproduce these tendencies, but the semi-global mechanism overestimates the CO concentration. Following these observations, a reduced mechanism (40 reactions, 17 species) was introduced, which proved to be much more accurate as far as the CO, O₂ and CO₂ are concerned. Regarding the flow analysis, a good agreement was found between the measured and computed velocities. In addition, the computed location of the recirculation zones corresponds globally with the experimental observations. Further, the 40 reactions mechanism was compared, using the CHEMKIN II code, to the experimental results and the 49 reactions (22 species) mechanism of Leroy *et al.* (2008). The first was found to be more reactive than the last one. However, the 40 reactions mechanism is in a good agreement with the experimental at low temperature (700 - 1000 K) and low fuel to air ratio (0.6 - 1).

Keywords: Combustion, Biomass, Laser Doppler Anemometry, Numerical Modelling, Chemical Kinetics.

Bibliothèque Universitaire de Valenciennes



00900731