



**Université de PAU et des Pays de l'Adour**  
**UFR Sciences et Techniques**

**THÈSE**

pour obtenir le grade de :

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR**

Spécialité :

GENIE DES PROCÉDÉS

par

**Alexandre DEYDIER**

---

*Modélisation d'un réacteur de gazéification à lit fixe*

---

Soutenue le 15 février 2012 à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

devant la commission d'examen formée de :

<b>J.R. PUIGGALI</b>	Professeur, Université de Bordeaux 1	Rapporteur
<b>S. SALVADOR</b>	Professeur, Ecole des Mines, Albi	Rapporteur
<b>P. CEZAC</b>	Professeur, Université de Pau et des Pays de l'Adour	Président du Jury
<b>F. COUTURE</b>	Maître de Conférences, Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examineur
<b>A. FOURCAULT</b>	Docteur, Europlasma, Bruges	Examineur
<b>F. MARIAS</b>	Professeur, Université de Pau et des Pays de l'Adour	Directeur de thèse



## *Remerciements*

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire de Thermique Energétique et Procédés de Pau dans le cadre d'une thèse CIFRE financée par la société Europlasma avec l'aide de la région Aquitaine et de l'ANRT.

Dans un premier temps, je tiens à remercier Monsieur le Professeur Pierre Cézac de m'avoir accueilli au sein de son laboratoire ainsi que pour son soutien sans faille afin que cette thèse soit soutenue. Merci également de m'avoir fait l'honneur de présider mon jury de thèse.

Je remercie également Frédéric Marias, directeur de cette thèse, de m'avoir fait confiance pour mener à bien ce projet et pour le temps qu'il a consacré à ce travail.

J'adresse mes profonds remerciements à Messieurs les professeurs Jean-Rodolphe Puiggali et Sylvain Salvador pour avoir accepté de poser un regard critique sur mon travail. Je les remercie pour leur travail de rapporteur et pour le temps qu'ils y ont consacré.

Je voudrais également remercier l'ensemble des personnels de la société Europlasma qui se sont succédé pour suivre cette thèse : Ulysse Michon, Véronique Brousse et Alice Fourcault.

J'exprime ma plus profonde gratitude à Frédéric Couture et Philippe Bernada pour avoir accepté d'encadrer cette thèse. Il m'est quasiment impossible d'exprimer tout ce que je vous dois en quelques mots. Ce travail n'aurait certainement pas abouti sans votre soutien inconditionnel et l'ensemble de vos conseils. Merci d'avoir tenté de m'inculquer votre rigueur scientifique. Ce fut un honneur de traverser ces trois années de thèse en votre compagnie et nos discussions plus ou moins scientifiques me manqueront.

Je ne saurai oublier Stéphane Laurent pour sa disponibilité et sa pédagogie lors de ses réponses à mes questions.

Merci à vous trois pour nos franches parties de rigolade.

Mes remerciements s'adressent également à l'ensemble des personnels de l'ENSGTI qui m'ont supporté durant toutes ces années. Bravo pour votre courage.

Je remercie également Jean-Michel « tchin-tchin » Sorbet pour sa bonne humeur nocturne et pour nos discussions.

Je tiens également à remercier mes amis docteurs et thésards pour ces années passées à vos côtés. Merci à mes colocos Eric Cloarec et Coralie Girard, à Romain Demarthon, à Cécile Casajus et Julien Ratte et à mon collègue de bureau Guillaume Aniès.

Merci Armelle.

## NOMENCLATURE DES PRINCIPAUX SYMBOLES

$a_w$	activité de l'eau
$A$	surface [ $m^2$ ]
$C_p, C$	chaleur massique [ $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ]
$D_{ek}$	coefficient de diffusion pour la paire d'espèce e-k [ $m^2.s^{-1}$ ]
$\underline{\underline{D}}_b$	tenseur de transport de l'eau liée dans le milieu
$\underline{\underline{D}}_{ek}^d$	tenseur de diffusion de la paire d'espèces e-k [ $m^2.s^{-1}$ ]
$\underline{\underline{D}}_{ek}^D$	tenseur de dispersion de la paire d'espèces e-k [ $m^2.s^{-1}$ ]
$\underline{\underline{D}}_{ek}^{eff}$	tenseur de diffusion effective de la paire d'espèces e-k [ $m^2.s^{-1}$ ]
$\underline{\underline{D}}_{ek}^M$	tenseur local de diffusion mutuelle de la paire d'espèces e-k [ $m^2.s^{-1}$ ]
$e$	énergie interne massique [ $J.kg^{-1}$ ]
$g$	vecteur gravité [ $m.s^{-2}$ ]
$h$	enthalpie massique partielle [ $J.kg^{-1}$ ]
$\Delta H_D$	enthalpie massique de désorption [ $J.kg^{-1}$ ]
$\Delta H_v$	enthalpie massique de vaporisation de l'eau [ $J.kg^{-1}$ ]
$\underline{\underline{I}}$	tenseur identité
$\underline{\underline{k}}$	perméabilité intrinsèque du milieu poreux [ $m^2$ ]
$\underline{\underline{k}}_{rl}$	perméabilité relative du liquide [ $m^2$ ]
$\underline{\underline{k}}_{rg}$	perméabilité relative du gaz [ $m^2$ ]
$l$	longueur [ $m$ ]
$L$	longueur caractéristique du milieu [ $m$ ]
$\dot{m}_v$	taux volumique de changement de phases de l'eau
$M_e$	masse molaire de l'espèce e [ $kg.mol^{-1}$ ]
$n$	vecteur unitaire normal sortant
$N_e$	nombre de constituants dans la phase gaz
$P$	pression [ $Pa$ ]
$P_c$	pression capillaire [ $Pa$ ]
$P_{ej}$	force volumique exercée par l'espèce e sur l'espèce j [ $N.m^{-3}$ ]
$q$	flux surfacique d'énergie [ $W.m^{-2}$ ]
$r$	rayon du VER [ $m$ ]
$r_e$	taux de production par réaction chimique homogène de l'espèce e [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$R$	constante universelle des gaz parfaits [ $8,314 J.mol^{-1}.K^{-1}$ ]
$R_1, R_2$	rayons de courbures principaux sur l'interface liquide/gaz
$r_{CRg}$	taux de consommation de CR par réactions hétérogènes de combustion et gazéification produisant du gaz [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$r_{CRMO}$	taux de production de CR par réaction de pyrolyse du charbon [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$r_{ecr_{comb}}$	taux de production de l'espèce e par réaction de combustion du charbon [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$r_{ecr_{gazé}}$	taux de production de l'espèce e par réaction de gazéification du charbon [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$r_{eMO}$	taux de production de l'espèce e par réaction de pyrolyse [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$r_{MOCR}$	taux de consommation de MO par réaction de pyrolyse produisant du charbon [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$r_{MOg}$	taux de consommation de MO produisant du gaz par réaction de pyrolyse [ $kg.m^{-3}.s^{-1}$ ]
$t$	temps [ $s$ ]

<b>t</b>	vecteur unitaire tangent à l'interface
<b>T</b>	température [K]
<b>v</b>	vitesse [m.s <sup>-1</sup> ]
<b>V</b>	volume élémentaire représentatif
<b>V<sub>α</sub></b>	volume de la phase α [m <sup>3</sup> ]
<b>w</b>	vitesse interface [m.s <sup>-1</sup> ]
<b>x</b>	vecteur position [m]
<b>X</b>	teneur en eau base sèche
<b>X<sub>ps</sub></b>	point de saturation en eau liée
<b>X<sub>e</sub></b>	fraction molaire de l'espèce e

## Caractères Grecs

<b>ρ</b>	masse volumique [kg.m <sup>3</sup> ]
<b>λ</b>	conductivité thermique [W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]
<b><u>λ</u><sub>eff</sub></b>	tenseur de conductivité thermique effectif dans le milieu poreux [W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]
<b>μ</b>	potentiel chimique [J.mol <sup>-1</sup> ] viscosité dynamique [kg.m <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> ]
<b>ε<sub>α</sub></b>	fraction volumique de la phase α
<b>φ</b>	densité volumique de taux d'énergie [W.m <sup>-3</sup> ]
<b><u>σ</u></b>	tenseur des contraintes [Pa]
<b><u>τ</u></b>	tenseur des contraintes visqueuses [Pa]
<b>ω<sub>s</sub></b>	vecteur du taux de rotation

## Indices

<b>α</b>	phase α
<b>b</b>	eau liée
<b>CI</b>	cendres inertes
<b>CR</b>	charbon
<b>e</b>	espèce e
<b>g</b>	gaz
<b>l</b>	liquide
<b>MO</b>	matière organique
<b>ref</b>	référence
<b>s</b>	solides
<b>v</b>	vapeur

## Symboles Mathématiques

$a, A, \alpha$	grandeur scalaire
$\mathbf{a}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\alpha}$	grandeur vectorielle
$\underline{\underline{\mathbf{a}}}, \underline{\underline{\mathbf{A}}}, \underline{\underline{\boldsymbol{\alpha}}}$	grandeur tensorielle
$\nabla \mathbf{a}$	gradient de la grandeur scalaire ou vectorielle $\mathbf{a}$
$\nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{a}}}$	divergence de la grandeur vectorielle ou tensorielle $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	produit tensoriel entre les vecteurs $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$
$\underline{\underline{\mathbf{a}}} : \underline{\underline{\mathbf{b}}}$	double produit contracté des tenseurs $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$ et $\underline{\underline{\mathbf{b}}}$
$\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$	produit vectoriel entre les vecteurs $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$
$\underline{\underline{\mathbf{a}}}^T$	tenseur $\underline{\underline{\mathbf{a}}}$ transposé
$\bar{a}$	moyenne volumique de la grandeur $a$
$\bar{a}_\beta$	moyenne volumique de la grandeur $a$ de la phase $\beta$
$\bar{a}_\beta^\beta$	moyenne volumique intrinsèque de la grandeur $a$ de la phase $\beta$
$\tilde{a}$	déviations spatiales de $a$



## **SOMMAIRE GENERAL**

<b>NOMENCLATURE DES PRINCIPAUX SYMBOLES.....</b>	<b>I</b>
<b>SOMMAIRE GENERAL .....</b>	<b>VII</b>
<b>TABLE DES FIGURES .....</b>	<b>XIII</b>
<b>TABLE DES TABLEAUX .....</b>	<b>XV</b>
<b>I Introduction .....</b>	<b>1</b>
<b>I.1 Contexte scientifique .....</b>	<b>5</b>
I.1.1 La gazéification et CHO-Power .....	5
I.1.1.a Les déchets .....	5
I.1.1.a.i Définition d'un déchet .....	5
I.1.1.a.ii La production française de déchets .....	6
I.1.1.a.iii Quel potentiel énergétique pour un déchet ? .....	8
I.1.1.b Les enjeux de la valorisation des déchets .....	9
I.1.1.c Les techniques de valorisation .....	12
I.1.1.c.i L'incinération .....	14
I.1.1.c.ii La pyrolyse .....	16
I.1.1.c.iii L'oxydation hydrothermale .....	17
I.1.1.d La gazéification de déchets.....	19
I.1.1.d.i Le processus de gazéification .....	19
I.1.1.d.ii Les applications de la gazéification .....	22
I.1.1.d.iii Les procédés de gazéification .....	24
I.1.1.e Le procédé CHO-Power .....	31
I.1.1.f Conclusions.....	34
I.1.2 Les différents types de modèles.....	35
I.1.2.a Les processus pertinents de la gazéification.....	35
I.1.2.b Les échelles d'observation.....	37
I.1.2.c Les modèles existants .....	38
I.1.2.c.i Les modèles d'équilibre thermodynamique .....	39
I.1.2.c.ii Les modèles de particules .....	41
I.1.2.c.iii Les modèles de lit de particules .....	43
I.1.2.c.iv Les modèles de milieu poreux .....	45
<b>I.2 Démarche scientifique .....</b>	<b>48</b>
I.2.1 Modèle d'équilibre thermodynamique pour la simulation du gazéifieur auto-thermique à lit fixe du procédé CHO-Power .....	48
I.2.1.a Présentation du système .....	48
I.2.1.b Résolution du système d'équations .....	49
I.2.1.c La validation du modèle.....	50

I.2.1.d Influence de l'agent de gazéification .....	- 52 -
I.2.2 Choix de la modélisation de type milieu poreux par prise de moyenne volumique .....	- 55 -

**II Modélisation .....** - 63 -

**II.1 Description du milieu poreux .....** - 66 -

II.1.1 La matière organique .....	- 66 -
II.1.2 Le charbon.....	- 66 -
II.1.3 Les cendres inertes.....	- 67 -
II.1.4 L'eau liquide.....	- 67 -
II.1.5 Le gaz.....	- 68 -

**II.2 Échelle des phases.....** - 69 -

II.2.1 Phases solides.....	- 69 -
II.2.1.a Hypothèse de rigidité des phases solides .....	- 70 -
II.2.1.b Conservation de la masse.....	- 70 -
II.2.1.c Conservation de la quantité de mouvement .....	- 70 -
II.2.1.d Conservation de l'énergie.....	- 70 -
II.2.2 Phase liquide .....	- 72 -
II.2.2.a Conservation de la masse.....	- 72 -
II.2.2.b Conservation du volume.....	- 72 -
II.2.2.c Conservation de la quantité de mouvement .....	- 72 -
II.2.2.d Conservation de l'énergie.....	- 73 -
II.2.3 Phase gaz .....	- 75 -
II.2.3.a Conservation de la masse d'une espèce .....	- 75 -
II.2.3.b Equations d'états .....	- 76 -
II.2.3.c Conservation de la quantité de mouvement .....	- 76 -
II.2.3.c.i Conservation de la quantité de mouvement des Ne constituants e .....	- 76 -
II.2.3.c.ii Conservation de la quantité de mouvement du mélange gazeux et loi de Fick généralisée.....	- 77 -
II.2.3.d Conservation de l'énergie.....	- 79 -
II.2.4 Conditions aux interfaces .....	- 81 -
II.2.4.a Interfaces liquide(l) /solides(s) $A_{ls}$ .....	- 83 -
II.2.4.b Interface gaz(g) /liquide(l) .....	- 84 -
II.2.4.c Interface gaz(g) /solides(s) $A_{gs}$ .....	- 85 -
II.2.4.c.i Gaz/Matière organique (MO) $A_{MOg}$ .....	- 85 -
II.2.4.c.ii Gaz/Charbon (CR) $A_{CRg}$ .....	- 87 -
II.2.4.c.iii Gaz/Cendres inertes (CI) $A_{Clg}$ .....	- 88 -
II.2.4.d Interfaces solide /solide.....	- 88 -
II.2.4.d.i Matière organique(MO)/Char(CR) $A_{MOCR}$ .....	- 88 -
II.2.4.d.ii Matière organique(MO) ou charbon(CR) / Cendres inertes(CI) .....	- 89 -
II.2.5 Récapitulatif des équations à l'échelle des phases.....	- 91 -

<b>II.3 Echelle locale.....</b>	<b>- 93 -</b>
II.3.1 La prise de moyenne volumique .....	- 93 -
II.3.2 Nouvelles inconnues de la prise de moyenne volumique .....	- 94 -
II.3.3 Théorèmes généraux.....	- 95 -
II.3.3.a Théorème de transport .....	- 95 -
II.3.3.b Théorèmes du gradient et de la divergence .....	- 96 -
II.3.3.c Décomposition de Gray .....	- 96 -
II.3.4 Equations de conservation du volume .....	- 97 -
II.3.4.a Phases solides .....	- 97 -
II.3.4.b Phase liquide .....	- 97 -
II.3.5 Lois thermodynamiques et hypothèses .....	- 97 -
II.3.5.a Equations d'états .....	- 97 -
II.3.5.b Equilibre thermodynamique local .....	- 98 -
II.3.6 Equations de conservation de la quantité de mouvement .....	- 100 -
II.3.6.a Phases solides .....	- 100 -
II.3.6.b Phase liquide .....	- 100 -
II.3.6.c Phase gaz .....	- 101 -
II.3.6.d Lois de Fick généralisées.....	- 101 -
II.3.7 Equations de conservation de la masse .....	- 106 -
II.3.7.a Phases solides .....	- 106 -
II.3.7.a.i Matière organique.....	- 107 -
II.3.7.a.ii Charbon.....	- 107 -
II.3.7.a.iii Les cendres inertes.....	- 108 -
II.3.7.b Phase liquide .....	- 109 -
II.3.7.c Phase Gaz (multiconstituant).....	- 110 -
II.3.8 Equations de conservation de l'énergie .....	- 113 -
II.3.8.a Phases solides .....	- 113 -
II.3.8.b Phase liquide .....	- 115 -
II.3.8.c Phase gaz .....	- 115 -
II.3.8.d Equilibre thermique local et équation de conservation de l'énergie totale .....	- 116 -
II.3.9 Récapitulatif des équations à l'échelle locale .....	- 122 -

**III Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe ..... - 129 -**

<b>III.1 Modélisation des conditions initiales et aux limites .....</b>	<b>- 131 -</b>
III.1.1 Conditions initiales .....	- 131 -
III.1.2 Conditions aux limites .....	- 132 -
III.1.2.a Entrée du déchet .....	- 133 -
III.1.2.b Entrée de l'air de gazéification.....	- 133 -
III.1.2.c Sortie du Syngaz.....	- 134 -

III.1.2.d Sortie des imbrûlés.....	- 137 -
<b>III.2 Résolution numérique .....</b>	<b>- 137 -</b>
III.2.1 Développement des équations par rapport aux variables indépendantes .....	- 138 -
III.2.1.a Choix des variables indépendantes .....	- 138 -
III.2.1.b Expression des gradients .....	- 142 -
III.2.1.c Adimensionnement .....	- 147 -
III.2.2 Discrétisation du problème .....	- 151 -
III.2.2.a Discrétisation temporelle .....	- 151 -
III.2.2.b Discrétisation spatiale .....	- 156 -
III.2.3 Méthode et optimisations numériques.....	- 160 -
III.2.3.a Méthode de résolution .....	- 161 -
III.2.3.b Gestion du pas de temps .....	- 163 -
III.2.3.c Gestion de la disparition des espèces.....	- 165 -
<b>III.3 Simulation du procédé CHO-Power .....</b>	<b>- 166 -</b>
III.3.1 Paramètres de simulation .....	- 166 -
III.3.1.a Phases et constituants pris en compte .....	- 166 -
III.3.1.b Réactions homogènes et hétérogènes du procédé .....	- 166 -
III.3.1.b.i Réactions homogènes.....	- 167 -
III.3.1.b.ii Réactions hétérogènes .....	- 168 -
III.3.1.c Paramètres de transport.....	- 170 -
III.3.1.c.i Viscosité dynamique du gaz .....	- 170 -
III.3.1.c.ii Conductivité thermique .....	- 170 -
III.3.1.c.iii Diffusion.....	- 171 -
III.3.1.c.iv Convection .....	- 172 -
III.3.1.d Enthalpies .....	- 173 -
III.3.1.e Masses volumiques intrinsèques solides.....	- 173 -
III.3.1.f Maillage et dimensions du lit .....	- 174 -
III.3.2 Initialisation du code .....	- 175 -
III.3.2.a Données de simulation .....	- 175 -
III.3.2.b Données d'initialisation .....	- 176 -
III.3.2.c Oscillations du code .....	- 176 -
III.3.3 Simulation CHO-Power .....	- 181 -
III.3.3.a Simulation 1 : 22,8 % de l'apport stœchiométrique .....	- 182 -
III.3.3.b Simulation 2 : 7 % de l'apport stœchiométrique .....	- 188 -
<b>III.4 Conclusion .....</b>	<b>- 192 -</b>
<b>Conclusion et Perspectives.....</b>	<b>- 195 -</b>
<b>ANNEXES.....</b>	<b>- 201 -</b>

**ANNEXE I : Mise en équations du modèle d'équilibre..... - 203 -**

**ANNEXE II : Coefficients du modèle..... - 213 -**

**ANNEXE III : Propriétés physiques ..... - 221 -**

## TABLE DES FIGURES

<i>Figure 1 : Part des différents producteurs de déchets (ADEME, 2009) .....</i>	- 7 -
<i>Figure 2 : Evolution de la production d'ordures ménagères en 1960 et 2006 (ADEME, 2009).....</i>	- 7 -
<i>Figure 3 : Evolution de la population en France métropolitaine depuis 1851(INSEE) .....</i>	- 8 -
<i>Figure 4 : Destination des 37,8 millions de tonnes de déchets collectés en 2007 (ADEME, 2009).....</i>	- 10 -
<i>Figure 5 : Provenance de l'énergie consommée mondialement en 2005 (Bobin et al., 2005).....</i>	- 11 -
<i>Figure 6 : Estimation des découvertes de pétrole (source : Longwell, 2002) .....</i>	- 11 -
<i>Figure 7 : Différentes technique de valorisation énergétique (source : Navarro, 2003) .....</i>	- 13 -
<i>Figure 8 : La valorisation énergétique en 2006 (ADEME, 2009) .....</i>	- 14 -
<i>Figure 9 : Schéma réactionnel de la pyrolyse du déchet .....</i>	- 16 -
<i>Figure 10 : Répartition des fractions des pyrolyses du bois (Bridgwater 2003) .....</i>	- 17 -
<i>Figure 11 : Schéma de principe des procédés d'OHT (Antonini, 2005).....</i>	- 18 -
<i>Figure 12 : Schéma de principe de la gazéification .....</i>	- 20 -
<i>Figure 13 : Procédé Fischer-Tropsch (source: The Choren Carbo-V<sup>®</sup> Process).....</i>	- 24 -
<i>Figure 14 : Schéma du gazéifieur British-Gas Lurgi à lit fixe (source : ADEME/PROCEDIS, 2001).....</i>	- 25 -
<i>Figure 15 : Schéma du gazéifieur Babcock &amp; Wilcox Volund systems (source : ADEME/PROCEDIS, 2001).....</i>	- 26 -
<i>Figure 16 : Schéma du gazéifieur Nippon Steel (NS) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001).....</i>	- 27 -
<i>Figure 17 : Schéma du gazéifieur Xylowatt (Belgique) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001) .....</i>	- 27 -
<i>Figure 18 : Schéma de principe du réacteur de gazéification à courant-croisé.....</i>	- 28 -
<i>Figure 19 : Schéma du Procédé HTW (Winkler) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001) .....</i>	- 29 -
<i>Figure 20 : Schéma du procédé Biosyn (Enerkem Tech.Inc./Biothermica) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001).....</i>	- 29 -
<i>Figure 21 : Schéma du gazéifieur Lurgi CFB (source : ADEME/PROCEDIS, 2001).....</i>	- 30 -
<i>Figure 22 : Schéma du procédé Foster Wheeler atmosphérique CFB (source : ADEME/PROCEDIS, 2001) .....</i>	- 30 -
<i>Figure 23 : Le procédé de gazéification CHO-Power .....</i>	- 33 -
<i>Figure 24 : Schéma de principe de CHO-Power.....</i>	- 34 -
<i>Figure 25 : Le procédé de gazéification CHO-Power .....</i>	- 48 -
<i>Figure 26 : Représentation simplifiée du système .....</i>	- 49 -
<i>Figure 27 : Validation pour le charbon.....</i>	- 50 -
<i>Figure 28 : Validation pour le bois .....</i>	- 51 -
<i>Figure 29 : Validation pour des déchets verts .....</i>	- 51 -
<i>Figure 30 : Influence de l'agent de gazéification sur le PCI et la température du gaz produit.....</i>	- 53 -
<i>Figure 31 : Influence de l'agent de gazéification sur la composition molaire du gaz produit .....</i>	- 54 -
<i>Figure 32 : Homogénéisation par prise de moyenne volumique.....</i>	- 65 -
<i>Figure 33 : Schéma réactionnel de la pyrolyse de la matière organique .....</i>	- 66 -
<i>Figure 34 : Equilibre de Boudouard pour la gazéification au CO<sub>2</sub> .....</i>	- 67 -
<i>Figure 35 : Réaction de gazéification à la vapeur d'eau .....</i>	- 67 -
<i>Figure 36 : Réaction de combustion du charbon.....</i>	- 67 -
<i>Figure 37 : Réactions homogènes prises en compte dans le modèle .....</i>	- 68 -

Figure 38 : Représentation à l'échelle du pore de la répartition des phases.....	- 69 -
Figure 39 : Représentation simplifiée du lit de déchets et des flux aux différentes surfaces .....	- 132 -
Figure 40 : Maillage du lit de déchets assimilé à un milieu poreux rectangulaire .....	- 157 -
Figure 41 : Point de discrétisation et maille à la sortie du Syngaz .....	- 157 -
Figure 42 : Structure matricielle par bloc du système .....	- 161 -
Figure 43 : Schéma de la gestion du pas de temps (Couture, 1995) .....	- 164 -
Figure 44 : Méthode de pénalisation pour la disparition locale d'une espèce .....	- 165 -
Figure 45 : Schéma réactionnel simplifié de la pyrolyse de la matière organique .....	- 168 -
Figure 46 : Composition du mélange gazeux produit par la pyrolyse .....	- 168 -
Figure 47 : Maillage (Nx=31)x(Ny=11) du lit de déchets simulé.....	- 174 -
Figure 48 : Profil oscillant à t=60s de la fraction massique en dioxygène.....	- 177 -
Figure 49 : Profil oscillant à t=60s de la fraction massique en diazote .....	- 177 -
Figure 50 : Profil de la fraction massique en oxygène pour un maillage 31*21 à t=10 s.....	- 178 -
Figure 51 : Profils de température et de fractions massiques pour l'initialisation.....	- 179 -
Figure 52 : Profils de pression et de fractions volumiques de phase pour l'initialisation.....	- 180 -
Figure 53 : Profils de fractions massiques de phase pour l'initialisation .....	- 181 -
Figure 54 : Profils de température et de fractions massiques pour la simulation 1 en régime stationnaire .....	- 183 -
Figure 55 : Profils de pression et de fractions volumiques de phase pour la simulation 1 en régime stationnaire .....	- 183 -
Figure 56 : Profils de la répartition en masse des différentes phases pour la simulation 1 en régime permanent .....	- 184 -
Figure 57 : Zoom sur les teneurs en H <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> et H <sub>2</sub> O pour la simulation 1 en régime stationnaire .....	- 185 -
Figure 58 : Profils de température et de fractions massiques pour la simulation 2 en régime stationnaire .....	- 189 -
Figure 59 : Profils de pression et de fractions volumiques de phase pour la simulation 2 en régime stationnaire .....	- 189 -
Figure 60 : Profils de la répartition en masse des différentes phases pour la simulation 1 en régime permanent .....	- 190 -

## TABLE DES TABLEAUX

<i>Tableau 1 : Pouvoir énergétique de combustibles classiques (AIE, 2006) .....</i>	<i>- 9 -</i>
<i>Tableau 2 : Expressions des vitesses de réactions prises en compte dans les simulations .....</i>	<i>- 167 -</i>
<i>Tableau 3 : Expression des vitesses de réactions pour la pyrolyse de la matière organique.....</i>	<i>- 168 -</i>
<i>Tableau 4 : Expression de la vitesse d'oxydation du Char .....</i>	<i>- 169 -</i>
<i>Tableau 5 : Expression des vitesses de réactions de gazéification .....</i>	<i>- 170 -</i>
<i>Tableau 6 : Côtes associées à la géométrie du gazéifieur du procédé CHO-Power.....</i>	<i>- 174 -</i>
<i>Tableau 7 : Données opératoires du déchet entrant .....</i>	<i>- 175 -</i>
<i>Tableau 8 : Composition molaire de la phase gazeuse du déchet entrant.....</i>	<i>- 175 -</i>
<i>Tableau 9 : Température, rapport stœchiométrique et débit de l'air de gazéification.....</i>	<i>- 176 -</i>
<i>Tableau 10 : Composition molaire de l'air de gazéification.....</i>	<i>- 176 -</i>
<i>Tableau 11 : Paramètres pour l'obtention d'un nouvel état initial .....</i>	<i>- 178 -</i>
<i>Tableau 12 : PCI du Syngaz et taux d'imbrûlés en régime permanent pour la simulation 1 .....</i>	<i>- 187 -</i>
<i>Tableau 13 : PCI du Syngaz et taux d'imbrûlés en régime permanent pour la simulation 2 .....</i>	<i>- 191 -</i>
<i>Tableau 14 : Paramètres pour le calcul des viscosités gaz tirés de la bibliothèque ComponentPlus .....</i>	<i>- 221 -</i>
<i>Tableau 15 : Paramètres pour les conductivités thermiques gaz tirés de la bibliothèque ComponentPlus .....</i>	<i>- 221 -</i>
<i>Tableau 16 : Paramètres pour le calcul des enthalpies tirés des bibliothèques Fluent .....</i>	<i>- 222 -</i>



# **I Introduction**



## CHAPITRE I : Introduction

Depuis quelques années, la communauté internationale doit faire face à de nombreux défis énergétiques et environnementaux dont la raréfaction des énergies fossiles ; la nécessité de réduire les émissions de gaz à effet de serre d'origine anthropique et la croissance de la demande énergétique mondiale en sont les principaux. Dans le but de répondre à l'ensemble de ces enjeux, un développement de la production d'énergie dite renouvelable est essentiel. Le processus de gazéification est à même de produire cette énergie « propre » à partir de déchets et/ou de biomasse et ce avec des rendements énergétiques allant jusqu'à 40 %.

La gazéification est une conversion thermochimique de matière, en un gaz majoritairement constitué de monoxyde de carbone (CO) et de dihydrogène (H<sub>2</sub>). Ce gaz ainsi produit peut ensuite être valorisé dans des installations de cogénération d'électricité et de chaleur, dans la synthèse de biocarburants, dans la production de dihydrogène pour les piles à combustible par exemple, ainsi que dans la production de gaz naturel de synthèse. Ces applications font de la gazéification un procédé d'avenir dans la production d'énergie dite « verte ».

Cette thèse s'inscrit dans la thématique de recherche de valorisation des déchets de l'activité « procédés pour l'environnement » du Laboratoire de Thermique, Energétique et Procédés (LaTEP) de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour. Ce thème de recherche a pour objectif la compréhension, la description et l'optimisation des procédés de valorisation de déchets.

L'objectif de ce travail est d'atteindre une compréhension plus complète de la gazéification de déchets sur grille. L'identification des différentes zones caractéristiques de la gazéification au sein du lit de déchets assimilé à un milieu poreux réactif multiconstituant est essentielle pour une description totale du réacteur. Or au cours du processus de conversion thermochimique de la matière carbonée en un mélange gazeux, de nombreux phénomènes physico-chimiques sont mis en jeu tels que des réactions chimiques hétérogènes et homogènes, des transports de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Le couplage de ces phénomènes explique la nécessité de la modélisation et de la simulation du procédé afin de mieux appréhender la gazéification.

La méthodologie de ce travail se base sur une approche numérique de la gazéification au travers de deux modèles distincts. Un premier modèle simple basé sur la notion d'équilibre thermodynamique au sein du réacteur permet d'estimer les grandeurs caractéristiques qui servent pour le second modèle. Celui-ci, plus complet et plus précis, est basé sur une approche de la mécanique des milieux continus et de prise de moyenne volumique des équations de conservations. Il permet la détermination des champs bidimensionnels de vitesse, de pression, de température et de concentration au sein du lit.

Ce travail, traitant de la gazéification d'un lit de déchets sur grille, est divisé en trois parties principales :

## CHAPITRE I : Introduction

Le premier chapitre introductif a pour objectif de présenter les enjeux du traitement des déchets et la place potentielle occupée par la gazéification dans le périmètre des moyens de leur traitement. Tout d'abord, la définition d'un déchet est proposée. Ensuite, par l'intermédiaire d'une description des différentes filières de traitement et avec un intérêt tout particulier pour la gazéification, les raisons qui ont motivé cette étude sont mises en lumière. S'inscrivant dans le projet CHO-Power, ce travail, fruit de la collaboration entre la société Europlasma et le LaTEP, porte sur la modélisation d'un gazéifieur auto-thermique à lit fixe. Avant de présenter le modèle général dans le chapitre II, un état des lieux des différents types de modèle existant dans la littérature est proposé en explicitant les possibilités et les limites de chacun. Cet examen permet de justifier notre choix d'approche pour modéliser un gazéifieur auto-thermique à lit fixe.

Dans le second chapitre, le lit est assimilé à un milieu multiphasique, chaque phase étant supposée continue. La description des phénomènes de transports au sein de chacune des phases passe par l'écriture des équations classiques de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Ensuite, le lien entre les différentes phases est assuré par les habituelles conditions aux limites des milieux continus : continuité des vitesses tangentielles, des contraintes, des températures et des flux massiques et de chaleur. A cette échelle, l'ensemble des mécanismes est parfaitement décrit mais le passage à la simulation est impossible en l'état sans la connaissance exacte de la répartition géométrique de chaque phase à chaque instant. La solution consiste à effectuer un changement d'échelle par prise de moyenne volumique des équations afin de se ramener à un milieu homogène équivalent. Le nouveau système obtenu gère alors les évolutions des moyennes des quantités physiques, intégrales sur un volume élémentaire représentatif des valeurs des quantités à l'échelle des phases.

Dans le troisième et dernier chapitre, le passage à la simulation débute par un jeu de conditions initiales et limites adapté au cas particulier du gazéifieur auto-thermique à lit fixe du procédé CHO-Power. L'ensemble des réactions chimiques hétérogènes et homogènes pris en compte est également décrit. Une présentation des différentes techniques numériques mises en œuvre est abordée puis une analyse des premiers résultats termine ce document.

## ***1.1 Contexte scientifique***

### **1.1.1 La gazéification et CHO-Power**

Dans un premier temps, une définition des différents types de déchets est donnée en montrant qu'ils présentent un potentiel énergétique très intéressant pour la production d'électricité et de chaleur. Bien que ce potentiel soit déjà en partie exploité dans l'incinération avec valorisation énergétique, dans le futur, la gazéification devrait prendre une place plus importante dans le panel de traitement des déchets avec production d'électricité. Mais avant de décrire le processus de gazéification, les différents procédés existant et le procédé CHO-power développé par la société Europlasma, une analyse de la complexité des enjeux de la valorisation des déchets est présentée.

#### ***1.1.1.a Les déchets***

##### **1.1.1.a.i Définition d'un déchet**

Avant de se concentrer plus particulièrement sur le traitement des déchets, il convient de décrire ce qu'est un déchet et le potentiel énergétique de celui-ci. Le code de l'environnement Titre IV1-1, Art L.541-1.-11 issu de la Loi n°75-663 du 15 juillet 1975, définit un déchet comme « tout résidu d'un processus de production, de transformation ou d'utilisation, toute substance, matériau, produit ou plus généralement tout bien ou meuble abandonné ou que son détenteur destine à l'abandon ». Les déchets se distinguent en fonction de leur provenance : déchets ménagers ou déchets industriels, ou en fonction de leur nature (inertes, non dangereux, dangereux...).

En France, l'ensemble des déchets collectés par les municipalités, c'est-à-dire ceux produits par les ménages (OM : Ordures Ménagères), les commerçants, les artisans, et même les entreprises et industries quand ils ne présentent pas de caractère dangereux ou polluant (papiers, cartons, bois, verre, textiles, emballages) sont catalogués comme Déchets Ménagers et Assimilés. Lors du paragraphe 1.1.1.e présentant le procédé CHO-Power, un intérêt particulier est porté au refus de tri de ce type de déchets comme principal combustible du procédé. Néanmoins, il existe d'autres types de déchets que nous définissons ici conformément à la loi du 13 juillet 1992.

- Les déchets industriels spéciaux qui sont du fait de leur dangerosité potentielle listés par décret, et ne peuvent pas être stockés dans des installations recevant d'autres catégories de déchets.
- Les déchets ultimes sont les déchets résultants ou non du traitement d'un déchet qui n'est plus susceptible d'être traité dans les conditions techniques et économiques du moment, notamment par extraction de la part valorisable ou par réduction de son

## CHAPITRE I : Introduction

caractère polluant et dangereux.

- Les déchets industriels banals correspondent aux déchets d'entreprises qui s'apparentent, par leur nature et leur composition, aux déchets ménagers. La loi considère d'ailleurs qu'ils sont « assimilables aux déchets ménagers » et peuvent ainsi être collectés et éliminés comme des déchets ménagers.
- Les déchets inertes, qui comme leur nom l'indique, ne se décomposent pas et ne se dégradent pas. Ce sont les gravats issus de travaux de démolition : briques, béton, terre, vitres... Ils ne sont pas dangereux, mais compte tenu de leurs volumes et de leurs quantités, ils seront stockés dans des centres spécialisés.

On définit également les déchets d'activités agricoles qui proviennent des élevages ou des cultures, les déchets d'activités de soins, dont certains sont considérés comme à risques ou encore les déchets nucléaires qui sont placés sous la responsabilité d'un organisme public particulier : l'Andra (Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs).

### **I.1.1.a.ii La production française de déchets**

Le Grenelle de l'environnement vise à réduire la production d'ordures ménagères de 7 % par habitant pendant les cinq prochaines années. L'objectif fixé est également d'augmenter le recyclage des matières et déchets organiques pour atteindre un taux de 35 % en 2012 et d'arriver à 45 % en 2015 pour les déchets ménagers contre 24 % en 2004. Mais à l'heure actuelle, pour la seule année 2008, la production de déchets en France s'élevait selon l'ADEME à 868 millions de tonnes avec la répartition suivante : 14 millions de tonnes pour les collectivités, 31 millions de tonnes pour les ménages, 90 millions de tonnes pour les entreprises, 374 millions de tonnes pour l'agriculture et la sylviculture, 0,2 million de tonnes pour les activités de soins, 359 millions de tonnes pour les mines, les carrières et le BTP (Figure 1).

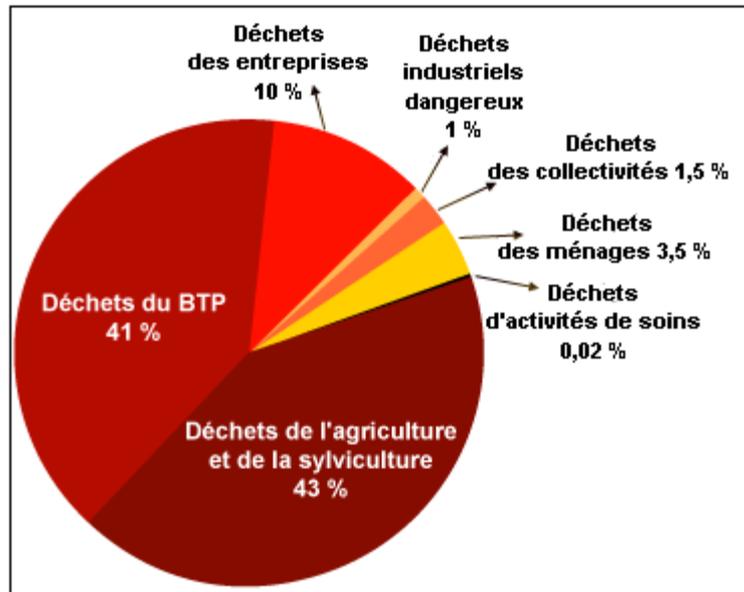


Figure 1 : Part des différents producteurs de déchets (ADEME, 2009)

Les déchets ménagers et assimilés représentent donc en 2008, 36 millions de tonnes (31 pour les ménages et 5 pour les entreprises collectées avec les OM) soit environ 4,1% de la production française. Cette production connaît une stabilisation depuis 2002, pour atteindre aujourd’hui 354 kg/an et par habitant (Figure 2). Ce chiffre est cependant bien loin de la production d’un Américain avec 750 kg/an ou d’un Espagnol avec 650 kg/an mais dix fois plus important qu’un habitant d’un pays en voie de développement. Cependant, on constate que lors des quarante dernières années la production française de déchets a doublé alors que la population n’a augmenté que de 30% (Figure 3).

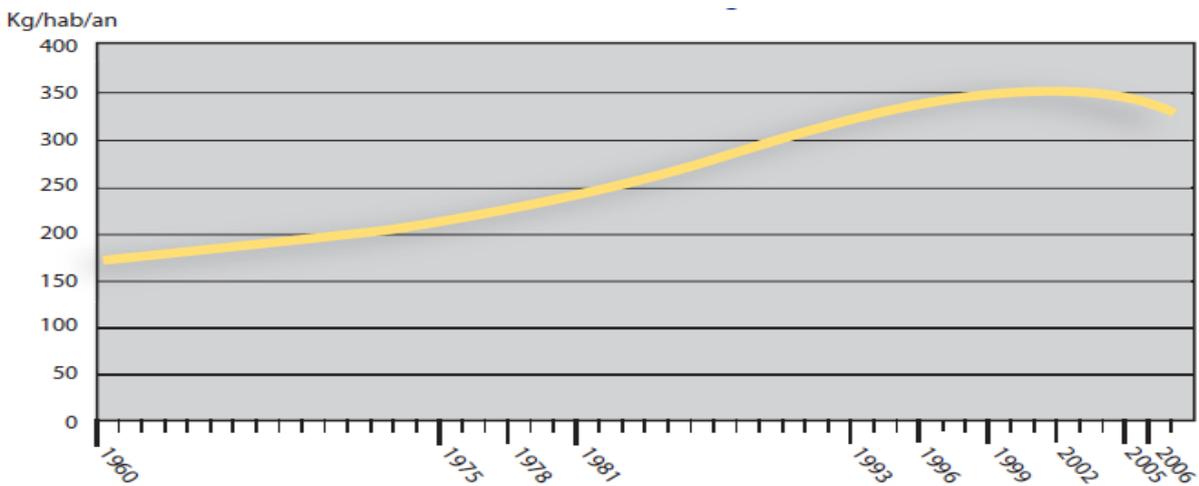
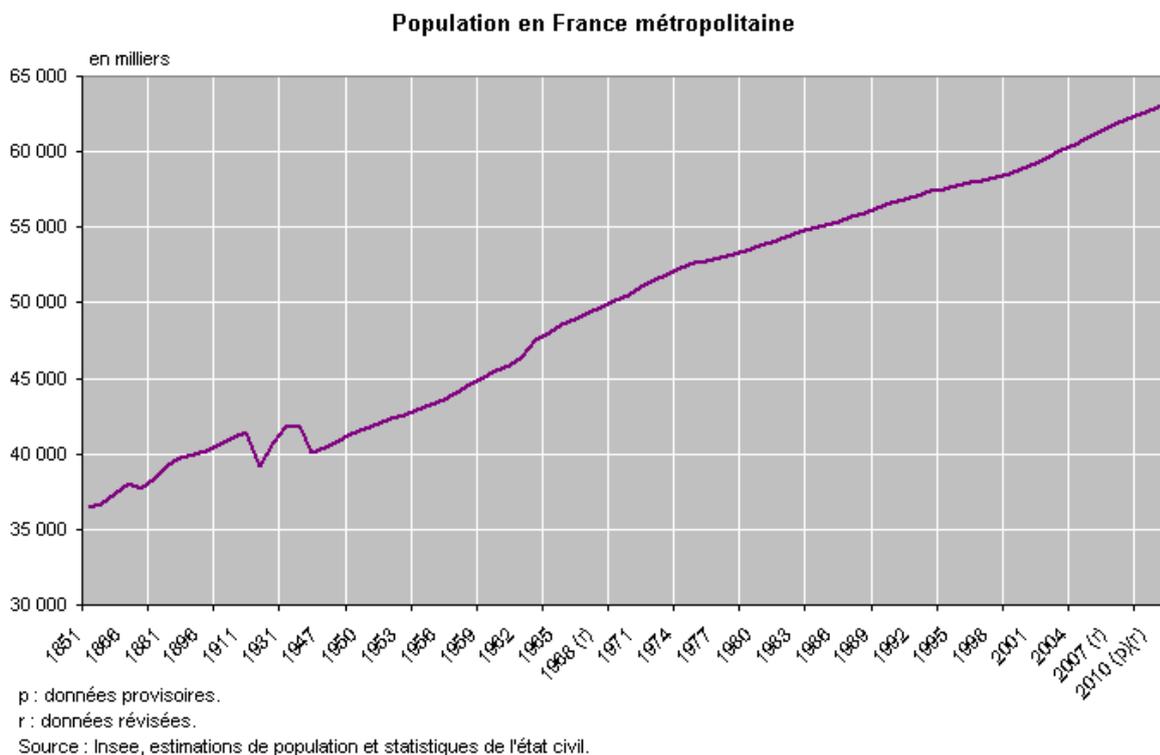


Figure 2 : Evolution de la production d’ordures ménagères en 1960 et 2006 (ADEME, 2009)



**Figure 3 : Evolution de la population en France métropolitaine depuis 1851(INSEE)**

La production française de déchets maintenant quantifiée, il est alors nécessaire de déterminer le potentiel énergétique des déchets afin de mieux appréhender leur place dans le contexte énergétique national.

### **I.1.1.a.iii Quel potentiel énergétique pour un déchet ?**

Le paragraphe précédent a mis en lumière une production française journalière d'environ 1 kg de déchets par habitant. Cette production présente des fluctuations plus ou moins importantes en fonction de la localisation géographique, du type d'habitants, des habitudes locales et de la saison. Bien que la composition des déchets soit relativement variable, on peut définir un pouvoir calorifique moyen se situant aux alentours de 7,820 MJ/kg (ADEME, 2000). Le Tableau 1 présente le pouvoir énergétique de quelques combustibles classiques, afin de pouvoir comparer le PCI de ces combustibles à celui des déchets. On observe alors qu'une tonne d'ordures ménagères correspond à l'équivalent énergétique d'environ 150 litres de fioul domestique. Avec une production annuelle de 36 millions de tonnes, les déchets ménagers et assimilés fourniraient ainsi autant d'énergie que 6,7 million de tonnes de pétrole. En comparant ce chiffre à la consommation énergétique française de 160 millions de Tonnes équivalent pétrole (1 tep= 41,8 GJ) pour l'année 2008, il apparaît alors que le potentiel énergétique des déchets pourrait couvrir 5% de l'énergie consommée en France.

	<b>Energie</b>	<b>PCI (en MJ/kg)</b>
<b>Charbon</b>		
Houille		26
Coke de houille		28
Briquettes de lignite		32
Lignite		17
<b>Pétrole</b>		
Pétrole brut, gazole, fioul		42
Gaz de pétrole liquéfié		46
Essence moteur		44
Fioul lourd		40
Coke de pétrole		32
<b>Bois</b>		<b>6,17</b>
<b>Déchets ménagers</b>		<b>7,82</b>

**Tableau 1 : Pouvoir énergétique de combustibles classiques (AIE, 2006)**

### *1.1.1.b Les enjeux de la valorisation des déchets*

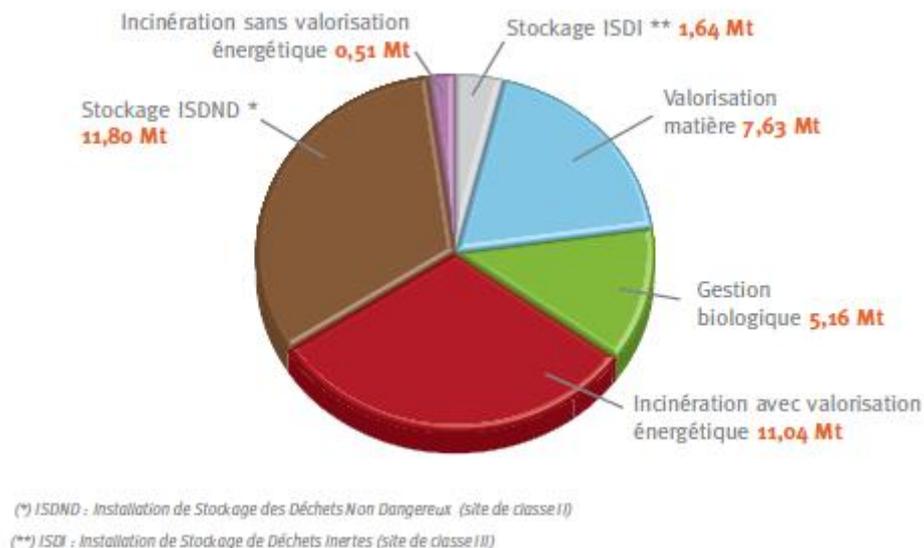
L'évolution croissante de la population mondiale pose à chaque jour de nouveaux défis pour la gestion des déchets. Face à leur multiplication mais aussi avec l'apparition de nouveaux enjeux environnementaux et énergétiques, la valorisation des déchets répond favorablement à l'ensemble de ces facteurs par le biais de la valorisation énergétique et du recyclage.

La Figure 2 du paragraphe I.1.1.a.ii a mis en évidence que la production française de déchets a doublée depuis une quarantaine d'année. De plus, la loi du 13 Juillet 1992, impose aux municipalités une gestion des déchets sans le recours à la mise en décharge. En effet, depuis le 1<sup>er</sup> Juillet 2002, seuls les déchets ultimes peuvent prétendre à une mise en décharge. En observant la production de déchets en fonction du PIB, on se rend compte que plus un pays est industrialisé plus il produit de déchets. Il apparaît également que les pays en développement du fait de leur forte croissance démographique devront rapidement faire face au problème de la gestion des déchets en termes de place et de coût. Cependant, les états et les collectivités locales font également face à des réactions antagonistes des populations qui exigent un traitement des déchets économique et respectueux de l'environnement, mais qui refusent catégoriquement l'implantation de telles

## CHAPITRE I : Introduction

installations près de chez eux («Not in my Backyard »). Ainsi, la valorisation des déchets bien que diminuant le coût du traitement et l'espace nécessaire doit répondre à l'ensemble des exigences socio-économiques du XXIème siècle.

La thématique du déchet, vue dans sa globalité, représente un enjeu majeur de la lutte contre le réchauffement climatique. Une prise de conscience des effets du changement climatique est d'abord apparue lors de la Conférence des Nations Unies sur l'Environnement en 1972 à Stockholm, puis confortée en 1992 lors du sommet de la Terre de Rio de Janeiro. C'est uniquement en 1997, que le protocole de Kyoto est venu traduire cette volonté par des engagements quantitatifs sur la réduction des gaz à effets de serre. Il est d'ores et déjà possible d'éviter les émissions de ce secteur d'activité par le biais de la prévention, du recyclage et de la valorisation. En effet, l'année 2007 fut le théâtre de l'émission de 10 Mteq CO<sub>2</sub> pour l'ensemble des activités liées aux traitements des déchets dont 4,5 Mteq CO<sub>2</sub> pour le seul stockage en décharge (ADEME, 2011). Cette mise en décharge génère, lors de la dégradation des déchets, du méthane qui est de surcroît vingt et une fois plus néfaste que le CO<sub>2</sub> (Keller 2009) sur l'effet de serre. En 2007, seul 62,5% des déchets étaient valorisés énergétiquement ou orientés vers le recyclage (Figure 4). Ainsi, la valorisation des 37,5 % de déchets restant, destinés pour l'heure à la mise en décharge ou à l'incinération sans valorisation, permettrait de satisfaire à l'ensemble des engagements de la communauté internationale vis-à-vis du changement climatique et de la réduction des gaz à effet de serre tout en produisant de l'énergie et en économisant les matières premières.



**Figure 4 : Destination des 37,8 millions de tonnes de déchets collectés en 2007 (ADEME, 2009)**

En effet, l'enjeu principal de la valorisation des déchets est l'économie des matières premières et de

## CHAPITRE I : Introduction

l'énergie. En dressant l'inventaire de l'utilisation énergétique à l'échelle mondiale, on aboutit à la répartition suivante (Bobin et al. 2005) : 35 % pour le pétrole, 25% pour le charbon minéral, 21% pour le gaz naturel, 10% pour la biomasse, 9% pour le nucléaire et l'hydraulique, les autres sources étant négligeables (Figure 5).

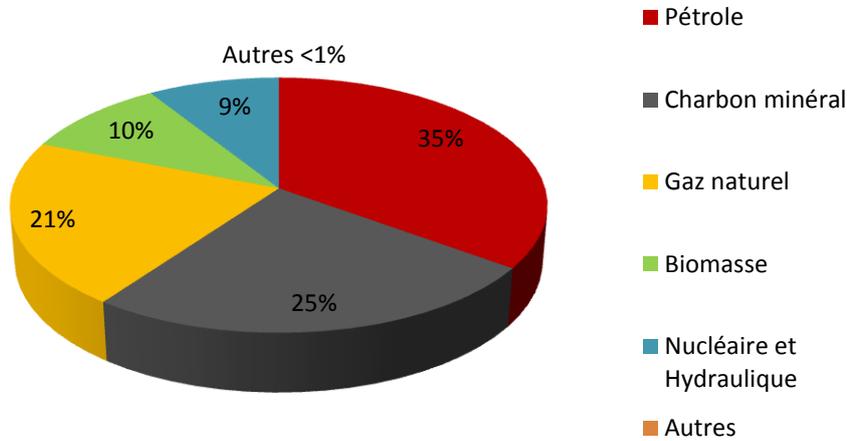


Figure 5 : Provenance de l'énergie consommée mondialement en 2005 (Bobin et al., 2005)

Le pétrole, le charbon minéral et le gaz naturel, appelés « énergies fossiles » car non renouvelables, représentent plus de 80% de la consommation mondiale d'énergie (transport, industries, chauffage...). En tenant compte de la problématique du XXI<sup>ème</sup> siècle qui estime, à titre indicatif, que sous sa forme conventionnelle, le pétrole sera épuisé définitivement en 2050 (Figure 6), on comprend mieux l'enjeu de trouver une alternative à cette source d'énergie.

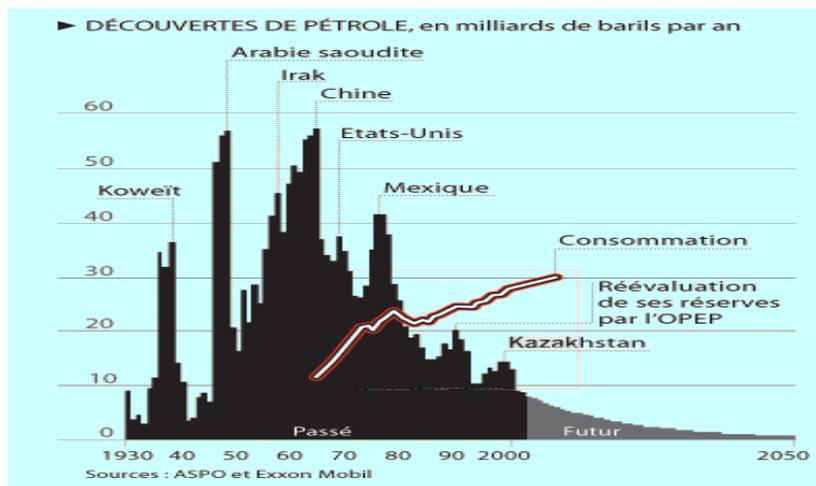


Figure 6 : Estimation des découvertes de pétrole (source : Longwell, 2002)

## CHAPITRE I : Introduction

A cette estimation, il faut ajouter que la demande énergétique mondiale croît d'année en année du fait de l'augmentation de la population mondiale et de l'émergence de nouvelles puissances économiques et industrielles comme la Chine, l'Inde et le Brésil. Pour Bobin et al (2005), même le scénario le plus restrictif prévoit une augmentation de 40% de la demande en énergie primaire en 2050 par rapport à 2005. En outre, les estimations de L'Agence Internationale de l'Energie et de l'United States Geological Survey considèrent qu'à conditions techniques et économiques équivalentes et avec un niveau d'exploitation inchangé les réserves énergétiques sont les suivantes : une cinquantaine d'années de production pour les réserves prouvées de pétrole, une soixantaine pour le gaz naturel, plus de deux siècles pour le charbon et une centaine d'années pour l'uranium. En faisant le parallèle entre ces deux observations, on prend conscience de la nécessité de trouver de nouvelles sources alternatives d'énergie.

Enfin, au contexte mondial de raréfaction des énergies fossiles et de croissance de la demande en énergie vient se greffer une volonté politico-environnementale dans la gestion des déchets. Le Grenelle de l'environnement a changé la donne en termes de production mais aussi de traitement des déchets. Bien qu'il préconise une réduction de la production de déchets, il souligne la nécessité d'une meilleure gestion de ceux-ci. Les pouvoirs publics envisagent d'instaurer d'ici fin 2011 une « Contribution climat énergie » pour taxer la consommation d'énergie d'origine fossile. Mise en place depuis 1991 en Suède (Johansson, 2000), cette « taxe carbone » est basée sur le principe « pollueur-payeur ». Grâce à une augmentation progressive du prix de l'énergie, la taxe doit inciter les ménages et les entreprises à se tourner vers des investissements écologiques leur permettant de baisser leur consommation d'énergie fossile et de favoriser le développement des énergies « propres ».

Bien que la tendance actuelle fasse pencher la balance en faveur de la biomasse, le déchet semble pouvoir apporter une sérieuse alternative dans la production d'énergie mondiale à condition de favoriser sa valorisation au détriment de sa mise en décharge. En effet avec un PCI supérieur à celui du bois, il existe énormément de techniques de valorisation du potentiel énergétique des déchets.

### *1.1.1.c Les techniques de valorisation*

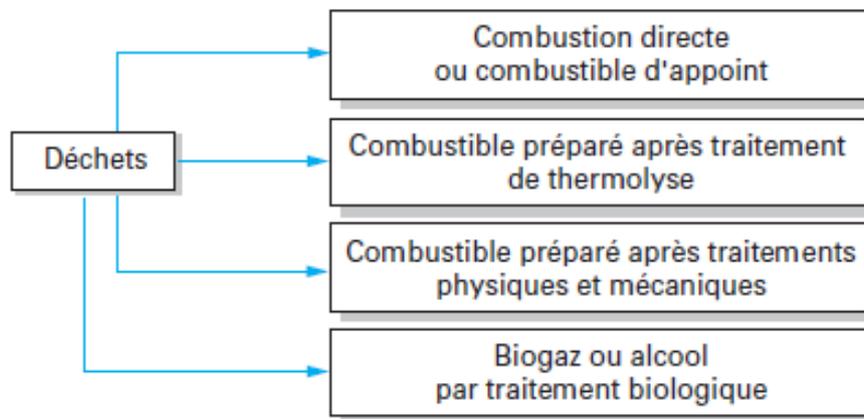
Tous les déchets, à l'exception des déchets ultimes, sont potentiellement valorisables en fonction de leur nature chimique, de leurs propriétés physico-chimiques, thermiques ou mécaniques. Il existe cinq grandes familles de valorisation possibles pour les déchets selon leurs caractéristiques.

- La valorisation énergétique comprenant la combustion, l'élaboration de combustibles dérivés par procédés mécaniques, thermiques et biologiques.

## CHAPITRE I : Introduction

- La valorisation des matières premières organiques et minérales.
- La valorisation de matériaux comme par exemple la valorisation des liants hydrauliques et des matériaux de structure, celle des verres et céramiques, des plastiques et caoutchoucs, des fibres cellulosiques de récupération ou d'autres matériaux.
- La valorisation en agriculture et élevage.
- La valorisation en techniques de l'environnement telle que l'épuration des effluents liquides et gazeux ou le conditionnement des déchets toxiques.

Parmi toutes ces valorisations celle qui intéresse tout particulièrement cette étude est la valorisation énergétique représentée schématiquement par la Figure 7.



**Figure 7 : Différentes technique de valorisation énergétique (source : Navarro, 2003)**

Une définition de chacune des techniques de valorisation est donnée (Navarro, 2003) avant d'approfondir la description de l'élaboration de combustibles par procédés thermiques, cette dernière étant l'objet de ce travail.

- La combustion, où le déchet remplace partiellement ou totalement un combustible classique comme les énergies fossiles ou le bois et où la chaleur produite est valorisée sous forme de vapeur, d'eau chaude ou d'électricité par exemple.
- L'élaboration de combustibles dérivés par procédés mécaniques, qui conditionnent le déchet, par l'intermédiaire d'un broyage ou d'un tri, lorsque c'est nécessaire avant combustion ou dégradation thermique.
- L'élaboration de combustibles dérivés par procédés thermiques tels que la pyrolyse ou la gazéification, procédé qui motive ce travail, permettant une transformation des molécules hydrocarbonées des déchets en combustibles solides, liquides ou gazeux en

## CHAPITRE I : Introduction

jouant sur les paramètres physiques comme la température ou la pression.

- L'élaboration de combustibles dérivés par procédés biologiques avec, pour un déchet biodégradable, la mise en œuvre des fermentations méthaniques ou alcooliques conduisant à la production de combustibles liquides ou gazeux comme l'alcool ou le biogaz.

En s'intéressant de plus près aux procédés de valorisation thermique, on se rend compte du grand nombre de possibilités selon le type de déchet. En effet, c'est celui-ci qui conditionne l'utilisation de tel ou tel procédé mais aussi les objectifs souhaités d'un point de vue économique et énergétique. Les procédés de traitement des déchets par voie thermique ont pour but de réduire sensiblement le volume et la toxicité des déchets en y ajoutant une valorisation énergétique ou autre à la clé. Les principaux procédés sont :

- l'incinération
- la pyrolyse
- l'oxydation hydrothermale
- la gazéification.

### I.1.1.c.i L'incinération

Pour l'année 2006, on observe la prépondérance de l'incinération par rapport aux autres techniques dans la répartition de la valorisation énergétique française (Figure 8).

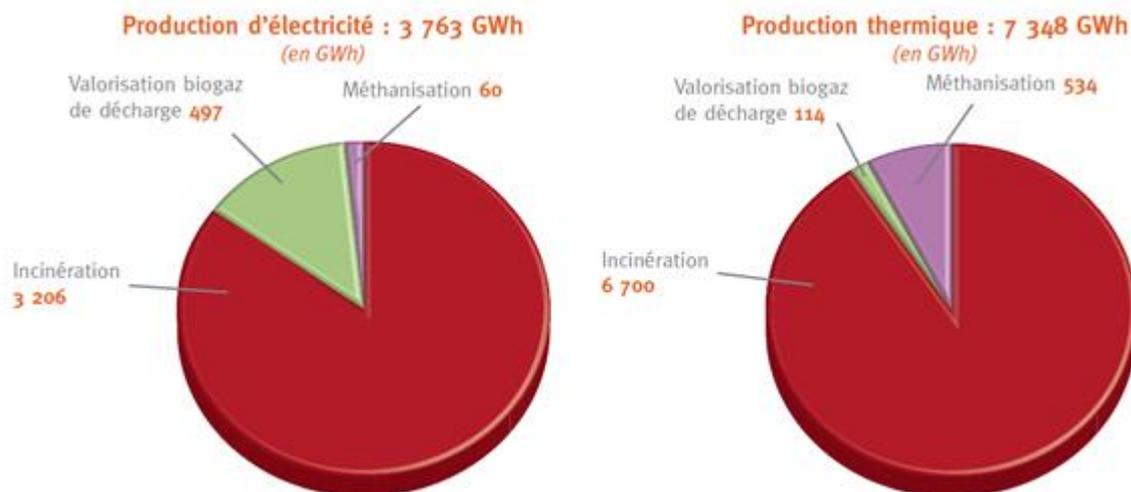


Figure 8 : La valorisation énergétique en 2006 (ADEME, 2009)

L'incinération se présente comme un procédé permettant une réduction de 70% de la masse, de

## CHAPITRE I : Introduction

90% du volume et étant l'un des plus rentables pour traiter à l'échelle industrielle de grandes quantités de déchets tout en les valorisant (Ménard, 2003). L'essentiel de la valorisation énergétique s'effectue au cours de l'incinération de déchets, en produisant soit de l'électricité, soit de la chaleur, la production conjointe des deux offrant un meilleur rendement. L'énergie produite est par la suite en grande partie vendue. L'incinération est une combustion en excès d'air par rapport à la demande stœchiométrique en oxygène. Celle-ci produit des gaz (fumées) et des solides (mâchefers) qui sont incombustibles dans le cas de réactions d'oxydation complètes. Il existe trois grands types de fours d'incinération :

- Les fours rotatifs ou oscillants
- Les fours à lits fluidisés
- Les fours à grilles fixes ou mécaniques.

Selon une enquête publiée en septembre 2009 par le Syndicat national du traitement et de la valorisation des déchets urbains et assimilés, sur 13 millions de tonnes de déchets incinérées en France chaque année au sein des 128 unités d'incinération d'ordures ménagères, 11 millions permettent de vendre de l'énergie soit 85 % du total des déchets incinérés. Les syndicats interrogés lors de l'enquête, qui traitent 7,1 millions de tonnes de déchets, fournissent l'équivalent de 450.000 tep, soit 0,064 tep par tonne de déchet incinéré. L'énergie produite par les 110 unités françaises d'incinération d'ordures ménagères avec valorisation énergétique est à 76 % thermique et 24 % électrique. Cette production d'énergie fournie par l'incinération en France représente une recette de 198 millions d'euros par an soit 18€ la tonne.

Selon le centre national d'information indépendant sur les déchets (CNIID), la France présente la spécificité d'avoir les usines les moins efficaces d'Europe avec des rendements souvent très faibles (30 % pour la production de chaleur contre 65,8 % au niveau européen et 11 % pour l'électricité contre 18 % en moyenne dans l'UE). Il souligne également le fait que seul 10 % environ des usines françaises peuvent prétendre au statut de valorisation. Bien que l'incinération soit aujourd'hui fortement génératrice d'énergie, il ne faut pas oublier que c'est aussi un gros pôle d'émission de gaz à effet de serre. D'après le registre français des émissions polluantes, l'incinération des ordures ménagères génère de 0,3 à 0,5 tonne de CO<sub>2</sub> par tonne de déchets produisant à terme l'émission de 6,5 millions de tonnes de CO<sub>2</sub>.

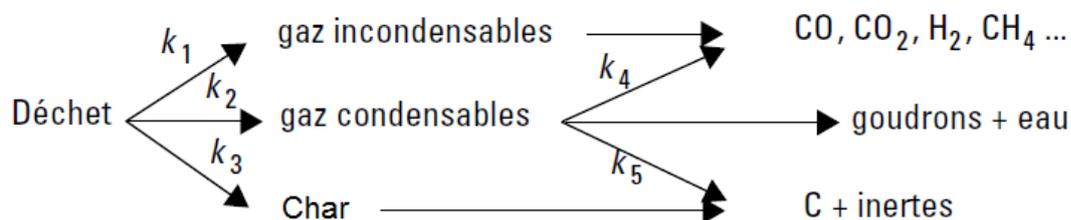
### I.1.1.c.ii La pyrolyse

A partir du moment où la teneur en oxygène est inférieure à 1% de la demande stœchiométrique, les procédés de chauffage du déchet (par rayonnement ou par convection par exemple) entraînent le séchage, puis la « distillation » des matières volatiles jusqu'à transformation de la matière solide en carbone fixe. C'est l'absence d'oxygène qui permet d'empêcher la combustion des produits de la réaction de décomposition.

La pyrolyse est donc une dégradation thermique d'un matériau organique en absence d'oxygène. Elle implique des phénomènes de transfert de chaleur et de matière ainsi qu'un ensemble de réactions chimiques hétérogènes et homogènes. Cette dégradation thermique produit pour un composé organique (Bridgwater, 2003 ; Antonini, 2005 ; Ratte, 2009 ; Casajus, 2010) :

- un mélange gazeux combustible composé d'incondensables ( $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ), de condensables ( $H_2O$ , hydrocarbures légers en  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_4$ , acides (formique, acétique) et des benzols) et de goudrons
- un résidu solide constitué de carbone appelé plus communément le « Char ».

Il est alors possible de décrire la pyrolyse par le schéma réactionnel suivant (Figure 9) (Ménard 2003, Antonini 2005).



**Figure 9 : Schéma réactionnel de la pyrolyse du déchet**

La pyrolyse n'est pas seulement une décomposition du déchet, c'est avant tout une recombinaison des molécules formées en molécules plus stables thermiquement. La répartition entre les différents produits de la pyrolyse dépend fortement des conditions opératoires telles que la température, la pression ou encore la vitesse de chauffe. Il est possible de définir deux types de pyrolyse en fonction des conditions opératoires :

- une pyrolyse dite lente pour des vitesses de chauffe  $<10^\circ C/min$  et des températures inférieures à  $500^\circ C$ . Ce type de pyrolyse maximise le rendement en char du fait d'un long temps de séjour (quelques dizaines de minutes) tout en diminuant les autres fractions. Cette pyrolyse est une technique très ancienne puisqu'elle a été mise en œuvre pour la fabrication du charbon de bois (Numazawa 2000).

## CHAPITRE I : Introduction

- La pyrolyse rapide ou flash pour des vitesses de chauffe comprise entre 10°C/s et 1000°C/s. Dans ce cas, c'est la production des incondensables qui est favorisée avec un temps de séjour faible (quelques secondes) et des températures comprises entre 400°C et 600°C.

Pour le cas du bois, les valeurs types des deux types de pyrolyses et de la fraction des produits obtenus est présenté dans le tableau ci-dessous (Figure 10).

	Goudrons %massique	Char %massique	Gaz %massique
Pyrolyse lente : vitesse de chauffe faible, temps de séjour important, température faible	30	35	35
Pyrolyse flash : vitesse de chauffe importante, temps de séjour très court, température modérée	75	12	13

**Figure 10 : Répartition des fractions des pyrolyses du bois (Bridgwater 2003)**

En conclusion, la pyrolyse permet la concentration in-situ de l'énergie du déchet dans le char (pyrolyse lente) ou dans les huiles de pyrolyse (pyrolyse rapide), facilitant ainsi son stockage (comme combustible et non plus comme déchet) et son transport pour une utilisation ultérieure et/ou sur un site différent. De plus, la pyrolyse des déchets produit moins de fumées (le déficit d'air dans la réaction génère moins de fumées à traiter) et donne ainsi la possibilité de faire des économies sur les équipements de traitement. Cependant la pyrolyse des déchets ne part pas sans inconvénients. Elle nécessite un prétraitement des déchets (séchage, broyage), et selon la qualité des déchets traités, les polluants tels que les métaux lourds et les produits chlorés se retrouvent concentrés dans le char.

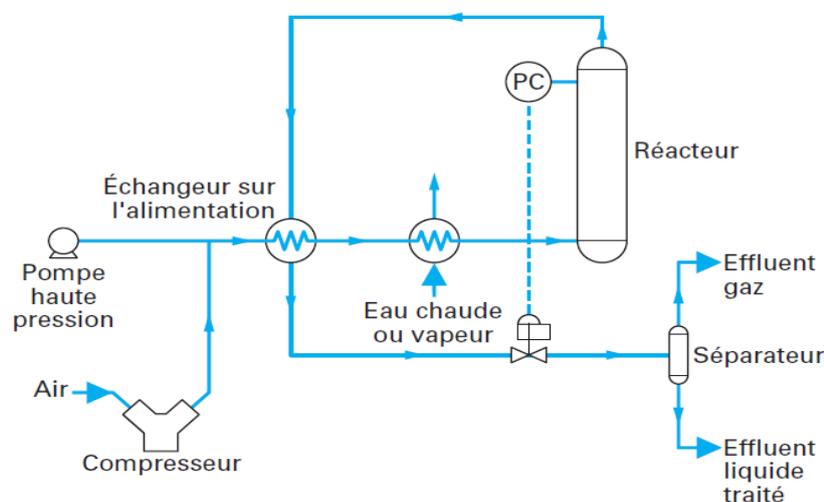
### **I.1.1.c.iii L'oxydation hydrothermale**

Le procédé d'oxydation hydrothermale (OHT) est utilisé pour traiter des déchets contenant une forte proportion d'eau. La particularité de ce procédé est qu'il ne nécessite pas l'évaporation de l'eau avant oxydation de la matière organique. L'oxydation est réalisée en phase liquide supercritique (par différence avec l'incinération). Elle permet de traiter des charges organiques difficilement traitables par voies biologiques (teneur en organiques trop élevée, DCO « dure » c'est-à-dire difficilement oxydable par voie biologique, organiques toxiques, etc.), ainsi que des flux

## CHAPITRE I : Introduction

ayant une charge organique trop faible (et donc un PCI trop faible) pour une incinération sans combustible d'appoint. Les déchets typiquement traités par l'OHT sont les boues urbaines et industrielles, des eaux process, des effluents liquides (aqueux), des déchets dangereux liquides, etc... L'OHT est une oxydation directement dans l'eau, en présence d'oxygène provenant d'air, d'air enrichi en oxygène ou d'oxygène pur, à forte température (150 °C à 650 °C), et à forte pression (15 à 300 bar), de la matière organique initialement contenue dans l'eau. Cette matière organique peut être présente au départ, soit sous forme dissoute dans le liquide, soit sous forme de matière en suspension ou les deux. Elle est convertie majoritairement en gaz carbonique et en eau.

La figure ci-dessous présente un schéma de principe pour les procédés d'oxydation hydrothermale (Figure 11) :



**Figure 11 : Schéma de principe des procédés d'OHT (Antonini, 2005)**

Pour l'OHT, il existe deux types de procédés selon leurs conditions opératoires :

- les procédés sous-critique pour des températures  $<300^{\circ}\text{C}$  et des pressions  $<150$  bar. Ici les phases liquides et gaz sont en phase dispersée, du fait de la faible solubilité de la fraction organique et de l'oxygène dans le milieu réactionnel. Les temps de séjour sont importants de l'ordre de 15-60min pour assurer une conversion de 99%.
- Les procédés supercritiques pour des températures comprises entre  $375^{\circ}\text{C}$  et  $550^{\circ}\text{C}$  et une pression de l'ordre de 250 bars. Dans ce cas, le mélange réactionnel est monophasique, conduisant à des temps de séjour de l'ordre de quelques dizaines de secondes du fait de la forte solubilité de l'oxygène et de la fraction organique.

### *1.1.1.d La gazéification de déchets*

#### **1.1.1.d.i Le processus de gazéification**

La gazéification est un procédé de plus de deux siècles d'existence. Mis en œuvre au milieu du XIX<sup>ème</sup> siècle, il permettait alors de produire le gaz de ville et d'éclairage à partir du charbon minéral. Ce procédé permet une conversion de matières organiques ou carbonées en un gaz de synthèse aussi appelé « syngaz ». Ce gaz ainsi produit est majoritairement constitué de monoxyde carbone (CO) et de dihydrogène (H<sub>2</sub>). Le solide combustible réagit à haute température (600°C-1800°C) avec l'agent de gazéification pour produire le syngaz. Les réactions thermochimiques de gazéification se produisent en défaut d'oxygène (entre 30 et 50 % de la demande stœchiométrique) afin d'éviter la combustion totale du solide dans le but de produire ce syngaz. Aujourd'hui, le processus de gazéification est capable de traiter une multitude de produits tels que le charbon minéral, les résidus du pétrole, la biomasse, les déchets et les boues de station d'épuration. Néanmoins, suivant le combustible et le procédé choisis, la gazéification génère de nombreux produits indésirables comme les goudrons par exemple. Il est donc dans la plupart des cas nécessaire de coupler les procédés de gazéification à des procédés de purification du syngaz. Ainsi, une fois purifié, ce gaz peut trouver toutes sortes d'utilisations (cf paraghe 1.1.1.d.ii) dont les principales sont la production d'électricité par cogénération et la production de biocarburants de seconde génération par procédé Fischer-Tropsch. Bien qu'à l'heure actuelle la gazéification s'applique principalement aux carburants fossiles comme le charbon, elle constitue également une voie pour la production d'énergies renouvelables.

Si on s'intéresse maintenant à l'aspect thermochimique du procédé de gazéification, on s'aperçoit que celui-ci met en jeu un ensemble de réactions parmi lesquelles les réactions de gazéification ne sont qu'une étape. En effet, le procédé se décompose en quatre grandes étapes (Figure 12).

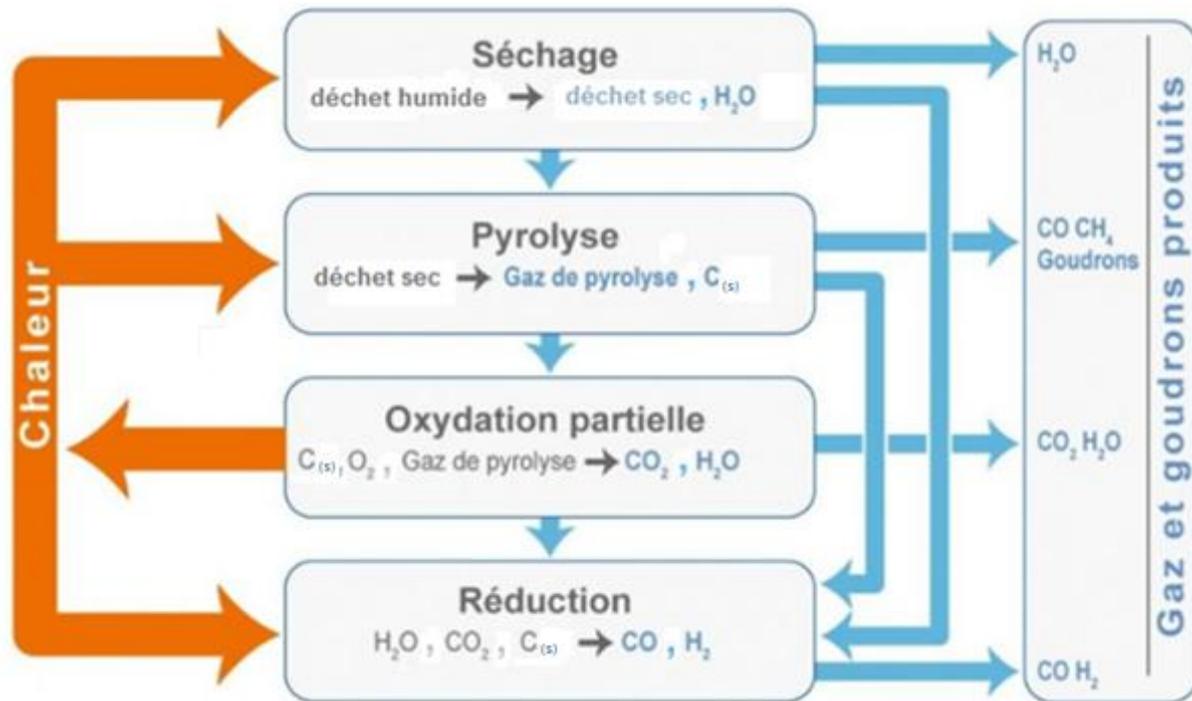
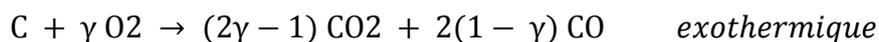


Figure 12 : Schéma de principe de la gazéification

Dans un premier temps, le combustible solide est séché par divers processus en fonction du type de procédé choisi. Puis, il est soumis à des hautes températures. Cela entraîne la pyrolyse de la matière organique, ce qui produit du char et un gaz constitué de condensables et d'incondensables (cf paragraphe I.1.1.c.ii). Ensuite, a lieu la combustion du char et/ou des matières volatiles par réaction avec l'oxygène présent dans l'enceinte de gazéification. La combustion joue un rôle déterminant dans le procédé de gazéification puisque c'est elle qui permet d'atteindre les niveaux thermiques suffisants pour la gazéification. Néanmoins, elle s'accompagne d'une forte production de CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O.

Il est possible de décrire le processus de gazéification par un ensemble de mécanismes réactionnels dans lesquels C représente le char (ADEME/PROCEDIS). Ici les mécanismes décrivant la pyrolyse, abordée au chapitre I.1.1.c.ii, ne seront pas présentés à nouveau. La pyrolyse s'étant produite, la combustion du char se met en place. Elle est décrite par le mécanisme suivant :



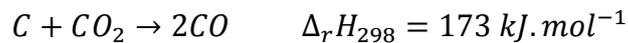
où  $\gamma$  est une fonction de la température.

Cette réaction exothermique permet donc d'enclencher les réactions de gazéification. On distingue alors trois réactions principales caractérisant la gazéification à proprement parlé.

La première réaction est une réaction hétérogène et correspond à la gazéification au dioxyde de

## CHAPITRE I : Introduction

carbone (CO<sub>2</sub>) provenant de la combustion et de la pyrolyse. Cette réaction endothermique est aussi appelée équilibre de Boudouard.



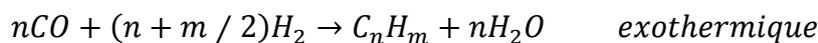
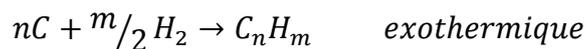
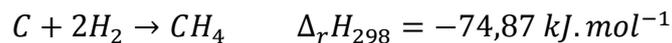
La seconde réaction, hétérogène elle aussi, est la réaction, également endothermique, à la vapeur d'eau qui dégage du CO et de l'H<sub>2</sub> en suivant le schéma réactionnel ci-dessous :



Mais la vapeur d'eau présente dans l'enceinte de gazéification réagit également avec le CO. Cette réaction exothermique réversible a toutefois tendance à s'équilibrer rapidement du fait des hautes températures. Elle est communément appelée réaction de « shift » et est décrite par :



De plus, il faut également prendre en compte les réactions secondaires de formation de méthane (CH<sub>4</sub>) et d'hydrocarbures lors du processus de gazéification, soit :



Les principales réactions de la gazéification maintenant explicitées, il est intéressant de resituer la gazéification dans le panel des traitements thermiques de déchets. Dans cette optique, une présentation des avantages de la gazéification par rapport à l'incinération est proposée. La gazéification présente quatre atouts majeurs en comparaison avec l'incinération :

- Le premier concerne le rendement énergétique des installations de gazéification qui peut aller jusqu'à 40% contre 20% pour l'incinération.
- De ce rendement énergétique plus élevé découle le second atout qui est la diminution des émissions de gaz à effet de serre. Concrètement, cela se traduit par une diminution du rapport CO<sub>2</sub> émis par kWh produit.
- De plus, la nature même du processus de gazéification a pour autre conséquence de ne pas dégager de furanes et de dioxines. Ainsi, Les émissions répondent aux normes les plus strictes en vigueur et anticipent d'ores et déjà les durcissements à venir.
- Enfin, le dernier point positif de la gazéification par rapport à l'incinération se trouve dans le fait qu'en gazéification, pour une tonne de déchets entrants, on ne produit pas de

résidus issus du traitement des fumées (REFIOM) contre 5 à 10 kg dans le cas de l'incinération (Senat.fr). On constate alors que la gazéification possède des rendements matière et énergie supérieurs à l'incinération.

Le syngaz produit a la particularité d'avoir une multitude d'application possible. En effet, le syngaz une fois purifié peut être utilisé, tel quel ou après transformation, comme source d'énergie.

### **I.1.1.d.ii Les applications de la gazéification**

L'intérêt de la gazéification est donc de pouvoir produire un syngaz aux multiples applications possibles dont les principales sont décrites dans les paragraphes suivants.

#### ❖ La cogénération d'électricité et de chaleur

La production d'électricité et/ou de chaleur par cogénération est l'application fondamentale et la plus courante. La cogénération consiste à produire simultanément de l'électricité et de la chaleur, cette chaleur étant issue de la production électrique. L'idée de cogénération se base sur le fait que la production électrique dégage une grande quantité de chaleur, habituellement dissipée dans l'environnement. En réponse à une demande thermique (chauffage, process industriel, ...), elle propose d'utiliser le cycle de génération électrique également comme source thermique. Lors de cette application, il est nécessaire d'utiliser des types de moteurs différents suivant la richesse énergétique du Syngaz obtenu. On peut distinguer trois types de moteur principalement utilisés lors de ce couplage (Tagutchou, 2008) :

- Les moteurs à gaz ou moteur à combustion interne sont des moteurs à allumage par injection ou par étincelle qui ont été plus ou moins transformés. Ils peuvent accepter 100% de Syngaz ou avec 10 à 25% de diesel lors de leur fonctionnement. L'utilisation d'un mélange Syngaz/diesel permet d'améliorer les rendements et on parle alors de moteur « dual-fuel ». Ces moteurs tolèrent des teneurs en goudrons allant jusqu'à 150 mg.Nm<sup>-3</sup>.
- Les turbines à gaz sont constituées d'un compresseur de 10 à 20 bars dans le but d'amener de l'air comprimé dans la chambre de combustion où il doit réagir avec le Syngaz sous pression. C'est la détente des fumées de combustion sous haute pression et haute température (environ 1200°C) au niveau des pales de la turbine entraînant une génératrice qui produit de l'électricité. Ce type d'installations implique des grandes exigences en terme de pureté du Syngaz (teneur en goudrons <5 mg.Nm<sup>-3</sup>).

## CHAPITRE I : Introduction

- Les turbines à vapeur récupèrent, à travers un échangeur, la chaleur produite lors de la combustion du Syngaz, pour produire la vapeur d'eau et alimenter la turbine.

Un des grands intérêts des procédés de gazéification est de pouvoir coupler les turbines à vapeur avec un moteur à gaz ou une turbine à gaz afin d'augmenter les rendements.

### ❖ La production de gaz naturel de synthèse

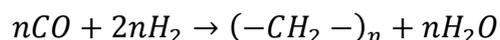
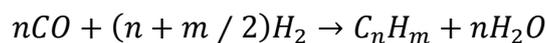
Une deuxième application de la gazéification est donc la production de gaz naturel de synthèse. En effet, le Syngaz peut être transformé, par conversion catalytique de CO et H<sub>2</sub>, en un gaz contenant majoritairement du méthane et dont les caractéristiques sont proches du gaz naturel. Ce gaz peut ensuite être réinjecté dans le réseau urbain de gaz de ville ou être utilisé comme combustible dans des moteurs à gaz et des turbines à gaz avec très peu voire aucune modification de celles-ci.

### ❖ La production d'hydrogène

Lors de la gazéification, le Syngaz produit peut être transformé en un gaz riche en hydrogène par conversion du CO en H<sub>2</sub>, par adjonction de vapeur d'eau puis purification du gaz. C'est cette richesse qui présente un regain d'intérêt depuis la démocratisation de la pile à combustible. L'enjeu majeur de cette technologie est l'approvisionnement en hydrogène ; le Syngaz semble une source de production potentiellement intéressante.

### ❖ La production de biocarburant

La raréfaction du pétrole fait qu'aujourd'hui une des orientations majeures des procédés de gazéification est la production de biocarburants dits de seconde génération. Le procédé Fischer-Tropsch permet la synthèse de biodiesel compatible avec les moteurs existants et avec une pureté accrue en comparaison avec le diesel d'origine fossile car il ne contient pas de soufre. Cette synthèse s'appuie sur la réduction du monoxyde de carbone par l'hydrogène dans le but de les transformer en hydrocarbures suivant les réactions ci-dessous :



Cette synthèse d'hydrocarbures linéaires est réalisée à partir du CO et H<sub>2</sub> sur un catalyseur à base de fer ou de cobalt et ce pour un rapport H<sub>2</sub>/CO égal à 2. Elle a lieu, dans le cas du réacteur slurry, pour des températures comprises entre 200 et 300°C et des pressions allant de 20 à 30 bar (Rauch, 2008).

La Figure 13 est une description du procédé Fischer-Tropsch dit BTL pour Biomass to liquids.

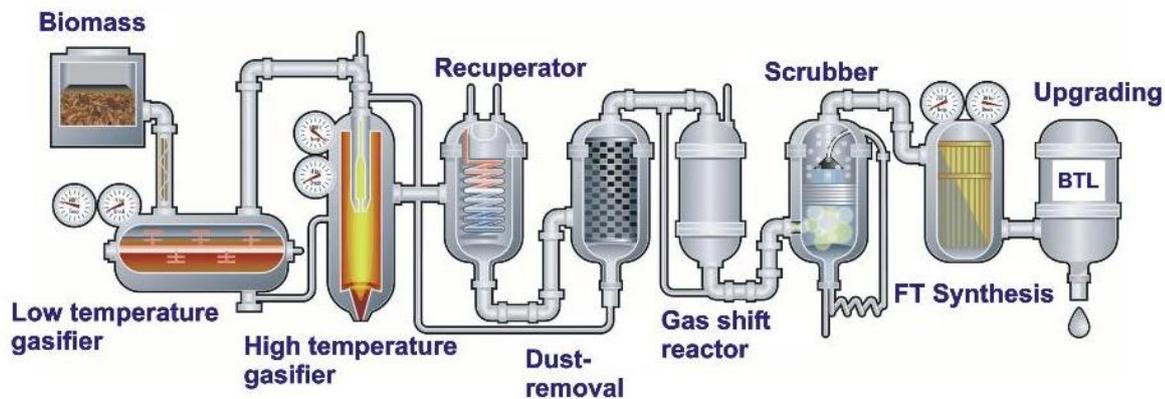


Figure 13 : Procédé Fischer-Tropsch (source: The Choren Carbo-V<sup>®</sup> Process)

### I.1.1.d.iii Les procédés de gazéification

Le choix d'un procédé de gazéification de déchets dépend principalement de la nature du déchet à traiter, comme ses caractéristiques physiques, chimiques et/ou biologiques, et des objectifs de valorisation voulant être mis en œuvre. A l'heure actuelle, les procédés commercialement développés s'appuient principalement sur deux grands types de gazéifieur (étude ADEME/PROCEDIS) décrits dans les paragraphes suivants.

#### ➤ Les gazéifieurs à lit fixe

Il existe différents types de réacteurs à lit fixe en fonction de l'écoulement de gaz. Ces gazéifieurs généralement de taille réduite (<1MW), ont pour désavantage de présenter des difficultés de changement d'échelle malgré une construction relativement simple. On distingue alors les gazéifieurs à contre-courant, à co-courant et à courant croisé.

- Les gazéifieurs à contre-courant

Dans ce type de gazéifieur, alors que le combustible est introduit par le haut, l'agent de gazéification est lui introduit par le bas. Le combustible descend dans le réacteur et le gaz circule de bas en haut permettant de sécher la charge tout en abaissant la température des produits gazeux jusqu'à environ 200-300°C. Le fait de sécher le combustible solide avec les gaz quittant le réacteur abaisse leur température et permet d'obtenir un haut rendement thermique. Ce type de gazéifieur

CHAPITRE I : Introduction

peut accepter des produits ayant une teneur en eau allant jusqu'à 50% (Mc kendry, 2002 et Beenackers, 1999). Le bémol de cette technologie est la forte production de goudrons empêchant son utilisation pour la production d'électricité, sauf avec la mise en place de techniques de traitement des gaz produits impliquant un surcoût important pour l'installation. Les gazéificateurs British-Gas Lurgi à lit fixe et Babcock & Wilcock Volund systems en sont les parfaits représentants (Figure 14 et Figure 15).

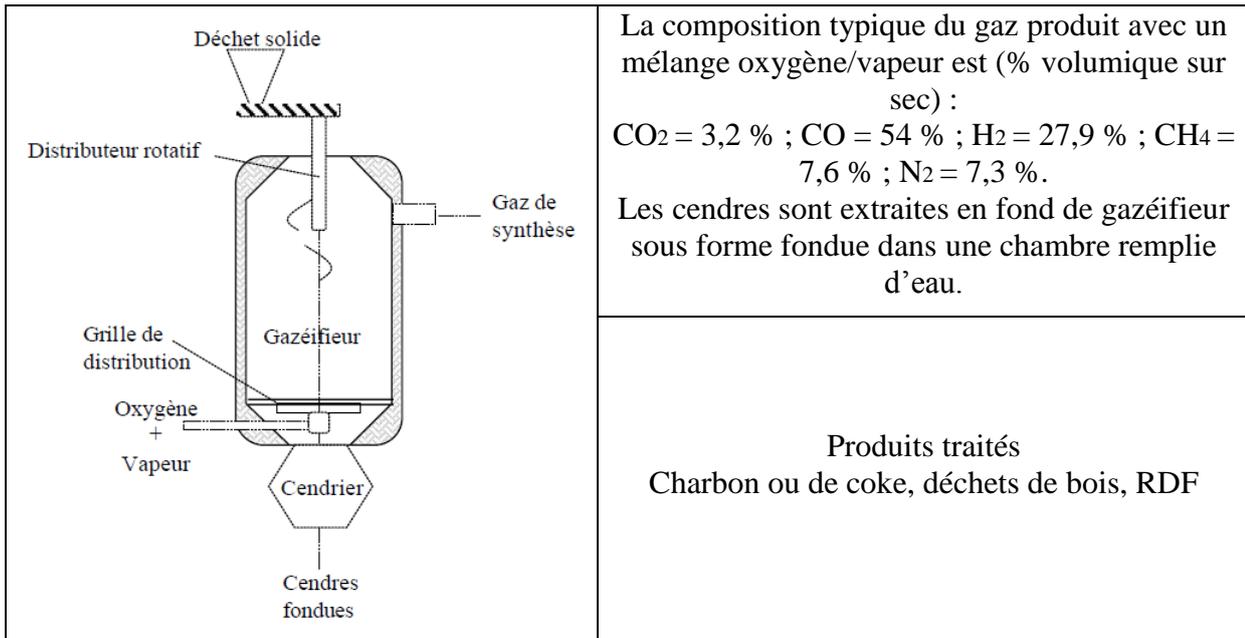
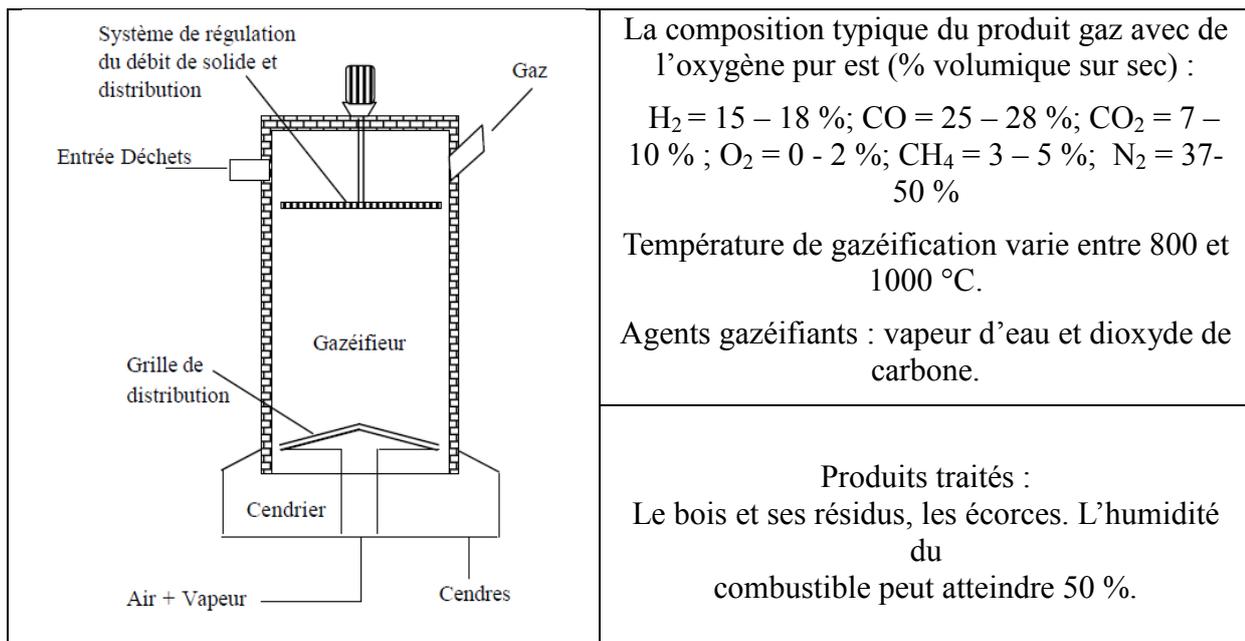


Figure 14 : Schéma du gazéificateur British-Gas Lurgi à lit fixe (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)



**Figure 15 : Schéma du gazéifieur Babcock & Wilcox Volund systems (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)**

- Les gazéifieurs à co-courant

Ici, le combustible et l'agent de gazéification s'écoulent dans le même sens, de haut en bas. Le combustible est d'abord séché puis pyrolysé, par conduction de la chaleur provenant du front de combustion, avant d'être mis en contact avec l'agent de gazéification. Les goudrons formés sont craqués thermiquement du fait des hautes températures (environ 1000°C) au niveau de la zone d'injection, permettant ainsi une production de gaz à faible teneur en goudrons. Cette faible quantité de goudrons fait de ce procédé le candidat idéal pour la production d'électricité. C'est dans le bas du réacteur qu'à lieu la gazéification du char produit par pyrolyse et que les produits gazeux sont évacués. Cette évacuation de gaz à haute température réduit le rendement thermique pour ce genre d'installation. Ce type de procédé est beaucoup plus exigeant en terme d'humidité du combustible, puisque celle-ci doit être inférieure à 20%, ainsi qu'au niveau de la taille des particules qui doit être plus faible que pour le contre-courant. On peut prendre comme exemple les gazéifieurs Nippon Steel (NS) et Xylowatt (Belgique) (Figure 16 et Figure 17).

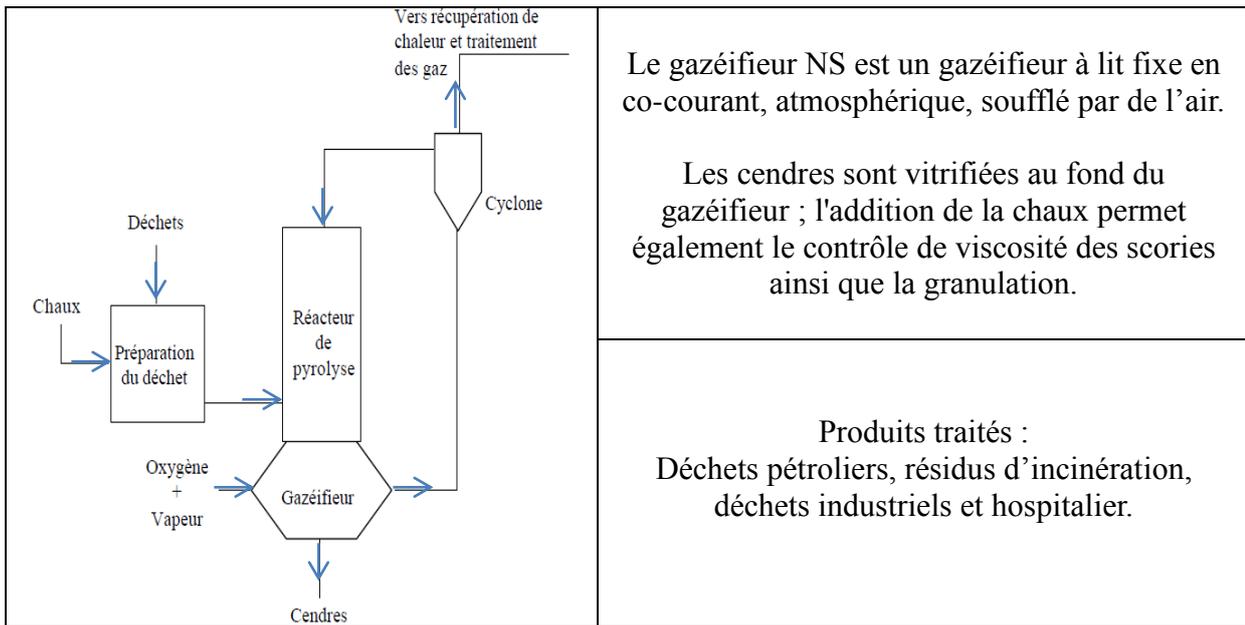


Figure 16 : Schéma du gazéifieur Nippon Steel (NS) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)

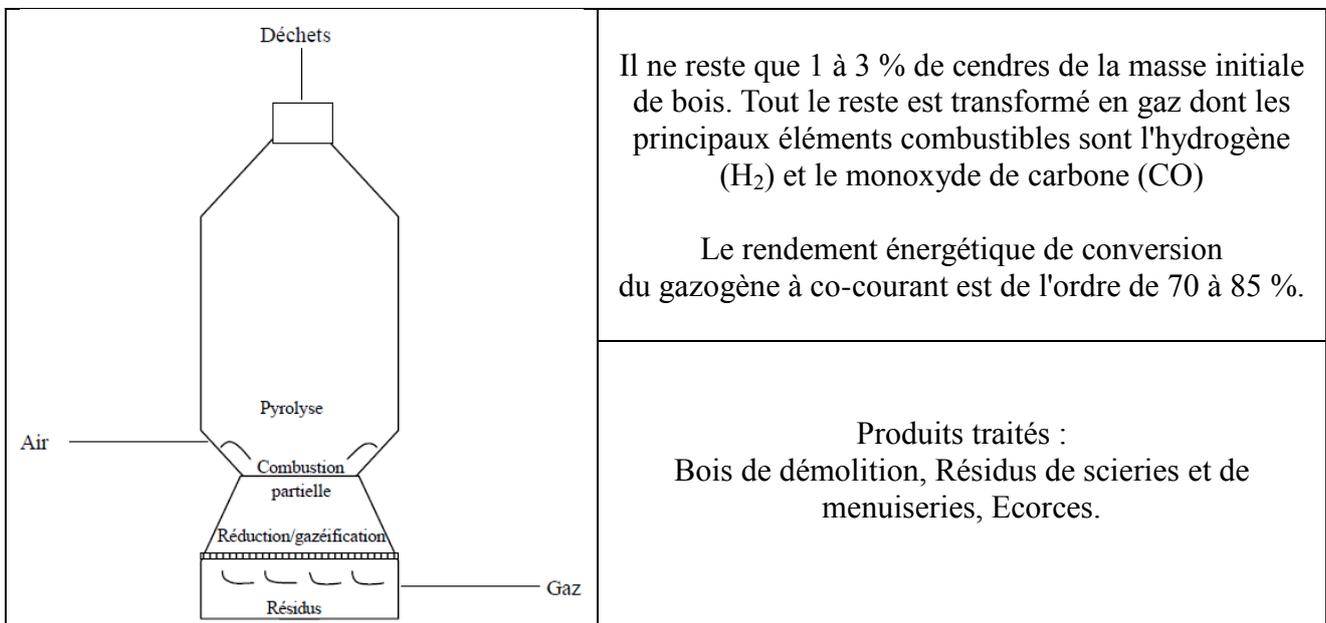
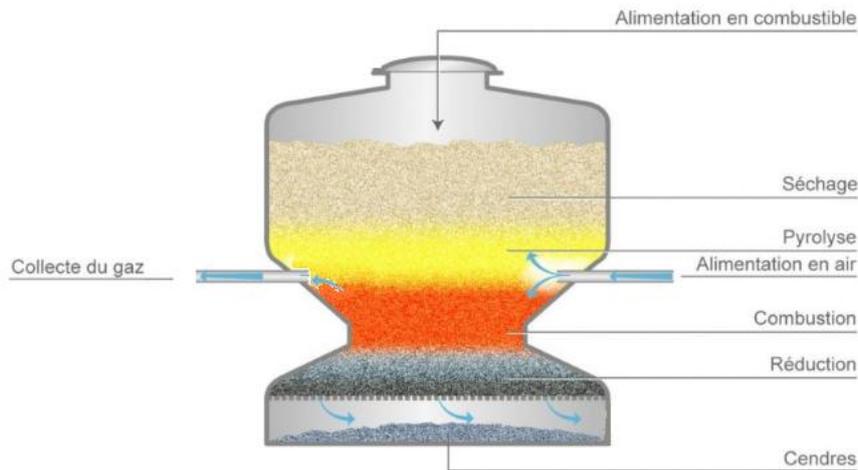


Figure 17 : Schéma du gazéifieur Xylowatt (Belgique) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)

- Les gazéifieurs à courant-croisé

Dans ces procédés de gazéification, les orifices d'injection d'agent gazéifiant et d'extraction des gaz produits se trouvent de part et d'autre du réacteur. Les gaz produits au cours de ce processus sont évacués à haute température, fortement chargés en goudrons et avec un faible rendement thermique (Mc kendry, 2002).



**Figure 18 : Schéma de principe du réacteur de gazéification à courant-croisé**

➤ Les gazéificateurs à lit fluidisé

Les gazéificateurs à lit fluidisés sont des réacteurs contenant un combustible solide en suspension avec des particules de matériau inerte comme le sable, la dolomite ou l'alumine. Cette fluidisation permet d'obtenir de bons transferts thermiques tout en assurant un bon mélange. Elle impose également une granulométrie faible pour les particules de déchets entrantes nécessitant alors un pré-broyage. Ce procédé implique la présence de techniques de traitement du gaz produit du fait de sa forte concentration en particules. En classant les réacteurs en fonction de leur vitesse de fluidisation, on peut différencier les gazéificateurs à lit dense, à lit fluidisé circulant.

• Les gazéificateurs à lit dense

Ces gazéificateurs permettent un brassage des particules sans entrainement à l'extérieur du lit grâce à des vitesses de circulation assez faibles de l'ordre de 1-2 m/s. Ils nécessitent des tailles de particules solides bien précises pour fournir un rendement optimal, ce qui en font des procédés restrictifs en terme d'exploitation. Les procédés HTW (Winkler) et Biosyn (Enerkem Tech.Inc./Biothermica) en sont les parfaits représentants (Figure 19 et Figure 20).

CHAPITRE I : Introduction

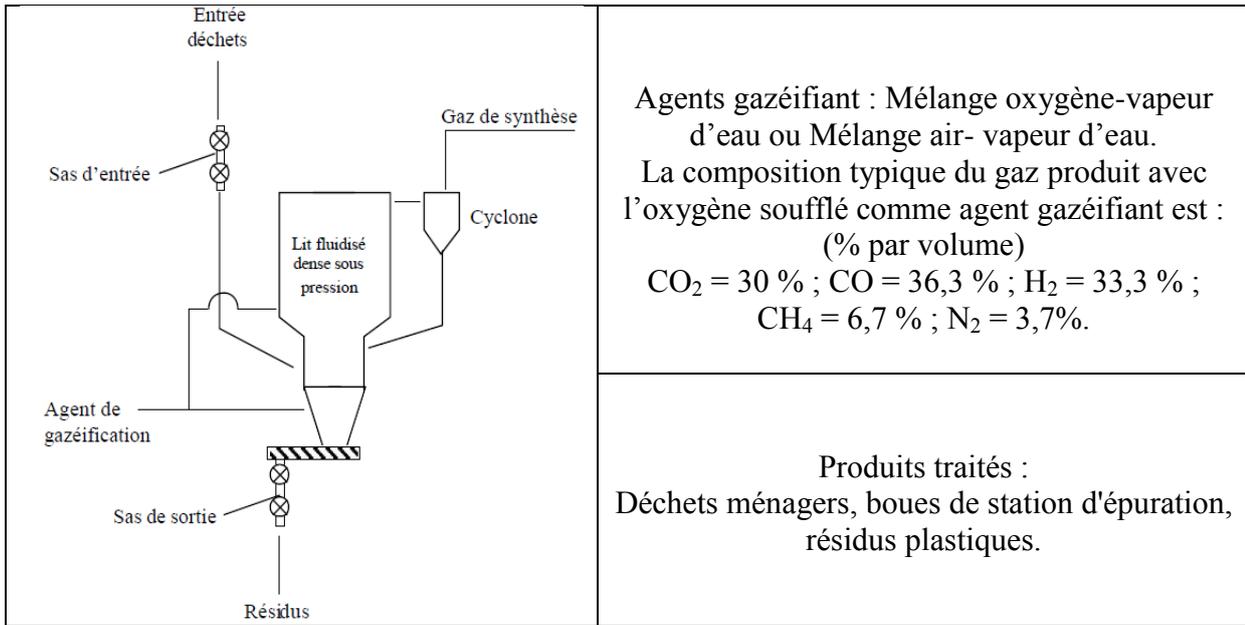


Figure 19 : Schéma du Procédé HTW (Winkler) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)

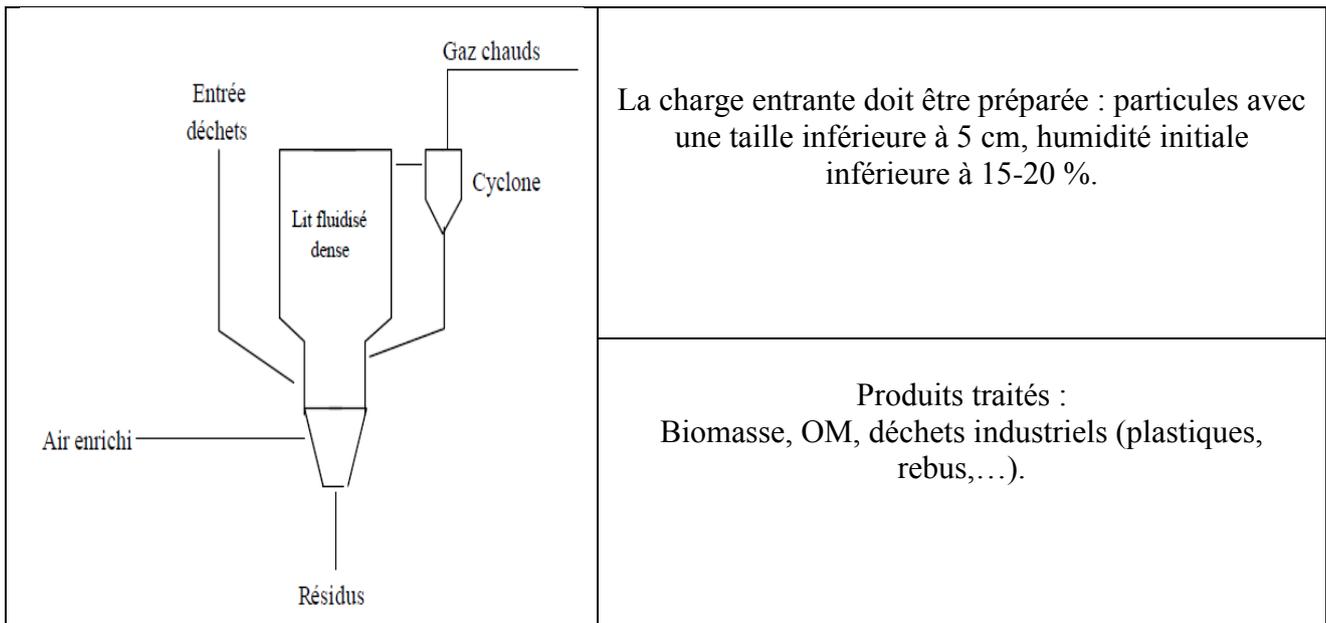


Figure 20 : Schéma du procédé Biosyn (Enerkem Tech.Inc./Biothermica) (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)

- Les gazéificateurs à lit fluidisé circulant

Dans ce type de procédé une partie de la charge est entraînée hors du réacteur du fait d'une vitesse de circulation plus élevée et de l'ordre de 4-6 m/s. Un cyclone permet une recirculation des particules solides dans le lit. Ces gazéificateurs sont beaucoup plus tolérants que les lits fluidisés denses au niveau de la taille des particules. Ici, les procédés Lurgi CFB et Foster Wheeler sont pris comme exemple (Figure 21 et Figure 22).

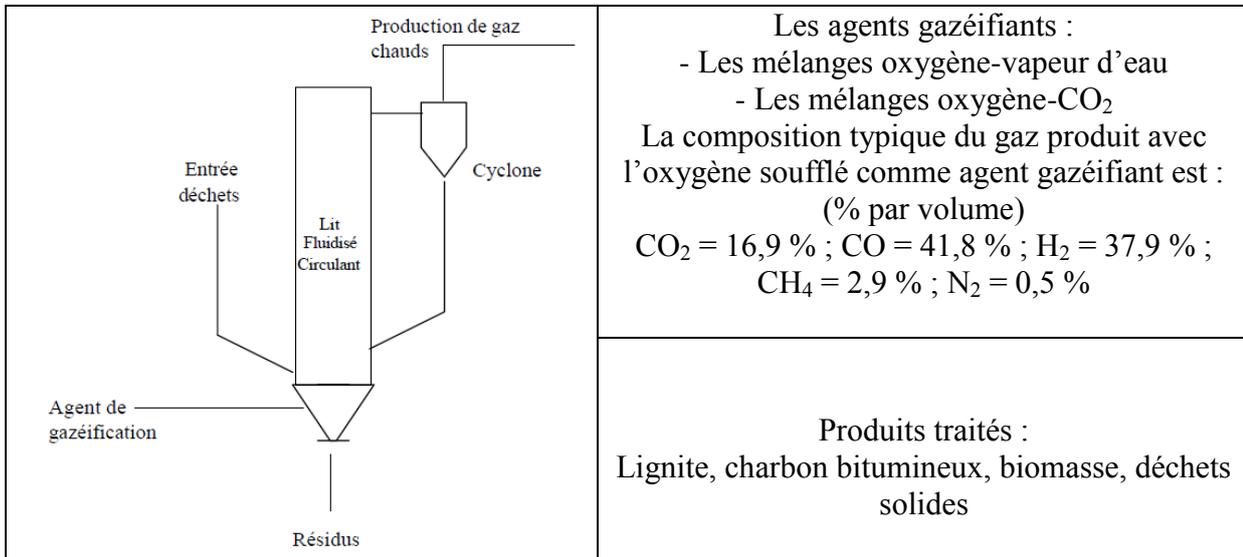


Figure 21 : Schéma du gazéificateur Lurgi CFB (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)

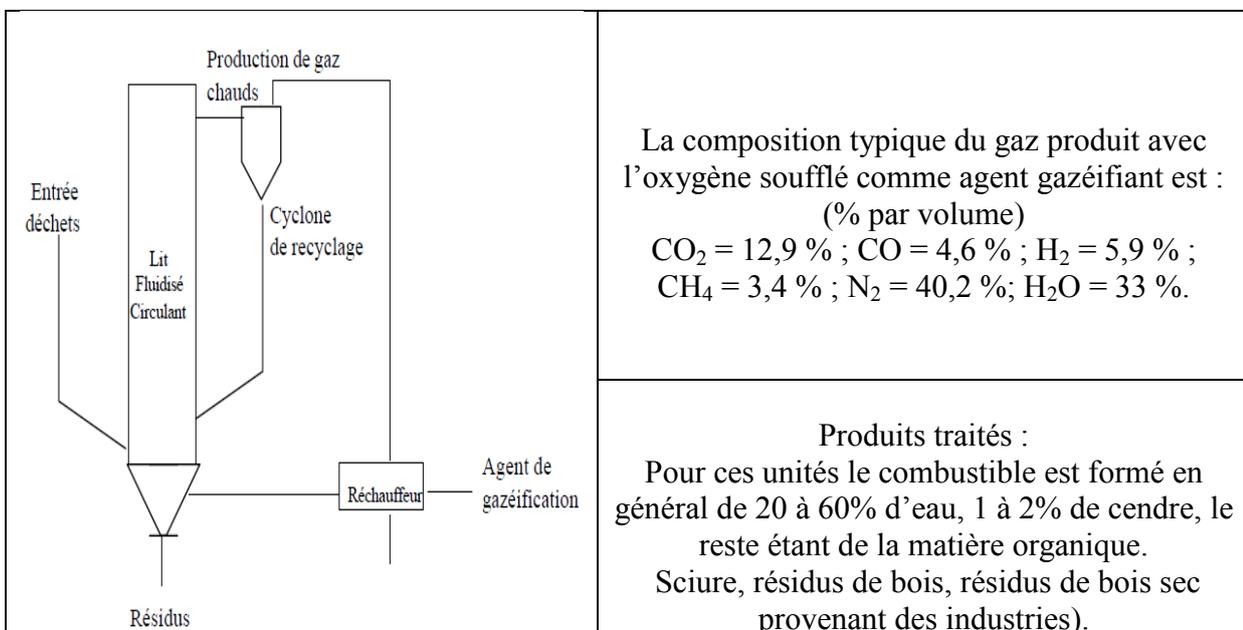


Figure 22 : Schéma du procédé Foster Wheeler atmosphérique CFB (source : ADEME/PROCEDIS, 2001)

### ➤ Les gazéificateurs à flux entraînés

La vitesse de fluidisation de ce type d'installation est nettement supérieure à 6 m/s avec des vitesses de gaz et de particules assez proches. Les réactions se font à très haute température, aux environs de 1200-1500°C, lors de l'injection sous forme pulvérulente du combustible produisant un Syngaz de faible teneur en goudrons. Les inconvénients de ce type de procédé résident dans la granulométrie faible du combustible qui implique une préparation onéreuse et difficile du combustible, mais aussi dans la conversion incomplète du solide du fait des faibles temps de séjour.

#### *1.1.1.e Le procédé CHO-Power*

En réponse à la sous-exploitation du potentiel énergétique de la biomasse et des déchets, le groupe Europlasma a imaginé le procédé CHO-Power. Avant de décrire précisément ce procédé en construction et dont le démarrage se fera courant 2012, une présentation du groupe est donnée.

Le groupe français Europlasma fut fondé en 1992 et a pour cœur de métier la conception et la commercialisation de torches à plasma. Ce groupe s'est spécialisé plus récemment dans les technologies propres et la production d'énergie renouvelable. Il rassemble quatre unités principales et 260 collaborateurs fermement engagés en faveur du développement durable et experts dans le traitement et la valorisation des déchets. La première entité est Europlasma, dont l'activité est le développement, la production et la commercialisation de solutions de traitement des déchets et de production d'énergie sur la base de sa technologie propriétaire de la torche à plasma. La seconde, Inertam, est le spécialiste mondial de l'élimination et de la valorisation des déchets d'amiante et des déchets dangereux. Puis, Europe Environnement, qui est le leader européen des systèmes de ventilation et de dépollution de l'air en milieu industriel. Enfin, CHO Power est un producteur d'électricité par gazéification des déchets et est également le nom du procédé présenté dans la suite de ce paragraphe.

Quelques dates clés permettent de mieux connaître le groupe :

1995 : Premier contrat d'installation d'une unité pilote de vitrification de résidus d'incinération (Cenon, Communauté Urbaine de Bordeaux – France).

## CHAPITRE I : Introduction

- 2000 : Validation de l'éco-compatibilité du vitrifiât produit à l'unité de Cenon dans le cadre du programme Vivaldi. Accord de recherche et développement avec le CEA pour une collaboration sur une unité de traitement de déchets très faiblement actifs (TFA).
- 2002 : Signature avec Hitachi Zozen (Hitz) d'un accord de licence, Hitz étant le leader japonais de l'équipement des incinérateurs.
- 2003 : Le site Inertam de Morcenx devient le seul site au monde autorisé pour la destruction d'amiante par vitrification (Convention de Bâle)
- 2005 : Accord de collaboration avec un certain nombre de partenaire dont le CEA, le CNRS et l'UPPA pour la conversion de biomasse et de déchets en bio-diesel (programme Galacsy).
- 2006 : Europlasma prend une participation dans Europe Environnement, société spécialisée dans le traitement de l'air et des gaz industriels. L'Agence Nationale pour la Recherche (ANR) aide à financer la première étape du programme Galacsy.
- 2007 : Placement privé de 11 millions d'euros de Crédit Suisse afin de donner à l'entreprise l'envergure nécessaire pour devenir un acteur crédible sur le marché de la production d'électricité à partir de déchets et de biomasse par le procédé de gazéification plasma (concept CHO Power). Thèse, CIFRE entre Europlasma et le LaTEP, d'A. Fourcault sur la modélisation d'un étage haute température alimenté par une torche à plasma pour la dégradation des goudrons présents dans les gaz de synthèse.
- 2008 : Lancement de plusieurs sites de production d'électricité (Portugal : 8MW, Canada : 20MW, Pays de Galles : 13MW). Thèse, CIFRE entre Europlasma et le LaTEP, d'A. Deydier sur la modélisation et la simulation d'un gazéifieur auto-thermique à lit fixe du procédé CHO-Power.
- 2009 : Lancement du programme ANR TBPL 2009 dans le lequel le LaTEP participe, via la thèse de R. Demarthon, à l'optimisation du réacteur Turboplasma® permettant le craquage des goudrons issus de la gazéification.
- 2010 : Démarrage des travaux de construction de CHO Morcenx pour une mise en service courant 2012.

Chaque année plus de 230 millions de tonnes de déchets sont enfouies ou incinérées en Europe et d'importants gisements de biomasse ne sont pas valorisés. Le procédé CHO-Power (Figure 23 et Figure 24) propose une solution innovante basée sur la gazéification de déchets (refus de tri et biomasse) pour la production d'électricité. Cette valorisation des déchets devrait permettre d'obtenir des rendements électriques de l'ordre de 40%, supérieurs à ceux de l'incinération (environ 20%).

## CHAPITRE I : Introduction

De plus, ce procédé tente de répondre favorablement au problème d'acceptation sociétale de ce type d'installation grâce à une taille raisonnable permettant l'intégration dans le paysage local. Cette acceptation est d'autant plus facile que ce procédé semble être capable de proposer une solution de gestion des déchets efficace et respectueuse de l'environnement via une diminution des émissions de CO<sub>2</sub> et en évitant la mise en décharge des refus de tri. D'un point de vu quantitatif, ce procédé permet la production de 90000 MWh/an à partir de 51500 tonnes de déchets et biomasses provenant des environs proches.

D'un point de vue technique, la principale innovation réside dans le couplage d'un gazéifieur à lit fixe à un étage haute température de purification du Syngaz, appelé Turboplasma. La description et le dimensionnement de cette technologie ont fait l'objet d'une précédente thèse CIFRE entre la société Europlasma et le LaTEP (Fourcault, 2010). Ce raffinage par torche à plasma, du fait de teneurs en goudrons trop importantes en sortie de gazéifieur, apporte une réelle valeur ajoutée au procédé classique de gazéification en lit fixe. Le procédé peut ainsi atteindre 40% de rendement électrique contre 18-20% pour un cycle de combustion et une turbine vapeur, faisant de ce type d'installation une véritable centrale électrique.

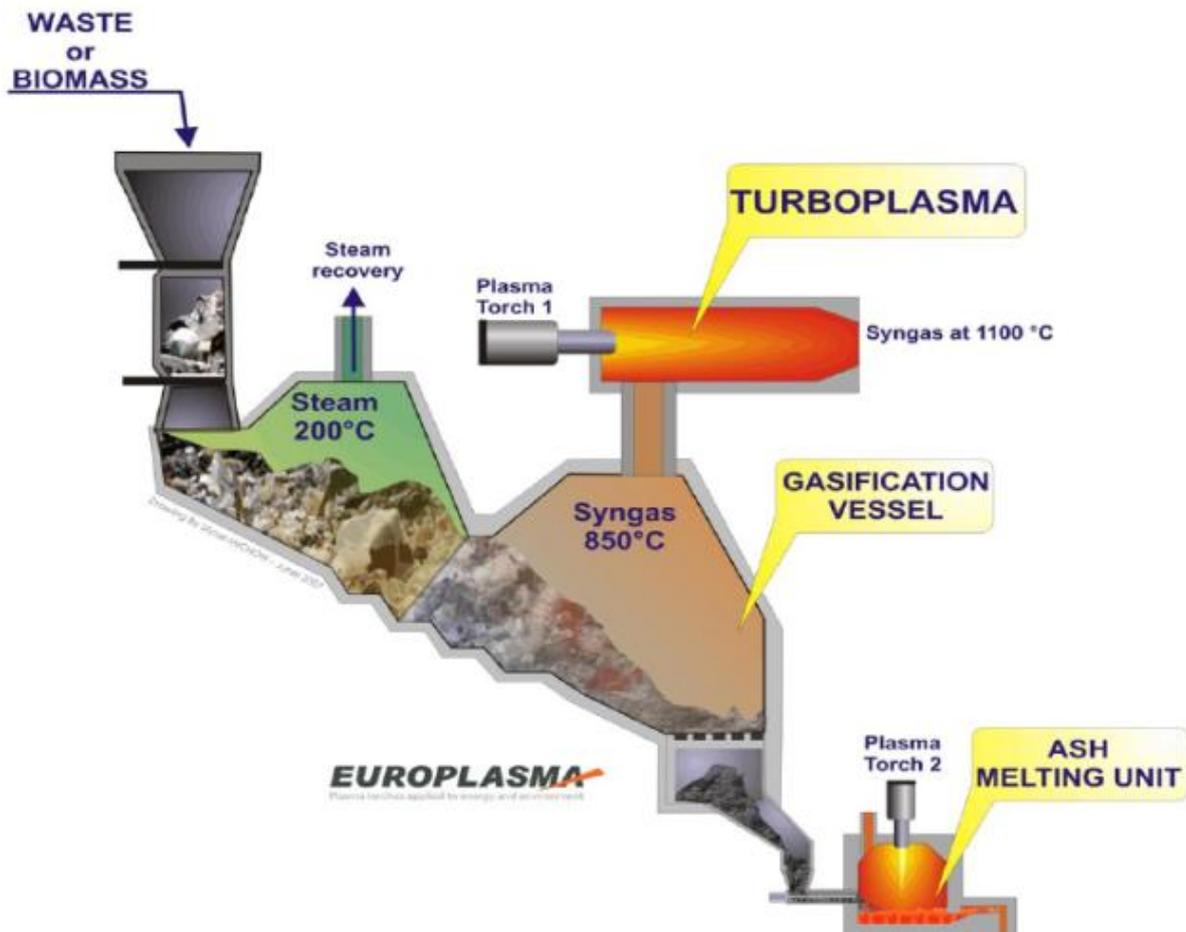


Figure 23 : Le procédé de gazéification CHO-Power



Figure 24 : Schéma de principe de CHO-Power

Le processus de gestion des déchets par gazéification se déroule de la manière suivante : dans un premier temps, le déchet et la biomasse sont traités afin de satisfaire les contraintes de granulométrie, d'humidité, de teneur en métaux et de matériaux inertes. Cet ensemble est mélangé dans une zone tampon afin d'assurer un fonctionnement optimal via l'obtention d'un combustible homogène (CHO-Fuel). Il est ensuite introduit dans un gazéifieur auto-thermique à lit fixe (de type courant croisé), qui est alimenté par de l'air chauffé à 600°C et à pression atmosphérique, pour produire un premier gaz, appelé Product gaz. Ce gaz, riche en CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO et en goudrons, est alors raffiné par craquage thermique des goudrons à haute température (entre 1200°C et 1400°C) grâce au réacteur Turboplasma afin d'obtenir un Syngaz propre. Il est ensuite refroidi dans une chaudière produisant de la vapeur (elle-même conduisant à la production d'électricité grâce à une turbine à vapeur) avant d'être orienté vers les moteurs à combustion interne, producteurs d'électricité.

### 1.1.1.f Conclusions

Dans cette première partie, nous avons vu les intérêts que peut représenter la valorisation de déchets. Alors que nous venons de présenter le procédé CHO-Power, le paragraphe I.1.1.d.iii a mis en lumière les grandes lignes des principaux procédés de gazéification existant. Afin de mieux appréhender les phénomènes physico-chimiques de la gazéification, de nombreux auteurs proposent différents types de modèles que nous allons décrire maintenant.

## **I.1.2 Les différents types de modèles**

Avant d'aborder une revue bibliographique des différents modèles de gazéification existants, une présentation des processus pertinents se déroulant lors de la gazéification ainsi que des échelles d'observation possibles des processus est proposée.

### ***I.1.2.a Les processus pertinents de la gazéification***

Le processus de gazéification peut être divisé en trois grandes étapes que sont le séchage, la pyrolyse et la gazéification à proprement parlé. Ces trois étapes sont le lieu de phénomènes et processus divers qui vont être présentés en suivant.

Dans un premier temps, le séchage a pour objectif d'éliminer l'eau initialement présente dans le déchet/la biomasse par évaporation ou par ébullition. Dans le cas de la gazéification, cette étape consiste à mettre le produit en contact avec le gaz s'écoulant dans et autour du milieu à sécher. Ainsi, le séchage s'effectue par changement d'état de l'eau liquide (libre ou liée) en vapeur du fait des valeurs locales de la température et de la pression. L'apport d'énergie, par convection et/ou diffusion et/ou rayonnement, nécessaire pour cette opération, correspond à la chaleur latente de vaporisation dans le cas de l'eau libre. En dessous du point de saturation, la vaporisation de l'eau liée nécessite une énergie supplémentaire pour désorber l'eau liée à la matrice solide. De plus, sous l'effet des gradients de pression internes, il peut également y avoir migration de la phase liquide au sein du milieu pour ensuite être évaporée aux surfaces en contact avec le milieu environnant. Le séchage implique donc une modification des propriétés et la structure du milieu à gazéifier. Une fois le séchage effectué, la chaleur apportée au milieu par l'agent de gazéification ou par rayonnement du milieu environnant permet d'enclencher la pyrolyse du solide.

La pyrolyse est une décomposition thermo-chimique en absence d'oxygène. Lors de cette opération la chaleur nécessaire est fournie au milieu par convection, par l'intermédiaire de l'agent de gazéification introduit dans le réacteur de traitement, par conduction de la chaleur et par rayonnement du milieu environnant. La pyrolyse est modélisée par un ensemble de mécanismes complexes faisant intervenir à la fois des réactions homogènes et hétérogènes. Etant globalement athermique, la pyrolyse ne produit ni ne consomme d'énergie durant son déroulement. Enfin, les gaz produits sont évacués par convection mais aussi par diffusion vers le milieu environnant. A lieu également le reformage de gaz par réactions homogènes à partir des produits gazeux de la pyrolyse. La gazéification du char produit lors de la pyrolyse, dernière étape du processus, peut alors avoir lieu.

## CHAPITRE I : Introduction

La gazéification se produit lorsque des niveaux thermiques suffisants sont atteints au sein du milieu. Ces niveaux proviennent de l'apport de chaleur par convection, conduction et rayonnement mais aussi par la production locale de chaleur au sein du milieu par le biais des réactions hétérogènes et homogènes caractéristiques de cette étape. Cette production de chaleur, provenant souvent de l'oxydation partielle du char mais aussi de l'apport depuis le milieu extérieur, est un facteur important dans la réalisation de la gazéification. En effet, c'est principalement cette production qui va permettre d'enclencher les réactions de gazéification à la vapeur d'eau et au dioxyde de carbone du char. Les produits sont ensuite évacués par convection et par diffusion vers le milieu environnant.

Il est donc possible d'identifier les phénomènes pertinents du processus de gazéification comme étant (Marias, 2005):

- Les transferts de matière : ils sont principalement impliqués dans l'alimentation des réactifs et dans l'évacuation des produits gazeux issus des réactions hétérogènes et homogènes. Ils caractérisent le transport des différentes phases présentes dans le milieu. Ils s'opèrent par convection et par diffusion.
- les transferts d'énergie : ils s'effectuent par l'intermédiaire des trois modes de transmission de la chaleur par convection, conduction et rayonnement. Les réactions chimiques hétérogènes et homogènes sont également des sources ou des puits de chaleur au sein du milieu.
- les transferts de quantité de mouvement : ils sont particulièrement dus à l'évacuation des produits des réactions hétérogènes et homogènes qui peuvent s'opérer avec une certaine quantité de mouvement. Ce transfert peut être également réalisé par le mouvement d'une phase par rapport aux autres au sein du milieu.
- les changements d'état : aux vues des valeurs locales de pression et de température, l'eau (dans notre cas de gazéification), peut changer d'état par évaporation.
- les réactions hétérogènes : les surfaces en contact avec un réactif présent en phase gaz réagissent, lors de l'oxydation du milieu, pour produire une multitude de constituants gazeux. Nous assimilons également les dégradations thermo-chimiques à des réactions hétérogènes bien que celles-ci ne font pas intervenir de coréactif gazeux.

- les réactions homogènes : les produits des réactions hétérogènes sont dégagés en phase gaz et se retrouvent alors en présence de co-réactifs où ils réagissent en phase homogène.
- les modifications des propriétés physiques et de la structure interne et externe du milieu gazéifié : les réactions chimiques ont pour effets de modifier les compositions, la température et la pression impliquant des modifications des propriétés chimiques (densité, diffusion thermique, coefficients de diffusion, ...). De plus, les réactions hétérogènes consomment du solide, ce qui se traduit par une modification de la structure interne et externe du milieu.

### *1.1.2.b Les échelles d'observation*

Il existe alors trois échelles possibles pour l'observation des phénomènes précédemment décrits, se produisant lors de la gazéification, qui vont de l'échelle du pore jusqu'à l'échelle du réacteur. L'introduction de ces trois échelles est nécessaire pour la description complète de l'ensemble des phénomènes physicochimiques se produisant lors de la transformation et de la dégradation des déchets (Marias, 2005 ; Mermoud, 2006).

- L'échelle du pore est la plus petite échelle d'observation. Elle permet généralement de déterminer les cinétiques intrinsèques de réaction, dans la mesure où les transferts de masses et d'énergie jouent des rôles limités. C'est à cette échelle que l'on observe la dégradation effective de la matière lors des processus de traitement des déchets.
- L'échelle de la particule est une échelle intermédiaire d'observation. Elle permet de mieux appréhender comment une particule échange matière et énergie avec son milieu environnant. Compte tenu de la taille des particules le plus souvent considérées (quelques cm), de forts couplages entre cinétique de réaction et transfert massiques et thermiques interviennent au sein de la particule. A cette échelle, la particule est assimilée à un milieu poreux.
- L'échelle du réacteur permet de caractériser la mise en contact et le mouvement des phases à l'intérieur du réacteur de traitement ainsi que les interactions entre le réacteur lui-même et le milieu réactionnel. Dans le cas du lit de particules, chaque tranche de réacteur est assimilée à cette échelle à un milieu poreux.

## CHAPITRE I : Introduction

Ces trois approches sont utilisées pour l'écriture des différents modèles permettant de décrire et de comprendre les processus de traitement de déchets et de biomasse qui sont présentés dans la partie suivante.

### *1.1.2.c Les modèles existants*

Dans les faits, il est possible de considérer quatre grands types d'approche pour la modélisation et la simulation des procédés de gazéification :

- les modèles dit d' « équilibre thermodynamique »
- les modèles de particules
- les modèles de lits de particules
- les modèles de type lit poreux.

Tout d'abord, les modèles d'équilibre thermodynamique permettent une prédiction de la production de gaz et de résidus dans le cas idéal, où l'équilibre thermodynamique serait atteint dans le réacteur, pour un système réactif donné (Li et al., 2001). Les modèles d'équilibre ne prennent ni en compte les caractéristiques géométriques du gazéifieur ni l'aérodynamique de l'enceinte. En effet, ils permettent d'avoir uniquement une vision idéale des phénomènes à l'échelle du réacteur.

Les modèles de particules sont développés dans le but de comprendre dans un premier temps puis de prédire les phénomènes physicochimiques et mécaniques ayant lieu lors de la dégradation/transformation d'une particule de déchets ou de biomasse. Ils permettent principalement l'étude des couplages entre les cinétiques chimiques et les transferts au sein d'une particule. Ces modèles sont également la base des modèles de lit de particules qui eux s'intéressent au réacteur de traitement dans sa globalité et non plus à une particule isolée.

Les modèles de lit de particules ont pour objectif la compréhension et la prédiction des phénomènes physicochimiques et mécaniques à l'échelle du lit dans son intégralité. Ils permettent de prédire les zones où se déroulent les différentes réactions chimiques, de connaître le profil de conversion du solide et de mettre en évidence le profil thermique au sein du lit. Ces modèles sont une aide à la conception de procédé par la prise en compte de l'ensemble des caractéristiques géométriques du gazéifieur.

Enfin les modèles de milieu poreux se basent sur l'écriture et la résolution des équations de conservation. Cette description est plus complète puisque, s'appuyant sur une formulation rigoureuse de type mécanique des milieux continus à l'échelle des phases, elle permet de prendre en compte l'ensemble des échanges de matières et d'énergie à cette échelle et de considérer les

réactions chimiques pouvant y avoir lieu. Ainsi ces modèles permettent de combiner l'approche à l'échelle du pore pour décrire les transports internes et celle à l'échelle du réacteur donnant les différents profils au sein du réacteur, offrant ainsi une description complète des phénomènes pertinents lors de la gazéification.

### **I.1.2.c.i Les modèles d'équilibre thermodynamique**

Les résultats des modèles d'équilibre thermodynamique, malgré leur indépendance par rapport au design du gazéifieur, sont intéressants dans le cas d'une étude de l'influence des paramètres opératoires du procédé comme le type de combustible, les différents débits,... Alors que dans la réalité les équilibres thermodynamiques et chimiques ne sont pas forcément atteints à l'intérieur d'un réacteur de traitement, les modèles d'équilibre permettent d'obtenir une bonne première approximation du potentiel de gazéification ainsi que de la composition du gaz obtenu. Par contre, ces modèles sont limités par la non prise en compte des paramètres géométriques et de l'aérodynamique, ne permettant d'obtenir qu'un cas idéalisé pour la gazéification. Une fois le modèle d'équilibre chimique écrit, le passage à la résolution numérique peut se faire via l'un des deux paramètres équivalents suivants :

- l'introduction des constantes d'équilibre
- la minimisation de l'énergie libre de Gibbs

Historiquement, avant 1958 les auteurs ont commencé par utiliser une formulation à l'aide des constantes d'équilibre, puis ils sont passés dans la majeure partie des cas à une modélisation par minimisation de l'énergie libre de Gibbs. A l'équilibre chimique, le système réactif est à son état de composition le plus stable à condition que l'entropie du système soit maximisée par la minimisation de l'énergie libre de Gibbs.

Bridgwater (1995) considère que du fait des relatives faibles températures opératoires lors des processus de la gazéification, environ 750-1000°C pour le gaz sortant, l'équilibre chimique ne peut pas être atteint. Néanmoins, beaucoup d'auteurs ne tiennent pas compte de cette restriction et utilisent le modèle d'équilibre. Ainsi, Bacon et al. (1985), Double et al. (1989), Ruggiero et Manfreda (1999), Zainal et al. (2001), Schuster et al. (2001), Altafini et al. (2003), Li et al. (2001 ; 2004), Melgar et al. (2007), Jarunghammachote et Dutta (2007 ; 2008), Huang et Ramaswamy (2009) et Haryanto et al. (2009) utilisent une modélisation par équilibre thermodynamique avant le passage à la simulation pour les gazéifieurs commerciaux. Ces différents modèles s'appuient sur les deux approches possibles suivantes :

- l'approche non-stœchiométrique
- l'approche stœchiométrique

## CHAPITRE I : Introduction

Lors de l'approche non-stœchiométrique, le modèle se base uniquement sur la minimisation de l'énergie libre totale de Gibbs dans le système sans spécifier les réactions pouvant y avoir lieu. Dans cette approche, seule la composition élémentaire pouvant être facilement obtenue à l'aide de l'analyse ultime doit être impérativement spécifiée ainsi que les espèces produites (Li et al. 2004).

Pour l'approche stœchiométrique, chaque mécanisme réactionnel doit être précisément décrit et l'ensemble des espèces impliquées identifié. Le choix des espèces présentes repose sur la volonté d'avoir celles étant majoritaires c'est-à-dire celles qui ont la plus faible énergie libre de formation. Ainsi, Desrosiers (1979) et Prins et al. (2003) considèrent que seules les espèces chimiques présentes dans des concentrations supérieures à  $10^{-4}$  mole par  $m^3$  soit à terme CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et le carbone graphite doivent être traitées.

Pour Smith (1982) et Jarunghammachote (2007), les deux approches sont sensiblement équivalentes du fait que le modèle stœchiométrique utilise un ensemble de données provenant de l'énergie libre pour déterminer la valeur des constantes d'équilibre. De plus, tous ces modèles d'équilibre sont basés sur un certains nombres d'hypothèses pour la modélisation comme les énumèrent Prins et al (2007) :

- ❖ Le réacteur est considéré comme une boîte noire à zéro dimension.
- ❖ Le gazéifieur est parfaitement isolé et ne subit aucune perte d'énergie vers l'extérieur. Dans la pratique, le gazéifieur perd de la chaleur vers le milieu extérieur mais ces termes peuvent être pris en compte lors de l'écriture du bilan enthalpique du système considéré.
- ❖ On suppose un mélange parfait et une température uniforme.
- ❖ Les vitesses de réactions sont suffisamment rapides par rapport au temps de séjour pour atteindre l'équilibre thermodynamique.
- ❖ On considère que le jeu de réactions chimiques ne fait pas intervenir d'intermédiaires réactionnels.
- ❖ On ne modélise pas les goudrons.

Néanmoins ce jeu d'hypothèses pose le problème qu'à faible température se produit une surestimation de la production de H<sub>2</sub> et CO accompagné d'une sous-estimation pour le CO<sub>2</sub>.

Zainal et al (2001) proposent un modèle d'équilibre thermodynamique stœchiométrique pour simuler la production de gaz issus de la gazéification de différents types de biomasse. Jarunghammachote et Dutta (2007) s'intéressent eux à un gazéifieur co-courant, « downdraft » via un modèle de constante d'équilibre. Ils apportent des corrections sur les réactions de méthanisations et « shift » afin de proposer une amélioration aux modèles existants. Ils ont ainsi obtenu une série de coefficients correcteurs en comparant leur modèle avec les résultats expérimentaux de Jayah et al

(2003).

Jarunghammachote et Dutta (2008) proposent également un modèle non-stœchiométrique pour la simulation de trois gazéificateurs différents. Ils montrent ainsi des déviations significatives des résultats de simulations par rapport à des données expérimentales, et particulièrement sur le CO et le CO<sub>2</sub>. Schuster et al (2001) présentent un modèle d'équilibre pour l'étude de la gazéification de biomasse à la vapeur d'eau en lit fluidisé. Les résultats obtenus par ce modèle sont dans la gamme des résultats expérimentaux, exception faite d'une surestimation de la production de CH<sub>4</sub>. Malgré cette différence, ils montrent que cela n'a pas d'influence significative dans l'efficacité globale du système.

Li et al (2001) utilisent un modèle d'équilibre non-stœchiométrique afin d'estimer la composition du gaz issu d'un gazéificateur de charbon en lit fluidisé circulant. Ils observent un écart par rapport à la réalité, qu'ils tentent de résoudre par l'introduction d'un modèle phénoménologique modifiant les équilibres initiaux. Cette méthode a permis de simuler avec succès la gazéification de charbon.

Dans le cadre de la collaboration entre le LaTEP et Europlasma, un modèle d'équilibre a été développé pour simuler le processus de gazéification du procédé CHO-Power. L'écriture de ce modèle, sa validation par rapport à la littérature ainsi que l'analyse de quelques résultats sont présentés au paragraphe I.2.1.

En conclusion de ce paragraphe consacré aux modèles d'équilibre thermodynamique, on notera que ces modèles permettent donc une première approximation des compositions de gaz pour la majeure partie des gazéificateurs commerciaux. D'après Villanueva et al. (2008), les équilibres chimiques se présentent comme de bonnes approches pour la simulation de gazéificateurs à lit entraîné, et arrivent à des conclusions similaires pour les gazéificateurs à lit fixe co-courant. Pour les autres gazéificateurs, une modélisation par modèle d'équilibre modifié doit être préférée en première approximation. Les modèles thermodynamiques offrent une vision à l'échelle du réacteur mais reposent sur un grand nombre d'hypothèses. Ils ne permettent pas une description des phénomènes de transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Les modèles de particules présentés en suivant permettent une description plus précise à l'aide d'une vision focalisée sur une seule particule solide poreuse.

### **I.1.2.c.ii Les modèles de particules**

Nombre d'auteurs se sont intéressés à la modélisation de la transformation thermochimique d'une particule poreuse. Dans la plus part des cas, les modèles développés sont des modèles à une dimension. Ainsi, les modèles simplifiés de Gurgel Veras et al. (1999), Gobel et al. (2001) et He et

## CHAPITRE I : Introduction

al. (2003) sont basés sur deux types d'approches. La première est celle dite à cœur réagissant pour laquelle les réactions sont uniformes dans toute la particule. La seconde est l'approche à « cœur rétrécissant » dans laquelle les réactions sont initiées à la surface de la particule et se déplacent avec un front de réaction qui va vers le centre de la particule en laissant derrière lui un produit solide de même densité apparente que le solide initial. Néanmoins, la grande majorité des modèles s'intéressent à l'écriture et à la résolution des équations de conservation au sein de la particule comme Dasappa et al. (1994,1998), Peters et Bruch (2001) et Wang et Bhatia (2001).

Dasappa et al. (1994) proposent un modèle de particule sphérique isolée pour la gazéification dans un mélange gazeux majoritairement constitué de CO et CO<sub>2</sub>. Ils décrivent l'ensemble des phénomènes de transferts de masse et d'énergie au sein du milieu par l'intermédiaire des équations de conservation. La modélisation des termes réactifs est basée sur les mécanismes d'adsorption de Langmuir-Hinshelwood pour l'écriture des cinétiques de réaction. Alors que les résultats de simulation sont bons pour un taux de conversion inférieur à 60% pour une gazéification au CO<sub>2</sub>, ceux obtenus pour le modèle étendu à la gazéification à la vapeur d'eau sont beaucoup plus éloignés des résultats expérimentaux.

Peters et Bruch (2001) modélisent, pour leur part, l'ensemble des réactions de dégradations thermochimiques, dont celle de la gazéification, d'une particule dans un cas monodimensionnel. Cette modélisation basée sur les équations de conservation propose des cinétiques simples, permettant de décrire les diverses transformations, afin de couvrir une plus grande variété de phénomènes de dégradation (pyrolyse, combustion et gazéification) et ce avec une description très simplifiée du transport convectif au sein de la particule.

Les deux modèles précédents, au contraire du modèle de Wang et Bhatia (2001), ne tiennent pas compte des effets de la fragmentation sphérique, de la fracturation de la particule et de la formation d'une couche de cendres inertes à la surface de celle-ci. Ainsi, Wang et Bhatia prennent en compte l'évolution de la structure de la particule de char en considérant toutefois les transformations uniformes afin de conserver un modèle monodimensionnel. Ce modèle n'a pour l'heure pas pu être validé expérimentalement.

Enfin, Mermoud (2006) reprend le modèle existant développé par Golfier pour la gazéification d'une particule sphérique de charbon de bois. Etabli à partir des équations de conservation de la masse et de l'énergie, ce modèle propose de considérer la réaction de gazéification à la vapeur d'eau comme prépondérante au sein de la particule. La modélisation de cette réaction est effectuée à l'aide du mécanisme réactionnel de Langmuir-Hinshelwood. Ce modèle a pu être validé par l'expérience et permet aujourd'hui de décrire la situation thermochimique d'une particule lors de la gazéification. De plus, il a également mis en lumière l'incompatibilité d'un modèle à cœur

réagissant pour la gazéification. Pour finir, il pose également les bases d'un modèle de lit de particules permettant de mieux comprendre les réactions en phase gaz et d'avoir une vision globale du gazéifieur.

### **I.1.2.c.iii Les modèles de lit de particules**

Les modèles de lit de particules sont une extension du modèle de particules dans lesquels le lit est représenté par un nombre fini de particules. Le lit ainsi formé est alors considéré comme un milieu poreux. Dans la grande majorité des modèles s'intéressant à une approche poreuse du réacteur, les auteurs choisissent l'approche lit de particules (Di Blasi, 2000 ; Bruch et al., 2002 ; Ménard, 2003 ; Asthana, 2008 ; Tinaut, 2008 ; Ratte, 2009 ; Sharma, 2011).

Di Blasi (2000) a formulé un modèle mathématique de lit de particules décrivant les principaux phénomènes chimiques et physiques entrant en jeu lors de la gazéification de lit fixe co-courant de composés ligno-cellulosiques. L'innovation principale de ce modèle provient de la description de la pyrolyse à l'aide de réactions du premier ordre pour la pyrolyse et du second ordre pour le craquage des goudrons et la combustion du CO, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> et d'une partie des goudrons.

Bruch et al. (2002) proposent également un modèle s'intéressant au bois par une approche de type lit de particules, mais ici dans un cas de combustion en lit fixe. Ce modèle tient compte des différentes étapes se produisant lors de la combustion que sont le séchage, la pyrolyse, la gazéification et la combustion, le tout dans un cas monodimensionnel. En se basant sur les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour la description de la combustion en phase gaz, ce modèle permet d'obtenir des résultats satisfaisants au regard de la bibliographie expérimentale existante.

En conservant cette approche monodimensionnelle Tinaut et al. (2008) ont développé un modèle pour la gazéification de biomasse en régime permanent. Ce modèle introduit les principaux phénomènes permettant la dégradation de la biomasse en combustible gazeux, et considère que le gaz produit peut être utilisé tel quel dans des moteurs à combustion interne. Une étude de sensibilité a été faite sur la taille des particules de biomasse et la vitesse d'air de gazéification. Les simulations et les résultats expérimentaux ont ensuite permis de valider le modèle.

Ménard (2003) propose un modèle bidimensionnel de lit de particules pour la combustion d'une charge d'ordures ménagères sur une grille d'incinérateur industriel. Ce modèle, où la diffusion et la conduction en phase gaz sont négligées, est développé en régime permanent. Il permet notamment d'étudier les effets de la répartition de l'air primaire et d'autres paramètres opératoires comme le préchauffage par exemple. Il montre ainsi comment ce modèle mathématique aide à la

## CHAPITRE I : Introduction

compréhension des phénomènes physicochimiques couplés prenant place au sein du lit d'ordures ménagères, et comment il peut être un outil de dimensionnement et d'optimisation de ce type d'installation. En effet, la connaissance de la répartition des différents profils de concentration, pression et température sont des informations capitales pour l'amélioration du procédé.

Asthana (2008) reprend les travaux de Ménard (2003) sur la modélisation bidimensionnelle en régime permanent de la combustion d'un lit de déchets sur une grille mobile d'incinération. Il ajoute au modèle existant la prise en compte du brassage de charge sur la grille et introduit la modélisation des métaux lourds ainsi que la description de la formation et destruction des oxydes d'azotes. Ce modèle a mis en lumière l'existence de deux fronts distincts de combustion, un pour les gaz de pyrolyse et l'autre pour le carbone résiduel, ainsi que l'existence d'une zone de gazéification du char résiduel du fait de l'absence d'oxygène dans une zone étendue du lit de déchets. Bien que le modèle n'a pu être validé en régime permanent par des mesures sur des incinérateurs industriels, le même modèle transposé en régime transitoire a été validé par comparaison avec les résultats du réacteur pilote KLEAA du centre de recherche ITC-TAB à Karlsruhe en Allemagne.

Ratte (2009) propose quant à lui un modèle de lit de particules pour la pyrolyse de bois pollués. Ce modèle repose sur deux sous-systèmes. Le premier pour le solide afin de décrire les phénomènes de transferts de masse et de chaleur couplés aux diverses réactions chimiques de dégradation ainsi qu'au séchage. Le second est le système « gaz » assimilé à un mélange de gaz parfaits soumis aux transferts de masse et d'énergie ainsi qu'à un ensemble de réaction homogènes. Ce modèle a permis d'identifier le débit énergétique nominal afin de convertir l'ensemble de la charge de bois en char. Ce débit fut validé par la suite avec la littérature. Ce modèle a également permis l'observation de l'influence des paramètres opératoires pour le procédé CHARTHERM<sup>TM</sup> de la société Thermya.

Plus récemment, Sharma (2011) a proposé un modèle de lit de particules pour un gazéifieur co-courant de biomasse dans le but de prédire entre autre les pertes de charges au sein du lit, le taux de conversion de la biomasse ainsi que les profils de température et de concentration. Ce modèle se compose de trois grandes étapes, la première correspondant à la modélisation et à l'estimation des flux de matière évacués du gazéifieur. La seconde est la résolution de l'équation de l'énergie sur chaque volume de contrôle obtenu après discrétisation en espace. Enfin la troisième résout l'ensemble des équations décrivant les phénomènes ayant lieu dans le gazéifieur tel que le séchage, la pyrolyse et les différentes oxydations et réductions.

Nous venons donc de voir qu'il était possible de modéliser l'ensemble d'une chambre de gazéification à l'aide d'une approche de type lit de particules. Ce type de modèle en s'appuyant sur des simplifications au niveau des transferts de masse et d'énergie permettent toutefois d'obtenir de très bonnes estimations des phénomènes se produisant au cours du procédé de gazéification. Dans la

majeure partie des cas, la diffusion interne au sein des particules n'est pas prise en compte et l'eau est décrite de façon très simplifiée malgré des propriétés très changeantes en fonction de la teneur en eau.

Bien que ce type de modèle permette d'obtenir un niveau de description des phénomènes de transport poussé, il ne permet que d'avoir une vision à l'échelle du réacteur. Dans le but de décrire simultanément l'ensemble des phénomènes à l'échelle du pore et celle du réacteur, une approche de type milieu poreux peut être développée. Néanmoins, la bibliographie de ce type d'approche est très peu fournie pour le cas de la gazéification, mais il est possible de procéder par analogie avec d'autres types de processus physico-chimique.

### **I.1.2.c.iv Les modèles de milieu poreux**

L'approche de type milieu poreux permet de combiner deux échelles d'observation pour la modélisation des phénomènes de transport au sein d'un lit de déchet ou de biomasse que sont l'échelle du pore et celle du réacteur. En effet, cette approche prend en compte l'ensemble des échanges de matière, de quantité de mouvement et d'énergie entre et au sein des différentes phases constituant le milieu poreux de la façon la plus globale, sur la totalité du lit, mais aussi de la façon la plus fine lors de la modélisation des transports internes. Elle s'appuie sur l'écriture des équations de conservation de la mécanique des milieux continus pour chacune des phases. On peut ainsi citer Whitaker (1977) et Quintard (1983) comme faisant partie des précurseurs de ce type d'approche lors de la modélisation du séchage d'un milieu multiphasique. La connaissance de la distribution spatiale des phases étant trop complexe pour résoudre directement, la prise de moyenne volumique, c'est à dire l'intégration des équations sur un volume élémentaire représentatif (cf chapitre II) dans le but d'homogénéiser le milieu poreux, est appliquée.

Cette approche de prise de moyenne est utilisée depuis longtemps dans le cas de milieux capillaro-poreux non réactifs pour des procédés comme le séchage par exemple. On peut citer les travaux de Couture (1995), Perré et Turner (1999), Erriguible (2004) sur le bois, Hager (1998) sur un lit de sphère et Porras (2005) sur du gel d'agar agar. Ils obtiennent ainsi après la mise en place de différentes techniques de résolution les profils de teneur en eau, de température et de pression au sein d'un échantillon du milieu étudié.

Plus précisément, Couture (1995) propose une description très complète des transports de masse et d'énergie lors du séchage d'un milieu capillaro-poreux. Cette modélisation issue de la théorie développée par Whitaker (1977) est ensuite appliquée au cas du séchage convectif du pin maritime. Il présente ainsi les résultats de simulations dans les cas mono et bidimensionnel. Par la suite

## CHAPITRE I : Introduction

Erriguible (2004) reprend ce modèle afin de l'appliquer au cas du séchage sous vide. Lors de la résolution, il couple le code développé par Couture (1995) à un logiciel commercial de CFD afin d'obtenir un nouveau jeu de conditions limites simulant l'enceinte sous vide environnante.

Perré et Turner (1999) développent un modèle permettant la simulation en trois dimensions des phénomènes de transport à l'échelle macroscopique lors du séchage du bois dans des cas isotrope et anisotrope.

Porras (2004) décrit le transport de masse et d'énergie au sein d'un milieu diphasique déformable, en optant pour un traitement particulier pour la pression liquide. Il applique ensuite ce modèle à la résolution du séchage d'un gel d'agar-agar.

Le cas d'un milieu réactif est plus complexe mais peut être modélisé par la même technique. Citons par exemple les travaux de Lanini (1998) et Chenu (2007) sur le stockage des déchets, pour lequel on peut faire l'analogie au cas de la gazéification de déchets.

Lanini (1998) propose une revue bibliographique des modèles de transports existant pour les décharges d'ordures ménagères. Elle montre qu'il est possible de considérer le lit de déchets comme étant un milieu poreux continu indéformable et homogène. Elle présente alors le modèle de El Fadel (1996) comme étant le plus complet bien qu'il soit monodimensionnel. En effet, l'ensemble des productions des gaz majoritaires,  $\text{CH}_4$  et  $\text{CO}_2$ , lors de la biodégradation de la phase solide réactive est pris en compte. De plus, ce modèle tient également compte de la production de chaleur par les différentes réactions, ce qui est l'aspect le plus novateur de la modélisation. En effet, le couplage transport de masse et de chaleur se limitait jusqu'alors au travail de Youg (1992). Lanini se base donc sur ces travaux pour le développement d'un modèle permettant la simulation de l'évolution de température et de concentrations en gaz dans le cas aérobie des décharges d'ordures ménagères. Elle révèle également les limites de ce type de modélisation que sont l'approvisionnement en paramètres provenant de l'expérience. Elle pose également les perspectives de simulations des cas anaérobiques beaucoup trop longues à entreprendre.

Plus récemment, Chenu (2007) modélise aussi une installation de stockage de déchets par l'approche de milieu poreux. Ce modèle complet intègre quatre phases dont deux, le gaz et le liquide, sont mobiles et dont les vitesses sont décrites par l'intermédiaire des lois de Darcy généralisées, tandis que le solide et le biofilm restent immobiles. Ce milieu multiphasique est également multiconstituant puisqu'il considère quatre espèces chimiques gaz que sont  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  présente sous forme gaz ou liquide. Le transport de chacune des espèces au sein du milieu et entre les phases ainsi que la conservation de l'énergie sont alors pris en compte dans les cas aérobie et anaérobique. Ce modèle a permis de mettre en évidence les différents régimes d'écoulement de gaz et de liquide au sein d'une installation de stockage de déchets ainsi que

## CHAPITRE I : Introduction

l'impact de différents paramètres opératoires, comme la recirculation de lixiviats, sur la production de biogaz.

Ces modèles apparaissent donc comme les plus complets par rapport aux autres types d'approches vues jusque-là. Ils permettent de prendre en compte l'ensemble des phénomènes de transport avec la vision la plus globale du lit tout en conservant un niveau de précision élevé pour la modélisation des transports internes malgré l'introduction de coefficients de transfert effectifs. Bien que la gazéification ne soit pas présentée ici, un modèle s'appuyant sur la prise de moyenne serait tout à fait réalisable. En effet, la gazéification en lit fixe est un cas particulier de milieu poreux réactif très ressemblant à ceux exposés précédemment et diffère uniquement par le jeu de conditions aux limites, par les réactions prises en compte et leurs expressions, et bien sûr par les niveaux thermiques atteints. C'est donc cette approche qui sera retenue dans ce travail.

Dans la partie qui suit nous allons présenter les raisons qui ont justifiées la modélisation du gazéifieur à lit fixe du procédé CHO Power par le biais d'une approche de type milieu poreux. Une présentation d'un premier modèle d'équilibre réalisé dans ce travail sera tout d'abord effectuée. Les atouts et limites de cette approche seront mis en lumière afin de comprendre notre choix de modèle final. Enfin, nous présentons les aspects essentiels de chacun des chapitres qui suivent.

## ***1.2 Démarche scientifique***

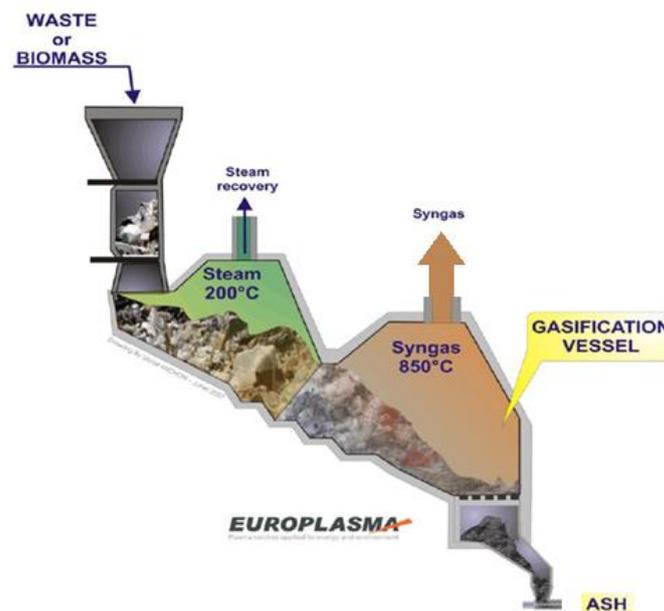
Lors de la présentation des différentes approches possibles pour la modélisation de la gazéification, nous avons vu que les modèles d'équilibre thermodynamique constituaient une bonne première approximation. Nous avons donc, dans un premier temps, choisi de modéliser notre procédé de gazéification au travers de cette approche. Un premier modèle d'équilibre a donc vu le jour, dans le but d'obtenir de premières estimations afin d'améliorer notre compréhension de la gazéification.

### **1.2.1 Modèle d'équilibre thermodynamique pour la simulation du gazéifieur auto-thermique à lit fixe du procédé CHO-Power**

Cette partie est dédiée à l'écriture du modèle d'équilibre thermodynamique ainsi qu'à la simulation numérique de celui-ci. Dans un premier temps, le système considéré sera présenté puis les principales hypothèses prises en compte lors de la modélisation seront exposées. Enfin, les équations constitutives du modèle seront écrites. Suivront alors sa validation et l'analyse de l'influence de l'agent de gazéification sur le procédé.

#### ***1.2.1.a Présentation du système***

Comme on peut le voir sur la Figure 25, le gazéifieur se décompose en deux sous-systèmes qui sont le sécheur et la chambre de gazéification. Le sécheur permet d'obtenir en sortie un déchet ou une biomasse de faible teneur en eau ainsi que de préchauffer l'entrée du gazéifieur. La chambre de gazéification est le lieu des réactions permettant la transformation thermo-chimique de la biomasse/du déchet en gaz.



**Figure 25 : Le procédé de gazéification CHO-Power**

## CHAPITRE I : Introduction

Avant de rentrer dans l'écriture du modèle d'équilibre thermodynamique du gazéifieur, les principales entrées et sorties sont définies. Une représentation simplifiée du modèle est donnée par la Figure 26.

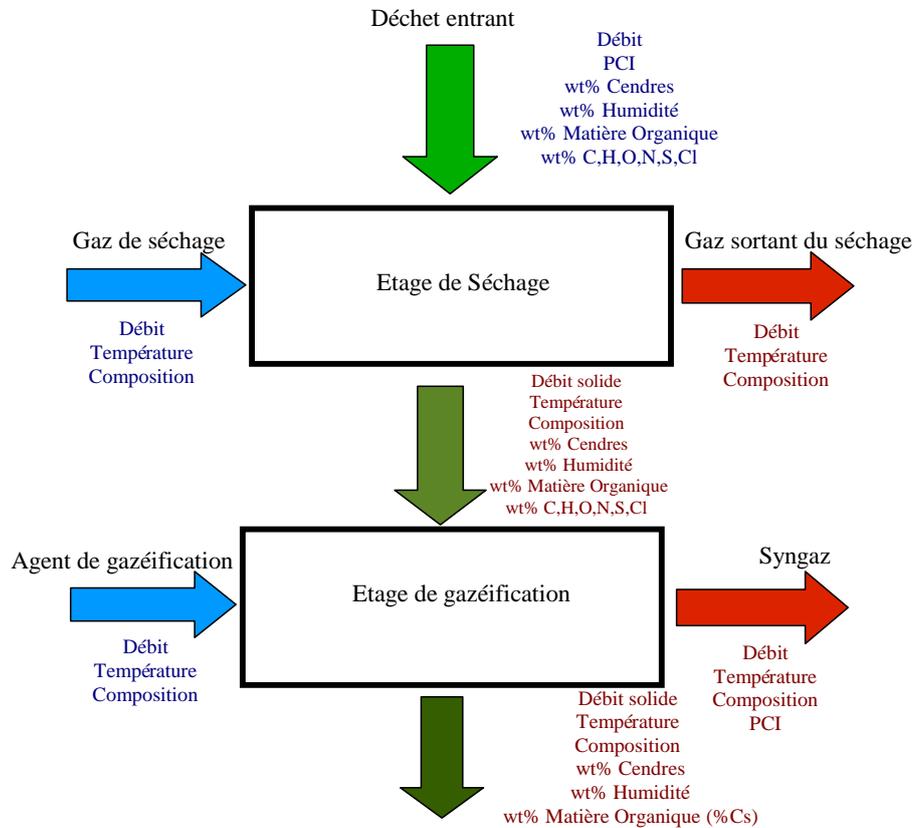
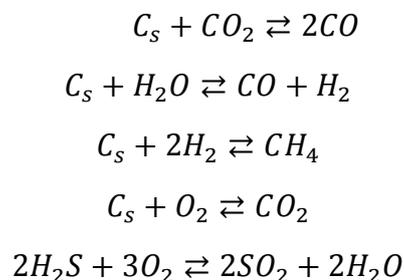


Figure 26 : Représentation simplifiée du système

La mise en équation du modèle d'équilibre, donnée en ANNEXE I, repose sur l'écriture de la conservation de la masse, des atomes et de l'énergie à l'échelle du réacteur. Les constituants pris en compte dans ce modèle sont  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2S$ ,  $HCN$ ,  $HCl$  et  $SO_2$ . Les équilibres chimiques considérés se traduisent par les équations suivantes :



### 1.2.1.b Résolution du système d'équations

Le système global d'équations tenant compte du sécheur et de l'étage de gazéification est composé

## CHAPITRE I : Introduction

de  $2N_s+26$  équations algébriques non linéaires,  $N_s$  désignant le nombre d'espèces gazeuses prises en compte, égal à 11 dans notre cas et 26 étant le nombre de variables indépendantes à calculer pour les deux étages (températures, composition du solide, débits solides, ...). La résolution de ce système se fait par l'utilisation de la méthode de Newton-Raphson. Cette méthode nécessite la connaissance de la matrice Jacobienne du système. L'estimation de cette matrice se fait par une procédure de perturbation numérique sur les différentes variables. La convergence du système est atteinte lorsque l'erreur relative des bilans massiques globaux et atomiques ainsi que le bilan énergétique est inférieure à  $10^{-6}$ .

### *1.2.1.c La validation du modèle*

Avant de pouvoir utiliser le modèle mathématique comme un outil permettant l'estimation des performances du procédé, il est nécessaire de pouvoir valider ce modèle à l'aide de résultats déjà existants. Cette validation fut effectuée grâce aux travaux de Ptasiński et al. (2007). Ces auteurs présente un modèle d'équilibre chimique dans le but de quantifier le meilleur ratio air/biomasse conduisant aux meilleures efficacités énergétique et exergetique. En comparant leurs résultats à ce travail, on observe très peu de différences (Figure 27, Figure 28 et Figure 29 ).

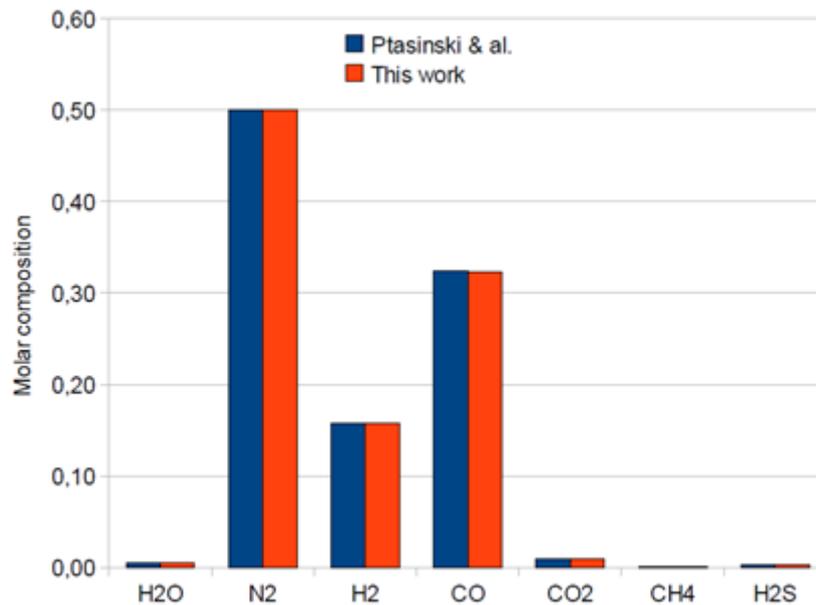


Figure 27 : Validation pour le charbon

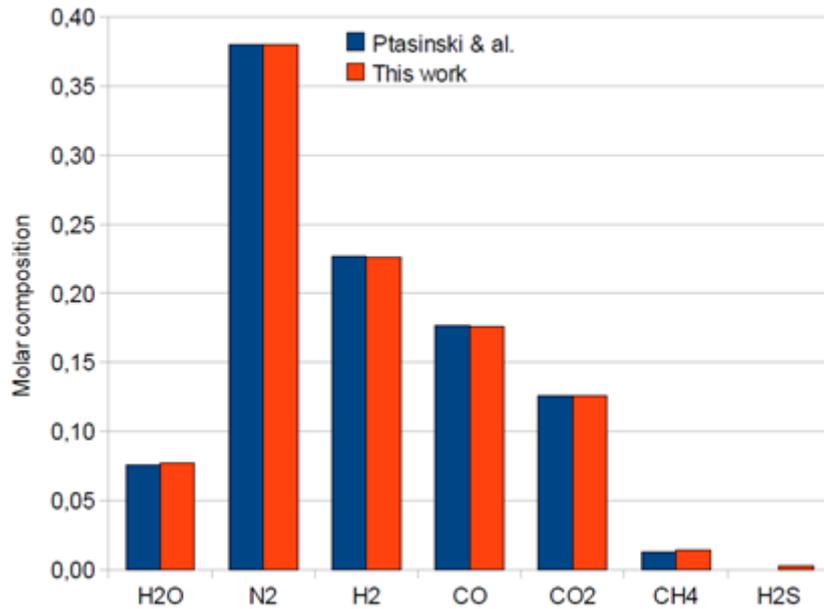


Figure 28 : Validation pour le bois

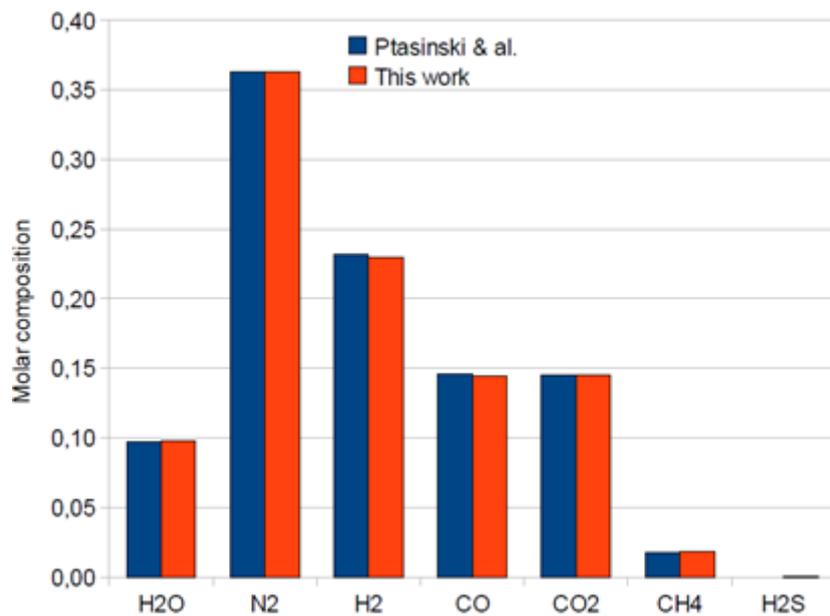


Figure 29 : Validation pour des déchets verts

Ces figures montrent que le modèle colle quasi-parfaitement avec les résultats de la littérature. Les différences proviennent du traitement de l'azote et du chlore, initialement présents dans la biomasse, qui est différent dans notre modèle. En effet, pour Ptasinski et al. l'azote contenu dans la biomasse est relâché dans le gaz sous la forme de diazote alors que dans ce modèle il se retrouve sous forme de cyanure d'hydrogène. De plus, Ptasinski et al. ne prennent pas en compte le chlore dans leurs modèle.

Le modèle maintenant validé, quelques résultats, concernant l'influence de l'agent de gazéification sur le procédé sont présentés en suivant. Une analyse plus complète des résultats est disponible dans la publication dont a fait l'objet ce modèle d'équilibre chimique (Deydier A. et al. 2011).

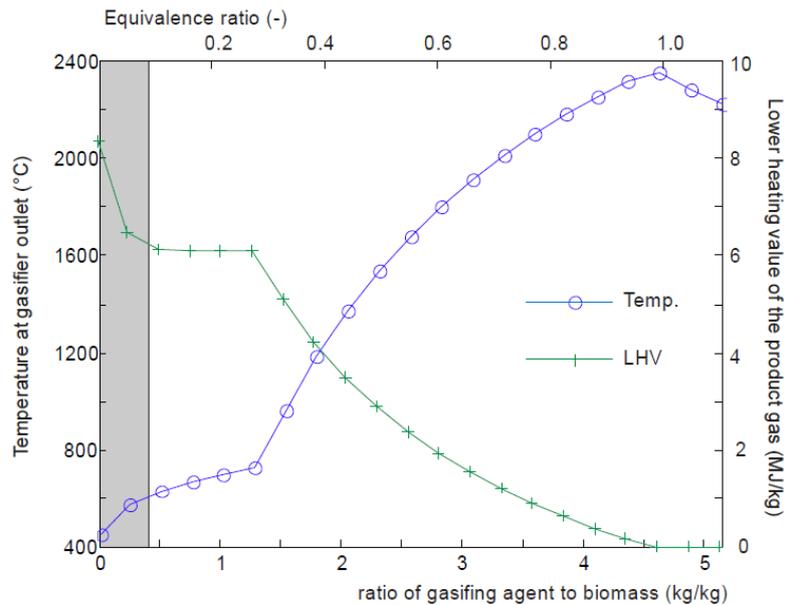
### ***1.2.1.d Influence de l'agent de gazéification***

Afin de caractériser l'influence de l'agent de gazéification, le ratio du débit d'air de gazéification entrant au débit de biomasse/déchets entrant est introduit. Ce ratio se définit de la façon suivante :

$$\beta_{gazé} = \frac{\text{Débit massique d'air de gazéification}}{\text{Débit massique de déchets}}$$

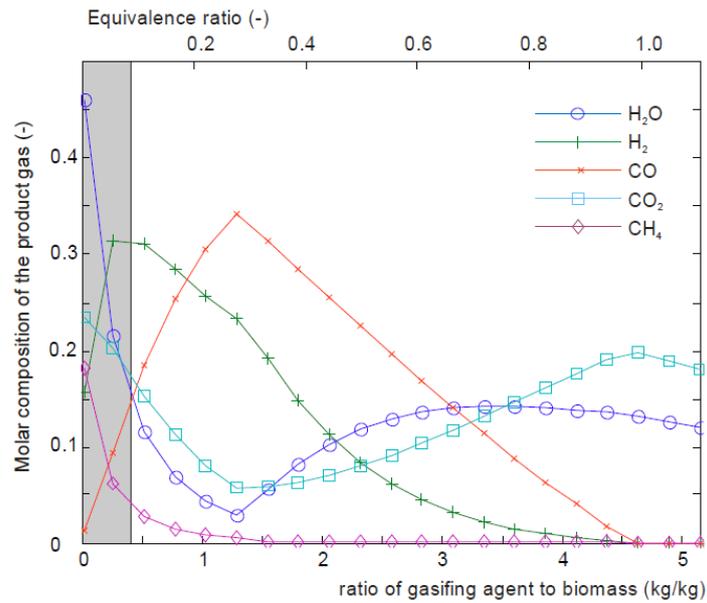
L'analyse de ce paramètre s'effectue dans le cas d'un séchage complet de la biomasse entrant dans l'étage de gazéification.

La Figure 30 représente l'évolution de la température et du PCI (noté Lower heating value sur la figure) du gaz produit en fonction du ratio  $\beta_{gazé}$ . On observe trois zones bien distinctes sur la figure. La première zone (zone grisée), pour une température de sortie variant de 400 à 600°C n'est pas réaliste pour un cas de gazéification et ne nécessite donc pas d'analyse. La seconde zone correspond à une valeur de  $\beta_{gazé}$  permettant d'obtenir une température de gaz de 600°C, jusqu'à une valeur de  $\beta_{gazé} = 1,28$ , correspondant à la gazéification complète du résidu solide (Char) et se traduisant par une rupture de pente de la température et du PCI sur le graphique. Dans cette zone, le PCI reste pratiquement constant et la température augmente légèrement. La dernière zone correspond à des valeurs allant de  $\beta_{gazé} = 1,28$  à  $\beta_{gazé} = 4,66$ . Cette dernière valeur correspondant à un apport stœchiométrique en air pour la biomasse, qui se traduit par une combustion complète de la matière organique en CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O. On observe dans cette zone que la température augmente du fait de la combustion des gaz produits entraînant en conséquence une diminution du PCI jusqu'à atteindre une valeur nulle pour celui-ci. On observe également une diminution de la température de gaz après le point d'apport stœchiométrique mais cela s'explique par une dilution du gaz produit par l'agent de gazéification.



**Figure 30 : Influence de l’agent de gazéification sur le PCI et la température du gaz produit**

La Figure 31 permet d’observer l’évolution de la composition molaire des gaz produits en fonction de  $\beta_{gazé}$ . Comme pour la Figure 30, trois zones sont présentes. La première ne fait ici encore l’objet d’aucune analyse puisqu’elle correspond à un cas irréaliste. Pour la zone allant de  $\beta_{gazé} = 0,4$  (correspondant à une température de 600°C) à  $\beta_{gazé} = 1,28$  (représentant l’apport en oxygène permettant la gazéification complète du carbone solide), l’évolution des compositions suit la progression de la gazéification du carbone solide au regard des niveaux de PCI. En effet, on observe une augmentation de la quantité de monoxyde de carbone à mesure que l’on se rapproche de la gazéification complète. L’augmentation de CO entraînent une diminution du niveau des autres espèces. Ensuite, pour  $\beta_{gazé} = 1,28$  à  $\beta_{gazé} = 4,66$  (apport stœchiométrique), la quantité d’oxygène apportée augmente, ce qui entraîne une oxydation des gaz produits. Cette oxydation se traduit par une augmentation des teneurs en  $CO_2$  et  $H_2O$  ainsi que par une diminution des niveaux des autres espèces produites. Une fois le point d’apport stœchiométrique atteint les teneurs en  $CO_2$  et  $H_2O$  diminuent du fait de la dilution des gaz produits par l’agent de gazéification.



**Figure 31 : Influence de l'agent de gazéification sur la composition molaire du gaz produit**

Alors que l'influence de l'agent de gazéification sur le procédé vient d'être présentée, il convient de souligner qu'un travail similaire a été effectué pour l'agent de séchage. Une analyse sur les efficacités énergétiques des différents étages du procédé fut également réalisée. L'ensemble de ces résultats se trouve dans la publication précédemment citée (Deydier A. et al. 2011).

Le modèle a fourni une première estimation de l'ensemble des paramètres opératoires nécessaire afin de satisfaire les exigences industrielles de la société Europlasma dans le but d'un pré-dimensionnement du procédé CHO-Power. Ce premier travail de modélisation a permis de mettre en lumière la nécessité d'une approche plus poussée afin de mieux appréhender l'ensemble des phénomènes de transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie lors de la gazéification. En effet, ce type de modèle ne tient pas compte de l'aérodynamique du réacteur de gazéification et l'écriture de la conservation de la quantité de mouvement n'est pas effectuée lors de la mise en équation. Ce modèle ne prend pas non plus en compte la vitesse des réactions chimiques se produisant.

## **I.2.2 Choix de la modélisation de type milieu poreux par prise de moyenne volumique**

Dans le but de modéliser l'ensemble des transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans le gazéifieur auto-thermique à lit fixe du procédé CHO-Power, ainsi que l'intensité des réactions chimiques, l'approche choisie est la résolution des équations de conservation de la mécanique des milieux continus pour chacune des phases du milieu poreux réactif multiconstituant. Néanmoins seule la connaissance exacte de la structure géométrique du lit de déchets permettrait la résolution des équations de conservation et des conditions aux interfaces des phases continues. L'homogénéité du milieu poreux est obtenue par un changement d'échelle appliqué au système d'équations. Il existe différentes techniques de changement d'échelle que sont les approches stochastiques et les approches non statistiques. Pour les premières, développées par Matheron (1965) et Dagan (1989), elles considèrent les variables physiques du problème comme des variables aléatoires. C'est par le biais de lois de probabilités que la méthode gère l'hétérogénéité des propriétés du milieu. Ce type de méthode, bien que largement utilisé dans le domaine pétrolier et en hydrogéologie, se base sur l'hypothèse de stationnarité et nécessite la connaissance exacte des lois de distribution des propriétés locales. Pour ces raisons, cette approche n'a pas été retenue. Les autres types d'homogénéisation par changement d'échelle dérivent des modèles macroscopiques mais sans utiliser d'aspect statistique. On peut alors citer les travaux de Bensoussan et al. (1978) et Sanchez-Palencia (1980) ou les méthodes de prise de moyenne volumique introduite par Whitaker (1967, 1999) et Marle (1967). Nous avons pris le parti de choisir la méthode de prise de moyenne volumique qui repose sur ce principe. La prise de moyenne n'entraînant a priori pas d'hypothèse lors de sa mise en place et conservant une signification physique explicite des propriétés moyennées après changement d'échelle, elle a été choisie pour l'écriture de notre modèle. Ceci permet d'obtenir un milieu poreux réactif multiconstituant homogène. Pour ce type de milieu, il est alors possible de citer les travaux de Roos et al. (2003) qui ont développé un modèle de transport macroscopique au sein des piles à combustibles ou encore ceux de Quintard et al. (2006) sur un modèle général de transport de masse multiconstituant non-linéaire en milieu poreux. Le modèle qui est développé dans les chapitres suivants de cette thèse est très ressemblant aux modèles de la littérature précédemment cités.



***Références Bibliographiques :***

**ADEME**, 2000, Déchets municipaux : les chiffres clés, 2<sup>ème</sup> édition, données et références

**ADEME**, 2009, les déchets en chiffres en France, édition 2009

**ADEME**, 2011, Collecte, tri, recyclage et valorisation des déchets, Feuille de route stratégique.

**Ademe/Procedis**, 2001, Pyrolyse-gazéification de déchets solides : état de l'art des procédés existants

**AIE (Agence Internationale de l'énergie)**, 2006, Manuel sur les statistiques de l'énergie

**Altafini CR, Wander PR, Barreto RM.**, 2003, Prediction of the working parameters of a wood waste gasifier through an equilibrium model. *Energy Convers Manage* ;44:2763–77.

**Antonini, G.**, 2005. Traitements thermiques des déchets - Procédés et technologies associées. *Techniques de l'Ingénieur - Environnement G 2051*, 1-18.

**Asthana A.**, 2008, Modélisation mathématique de la formation des NO<sub>x</sub> et de la volatilisation des métaux lourds lors de l'incinération sur grille d'ordures ménagères, thèse, Institut National Polytechnique de Lorraine.

**Bacon DW, Downie J, Hsu JC, Peters J.**, 1985, Modeling of fluidized bed gasifiers. In: Milne TA, Mudge KL, editors. *Fundamentals of thermochemical biomass conversion*. London, UK: Elsevier Applied Science; p. 717–32.

**Beenackers A.A.C.M**, 1999, Biomass gasification in moving beds, a review of European technologies, *Renewable Energy*, 16, 1180-1186.

**Bensoussan, A., Lions, J. L., and Papanicolaou, G.**, 1978. *Asymptotic Analysis for Periodic Structure*, volume volume 5 of *Studies in Mathematics and Its Applications*. North-Holland, Amsterdam.

**Bobin J.L, Huffer E., Nifenecker H.**, 2005, *L'énergie de demain* Techniques-Environnement-Economie, Groupe energie de la société française de physique, EDP sciences.

**Bridgwater A.V**, 1995, The technical and economic feasibility of biomass gasification for power generation, *Fuel*, 74, 631-653

**Bridgwater A.V**, 2003, Renewable fuels and chemical by thermal processing of biomass, *Chemical Engineering Journal*, 91, 87-102

**Brush C., Peters B., Nussbaumer T.**, 2002, Modelling wood combustion under fixed bed conditions, *Fuel*, 82, 729-738

**Casajus C.**, 2010, Torréfaction de biomasses ligno-cellulosiques, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**Chenu D.**, 2007, Modélisation des transferts réactifs de masse et de chaleur dans les installations de

## CHAPITRE I : Introduction

stockage de déchets ménagers : application aux installations de type bioréacteur, thèse, Institut national polytechnique de Toulouse.

**Couture F.**, 1995, Modélisation fine d'un problème de séchage. Développement d'outils adaptés, thèse, Université de Bordeaux 1, France

**Dasappa, S., Paul, P.J., Mukunda, H.S., Shrinivasa, U.**, 1994, The gasification of wood-char sphere in CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> mixtures : analysis and experiments, *Chemical Engineering Science*, vol. 49 (2), p. 223-232.

**Dasappa, S., Paul, P.J., Mukunda, H.S., Shrinivasa, U.**, 1998, Wood-char gasification : experiments and analysis on single particles and packed beds, *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, p. 1335-1342.

**Dagan G.**, 1989. Flow and transport in porous formations. Springer-Verlag, Berlin.

**Desrosiers R.**, 1979, Thermodynamics of gas-char reactions. In: Reed TB, editor. A survey of biomass gasification. Colorado: Solar Energy Research Institute

**Deydier A., Marias F., Bernada P., Couture F., Michon U.**, 2011, Equilibrium model for a travelling bed gasifier, *Biomass and Bioenergy*, Volume 35, Issue 1, January 2011, Pages 133-145.

**Di Blassi C.**, 2000, Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chem Eng Sci* ;55:2931-44

**Double JM, Smith EL, Bridgwater AV.**, 1989, Computer modeling of fluidized bed gasifier. In: Ferrero GL, Maniatis K, Buekens A, editors. Process and gasification. London, UK: Elsevier Applied Science; p. 651-5.

**El-Fadel, M., Findikakis, A.N. & Leckie, J.O.**, 1996, Numerical Modelling of Generation and Transport of Gas and Heat in Landfills I. Model Formulation. *Waste Management & Research*, N°14, pp. 483 -504

**Erriguible A.**, 2004, Modélisation des transferts à l'interface d'un milieu multiphasique et de son environnement, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**Fourcault A.**, 2010, modélisation d'un étage haute température alimenté par une torche à plasma pour la dégradation des goudrons présents dans les gaz de synthèse, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**Gobel, B., Henriksen, U., Qvale, B., Houbak, N.**, 2001, Dynamic modelling of char gasification in a fixed-bed, in: Bridgwater, A.V. (Ed.) *Progress in Thermochemical Biomass Conversion*, Blackwell, London, p. 92-108.

**Gurgel Veras, C.A., Saastamoinen, J., Carvalho Jr, J.A., Aho, M.**, 1999, Overlapping of the devolatilization and char combustion stages in the burning of coal particles, *Combustion & Flame*, vol. 116 (4), p. 567-579.

- Hager J**, 1998, Steam drying of porous media, Department of chemical engineering I, Lund University, Sweden.
- Haryanto A, Fernando SD, Pordesimo LO, Adhikarid S.**, 2009, Upgrading of syngas derived from biomass gasification: a thermodynamic analysis. *Biomass Bioenergy* ;33:882–9.
- He, R., Suda, T., Fujimori, T., Sato, J.i.**, 2003, Effects of particle sizes on transport phenomena in single char combustion, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 46 (19), p. 3619-3627.
- Huang H-J, Ramaswamy S.**, 2009, Modeling biomass gasification using thermodynamic equilibrium approach. *Appl Biochem Biotechnol* ;154:193–204.
- INSEE**, estimation de population et statistique de l'état civil, [www.insee.fr](http://www.insee.fr)
- Jarunthammachote S, Dutta A.**, 2007, Thermodynamic equilibrium model and second law analysis of a downdraft waste gasifier. *Energy* ;32:1660–9.
- Jarunthammachote S, Dutta A.**, 2008, Equilibrium modeling of gasification: Gibbs free energy minimisation approach and its application to spouted bed and spout-fluid bed gasifiers. *Energy Convers Manage* ;49:1345–56.
- Jayah TH, Aye L, Fuller RJ, Stewart DF.**, 2003, Computer simulation of a downdraft wood gasifier for tea drying. *Biomass Bioenergy* ;25:459–69.
- Johansson B.**, 2000, *Economic Instruments in Practice 1: Carbon Tax in Sweden*, Swedish Environmental Protection Agency.
- Keller T.**, 2009, *La valorisation énergétique des déchets par incineration*, Mémoire de fin d'études HEC Finance.
- Lanini S.**, 1998, *Analyse et modélisation des transferts de masse et de chaleur au sein des décharges d'ordures ménagères*, thèse, Institut polytechnique de Toulouse, France.
- Li X, Grace JR, Watkinson AP, Lim CJ, Ergudenler A.**, 2001, Equilibrium modeling of gasification: a free energy minimization approach and its application to circulating fluidized bed coal gasifier. *Fuel* ;80:195–207.
- Li XT, Grace JR, Lim CJ, Watkinson AP, Chen HP, Kim JR.**, 2004, Biomass gasification in a circulating fluidized bed. *Biomass Bioenergy* ;26:171–93.
- Longwell H.J.**, 2002, *The future of the Oil and Gas Industry: Past Approaches*, World Energy Vol. 5 No.3 New Challenges, Exxon Mobil Corporation.
- Marias F.**, 2005, *Modélisation de réacteur de traitement de déchets*, HDR, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France
- Marle C.M.**, 1967. Ecoulements monophasiques en milieu poreux. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 22(10) :1471–1509.

## CHAPITRE I : Introduction

**Matheron G.**, 1965. Les Variables Régionalisées et Leur Estimation : Une Application de la Théorie Aléatoire Aux Sciences de la Nature. Masson, Paris.

**McKendry P.**, 2002, Energy production from biomass (part 3): gasification technologies, bioresource Technology, 83, 55-63

**Melgar A, Perez JF, Laget H, Hornillo A.**, 2007, Thermochemical equilibrium modeling of gasifying process. Energy Convers Manage ;48:59–67.

**Menard Y.**, 2003, Modélisation de l'incinération sur grille d'ordures ménagères et approche thermodynamique du comportement des métaux lourds, thèse, Institut polytechnique de Lorraine.

**Mermoud F.**, 2006, Gazéification de charbon de bois à la vapeur d'eau : de la particule isolée au lit fixe continu, thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse.

**Navarro A.**, 2003, Approche systémique des déchets, Techniques de l'ingénieur- Environnement G2000.

**Numazawa S.**, 2000, Contribution à l'étude de la pyrolyse lente sous pression de bois, thèse, Université de Technologie de Compiègne, 2000.

**Ptasinski K.J, Prins M.J, Pierik A.**, 2007. Exergic evaluation of biomass gasification. Energy No 32, pp 568-574

**Perré P., Turner I.W.**, 1999, A 3-D version of TransPore: a comprehensive heat and mass transfer computational model for simulating the drying of porous media, International Journal of Heat and Mass Transfert, 42, 4501-4521.

**Peters, B., Bruch, C.**, 2001, A flexible and stable numerical method for simulating the thermal decomposition of wood particles, Chemosphere, vol. 42 (5-7), p. 481-490.

**Porras Rey G.O.**, 2005, Modélisation des phénomènes de transport en milieu diphasique déformable (solide-liquide binaire) : simulation 2D du séchage convectif, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**Prins MJ, Ptasinski KJ, Janssen FJJG.**, 2003, Thermodynamics of gas-char reactions: first and second law analysis. Chem Eng Sci 2003;58:1003–11

**Prins MJ, Ptasinski KJ, Janssen FJJG.**, 2007, From coal to biomass gasification : comparison of thermodynamic efficiency, Energy, 32, 1248-1259

**Quintard M.**, 1983, Stabilité des déplacements miscibles en milieu poreux homogène: injection d'un fluide chaud dans un massif poreux saturé par ce fluide froid, Thèse d'Etat, Université de Bordeaux

**Quintard M., Bletzacker L., Chenu D., and Whitaker S.**, 2006. Nonlinear, multicomponent, mass transport in porous media. Chemical Engineering Science, 61(8) :2643–2669.

**Ratte J.**, 2009, modélisation d'un réacteur de pyrolyse lente de bois pollué, thèse, Université de Pau

## CHAPITRE I : Introduction

et des Pays de l'Adour, France

- Rauch R.**, 2008, gasification of biomass-Biomass CHP Güssing, Vienna University of Technology.
- Roos, M., Batawi, E., Harnisch, U., and Hocker, T.**, 2003. Efficient simulation of fuel cell stacks with the volume averaging method. *Journal of Power Sources*, 118(1-2) :86–95.
- Ruggiero M, Manfrida G.**, 1999, An equilibrium model for biomass gasification processes. *Renew Energy* ;16:1106–9.
- Sanchez-Palencia E.**, 1980. *Lecture Notes in Physics*, vol 127 : Nonhomogeneous media and vibration theory, volume 127. Springer-Verlag, New-York.
- Schuster G, Löffler G, Weigl K, Hofbauer H.**, 2001, Biomass steam gasification: an extensive parametric modeling study. *Bioresour Technol* ;77:71–9.
- Senat.fr**, rapport d'information, Recyclage et Valorisation des déchets ménagers.
- Sharma A.K.**, 2011, Modeling and simulation of a downdraft biomass gasifier 1. Model development and validation, *Energy Conversion and Management*, 52, 1386-1396.
- Smith WR, Missen RW.**, 1982, *Chemical reaction equilibrium analysis: theory and algorithms*. New York, USA: Wiley
- Tagutchou J.P.**, 2008, *Gazéification du charbon de plaquettes forestières : particule isolée et lit fixe continu*, thèse, Université de Perpignan-via domitia.
- Tinaut F.V., Melgar A., Pérez J.F., Horrillo A.**, 2008, Effect of biomass particule size and air superficial velocity on the gasification process in a downdraft fixed bed gasifier. An experimental and modeling study., *Fuel Processing Technology*, 89, 1076-1089.
- Villanueva AL, Gomez-Barea A, Revuelta E, Campoy M, Ollero P.**, 2008, Guidelines for selection of gasifiers modelling strategies. In: 16th European biomass conference and exhibition;
- Wang, F.Y., Bhatia, S.K.**, 2001, A generalised dynamic model for char particle gasification with structure evolution and peripheral fragmentation, *Chemical Engineering Science*, vol. 56 (12), p. 3683-3697.
- Whitaker S.**, 1967. Diffusion and dispersion in porous media. *AICHE Journal*, 13 :420-427.
- Whitaker S.**, 1977, Simultaneous heat, mass and momentum transfer in porous media : a theory of drying. *Advances in Heat Transfer*, 13 :119-203
- Whitaker S.**, 1999. *The Method of Volume Averaging*. Kluwer, Dordrecht.
- Young A.**, 1992, *Applications of Computer Modelling to Landfill Processes - Report n°CWM 039/92*, AEA Technology, London
- Zainal ZA, Ali R, Lean CH, Seetharamu KN.**, 2001, Prediction of performance of a downdraft gasifier using equilibrium modeling for different biomass materials. *Energy Convers Manage* ;42:1499–515.



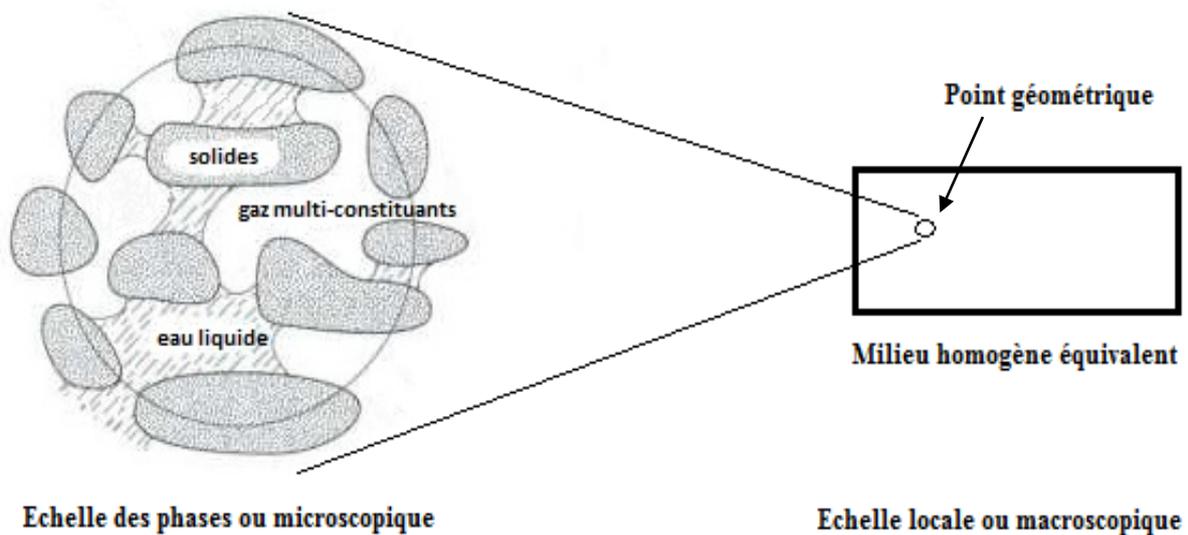
## **II Modélisation**



## CHAPITRE II : Modélisation

Dans la première partie de ce chapitre, nous présentons le milieu multiphasique et multiconstituant que nous considérons pour cette étude. Nous posons ainsi ses caractéristiques et les principales hypothèses prises en compte lors de la modélisation des phénomènes de transport.

Dans la deuxième partie, nous nous employons à modéliser les phénomènes de transport au sein de chacune des phases du milieu multiphasique (3 phases solides - 1 phase liquide – 1 phase gaz multiconstituant) à l'échelle microscopique. Les équations de conservation issues de la mécanique des milieux continus (masse, quantité de mouvement et énergie) sont écrites puis complétées par les équations d'états de la phase gaz et la conservation du volume pour les phases solides et liquides. Le lien entre les phases est assuré par les conditions aux limites des milieux continus : continuité des vitesses, continuité des contraintes, continuité des flux de chaleur et continuité de certains scalaires : température, vitesse tangentielle et potentiel chimique. Bien que la description des phénomènes de transport à cette échelle soit complète, le passage à la simulation par la résolution du système d'équations est impossible en raison de la complexité de la répartition géométrique des phases. La solution pour palier à ce problème consiste ici à intégrer les équations sur un volume élémentaire représentatif (V.E.R) afin de se ramener à un milieu homogène équivalent. Il s'agit d'une homogénéisation par prise de moyenne volumique (Figure 32).



**Figure 32 : Homogénéisation par prise de moyenne volumique**

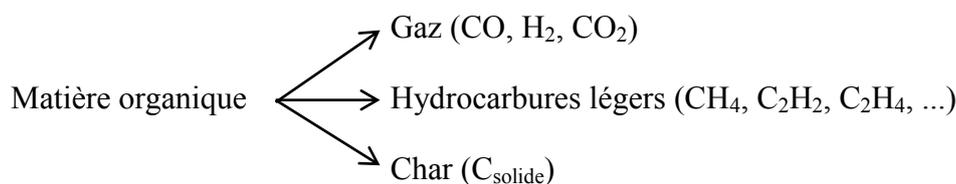
L'application de la méthode de la prise de moyenne volumique et de ses théorèmes aux équations de l'échelle des phases, qui correspond à la troisième partie de ce chapitre, permet de décrire rigoureusement les phénomènes de transport à l'échelle locale.

## ***II.1 Description du milieu poreux***

Nous nous intéressons à un milieu poreux multiphasique et multiconstituant réactif caractérisant le lit de déchets. Nous considérons cinq phases dont trois phases solides rigides, correspondant à la matière organique (MO), au charbon (CR) et aux cendres inertes (CI), une phase pour l'eau liquide et une phase gaz multiconstituant.

### **II.1.1 La matière organique**

Dans les faits, la matière organique d'un déchet est composée d'une multitude de matériaux tels que du bois, des plastiques, des cartons ou encore des matières biodégradables. Malgré cette diversité, la phase MO est assimilée ici à une phase monocomposante et homogène (ce qui signifie que les propriétés de la phase dans un V.E.R sont indépendantes des variables d'espace). Elle est également considérée comme rigide, ainsi elle ne subit aucune déformation au cours des transformations physico-chimiques. Lors du processus de gazéification, elle subit une dégradation thermique entraînant la production de gaz et de charbon (noté dans la suite du document char). Cette transformation est la pyrolyse de la phase MO (Figure 33). La matière organique, sous l'action de la chaleur, se dégrade en char avec un dégagement de gaz constitué principalement de monoxyde de carbone, de dioxyde de carbone, de méthane et de dihydrogène. L'interface entre la phase MO et la phase gaz du milieu est soumise à des réactions hétérogènes, ce qui est une des particularités de ce modèle.



**Figure 33 : Schéma réactionnel de la pyrolyse de la matière organique**

### **II.1.2 Le charbon**

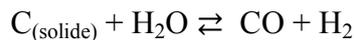
Le charbon est, en réalité, du carbone solide produit lors de dégradations thermiques. Il est donc tout naturel de choisir une approche monocomposante pour cette phase solide, à laquelle on attribue également les caractères homogène et rigide. Initialement absent du milieu poreux, il provient de la pyrolyse de la matière organique. C'est à l'interface entre le char et le gaz qu'a lieu la réaction à proprement parlé de gazéification. Le char réagit avec le CO<sub>2</sub> lors de la gazéification au dioxyde carbone. Le mécanisme réactionnel (Figure 34) appelé équilibre de Boudouard permet une

description précise de cette transformation produisant du CO.



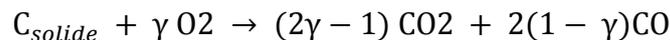
**Figure 34 : Equilibre de Boudouard pour la gazéification au CO<sub>2</sub>**

La vapeur d'eau, produite par des réactions homogènes en phase gaz et par l'évaporation de l'eau liquide au cours du séchage, permet la vapo-gazéification du char (Figure 35). Elle est à l'origine de la production de H<sub>2</sub> et de CO.



**Figure 35 : Réaction de gazéification à la vapeur d'eau**

L'injection d'oxygène, en quantité limitée, dans le milieu provoque la combustion partielle du char avec pour conséquence la production de CO et de CO<sub>2</sub> (Figure 36) (J. Cooper, W.L.H. Hallett, 2000 ). Les études menées par Tomczek (1994) et Hayhurst et Parmar (1998) nous permettent de choisir la description suivante pour la combustion du char.



**Figure 36 : Réaction de combustion du charbon**

L'ensemble des réactions de transformation du char représentent les réactions hétérogènes considérées pour cette phase lors de l'écriture du modèle mathématique.

### **II.1.3 Les cendres inertes**

Les cendres inertes représentent la partie inorganique du déchet comme les métaux lourds, par exemple. Elles sont considérées comme une seule phase monocomposante et homogène. Inertes chimiquement, les cendres représentent une phase solide rigide ne subissant aucune déformation.

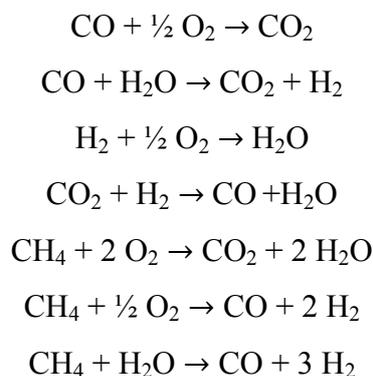
### **II.1.4 L'eau liquide**

L'eau liquide est une phase monocomposante, homogène et incompressible pouvant être aussi bien de l'eau libre que de l'eau liée en fonction de la teneur en eau du milieu. L'eau libre est piégée dans les pores, de dimension de l'ordre du micromètre ou supérieure, sous forme liquide par des forces d'origine capillaire. Dans ce cas, l'activité de l'eau  $a_w$  vaut 1. Lorsque toute l'eau libre est évaporée dans la phase gaz, l'ensemble des parois de la structure solide reste saturé en eau liée et le point de saturation en eau liée est atteint. Pour l'eau liée, l'activité de l'eau  $a_w$  devient inférieure à 1. Cette eau est absorbée physiquement en couche multimoléculaire par des forces de type Van Der Waals

ou de nature électrostatique sur, et parfois dans, les parois de la structure. Son évaporation nécessite une énergie supplémentaire, notée  $\Delta H_D$ , qu'on appelle enthalpie de désorption de l'eau. Cette grandeur est une fonction de la température et de l'activité de l'eau  $a_w$ . Elle caractérise l'énergie permettant de désolidariser l'eau liée des phases solides. Les eaux libre et liée sont donc représentées par une seule phase mais de propriétés physiques et de structures moléculaires différentes.

### II.1.5 Le gaz

La phase gaz est un mélange d'espèces gazeuses présentes initialement dans le déchet tel que le dioxygène, le diazote et la vapeur d'eau, auxquelles s'ajoutent l'ensemble des productions lors de la pyrolyse, de la combustion et de la gazéification. Il s'agit par exemple du dihydrogène, du méthane, du monoxyde de carbone et du dioxyde de carbone. La description des phénomènes de transferts entre la phase gaz et les phases matière organique et char fait apparaître les réactions hétérogènes représentatives du processus de gazéification. Notons que l'ensemble de ces constituants gazeux réagissent entre eux par le biais de réactions homogènes. En considérant les sept constituants cités ci-dessus, le schéma réactionnel choisi pour l'écriture du modèle s'écrit (Figure 37) (H.K. Chelliah, A. Makino, N. Araki, C.K. Law, 1996) :



**Figure 37 : Réactions homogènes prises en compte dans le modèle**

Enfin, nous assimilons la phase gaz à un mélange idéal de gaz parfaits permettant ainsi une écriture et une estimation plus simple de sa composition, de son enthalpie et des enthalpies de chacune des espèces gazeuses.

La Figure 38 résume la composition du milieu :

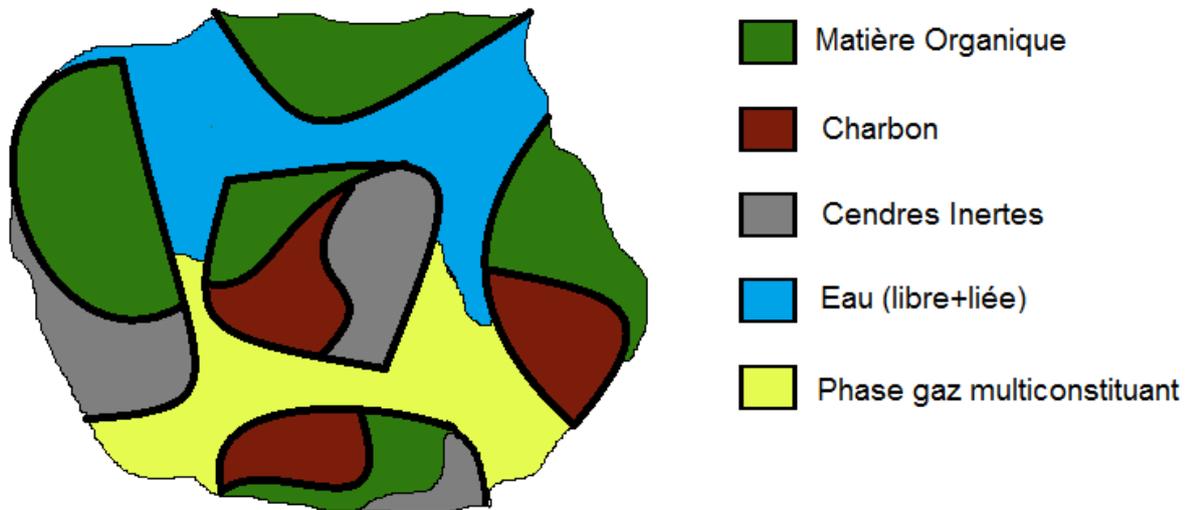


Figure 38 : Représentation à l'échelle du pore de la répartition des phases

Le milieu poreux étant maintenant caractérisé, nous pouvons modéliser les différents phénomènes de transport d'abord, à l'échelle des phases, puis à l'échelle locale grâce à la théorie d'homogénéisation par prise de moyenne volumique.

## ***II.2 Échelle des phases***

Dans cette partie, les équations descriptives des phénomènes sont établies phase par phase (Whitaker 1986, Slattery 1999). Elles sont issues de la théorie de la mécanique des milieux continus mono ou multiconstituant.

### **II.2.1 Phases solides**

La description des différentes phases solides proposées dans le paragraphe précédent montre qu'elles peuvent toutes être traitées de manière identique d'un point de vue transport interne : les trois phases solides sont assimilées à des milieux monocomposants, rigides et homogènes. On ne les distingue que par les différents types de réactions hétérogènes qu'elles subissent sur les interfaces les reliant aux autres phases, ce qui implique des différences importantes sur les conditions aux limites associées aux équations de conservation, mais pas sur les équations elles-mêmes. Ainsi, dans le prochain paragraphe, nous considérerons une phase unique, symbolisée par l'indice « s » pouvant représenter chacune des trois phases solides MO, CR ou CI

**II.2.1.a Hypothèse de rigidité des phases solides**

**Hypothèse 1** : les phases solides sont rigides.

La caractérisation du mouvement d'un corps solide en cinématique des milieux continus (Germain P., Muller P., 1994) et sous l'hypothèse de rigidité des phases solides nous permet d'exprimer la vitesse d'une phase solide par :

$$\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{s0}(t) + \boldsymbol{\omega}_s(t) \wedge \mathbf{x} \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-1}$$

avec  $\mathbf{x}$  le vecteur position et  $\boldsymbol{\omega}_s(t) = \nabla \wedge \mathbf{x}$ . L'équation (II.2-1) devient s'il n'y a pas de rotation comme dans notre cas :

$$\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{s0}(t) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-2}$$

**II.2.1.b Conservation de la masse**

Les phases solides étant monocomposantes, l'équation de conservation de la masse s'écrit simplement :

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \mathbf{v}_s) = 0 \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-3}$$

où  $\rho_s$  et  $\mathbf{v}_s$  représentent respectivement la masse volumique et la vitesse de la phase.

**II.2.1.c Conservation de la quantité de mouvement**

Comme on l'a vu précédemment, dans le cas d'un solide rigide en mouvement irrotationnel, la vitesse est indépendante des variables d'espace et n'est plus fonction que du temps. Dans ce cas, l'équation (II.2-2) remplace l'équation de conservation de la quantité de mouvement de la phase solide qu'il n'est donc plus nécessaire de traiter ici.

**II.2.1.d Conservation de l'énergie**

La conservation de l'énergie pour une phase monocomposante indéformable est donnée par le premier principe de la thermodynamique soit :

$$\rho_s \frac{D_{(s)} e_s}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_s + \varphi_s \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-4}$$

où la dérivée particulière associée à la phase solide  $s$  est définie par :

$$\frac{D_{(s)}}{Dt} = \frac{\partial ()}{\partial t} + \mathbf{v}_s \cdot \nabla () \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-5}$$

Dans l'équation (II.2-4)  $e_s$  représente l'énergie interne massique,  $\mathbf{q}_s$  est le flux surfacique d'énergie et  $\varphi_s$  une densité volumique de taux d'énergie fournie par l'extérieur (ex: rayonnement microonde) ou des phénomènes internes (ex: réactions chimiques).

Dans le cas d'une phase solide on peut évaluer l'énergie interne massique à l'enthalpie massique  $h_s$ , ce qui permet d'arriver après le développement de la dérivée particulaire à :

$$\frac{\partial \rho_s h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s) - h_s \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \mathbf{v}_s) \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_s + \varphi_s \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-6}$$

En appliquant la conservation de la masse (II.2-3) à l'équation (II.2-6) on obtient la simplification suivante :

$$\frac{\partial \rho_s h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_s + \varphi_s \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-7}$$

L'utilisation de la loi de Fourier pour décrire le flux surfacique d'énergie  $\mathbf{q}_s$  conduit à

$$\mathbf{q}_s = -\lambda_s \nabla T_s \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-8}$$

où  $\lambda_s$  est la conductivité thermique de la phase solide et  $T_s$  la température.

Ainsi en introduisant (II.2-8) dans l'équation de conservation de l'énergie (II.2-7) on obtient :

$$\frac{\partial \rho_s h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s - \lambda_s \nabla T_s) = \varphi_s \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-9}$$

A ce stade, nous venons d'introduire deux nouvelles inconnues lors de l'écriture de la conservation de l'énergie : l'enthalpie massique et la température. Ces deux inconnues sont liées par la chaleur massique en supposant que l'enthalpie solide est uniquement une fonction de la température solide :

$$h_s = h_s(T_s) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-10}$$

et

$$C_s = \left( \frac{\partial h_s}{\partial T_s} \right) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-11}$$

**Hypothèse 2** : la chaleur massique  $C_s$  est une constante.

Après intégration de (II.2-11), on obtient pour la phase solide:

$$h_s - h_{s_{ref}} = C_s (T_s - T_{ref}) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-12}$$

où  $h_{s_{ref}}$  représente l'enthalpie massique à la température de référence  $T_{ref}$ , choisie de façon arbitraire.

## II.2.2 Phase liquide

Les équations descriptives du mouvement de la phase liquide sont celles d'une phase continue monocomposante.

### II.2.2.a Conservation de la masse

La phase liquide étant monocomposante nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{v}_l) = 0 \quad \text{II.2-13}$$

### II.2.2.b Conservation du volume

Cette équation supplémentaire est nécessaire pour traiter l'inconnue qu'est la pression liquide introduite lors de l'écriture de la conservation de l'énergie (cf paragraphe II.2.2.d). En effet, les équations de conservation ne suffisent pas pour traiter ce terme.

On admet donc l'hypothèse d'un mouvement isovolume pour la phase liquide.

**Hypothèse 3** : Le volume de la phase liquide se conserve.

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_l = 0 \quad \text{II.2-14}$$

L'hypothèse suivante est admise:

**Hypothèse 4** : la phase liquide est un fluide homogène,

$$\nabla \rho_l = 0 \quad \text{II.2-15}$$

En injectant (II.2-14) dans l'équation de conservation de la masse (II.2-13) sous l'hypothèse 4, on établit :

$$\rho_l = cste \quad \text{II.2-16}$$

### II.2.2.c Conservation de la quantité de mouvement

La conservation de la quantité de mouvement pour la phase liquide aboutit aux deux équations vectorielles suivantes :

$$\rho_l \frac{D^{(l)} \mathbf{v}_l}{Dt} = \rho_l \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l \quad \text{II.2-17}$$

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l = \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l^T \quad \text{II.2-18}$$

où la dérivée particulaire associée à la phase liquide l est donnée par :

$$\frac{D^{(l)}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_l \cdot \nabla \quad \text{II.2-19}$$

Dans les équations (II.2-17) et (II.2-18),  $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l$  est le tenseur des contraintes de la phase liquide.

Après le développement de la dérivée particulaire de l'équation (II.2-17), on obtient :

$$\frac{\partial \rho_l \mathbf{v}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{v}_l \otimes \mathbf{v}_l) = \rho_l \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l \quad \text{II.2-20}$$

où  $\otimes$  représente l'opérateur produit tensoriel défini ci-dessous.

Soient deux vecteurs  $\mathbf{a} = a_i \mathbf{e}_i$  et  $\mathbf{b} = b_j \mathbf{e}_j$ ,  $\{\mathbf{e}_i \quad i = 1,3\}$  étant la base orthonormée du repère galiléen dans lequel, la description est effectuée.  $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$  un tenseur d'ordre deux ayant pour composante  $a_i b_j$  tel que  $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = a_i b_j \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ . On admet, ici et dans la suite du document, la convention de sommation sur les indices muets.

#### II.2.2.d Conservation de l'énergie

Le premier principe de la thermodynamique conduit à :

$$\rho_l \frac{D^{(l)} e_l}{Dt} = \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l : \nabla \mathbf{v}_l - \nabla \cdot \mathbf{q}_l + \varphi_l \quad \text{II.2-21}$$

Le terme  $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l : \nabla \mathbf{v}_l$  désigne la dissipation mécanique, double produit contracté du tenseur des contraintes et du gradient du vecteur vitesse. La définition du double produit contracté : est rappelée ci-dessous.

Soient deux tenseurs  $\underline{\underline{\mathbf{a}}} = a_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$  et  $\underline{\underline{\mathbf{b}}} = b_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ , alors  $\underline{\underline{\mathbf{a}}} : \underline{\underline{\mathbf{b}}}$  un scalaire tel que

$$\underline{\underline{\mathbf{a}}} : \underline{\underline{\mathbf{b}}} = a_{ij} b_{ji} .$$

De façon analogue au développement de l'équation de conservation de l'énergie pour les phases solides, on obtient pour l'équation (II.2-22) après avoir exprimé la dérivée particulaire :

$$\frac{\partial \rho_l e_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l e_l \mathbf{v}_l) = \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_l : \nabla \mathbf{v}_l + \nabla \cdot (\lambda_l \nabla T_l) + \varphi_l \quad \text{II.2-22}$$

On exprime l'énergie interne d'un liquide par

$$e_l = h_l - \frac{P_l}{\rho_l} \quad \text{II.2-23}$$

où  $h_l$  et  $P_l$  représentent respectivement l'enthalpie massique et la pression de la phase liquide.

Or, pour la phase liquide, le tenseur des contraintes est donné par :

$$\underline{\underline{\sigma}}_l = -P_l \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_l \quad \text{II.2-24}$$

avec  $\underline{\underline{I}}$  et  $\underline{\underline{\tau}}_l$  respectivement le tenseur identité et le tenseur des contraintes visqueuses. En développant (II.2-22) en tenant compte de (II.2-23), (II.2-24) et de la conservation de la masse (II.2-13), on peut écrire

$$\frac{\partial \rho_l h_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l h_l \mathbf{v}_l) = \underline{\underline{\tau}}_l : \nabla \mathbf{v}_l + \nabla \cdot (\lambda_l \nabla T_l) + \varphi_l + \frac{D_{(l)} P_l}{Dt} \quad \text{II.2-25}$$

où  $\underline{\underline{\tau}}_l : \nabla \mathbf{v}_l$  et  $\frac{D_{(l)} P_l}{Dt}$  sont respectivement la dissipation visqueuse et la puissance volumique réversible des forces de pression. L'hypothèse classique suivante est admise.

**Hypothèse 5** : la dissipation visqueuse et la puissance volumique réversible des forces de pression sont négligeables (Whitaker, 1977 ; Porras, 2005).

On obtient donc :

$$\frac{\partial \rho_l h_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l h_l \mathbf{v}_l) = \nabla \cdot (\lambda_l \nabla T_l) + \varphi_l \quad \text{II.2-26}$$

Comme pour les phases solides, l'enthalpie massique et la température sont liées par la chaleur massique en supposant que l'enthalpie de la phase est uniquement une fonction de la température liquide:

$$h_l = h_l(T_l) \quad \text{II.2-27}$$

et

$$C_{P_l} = \left( \frac{\partial h_l}{\partial T_l} \right)_P \quad \text{II.2-28}$$

**Hypothèse 6** : la chaleur massique de la phase liquide est constante.

Cette hypothèse mène à l'expression suivante pour l'enthalpie.

$$h_l - h_{l_{ref}} = C_{P_l} (T_l - T_{ref}) - \Delta H_D(T_l, a_w) \quad \text{II.2-29}$$

où  $h_{l_{ref}}$  représente l'enthalpie massique à la température de référence  $T_{ref}$  choisie de façon arbitraire et  $\Delta H_D(T_l, a_w)$  l'enthalpie de désorption de l'eau liée. Il s'agit d'une fonction de la température et de l'activité de l'eau  $a_w$ . Cette enthalpie est nulle pour l'eau libre.

### II.2.3 Phase gaz

Les équations descriptives du mouvement de la phase gaz sont les équations classiques issues de la mécanique des milieux continus multicomposants.

#### II.2.3.a Conservation de la masse d'une espèce

On écrit la conservation de la masse pour chaque constituant de la phase gaz, pour une phase gaz multiconstituant soumise à des réactions homogènes (Whitaker, 1987a).

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e \mathbf{v}_e) = r_e \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-30}$$

où  $r_e$  est le taux volumique de production ou de disparition du constituant  $e$  par réaction chimique homogène. Ce terme est un terme global prenant en compte l'existence possible de plusieurs réactions intervenant dans la création ou la consommation d'un constituant  $e$ .

On prend pour définition de la masse volumique et du flux de masse du mélange les expressions suivantes :

$$\rho_g = \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \quad \text{II.2-31}$$

$$\rho_g \mathbf{v}_g = \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e \quad \text{II.2-32}$$

où  $\mathbf{v}_g$  est la vitesse barycentrique massique du mélange.

La sommation des équations de conservation de la masse de chaque constituant nous permet d'écrire l'équation classique de conservation de la masse de la phase gaz :

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}_g) = \sum_{e=1}^{Ne} r_e \quad \text{II.2-33}$$

Selon le postulat de Truesdell (1969), on a :

$$\sum_{e=1}^{N_e} r_e = 0 \quad \text{II.2-34}$$

On retrouve ainsi l'équation de conservation de la masse de la phase gaz

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}_g) = 0 \quad \text{II.2-35}$$

Cette équation est donnée à titre indicatif. Elle ne constitue pas une nouvelle équation puisqu'elle n'est pas indépendante des autres équations de conservation de la masse.

### **II.2.3.b Equations d'états**

Les équations d'états sont introduites afin de fermer notre problème en raison de l'inconnue de pression du mélange gazeux. Lors de la description du milieu poreux nous avons considéré la phase gaz comme un mélange idéal de gaz parfaits, d'où :

$$\rho_e = \frac{M_e P_e}{RT_e} \quad \text{Pour } e = 1, \dots, N_e \quad \text{II.2-36}$$

et

$$P_g = \sum_{e=1}^{N_e} P_e \quad \text{II.2-37}$$

où  $M_e$  est la masse molaire,  $P_e$  la pression partielle et  $T_e$  la température du constituant  $e$  avec  $R$  la constante des gaz parfaits.

### **II.2.3.c Conservation de la quantité de mouvement**

Un premier formalisme est obtenu en écrivant la conservation de la quantité de mouvement de chaque espèce du mélange.

#### **II.2.3.c.i Conservation de la quantité de mouvement des $N_e$ constituants $e$**

L'écriture de la conservation de la quantité de mouvement pour un constituant  $e$  conduit à (Slattery, 1981 ; Whitaker, 1987),

$$\rho_e \frac{D_{(e)} \mathbf{v}_e}{Dt} = \rho_e \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_e + \sum_{j=1, j \neq e}^{Ne} \mathbf{P}_{ej} + r_e (\mathbf{v}_e^* - \mathbf{v}_e) \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-38}$$

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_e = \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_e^T \quad \text{II.2-39}$$

avec

$$\frac{D_{(e)}}{Dt} = \frac{\partial ()}{\partial t} + \mathbf{v}_e \cdot \nabla () \quad \text{II.2-40}$$

Les termes  $\mathbf{v}_e$  et  $\mathbf{v}_e^*$  désignent respectivement la vitesse du constituant e et la vitesse du constituant e produite par réaction chimique,  $\mathbf{P}_{ej}$  est la force par unité de volume exercée par le constituant j sur le constituant e,  $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_e$  est le tenseur des contraintes du constituant e.

En développant la dérivée particulière et en écrivant sous forme conservative l'équation (II.2-38), on a :

$$\frac{\partial \rho_e \mathbf{v}_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e \mathbf{v}_e \otimes \mathbf{v}_e - \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_e) = \rho_e \mathbf{g} + \sum_{j=1, j \neq e}^{Ne} \mathbf{P}_{ej} + r_e \mathbf{v}_e^* \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-41}$$

L'impossibilité d'exprimer, voire de définir, pour chaque espèce, le tenseur  $\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_e$  oblige à chercher un autre formalisme issu des équations (II.2-41). La somme fournit la conservation de la quantité de mouvement du mélange. Les Ne-1 autres équations indépendantes nécessaires sont données par l'expression des flux diffusifs. Ici les lois de Fick généralisées sont retenues.

### II.2.3.c.ii Conservation de la quantité de mouvement du mélange gazeux et loi de Fick généralisée

En effectuant la sommation des équations de conservation de la quantité de mouvement de l'ensemble des constituants, on obtient l'équation de conservation pour le mélange soit :

$$\sum_{e=1}^{Ne} \frac{\partial \rho_e \mathbf{v}_e}{\partial t} + \sum_{e=1}^{Ne} \nabla \cdot (\rho_e \mathbf{v}_e \otimes \mathbf{v}_e - \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}_e) = \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{g} + \sum_{e=1}^{Ne} \sum_{j=1, j \neq e}^{Ne} \mathbf{P}_{ej} + \sum_{e=1}^{N_-} r_e \mathbf{v}_e^* \quad \text{II.2-42}$$

Sachant qu'il ne peut pas y avoir de perte ou de création de quantité de mouvement au sein du mélange phase gaz selon le postulat de (Truesdell, 1969) on a donc :

$$\sum_{e=1}^{Ne} \sum_{j=1, j \neq e}^{Ne} \mathbf{P}_{ej} = 0 \quad \text{II.2-43}$$

$$\sum_{e=1}^{Ne} r_e \mathbf{v}_e^* = 0 \quad \text{II.2-44}$$

En introduisant dans l'équation (II.2-42) les définitions de la masse volumique du mélange (II.2-31) et la vitesse barycentrique du mélange (II.2-32), on peut écrire :

$$\frac{\partial \rho_g \mathbf{v}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}_g \otimes \mathbf{v}_g - \underline{\underline{\sigma}}_g) = \rho_g \mathbf{g} \quad \text{II.2-45}$$

Avec  $\underline{\underline{\sigma}}_g$  le tenseur des contraintes de la phase gaz défini par Truesdell (1969) et Whitaker (1987) :

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \sum_{e=1}^{Ne} (\underline{\underline{\sigma}}_e - \rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g) \otimes (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g)) \quad \text{II.2-46}$$

respectant

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\sigma}}_g^T \quad \text{II.2-47}$$

On introduit la loi de comportement suivante pour définir le tenseur des contraintes  $\underline{\underline{\sigma}}_g$  :

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = -P_g \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_g \quad \text{II.2-48}$$

Les équations de conservation (II.2-41), constituent une base rigoureuse sur laquelle on peut s'appuyer pour établir les équations de Fick généralisées. En particulier le terme  $\sum_{j=1, j \neq e}^{Ne} \mathbf{P}_{ej}$  doit être traité avec attention puisqu'il est significatif des phénomènes de diffusion. En reprenant des idées issues de la théorie cinétique des gaz dilués de Maxwell, Whitaker (1987b) propose un modèle simple pour ces forces diffusives et l'injecte dans l'équation (II.2-41), de sorte que l'on obtient :

$$\frac{\partial \rho_e \mathbf{v}_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e \mathbf{v}_e \otimes \mathbf{v}_e - \underline{\underline{\sigma}}_e) = \rho_e \mathbf{g} + \sum_{j \neq e} P_g \frac{X_e X_j}{D_{ej}} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_e) + r_e \mathbf{v}_e^* \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-49}$$

où  $D_{ej}$  est le coefficient de diffusion pour la paire d'espèce e-j,  $X_e$  et  $X_j$  sont les fractions molaires des espèces e et j.

Par une analyse des ordres de grandeurs de l'équation (II.2-49), Whitaker (1987b) et Porras (2005) démontrent alors que, dans le cas où la diffusion est prépondérante, l'accélération locale,

## CHAPITRE II : Modélisation

l'accélération convective, les effets de la gravité et de la viscosité sont négligeables, et aboutissent aux relations de Stefan-Maxwell qui s'écrivent :

$$\nabla X_e = \sum_{j \neq e} \frac{X_e X_j}{D_{ej}} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_e) \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-50}$$

Il est alors possible de montrer l'équivalence entre ces relations et les lois de Fick généralisées pour un mélange gazeux (Taylor and Krishna, 1993; Krishna and Wesselingh, 1996; Quintard et al., 2006). Dans la suite, nous faisons la choix de ce formalisme et l'expression des coefficients de la loi de Fick généralisée est directement obtenue à partir des coefficients de diffusion de Stefan-Maxwell (Quintard et al., 2006).

Pour notre mélange gazeux nous avons donc :

$$\rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g) = -\rho_g \sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g} \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-51}$$

avec  $D_{ek}$  le coefficient de diffusion de l'espèce  $e$  par rapport à l'espèce  $k$  au sein du mélange gazeux. Notons que les  $Ne$  équations de Fick généralisées nous permettent de remplacer seulement  $Ne-1$  équations de conservation de la quantité de mouvement (II.2-41). En effet, les définitions de la masse volumique (II.2-31) et de la vitesse barycentrique (II.2-32) de la phase gaz imposent nécessairement que la somme des flux diffusifs soit nulle :

$$\sum_{e=1}^{Ne} -\rho_g \sum_{k=1}^{Ne} D_{ek} \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g} = 0 \quad \text{II.2-52}$$

En résumé, les  $Ne$  équations de conservation pour chaque constituant (II.2-41) sont remplacées par la conservation de la quantité de mouvement pour le mélange (II.2-45) et  $Ne-1$  équations de Fick généralisées (II.2-51).

### II.2.3.d Conservation de l'énergie

Pour l'écriture de la conservation de l'énergie nous faisons l'hypothèse suivante.

**Hypothèse 7** : l'équilibre thermique implique l'égalité des températures de chaque espèce du mélange gazeux.

$$T_e = T_g \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-53}$$

avec  $T_e$  et  $T_g$  respectivement les températures de chaque constituant  $e$  et du mélange.

## CHAPITRE II : Modélisation

Grâce à l'hypothèse 7, il est possible d'écrire la conservation de l'énergie avec une équation unique.

Sous sa forme enthalpique (Slattery, 1981 ; Whitaker, 1977), nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e h_e \right) + \nabla \cdot \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e h_e \right) = \\ -\nabla \cdot \mathbf{q}_g + \varphi_g + \frac{D_{(g)} P_g}{Dt} + \underline{\boldsymbol{\tau}}_g : \nabla \mathbf{v}_g + \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g) \cdot \mathbf{g} \\ - \rho_g \frac{D_{(g)}}{Dt} \sum_{e=1}^{Ne} \frac{1}{2} \frac{\rho_e}{\rho_g} (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g)^2 \end{aligned} \quad \text{II.2-54}$$

avec

$$\frac{D_{(g)}}{Dt} = \frac{\partial ()}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla () \quad \text{II.2-55}$$

Dans la suite de ce travail, nous considèrerons les restrictions suivantes (Whitaker, 1977).

**Hypothèse 8 :**  $\frac{D_{(g)} P_g}{Dt}$  et  $\underline{\boldsymbol{\tau}}_g : \nabla \mathbf{v}_g$  exprimant respectivement la variation d'énergie due au travail des forces de pression et la dissipation visqueuse interne au mélange gazeux sont négligeables face aux autres termes de l'équation de conservation de l'énergie.

**Hypothèse 9 :** La dérivée particulaire d'énergie cinétique diffusive est supposée négligeable :

$$\rho_g \frac{D_{(g)}}{Dt} \sum_{e=1}^{Ne} \frac{1}{2} \frac{\rho_e}{\rho_g} (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g)^2 = 0 \quad \text{II.2-56}$$

Le travail des forces volumiques diffusives est nul du fait de la définition (II.2-32) :

$$\sum_{e=1}^{Ne} \rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g) \cdot \mathbf{g} = 0 \quad \text{II.2-57}$$

Ainsi la conservation de l'énergie s'écrit en introduisant la loi de Fourier pour la conduction :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e h_e \right) + \nabla \cdot \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e h_e \right) = \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T_g) + \varphi_g \quad \text{II.2-58}$$

Enfin on suppose qu'il existe une équation d'état reliant l'enthalpie massique et la température, de la forme :

$$h_e = h_e(T_g) \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-59}$$

Avec pour définition de la chaleur massique :

$$\text{pour } e = 1, \dots, Ne \quad C_{P_e} = \left( \frac{\partial h_e}{\partial T_g} \right)_p \quad \text{II.2-60}$$

Ainsi on peut écrire :

$$\text{pour } e = 1, \dots, Ne \quad h_e = h_{e_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_g} C_{P_e}(T_g) dT \quad \text{II.2-61}$$

où  $h_{e_{ref}}$  représente l'enthalpie massique à la température de référence  $T_{ref}$  choisie de façon arbitraire pour tous les constituants gazeux à l'exception de la vapeur d'eau. En effet le choix de la référence liquide conditionne l'écriture de l'enthalpie de la vapeur.

$$h_{v_{ref}} = h_{l_{ref}} + \Delta H_v(T_{ref}) \quad \text{II.2-62}$$

avec  $\Delta H_v(T_{ref})$  l'enthalpie de vaporisation à la température de référence.

La description des phénomènes de transport au sein du milieu poreux s'achève par la caractérisation des conditions aux interfaces entre les différentes phases. Il s'agit des conditions limites classiques entre milieux continus (Slattery, 1999).

## II.2.4 Conditions aux interfaces

Considérons deux phases continues  $\alpha$  et  $\beta$ , séparées par une interface  $A_{\alpha\beta}$  animée d'une vitesse que l'on notera  $\mathbf{w}_{\alpha\beta}$ . Il existe globalement deux types de conditions aux limites entre deux milieux continus : la continuité des flux et la continuité des scalaires.

La continuité des flux de matière, de quantité de mouvement et de chaleur traversant l'interface constituent les conditions limites naturelles. Ces relations peuvent être démontrées à partir de l'écriture des équations de conservation dans chacune des phases (Slattery, 1999 ; Slattery 1993).

Les expressions mathématiques des conditions limites sont listées ci-dessous:

**Continuité du flux de matière pour une espèce  $e$ ,  $e = 1, \dots, Ne$**

$$\rho_{e\alpha} (\mathbf{v}_{e\alpha} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} = \rho_{e\beta} (\mathbf{v}_{e\beta} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} + r_{e\alpha\beta} \quad \text{II.2-63}$$

où  $r_{e\alpha\beta}$  représente le taux surfacique de production/disparition du constituant  $e$  par réaction hétérogène sur l'interface  $\alpha\beta$ . Bien entendu, pour les espèces non impliquées dans des réactions

hétérogènes, ce terme est nul. A noter que lorsque ce constituant n'est présent que dans une seule des deux phases (par exemple  $\alpha$ ) la concentration massique  $\rho_{e\beta}$  s'annule, le second membre est alors amputé du premier terme et l'équation précédente devient :

$$\rho_{e\alpha}(\mathbf{v}_{e\alpha} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} = r_{e\alpha\beta} \quad e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-64}$$

En prenant en compte la définition de la vitesse barycentrique d'une phase (II.2-32), la somme des équations (II.2-63) sur l'ensemble des composants amène à la continuité des flux de matière totale :

$$\rho_{\alpha}(\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} = \rho_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{w}_{\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} + \sum_{e=1}^{Ne} r_{e\alpha\beta} \quad \text{II.2-65}$$

Bien entendu, de même qu'on ne peut créer ou perdre de la matière au sein d'une phase, on ne peut pas non plus en créer ou en perdre sur l'interface  $A_{\alpha\beta}$ , et on doit nécessairement avoir

$$\sum_{e=1}^{Ne} r_{e\alpha\beta} = 0 \quad \text{II.2-66}$$

de sorte que la continuité du flux de matière total traversant une interface s'écrit finalement :

$$\rho_{\alpha}(\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} = \rho_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{w}_{\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} \quad \text{II.2-67}$$

### ***Continuité du flux de quantité de mouvement***

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}(\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} - \underline{\underline{\sigma}}_{\alpha} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} = \\ \rho_{\beta} \mathbf{v}_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{w}_{\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} - \underline{\underline{\sigma}}_{\beta} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} + \sigma \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \end{aligned} \quad \text{II.2-68}$$

Le dernier terme du membre de droite de cette équation représente la contribution des efforts de tension superficielle ( $\sigma$ ) au sein de l'interface. Ils seront nuls ou négligeables dans tous les cas autre que celui de l'interface gaz/liquide, lorsque les rayons de courbure principaux  $R_1$  et  $R_2$  restent faibles ( $R_1, R_2 < 10\mu\text{m}$ ). A noter que lorsqu'une des deux phases est rigide, le tenseur des contraintes au sein de la phase n'est pas défini et cette équation n'a plus lieu d'être traitée.

### ***Continuité du flux de chaleur***

- entre deux phases monocomposant :

$$\rho_{\alpha} h_{\alpha}(\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} - \lambda_{\alpha} \nabla T_{\alpha} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} = \rho_{\beta} h_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{w}_{\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} - \lambda_{\beta} \nabla T_{\beta} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} \quad \text{II.2-69}$$

- entre une phase monocomposant ( $\alpha$ ) et une phase multicomposant ( $\beta$ ) :

$$\rho_{\alpha} h_{\alpha} (\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{w}_{\alpha\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} - \lambda_{\alpha} \nabla T_{\alpha} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} = \sum_{e=1}^{N_e} (\rho_{e\beta} h_{e\beta} (\mathbf{v}_{e\beta} - \mathbf{w}_{\beta}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta}) - \lambda_{\beta} \nabla T_{\beta} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} \quad \text{II.2-70}$$

L'autre type de conditions limites concernent la continuité de certaines grandeurs scalaires, provenant de l'introduction d'une hypothèse supplémentaire, en général l'équilibre thermodynamique local sur l'interface (Slattery, 1999) qui se traduit par :

***L'équilibre thermique***

$$T_{\alpha} = T_{\beta} \quad \text{sur } A_{\alpha\beta} \quad \text{II.2-71}$$

***L'équilibre mécanique, qui s'exprime par la continuité des vitesses tangentielles entre les deux milieux***

$$\mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_{\beta} \cdot \mathbf{t} \quad \text{sur } A_{\alpha\beta} \quad \text{II.2-72}$$

où  $\mathbf{t}$  est un vecteur tangent à l'interface. Cette équation est aussi connue sous l'appellation de « condition d'adhérence » entre les deux milieux  $\alpha$  et  $\beta$ .

***L'équilibre chimique des constituants présents dans les deux phases***

$$\mu_{e\alpha} = \mu_{e\beta} \quad \text{sur } A_{\alpha\beta} \quad \text{II.2-73}$$

où  $\mu_{e(\alpha,\beta)}$  représente le potentiel chimique de l'espèce  $e$  dans la phase  $\alpha$  ou  $\beta$ .

Maintenant que le cadre général des conditions aux limites entre deux phases est donné, étudions chaque interface au cas par cas.

#### ***II.2.4.a Interfaces liquide(l) /solides(s) $A_{ls}$***

Les phases solides sont non miscibles dans la phase liquide. En l'absence de réactions hétérogènes vers la phase liquide le flux de matière traversant l'interface est nul et d'après l'équation (II.2-67), on a :

$$\rho_s (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{sl}) \cdot \mathbf{n}_{sl} = 0 \quad \text{pour } s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-74}$$

$$\rho_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{w}_{sl}) \cdot \mathbf{n}_{ls} = 0 \quad \text{pour } s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-75}$$

avec  $\mathbf{n}_{sl} = -\mathbf{n}_{ls}$  la normale sortante à la phase solide.

## CHAPITRE II : Modélisation

La phase solide étant indéformable, la continuité du flux de quantité de mouvement (II.2-68) ne s'applique donc pas dans ce cas.

Le flux de matière étant nul, l'équation (II.2-69) se simplifie pour donner :

$$(\lambda_s \nabla T_s) \cdot \mathbf{n}_{sl} = (\lambda_l \nabla T_l) \cdot \mathbf{n}_{ls} \quad \text{pour } s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-76}$$

i.e la continuité du flux de chaleur est celle d'un flux conductif.

L'hypothèse de l'équilibre thermodynamique sur les interfaces se traduit par la continuité des températures et des vitesses tangentielles entre le liquide et les solides. D'après l'équation (II.2-71), on peut alors écrire :

$$T_l = T_{MO} \quad \text{II.2-77}$$

$$T_l = T_{CI} \quad \text{II.2-78}$$

$$T_l = T_{CR} \quad \text{II.2-79}$$

La condition d'adhérence (II.2-72) entre les phases aboutit à l'égalité des vitesses tangentielles :

$$\mathbf{v}_l \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{t} \quad \text{pour } s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.2-80}$$

avec  $\mathbf{t}$  le vecteur unitaire tangent à l'interface.

### II.2.4.b Interface gaz(g) /liquide(l)

On suppose que l'interface gaz/liquide est imperméable aux espèces gaz autre que la vapeur d'eau.

La continuité des flux de matière (II.2-67) s'exprime donc par

$$\rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{gl} = 0 \quad \forall e \neq v \quad \text{II.2-81}$$

$$\rho_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{lg} = \rho_v (\mathbf{v}_v - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{lg} \quad \text{II.2-82}$$

avec  $\mathbf{n}_{lg} = -\mathbf{n}_{gl}$ ,  $\mathbf{w}_{lg}$  représentant la vitesse de l'interface liquide/gaz.

L'écriture de la continuité du flux de quantité de mouvement (II.2-68) entre l'interface liquide/gaz aboutit à :

$$\rho_l \mathbf{v}_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{lg} + \underline{\underline{\sigma}}_l \cdot \mathbf{n}_{lg} = \rho_g \mathbf{v}_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{lg} + \underline{\underline{\sigma}}_g \cdot \mathbf{n}_{lg} + \sigma \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad \text{II.2-83}$$

La continuité du flux de chaleur entre les deux phases s'écrit, d'après (II.2-69)

$$(\rho_l h_l(\mathbf{v}_l - \mathbf{w}_{lg}) - \lambda_l \nabla T_l) \cdot \mathbf{n}_{lg} = \left( \sum_{e=1,Ne} \rho_e h_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{lg}) - \lambda_g \nabla T_g \right) \cdot \mathbf{n}_{lg} \quad \text{II.2-84}$$

L'hypothèse de l'équilibre thermodynamique sur l'interface gaz/liquide implique la continuité des températures, des vitesses tangentielles et des potentiels chimiques de l'eau, seul constituant présent dans les deux phases. On a donc, d'après (II.2-73)

$$\mu_l = \mu_v \quad \text{II.2-85}$$

L'écriture de l'équilibre thermique (II.2-71) implique

$$T_l = T_g \quad \text{II.2-86}$$

La condition d'adhérence traduisant l'équilibre mécanique entre ces deux phases s'écrit d'après (II.2-72)

$$\mathbf{v}_l \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{t} \quad \text{II.2-87}$$

#### **II.2.4.c Interface gaz(g) /solides(s) $A_{gs}$**

Lors de la dégradation thermique du déchet par pyrolyse, la production de gaz est modélisée par le biais de réactions hétérogènes à l'interface gaz/matière organique. De la même manière, on peut exprimer l'ensemble des réactions de combustion et de gazéification à l'interface gaz/char. L'écriture de la continuité du flux massique à ces interfaces fait donc apparaître les taux de réactions hétérogènes de pyrolyse du déchet, de combustion et de gazéification du char (cf paragraphes II.1.1 et II.1.2). Ces taux sont trouvés sous la forme générique  $r_{e\alpha\beta}$  dans le modèle général de conditions aux limites entre deux milieux continus présenté précédemment (II.2-63). A cette échelle nous ne disposons d'aucune donnée permettant d'explicitier ces réactions. En effet l'expérimentation nous apporte uniquement une information volumique et il n'existe pour l'heure aucun modèle théorique à l'échelle des phases. Ceci ne pose pas de problème pour l'écriture du modèle à l'échelle locale car nous ne nous intéresserons qu'à la moyenne sur le VER (cf chapitre III). On pourra alors utiliser un modèle comme celui proposé par Thurner and Mann (1981).

#### **II.2.4.c.i Gaz/Matière organique (MO) $A_{MOg}$**

Cette interface est le lieu de la pyrolyse du déchet. L'écriture de la continuité du flux massique fait apparaître les termes de production de gaz et de consommation de MO par réactions hétérogènes. La phase MO étant monoconstituante, l'équation de continuité du flux de MO à travers l'interface s'écrit, d'après l'équation (II.2-64),

$$\rho_{MO}(\mathbf{v}_{MO} - \mathbf{w}_{MOg}) \cdot \mathbf{n}_{MOg} = r_{MOg} \quad \text{II.2-88}$$

où  $r_{MOg}$  représente le taux volumique de pyrolyse sur l'interface gaz/MO. De même, pour la phase gaz, étant donné que le constituant  $e$  n'est présent que dans cette phase, la condition de continuité du flux de matière pour une espèce  $e$  s'écrit directement sous la forme (II.2-64). Après avoir identifié  $g$  à  $\alpha$  et MO à  $\beta$ , on a donc :

$$\rho_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{MOg}) \cdot \mathbf{n}_{gMO} = r_{eMO} \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-89}$$

En effectuant la somme sur tous les constituants présents dans chacune des deux phases, des deux dernières équations, on aboutit à la continuité du flux total de matière traversant l'interface g/MO :

$$\rho_{MO}(\mathbf{v}_{MO} - \mathbf{w}_{MOg}) \cdot \mathbf{n}_{MOg} = \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{MOg}) \cdot \mathbf{n}_{gMO} \quad \text{II.2-90}$$

avec, implicitement :

$$\sum_{e=1, \dots, Ne} r_{eMO} = -r_{MOg} \quad \text{II.2-91}$$

Comme pour les interfaces liquide/solides la continuité du flux de quantité de mouvement ne s'applique pas ici.

La condition de continuité du flux de chaleur pour une espèce  $e$  s'écrit directement sous la forme (II.2-70). Après avoir identifié  $g$  à  $\alpha$  et MO à  $\beta$ , on a donc:

$$\begin{aligned} & (\rho_{MO} h_{MO}(\mathbf{v}_{MO} - \mathbf{w}_{MOg}) - \lambda_{MO} \nabla T_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MOg} \\ & = \left( \sum_{e=1, Ne} \rho_e h_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{MOg}) - \lambda_g \nabla T_g \right) \cdot \mathbf{n}_{MOg} \end{aligned} \quad \text{II.2-92}$$

L'hypothèse d'équilibre thermique implique

$$T_{MO} = T_g \quad \text{II.2-93}$$

La traduction de la condition d'adhérence s'écrit

$$\mathbf{v}_{MO} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{t} \quad \text{II.2-94}$$

**II.2.4.c.ii Gaz/Charbon (CR)  $A_{CRg}$**

La description des conditions limites entre ces deux interfaces, permet l'introduction des réactions hétérogènes de combustion et de gazéification du char par le gaz. Le constituant char étant présent uniquement dans la phase CR, la continuité du flux massique, écrite en (II.2-64), donne directement :

$$\rho_{CR}(\mathbf{v}_{CR} - \mathbf{w}_{CRg}) \cdot \mathbf{n}_{CRg} = r_{CRg} \quad \text{II.2-95}$$

où  $r_{CRg}$  représente le taux volumique de disparition de CR par combustion et gazéification. Pour la phase gaz, il vient :

$$\rho_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{CRg}) \cdot \mathbf{n}_{gCR} = r_{ecr\ comb} + r_{ecr\ gaz\ é} \quad \text{Pour } e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-96}$$

Avec, le taux global de réaction hétérogène qui est cette fois-ci, la somme des contributions dues à la combustion et à la gazéification :

$$\text{pour } e = 1, \dots, Ne \quad r_{ecr} = r_{ecr\ comb} + r_{ecr\ gaz\ é} \quad \text{II.2-97}$$

En effectuant la somme sur tous les constituants présents dans chacune des deux phases, des deux dernières équations, on aboutit à la continuité du flux total de matière traversant l'interface g/CR

$$\rho_{CR}(\mathbf{v}_{CR} - \mathbf{w}_{CRg}) \cdot \mathbf{n}_{CRg} = \sum_{e=1}^{Ne} (\rho_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{CRg})) \cdot \mathbf{n}_{CRg} \quad \text{II.2-98}$$

avec, là encore, une relation implicite sur les taux de réaction, provenant de (II.2-98) :

$$\sum_{e=1, \dots, Ne} r_{ecr\ comb} + r_{ecr\ gaz\ é} = -r_{CRg} \quad \text{II.2-99}$$

Ici aussi, la continuité du flux de quantité de mouvement ne s'applique pas.

L'écriture de la continuité du flux d'énergie conduit à :

$$\begin{aligned} & (\rho_{CR} h_{CR}(\mathbf{v}_{CR} - \mathbf{w}_{CRg}) - \lambda_{CR} \nabla T_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CRg} \\ & = \left( \sum_{e=1, Ne} \rho_e h_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{CRg}) - \lambda_g \nabla T_g \right) \cdot \mathbf{n}_{CRg} \end{aligned} \quad \text{II.2-100}$$

Sur cette interface, l'hypothèse d'équilibre thermique impose d'une part (II.2-71) qui s'écrit ici

$$T_{CR} = T_g \quad \text{II.2-101}$$

ainsi que la condition d'adhérence qui s'exprime par la relation suivante :

$$\mathbf{v}_{CR} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{t} \quad \text{II.2-102}$$

### II.2.4.c.iii Gaz/Cendres inertes (CI) $A_{CIg}$

Le caractère inerte nous permet, en partant de l'équation de continuité du flux d'une espèce à travers une interface (II.2-64), d'aboutir directement à :

$$\rho_{CI}(\mathbf{v}_{CI} - \mathbf{w}_{CIg}) \cdot \mathbf{n}_{CIg} = 0 \quad \text{II.2-103}$$

De même pour la phase gaz :

$$\rho_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{CIg}) \cdot \mathbf{n}_{CIg} = 0 \quad e = 1, \dots, Ne \quad \text{II.2-104}$$

Une fois encore, la continuité du flux de quantité de mouvement ne peut pas être écrite ici.

La continuité du flux de chaleur donne, d'après (II.2-70)

$$(\rho_{CI} h_{CI}(\mathbf{v}_{CI} - \mathbf{w}_{CIg}) - \lambda_{CI} \nabla T_{CI}) \cdot \mathbf{n}_{CIg} = \left( \sum_e \rho_e h_e(\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{CIg}) - \lambda_g \nabla T_g \right) \cdot \mathbf{n}_{CIg} \quad \text{II.2-105}$$

ce qui, en prenant en compte les équations (II.2-103) et (II.2-104) amène à :

$$\lambda_{CI} \nabla T_{CI} \cdot \mathbf{n}_{CIg} = \lambda_g \nabla T_g \cdot \mathbf{n}_{CIg} \quad \text{II.2-106}$$

c'est-à-dire, la continuité des flux conductifs à travers l'interface.

Les conditions d'équilibre thermique et d'adhérence, nous donne :

$$T_{CI} = T_g \quad \text{II.2-107}$$

et

$$\mathbf{v}_{CI} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{t} \quad \text{II.2-108}$$

### II.2.4.d Interfaces solide /solide

#### II.2.4.d.i Matière organique(MO)/Char(CR) $A_{MOCR}$

Lors de la pyrolyse, la matière organique est dégradée thermiquement produisant ainsi du char (cf

paragraphe II.1.1 et II.1.2). La continuité du flux massique entre les deux phases solides (II.2-67) fait apparaître le taux de production de charbon et le taux de consommation de matière organique décrits par des termes de réactions hétérogènes, on obtient alors :

$$\rho_{MO}(\mathbf{v}_{MO} - \mathbf{w}_{MOCR}) \cdot \mathbf{n}_{MOCR} = r_{MOCR} \quad \text{II.2-109}$$

$$\rho_{CR}(\mathbf{v}_{CR} - \mathbf{w}_{MOCR}) \cdot \mathbf{n}_{CRMO} = -r_{MOCR} \quad \text{II.2-110}$$

Les solides sont indéformables donc l'écriture de la continuité de la quantité de mouvement est impossible.

La continuité du flux d'énergie (II.2-69) entre les deux phases solides s'écrit :

$$\begin{aligned} &(\rho_{MO}h_{MO}(\mathbf{v}_{MO} - \mathbf{w}_{MOCR}) - \lambda_{MO}\nabla T_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MOCR} && \text{II.2-111} \\ &= (\rho_{CR}h_{CR}(\mathbf{v}_{CR} - \mathbf{w}_{MOCR}) - \lambda_{CR}\nabla T_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{MOCR} \end{aligned}$$

La continuité des scalaires entre ces deux phases donne sous l'hypothèse d'équilibre thermique et avec la condition d'adhérence :

$$T_{MO} = T_{CR} \quad \text{II.2-112}$$

et

$$\mathbf{v}_{MO} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_{CR} \cdot \mathbf{t} \quad \text{II.2-113}$$

#### **II.2.4.d.ii Matière organique(MO) ou charbon(CR) / Cendres inertes(CI)**

Les conditions aux limites étant identiques pour les interfaces CI/MO et CI/CR, leur traitement est synthétisé dans un même paragraphe, en utilisant l'indice générique « s » pour les phases MO et CR. Ainsi, aucun transfert de matière n'ayant lieu entre ces deux phases solides, la continuité des flux massiques (II.2-67) aboutit à :

$$\rho_s(\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{sCI}) \cdot \mathbf{n}_{sCI} = 0 \quad \text{pour } s = MO, CR \quad \text{II.2-114}$$

$$\rho_{CI}(\mathbf{v}_{CI} - \mathbf{w}_{sCI}) \cdot \mathbf{n}_{CI s} = 0 \quad \text{pour } s = MO, CR \quad \text{II.2-115}$$

## CHAPITRE II : Modélisation

La continuité du flux de chaleur exprimé en fonction de (II.2-69) donne, en tenant compte de (II.2-114) et (II.2-115) :

$$\lambda_s \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{sCl} = \lambda_{Cl} \nabla T_{Cl} \cdot \mathbf{n}_{sCl} \quad \text{pour } s = MO, CR \quad \text{II.2-116}$$

Les équilibres thermique et mécanique entre les deux phases se traduisent par

$$T_s = T_{Cl} \quad \text{pour } s = MO, CR \quad \text{II.2-117}$$

et

$$\mathbf{v}_s \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_{Cl} \cdot \mathbf{t} \quad \text{pour } s = MO, CR \quad \text{II.2-118}$$

**II.2.5 Récapitulatif des équations à l'échelle des phases**

<u>Phase liquide</u>		
Conservation de la masse	$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{v}_l) = 0$	(II.2-14)
Conservation du volume	$\rho_l = cste$	(II.2-16)
Conservation de la quantité de mouvement		
	$\frac{\partial \rho_l \mathbf{v}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{v}_l \otimes \mathbf{v}_l) = \rho_l \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}_l$	(II.2-20)
avec	$\underline{\underline{\sigma}}_l = \underline{\underline{\sigma}}_l^T$	(II.2-18)
et	$\underline{\underline{\sigma}}_l = -P_l \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_l$	(II.2-24)
Conservation de l'énergie	$\frac{\partial \rho_l h_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l h_l \mathbf{v}_l) = \nabla \cdot (\lambda_l \nabla T_l) + \varphi_l$	(II.2-26)
avec	$h_l - h_{l_{ref}} = C_{P_l}(T_l - T_{ref}) - \Delta H_D(T_l, a_w)$	(II.2-29)

<u>Phases solides pour s=MO, CI, CR</u>		
Conservation de la masse	$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \mathbf{v}_s) = 0$	(II.2-3)
Conservation de la quantité de mouvement		
	$\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{s0}(t)$	(II.2-2)
Conservation de l'énergie	$\frac{\partial \rho_s h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s - \lambda_s \nabla T_s) = \varphi_s$	(II.2-9)
avec	$h_s - h_{s_{ref}} = C_s(T_s - T_{ref})$	(II.2-12)

<u>Phase gaz multiconstituant</u>		
Conservation de la masse	$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e \mathbf{v}_e) = r_e$	(II.2-30)
avec	$\sum_{e=1}^{N_e} r_e = 0$	(II.2-34)
Equations d'états	$\rho_e = \frac{M_e P_e}{RT_g}$	(II.2-36)
et	$\rho_g = \sum_{e=1}^{N_e} \rho_e$	(II.2-31)
Conservation de la quantité de mouvement		
	$\frac{\partial \rho_g \mathbf{v}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}_g \otimes \mathbf{v}_g - \underline{\underline{\sigma}}_g) = \rho_g \mathbf{g}$	(II.2-45)
avec	$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\sigma}}_g^T$	(II.2-47)
	$\underline{\underline{\sigma}}_g = -P_g \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_g$	(II.2-48)
	$P_g = \sum_{e=1}^{N_e} P_e$	
et	$\rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g) = -\rho_g \sum_{k=1}^{N_e-1} D_{ek} \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g} \text{ pour } e=1, \dots, N_e$	(II.2-51)
avec	$\rho_g \mathbf{v}_g = \sum_{e=1}^{N_e} \rho_e \mathbf{v}_e$	(II.2-32)
Conservation de l'énergie		
	$\frac{\partial}{\partial t} (\sum_{e=1}^{N_e} \rho_e h_e) + \nabla \cdot (\sum_{e=1}^{N_e} \rho_e \mathbf{v}_e h_e - \lambda_g \nabla T_g) = \varphi_g$	(II.2-58)
avec	pour $e = 1, \dots, N_e$ $h_e = h_{e_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_g} C_{P_e}(T_g) dT$	(II.2-61)

Les phases sont liées par le jeu de conditions aux limites explicité au paragraphe II.2.4.

### ***II.3Echelle locale***

La description à l'échelle des phases du paragraphe précédent constitue une représentation idéale des mécanismes mis en jeu au sein du lit de déchets. Néanmoins, la résolution à cette échelle n'est théoriquement possible qu'à condition de connaître la répartition exacte de chaque phase à chaque instant. L'hétérogénéité des phases solides, leur perpétuelle évolution au cours du temps induites par le phénomène de gazéification, l'évolution de la phase liquide associée à l'évaporation sont autant de paramètres empêchant la connaissance de cette répartition géographique. La prise de moyenne volumique est une technique de changement d'échelle qui permet de s'affranchir de la donnée précise de la structure interne du milieu. L'ensemble des équations associées à chacune des phases est intégré sur un volume élémentaire représentatif (V.E.R) noté V. Les équations moyennées ainsi obtenues gèrent les évolutions des moyennes des quantités physiques, intégrales sur le V.E.R des valeurs des quantités à l'échelle des phases (Gray, 1975 ; Whitaker, 1977, 1999 ; Slattery, 1981).

#### **II.3.1 La prise de moyenne volumique**

Par le biais du changement d'échelle, notre milieu hétérogène devient un milieu homogène équivalent. Cette méthode de changement d'échelle est applicable aux milieux vérifiant la condition suivante,

$$l_s, l_l, l_g \ll r \ll L \quad \text{II.3-1}$$

où  $l_s, l_l$  et  $l_g$  sont les dimensions caractéristiques des phases solides, liquide et gaz,  $r$  étant le rayon du V.E.R et  $L$  la dimension caractéristique du milieu. La première partie de l'inégalité assure une taille de V.E.R suffisamment grande pour que la valeur de la moyenne d'une grandeur ne dépende pas de l'hétérogénéité microscopique. La seconde partie permet d'assimiler un V.E.R, à l'échelle locale, à un point géométrique.

On distingue deux moyennes définissant la valeur locale d'une grandeur  $f_\alpha$  associée à une phase  $\alpha$  en un point du milieu homogène équivalent :

- la moyenne de phase  $\alpha$  définie par

$$\bar{f}_\alpha = \frac{1}{V} \int_V f_\alpha \, dv \quad \text{II.3-2}$$

- la moyenne intrinsèque de phase  $\alpha$  définie par

$$\bar{f}_\alpha^\alpha = \frac{1}{V_\alpha} \int_V f_\alpha \, dv \quad \text{II.3-3}$$

avec ici  $V_\alpha$  le volume de la phase  $\alpha$  ( $\alpha=MO, CI, CR, l, g$ ) inclus dans le V.E.R.

### II.3.2 Nouvelles inconnues de la prise de moyenne volumique

Les deux moyennes précédemment décrites sont liées entre elles par

$$\bar{f}_\alpha = \varepsilon_\alpha \bar{f}_\alpha^\alpha \quad \text{II.3-4}$$

où la fraction volumique de la phase  $\alpha$ ,  $\varepsilon_\alpha$ , est donnée par :

$$\varepsilon_\alpha = \frac{V_\alpha}{V} \quad \alpha = MO, CI, CR, l, g \quad \text{II.3-5}$$

A l'échelle locale, le V.E.R devient un point géométrique et ainsi les fractions volumiques deviennent des variables de la description liées par la loi de répartition des volumes du fait du caractère multiphasique du milieu :

$$\sum_\alpha \varepsilon_\alpha = 1 \quad \text{II.3-6}$$

Soit dans notre cas :

$$\varepsilon_{MO} + \varepsilon_{CR} + \varepsilon_{CI} + \varepsilon_l + \varepsilon_g = 1 \quad \text{II.3-7}$$

On observe donc que la technique d'homogénéisation introduit, à l'échelle locale, cinq inconnues supplémentaires par rapport à l'échelle des phases, liées par l'équation (II.3-7). Un déficit de quatre équations doit donc être comblé. Trois d'entre elles peuvent être trouvées en remarquant que le caractère rigide des phases solides ( $\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{s0}(t)$ ) implique nécessairement la conservation du volume de ces phases :

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}_s) = 0 \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-8}$$

Sous l'hypothèse peu contraignante de phases solides homogènes ( $\nabla \rho_s = 0$ ), l'équation (II.3-8) devient :

$$\rho_s = \text{cste} \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-9}$$

La prise de moyenne de ces trois équations fournira donc trois relations supplémentaires. La dernière sera trouvée dans le lien classique entre la pression des phases liquide et gaz via la pression capillaire.

### II.3.3 Théorèmes généraux

Ici seront présentés les outils mathématiques de la prise de moyenne utilisés par la suite pour l'écriture du modèle à l'échelle locale à partir de l'échelle des phases. Les résultats de Gray (1975), Whitaker (1977) et Slaterry (1999) nous permettent d'énoncer les théorèmes généraux de la prise de moyenne volumique.

#### II.3.3.a Théorème de transport

Soit  $f_\alpha$  une grandeur scalaire associée à la phase  $\alpha$  d'un milieu multiphasique. On peut écrire :

$$\frac{\overline{\partial f_\alpha}}{\partial t} = \frac{Df_\alpha}{Dt} - \frac{1}{V} \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{A_{\alpha\beta}} f_\alpha \mathbf{w}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \quad \alpha = \text{MO, CI, CR, l, g avec } \beta \neq \alpha \quad \text{II.3-10}$$

où l'indice  $\beta$  balaye les phases différentes de  $\alpha$ ,  $\mathbf{w}_{\alpha\beta}$  représente la vitesse de l'interface  $A_{\alpha\beta}$  et  $\mathbf{n}_{\alpha\beta}$  le vecteur normal à l'interface. De plus, le V.E.R étant considéré comme fixe dans l'espace, on peut remplacer la dérivée particulière d'une fonction par sa dérivée partielle (Whitaker, 1977), d'où :

$$\frac{\overline{\partial f_\alpha}}{\partial t} = \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} - \frac{1}{V} \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{A_{\alpha\beta}} f_\alpha \mathbf{w}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \quad \text{II.3-11}$$

Cette équation étant la forme finale du théorème de transport.

**II.3.3.b Théorèmes du gradient et de la divergence**

Soit  $f_\alpha$  une grandeur scalaire associée à la phase  $\alpha$  d'un milieu multiphasique, alors :

$$\overline{\nabla f_\alpha} = \nabla \bar{f}_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} f_\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \quad \text{II.3-12}$$

Soit  $\mathbf{f}_\alpha$  une grandeur tensorielle d'ordre 1 (vecteur) ou 2 associée à la phase  $\alpha$  d'un milieu multiphasique, alors :

$$\overline{\nabla \cdot \mathbf{f}_\alpha} = \nabla \cdot \bar{\mathbf{f}}_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \mathbf{f}_\alpha \cdot \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \quad \text{II.3-13}$$

**II.3.3.c Décomposition de Gray**

La décomposition de Gray permet de définir toute grandeur physique  $f_\alpha$  comme la somme de la moyenne intrinsèque de la phase et de sa déviation spatiale, notée  $\tilde{f}_\alpha$ . Cette déviation spatiale représente l'écart entre la grandeur et la moyenne intrinsèque de la phase dans le V.E.R, d'où :

$$f_\alpha = \bar{f}_\alpha^\alpha + \tilde{f}_\alpha \quad \text{II.3-14}$$

Cette décomposition permet d'exprimer la moyenne du produit de deux grandeurs physiques en fonction du produit des moyennes. Ainsi pour deux grandeurs physiques  $f_\alpha$  et  $g_\alpha$ , on a :

$$\overline{f_\alpha g_\alpha} = \bar{f}_\alpha^\alpha \bar{g}_\alpha + \overline{\tilde{f}_\alpha \tilde{g}_\alpha} = \bar{f}_\alpha \bar{g}_\alpha^\alpha + \overline{\tilde{f}_\alpha \tilde{g}_\alpha} \quad \text{II.3-15}$$

On supposera ici pour certaines fonctions  $F$  que leurs moyennes sont égales aux fonctions de la moyenne des variables, sous l'hypothèse de négliger pour ces fonctions les déviations des variables par rapport aux moyennes des variables soit :

$$si \tilde{x}_i \ll \bar{x}_i^\alpha \quad \forall i = 1, n \quad \overline{F(x_1, x_2, \dots, x_n)^\alpha} = F(\bar{x}_1^\alpha, \bar{x}_2^\alpha, \dots, \bar{x}_n^\alpha) \quad \text{II.3-16}$$

### II.3.4 Equations de conservation du volume

#### II.3.4.a Phases solides

Nous allons donc nous employer à décrire le milieu homogène équivalent à partir des équations à l'échelle des phases. L'intégration de l'équation de conservation du volume pour les phases solides (II.3-9) sur le VER nous donne directement :

$$\bar{\rho}_s^S = \rho_s = cste \quad \text{pour } s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-17}$$

Les équations de conservation du volume des phases solides, après prise de moyenne (II.3-17) constituent trois nouvelles équations associés à trois des cinq nouvelles inconnues que sont les fractions volumiques, caractéristiques de la prise de moyenne volumique.

#### II.3.4.b Phase liquide

En effectuant le même traitement pour la phase liquide que sur les phases solides la conservation du volume au cours du mouvement à l'échelle locale s'exprime

$$\bar{\rho}_l^l = \rho_l = cste \quad \text{II.3-18}$$

### II.3.5 Lois thermodynamiques et hypothèses

#### II.3.5.a Equations d'états

En appliquant la relation sur la moyenne d'une fonction de variables (II.3-16) à l'équation des gaz parfaits (II.2-36), on aboutit à :

$$\bar{\rho}_e^g = \frac{M_e \bar{P}_e^g}{R \bar{T}_g^g} \quad \text{II.3-19}$$

En outre les équations (II.2-31) et (II.2-37) deviennent :

$$\bar{\rho}_g^g = \sum_e \bar{\rho}_e^g \quad \text{II.3-20}$$

$$\bar{P}_g^g = \sum_e \bar{P}_e^g$$

II.3-21

### ***II.3.5.b Equilibre thermodynamique local***

L'équilibre thermodynamique local est défini par Whitaker (1980), pour un cas de séchage sans réaction, comme étant la combinaison de l'équilibre thermique et de l'équilibre de masse (ou chimique). Ce dernier implique l'égalité des potentiels chimiques. Dans notre cas réactif une discussion sur le traitement des termes de réactions doit être menée.

#### - Equilibre thermique local

Comme on l'a vu précédemment, dans le cas général, on définit une température par phase dans un milieu multiphasique. L'hypothèse d'équilibre thermique local consiste à supposer que l'écart des températures entre les phases est suffisamment faible au sein du V.E.R pour que la thermique puisse être décrite à l'aide d'une température macroscopique unique. Cette hypothèse simplifie largement le problème puisqu'elle conduit à un modèle à une équation pour la conservation de l'énergie. Quintard et Whitaker (1993), et Gobbé et Quintard (1994), développent les conditions dans lesquelles l'hypothèse d'équilibre thermique est justifiée, dans le cas d'un milieu poreux diphasique non réactif. Ils montrent notamment que la taille des pores et le rapport des conductivités thermiques des phases en présence jouent un rôle important sur la validité de cette hypothèse. Dans le cas du séchage à moyenne température d'un milieu poreux granulaire, Whitaker (1980) valide l'hypothèse d'équilibre thermique. Le cas où le milieu est réactif est plus complexe car le caractère endo ou exo thermique des réactions peut avoir une influence importante sur les transferts interfaciaux et donc sur l'équilibre thermique en lui-même. Dans le cas d'un réacteur catalytique représenté par un milieu diphasique réactif, Whitaker (1984b) aboutit à une contrainte impliquant notamment le flux de chaleur libéré par les réactions hétérogènes. Chenu (2007) étudie l'équilibre thermique local dans le cas de la modélisation des transferts réactifs de chaleur et de matière dans les installations de stockage de déchets ménagers. Il montre en particulier que, le temps caractéristique associé au transport de matière étant beaucoup plus élevé que celui du transport de chaleur, celui-ci peut être considéré comme instantané et il valide ainsi l'hypothèse d'équilibre thermique.

#### - Equilibre chimique local (ou massique)

L'hypothèse d'équilibre chimique local peut être considérée comme un prolongement de

## CHAPITRE II : Modélisation

l'hypothèse d'équilibre chimique sur l'interface, dans le sens où elle étend à l'ensemble du VER l'égalité des potentiels chimiques d'un constituant présent dans plusieurs phases. Whitaker (1980), étudie l'équilibre chimique local de l'eau au cours du séchage d'un milieu poreux. Il montre que cette hypothèse est légitime lorsque le temps caractéristique associé à la diffusion du composant à l'échelle des phases est très faible au regard du temps caractéristique du procédé et valide donc l'hypothèse dans la plupart des cas de séchage de milieu poreux à faible ou moyenne température. Thorpe et Whitaker (1992), suite à une analyse d'ordre de grandeur, aboutissent à un résultat similaire dans le cas du séchage de milieux granulaire. Ils établissent notamment que l'hypothèse d'équilibre massique local sera d'autant plus justifiée que le temps caractéristique du procédé est long et la taille des grains (ou des pores) petite. L'étude de l'équilibre chimique d'un milieu devient plus complexe lorsque le milieu est soumis à des réactions chimiques. En effet, le caractère réactif peut perturber voire remettre en cause l'équilibre. Wood et Whitaker (1998) étudient l'équilibre chimique local d'un constituant dans un milieu soumis à des réactions biologiques et établissent des contraintes concernant les coefficients de transport et les taux de réaction garantissant la validité de l'hypothèse d'équilibre. Chenu (2007) montre comment une réaction hétérogène peut bouleverser les transferts interfaciaux et créer des phénomènes diffusifs qui perturbent l'équilibre chimique d'un constituant. Là encore, par une analyse d'ordre de grandeur, il établit que les nombres de Péclet et de Damkohler jouent un rôle prépondérant sur la validité de l'hypothèse d'équilibre chimique en milieu réactif. Toutefois, dans tous ces travaux, la géométrie interne complexe du milieu rend l'accès à la valeur de ces nombres impossible dans la plupart des cas pratiques, et la validité ou non de cette hypothèse reste la plupart du temps invérifiable.

Alors qu'une discussion sur le traitement des réactions chimiques doit être menée, nous nous heurtons à un manque d'information sur le sujet. L'hypothèse d'équilibre thermodynamique local devrait nous imposer d'associer aux termes réactifs des constantes d'équilibres chimiques locales. Or, les travaux de Chenu (2007) pour les installations de stockage de déchets, de Gronli (1996) et de Ratte (2009) pour la pyrolyse, considèrent une approche de type cinétique pour l'ensemble des réactions chimiques, tout en prenant en compte l'équilibre thermodynamique de leur milieu. Nous adopterons ici la même démarche.

Finalement, au vu des travaux déjà réalisés dans la littérature, nous ferons l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local et ce pour deux raisons essentielles :

- même si à première vue ce sont surtout les macropores du milieu qui sont visibles dans le milieu que l'on étudie, la taille moyenne de pores reste relativement faible au sein du lit, ce qui favorise l'équilibre thermique et chimique,

- la non prise en compte de cette hypothèse impliquerait l'introduction dans le modèle de coefficient d'échange massique ou thermique caractérisant les transferts interfaciaux, coefficients que l'on ne sait pas déterminer d'un point de vue théorique et dont l'ordre de grandeur lui-même reste flou.

**Hypothèse 10** : Le milieu homogène équivalent est à l'équilibre thermodynamique local.

### **II.3.6 Equations de conservation de la quantité de mouvement**

Lors de l'écriture du modèle à l'échelle des phases nous avons établi les équations de conservation de la quantité de mouvement pour chacune des phases solides, liquide et gaz. A l'exception des phases solides, la résolution de ces équations est impossible sans la connaissance précise de la position des interfaces entre les différentes phases du fait des intégrales de surface dues à la prise de moyenne volumique. Afin de pouvoir résoudre la conservation de la quantité de mouvement en l'absence de cette connaissance, nombre d'auteurs propose de remplacer cette équation de conservation par la loi de Darcy (Whitaker, 1977, 1986a,b ; Slattery,1999). Whitaker (1986a) démontre que, sous l'hypothèse de quasi-stationnarité de l'écoulement, la prise de moyenne de l'équation de Navier Stokes aboutit à la loi de Darcy dans le cas d'un écoulement monophasique au sein d'un milieu poreux. Dans notre cas nous choisissons l'expression la plus générale de la loi de Darcy de (Whitaker 1986a ; Sfair 2004), prenant en compte la mobilité de la phase solide.

#### ***II.3.6.a Phases solides***

Sous l'hypothèse de rigidité des phases solides, l'intégration de l'équation (II.2-2) nous donne directement l'expression de la conservation de la quantité de mouvement à l'échelle locale pour les phases solides.

$$\bar{\mathbf{v}}_s^s = \mathbf{v}_{s0}(t) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-22}$$

**Hypothèse 11** : les phases solides ont la même vitesse.

On peut donc écrire

$$\bar{\mathbf{v}}_s^s = \mathbf{v}_0(t) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-23}$$

#### ***II.3.6.b Phase liquide***

**Hypothèse 12** : La phase liquide est assimilée à un fluide newtonien.

On peut donc écrire l'expression généralisée de la loi de Darcy pour la phase liquide libre. Pour des niveaux de teneur en eau supérieurs au point de saturation en eau liée  $X_{ps}$ , on a :

$$si X > X_{ps} \quad \bar{\mathbf{v}}_l^l - \bar{\mathbf{v}}_s^s = -\frac{\underline{\mathbf{k}} \cdot \underline{\mathbf{k}}_{rl}}{\mu_l \varepsilon_l} \cdot (\nabla \bar{P}_l^l + \bar{\rho}_l^l \mathbf{g}) \quad \text{II.3-24}$$

Lorsque la phase liquide devient liée (niveau inférieur à  $X_{ps}$ ), on utilise une loi phénoménologique de type Fick (Pérré et Degiovanni, 1990 ; Couture 1995) pour décrire les mécanismes de diffusion sorption:

$$si X < X_{ps} \quad \bar{\rho}_l (\bar{\mathbf{v}}_l^l - \bar{\mathbf{v}}_s^s) = -\bar{\rho}_s \underline{\mathbf{D}}_b \cdot \nabla X \quad \text{II.3-25}$$

avec  $\underline{\mathbf{D}}_b$  le tenseur de transport de l'eau liée dans le milieu, où X est la teneur en eau définie par :

$$X = \frac{\bar{\rho}_l}{\sum_s \rho_s} \quad \text{II.3-26}$$

### II.3.6.c Phase gaz

Pour la phase gaz, la vitesse est aussi donnée par l'expression de la loi de Darcy généralisée d'où :

$$\bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\mathbf{v}}_s^s = -\frac{\underline{\mathbf{k}} \cdot \underline{\mathbf{k}}_{rg}}{\mu_g \varepsilon_g} \cdot (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) \quad \text{II.3-27}$$

Dans les équations (II.3-24) et (II.3-27)  $\underline{\mathbf{k}}$  est la perméabilité intrinsèque du milieu poreux,  $\underline{\mathbf{k}}_{rl}$ ,  $\underline{\mathbf{k}}_{rg}$ ,  $\mu_l$  et  $\mu_g$  représentent respectivement les perméabilités relatives et les viscosités du liquide et du gaz et  $\mathbf{g}$  désigne l'accélération de pesanteur.

### II.3.6.d Lois de Fick généralisées

Les flux diffusifs sont modélisés par la loi de Fick généralisée à l'échelle des phases (II.2-51). Ainsi dans un milieu poreux rigide, le flux diffusif moyenné pour le constituant e peut s'écrire sous la forme suivante :

$$e = 1, \dots, Ne \quad \overline{\rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g)} = -\rho_g \overline{\sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} \quad \text{II.3-28}$$

## CHAPITRE II : Modélisation

En partant de cette expression et en nous inspirant des travaux de Whitaker (1986a), Quintard et Whitaker (1993), Chauvi (2000) et Porras (2005), nous proposons un développement afin d'écrire les lois de Fick généralisées à l'échelle locale.

La décomposition de Gray (II.3-15) appliquée au premier membre de cette équation donne :

$$e = 1, \dots, Ne \quad \overline{\rho_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_g)} = \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g - \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_g^g + \widetilde{\overline{\rho_e \mathbf{v}_e}} - \widetilde{\overline{\rho_e \mathbf{v}_g}} \quad \text{II.3-29}$$

On considère l'hypothèse émise par (Gray, 1975) valide.

**Hypothèse 13** : Les variations du coefficient de diffusion au sein du volume d'intégration sont négligeables.

Cette hypothèse n'empêche en aucun cas la possibilité de variation de  $D_{ek}$  sur une distance supérieure à la longueur caractéristique du VER (Whitaker, 1977). En appliquant celle-ci sur le second membre, on obtient :

$$e = 1, \dots, Ne \quad -\rho_g \overline{\sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} = -\sum_{k=1}^{Ne-1} \overline{D_{ek} \rho_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} \quad \text{II.3-30}$$

La définition de la moyenne d'un produit nous donne :

$$\overline{\rho_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} = \bar{\rho}_g^g \overline{\nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} + \widetilde{\overline{\rho_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}}} \quad \text{II.3-31}$$

Le théorème du gradient (II.3-12) nous permet d'écrire :

$$\overline{\rho_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} = \bar{\rho}_g^g \left( \nabla \left( \overline{\frac{\rho_k}{\rho_g}} \right) + \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{\text{Ag} \alpha} \frac{\rho_k}{\rho_g} \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right) + \widetilde{\overline{\rho_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}}} \quad \text{II.3-32}$$

Aucun des théorèmes généraux ne permet d'explicitier directement la moyenne d'un rapport en terme de grandeurs moyennes. Cette difficulté oblige à approcher le rapport de grandeurs intervenant dans l'équation précédente. Le développement du dénominateur du rapport à l'aide de la décomposition de Gray (II.3-15) nous permet d'écrire,

$$\frac{\rho_k}{\rho_g} = \frac{\rho_k}{\bar{\rho}_g^g + \widetilde{\rho}_g} \quad \text{II.3-33}$$

On admet l'hypothèse émise par Whitaker (1977).

**Hypothèse 14** : La déviation d'une grandeur  $\mathbf{f}_\alpha$  associée à la phase  $\alpha$  est négligeable devant sa moyenne soit  $\widetilde{\mathbf{f}}_\alpha \ll \bar{\mathbf{f}}_\alpha$ .

## CHAPITRE II : Modélisation

On obtient alors

$$\frac{\rho_k}{\rho_g} = \frac{\rho_k}{\bar{\rho}_g^g} \quad \text{II.3-34}$$

Il est possible maintenant d'exprimer la moyenne du rapport à partir des grandeurs moyennes :

$$\overline{\left(\frac{\rho_k}{\bar{\rho}_g^g}\right)} = \frac{1}{V} \int_{V_g} \frac{\rho_k}{\bar{\rho}_g^g} dV \quad \text{II.3-35}$$

Une moyenne étant constante sur le VER on a :

$$\overline{\left(\frac{\rho_k}{\bar{\rho}_g^g}\right)} = \frac{\bar{\rho}_k}{\bar{\rho}_g^g} \quad \text{II.3-36}$$

En reportant (II.3-34) et (II.3-36) dans (II.3-32) on obtient :

$$\overline{\rho_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} = \bar{\rho}_g^g \left( \underbrace{\nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k}{\bar{\rho}_g^g} \right)}_A + \underbrace{\frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{A_{g\alpha}} \frac{\rho_k}{\bar{\rho}_g^g} \mathbf{n}_{g\alpha} dA}_B \right) + \overline{\widetilde{\rho}_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} \quad \text{II.3-37}$$

L'application de la relation reliant les deux types de moyennes (II.3-4) à  $\bar{\rho}_k$  dans le terme A ainsi que la décomposition du gradient donnent :

$$A = \varepsilon_g \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k}{\bar{\rho}_g^g} \right) + \frac{\bar{\rho}_k}{\bar{\rho}_g^g} \nabla \varepsilon_g \quad \text{II.3-38}$$

En appliquant la décomposition de Gray (II.3-15) sur le terme B et en utilisant la constance des moyennes sur le VER, on obtient :

$$B = \frac{\bar{\rho}_k}{\bar{\rho}_g^g} \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{A_{g\alpha}} \mathbf{n}_{g\alpha} dS + \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{A_{g\alpha}} \widetilde{\rho}_k \mathbf{n}_{g\alpha} dS \quad \text{II.3-39}$$

Lorsque  $f_\alpha = 1$ , la définition de la moyenne de phase (II.3-2) et le théorème du gradient (II.3-12) permettent d'aboutir au corolaire suivant

$$0 = \nabla \varepsilon_\alpha + \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{A_{g\alpha}} \mathbf{n}_{g\alpha} dA \quad \text{II.3-40}$$

avec lequel l'équation (II.3-39) devient :

$$B = -\frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g} \nabla \varepsilon_g + \frac{1}{\bar{\rho}_g} \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{Ag\alpha} \bar{\rho}_k \mathbf{n}_{g\alpha} dA \quad \text{II.3-41}$$

Ainsi la somme A+B à partir de (II.3-38) et (II.3-41) injectés dans l'équation (II.3-37) donne :

$$\overline{\rho_g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} = \bar{\rho}_g^g \varepsilon_g \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) + \bar{\rho}_g^g \left( \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{Ag\alpha} \bar{\rho}_k \mathbf{n}_{g\alpha} dA + \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \overline{\bar{\rho}_g^g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} \right) \quad \text{II.3-42}$$

En reportant cette expression dans (II.3-30), on obtient :

$$\begin{aligned} -\rho_g \sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g} &= -\bar{\rho}_g^g \varepsilon_g \sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \\ -\bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \left( \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{Ag\alpha} \bar{\rho}_k \mathbf{n}_{g\alpha} dA + \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \overline{\bar{\rho}_g^g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} \right) & \end{aligned} \quad \text{II.3-43}$$

Ainsi on peut écrire la forme intégrale de la loi de Fick généralisée en remplaçant les membres de l'équation (II.3-28) par leurs expressions (II.3-29) et (II.3-43) :

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_e (\bar{\mathbf{v}}_e^g - \bar{\mathbf{v}}_g^g) + \overline{\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e} &= -\bar{\rho}_g^g \varepsilon_g \sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \\ -\bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \left( \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{Ag\alpha} \bar{\rho}_k \mathbf{n}_{g\alpha} dA + \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \overline{\bar{\rho}_g^g \nabla \frac{\rho_k}{\rho_g}} \right) &+ \overline{\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e} \end{aligned} \quad \text{II.3-44}$$

Le développement établi jusqu'ici a introduit de nouvelles inconnues que sont les termes de déviation empêchant de fait le passage à la simulation à l'échelle locale. La solution théorique impliquerait une résolution des équations aux dérivées partielles établies pour les déviations dans le cas d'une distribution spatiale des phases géométriquement simplifiée (Whitaker, 1986b ; Quintard et Whitaker, 1993). Dans le cadre de ce travail nous contournerons la difficulté introduite par la résolution de ce problème de fermeture par l'introduction de deux nouvelles hypothèses. Ces hypothèses consistent à modéliser les termes de flux diffusifs et dispersifs dans lesquels les dérivations apparaissent en conservant le terme moteur de la diffusion  $\nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)$  (Whitaker 1977).

Ainsi il est possible d'écrire :

$$\overline{\rho_e \mathbf{v}_g} = -\bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^D \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \quad \text{II.3-45}$$

où  $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^D$  est le tenseur de dispersion de l'espèce e par rapport à l'espèce k.

On a également la relation suivante :

$$-\bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} D_{ek} \left( \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \frac{1}{V} \sum_{\alpha \neq g} \int_{S_{g\alpha}} \tilde{\rho}_k \mathbf{n}_{g\alpha} dS + \frac{1}{\bar{\rho}_g^g} \overline{\tilde{\rho}_g \nabla \frac{\bar{\rho}_k}{\bar{\rho}_g}} \right) = -\bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^d \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \quad \text{II.3-46}$$

où  $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^d$  est le tenseur de diffusion de l'espèce e par rapport à l'espèce k.

Ces deux nouvelles relations et la définition du tenseur local de diffusion mutuelle

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^M \equiv \varepsilon_g D_{ek} \underline{\underline{\mathbf{I}}} \quad \text{II.3-47}$$

permettent d'écrire la loi de Fick généralisée à l'échelle locale, soit :

$$\bar{\rho}_e (\mathbf{v}_e^g - \mathbf{v}_g^g) + \overline{\rho_e \mathbf{v}_e} = -\bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \quad \text{II.3-48}$$

Où  $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}}$  est le tenseur de diffusion effective de l'espèce e par rapport à l'espèce k tel que :

$$\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} = \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^M + \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^D + \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^d \quad \text{II.3-49}$$

Ce tenseur permet de caractériser à l'échelle locale la diffusion à l'échelle des phases. Le terme  $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^M$  prend en compte les interactions moléculaires entre les différents constituants présents dans la phase gaz. Le terme  $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^d$  de diffusion caractérise la gêne engendrée par les phases solides et liquide sur la diffusion au sein de la phase gaz. Le terme  $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^D$  caractérise quant à lui l'écart à la moyenne de la distribution des flux convectifs des constituants gazeux.

Les tenseurs  $\underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}}$ , propres à chaque composant doivent être déterminés de façon expérimentale et peuvent varier fortement avec la fraction volumique de la phase gaz (Whitaker 1977).

En tenant compte des trois équations de conservation du volume des phases solides (II.3-17), il manque encore une équation supplémentaire pour traiter les inconnues de l'échelle locale que sont les fractions volumiques. Comme nous l'énoncions dans le paragraphe II.3.2, cette dernière équation est donnée par l'expression de la pression capillaire, différence entre la pression gazeuse et la pression liquide en présence de phases solides (Whitaker, 1984 ; Puiggali & Quintard, 1992).

$$\bar{P}_l^l = \bar{P}_g^g - \bar{P}_c(X, \bar{T}_l^l) \quad \text{II.3-50}$$

### II.3.7 Equations de conservation de la masse

#### II.3.7.a Phases solides

On applique la prise de moyenne volumique à l'équation générale de conservation de la masse de la phase solide (II.2-2) où phase et constituant sont confondus. On considère que les phases solides sont en contact avec toutes les autres phases du milieu homogène.

On écrit donc pour le premier terme en appliquant le premier théorème général (II.3-11) :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_s}{\partial t} = \frac{\partial \bar{\rho}_s}{\partial t} - \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s \mathbf{w}_{s\alpha} \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-51}$$

Pour le second terme, on applique le théorème général de la divergence (II.3-13), ce qui conduit à :

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}_s \mathbf{v}_s) = \nabla \cdot (\bar{\rho}_s \mathbf{v}_s) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-52}$$

L'introduction de ces deux équations (II.3-51) et (II.3-52) nous amène donc à :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_s \mathbf{v}_s) = \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s (\mathbf{w}_{s\alpha} - \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-53}$$

La décomposition de Gray (II.3-15) de la moyenne d'un produit nous fournit l'expression suivante pour la conservation de la masse d'une phase solide :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_s \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\tilde{\rho}}_s \bar{\mathbf{v}}_s) = \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s (\mathbf{w}_{s\alpha} - \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-54}$$

La conservation du volume implique alors que la déviation de la concentration massique, provenant de la décomposition de Gray est nulle :

$$\tilde{\rho}_s = \rho_s - \bar{\rho}_s^s = 0 \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-55}$$

On obtient alors

$$\frac{\partial \bar{\rho}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_s \bar{\mathbf{v}}_s^s) = \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s (\mathbf{w}_{s\alpha} - \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-56}$$

Finalement, les équations de conservation, pour chacune des phases solides (matière organique,

charbon et cendres inertes), et l'expression des taux volumiques de réactions hétérogènes sont listés ci-dessous.

### II.3.7.a.i Matière organique

L'écriture de l'équation (II.3-56) pour la matière organique donne

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{MO} \bar{\mathbf{v}}_{MO}^{MO}) = \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} \rho_{MO} (\mathbf{w}_{MO\alpha} - \mathbf{v}_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MO\alpha} dA \quad \text{II.3-57}$$

Le développement du second membre de l'équation (II.3-57) aboutit à :

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} \rho_{MO} (\mathbf{w}_{MO\alpha} - \mathbf{v}_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MO\alpha} dA = \\ & \frac{1}{V} \int_{A_{MOg}} \rho_{MO} (\mathbf{w}_{MOg} - \mathbf{v}_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MOg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{MOCl}} \rho_{MO} (\mathbf{w}_{MOCl} - \mathbf{v}_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MOCl} dA \\ & + \frac{1}{V} \int_{A_{MOCR}} \rho_{MO} (\mathbf{w}_{MOCR} - \mathbf{v}_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MOCR} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{MOl}} \rho_{MO} (\mathbf{w}_{MOl} - \mathbf{v}_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MOl} dA \end{aligned} \quad \text{II.3-58}$$

En tenant compte de l'écriture des conditions aux limites de continuité des flux massiques (II.2-74), (II.2-88), (II.2-109) et (II.2-114) à l'échelle des phases, on obtient

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} \rho_{MO} (\mathbf{w}_{MO\alpha} - \mathbf{v}_{MO}) \cdot \mathbf{n}_{MO\alpha} dA = -\frac{1}{V} \int_{A_{MOg}} r_{MOg} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{MOCR}} r_{MOCR} dA \quad \text{II.3-59}$$

Ainsi, il apparaît que le second membre de l'équation (II.3-57) est la somme de la moyenne volumique de la réaction hétérogène de consommation de la matière organique et de production de charbon par pyrolyse. On écrit alors

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{MO} \bar{\mathbf{v}}_{MO}^{MO}) = -\frac{1}{V} \int_{A_{MOg}} r_{MOg} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{MOCR}} r_{MOCR} dA \quad \text{II.3-60}$$

### II.3.7.a.ii Charbon

De façon analogue à la matière organique, on écrit pour le charbon

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CR} \bar{\mathbf{v}}_{CR}^{CR}) = \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} \rho_{CR} (\mathbf{w}_{CR\alpha} - \mathbf{v}_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CR\alpha} dA \quad \text{II.3-61}$$

avec

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} \rho_{CR} (\mathbf{w}_{CR\alpha} - \mathbf{v}_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CR\alpha} dA = \\
 & \frac{1}{V} \int_{A_{CRg}} \rho_{CR} (\mathbf{w}_{CRg} - \mathbf{v}_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CRg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{CRCl}} \rho_{CR} (\mathbf{w}_{CRCl} - \mathbf{v}_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CRCl} dA \quad \text{II.3-62} \\
 & + \frac{1}{V} \int_{A_{CRM0}} \rho_{CR} (\mathbf{w}_{CRM0} - \mathbf{v}_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CRM0} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{CRI}} \rho_{CR} (\mathbf{w}_{CRI} - \mathbf{v}_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CRI} dA
 \end{aligned}$$

La description des conditions de continuité des flux massiques (II.2-74), (II.2-95), (II.2-110) et (II.2-114) à l'échelle des phases donne

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} \rho_{CR} (\mathbf{w}_{CR\alpha} - \mathbf{v}_{CR}) \cdot \mathbf{n}_{CR\alpha} dA = -\frac{1}{V} \int_{A_{CRg}} r_{CRg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{CRM0}} r_{MOCR} dA \quad \text{II.3-63}$$

Le second membre de l'équation (II.3-61) est donc la somme de la moyenne volumique de la réaction hétérogène de production de charbon par pyrolyse de la matière organique et des réactions hétérogènes de consommation du charbon par combustion et gazéification. Dans ce cas, on a

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CR} \bar{\mathbf{v}}_{CR}^{CR}) = -\frac{1}{V} \int_{A_{CRg}} r_{CRg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{CRM0}} r_{MOCR} dA \quad \text{II.3-64}$$

### II.3.7.a.iii Les cendres inertes

En appliquant la même démarche pour les cendres inertes que pour les deux autres phases solides, on aboutit à :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{Cl}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{Cl} \bar{\mathbf{v}}_{Cl}^{Cl}) = \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{Cl\alpha}} \rho_{Cl} (\mathbf{w}_{Cl\alpha} - \mathbf{v}_{Cl}) \cdot \mathbf{n}_{Cl\alpha} dA \quad \text{II.3-65}$$

avec

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{Cl\alpha}} \rho_{Cl} (\mathbf{w}_{Cl\alpha} - \mathbf{v}_{Cl}) \cdot \mathbf{n}_{Cl\alpha} dA = \\
 & \frac{1}{V} \int_{A_{Clg}} \rho_{Cl} (\mathbf{w}_{Clg} - \mathbf{v}_{Cl}) \cdot \mathbf{n}_{Clg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{ClCR}} \rho_{Cl} (\mathbf{w}_{ClCR} - \mathbf{v}_{Cl}) \cdot \mathbf{n}_{ClCR} dA \quad \text{II.3-66} \\
 & + \frac{1}{V} \int_{A_{ClM0}} \rho_{Cl} (\mathbf{w}_{ClM0} - \mathbf{v}_{Cl}) \cdot \mathbf{n}_{ClM0} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{ClI}} \rho_{Cl} (\mathbf{w}_{ClI} - \mathbf{v}_{Cl}) \cdot \mathbf{n}_{ClI} dA
 \end{aligned}$$

L'utilisation des conditions aux limites à l'échelle des phases et tout particulièrement la continuité

des flux massiques (II.2-74), (II.2-103) et (II.2-115), nous permet d'écrire

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{Cl\alpha}} \rho_{Cl} (\mathbf{w}_{Cl\alpha} - \mathbf{v}_{Cl}) \cdot \mathbf{n}_{Cl\alpha} dA = 0 \quad \text{II.3-67}$$

d'où

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{Cl}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{Cl} \bar{\mathbf{v}}_{Cl}^{Cl}) = 0 \quad \text{II.3-68}$$

### II.3.7.b Phase liquide

On part de l'équation (II.2-13) à laquelle on applique la prise de moyenne. Ainsi, avec une démarche similaire à celle appliquée pour les solides, on obtient pour le premier terme :

$$\overline{\frac{\partial \rho_l}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t} - \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l \mathbf{w}_{l\alpha} \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA \quad \text{II.3-69}$$

De plus le théorème général de la divergence (II.3-13) nous donne pour le second terme :

$$\overline{\nabla \cdot (\rho_l \mathbf{v}_l)} = \nabla \cdot (\bar{\rho}_l \bar{\mathbf{v}}_l) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l \mathbf{v}_l \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA \quad \text{II.3-70}$$

La somme de ces deux termes nous permet d'écrire :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_l \bar{\mathbf{v}}_l) = \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l (\mathbf{w}_{l\alpha} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA \quad \text{II.3-71}$$

En développant le second terme de l'équation (II.3-71), on obtient

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l (\mathbf{w}_{l\alpha} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA = \\ & \frac{1}{V} \int_{A_{lg}} \rho_l (\mathbf{w}_{lg} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{lg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{lCR}} \rho_l (\mathbf{w}_{lCR} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{lCR} dA \\ & + \frac{1}{V} \int_{A_{lMO}} \rho_l (\mathbf{w}_{lMO} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{lMO} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{lCI}} \rho_l (\mathbf{w}_{lCI} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{lCI} dA \end{aligned} \quad \text{II.3-72}$$

En tenant compte des continuités des flux massiques écrites à l'échelle des phases (II.2-75) et (II.2-82), l'équation (II.3-72) devient

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l (\mathbf{w}_{l\alpha} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA = \frac{1}{V} \int_{A_{lg}} \rho_l (\mathbf{w}_{lg} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{lg} dA \quad \text{II.3-73}$$

La continuité du flux massique entre la phase liquide et gaz à l'échelle des phases (II.2-82) permet d'écrire

$$\frac{1}{V} \int_{A_{lg}} \rho_l (\mathbf{w}_{lg} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{lg} dA = \frac{1}{V} \int_{A_{lg}} \rho_v (\mathbf{v}_v - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{lg} dA \quad \text{II.3-74}$$

On a alors

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l (\mathbf{w}_{l\alpha} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA = \frac{1}{V} \int_{A_{lg}} \rho_v (\mathbf{v}_v - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{lg} dA \quad \text{II.3-75}$$

avec  $\frac{1}{V} \int_{A_{lg}} \rho_v (\mathbf{v}_v - \mathbf{w}_{lg}) \cdot \mathbf{n}_{lg} dA$  le taux volumique de changement de phase de l'eau noté par la suite  $\dot{m}_v$ .

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l (\mathbf{w}_{l\alpha} - \mathbf{v}_l) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA = -\dot{m}_v \quad \text{II.3-76}$$

La décomposition de Gray (II.3-15) de la moyenne d'un produit nous donne

$$\nabla \cdot (\overline{\rho_l \mathbf{v}_l}) = \nabla \cdot (\overline{\rho_l} \overline{\mathbf{v}_l}^l + \overline{\tilde{\rho}_l} \overline{\tilde{\mathbf{v}}_l}) \quad \text{II.3-77}$$

La conservation du volume (II.3-18), assure que la déviation de la masse volumique, provenant de la décomposition de Gray est nulle :

$$\tilde{\rho}_l = \rho_l - \overline{\rho_l}^l = 0 \quad \text{II.3-78}$$

En reportant dans (II.3-71), (II.3-76) et (II.3-77) en tenant compte de (II.3-78), il vient

$$\frac{\partial \overline{\rho_l}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho_l} \overline{\mathbf{v}_l}^l) = -\dot{m}_v \quad \text{II.3-79}$$

### II.3.7.c Phase Gaz (multiconstituant)

L'écriture de la conservation de la masse d'un constituant au sein de la phase gaz (II.2-30), en lui appliquant la prise de moyenne volumique, nous permet d'obtenir une expression du même type que pour les solides et le liquide.

$$\frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_e \mathbf{v}_e) = \bar{r}_e + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e (\mathbf{w}_{g\alpha} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA \quad \text{II.3-80}$$

Le développement du terme de la divergence donne :

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}_e \mathbf{v}_e) = \nabla \cdot (\bar{\rho}_e \mathbf{v}_g^g + \overline{\bar{\rho}_e \mathbf{v}_e}) \quad \text{II.3-81}$$

L'expression de Fick généralisé (II.3-48) dans cette relation donne directement

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}_e \mathbf{v}_e) = \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \quad \text{II.3-82}$$

En reportant (II.3-82) dans (II.3-80), on aboutit à la conservation de la masse d'une espèce gazeuse e sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_g^g) - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) &= \bar{r}_e \\ + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e (\mathbf{w}_{g\alpha} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA & \end{aligned} \quad \text{II.3-83}$$

Le développement du deuxième terme du second membre de l'équation (II.3-83) aboutit à

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e (\mathbf{w}_{g\alpha} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA &= \\ \frac{1}{V} \int_{A_{gl}} \rho_e (\mathbf{w}_{gl} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{gl} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} \rho_e (\mathbf{w}_{eCR} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{gCR} dA & \quad \text{II.3-84} \\ + \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} \rho_e (\mathbf{w}_{gMO} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{gMO} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{gCI}} \rho_e (\mathbf{w}_{gCI} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{gCI} dA & \end{aligned}$$

Pour les constituants gazeux autres que la vapeur, les réactions hétérogènes de pyrolyse, combustion et gazéification sont à l'origine de leurs productions. L'écriture des conditions limites à l'échelle des phases (II.2-81), (II.2-89), (II.2-96) et (II.2-104) traduit cette production. On obtient alors

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e (\mathbf{w}_{g\alpha} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA &= \\ - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{ecr\ comb} + r_{ecr\ gaz\ é}) dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{eMO} dA & \end{aligned} \quad \text{II.3-85}$$

En injectant (II.3-85) dans (II.3-83) on écrit la conservation de la masse pour un constituant gazeux e différent de la vapeur.

$$\begin{aligned} \text{Pour } e \neq v \quad \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_g^g) - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \bar{r}_e \\ - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{ecr\ comb} + r_{ecr\ gaz\ é}) dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{eMO} dA \end{aligned} \quad \text{II.3-86}$$

Dans le cas de la vapeur d'eau identification des différentes contributions à l'aide des conditions limites à l'échelle des phases dans (II.3-84) conduit à

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e (\mathbf{w}_{g\alpha} - \mathbf{v}_e) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA = \dot{m}_v \\ - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{vcr\ comb} + r_{vcr\ gaz\ é}) dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO} dA \end{aligned} \quad \text{II.3-87}$$

L'écriture de (II.3-83) en prenant en compte (II.3-87) aboutit à la conservation de la masse pour la vapeur d'eau écrite à l'échelle locale.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_v \bar{\mathbf{v}}_g^g) - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \bar{r}_v + \dot{m}_v \\ - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} r_{vcr\ comb} + r_{vcr\ gaz\ é} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO} dA \end{aligned} \quad \text{II.3-88}$$

On ne dispose pas d'expression du taux volumique moyen de changement de phase de l'eau  $\dot{m}_v$ . Il est nécessaire d'introduire une nouvelle équation permettant de gérer cette inconnue. L'égalité des potentiels chimiques de l'eau liquide et de l'eau vapeur, provenant de l'équilibre thermodynamique local conduit à l'équation qui permettra de traiter  $\dot{m}_v$  (Laurent, 1998), soit :

$$\bar{P}_v^g = a_w P_{vsat} \quad \text{II.3-89}$$

où  $P_{vsat}$  est la pression de vapeur saturante fonction uniquement de la température  $\bar{T}_l^l$ . L'activité de l'eau dans le milieu  $a_w$  est déduite des isothermes de sorption expérimentales. Elle est égale à 1 au-dessus du point de saturation. En dessous,  $a_w$  est supposée égale à l'humidité relative que l'air doit avoir pour que, à la température  $\bar{T}_l^l$ , la teneur en eau d'équilibre soit la teneur en eau liée du déchet. La corrélation décrivant l'activité de l'eau est donc fonction de la température et de la teneur en eau du milieu, soit  $a_w(\bar{T}_l^l, X)$ .

### II.3.8 Equations de conservation de l'énergie

#### II.3.8.a Phases solides

Après prise de moyenne volumique, l'équation de conservation de l'énergie (II.2-14) devient :

$$\frac{\partial \overline{\rho_s h_s}}{\partial t} + \overline{\nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s)} - \overline{\nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s)} = \overline{\varphi_s} \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-90}$$

On applique le théorème de transport (II.3-11) sur le premier terme de l'équation (II.3-90)

$$\frac{\partial \overline{\rho_s h_s}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{\rho_s h_s}}{\partial t} - \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s h_s \mathbf{w}_{s\alpha} \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-91}$$

La décomposition de Gray (II.3-15) nous permet alors d'écrire :

$$\frac{\partial \overline{\rho_s h_s}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{\rho_s h_s^s}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\tilde{\rho}_s h_s}}{\partial t} - \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s h_s \mathbf{w}_{s\alpha} \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-92}$$

La conservation du volume de chacune des phases assure que la déviation spatiale de la masse volumique de chacune des phases est nulle (II.3-55), d'où :

$$\frac{\partial \overline{\rho_s h_s}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{\rho_s h_s^s}}{\partial t} - \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s h_s \mathbf{w}_{s\alpha} \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-93}$$

On utilise le théorème de la divergence (II.3-13) sur le second terme de l'équation (II.3-90), d'où :

$$\overline{\nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s)} = \nabla \cdot (\overline{\rho_s h_s \mathbf{v}_s}) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s h_s \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-94}$$

En appliquant une nouvelle fois la décomposition de Gray (II.3-15) pour la moyenne d'un produit en tenant compte que la déviation spatiale de la masse volumique des phases solides est nulle (II.3-55), on a :

$$\begin{aligned} \overline{\nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s)} &= \nabla \cdot (\overline{\rho_s h_s^s \mathbf{v}_s^s}) + \nabla \cdot (\overline{\tilde{\rho}_s h_s \mathbf{v}_s}) \\ &+ \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s h_s \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \end{aligned} \quad \text{II.3-95}$$

En considérant l'équation (II.3-23) ( $\widetilde{\mathbf{v}}_s = 0$ ), on obtient :

$$\overline{\tilde{\rho}_s h_s \mathbf{v}_s} = 0 \quad \text{II.3-96}$$

d'où

$$\begin{aligned} \overline{\nabla \cdot (\rho_s h_s \mathbf{v}_s)} &= \nabla \cdot (\bar{\rho}_s \bar{h}_s^s \bar{\mathbf{v}}_s^s) \\ &+ \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s h_s \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \end{aligned} \quad \text{II.3-97}$$

Le théorème de la divergence (II.3-13) appliqué au troisième terme du membre de gauche de l'équation (II.3-90) et l'utilisation de la décomposition de Gray (II.3-15) pour la moyenne d'un produit nous donnent :

$$\overline{\nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s)} = \nabla \cdot (\bar{\lambda}_s^s \nabla \bar{T}_s + \widetilde{\lambda}_s^s \nabla \bar{T}_s) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \lambda_s \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-98}$$

**Hypothèse 15** : la conductivité thermique  $\lambda_{\alpha}$  est constante pour n'importe quelle phase  $\alpha$ . Selon cette hypothèse, la déviation spatiale  $\widetilde{\lambda}_{\alpha}$  est nulle, d'où :

$$\overline{\nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s)} = \nabla \cdot (\bar{\lambda}_s^s \nabla \bar{T}_s) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \lambda_s \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-99}$$

L'utilisation du théorème du gradient (II.3-12) pour l'équation (II.3-99), nous donne :

$$\begin{aligned} \overline{\nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s)} &= \nabla \cdot \left( \bar{\lambda}_s^s \left[ \nabla \bar{T}_s + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} T_s \mathbf{n}_{s\alpha} dA \right] \right) \\ &+ \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \lambda_s \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA \quad s = \text{MO, CI, CR} \end{aligned} \quad \text{II.3-100}$$

En réinjectant les équations (II.3-93), (II.3-95) et (II.3-100) dans l'équation (II.3-90) et après la combinaison de certains termes, on arrive à :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_s \bar{h}_s^s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_s \bar{h}_s^s \bar{\mathbf{v}}_s^s) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \rho_s h_s (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{s\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA = \\ \nabla \cdot \left( \bar{\lambda}_s^s \left[ \nabla \bar{T}_s + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} T_s \mathbf{n}_{s\alpha} dA \right] \right) \\ + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{s\alpha}} \lambda_s \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_{s\alpha} dA + \bar{\varphi}_s \quad s = \text{MO, CI, CR} \end{aligned} \quad \text{II.3-101}$$

dans laquelle l'enthalpie moyenne d'une phase solide  $\bar{h}_s^s$  s'exprime en fonction de la température  $\bar{T}_s^s$ , en effectuant la prise de moyenne de l'équation (II.2-12), sous l'hypothèse d'une chaleur massique constante :

$$\bar{h}_s^s - h_{s,ref} = C_s (\bar{T}_s^s - T_{ref}) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad \text{II.3-102}$$

### II.3.8.b Phase liquide

Le développement des calculs de la prise de moyenne de l'équation de la conservation de l'énergie de la phase liquide est similaire à celui effectué dans le paragraphe précédent pour les phases solides. En effet, les phases solides et liquides ont de nombreuses similitudes en terme d'hypothèse sur certaines de leurs propriétés physiques et la conservation du volume est écrite pour chacune :

$$(\bar{\rho}_\alpha = \rho_\alpha = cste, \lambda_\alpha = cste, C_{p_\alpha} = cste)_{\alpha=s,l}$$

En adoptant la même méthode que pour le développement de la conservation de l'énergie des phases solides, on aboutit pour la phase liquide à l'équation moyennée suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l) + \sum_\alpha \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l h_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA = \\ \nabla \cdot \left( \bar{\lambda}_l^l \left[ \nabla \bar{T}_l^l + \sum_\alpha \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} T_l \mathbf{n}_{l\alpha} dA \right] - \bar{\rho}_l^l \bar{\mathbf{h}}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l \right) + \sum_\alpha \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \lambda_l \nabla T_l \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA + \bar{\varphi}_l \end{aligned} \quad \text{II.3-103}$$

L'intégration sur le VER de l'équation (II.2-29) nous permet d'obtenir l'expression de l'enthalpie moyenne pour la phase liquide, en considérant que la chaleur massique à pression constante ne dépende pas de la température :

$$\bar{h}_l^l - h_{l,ref} = C_{p_l} (\bar{T}_l^l - T_{ref}) - \bar{\Delta H}_D^l (\bar{T}_l^l, a_w) \quad \text{II.3-104}$$

### II.3.8.c Phase gaz

En appliquant la prise de moyenne volumique à l'équation de conservation de l'énergie pour la phase gaz, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e h_e \right) + \nabla \cdot \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e h_e \right) - \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T_g) = \bar{\varphi}_g \quad \text{II.3-105}$$

Les théorèmes de transport (II.3-11) et de la divergence (II.3-13) appliqués à l'équation précédente donnent :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{e=1}^{Ne} \left[ \frac{\partial(\overline{\rho_e h_e})}{\partial t} - \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e h_e \mathbf{w}_{g\alpha} \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right] \\
 & + \sum_{e=1}^{Ne} \left[ \nabla \cdot (\overline{\rho_e v_e h_e}) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e h_e \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right] = \quad \text{II.3-106} \\
 & \nabla \cdot (\overline{\lambda_g \nabla T_g}) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \lambda_g \nabla T_g \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA + \overline{\varphi_g}
 \end{aligned}$$

L'application du théorème de la moyenne d'un produit (II.3-15), la combinaison de certains termes et le développement du terme de gradient de température gaz de façon analogue à la température de la phase solide aboutissent à :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{e=1}^{Ne} \left[ \frac{\partial (\overline{\rho_e \bar{h}_e^g} + \overline{\rho_e \widetilde{h}_e})}{\partial t} \right] \\
 & + \sum_{e=1}^{Ne} \left[ \nabla \cdot \left( (\overline{\rho_e \bar{v}_e^g} + \overline{\rho_e \widetilde{v}_e}) \bar{h}_e^g + \overline{\rho_e \widetilde{v}_e \bar{h}_e} \right) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e h_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{g\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right] = \quad \text{II.3-107} \\
 & \nabla \cdot \left( \overline{\lambda_g} \left[ \nabla \bar{T}_g + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} T_g \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right] \right) + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \lambda_g \nabla T_g \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA + \overline{\varphi_g}
 \end{aligned}$$

L'intégration sur le VER des équations définissant l'enthalpie d'un constituant gazeux (II.2-61) en tenant compte pour la vapeur de (II.2-61) nous donne :

Pour un constituant  $e \neq v$

$$\bar{h}_e^g(\bar{T}_g^g) - h_{e,ref} = \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \overline{c_{p_e}^g}(\bar{T}_g^g) dT \quad \text{II.3-108}$$

Pour la vapeur

$$\bar{h}_v^g(\bar{T}_g^g) - h_{l,ref} = \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \overline{c_{p_v}^g}(\bar{T}_g^g) dT + \Delta H_v^{ref} \quad \text{II.3-109}$$

### II.3.8.d Equilibre thermique local et équation de conservation de l'énergie totale

Le milieu multiphasique est à l'équilibre thermique (cf paragraphe II.3.5.b). Nous avons égalité des températures moyennes dans chaque phase, soit :

$$\bar{T}_{MO}^{MO} = \bar{T}_{CI}^{CI} = \bar{T}_{CR}^{CR} = \bar{T}_l^l = \bar{T}_g^g = \bar{T} \quad \text{II.3-110}$$

avec

$$\bar{T} = \varepsilon_{MO} \bar{T}_{MO}^{MO} + \varepsilon_{CI} \bar{T}_{CI}^{CI} + \varepsilon_{CR} \bar{T}_{CR}^{CR} + \varepsilon_l \bar{T}_l^l + \varepsilon_g \bar{T}_g^g \quad \text{II.3-111}$$

L'équilibre thermique local introduit quatre nouvelles équations via l'égalité des températures. Cinq équations sont nécessaires pour l'écriture de la conservation de l'énergie du lit de déchets. On choisit de conserver les équations (II.3-110) auxquelles on ajoute la somme des équations de conservation de l'énergie de chacune des phases qui n'est autre que la conservation de l'énergie totale du milieu à l'échelle locale.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \{ \bar{\rho}_e \bar{h}_e^g + \overline{\bar{\rho}_e \bar{h}_e} \} \right) \\ & + \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \{ (\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g + \overline{\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e}) \bar{h}_e^g \} \right) = \\ & \quad \nabla \cdot \left( \bar{\lambda}_{MO}^{MO} \left[ \nabla \bar{T}_{MO} + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} T_{MO} \mathbf{n}_{MO\alpha} dA \right] \right. \\ & \quad \left. + \bar{\lambda}_{CR}^{CR} \left[ \nabla \bar{T}_{CR} + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} T_{CR} \mathbf{n}_{CR\alpha} dA \right] + \bar{\lambda}_{CI}^{CI} \left[ \nabla \bar{T}_{CI} + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CI\alpha}} T_{CI} \mathbf{n}_{CI\alpha} dA \right] \right. \\ & \quad \left. + \bar{\lambda}_l^l \left[ \nabla \bar{T}_l + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} T_l \mathbf{n}_{l\alpha} dA \right] + \bar{\lambda}_g^g \left[ \nabla \bar{T}_g + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} T_g \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right] - \bar{\rho}_l^l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l - \sum_{e=1}^{Ne} \overline{\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e \bar{h}_e} \right) \\ & \quad + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l h_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{w}_{l\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} \rho_{MO} h_{MO} (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{MO\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{MO\alpha} dA \\ & \quad + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CI\alpha}} \rho_{CI} h_{CI} (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{CI\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{CI\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} \rho_{CR} h_{CR} (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{CR\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{CR\alpha} dA \\ & \quad + \sum_{e=1}^{Ne} \left[ \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e h_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{g\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right] + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} \lambda_{MO} \nabla T_{MO} \cdot \mathbf{n}_{MO\alpha} dA \\ & \quad + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} \lambda_{CR} \nabla T_{CR} \cdot \mathbf{n}_{CR\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CI\alpha}} \lambda_{CI} \nabla T_{CI} \cdot \mathbf{n}_{CI\alpha} dA \\ & \quad + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \lambda_l \nabla T_l \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \lambda_g \nabla T_g \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA \\ & \quad + \overline{\varphi_g} + \overline{\varphi_l} + \overline{\varphi_{MO}} + \overline{\varphi_{CR}} + \overline{\varphi_{CI}} \end{aligned} \quad \text{II.3-112}$$

En tenant compte de l'ensemble des conditions limites exprimant la continuité du flux de chaleur aux interfaces de l'échelle des phases (II.2-76), (II.2-84), (II.2-92), (II.2-100), (II.2-105), (II.2-111) et (II.2-116), on montre que :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \rho_l h_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{w}_{l\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} \rho_{MO} h_{MO} (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{MO\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{MO\alpha} dA \\
 & + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{Cl\alpha}} \rho_{Cl} h_{Cl} (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{Cl\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{Cl\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} \rho_{CR} h_{CR} (\mathbf{v}_s - \mathbf{w}_{CR\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{CR\alpha} dA \\
 & + \sum_{e=1}^{Ne} \left[ \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \rho_e h_e (\mathbf{v}_e - \mathbf{w}_{g\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA \right] + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\alpha}} \lambda_{MO} \nabla T_{MO} \mathbf{n}_{MO\alpha} dA \\
 & + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\alpha}} \lambda_{CR} \nabla T_{CR} \cdot \mathbf{n}_{CR\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{Cl\alpha}} \lambda_{Cl} \nabla T_{Cl} \cdot \mathbf{n}_{Cl\alpha} dA \\
 & + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{l\alpha}} \lambda_l \nabla T_l \cdot \mathbf{n}_{l\alpha} dA + \sum_{\alpha} \frac{1}{V} \int_{A_{g\alpha}} \lambda_g \nabla T_g \cdot \mathbf{n}_{g\alpha} dA = 0
 \end{aligned} \tag{II.3-113}$$

ce qui permet d'aboutir à :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} + \bar{\rho}_{Cl} \bar{h}_{Cl}^{Cl} + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \{ \bar{\rho}_e \bar{h}_e^g + \overline{\rho_e h_e} \} \right) \\
 \mathbf{A} \left\{ \begin{aligned}
 & + \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{Cl} \bar{h}_{Cl}^{Cl} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \{ (\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g + \overline{\rho_e \mathbf{v}_e}) \bar{h}_e^g \} \right) = \\
 & \quad \nabla \cdot \left( \bar{\lambda}_{MO}^{MO} \left[ \nabla \bar{T}_{MO} + \sum_{\beta} \frac{1}{V} \int_{A_{MO\beta}} T_{MO} \mathbf{n}_{MO\beta} dA \right] \right) \\
 & + \bar{\lambda}_{CR}^{CR} \left[ \nabla \bar{T}_{CR} + \sum_{\beta} \frac{1}{V} \int_{A_{CR\beta}} T_{CR} \mathbf{n}_{CR\beta} dA \right] + \bar{\lambda}_{Cl}^{Cl} \left[ \nabla \bar{T}_{Cl} + \sum_{\beta} \frac{1}{V} \int_{A_{Cl\beta}} T_{Cl} \mathbf{n}_{Cl\beta} dA \right] \\
 & + \bar{\lambda}_l^l \left[ \nabla \bar{T}_l + \sum_{\beta} \frac{1}{V} \int_{A_{l\beta}} T_l \mathbf{n}_{l\beta} dA \right] + \bar{\lambda}_g^g \left[ \nabla \bar{T}_g + \sum_{\beta} \frac{1}{V} \int_{A_{g\beta}} T_g \mathbf{n}_{l\beta} dA \right] \\
 & - \bar{\rho}_l^l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l - \sum_{e=1}^{Ne} \overline{\rho_e \mathbf{v}_e h_e} + \bar{\varphi}_g + \bar{\varphi}_l + \bar{\varphi}_{MO} + \bar{\varphi}_{CR} + \bar{\varphi}_{Cl}
 \end{aligned} \right. =
 \end{aligned} \tag{II.3-114}$$

On s'intéresse à l'expression vectorielle suivante :

$$\mathbf{A} = \sum_{\alpha} \left( \bar{\lambda}_{\alpha}^{\alpha} \left( \nabla \bar{T}_{\alpha} + \sum_{\beta} \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} T_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) \right) \right) \tag{II.3-115}$$

Remarquons tout d'abord que par définition de la moyenne intrinsèque de phase de la température,

on a :

$$\bar{T}_\alpha = \varepsilon_\alpha \bar{T}_\alpha^\alpha \quad \text{II.3-116}$$

Ainsi, le gradient de température dans la phase  $\alpha$ , se décompose en deux termes :

$$\nabla \bar{T}_\alpha = \varepsilon_\alpha \nabla \bar{T}_\alpha^\alpha + \bar{T}_\alpha^\alpha \nabla \varepsilon_\alpha \quad \text{II.3-117}$$

D'autre part, toute grandeur physique peut être représentée comme la somme de sa moyenne intrinsèque de phase et d'une déviation (II.3-14) :

$$T_\alpha = \bar{T}_\alpha^\alpha + \tilde{T}_\alpha \quad \text{II.3-118}$$

De sorte que le second terme de l'expression (II.3-115) s'écrit :

$$\sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} T_\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) = \sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \bar{T}_\alpha^\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) + \sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \tilde{T}_\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) \quad \text{II.3-119}$$

Le premier terme du membre de droite de cette dernière équation se simplifie puisque la moyenne de la température est constante en tout point du VER. Ainsi, on a :

$$\sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \bar{T}_\alpha^\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) = \bar{T}_\alpha^\alpha \left( \frac{1}{V} \sum_\beta \left( \int_{A_{\alpha\beta}} \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) \right) \quad \text{II.3-120}$$

On montre facilement, en appliquant le théorème du gradient à la fonction  $f=1$ , que

$$\frac{1}{V} \sum_\beta \left( \int_{A_{\alpha\beta}} \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) = -\nabla \varepsilon_\alpha \quad \text{II.3-121}$$

Et on conclut aisément que :

$$\sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \bar{T}_\alpha^\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) = -\bar{T}_\alpha^\alpha \nabla \varepsilon_\alpha \quad \text{II.3-122}$$

En injectant ces résultats dans l'expression initiale de  $\mathbf{A}$ , on obtient :

$$\mathbf{A} = \sum_\alpha \left( \bar{\lambda}_\alpha^\alpha \left( \varepsilon_\alpha \nabla \bar{T}_\alpha^\alpha + \bar{T}_\alpha^\alpha \nabla \varepsilon_\alpha - \bar{T}_\alpha^\alpha \nabla \varepsilon_\alpha + \sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \tilde{T}_\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) \right) \right) \quad \text{II.3-123}$$

Soit finalement :

$$\mathbf{A} = \sum_\alpha \left( \bar{\lambda}_\alpha^\alpha \left( \varepsilon_\alpha \nabla \bar{T}_\alpha^\alpha + \sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \tilde{T}_\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) \right) \right) \quad \text{II.3-124}$$

En supposant maintenant que  $\tilde{T}_\alpha$  est une fonction linéaire du gradient de la température moyenne  $\bar{T}_\alpha^\alpha$  Whitaker(1977) obtient, après quelques calculs :

$$\bar{\lambda}_\alpha \sum_\beta \left( \frac{1}{V} \int_{A_{\alpha\beta}} \tilde{T}_\alpha \mathbf{n}_{\alpha\beta} dA \right) = \underline{\underline{\lambda}}_{D\alpha} \cdot \nabla \bar{T}_\alpha \quad \text{II.3-125}$$

Où  $\underline{\underline{\lambda}}_{D\alpha}$  représente un tenseur de conduction. On a donc finalement :

$$\mathbf{A} = \sum_\alpha \left( \left( \bar{\lambda}_\alpha \varepsilon_\alpha \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\lambda}}_{D\alpha} \right) \cdot \nabla \bar{T}_\alpha \right) \quad \text{II.3-126}$$

Soit encore, en utilisant l'hypothèse d'équilibre thermique local (II.3-110):

$$\mathbf{A} = \left[ \sum_\alpha \left( \bar{\lambda}_\alpha \varepsilon_\alpha \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\lambda}}_{D\alpha} \right) \right] \cdot \nabla \bar{T} \quad \text{II.3-127}$$

De même que pour les termes faisant apparaître des déviations de température, Whitaker (1977) propose de modéliser les termes dispersifs comme une fonction linéaire du gradient de la température :

$$- \left( \bar{\rho}_l^l \tilde{h}_l \tilde{\mathbf{v}}_l + \sum_{e=1}^{Ne} \bar{\rho}_e \mathbf{v}_e \tilde{h}_e \right) = \underline{\underline{\lambda}}_d \cdot \nabla \bar{T} \quad \text{II.3-128}$$

Où  $\underline{\underline{\lambda}}_d$  représente le tenseur de dispersion associé aux phases liquide et gaz. En regroupant ces deux derniers résultats, on obtient une expression des flux où l'on identifie aisément un tenseur de conductivité thermique équivalente  $\underline{\underline{\lambda}}_{\text{eff}}$ :

$$\mathbf{A} - \left( \bar{\rho}_l^l \tilde{h}_l \tilde{\mathbf{v}}_l + \sum_{e=1}^{Ne} \bar{\rho}_e \mathbf{v}_e \tilde{h}_e \right) = \underline{\underline{\lambda}}_{\text{eff}} \cdot \nabla \bar{T} \quad \text{II.3-129}$$

Avec :

$$\underline{\underline{\lambda}}_{\text{eff}} = \sum_\alpha \left( \lambda_\alpha \varepsilon_\alpha \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\lambda}}_{D\alpha} \right) + \underline{\underline{\lambda}}_d \quad \text{II.3-130}$$

On admet de plus l'expression du terme source de chaleur volumique selon Whitaker [1999] :

$$\bar{\varphi} = \bar{\varphi}_g + \bar{\varphi}_l + \bar{\varphi}_{MO} + \bar{\varphi}_{CR} + \bar{\varphi}_{CI} - \sum_{e=1}^{Ne} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}_e \tilde{h}_e \quad \text{II.3-131}$$

En reportant (II.3-129) et (II.3-131) dans (II.3-114), on obtient :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \bar{\rho}_e \bar{h}_e^g \right) \\
 + \nabla \cdot & \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \{ (\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g + \overline{\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g}) \bar{h}_e^g \} \right) = \quad \text{II.3-132} \\
 & \nabla \cdot (\underline{\lambda}_{\text{eff}} \cdot \nabla \bar{T}) + \bar{\varphi}
 \end{aligned}$$

Dans cette expression apparaît un terme dispersif  $\overline{\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g}$  faisant intervenir les déviations des inconnus. La solution est de remplacer ce terme à l'aide de la loi de Fick généralisée (II.3-48) précédemment écrite soit :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \bar{\rho}_e \bar{h}_e^g \right) \\
 + \nabla \cdot & \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l \right. \\
 + \sum_{e=1}^{Ne} & \left. \left\{ \left( \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g - \bar{\rho}_e^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\mathbf{D}}_{ek}^{\text{eff}} \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_e^g} \right) \right) \bar{h}_e^g \right\} \right) = \nabla \cdot (\underline{\lambda}_{\text{eff}} \cdot \nabla \bar{T}) + \bar{\varphi} \quad \text{II.3-133}
 \end{aligned}$$

Ce chapitre s'achève par un récapitulatif du système d'équation à l'échelle locale décrivant l'ensemble des phénomènes de transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans notre milieu poreux réactif multiphasique multiconstituant.

### II.3.9 Récapitulatif des équations à l'échelle locale

Conservation de la masse (Loi de Fick incluse)

Pour l'eau liquide :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_l \bar{\mathbf{v}}_l^l) = -\dot{m}_v \quad (\text{II.3-79})$$

Pour la matière organique :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{MO} \bar{\mathbf{v}}_{MO}^{MO}) = -\frac{1}{V} \int_{A_{MOg}} r_{MOg} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{MOCR}} r_{MOCR} dA \quad (\text{II.3-60})$$

Pour le charbon :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CR} \bar{\mathbf{v}}_{CR}^{CR}) = -\frac{1}{V} \int_{A_{CRg}} r_{CRg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{CRMO}} r_{MOCR} dA \quad (\text{II.3-64})$$

Pour les cendres inertes :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CI}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CI} \bar{\mathbf{v}}_{CI}^{CI}) = 0 \quad (\text{II.3-68})$$

Espèce e dans la phase gaz,  $e \neq v$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g) - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \\ \bar{\Gamma}_e - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{ecr_{comb}} + r_{ecr_{gazé}}) dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{eMO} dA \end{aligned} \quad (\text{II.3-86})$$

pour  $e=v$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_v \bar{\mathbf{v}}_v^g) - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \bar{\Gamma}_v + \dot{m}_v \\ - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} r_{vcr_{comb}} + r_{vcr_{gazé}} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO} dA \end{aligned} \quad (\text{II.3-88})$$

Conservation de la quantité de mouvement

Phases solides :

$$\bar{\mathbf{v}}_s^s = \mathbf{v}_0(t) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad (\text{II.3-23})$$

Phase liquide :

$$\bar{\mathbf{v}}_l^l - \bar{\mathbf{v}}_s^s = -\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} (\nabla \bar{P}_l^l + \bar{\rho}_l^l \mathbf{g}) \quad \text{si } X > X_{ps} \quad (\text{II.3-24})$$

$$\bar{\rho}_l (\bar{\mathbf{v}}_l^l - \bar{\mathbf{v}}_s^s) = -\bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \nabla X \quad \text{si } X < X_{ps} \quad (\text{II.3-25})$$

Phase gaz :

$$\bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\mathbf{v}}_s^s = -\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) \quad (\text{II.3-27})$$

avec

$$\bar{\rho}_e (\bar{\mathbf{v}}_e^g - \bar{\mathbf{v}}_g^g) + \overline{\bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e} = -\bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \quad (\text{II.3-48})$$

Conservation de l'énergie (Loi de Fick incluse)

Sommation des phases

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l + \sum_{e=1}^{Ne} \bar{\rho}_e \bar{h}_e^g) \\ & + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} \bar{\mathbf{v}}_{MO}^{MO} + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} \bar{\mathbf{v}}_{CR}^{CR} + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} \bar{\mathbf{v}}_{CI}^{CI} + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l \\ & + \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_e^g - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \bar{h}_e^g \right\} ) = \\ & \nabla \cdot (\underline{\underline{\lambda}}_{\text{eff}} \cdot \nabla \bar{T}) + \bar{\varphi} \end{aligned} \quad (\text{II.3-133})$$

avec

$$\bar{h}_s^s - h_{s,ref} = C_s (\bar{T} - T_{ref}) \quad s = \text{MO, CI, CR} \quad (\text{II.3-102})$$

$$\bar{h}_l^l - h_{l,ref} = C p_l (\bar{T} - T_{ref}) - \bar{\Delta H}_D^l (\bar{T}_l^l, a_w) \quad (\text{II.3-104})$$

$$\forall e \neq v \quad \bar{h}_e^g (\bar{T}_g^g) - h_{e,ref} = \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{C} p_e^g (\bar{T}) dT \quad (\text{II.3-108})$$

$$\bar{h}_v^g(\bar{T}_g) - h_{l,ref} = \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{C}_{p_v}^g(\bar{T}) dT + \Delta H_v^{ref} \quad (\text{II.3-109})$$

Equilibre thermique local  $\bar{T}_{MO}^{MO} = \bar{T}_{CI}^{CI} = \bar{T}_{CR}^{CR} = \bar{T}_l^l = \bar{T}_g^g = \bar{T}$  (II.3-110)

Equations complémentaires

Loi de répartition des volumes  $\varepsilon_{MO} + \varepsilon_{CR} + \varepsilon_{CI} + \varepsilon_l + \varepsilon_g = 1$  (II.3-7)

Conservation du volume des phases solides et de la phase liquide

$$\bar{\rho}_{MO}^{MO} = \rho_{MO} = cste \quad (\text{II.3-17})$$

$$\bar{\rho}_{CR}^{CR} = \rho_{CR} = cste \quad (\text{II.3-17})$$

$$\bar{\rho}_{CI}^{CI} = \rho_{CI} = cste \quad (\text{II.3-17})$$

$$\bar{\rho}_l^l = \rho_l = cste \quad (\text{II.3-18})$$

Pression capillaire  $\bar{P}_l^l = \bar{P}_g^g - \bar{P}_c$  (II.3-50)

Egalité des potentiels chimiques de l'eau  $\bar{P}_v^g = a_w P_{vsat}$  (II.3-89)

Loi des gaz parfaits

$$\bar{\rho}_e^g = \frac{M_e \bar{P}_e^g}{R \bar{T}_g} \quad (\text{II.3-19})$$

$$\bar{P}_g^g = \sum_e \bar{P}_e^g \quad (\text{II.3-21})$$

$$\bar{\rho}_g^g = \sum_e \bar{\rho}_e^g \quad (\text{II.3-20})$$

***Références Bibliographiques :***

**Chausi B.**, 2000, Modélisation des phénomènes de transport en milieu déformable diphasique dont une phase est binaire : application à la DII, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France.

**Chelliah H.K., Makino A., Araki N., Law C.K.**, 1996. Modeling of graphite oxidation in a stagnation-point flow field using detailed homogeneous and semi global heterogeneous mechanisms with comparison to experimentas. *Combustion and Flame*, 104, 469-480.

**Chenu D.**, 2007, Modélisation des transferts réactifs de masse et de chaleur dans les installations de stockage de déchets ménagers : application aux installations de type bioréacteur, thèse, Institut national polytechnique de Toulouse.

**Cooper, J. & Hallett, W.L.H.**, 2000. A Numerical Model for Packed-Bed Combustion of Char Particles, *Chemical Engineering Science*, 55, pp. 4451-4460.

**Couture F.**, 1995, Modélisation fine d'un problème de séchage, développement d'outils adaptés, Thèse, Université de Bordeaux I, France.

**Germain P. & Muller P.**, 1994, Introduction à la mécanique des milieux continus, Masson, Paris.

**Gobbé C. and Quintard M.**, 1994. Macroscopic description of unsteady heat transfer in heterogeneous media. *High Temperatures - High Pressures*, 26 :1-14.

**Gray, W.G.**, 1975, A derivation of the equations of multi-phase transport. *Chemical Engineering Science*, 30 :229-233

**Grønli M.**, 1996, A theoretical and experimental study of the thermal degradation of biomass, Ph.D Thesis, The Norwegian University of Science and Technology.

**Hayhurst A.N. & Parmar M.S.**, 1998, Does solid carbon burn in oxygen to give the gaseous intermediate CO or produce CO<sub>2</sub> directly? Some experiments in a hot bed of sand fluidized by air, *Chemical Engineering Science*, 53, 427-438.

**Laurent S.**, 1998, Analyse expérimentale de l'évolution pseudo-polymorphique lors du séchage : application à un produit pharmaceutique imprégné d'un solvant multicomposant, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**Menard Y.**, 2003, Modélisation de l'incinération sur grille d'ordures ménagères et approche thermodynamique du comportement des métaux lourds, thèses, Institut polytechnique de Lorraine.

**Perré P., Degiovanni A.**, 1990, Simulations par volumes finis des transferts couplés en milieu poreux anisotropies: séchage du bois à basse et à haute température, *International Journal of heat and mass transfer*, 33(11) :2463-2478

**Porras Rey G.O.**, 2005, Modélisation des phénomènes de transport en milieu diphasique déformable (solide-liquide binaire) : simulation 2D du séchage convectif, thèse, Université de Pau

## CHAPITRE II : Modélisation

et des Pays de l'Adour, France

**Puiggali J.R., Quintard M.**, 1992, Properties and simplifying assumptions for classical drying models, *Advances in drying*, 5:131-147

**Quintard M. & Whitaker S.**, 1993, One- and two-equations models for transient diffusion processes in two-phase system. *Advances in heat transfer*, 23.

**Ratte J.**, 2009, modélisation d'un réacteur de pyrolyse lente de bois pollué, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**Rosendahl, L.**, Extending the modelling framework for gas-particle systems. Applications of multiparameter shape descriptions to non-conventional solid fuels in reacting and nonreacting environments, *Institute of Energy Technology*, Aalborg University, Denmark, 1998.

**Sfair Da Costa Sarmento A.L.**, 2004, modélisation des phénomènes de transports en milieu déformable diphasique : prise en compte de la pression de la phase liquide, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France

**Slattery J.C.**, 1981, *Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua*, McGraw-Hill Book, New York

**Slattery J.C.**, 1999, *Advanced Transport Phenomena*, Cambridge Press, Cambridge.

**Taylor R., Krishna R.**, 1993, *Multicomponent mass transfer*, John-Wiley & Sons, New York

**Thorpe G.R., Whitaker S.**, 1992, Local mass and thermal equilibria in ventilated grain bulks. Part II: the development of constraints, *J. stored Prod. Res.*, 28, pp 29-52.

**Thurner F., Mann U.**, 1981. Kinetic investigation of wood pyrolysis, *Industrial Engineering Chemistry Process Design and Development*, 20, 482-488

**Tomeczek J.**, 1994, *Coal Combustion*, Krieger, Malabar, Florida

**Truesdell C.**, 1969, *Rational thermodynamics. Modern Applied Mathematics*. McGraw-Hill Book Company

**Whitaker S.**, 1977, Simultaneous heat, mass and momentum transfer in porous media : a theory of drying. *Advances in Heat Transfer*, 13 :119-203

**Whitaker S.**, 1977a, *Fundamental principles of heat transfer*, Krieger publishing company, Malabar, Florida

**Whitaker S.**, 1980, Heat and mass transfer in granular porous media, *Advances in Drying*, 1, pp 23-61

**Whitaker S.**, 1984, Moisture transport mechanisms during the drying of granular porous media, *Proceeding of the fourth international drying symposium*, 1 :31-42

**Whitaker S.**, 1984b, Local thermal equilibrium: an application to packed bed catalytic reactor design, *Chemical Engineering Science*, 41, pp 2029-2039

## CHAPITRE II : Modélisation

**Whitaker S.**, 1986, Transport processes with heterogeneous reaction, pages 1-94 in Concepts and Design of Chemical Reactors, edited by S. Whitaker and A.E. Cassano, Gordon and Breach, New York.

**Whitaker S.**, 1986a, Flow in porous media I : A theoretical derivation of darcy's law. Transport in porous media, 1 :3-25

**Whitaker S.**, 1986b, Flow in porous media III : deformable media. Transport in porous media, 1(2) :127-154

**Whitaker S.**, 1987a, Concepts and design of chemical reactors, chapter 1: Transport processes with heterogeneous reaction. Gordon and Breach, New York.

**Whitaker S.**, 1987b, Mass transport and reaction in catalyst pellets, Transport in porous media, 2 :269-299

**Wood B.,Whitaker S.**, 1997, Diffusion and reaction in biofilm, Chemical Engineering Science, 50 :397-425

**Whitaker S.**, 1999, The Method of Volume Averaging, volume 13 of theory and applications of transport in porous media.



## **III Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe**



Le passage du système final d'équations à la simulation numérique nécessite l'écriture de conditions aux limites et initiales propres au gazéifieur auto-thermique à lit fixe du procédé CHO-Power. Ainsi la modélisation de l'ensemble des conditions de continuité des flux et des scalaires nécessaire à l'obtention d'un jeu de conditions limites est proposée afin de pouvoir résoudre numériquement le modèle mathématique de transport en milieu poreux réactif. Celle-ci découle du choix préalable des inconnues indépendantes pour la résolution et de l'expression des gradients moteurs des phénomènes de transport en fonction des variables choisies. Alors, les méthodes de discrétisation temporelle et spatiale adaptées à cette étude sont mises en œuvre. Ensuite, la démarche numérique mise en place pour la résolution ainsi que les optimisations numériques permettant une meilleure résolution du modèle sont présentées. Enfin, les résultats des simulations effectuées pour le cas d'un gazéifieur auto-thermique à lit fixe sont analysés.

### ***III.1 Modélisation des conditions initiales et aux limites***

Une fois le modèle de transports internes écrit à l'échelle locale, il est nécessaire d'y ajouter un jeu de conditions initiales et aux limites afin de pouvoir résoudre le système final d'équations.

#### **III.1.1 Conditions initiales**

A l'état initial, les distributions des différents scalaires sont supposées connues et uniformes sur tout le milieu. Pour les phases solides et la phase liquide, on obtient les moyennes des concentrations massiques à partir de la répartition des fractions volumiques initiales sachant que leurs moyennes intrinsèques de phase sont des constantes (II.3-17, II.3-18).

##### ***Phases solides***

$$\text{à } t = 0, \forall(x, y) \quad \bar{\rho}_{MO} = \varepsilon_{MO}^0 \bar{\rho}_{MO}^{MO} \quad \text{III-1}$$

$$\text{à } t = 0, \forall(x, y) \quad \bar{\rho}_{CR} = \varepsilon_{CR}^0 \bar{\rho}_{CR}^{CR} \quad \text{III-2}$$

$$\text{à } t = 0, \forall(x, y) \quad \bar{\rho}_{CI} = \varepsilon_{CI}^0 \bar{\rho}_{CI}^{CI} \quad \text{III-3}$$

##### ***Phase liquide***

$$\text{à } t = 0, \forall(x, y) \quad \bar{\rho}_l = \varepsilon_l^0 \bar{\rho}_l^l \quad \text{III-4}$$

##### ***Phase gaz***

la fraction volumique de la phase gaz en tout point est déduite via l'équation (II.3-7) des fractions volumiques initiales des phases solides et liquide. Les moyennes des concentrations massiques des

constituants sont obtenues à partir des moyennes intrinsèques en phase gaz des concentrations massiques de chaque constituant, supposées connues

$$\text{à } t = 0, \forall(x, y), \forall e \quad \bar{\rho}_e = \varepsilon_g^0 \bar{\rho}_e^{g0} \quad \text{III-5}$$

### Température

On considère une température moyenne initiale uniforme

$$\text{à } t = 0, \forall(x, y) \quad \bar{T} = \bar{T}^0 \quad \text{III-6}$$

### III.1.2 Conditions aux limites

Avant toute écriture de conditions limites, il convient de préciser l'ensemble des surfaces sur lesquelles se produisent les différents transferts de masse et d'énergie. Le choix d'un problème bidimensionnel a été fait. Les surfaces d'échanges avec le milieu environnant sont les surfaces latérales du milieu ainsi que les surfaces supérieure et inférieure. La Figure 39 illustre de façon simplifiée le milieu poreux équivalent afin de pouvoir identifier les différentes surfaces.

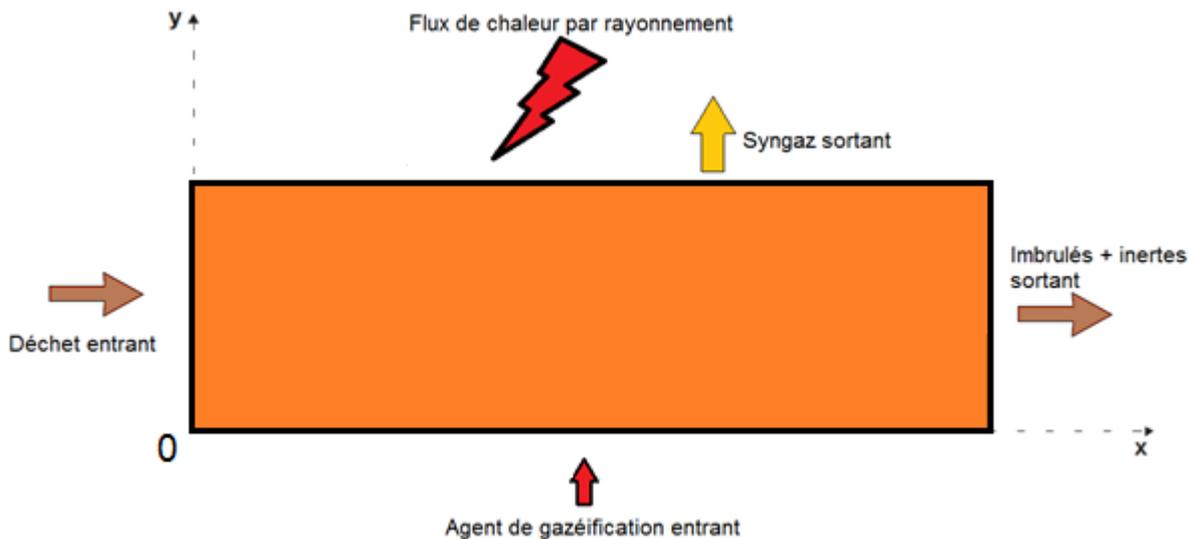


Figure 39 : Représentation simplifiée du lit de déchets et des flux aux différentes surfaces

Les équations aux dérivées partielles du système à résoudre sont soit d'ordre 1 (équations de conservation de la masse des phases solides) soit d'ordre 2. Pour deux dimensions d'espace, deux conditions aux limites sont nécessaires pour les équations d'ordre 1. Elles seront écrites en entrée du déchet et en entrée de l'air de gazéification. Pour les équations d'ordre 2, quatre conditions aux limites doivent être écrites, une par surface.

### III.1.2.a Entrée du déchet

La connaissance de l'ensemble des caractéristiques du déchet en entrée ainsi que son débit d'alimentation permet de choisir le type de conditions aux limites sur cette surface. On peut aussi bien utiliser une condition de continuité de flux (condition de type Neumann) qu'une valeur imposée (condition de type Dirichlet). Une condition de type Dirichlet est retenue.

Les continuités des masses volumiques moyennes des phases solides et liquide  $\bar{\rho}_{MO}$ ,  $\bar{\rho}_{CR}$ ,  $\bar{\rho}_{CI}$  et  $\bar{\rho}_l$  sont fixées par la connaissance des fractions volumiques du déchet entrant, d'où :

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{MO} = \varepsilon_{MO}^{\text{entrée}} \bar{\rho}_{MO}^{\text{MO}} \quad \text{III-7}$$

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{CR} = \varepsilon_{CR}^{\text{entrée}} \bar{\rho}_{CR}^{\text{CR}} \quad \text{III-8}$$

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{CI} = \varepsilon_{CI}^{\text{entrée}} \bar{\rho}_{CI}^{\text{CI}} \quad \text{III-9}$$

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_l = \varepsilon_l^{\text{entrée}} \bar{\rho}_l^l \quad \text{III-10}$$

Les concentrations massiques moyennes des constituants en phase gaz  $\bar{\rho}_e$  sont données par la composition de la phase gaz du déchet entrant, la fraction volumique gazeuse étant déduite par différence des fractions volumiques des autres phases (II.3-7)

$$\text{en } x = 0, \forall y \text{ et } \forall e \quad \bar{\rho}_e = \varepsilon_g^{\text{entrée}} \bar{\rho}_e^{g, \text{entrée}} \quad \text{III-11}$$

Enfin la continuité de la température moyenne donne

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{T} = T_{\text{déchet}}^{\text{entrée}} \quad \text{III-12}$$

### III.1.2.b Entrée de l'air de gazéification

La continuité des flux de matière et de chaleur est écrite.

Pour toutes les phases solides, le flux est nul.

$$\text{en } y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{MO} \bar{\mathbf{v}}_s^s \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-13}$$

$$\text{en } y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{CR} \bar{\mathbf{v}}_s^s \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-14}$$

$$\text{en } y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{CI} \bar{\mathbf{v}}_s^s \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-15}$$

Pour les Ne-1 constituants de la phase gaz autre que la vapeur d'eau, la continuité du flux de matière donne

$$\text{en } y = 0, \forall x \text{ et } \forall e \neq v \quad \left( \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{\text{Ne}-1} \mathbf{D}_{ek}^{\text{eff}} \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_e \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-16}$$

où  $\rho_e \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n}$  représente, à l'interface, le flux de masse au sein de l'air de gazéification dont la valeur est connue.

La continuité du flux de matière pour l'eau sous ses deux états (liquide et gazeux) entre le milieu poreux et l'air de gazéification aboutit à l'expression suivante :

$$en\ y = 0, \forall x \left( \bar{\rho}_l \bar{\mathbf{v}}_l^l + \bar{\rho}_v \bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{eff} \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_v \mathbf{v}_v \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-17}$$

où  $\rho_v \mathbf{v}_v \cdot \mathbf{n}$  représente, à l'interface, le flux de masse d'eau au sein de l'air de gazéification.

Enfin l'écriture de la conservation de l'énergie et la continuité du flux de chaleur associée à cette équation se traduit par la relation

$$\begin{aligned} en\ y = 0, \forall x & \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} \bar{\mathbf{v}}_s^s + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{\mathbf{v}}_l^l \right. \\ & + \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \bar{h}_e^g \right\} - \underline{\underline{\lambda}}_{eff} \cdot \nabla T \Big) \cdot \mathbf{n} = \\ & \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e h_e - \lambda \nabla T \right) \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad \text{III-18}$$

où  $(\sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e h_e - \lambda \nabla T) \cdot \mathbf{n}$  représente, à l'interface, le flux de chaleur au sein de l'air de gazéification.

Les valeurs des flux à la surface à partir des caractéristiques de l'agent de gazéification entrant du procédé CHO-Power sont données dans la troisième partie (cf. III.3) de ce chapitre.

### III.1.2.c Sortie du Syngaz

Comme nous l'avons déjà évoqué, l'écriture d'une condition à la limite sur cette surface pour les phases solides n'est pas nécessaire. Les équations de conservation de la masse solide sont des équations du premier ordre. Ainsi dans un cas bidimensionnel, l'écriture de deux conditions limites, à l'entrée du déchet et à l'entrée de l'air de gazéification, suffit.

La continuité du flux pour chacun des constituants de la phase gaz à l'exception de l'eau à la surface de la sortie du Syngaz est écrite

$$en\ y = Ly, \forall x \text{ et } \forall e \neq v \left( \bar{\rho}_e \bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_e \mathbf{V}_e \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-19}$$

où  $\rho_e \mathbf{V}_e \cdot \mathbf{n}$  désigne le flux du constituant e dans le milieu environnant.

La continuité du flux de matière appliquée au constituant « eau » (liquide+vapeur) donne

$$en\ y = Ly, \forall x \left( \bar{\rho}_l \bar{\mathbf{v}}_l^l + \bar{\rho}_v \bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{eff} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_v \mathbf{V}_v \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-20}$$

Enfin, l'écriture de la continuité du flux de chaleur entre le milieu poreux et le milieu environnant s'exprime

$$\begin{aligned}
 & \text{en } y = Ly, \forall x \\
 & + \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} \bar{v}_s^s + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} \bar{v}_s^s + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} \bar{v}_s^s + \bar{\rho}_l \bar{h}_l^l \bar{v}_l^l \right. \right. \\
 & \left. \left. - \bar{\rho}_e \bar{v}_g^g - \bar{\rho}_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{ek}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g} \right) \right) \bar{h}_e^g \right\} - \underline{\underline{\lambda}}_{\text{eff}} \cdot \nabla \bar{T} \cdot \mathbf{n} = \\
 & \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e h_e \mathbf{V}_e \right) \cdot \mathbf{n} + Q_{ray} - \lambda \nabla T
 \end{aligned} \tag{III-21}$$

où  $T$  est la température du milieu environnant,  $h_e$  est l'enthalpie massique d'un constituant  $e$  au sein du milieu environnant et  $Q_{ray}$  le flux surfacique de rayonnement émis par le milieu environnant et reçu par le milieu poreux.

La connaissance des flux dans l'environnement impose l'écriture puis la résolution, par exemple à l'aide d'un outil de CFD, des équations de conservations de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie du fluide ambiant. Le jeu de conditions aux limites (III-19) à (III-21), agrémenté de l'égalité des températures et des concentrations massiques, s'appliquerait successivement au lit de déchets puis à l'environnement lors d'un processus itératif de résolution du système d'équations au sein du lit poreux et du système d'équations au sein de son environnement. Ce type de méthodologie, déjà mise en œuvre ailleurs (Erriguible 2004, Marias et al. 2005), implique dans un cas non stationnaire un temps de calcul important. Aussi, son implémentation dans le contexte CHO-Power reste une perspective de ce travail.

Une solution pour contourner la difficulté serait d'adopter un jeu d'hypothèses simplificatrices pour limiter le nombre d'équations d'ordre deux, et donc de conditions aux limites. Négliger la diffusion au sein du milieu permet de décrire la conservation de la masse et de la quantité de mouvement du système par seulement une équation d'ordre deux et  $Ne-1$  équations d'ordre un. En tenant compte des conditions en entrée du déchet et du gaz, une seule condition en sortie Syngaz au lieu de  $Ne$  permet de résoudre le problème massique.

C'est par exemple le cas dans les travaux de Menard (2003). La diffusion est négligée. Dans une des équations de conservation de la masse est injectée la loi de Darcy. Une équation d'ordre deux en pression de la phase gazeuse est obtenue. Cette équation est résolue en spécifiant la pression à la sortie des gaz et en ajoutant des conditions aux limites similaires à celles utilisées ici aux autres surfaces. Le champ de vitesse est déduit du champ de pression. Les équations de conservation de la masse pour les autres espèces sont alors des équations d'ordre un, pour lesquelles une condition en entrée du déchet et une en entrée du gaz suffisent. D'un point de vue thermique, on pourrait se

ramener à une équation d'ordre un en négligeant, en plus de la diffusion matérielle, la conduction. Cette hypothèse est également effectuée par Menard pour le bilan enthalpique de la phase gazeuse. Ainsi, aucune condition en sortie gaz n'est nécessaire. Par contre, dans son modèle à deux températures, la conduction est conservée pour le bilan sur le solide. La continuité du flux de chaleur est écrite en supposant que le flux externe est uniquement lié au rayonnement.

Plutôt que de dégrader le modèle de transports internes afin de réduire le nombre de conditions aux limites, il est préféré ici estimer les flux à la limite intervenant dans les équations (III-19) à (III-21) en se basant sur les hypothèses suivantes :

- la pression du gaz environnant est connue ( $P_0$ ) et la pression de la phase gazeuse du milieu est égale à cette pression

$$\bar{P}_g^g = P_0 \quad \text{III-22}$$

- les concentrations massiques des espèces du gaz environnant sont celles du milieu

$$\forall e \quad \rho_e = \bar{\rho}_e^g \quad \text{III-23}$$

- la diffusion au sein du gaz environnant est négligée à la limite

$$\forall e \quad -\rho_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \mathbf{D}_{ek} \cdot \nabla \left( \frac{\rho_k}{\rho_g} \right) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-24}$$

- la conduction est négligée au sein du gaz environnant

$$-\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-25}$$

En tenant compte de ces relations, la composante normale de la vitesse du gaz ambiant est déduite de la continuité du flux d'une des espèces. Soit a cette espèce. Son flux dans l'environnement s'exprime

$$\rho_a \mathbf{V}_a = \rho_a \mathbf{V}_g - \rho_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \mathbf{D}_{ak} \cdot \nabla \left( \frac{\rho_k}{\rho_g} \right) \quad \text{III-26}$$

En reportant (III-26) dans (III-19) pour e=a, avec (III-23) et (III-24), il vient :

$$\left( \bar{\rho}_a \bar{\mathbf{v}}_g^g - \bar{\rho}_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ak}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \cdot \mathbf{n} = \bar{\rho}_a^g \mathbf{V}_g \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-27}$$

soit

$$\mathbf{V}_g \cdot \mathbf{n} = \left( \varepsilon_g \bar{\mathbf{v}}_g^g - \frac{\bar{\rho}_g^g}{\bar{\rho}_a^g} \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ak}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-28}$$

Ayant consommé l'équation (III-19) e=a pour obtenir (III-28), la continuité des pressions (III-22) fournit une condition de Dirichlet pour cette espèce. D'après (II.3-19) et (II.3-21), en tenant compte

de (III-22), il vient :

$$\bar{\rho}_a = \varepsilon_g \frac{M_a}{RT} \left( P_0 - \sum_{e \neq a} \bar{P}_e^g \right) \quad \text{III-29}$$

En résumé le jeu de conditions aux limites appliqué à la sortie Syngaz est donnée par (III-29) pour l'espèce gazeuse a, (III-20) pour l'espèce eau, (III-19) pour toutes les autres espèces et (III-21) pour l'énergie en tenant compte de (III-25). Dans ces équations, les flux des espèces dans le gaz environnant valent, grâce à (III-23) et (III-24)

$$\forall e \quad \rho_e \mathbf{V}_e \cdot \mathbf{n} = \bar{\rho}_e \mathbf{V}_g \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-30}$$

où  $\mathbf{V}_g \cdot \mathbf{n}$  s'exprime comme indiqué en (III-28).

#### **III.1.2.d Sortie des imbrûlés**

Sur cette surface, correspondant à la sortie de la fraction de déchets imbrûlés lors du processus, on considère, au vu des dimensions caractéristiques du lit de déchets, que le régime est établi. Ceci se traduit par la nullité du produit scalaire entre le gradient des inconnues de résolution et la normale sortante au milieu, soit

$$\forall \theta \text{ inconnue} \quad \nabla \theta \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-31}$$

où  $\theta$  est une inconnue de résolution.

Dans cette partie, les conditions aux limites et initiales nécessaire à la résolution de notre modèle mathématique ont été écrites.

Dans la partie suivante, le choix des variables de résolution, le développement des méthodes numériques utilisées et les différents arrangements numériques implémentés sont présentés.

### **III.2 Résolution numérique**

Dans le chapitre II, un modèle mathématique d'équations aux dérivées partielles et d'équations algébriques couplées a été développé. Afin de réduire au maximum la taille du système d'équations algébriques à résoudre après discrétisation, les lois exprimant les flux (Darcy, Fick généralisée) et les relations algébriques du modèle au chapitre II sont introduites dans les équations aux dérivées partielles. Dans un premier temps, un jeu de variables indépendantes, dont le nombre est égal au nombre d'équations aux dérivées partielles à résoudre est choisi. Dans un second temps, les gradients moteurs apparaissant dans l'expression des flux sont développés par rapport aux gradients des variables indépendantes. Cette étape présente au demeurant l'avantage de conférer

aux équations un caractère parabolique fort (termes de type diffusif d'un point de vue mathématique dominants), adaptés à la résolution numérique. Les méthodes de discrétisation spatiale et temporelle conduisent à un système linéaire d'équations dont la résolution est effectuée par une méthode itérative par bloc. Enfin, quelques arrangements numériques sont implémentés dans le but d'améliorer le temps de calcul et la stabilité.

### III.2.1 Développement des équations par rapport aux variables indépendantes

#### III.2.1.a Choix des variables indépendantes

Le choix des variables indépendantes se fait en connaissance du nombre d'équations aux dérivées partielles à résoudre après introduction des flux dans les équations de conservations de la masse et de l'énergie.

Pour les phases solides, que sont la matière organique (MO), le charbon (CR) et les cendres inertes (CI), la vitesse est donnée par (II.3-23). Les équations de conservations de la masse (II.3-60, II.3-64, II.3-68) deviennent.

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{MO} \mathbf{v}_0(t)) = -\frac{1}{V} \int_{A_{MOg}} r_{MOg} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{MOCR}} r_{MOCR} dA \quad \text{III-32}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CR} \mathbf{v}_0(t)) = -\frac{1}{V} \int_{A_{CRg}} r_{CRg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{CRM O}} r_{MOCR} dA \quad \text{III-33}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CI}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CI} \mathbf{v}_0(t)) = 0 \quad \text{III-34}$$

où  $\mathbf{v}_0(t)$  est une constante.

Pour le constituant « eau », rappelons que l'écriture de la conservation de la masse du liquide est donnée par (II.3-79) et la conservation de la masse de la vapeur par (II.3-88). Ces deux équations font apparaître le taux volumique de changement de phase  $\dot{m}_v$ . La connaissance de ce taux n'ayant que peu d'intérêt, il est numériquement rentable d'éliminer cette inconnue et donc une équation du système. Il suffit de remplacer (II.3-79) par la somme de (II.3-79) et (II.3-88) et de choisir d'éliminer (II.3-88). La somme des équations donne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_v + \bar{\rho}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_v \bar{\mathbf{v}}_g^g + \bar{\rho}_l \bar{\mathbf{v}}_l^l) - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{eff} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \bar{r}_v \\ - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} r_{vcrcomb} + r_{vcrgazé} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO} dA \end{aligned} \quad \text{III-35}$$

L'expression des vitesses pour les phases gaz (II.3-27) et liquide (II.3-24, II.3-25) en tenant compte de l'équation (II.3-23) donne :

pour la phase gaz,

$$\bar{\mathbf{v}}_g^g - \mathbf{v}_0(t) = - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) \quad \text{III-36}$$

pour la phase liquide,

$$\text{si } X > X_{ps} \quad \bar{\mathbf{v}}_l^l - \mathbf{v}_0(t) = - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} (\nabla \bar{P}_l^l + \bar{\rho}_l^l \mathbf{g}) \quad \text{III-37}$$

$$\text{si } X < X_{ps} \quad \bar{\rho}_l (\bar{\mathbf{v}}_l^l - \mathbf{v}_0(t)) = - \bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \nabla X \quad \text{III-38}$$

En introduisant (III-36), (III-37) et (III-38) dans (III-35), on obtient :

$$\begin{aligned} \text{si } X > X_{ps} \quad \frac{\partial \bar{\rho}_v + \bar{\rho}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_v \left( - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) + \mathbf{v}_0(t) \right) \right) \\ + \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_l \left( - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} (\nabla \bar{P}_l^l + \bar{\rho}_l^l \mathbf{g}) + \mathbf{v}_0(t) \right) \right) \\ - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{eff} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \bar{r}_v \\ - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} r_{vcrcomb} + r_{vcrgazé} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO} dA \end{aligned} \quad \text{III-39}$$

et

$$\begin{aligned}
 \text{si } X < X_{ps} \quad & \frac{\partial \bar{\rho}_v + \bar{\rho}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_v \left( -\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) + \mathbf{v}_0(t) \right) \right) \\
 & + \nabla \cdot \left( -\bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \nabla X + \bar{\rho}_l \mathbf{v}_0(t) \right) \\
 & - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \bar{r}_v \\
 & - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} r_{vcr_{comb}} + r_{vcr_{gazé}} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO} dA
 \end{aligned} \tag{III-40}$$

Pour les autres constituants de la phase gaz, on écrit la conservation de la masse (II.3-86) en introduisant la conservation de la quantité de mouvement de la phase gaz (II.3-27) et en tenant compte de l'hypothèse de rigidité des phases solides (II.3-23) ce qui donne

$$\begin{aligned}
 \forall e \neq v \quad & \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) + \mathbf{v}_0(t) \right) \right) \\
 & - \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{\text{eff}} \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) = \\
 & \bar{r}_e - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{ecr_{comb}} + r_{ecr_{gazé}}) dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{eMO} dA
 \end{aligned} \tag{III-41}$$

Concernant l'écriture de la conservation de l'énergie totale du milieu homogénéisé (II.3-133), il semble naturel d'envisager le choix de l'enthalpie volumique totale comme inconnue, d'autant plus que cette quantité  $\bar{\rho}h$  définie par

$$\bar{\rho}h = \bar{\rho}_{MO} \bar{h}_{MO}^{MO} + \bar{\rho}_{CR} \bar{h}_{CR}^{CR} + \bar{\rho}_{CI} \bar{h}_{CI}^{CI} + \sum_{e=1}^{Ne} \{ \bar{\rho}_e \bar{h}_e^g \} \tag{III-42}$$

est une grandeur conservative.

Néanmoins, le caractère non linéaire de  $\bar{\rho}h = f(\bar{T})$  nous a incité à prendre la température moyenne à l'échelle locale  $\bar{T}$  comme inconnue du problème et donc de développer les enthalpies en fonction de  $\bar{T}$  selon (II.3-102), (II.3-104), (II.3-108) et (II.3-109). En introduisant les lois de Darcy généralisées pour les phases gaz (II.3-27) et liquide (II.3-24, II.3-25), en tenant compte de l'équation (II.3-23) traduisant la rigidité des phases solides dans l'équation (II.3-133), le développement par rapport à la température aboutit à

$$\begin{aligned}
 \text{si } X > X_{ps} \quad & \frac{\partial}{\partial t} \left( \bar{\rho}_{MO} (C_{MO}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref}) + \bar{\rho}_{CR} (C_{CR}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref}) \right) \\
 & + \bar{\rho}_{CI} (C_{CI}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CI,ref}) \\
 & + \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \\
 & + \sum_{e=1}^{Ne} \bar{\rho}_e \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \overline{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \\
 + \nabla \cdot [ & \bar{\rho}_{MO} (C_{MO}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref}) \mathbf{v}_0(t) + \bar{\rho}_{CR} (C_{CR}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref}) \mathbf{v}_0(t) \\
 & + \bar{\rho}_{CI} (C_{CI}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CI,ref}) \mathbf{v}_0(t) + \\
 & \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} (\nabla \bar{P}_l^l + \bar{\rho}_l^l \mathbf{g}) + \mathbf{v}_0(t) \right) \\
 & + \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) + \mathbf{v}_0(t) \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{ek}^{eff} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \overline{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} ] = \\
 & \nabla \cdot (\underline{\underline{\lambda}}_{eff} \cdot \nabla \bar{T}) + \bar{\varphi}
 \end{aligned}$$

III-43

et

$$\begin{aligned}
 \text{si } X > X_{ps} \quad & \frac{\partial}{\partial t} \left( \bar{\rho}_{MO} (C_{MO} (\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref}) \right. \\
 & + \bar{\rho}_{CR} (C_{CR} (\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref}) + \bar{\rho}_{CI} (C_{CI} (\bar{T} - T_{ref}) + h_{CI,ref}) \\
 & + \bar{\rho}_l (C_{pl} (\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l (\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \\
 & \left. + \sum_{e=1}^{Ne} \bar{\rho}_e \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \overline{Cp}_e^g (\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right) \\
 & + \nabla \cdot \left( \bar{\rho}_{MO} (C_{MO} (\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref}) \mathbf{v}_0(t) \right. \\
 & \quad + \bar{\rho}_{CR} (C_{CR} (\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref}) \mathbf{v}_0(t) \\
 & \quad + \bar{\rho}_{CI} (C_{CI} (\bar{T} - T_{ref}) + h_{CI,ref}) \mathbf{v}_0(t) + \\
 & \quad \left. \bar{\rho}_l (C_{pl} (\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l (\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}_l} \underline{\underline{D}}_b \cdot \nabla X + \mathbf{v}_0(t) \right) \right) \\
 & + \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) + \mathbf{v}_0(t) \right) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{ek}^{eff} \cdot \nabla \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right) \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \overline{Cp}_e^g (\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} = \\
 & \quad \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\lambda}}_{eff} \cdot \nabla \bar{T} \right) + \bar{\varphi}
 \end{aligned} \tag{III-44}$$

Finalement, en tenant compte des équations algébriques (II.3-17) à (II.3-21) et (II.3-50), de l'élimination de  $\dot{m}_v$  et donc de l'équation (II.3-88), de l'équilibre thermodynamique local (II.3-89), Ne+4 équations aux dérivées partielles sont à résoudre pour calculer Ne+4 inconnues indépendantes. On choisit  $\bar{\rho}_{MO}$ ,  $\bar{\rho}_{CR}$ ,  $\bar{\rho}_{CI}$ ,  $\bar{\rho}_l$ , les  $\bar{\rho}_e$  pour  $e \neq v$  et  $\bar{T}$ .

### III.2.1.b Expression des gradients

L'écriture du système d'équations fait apparaître les gradients de fonctions  $\theta$  des variables indépendantes choisies en (III.2.1.a). Ces gradients sont développés suivant la relation :

pour  $\theta = \bar{p}_g^g, \bar{p}_l^l, \left(\frac{\bar{\rho}_b}{\bar{\rho}_s}\right), \left(\frac{\bar{\rho}_e^g}{\bar{\rho}_g^g}\right) e \neq v$

$$\nabla\theta = \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_{MO}} \nabla\bar{\rho}_{MO} + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_{CR}} \nabla\bar{\rho}_{CR} + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_{CI}} \nabla\bar{\rho}_{CI} + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_l} \nabla\bar{\rho}_l + \sum_{e=1}^{Ne-1} \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_e} \nabla\bar{\rho}_e + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{T}} \nabla\bar{T} \quad \text{III-45}$$

Un développement similaire de la dérivée en temps donne

pour  $\theta = \bar{\rho}_v, \bar{\rho}h$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_{MO}} \frac{\partial\bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_{CR}} \frac{\partial\bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_{CI}} \frac{\partial\bar{\rho}_{CI}}{\partial t} + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_l} \frac{\partial\bar{\rho}_l}{\partial t} + \sum_{e=1}^{Ne-1} \frac{\partial\theta}{\partial\bar{\rho}_e} \frac{\partial\bar{\rho}_e}{\partial t} + \frac{\partial\theta}{\partial\bar{T}} \frac{\partial\bar{T}}{\partial t} \quad \text{III-46}$$

En tenant compte de ces développements, le système à résoudre pour décrire les phénomènes de transport lors de la gazéification est résumé ci-dessous.

➤ *phases solides*

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{MO} \mathbf{v}_0(t)) = \bar{R}_{MO} \quad \text{III-47}$$

avec

$$\bar{R}_{MO} = \frac{1}{V} \int_{A_{MOg}} r_{MOg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{MOCR}} r_{MOCR} dA \quad \text{III-48}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CR} \mathbf{v}_0(t)) = \bar{R}_{CR} \quad \text{III-49}$$

avec

$$\bar{R}_{CR} = \frac{1}{V} \int_{A_{CRg}} r_{CRg} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{CRM0}} r_{MOCR} dA \quad \text{III-50}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{CI}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CI} \mathbf{v}_0(t)) = 0 \quad \text{III-51}$$

➤ **constituant « eau » (liquide+vapeur)**

$$\beta_{lMO} \frac{\partial \bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \beta_{lCR} \frac{\partial \bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \beta_{lCI} \frac{\partial \bar{\rho}_{CI}}{\partial t} + \beta_{ll} \frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t} + \beta_{lT} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \sum_{e \neq v} \beta_{le} \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\alpha}}_{lMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{ll} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{lT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{le} \cdot \nabla \bar{\rho}_e + \mathbf{A}_l + \bar{\rho}_l \mathbf{v}_0(t) \right) = \bar{R}_l \quad \text{III-52}$$

avec

$$\bar{R}_l = \bar{r}_v + \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{vcr\ comb} + r_{vcr\ gazé}) dA + \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO} dA \quad \text{III-53}$$

➤ **phase gaz exceptée la vapeur**

Pour  $k \neq v$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\alpha}}_{kMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{kl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{kT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{ke} \cdot \nabla \bar{\rho}_e + \mathbf{A}_k + \bar{\rho}_k \mathbf{v}_0(t) \right) = \bar{R}_k \quad \text{III-54}$$

avec

$$\bar{R}_k = \bar{r}_k - \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{kcr\ comb} + r_{kcr\ gazé}) dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{kMO} dA \quad \text{III-55}$$

➤ **bilan énergétique**

$$\beta_{TMO} \frac{\partial \bar{\rho}_{MO}}{\partial t} + \beta_{TCR} \frac{\partial \bar{\rho}_{CR}}{\partial t} + \beta_{TCI} \frac{\partial \bar{\rho}_{CI}}{\partial t} + \beta_{Tl} \frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t} + \beta_{TT} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \sum_e \beta_{Te} \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{TT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_e \underline{\underline{\alpha}}_{Te} \cdot \nabla \bar{\rho}_e + \mathbf{A}_T + \mathbf{Z}_T \mathbf{v}_0(t) \right) = \bar{\varphi}_T \quad \text{III-56}$$

En termes de conditions aux limites, le développement par rapport aux variables indépendantes aboutit aux expressions suivantes.

➤ **Entrée du déchet**

Phases solides

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{MO} = \varepsilon_{MO}^{\text{entrée}} \bar{\rho}_{MO}^{\text{entrée}} \quad \text{III-57}$$

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{CR} = \varepsilon_{CR}^{\text{entrée}} \bar{\rho}_{CR}^{\text{entrée}} \quad \text{III-58}$$

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{CI} = \varepsilon_{CI}^{\text{entrée}} \bar{\rho}_{CI}^{\text{entrée}} \quad \text{III-59}$$

Constituant « eau »

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_l = \varepsilon_l^{\text{entrée}} \bar{\rho}_l^{\text{entrée}} \quad \text{III-60}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v$

$$\text{en } x = 0, \forall y \text{ et } \forall k \neq v \quad \bar{\rho}_k = \varepsilon_g^{\text{entrée}} \bar{\rho}_k^{g,\text{entrée}} \quad \text{III-61}$$

Température

$$\text{en } x = 0, \forall y \quad \bar{T} = T_{\text{déchet}}^{\text{entrée}} \quad \text{III-62}$$

➤ **Entrée de l'agent de gazéification**

Phases solides

$$\text{en } y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{MO} \mathbf{v}_0(t) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-63}$$

$$\text{en } y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{CR} \mathbf{v}_0(t) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-64}$$

$$\text{en } y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{CI} \mathbf{v}_0(t) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{III-65}$$

Constituant « eau »

$$\text{en } y = 0, \forall x$$

$$\left( \underline{\alpha}_{lMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\alpha}_{lCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\alpha}_{lCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\alpha}_{ll} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\alpha}_{lT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\alpha}_{le} \cdot \nabla \bar{\rho}_e + \mathbf{A}_l + \bar{\rho}_l \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_v \mathbf{v}_v \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-66}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v$

$$\text{en } y = 0, \forall x \text{ et } \forall k \neq v$$

$$\left( \underline{\alpha}_{kMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\alpha}_{kCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\alpha}_{kCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\alpha}_{kl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\alpha}_{kT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\alpha}_{ke} \cdot \nabla \bar{\rho}_e + \mathbf{A}_k + \bar{\rho}_k \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_k \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-67}$$

Continuité du flux de chaleur

$$\begin{aligned}
 & \text{en } y = 0, \forall x \\
 & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{TT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_e \underline{\underline{\alpha}}_{Te} \cdot \nabla \bar{\rho}_e \right. \\
 & \quad \left. + \mathbf{A}_T + \mathbf{Z}_T \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e h_e \right) \cdot \mathbf{n}
 \end{aligned} \quad \text{III-68}$$

Dans les expressions (III-66) à (III-68) les flux  $\rho_e \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n} \quad \forall e$  sont connus.

➤ *Sortie du Syngaz*

Constituant « eau »

$$\begin{aligned}
 & \text{en } y = Ly, \forall x \\
 & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{lMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{ll} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{lT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{le} \cdot \nabla \bar{\rho}_e \right. \\
 & \quad \left. + \mathbf{A}_l + \bar{\rho}_l \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_v \mathbf{V}_v \cdot \mathbf{n}
 \end{aligned} \quad \text{III-69}$$

Espèce gazeuse a

$$\bar{\rho}_a = \varepsilon_g \frac{M_a}{RT} \left( P_0 - \sum_{e \neq a} \bar{P}_e^g \right) \quad \text{III-70}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v, a$

$$\begin{aligned}
 & \text{en } y = Ly, \forall x \text{ et } \forall k \neq a, v \\
 & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{kMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{kl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{kT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{ke} \cdot \nabla \bar{\rho}_e \right. \\
 & \quad \left. + \mathbf{A}_k + \bar{\rho}_k \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_k \mathbf{V}_k \cdot \mathbf{n}
 \end{aligned} \quad \text{III-71}$$

Continuité du flux de chaleur

$$\begin{aligned}
 & \text{en } y = Ly, \forall x \\
 & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{TT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_e \underline{\underline{\alpha}}_{Te} \cdot \nabla \bar{\rho}_e \right. \\
 & \quad \left. + \mathbf{A}_T + \mathbf{Z}_T \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e h_e \mathbf{V}_e \right) \cdot \mathbf{n} + Q_{ray}
 \end{aligned} \quad \text{III-72}$$

Dans les équations (III-69), (III-71) et (III-72) les flux  $\rho_e \mathbf{V}_e \cdot \mathbf{n} \quad \forall e$  s'expriment selon (III-30) en tenant compte de (III-28). Le flux de rayonnement est connu.

➤ *Sortie des imbrûlés*

Constituant « eau »

$$en\ y = Ly, \forall x$$

$$\left( \underline{\underline{\alpha}}_{lMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{ll} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{lT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{le} \cdot \nabla \bar{\rho}_e \right. \\ \left. + \mathbf{A}_l + \bar{\rho}_l \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{A}_l + \bar{\rho}_l \mathbf{v}_0(t)) \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-73}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v$

$$en\ y = Ly, \forall x\ et\ \forall k \neq v$$

$$\left( \underline{\underline{\alpha}}_{kMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{kl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{kT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{ke} \cdot \nabla \bar{\rho}_e \right. \\ \left. + \mathbf{A}_k + \bar{\rho}_k \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{A}_k + \bar{\rho}_k \mathbf{v}_0(t)) \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-74}$$

Continuité du flux de chaleur

$$en\ y = Ly, \forall x$$

$$\left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO} \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCI} \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl} \cdot \nabla \bar{\rho}_l + \underline{\underline{\alpha}}_{TT} \cdot \nabla \bar{T} + \sum_e \underline{\underline{\alpha}}_{Te} \cdot \nabla \bar{\rho}_e \right. \\ \left. + \mathbf{A}_T + \mathbf{Z}_T \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{A}_T + \mathbf{Z}_T \mathbf{v}_0(t)) \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-75}$$

L'ensemble des expressions des différents coefficients  $\underline{\underline{\alpha}}$ ,  $\beta$ ,  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{Z}$  intervenant dans les équations précédemment exposées est développé en ANNEXE II.

### III.2.1.c Adimensionnement

Le choix de variables de résolution fait intervenir des variables ayant des ordres de grandeur très différents. Le système d'équations avant discrétisation est mis sous forme adimensionnelle afin de pondérer le poids des différents coefficients dans le but d'augmenter la stabilité numérique du code de calcul.

La quantité adimensionnée d'un objet  $S_k$  du système est notée  $S_k^*$ , où  $S_k$  peut désigner aussi bien un opérateur, un tenseur d'ordre deux, un vecteur qu'une grandeur scalaire.

Les variables, le temps et les coordonnées de l'espace sont rendus sans dimension par les relations suivantes :

$$x^*y^*z^* = \frac{x,y,z}{L_0} \quad t^* = \frac{\alpha_{N_2N_2,0}}{L_0^2} t \quad \text{III-76}$$

$$\bar{\rho}_{MO}^* = \frac{\bar{\rho}_{MO}}{\bar{\rho}_{MO,0}} \quad \bar{\rho}_{CR}^* = \frac{\bar{\rho}_{CR}}{\bar{\rho}_{CR,0}} \quad \bar{\rho}_{CI}^* = \frac{\bar{\rho}_{CI}}{\bar{\rho}_{CI,0}} \quad \bar{\rho}_l^* = \frac{\bar{\rho}_l}{\bar{\rho}_{l,0}} \quad \bar{\rho}_e^* = \frac{\bar{\rho}_e}{\bar{\rho}_{e,0}} \quad \forall e \neq v \quad \text{III-77}$$

$$\bar{T}^* = \frac{\bar{T}}{\bar{T}_0}$$

$L_0$  étant la longueur caractéristique la plus grande du milieu poreux qui a priori est la longueur du lit de déchets.

Les constantes  $\alpha_{N_2N_2,0}$ , dont la dimension est celle des grandeurs scalaires du tenseur  $\underline{\underline{\alpha}}_{N_2N_2}$  de l'équation de conservation pour l'azote,  $\bar{\rho}_{MO,0}$ ,  $\bar{\rho}_{CR,0}$ ,  $\bar{\rho}_{CI,0}$ ,  $\bar{\rho}_{l,0}$ ,  $\bar{\rho}_{e,0} \forall e \neq v$ ,  $\bar{T}_0$  sont calculées à chaque instant de façon à assurer une valeur proche de l'unité pour les quantités sans dimension  $\bar{\rho}_{MO}^*$ ,  $\bar{\rho}_{CR}^*$ ,  $\bar{\rho}_{CI}^*$ ,  $\bar{\rho}_l^*$ ,  $\bar{\rho}_e^*$ ,  $\forall e \neq v$ ,  $\bar{T}^*$  et  $\underline{\underline{\alpha}}_{N_2N_2}^* = \frac{\underline{\underline{\alpha}}_{N_2N_2}}{\alpha_{N_2N_2,0}}$ .

Les expressions sans dimension de la dérivée en temps et de l'opérateur nabla sont directement déduites de (III-76)

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{L_0^2}{\alpha_{N_2N_2,0}} \frac{\partial}{\partial t} \quad \nabla^* = L_0 \nabla \quad \text{III-78}$$

L'introduction des relations (III-77) et (III-78) dans les équations (III-47) à (III-75) du modèle permet d'obtenir la forme adimensionnelle du système final à résoudre en multipliant ces équations par les constantes suivantes.

$$\text{équation (III-47)}^* = \text{équation (III-47)} \times \frac{L_0^2}{\bar{\rho}_{MO,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-79}$$

$$\text{équation (III-49)}^* = \text{équation (III-49)} \times \frac{L_0^2}{\bar{\rho}_{CR,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-80}$$

$$\text{équation (III-51)}^* = \text{équation (III-51)} \times \frac{L_0^2}{\bar{\rho}_{CI,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-81}$$

$$\text{équation (III-52)}^* = \text{équation (III-52)} \times \frac{L_0^2}{\bar{\rho}_{l,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-82}$$

$$\text{équation (III-54)}^* = \text{équation (III-54)} \times \frac{L_0^2}{\bar{\rho}_{e,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-83}$$

$$\text{équation (III-56)}^* = \text{équation (III-56)} \times \frac{L_0^2}{\beta_{TT,0} \bar{T}_0 \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-84}$$

Pour les conditions aux limites, on obtient alors

➤ *Entrée du déchet*

$$\text{équation (III-57)}^* = \text{équation (III-57)} \times \frac{1}{\bar{\rho}_{MO,0}} \quad \text{III-85}$$

$$\text{équation (III-58)}^* = \text{équation (III-58)} \times \frac{1}{\bar{\rho}_{CR,0}} \quad \text{III-86}$$

$$\text{équation (III-59)}^* = \text{équation (III-59)} \times \frac{1}{\bar{\rho}_{CI,0}} \quad \text{III-87}$$

$$\text{équation (III-60)}^* = \text{équation (III-60)} \times \frac{1}{\bar{\rho}_{I,0}} \quad \text{III-88}$$

$$\text{équation (III-61)}^* = \text{équation (III-61)} \times \frac{1}{\bar{\rho}_{e,0}} \quad \text{III-89}$$

$$\text{équation (III-62)}^* = \text{équation (III-62)} \times \frac{1}{\bar{T}_0} \quad \text{III-90}$$

➤ *Entrée de l'agent de gazéification*

$$\text{équation (III-63)}^* = \text{équation (III-63)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{MO,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-91}$$

$$\text{équation (III-64)}^* = \text{équation (III-64)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{CR,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-92}$$

$$\text{équation (III-65)}^* = \text{équation (III-65)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{CI,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-93}$$

$$\text{équation (III-66)}^* = \text{équation (III-66)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{I,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-94}$$

$$\text{équation (III-67)}^* = \text{équation (III-67)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{e,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-95}$$

$$\text{équation (III-68)}^* = \text{équation (III-68)} \times \frac{L_0}{\beta_{TT,0} \bar{T}_0 \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-96}$$

➤ *Sortie du Syngaz*

$$\text{équation (III-69)}^* = \text{équation (III-69)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{l,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-97}$$

$$\text{équation (III-70)}^* = \text{équation (III-70)} \times \frac{1}{\bar{\rho}_{a,0}} \quad \text{III-98}$$

$$\text{équation (III-71)}^* = \text{équation (III-71)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{e,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-99}$$

$$\text{équation (III-72)}^* = \text{équation (III-72)} \times \frac{L_0}{\beta_{TT,0} \bar{T}_0 \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-100}$$

➤ *Sortie imbrûlés*

$$\text{équation (III-73)}^* = \text{équation (III-73)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{l,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-101}$$

$$\text{équation (III-74)}^* = \text{équation (III-74)} \times \frac{L_0}{\bar{\rho}_{e,0} \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-102}$$

$$\text{équation (III-75)}^* = \text{équation (III-75)} \times \frac{L_0}{\beta_{TT,0} \bar{T}_0 \alpha_{N_2N_2,0}} \quad \text{III-103}$$

Sur les équations concernant la thermique on voit apparaître une constante  $\beta_{TT,0}$ . En effet, le choix de la température plutôt que de la variable  $\bar{\rho h}$  fait apparaître des termes d'accumulation de type (cf équation (III-56)) :

$$\beta_{TT} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \quad \text{III-104}$$

L'introduction des équations (III-77) et (III-78) donne

$$\beta_{TT} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = \beta_{TT} \frac{\bar{T}_0 \alpha_{N_2N_2,0}}{L_0^2} \frac{\partial \bar{T}^*}{\partial t^*} \quad \text{III-105}$$

On constate que rendre ce terme sans dimension impose l'introduction d'une constante  $\beta_{TT,0}$ . On obtient ainsi la constante multiplicatrice de l'équation indiquée en (III-84).

### III.2.2 Discrétisation du problème

Dans cette partie, le système d'équations est discrétisé en temps et en espace afin de passer d'un système d'équations aux dérivées partielles à un système d'équations algébriques linéaires. Le détail de l'écriture des équations discrétisées n'est pas présenté. Les choix d'une discrétisation de type différences finies pour le temps, et de type volumes finis pour l'espace, sont faits.

#### III.2.2.a Discrétisation temporelle

Comme le système d'équations choisi est un système instationnaire, afin de pouvoir observer les régimes transitoires lors d'une perturbation des conditions opératoires, il faut dans un premier temps proposer une discrétisation temporelle des équations. L'obtention d'un système d'équations algébriques linéaires à partir d'un système d'équations aux dérivées partielles à coefficients non linéaires impose un schéma semi-implicite.

On note  $S^n$  l'estimation de la quantité  $S$  à l'instant  $t=t^n$ ,  $S$  désignant une inconnue à calculer ou une fonction des inconnues à calculer.

Soit une équation type de notre système à résoudre :

$$\sum_{k=1}^{Nv} \beta_{ak} \frac{\partial U_k}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \sum_{k=1}^{Nv} \underline{\alpha}_{ak} \nabla U_k + A_a + U_a \mathbf{v}_0(t) \right) = R_a \quad \text{III-106}$$

La discrétisation temporelle, via le schéma semi-implicite choisi donne :

$$\sum_{k=1}^{Nv} \beta_{ak}^n \frac{(U_k^{n+1} - U_k^n)}{\Delta t^n} + \nabla \cdot \left( \sum_{k=1}^{Nv} \underline{\alpha}_{ak}^n \nabla U_k^{n+1} + A_a^n + U_a^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \right) = R_a^n \quad \text{III-107}$$

où  $\Delta t^n$  désigne le pas de temps entre  $t^n$  et  $t^{n+1}$ .

En appliquant (III-107) à notre système, on obtient :

#### ➤ Phases solides

$$\frac{\bar{\rho}_{MO}^{n+1} - \bar{\rho}_{MO}^n}{\Delta t^n} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{MO}^{n+1} \mathbf{v}_0(t)) = \bar{R}_{MO}^n \quad \text{III-108}$$

avec

$$\bar{R}_{MO}^n = \frac{1}{V} \int_{A_{MOg}} r_{MOg}^n dA + \frac{1}{V} \int_{A_{MOCR}} r_{MOCR}^n dA \quad \text{III-109}$$

$$\frac{\bar{\rho}_{CR}^{n+1} - \bar{\rho}_{CR}^n}{\Delta t^n} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CR}^{n+1} \mathbf{v}_0(t)) = \bar{R}_{CR}^n \quad \text{III-110}$$

avec

$$\bar{R}_{CR}^n = \frac{1}{V} \int_{A_{CRg}} r_{CRg}^n dA - \frac{1}{V} \int_{A_{CRMO}} r_{MOCR}^n dA \quad \text{III-111}$$

$$\frac{\bar{\rho}_{CI}^{n+1} - \bar{\rho}_{CI}^n}{\Delta t^n} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_{CI}^{n+1} \mathbf{v}_0(t)) = 0 \quad \text{III-112}$$

➤ **Constituant « eau » (liquide+vapeur)**

$$\begin{aligned} & \beta_{IMO}^n \frac{\bar{\rho}_{MO}^{n+1} - \bar{\rho}_{MO}^n}{\Delta t^n} + \beta_{ICR}^n \frac{\bar{\rho}_{CR}^{n+1} - \bar{\rho}_{CR}^n}{\Delta t^n} + \beta_{ICI}^n \frac{\bar{\rho}_{CI}^{n+1} - \bar{\rho}_{CI}^n}{\Delta t^n} + \\ & \beta_{ul}^n \frac{\bar{\rho}_l^{n+1} - \bar{\rho}_l^n}{\Delta t^n} + \beta_{IT}^n \frac{\bar{T}^{n+1} - \bar{T}^n}{\Delta t^n} + \sum_{e \neq v} \beta_{le}^n \frac{\bar{\rho}_e^{n+1} - \bar{\rho}_e^n}{\Delta t^n} + \\ & \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\alpha}}_{IMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{ICR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{ICI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{ul}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ & \quad \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{IT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{le}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} \right) \\ & \quad + \nabla \cdot (\mathbf{A}_l^n + \bar{\rho}_l^{n+1} \mathbf{v}_0(t)) = \bar{r}_v^n + \bar{R}_v^n \end{aligned} \quad \text{III-113}$$

avec

$$\bar{R}_v^n = \frac{1}{V} \int_{A_{gCR}} (r_{vcr_{comb}}^n + r_{vcr_{gazé}}^n) dA + \frac{1}{V} \int_{A_{gMO}} r_{vMO}^n dA \quad \text{III-114}$$

➤ **Phase gaz exceptée la vapeur**

Pour  $k \neq v$

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{\rho}_k^{n+1} - \bar{\rho}_k^n}{\Delta t^n} + \\ & \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\alpha}}_{kMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ & \quad \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{kT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{ke}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} \right) + \\ & \quad \nabla \cdot (\mathbf{A}_k^n + \bar{\rho}_k^{n+1} \mathbf{v}_0(t)) = \bar{r}_k^n + \bar{R}_k^n \end{aligned} \quad \text{III-115}$$

➤ **Bilan énergétique**

$$\begin{aligned}
 & \beta_{TMO}^n \frac{\bar{\rho}_{MO}^{n+1} - \bar{\rho}_{MO}^n}{\Delta t^n} + \beta_{TCR}^n \frac{\bar{\rho}_{CR}^{n+1} - \bar{\rho}_{CR}^n}{\Delta t^n} + \beta_{TCI}^n \frac{\bar{\rho}_{CI}^{n+1} - \bar{\rho}_{CI}^n}{\Delta t^n} + \\
 & \beta_{Tl}^n \frac{\bar{\rho}_l^{n+1} - \bar{\rho}_l^n}{\Delta t^n} + \beta_{TT}^n \frac{\bar{T}^{n+1} - \bar{T}^n}{\Delta t^n} + \sum_{e \neq v} \beta_{Te}^n \frac{\bar{\rho}_e^{n+1} - \bar{\rho}_e^n}{\Delta t^n} + \\
 & \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\
 & \quad \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{TT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{Te}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} \right) + \nabla \cdot (\mathbf{A}_T^n + \bar{Z}_T^n \mathbf{v}_0(t)) \\
 & = \bar{\varphi}_T^n
 \end{aligned} \tag{III-116}$$

La discrétisation temporelle des conditions aux limites aboutit à :

➤ **Entrée du déchet**

Phases solides

$$en\ x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{MO}^{n+1} = \varepsilon_{MO}^{entrée^{n+1}} \bar{\rho}_{MO}^{n+1} \tag{III-117}$$

$$en\ x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{CR}^{n+1} = \varepsilon_{CR}^{entrée^{n+1}} \bar{\rho}_{CR}^{n+1} \tag{III-118}$$

$$en\ x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_{CI}^{n+1} = \varepsilon_{CI}^{entrée^{n+1}} \bar{\rho}_{CI}^{n+1} \tag{III-119}$$

Constituant « eau »

$$en\ x = 0, \forall y \quad \bar{\rho}_l^{n+1} = \varepsilon_l^{entrée^{n+1}} \bar{\rho}_l^{n+1} \tag{III-120}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v$

$$en\ x = 0, \forall y\ et\ \forall k \neq v \quad \bar{\rho}_k^{n+1} = \varepsilon_g^{entrée^{n+1}} \bar{\rho}_k^{g,entrée^{n+1}} \tag{III-121}$$

Température

$$en\ x = 0, \forall y \quad \bar{T}^{n+1} = T_{déchet}^{entrée^{n+1}} \tag{III-122}$$

➤ **Entrée de l'agent de gazéification**

Phases solides

$$en\ y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{MO}^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \cdot \mathbf{n} = 0 \tag{III-123}$$

$$en\ y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{CR}^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \cdot \mathbf{n} = 0 \tag{III-124}$$

$$en\ y = 0, \forall x \quad \bar{\rho}_{CI}^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \cdot \mathbf{n} = 0 \tag{III-125}$$

Constituant « eau »

$$en\ y = 0, \forall x$$

$$\begin{aligned} & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{lMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{Cl}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{ll}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{lT}^n \right. \\ & \quad \left. \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{le}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_l^n + \bar{\rho}_l^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} \\ & = \rho_v^{n+1} \mathbf{v}_v^{n+1} \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad \text{III-126}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v$

$$en\ y = 0, \forall x\ et\ \forall k \neq v$$

$$\begin{aligned} & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{kMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{Cl}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ & \quad \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{kT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{ke}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_k^n + \bar{\rho}_k^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_k^{n+1} \mathbf{v}_k^{n+1} \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad \text{III-127}$$

La continuité du flux de chaleur

$$en\ y = 0, \forall x$$

$$\begin{aligned} & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{Cl}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ & \quad \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{TT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_e \underline{\underline{\alpha}}_{Te}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_T^n + \mathbf{Z}_T^n \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e \mathbf{v}_e h_e \right)^{n+1} \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad \text{III-128}$$

➤ *Sortie du Syngaz*

Constituant « eau »

$$en\ y = Ly, \forall x$$

$$\begin{aligned} & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{lMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{Cl}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{ll}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ & \quad \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{lT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{le}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_l^n + \bar{\rho}_l^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_v^n \mathbf{V}_g^n \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad \text{III-129}$$

Espèce gazeuse a

$$\bar{\rho}_a^{n+1} = \varepsilon_g^n \frac{M_a}{RT^n} \left( P_0 - \sum_{e \neq a} \bar{P}_e^{g^{n+1}} \right) \quad \text{III-130}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v, a$

$$\text{en } y = Ly, \forall x \text{ et } \forall k \neq a, v$$

$$\left( \underline{\underline{\alpha}}_{kMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{kT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{ke}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_k^n + \bar{\rho}_k^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} = \rho_k^{n+1} \mathbf{V}_g^n \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-131}$$

La continuité du flux de chaleur

$$\text{en } y = Ly, \forall x$$

$$\left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{TT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{\substack{e \neq v \\ Ne}} \underline{\underline{\alpha}}_{Te}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_T^n + \mathbf{Z}_T^n \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} \\ = \left( \sum_{e=1}^{Ne} \rho_e^n h_e^{n+1} \mathbf{V}_g^n \right) \cdot \mathbf{n} + Q_{ray}^{n+1} \quad \text{III-132}$$

avec  $\mathbf{V}_g$  donnée par (III-28)

➤ *Sortie des imbrûlés*

Constituant « eau »

$$\text{en } y = Ly, \forall x$$

$$\left( \underline{\underline{\alpha}}_{lMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{lCI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{ll}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{lT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{le}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_l^n + \bar{\rho}_l^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} \\ = (\mathbf{A}_l^n + \bar{\rho}_l^{n+1} \mathbf{v}_0(t)) \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-133}$$

Espèces gazeuses  $k \neq v$

$$\text{en } y = Ly, \forall x \text{ et } \forall k \neq v$$

$$\left( \underline{\underline{\alpha}}_{kMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kCI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{kl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{kT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_{e \neq v} \underline{\underline{\alpha}}_{ke}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_k^n + \bar{\rho}_k^{n+1} \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} \\ = (\mathbf{A}_k^n + \bar{\rho}_k^{n+1} \mathbf{v}_0(t)) \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-134}$$

La continuité du flux de chaleur

$$\text{en } y = Ly, \forall x$$

$$\begin{aligned} & \left( \underline{\underline{\alpha}}_{TMO}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{MO}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCR}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CR}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{TCI}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_{CI}^{n+1} + \underline{\underline{\alpha}}_{Tl}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_l^{n+1} \right. \\ & \left. + \underline{\underline{\alpha}}_{TT}^n \cdot \nabla \bar{T}^{n+1} + \sum_e \underline{\underline{\alpha}}_{Te}^n \cdot \nabla \bar{\rho}_e^{n+1} + \mathbf{A}_T^n + \mathbf{Z}_T^n \mathbf{v}_0(t) \right) \cdot \mathbf{n} \\ & = (\mathbf{A}_T^n + \mathbf{Z}_T^n \mathbf{v}_0(t)) \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad \text{III-135}$$

### III.2.2.b Discrétisation spatiale

Une première version du code de calcul a été réalisée à partir d'une discrétisation spatiale par éléments finis. Cette méthode était initialement choisie dans la perspective future de la prise en compte du retrait du lit de déchets au cours de sa gazéification. Au regard des dimensions industrielles et de l'intensité des transferts, le nombre de mailles nécessaire impliquait un temps de calcul trop important. La seconde version, celle présentée ici, s'appuie sur une discrétisation par volumes finis. Nécessitant moins de mailles, elle s'est avérée moins couteuse en temps CPU. Cette technique, très classique, n'est pas détaillée. L'essentiel de la méthode est par exemple expliqué dans Pantankar, [1980]. Soulignons simplement qu'à chaque point de discrétisation (ou nœud) est associé un volume (ou maille) le contenant. Les équations (III-107) issues de la discrétisation en temps sont intégrées sur ce volume. L'application de la formule de la divergence fait apparaître les flux aux surfaces, précisément les termes sous la divergence des  $Nv$  équations (III-107) :

$$a = 1, Nv \left( \underbrace{\sum_{k=1}^{Nv} \underline{\underline{\alpha}}_{ak}^n \cdot \nabla U_k^{n+1}}_{\text{Diffusion Mathématique}} + \underbrace{\mathbf{A}_a^n + U_a^{n+1} \bar{\mathbf{v}}_s^s}_{\text{Convection Mathématique}} \right) \cdot \mathbf{n} \quad \text{III-136}$$

Pour un volume interne, i.e. sans surface coïncidente avec la surface du milieu, les gradients aux surfaces des termes de type de diffusif au sens mathématique sont estimés par différences finies centrées. Les coefficients devant ces gradients sont évalués par une simple moyenne des valeurs aux nœuds de part et d'autre de la surface considérée. Enfin, un schéma « upwind » ou « amont » sur les termes convectifs au sens mathématique est classiquement retenu pour une meilleure stabilité numérique.

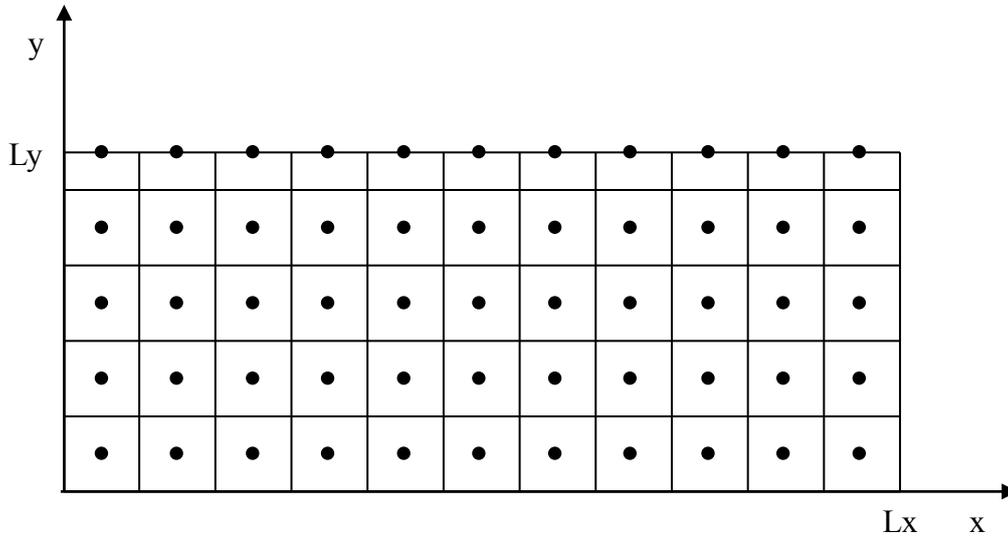


Figure 40 : Maillage du lit de déchets assimilé à un milieu poreux rectangulaire

Comme l'illustre la Figure 40, le traitement des conditions aux limites à la sortie du Syngaz nous a incités à positionner les points de discrétisation sur la surface du lit poreux. La dimension du volume d'intégration selon  $y$  est divisée par deux et sa surface supérieure, confondue avec la surface du milieu, contient le point d'estimation. L'explication de ce choix implique un retour sur la prise en compte des conditions aux limites en volumes finis. Considérons le cas classique d'un volume centré sur le point de discrétisation  $i$  schématisé sur la Figure 41a. La méthode fait apparaître la valeur des flux (III-136) à la surface  $y=Ly$ . Dans le cas du système d'EDP couplées similaire à celui considéré dans ce travail, trois cas doivent être distingués.

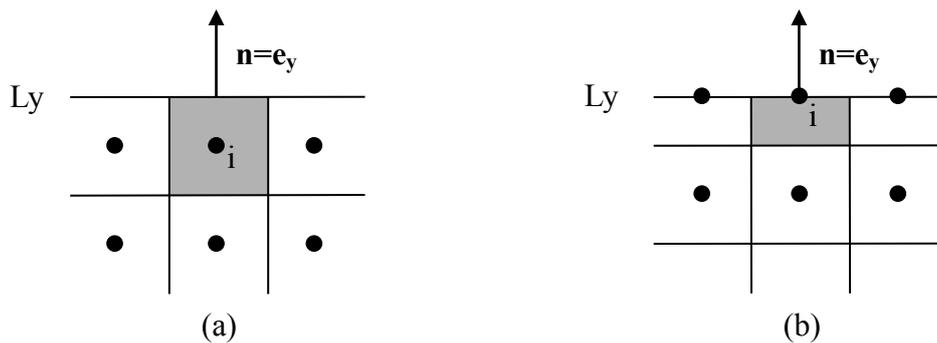


Figure 41 : Point de discrétisation et maille à la sortie du Syngaz  
 (a) point de discrétisation interne, (b) point de discrétisation à la surface

**Cas 1 : l'ensemble des flux est imposé (conditions de Neumann).**

$$a = 1, Nv \quad \left( \sum_{k=1}^{Nv} \underline{\underline{\alpha}}_{ak}^n \cdot \nabla U_k^{n+1} + \mathbf{A}_a^n + U_a^{n+1} \bar{\mathbf{v}}_s^s \right) \cdot \mathbf{n} = F_a^n \quad \text{III-137}$$

Ce cas est le plus simple puisqu'il suffit de remplacer les flux (III-136) à la surface  $y=Ly$  par leurs valeurs connues  $F_a^n$ . Il s'agit par exemple du jeu de conditions à l'entrée de l'air de gazéification.

**Cas 2 : l'ensemble des valeurs des inconnues est imposé (conditions de Dirichlet).**

$$a = 1, Nv \quad U_a^{n+1} = U_{La} \quad \text{III-138}$$

Les gradients des inconnues sont estimés par différences finies. Dans le cas de la Figure 41a où la normale sortante du volume  $\mathbf{n}$  est le vecteur de base  $\mathbf{e}_y$ , il vient :

$$a = 1, Nv, k = 1, Nv \quad \left( \underline{\underline{\alpha}}_{ak}^n \cdot \nabla U_k^{n+1} \right) \cdot \mathbf{n} = 2\alpha_{akyyi}^n \frac{U_{Lk} - U_{ki}^{n+1}}{\Delta y} \quad \text{III-139}$$

Dans cette relation,  $\alpha_{akyyi}^n$  désigne la valeur au nœud  $i$  du coefficient  $yy$  du tenseur  $\underline{\underline{\alpha}}_{ak}^n$  supposé diagonal et  $U_k^{n+1}$  la valeur de l'inconnue  $U_k$  au nœud  $i$ . Les flux (III-136) s'expriment alors à la surface  $y=Ly$  par:

$$a = 1, Nv \quad \left( \sum_{k=1}^{Nv} \underline{\underline{\alpha}}_{ak}^n \cdot \nabla U_k^{n+1} + \mathbf{A}_a^n + U_a^{n+1} \bar{\mathbf{v}}_s^s \right) \cdot \mathbf{n} = \quad \text{III-140}$$

$$2\alpha_{akyyi}^n \frac{U_{Lk} - U_{ki}^{n+1}}{\Delta y} + (\mathbf{A}_{ai}^n + U_{La} \bar{\mathbf{v}}_s^s) \cdot \mathbf{n}$$

Le terme  $\mathbf{A}_{ai}^n$  est la valeur du vecteur  $\mathbf{A}_a^n$  au nœud  $i$ . Cette méthode est utilisée à l'entrée du déchet.

**Cas 3 : Nf flux sont imposés, (Nv-Nf) valeurs des inconnues sont imposées.**

$$a = 1, Nf \quad \left( \sum_{k=1}^{Nv} \underline{\underline{\alpha}}_{ak}^n \cdot \nabla U_k^{n+1} + \mathbf{A}_a^n + U_a^{n+1} \bar{\mathbf{v}}_s^s \right) \cdot \mathbf{n} = F_a^n \quad \text{III-141}$$

$$a = Nf + 1, Nv \quad U_a^{n+1} = U_{La} \quad \text{III-142}$$

Les Nf flux (III-136) associés aux conditions (III-141) sont directement remplacés par leurs valeurs  $F_a^n$ . Toute la difficulté réside dans l'estimation des flux (III-136) pour  $a=Nf+1, Nv$ . Deux étapes sont nécessaires. Dans un premier temps, comme pour le cas 2, les gradients des inconnues gérées par une condition de Dirichlet sont approchés par différences finies.

$$k = Nf + 1, Nv \quad \nabla U_k^{n+1} \cdot \mathbf{n} = 2 \frac{U_{Lk} - U_{ki}^{n+1}}{\Delta y} \quad \text{III-143}$$

Dans un second temps, ces approximations sont reportées dans les Nf équations (III-141). On obtient, toujours dans le cas illustré par la Figure 41a, et en tenant compte de  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_y$  :

$$\begin{aligned}
 & a = 1, Nf \quad \sum_{k=1}^{Nf} \alpha_{akyyi}^n (\nabla U_k^{n+1} \cdot \mathbf{n}) = \\
 F_a^n - \sum_{k=Nf+1}^{Nv} 2\alpha_{akyyi}^n \frac{U_{Lk} - U_{ki}^{n+1}}{\Delta y} + (A_a^n + U_a^{n+1} \bar{\mathbf{v}}_s^s) \cdot \mathbf{n}
 \end{aligned}
 \tag{III-144}$$

Le système de Nf équations (III-144) est ensuite résolu pour exprimer les Nf termes  $(\nabla U_k^{n+1} \cdot \mathbf{n})$ ,  $k=1, Nf$ . Si le nombre d'équations est faible (2 par exemple) l'inversion peut être formelle. Sinon, elle doit être numérique. Dans cette optique, les termes implicites du second membre doivent devenir explicites :

$$\begin{aligned}
 & a = 1, Nf \quad \sum_{k=1}^{Nf} \alpha_{akyyi}^n (\nabla U_k^{n+1} \cdot \mathbf{n}) = \\
 F_a^n - \sum_{k=Nf+1}^{Nv} 2\alpha_{akyyi}^n \frac{U_{Lk} - U_{ki}^n}{\Delta y} + (A_a^n + U_a^n \bar{\mathbf{v}}_s^s) \cdot \mathbf{n}
 \end{aligned}
 \tag{III-145}$$

Notons les solutions des systèmes (III-144) ou (III-145) :

$$a = 1, Nf \quad \nabla U_k^{n+1} \cdot \mathbf{n} = (\nabla U_k^{n+1} \cdot \mathbf{n})_L
 \tag{III-146}$$

Les flux (III-136) pour  $a=Nf+1, Nv$  sont alors donnés à la surface  $y=L_y$  par:

$$\begin{aligned}
 & a = Nf + 1, Nv \quad \left( \sum_{k=1}^{Nv} \underline{\alpha}_{ak}^n \cdot \nabla U_k^{n+1} + A_a^n + U_a^{n+1} \bar{\mathbf{v}}_s^s \right) \cdot \mathbf{n} = \\
 \sum_{k=1}^{Nf} \alpha_{akyyi}^n (\nabla U_k^{n+1} \cdot \mathbf{n})_L + \sum_{k=Nf+1}^{Nv} 2\alpha_{akyyi}^n \frac{U_{Lk} - U_{ki}^n}{\Delta y} + (A_{ai}^n + U_{La} \bar{\mathbf{v}}_s^s) \cdot \mathbf{n}
 \end{aligned}
 \tag{III-147}$$

En résumé, si les conditions à la surface  $y = L_y$  sont un mélange de conditions de Dirichlet et de Neumann, une maille « pleine » telle qu'elle est représentée sur la Figure 41a impose un traitement qui peut s'avérer lourd pour aboutir aux expressions (III-141) et (III-147).

Le jeu de conditions à la sortie du Syngaz présenté au paragraphe (III.1.2.c) place cette limite dans le cas 3 (une condition de Dirichlet, des conditions de Neumann). Nous avons en outre évoqué la perspective du couplage avec un code de CFD pour un traitement plus rigoureux des conditions à cette limite. Le souci de simplifier la technique d'imposition des CL, avec notamment la possibilité de basculer facilement d'une condition de type valeur imposée à une condition de type flux imposé, nous a amené à positionner les points de discrétisation sur la surface comme le montre la Figure 40 et la Figure 41b.

L'intégration des équations sur les mailles de surface est alors effectuée en considérant uniquement

des conditions de flux imposé. Le flux à la surface  $y=Ly$  est directement explicité selon la relation (III-137). Si une ou plusieurs de ces conditions de Neumann est, ou sont, remplacées par une ou plusieurs conditions de Dirichlet de type (III-138), ces conditions sont imposées par une classique méthode de pénalisation.

Considérons le nœud  $i$ . La méthode consiste à remplacer le coefficient diagonal  $(i,i)$  de la matrice du système linéaire à résoudre après discrétisation en temps et en espace par une très grande valeur notée  $gv$ . Le terme correspondant du second membre est remplacée par  $gvU_{La}$  où  $U_{La}$  est la valeur à imposer au nœud  $i$ . Lors de la résolution, la division par  $gv$  rendra tous les coefficients de la ligne matricielle négligeables excepté le second membre qui prendra la valeur  $U_{La}$ .

La discrétisation en espace du système discrétisé en temps (III-107) aboutit finalement au système matriciel

$$a = 1, Nv \sum_{k=1}^{Nv} [\Lambda_{ak}^n + \Psi_{ak}^n] \mathbf{U}_k^{n+1} = \sum_{k=1}^{Nv} [\Lambda_{ak}^n] \mathbf{U}_k^n + \mathbf{B}_a^n \quad \text{III-148}$$

où les termes entre crochets  $[\ ]$  désignent des matrices de dimension  $NN \times NN$ ,  $NN$  étant le nombre total de nœud de discrétisation. Les variables indépendantes  $\mathbf{U}_k$  sont en gras pour préciser que ce sont des vecteurs de dimension  $NN$ .

$$\mathbf{U}_k = \begin{pmatrix} U_{k1} \\ \vdots \\ U_{ki} \\ \vdots \\ U_{kNN} \end{pmatrix} \text{ où } U_{ki} \quad i = 1, NN \text{ désigne la valeur de } U_k \text{ au nœud } i$$

Les matrices  $[\Lambda_{ak}^n]$  proviennent des termes initiaux en  $\frac{\partial}{\partial t}$  des équations (III-107) et les matrices  $[\Psi_{ak}^n]$  sont issues essentiellement du traitement des termes sous la divergence, mais aussi de la partie implicite de certaines conditions aux limites. Le vecteur second membre  $\mathbf{B}_a$  prend en compte la partie explicite des conditions limites de type Neumann ainsi que les termes de droite de l'équation (III-107).

A ce stade le système peut être résolu par des méthodes de résolution adaptées aux systèmes d'équations algébriques linéaires.

### III.2.3 Méthode et optimisations numériques

Dans cette partie, la méthode de résolution du système linéaire ainsi que quelques arrangements numériques implémentés dans le but d'améliorer la rapidité et la stabilité du code de calcul sont explicités.

**III.2.3.a Méthode de résolution**

Le système linéaire de taille  $Nv$  (nombre de variables indépendantes) x  $NN$  (nombre de nœuds du maillage) (III-148) a une structure par bloc schématisé Figure 42. Chaque ligne de bloc correspond à la discrétisation d'une EDP. Afin d'améliorer la lisibilité de la Figure 42, les constituants gaz notés  $e$  ont été mis sous une forme générale sur une seule ligne mais correspondent aux  $Ne-1$  espèces gazeuses autres que la vapeur d'eau. Le couplage entre les équations est représenté par les blocs extradiagonaux.

	NN	2NN	3NN	4NN	5NN	(5+Ne-1)NN			
NN	$\Lambda_{MOMO}^n + \Psi_{MOMO}^n$	$\Psi_{MOCR}^n$	$\Psi_{MOCI}^n$	$\Psi_{MOI}^n$	$\Psi_{MOT}^n$	$\Psi_{MOe}^n$	$\bar{\rho}_{MO}^{n+1}$	$B_{MO}^n$	
2NN	$\Psi_{CRMO}^n$	$\Lambda_{CRCR}^n + \Psi_{CRCR}^n$	$\Psi_{CRCI}^n$	$\Psi_{CRI}^n$	$\Psi_{CRT}^n$	$\Psi_{CRe}^n$	$\bar{\rho}_{CR}^{n+1}$	$B_{CR}^n$	
3NN	$\Psi_{CIMO}^n$	$\Psi_{CICR}^n$	$\Lambda_{CICI}^n + \Psi_{CICI}^n$	$\Psi_{CII}^n$	$\Psi_{CIT}^n$	$\Psi_{CIE}^n$	$\bar{\rho}_{CI}^{n+1}$	$B_{CI}^n$	
4NN	$\Psi_{IMO}^n$	$\Psi_{ICR}^n$	$\Psi_{ICI}^n$	$\Lambda_u^n + \Psi_u^n$	$\Psi_{IT}^n$	$\Psi_{Ie}^n$	$\bar{\rho}_I^{n+1}$	$B_I^n$	
5NN	$\Psi_{TMO}^n$	$\Psi_{TCR}^n$	$\Psi_{TCI}^n$	$\Psi_{TI}^n$	$\Lambda_{TT}^n + \Psi_{TT}^n$	$\Psi_{Te}^n$	$\bar{T}^{n+1}$	$B_T^n$	
(5+Ne-1)NN	$\Psi_{eMO}^n$	$\Psi_{eCR}^n$	$\Psi_{eCI}^n$	$\Psi_{eI}^n$	$\Psi_{eT}^n$	$\Lambda_{ee}^n + \Psi_{ee}^n$	$\bar{\rho}_e^{n+1}$	$B_e^n$	
	$[A^n]$						$X^{n+1}$	$=$	$B^n$

**Figure 42 : Structure matricielle par bloc du système**

Pour la résolution, une méthode de type Gauss Seidel par bloc est choisie. Cette méthode permet de prendre en compte aux mieux le fort couplage qui existe entre les équations de conservation par une résolution simultanée plutôt que séquentielle (Couture, 1995 ; Porras, 2005).

Cette méthode est décrite ci-dessous.

Tout d'abord notons  $\mathbf{U}_k^{it}$  la valeur d'un vecteur d'une des  $N_v$  variables de résolution à la  $it^{ième}$  itération.

- On initialise la méthode avec la solution de l'itération en temps précédent

$$\bar{\rho}_{MO}^0 = \bar{\rho}_{MO}^n, \bar{\rho}_{CR}^0 = \bar{\rho}_{CR}^n, \bar{\rho}_{CI}^0 = \bar{\rho}_{CI}^n, \bar{\rho}_l^0 = \bar{\rho}_l^n, \bar{\rho}_e^0 = \bar{\rho}_e^n \quad \forall e \neq v \text{ et } \bar{T}^0 = \bar{T}^n$$

- Le processus itératif est le suivant :

- Traitement du caractère implicite des conditions aux limites de Dirichlet en calculant  $\mathbf{U}_{Lki}^{it+1} = U_{Lki}(\mathbf{U}_{k,i}^{it})$  pour tout nœud  $i$  à la surface concernée.

$\mathbf{U}_{Lki}$  désigne la valeur de la condition limite de l'inconnue  $\mathbf{U}_k$  au nœud  $i$ .

- Résolutions successives des systèmes (NNxNN) à l'aide d'une méthode LU (Nougier, 1991)

$$\begin{aligned} & [\Lambda_{MOMO}^n + \Psi_{MOMO}^n] \bar{\rho}_{MO}^{it+1} \\ &= -[\Psi_{MOCR}^n] \bar{\rho}_{CR}^{it} - [\Psi_{MOCI}^n] \bar{\rho}_{CI}^{it} - [\Psi_{MOl}^n] \bar{\rho}_l^{it} - [\Psi_{MOT}^n] \bar{T}^{it} \\ & - \sum_{e=1}^{Ne-1} [\Psi_{MOe}^n] \bar{\rho}_e^{it} + \mathbf{B}_{MO}^n \end{aligned} \quad \text{III-149}$$

$$\begin{aligned} & [\Lambda_{CRCR}^n + \Psi_{CRCR}^n] \bar{\rho}_{CR}^{it+1} \\ &= -[\Psi_{CRMO}^n] \bar{\rho}_{MO}^{it+1} - [\Psi_{CRCI}^n] \bar{\rho}_{CI}^{it} - [\Psi_{CRl}^n] \bar{\rho}_l^{it} - [\Psi_{CRT}^n] \bar{T}^{it} \\ & - \sum_{e=1}^{Ne-1} [\Psi_{CRE}^n] \bar{\rho}_e^{it} + \mathbf{B}_{CR}^n \end{aligned} \quad \text{III-150}$$

$$\begin{aligned} & [\Lambda_{CICI}^n + \Psi_{CICI}^n] \bar{\rho}_{CI}^{it+1} \\ &= -[\Psi_{CIMO}^n] \bar{\rho}_{MO}^{it+1} - [\Psi_{CICR}^n] \bar{\rho}_{CR}^{it+1} - [\Psi_{CIl}^n] \bar{\rho}_l^{it} - [\Psi_{CIT}^n] \bar{T}^{it} \\ & - \sum_{e=1}^{Ne-1} [\Psi_{CIE}^n] \bar{\rho}_e^{it} + \mathbf{B}_{CI}^n \end{aligned} \quad \text{III-151}$$

$$\begin{aligned} & [\Lambda_U^n + \Psi_U^n] \bar{\rho}_l^{it+1} \\ &= -[\Psi_{lMO}^n] \bar{\rho}_{MO}^{it+1} - [\Psi_{lCR}^n] \bar{\rho}_{CR}^{it+1} - [\Psi_{lCI}^n] \bar{\rho}_{CI}^{it+1} - [\Psi_{lT}^n] \bar{T}^{it} \\ & - \sum_{e=1}^{Ne-1} [\Psi_{le}^n] \bar{\rho}_e^{it} + \mathbf{B}_l^n \end{aligned} \quad \text{III-152}$$

$$\begin{aligned} & [\Lambda_{TT}^n + \Psi_{TT}^n] \bar{T}^{it+1} \\ &= -[\Psi_{TMO}^n] \bar{\rho}_{MO}^{it+1} - [\Psi_{TCR}^n] \bar{\rho}_{CR}^{it+1} - [\Psi_{TCI}^n] \bar{\rho}_{CI}^{it+1} \\ & - [\Psi_{Ul}^n] \bar{\rho}_l^{it+1} - \sum_{e=1}^{Ne-1} [\Psi_{Te}^n] \bar{\rho}_e^{it} + \mathbf{B}_T^n \end{aligned} \quad \text{III-153}$$

$$\text{Pour } e=1, \dots, Ne-1 \quad \text{III-154}$$

$$\begin{aligned}
 & [\Lambda_{ee}^n + \Psi_{ee}^n] \bar{\rho}_e^{it+1} \\
 & = -[\Psi_{eMO}^n] \bar{\rho}_{MO}^{it+1} - [\Psi_{eCR}^n] \bar{\rho}_{CR}^{it+1} - [\Psi_{eCl}^n] \bar{\rho}_{Cl}^{it+1} \\
 & \quad - [\Psi_{el}^n] \bar{\rho}_l^{it+1} - [\Psi_{eT}^n] \bar{T}^{it+1} - \sum_{k=1}^{e-1} [\Psi_{ek}^n] \bar{\rho}_k^{it+1} - \sum_{k=e+1}^{Ne-1} [\Psi_{ek}^n] \bar{\rho}_k^{it} \\
 & \quad + \mathbf{B}_e^n
 \end{aligned}$$

- Le champ de valeur au temps n+1 est obtenu si le test de convergence suivant est réalisé

$$\text{si } \max_{U_k^{it} = \bar{\rho}_{MO}, \bar{\rho}_{CR}, \bar{\rho}_{Cl}, \bar{\rho}_l, \bar{\rho}_e \forall e \neq v, \bar{T}} \left[ \max_{i=1, NN} \left[ \frac{|U_{k,i}^{it+1} - U_{k,i}^{it}|}{U_{k,i}^{it}} \right] \right] < \xi \ll 1 \text{ est satisfait.}$$

$$U_{k,i}^{n+1} = U_{k,i}^{it+1} \quad k = 1, Nv$$

### III.2.3.b Gestion du pas de temps

Considérer un pas de temps  $\Delta t$  constant oblige à adopter un pas de temps très petit. En effet, il existe des périodes de fort couplage entre les équations, notamment lors de l'enclenchement des réactions de gazéification et des réactions homogènes en phase gaz. Durant ces périodes, les blocs extra diagonaux du système matriciel (III-148), issus du couplage, prennent de l'importance par rapport aux blocs diagonaux. Consécutivement, le conditionnement du système, globalement proportionnel à la dominance de la diagonale, se dégrade. La convergence de la méthode itérative de résolution Gauss Seidel par blocs nécessite plus d'itérations, voire n'est plus assurée. La solution passe alors par un choix de pas de temps plus petit. Ainsi, l'influence des termes des blocs extra diagonaux et des extra diagonales des blocs diagonaux, proportionnels au pas, diminue. La diagonale, indépendante de  $\Delta t$ , et consécutivement le conditionnement sont renforcés.

Dans ce contexte, conduire la simulation à  $\Delta t$  constant se révèle trop couteux en temps CPU. Un algorithme à pas variable est donc implanté. Le principe de la méthode, déjà mise en œuvre ailleurs (Couture 1995, Porras 2005), est le suivant : à chaque instant, le pas de temps est ajusté au mieux (le plus grand possible) afin que le conditionnement du système soit suffisant pour que la convergence soit assurée en un nombre fixé d'itérations. Concrètement, la procédure décrite ci-dessous est mise en place.

On note  $Nbiter_{max}$  le nombre d'itérations limites pour la méthode de résolution. On se place au  $n^{ième}$  incrément en temps tel que  $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$  avec la stratégie suivante pour le choix du pas temps au cours de la simulation :

- Si au bout de  $Nbiter_{max}$  la convergence n'est toujours pas obtenue alors :

### CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe

- la simulation est stoppée,
- la simulation est reprise à l'instant précédent  $t^n$  avec  $\Delta t^n = \frac{\Delta t^n}{2}$
- Si au bout  $Nbiter$  itérations avec  $Nbiter < Nbiter_{max}$  la convergence est obtenue,
  - un facteur ( $Nbiter$ ) , compris entre 0.5 et 2 et inversement proportionnel à  $Nbiter$  est calculé.

Si  $\gamma(Nbiter) < 1$

Le  $n^{i\text{ème}}$  incrément en temps est annulé,

la simulation est reprise à l'instant  $t^n$  avec  $\Delta t^n = \gamma(Nbiter)\Delta t^n$

Sinon

$$\Delta t^{n+1} = \gamma(Nbiter)\Delta t^n$$

Ce calcul n'est effectué que si le pas de temps n'a pas évolué au cours des 50 incréments en temps précédents.

La Figure 43 présente l'évolution de  $\gamma(Nbiter)$  tout en résumant la procédure mise en place pour gérer le pas de temps.

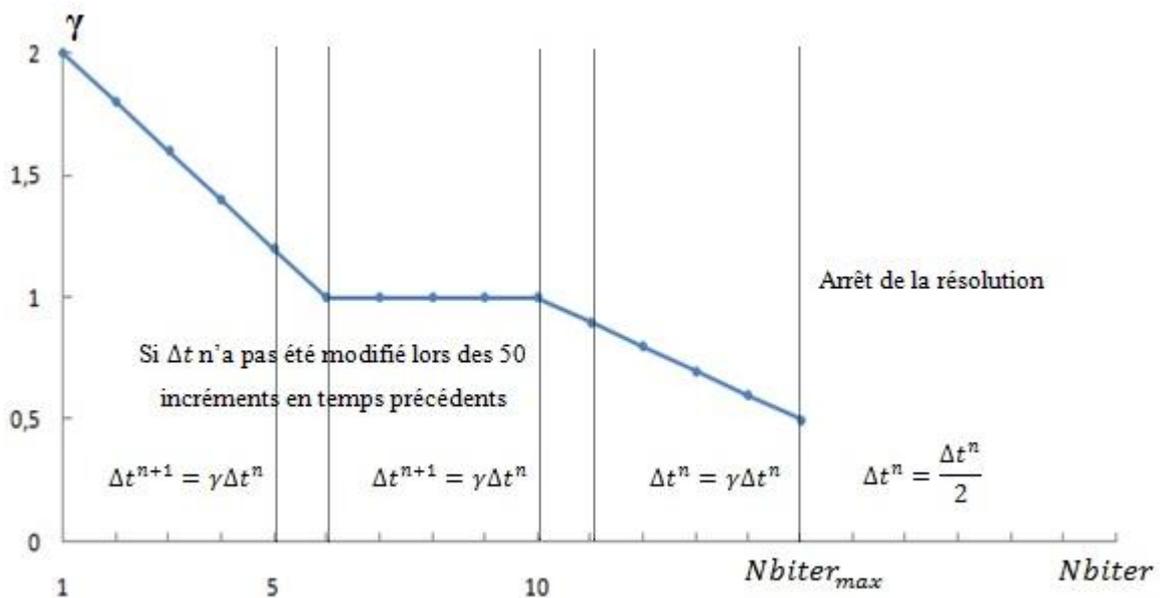


Figure 43 : Schéma de la gestion du pas de temps (Couture, 1995)

Cette méthode présente les avantages suivants :

- aucun calcul supplémentaire lors de la mise en œuvre de la méthode,

- limitation du nombre d'itérations inutiles à  $N_{biter_{max}}$  lors de divergence,
- la méthode prévient tout risque de convergence vers une solution aberrante en garantissant un résultat obtenu avant 10 itérations pour un pas de temps.

### III.2.3.c Gestion de la disparition des espèces

Au cours du processus de gazéification, les espèces gazeuses prises en compte dans le modèle peuvent être amenées à disparaître. Cette disparition est imputable aux réactions homogènes et hétérogènes caractérisant la gazéification. Néanmoins, une espèce peut disparaître localement à un instant  $t$  puis réapparaître plus tard du fait de la diffusion, de la convection ou encore de la production par réaction chimique de cette espèce. Numériquement, cela impose de pouvoir assurer au point de discrétisation une valeur positive et proche du zéro numérique de la moyenne de la masse volumique de l'espèce lors de sa disparition afin d'éviter toutes aberrations physiques. Cette valeur ne doit en aucun cas être fixée définitivement puisqu'elle doit pouvoir évoluer au cours de la simulation. Pour ce faire, le choix d'une technique de pénalisation lorsque la moyenne de la masse volumique de l'espèce atteint une valeur limite  $\bar{\rho}_{e,test}$  avec possibilité de reprise en l'espèce est choisie.

La stratégie de cette méthode est donnée en suivant (Figure 44).

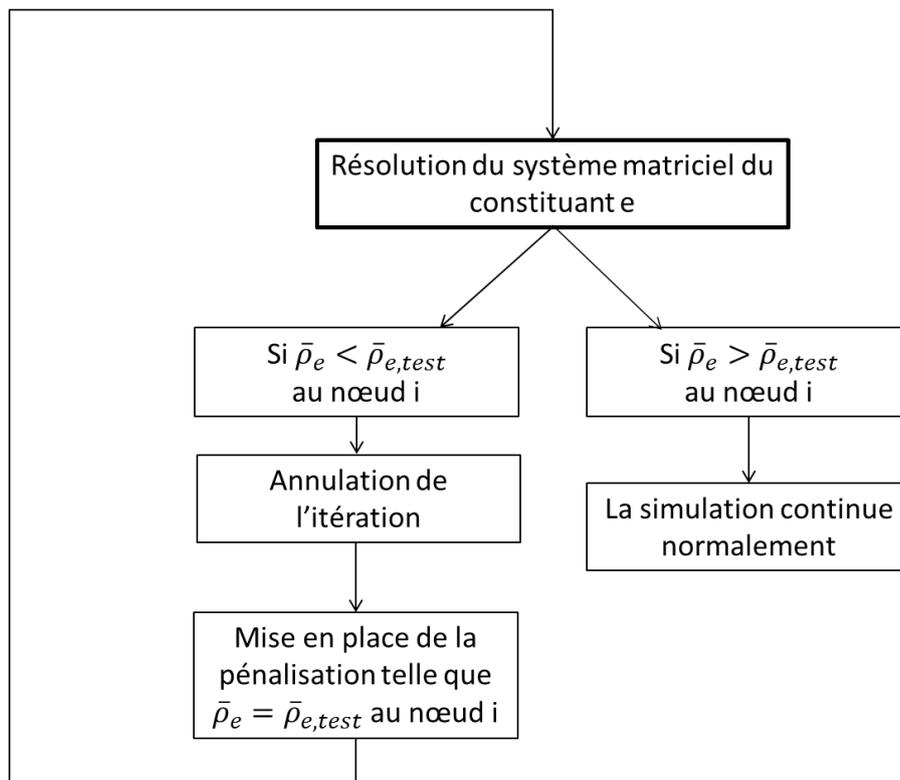


Figure 44 : Méthode de pénalisation pour la disparition locale d'une espèce

### ***III.3 Simulation du procédé CHO-Power***

#### **III.3.1 Paramètres de simulation**

##### ***III.3.1.a Phases et constituants pris en compte***

Dans un premier temps, le choix de ne pas prendre en compte l'eau liquide et donc de partir d'un déchet déjà sec a été effectué. Ce choix permet de s'affranchir de l'étape de séchage et donc de diminuer le temps de calcul. Lors de cette étape se pose le problème de l'estimation de la pression de vapeur via l'équilibre thermodynamique local avec des niveaux de température supérieurs aux limites de validité des corrélations permettant de calculer la pression de vapeur saturante de l'eau pure, c'est-à-dire, supérieurs à sa température critique. De plus, ces mêmes niveaux de température impliquent une disparition de l'eau liquide et donc de l'inconnue associée à cette phase et par voie de conséquence de l'équation qui lui est associée. A partir de cet instant, l'eau se trouve uniquement sous forme vapeur et doit être gérée comme un constituant gaz classique. Ce travail cherche à caractériser et à comprendre les phénomènes en présence lors de l'étape de gazéification du procédé CHO-Power. Ainsi, le séchage n'étant pas l'étape prépondérante du procédé, le fait de s'affranchir de cette étape ne pénalise pas la compréhension des processus en présence. Dans ce cas, l'équation caractérisant l'« eau » (III-39 et III-40 selon la valeur de la teneur en eau) disparaît. En lieu et place de cette équation, on traite la vapeur d'eau via une expression classique pour un constituant gaz (III-41).

Lors des simulations, les phases et les espèces prises en compte sont :

- la matière organique (MO) via l'équation (III-32)
- le Char (CR) via l'équation (III-33)
- les cendres inertes (CI) via (III-34)
- la phase gaz (g) constituée dans les simulations actuelles de H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> via (III-41) mais qui pourra par la suite être enrichie par d'autres espèces notamment les goudrons.

En résumé, on considère donc quatre phases distinctes dont une phase gaz multiconstituant.

##### ***III.3.1.b Réactions homogènes et hétérogènes du procédé***

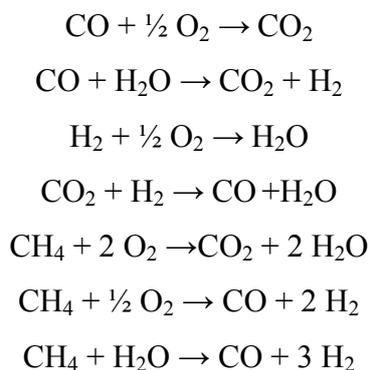
Dans ce paragraphe l'ensemble des constantes de vitesse des réactions homogènes et hétérogènes du procédé CHO-Power est modélisé par l'intermédiaire d'une expression de type Loi d'Arrhenius :

$$k = A \exp\left(\frac{-Ea}{R\bar{T}}\right) \quad \text{III-155}$$

avec  $Ea$  l'énergie d'activation de la réaction considérée,  $R$  la constante des gaz parfaits,  $A$  le facteur pré-exponentiel et  $\bar{T}$  la moyenne de la température du milieu.

### III.3.1.b.i Réactions homogènes

En considérant les sept constituants cités dans le paragraphe précédent, le schéma réactionnel choisi pour la réalisation des simulations est le suivant (Chelliah et al.1996) :



Les cinétiques réactionnelles correspondant à ces réactions sont regroupées au sein du Tableau 2 où les concentrations [-] sont exprimées en  $\text{mol.m}^{-3}$  et les vitesses de réaction en  $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ .

Réaction	Vitesse de réaction	Constante de réaction	Référence
$\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	$R_1 = 0,001. k_1. [\text{O}_2]. [\text{H}_2]$	$k_1 = 1,08. 10^{10} \exp\left(\frac{-125525}{R\bar{T}}\right)$	Turns., 1996
$\text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	$R_2 = k_2. [\text{CO}]. [\text{H}_2\text{O}]^{0,5}. [\text{O}_2]^{0,5}$	$k_2 = 1,3. 10^8 \exp\left(\frac{-125500}{R\bar{T}}\right)$	Howard et al. 1973
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	$R_3 = 0,1. k_3. [\text{CO}]. [\text{H}_2\text{O}]$	$k_3 = 2,778 \exp\left(\frac{-12560}{R\bar{T}}\right)$	Petersen & Werther., 2005
$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	$R_4 = k_4. [\text{CO}_2]. [\text{H}_2]$	$k_4 = 1,623. 10^1 \exp\left(\frac{-47290}{R\bar{T}}\right)$	Petersen & Werther., 2005
$\text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$	$R_5 = k_5. [\text{CH}_4]^{-0,3}. [\text{O}_2]^{1,3}$	$k_5 = 1,3. 10^2 \exp\left(\frac{-202529}{R\bar{T}}\right)$	Turns., 1996
$\text{CH}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2$	$R_6 = k_6. [\text{CH}_4]^{0,7}. [\text{O}_2]^{0,8}$	$k_6 = 1,58. 10^{12} \exp\left(\frac{-202612}{R\bar{T}}\right)$	Petersen & Werther., 2005
$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3 \text{H}_2$	$R_7 = k_7. [\text{CH}_4]. [\text{H}_2\text{O}]$	$k_5 = 3,101 \exp\left(\frac{-124710}{R\bar{T}}\right)$	Nozahic., 2008

Tableau 2 : Expressions des vitesses de réactions prises en compte dans les simulations

où la concentration molaire d'une espèce  $k$  est définie par

$$[\text{espèce } k] = \frac{\bar{\rho}_k}{M_k \varepsilon_g}$$

### III.3.1.b.ii Réactions hétérogènes

Au cours du procédé CHO-Power, la matière organique est, dans un premier temps, pyrolysée du fait des valeurs locales de température. Cette pyrolyse produit du Char et un mélange gazeux composé d'incondensables et de gaz condensables selon le schéma réactionnel simplifié suivant (Figure 45) :

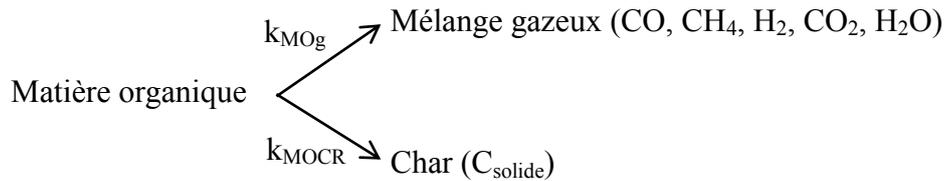


Figure 45 : Schéma réactionnel simplifié de la pyrolyse de la matière organique

Dans les simulations, nous supposons que le mélange gazeux produit a la composition suivante :

Espèce	Fraction massique
H <sub>2</sub> O	0
H <sub>2</sub>	0,04
CH <sub>4</sub>	0,1
CO	0,71
CO <sub>2</sub>	0,15

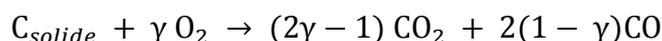
Figure 46 : Composition du mélange gazeux produit par la pyrolyse

Le Tableau 3 correspond à l'expression des vitesses de réactions hétérogènes pour la pyrolyse lors des simulations du procédé CHO-Power (Ménard 2003).

Réaction	Vitesse de réaction	Constante de réaction
<b>MO → CR</b>	$r_{MOCR} = k_{MOCR} \cdot \bar{\rho}_{MO}$	$k_{MOCR} = 2,5 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-106500}{R\bar{T}}\right)$
<b>MO → gaz</b>	$r_{MOg} = k_{MOg} \cdot \bar{\rho}_{MO}$	$k_{MOg} = 1,43 \cdot 10^4 \exp\left(\frac{-88600}{R\bar{T}}\right)$

Tableau 3 : Expression des vitesses de réactions pour la pyrolyse de la matière organique

La pyrolyse ayant eu lieu, se produit alors l'oxydation partielle du Char par l'oxygène contenu, en quantité inférieure à l'apport stœchiométrique, dans l'agent de gazéification entraînant la production de dioxyde de carbone et de monoxyde de carbone. Le schéma réactionnel est le suivant :



### CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe

L'expression de  $\gamma$  est donnée par la fonction suivante :

$$\gamma = \frac{2 + f}{2(1 + f)} \text{ avec } \begin{cases} f = 1340 \exp\left(\frac{-63500}{R\bar{T}}\right) \text{ si } 850 < \bar{T} < 970K \\ f = 4,72 \cdot 10^{-3} \exp\left(\frac{37700}{R\bar{T}}\right) \text{ si } 970 < \bar{T} < 1220K \\ f = 12,4 \exp\left(\frac{-42000}{R\bar{T}}\right) \text{ si } 1220 < \bar{T} < 1650K \end{cases}$$

La vitesse d'oxydation du Char prend la forme donnée dans le Tableau 4 (Cooper & Hallett, 2000) :

Réaction	Vitesse de réaction
$C_{solide} + \gamma O_2 \rightarrow (2\gamma - 1) CO_2 + 2(1 - \gamma)CO$	$r_{Coxydation} = \left(860 \cdot 10^{-3} \exp\left(\frac{-18 \cdot 10^3}{\bar{T}}\right) \bar{P}_{O_2}^g\right) \Omega_{act} a_g$

Tableau 4 : Expression de la vitesse d'oxydation du Char

La quantité  $\Omega_{act}$  désigne la correction de surface réactive et  $a_g$  l'aire spécifique dont les expressions sont tirées du cas d'un lit de particules sphériques de diamètre  $d_p$  et de porosité  $\varepsilon$ . On a ainsi :

$$\Omega_{act} = \frac{\bar{\rho}_{CR}}{\bar{\rho}_{CR} + \bar{\rho}_{CI}}$$

et

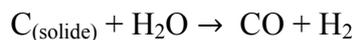
$$a_g = \frac{6(1 - \varepsilon)}{d_p}$$

avec

$$d_p = 13 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

La valeur du diamètre de la particule est choisie en fonction des exigences granulométriques du procédé CHO-Power.

L'oxydation partielle du Char permet d'atteindre les niveaux de température nécessaires à la réalisation des réactions de gazéification à la vapeur d'eau et au dioxyde de carbone suivantes :



La modélisation des vitesses de réactions, en s'appuyant sur les travaux de Chelliah et al. 1996, aboutit à :

Réaction	Vitesse de réaction
$C_{(solide)} + CO_2 \rightarrow 2 CO$	$r_{C,CO_2} = \left( 28,3 \cdot 10^2 \exp\left(\frac{-284,6 \cdot 10^3}{R\bar{T}}\right) \bar{P}_{CO_2}^{g, 0,5} \right) \Omega_{act} a_g$
$C_{(solide)} + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$r_{C,H_2O} = \left( 1,5 \cdot 10^3 \exp\left(\frac{-287,5 \cdot 10^3}{R\bar{T}}\right) \bar{P}_{H_2O}^{g, 0,5} \right) \Omega_{act} a_g$

Tableau 5 : Expression des vitesses de réactions de gazéification

### III.3.1.c Paramètres de transport

#### III.3.1.c.i Viscosité dynamique du gaz

La phase gaz est un mélange multiconstituant évoluant avec la progression des phénomènes de pyrolyse, d'oxydation partielle et de gazéification. On formule alors une moyenne de la viscosité dynamique du gaz de la façon suivante (Ratte, 2009) :

$$\mu_g \bar{\rho}_g = \sum_{e=1}^{Ne} \mu_e \bar{\rho}_e \quad \text{III-156}$$

où  $\mu_e$  la viscosité dynamique de l'espèce e est de la forme

$$\mu_e = \frac{A_{\mu e} \cdot \bar{T}^{B_{\mu e}}}{1 + C_{\mu e} / \bar{T} + D_{\mu e} / \bar{T}^2} \quad \text{III-157}$$

Les valeurs des constantes  $A_{\mu e}$ ,  $B_{\mu e}$ ,  $C_{\mu e}$  et  $D_{\mu e}$  provenant de la bibliothèque ComponentPlus sont données en ANNEXE III.

#### III.3.1.c.ii Conductivité thermique

Le milieu poreux est constitué de quatre phases distinctes isotropes que sont la matière organique, les cendres inertes, le Char et le gaz. Au vu du manque d'information pour modéliser la conductivité thermique équivalente du milieu, on considère la contribution respective de chacune des phases dans le cas dit « parallèle » (Chenu, 2007). Dans ce modèle, il est supposé qu'aucun transfert de chaleur par rayonnement n'a lieu à l'intérieur du milieu poreux, celui-ci se produisant uniquement à la surface, ce qui aboutit à :

$$\underline{\lambda}_{eff} = \lambda_{eff} \underline{I} \quad \text{III-158}$$

avec

$$\lambda_{eff} = \varepsilon_{MO} \lambda_{MO} + \varepsilon_{CI} \lambda_{CI} + \varepsilon_{CR} \lambda_{CR} + \varepsilon_g \lambda_g \quad \text{III-159}$$

Pour les phases matière organique et cendres inertes, on prend (Ménard, 2003) :

$$\lambda_{MO} = 0,3 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\lambda_{CI} = 0,5 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

## CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe

La conductivité thermique de la phase Char est assimilée à celle du carbone graphite, d'où :

$$\lambda_{CR} = 129 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

D'autre part, la phase gaz étant multiconstituante, l'expression suivante de la bibliothèque ComponentPlus est retenue pour la moyenne de la conductivité thermique (Ratte, 2009) :

$$\lambda_g \bar{\rho}_g = \sum_{e=1}^{Ne} \lambda_e \bar{\rho}_e \quad \text{III-160}$$

où  $\lambda_e$  la conductivité thermique de l'espèce e est de la forme

$$\lambda_e = \frac{A_{\lambda e} \cdot \bar{T}^{B_{\lambda e}}}{1 + C_{\lambda e} / \bar{T} + D_{\lambda e} / \bar{T}^2} \quad \text{III-161}$$

Les coefficients  $A_{\lambda e}$ ,  $B_{\lambda e}$ ,  $C_{\lambda e}$  et  $D_{\lambda e}$ , issus de la bibliothèque ComponentPlus sont donnés en ANNEXE III.

### III.3.1.c.iii Diffusion

Dans le chapitre II, la diffusion des espèces gazeuses a été modélisée par l'intermédiaire de la Loi de Fick généralisée. Dans ce travail, le gaz est multiconstituant et l'obtention des coefficients de diffusion pour ce type de modélisation reste complexe du fait des interactions avec les pores. Aussi, dans le but de réduire le nombre de paramètres requis pour l'utilisation du code de calcul, le choix d'une description à partir des coefficients de diffusion de Fick dans le cas d'un mélange gazeux constitué majoritairement d'azote est fait. Les coefficients sont pondérés par un facteur frein dépendant du milieu poreux considéré, soit :

$$D_{iN_2}^{eff} = B D_{iN_2} \quad \text{III-162}$$

où B est un facteur frein dépendant de la perméabilité du milieu. La valeur de B a été choisie de façon arbitraire en fonction de la valeur  $\varepsilon^{-6}$  pour une perméabilité de  $10^{-16} \text{ m}^2$ . Aussi, dans notre cas d'une perméabilité forte,  $10^{-10} \text{ m}^2$ , la valeur choisie est :

$$B = 0,9$$

Afin d'assurer la somme des flux diffusifs nulle, un des coefficients est calculé à partir de :

$$\sum_{e=1, Ne} D_{eN_2} \nabla \left( \frac{\rho_e}{\rho_g} \right) = 0 \quad \text{III-163}$$

Le choix du diazote a été effectué pour ce calcul et on obtient alors :

$$D_{N_2N_2} = -\frac{1}{\nabla\left(\frac{\rho_{N_2}}{\rho_g}\right)} \left( \sum_{e=1, Ne-1} D_{eN_2} \nabla\left(\frac{\rho_e}{\rho_g}\right) \right) \quad \text{III-164}$$

Les coefficients de diffusion sont des propriétés dépendant de la température, de la pression et de la nature des constituants du système considéré. La modification de Wilke-Lee à la méthode de Hirschfelder-Bird-Spottz (Treybal, 1980) permet d'obtenir l'expression des coefficients de diffusion binaires, soit :

$$D_{iN_2} = \frac{10^{-4} \cdot \left( 1,084 - 0,249 \sqrt{\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_{N_2}}} \right) \bar{T}^{3/2} \sqrt{\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_{N_2}}}}{\bar{P}_g^g r_{iN_2}^2 f(k\bar{T}/\varepsilon_{iN_2})} \quad \text{III-165}$$

où  $M_i$  désigne la masse molaire d'un constituant  $i$ ,  $\bar{P}_g^g$  la pression absolue,  $k$  la constante de Boltzman,  $f(k\bar{T}/\varepsilon_{iN_2})$  la fonction de collision et  $r_{iN_2} = \frac{(r_{N_2} + r_i)}{2}$  la séparation moléculaire à la collision (Treybal, 1980).

### III.3.1.c.iv Convection

Lors de l'écriture du modèle général, la conservation de la quantité de mouvement pour la phase gaz a été modélisée grâce à la loi de Darcy généralisée suivante :

$$\bar{\mathbf{v}}_g^g - \mathbf{v}_0(t) = -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}, \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \cdot (\nabla \bar{P}_g^g + \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}) \quad \text{III-36}$$

Le fait de ne pas prendre en compte dans un premier temps la phase liquide implique pour la perméabilité relative de la phase gaz :

$$\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg} = \underline{\underline{\mathbf{I}}} \quad \text{III-166}$$

De plus, les effets de la gravité ont été négligés dans un premier temps. On obtient alors :

$$\bar{\mathbf{v}}_g^g - \mathbf{v}_0(t) = -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}}{\varepsilon_g \mu_g} \cdot \nabla \bar{P}_g^g \quad \text{III-167}$$

Lors de la résolution numérique du modèle, on considère la perméabilité intrinsèque du lit de déchets  $\underline{\underline{\mathbf{k}}}$  comme étant isotrope, on a :

$$\underline{\underline{\mathbf{k}}} = k \underline{\underline{\mathbf{I}}} \quad \text{III-168}$$

avec

$$k = 1.10^{-10} [m^2]$$

Cette valeur a été choisie de façon empirique au regard des premières simulations effectuées dans le cas d'un lit de déchets traversé par de l'air à 600 °C sans réaction chimique garantissant des pertes

de charges inférieures à 500 MPa.

### III.3.1.d Enthalpies

Comme on l'a vu dans le chapitre II, les enthalpies des constituants en phase gaz sont définies à partir d'une enthalpie de référence et sont de la forme :

$$h_e = h_{e,ref} + \int_{T^{ref}}^{\bar{T}} C_{p_e} dT \quad \forall e = 1, \dots, Ne \quad \text{III-169}$$

L'enthalpie standard de formation à 298 K a été prise comme référence dans ce travail. Pour les espèces gazeuses, la chaleur spécifique est calculée à l'aide d'un polynôme ordre 4, soit :

$$C_{p_e} = A_e + B_e \bar{T} + C_e \bar{T}^2 + D_e \bar{T}^3 + E_e \bar{T}^4 \quad [J.kg^{-1}.K^{-1}] \quad \text{III-170}$$

Les valeurs des coefficients  $A_e$ ,  $B_e$ ,  $C_e$ ,  $D_e$  et  $E_e$  sont données ANNEXE III à partir de la bibliothèque Fluent.

Pour les phases Char et cendres inertes, l'enthalpie de référence est considérée comme nulle alors que pour la matière organique l'enthalpie de référence est l'enthalpie de formation calcul à partir du PCI de la matière organique de la même manière que pour le modèle d'équilibre ANNEXE I. En première approximation, les chaleurs spécifiques supposées constantes choisies dans les simulations sont les données utilisées dans le modèle d'équilibre présenté dans le chapitre I en faisant l'hypothèse que la matière organique et le Char ont la même chaleur spécifique.

$$C_{MO} = 1000 \quad [J.kg^{-1}.K^{-1}]$$

$$C_{CR} = 1000 \quad [J.kg^{-1}.K^{-1}]$$

$$C_{CI} = 1100 \quad [J.kg^{-1}.K^{-1}]$$

### III.3.1.e Masses volumiques intrinsèques solides

Les phases solides sont la matière organique, le Char et les cendres inertes. Nous avons vu dans le chapitre II que les masses volumiques intrinsèques des solides étaient des constantes, aussi par manque de données sur le déchet type du procédé les valeurs suivantes sont prises comme première approximation (base de données Engineering ToolBox) :

$$\bar{\rho}_{MO}^{MO} = 900 \quad kg.m^{-3}$$

$$\bar{\rho}_{CR}^{CR} = 900 \quad kg.m^{-3}$$

$$\bar{\rho}_{CI}^{CI} = 1500 \quad kg.m^{-3}$$

Ces valeurs devront par la suite être déterminé expérimentalement mais sont pour l'heure prise dans la moyenne des plages disponibles dans la littérature.

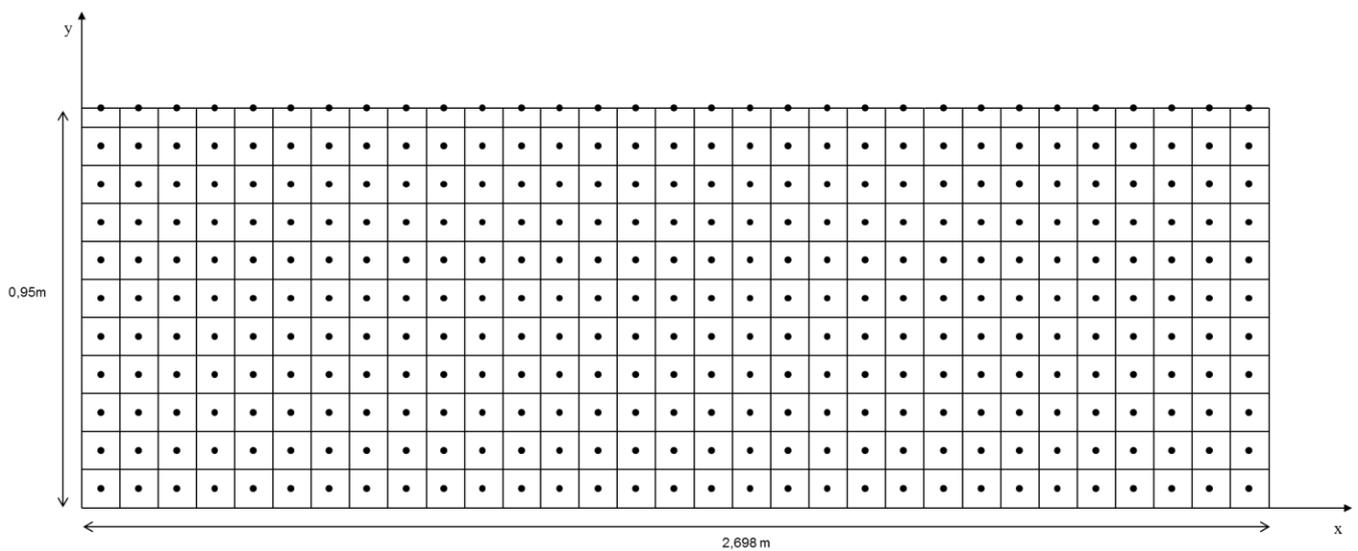
**III.3.1.f Maillage et dimensions du lit**

Les simulations sont effectuées dans le cas d'un problème bidimensionnel instationnaire. Le lit de déchets est représenté par un rectangle dont les côtes sont les suivantes :

Longueur	2,698 m
Hauteur	0,95 m

**Tableau 6 : Côtes associées à la géométrie du gazéifieur du procédé CHO-Power**

Le maillage du lit de déchets est un maillage régulier rectangulaire de 31 nœuds selon la longueur et 11 nœuds dans la hauteur. La Figure 47 permet de visualiser le maillage du lit.



**Figure 47 : Maillage (Nx=31)x(Ny=11) du lit de déchets simulé**

### III.3.2 Initialisation du code

#### III.3.2.a Données de simulation

Afin de simuler le procédé CHO-Power, les paramètres opératoires utilisés sont listés ci-dessous.

##### ➤ Entrée du déchet

On considère que le déchet entre dans le gazéifieur après séchage complet avec une composition, une température et un débit connus et constants. Le Tableau 7 et le Tableau 8 ci-dessous résument les caractéristiques du déchet entrant.

<b>Analyse proche du déchet après séchage</b>	
<b>Fraction volumique en Matière Organique</b>	16,8%
<b>Fraction volumique en Char</b>	0%
<b>Fraction volumique en Cendres Inertes</b>	1,29%
<b>Fraction volumique en gaz</b>	81,91%
<b>Fraction massique en Matière Organique</b>	88,23%
<b>Fraction massique en Char</b>	0%
<b>Fraction massique en Cendres Inertes</b>	11,29%
<b>Fraction massique en gaz</b>	0,58%
<b>Analyse ultime du déchet en massique</b>	
<b>C</b>	49,16%
<b>H</b>	6,04%
<b>O</b>	44,08%
<b>N</b>	0,485%
<b>S</b>	0,235%
<b>Pouvoir comburivore du déchet</b>	4,54 Nm <sup>3</sup> .kg <sup>-1</sup>
<b>Débit de déchets</b>	6,25 t.h <sup>-1</sup>
<b>Température</b>	150 °C

Tableau 7 : Données opératoires du déchet entrant

<b>Constituant</b>	<b>Fraction molaire</b>
<b>O<sub>2</sub></b>	21%
<b>N<sub>2</sub></b>	79%
<b>CH<sub>4</sub></b>	0%
<b>H<sub>2</sub></b>	0%
<b>CO</b>	0%
<b>CO<sub>2</sub></b>	0%
<b>H<sub>2</sub>O</b>	0%

Tableau 8 : Composition molaire de la phase gazeuse du déchet entrant

##### ➤ Air de gazéification

Les données de l'air de gazéification sont également constantes au cours des simulations et sont connues (cf. Tableau 9 et Tableau 10).

<b>Débit volumique de gaz</b>	1,805 Nm <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> soit 6500 Nm <sup>3</sup> .h <sup>-1</sup>
<b>Rapport stœchiométrique</b>	22,8%
<b>Température</b>	600 °C

Tableau 9 : Température, rapport stœchiométrique et débit de l'air de gazéification

<b>Constituant</b>	<b>Fraction molaire</b>
<b>O<sub>2</sub></b>	21%
<b>N<sub>2</sub></b>	79%
<b>CH<sub>4</sub></b>	0%
<b>H<sub>2</sub></b>	0%
<b>CO</b>	0%
<b>CO<sub>2</sub></b>	0%
<b>H<sub>2</sub>O</b>	0%

Tableau 10 : Composition molaire de l'air de gazéification

#### ➤ *Sortie Syngaz*

Il est supposé qu'au cours de la gazéification le Syngaz est évacué dans une enceinte se trouvant à pression atmosphérique. Pour les simulations cela se traduit par :

$$P_0 = 101325 P_a$$

#### *III.3.2.b Données d'initialisation*

Dans un premier temps, les simulations du procédé CHO-Power ont été initialisées avec des profils plats correspondant à un lit de déchets après séchage complet dont les valeurs sont données dans les différents tableaux précédemment cités (cf. Tableau 7 et Tableau 8). Dans la suite du document, la fraction volumique des cendres inertes ne sera pas représentée car celle-ci est constante et égale à 1,29% au cours des simulations.

#### *III.3.2.c Oscillations du code*

Cette initialisation a mis en lumière la nécessité d'une initialisation plus proche de l'état stationnaire du fait de l'apparition d'oscillations dans l'espace très importantes lors des premières secondes de simulation. Les profils des fractions massiques en dioxygène (cf. Figure 48) et en diazote (cf. Figure 49), mettent alors en lumière l'amplitude des oscillations.

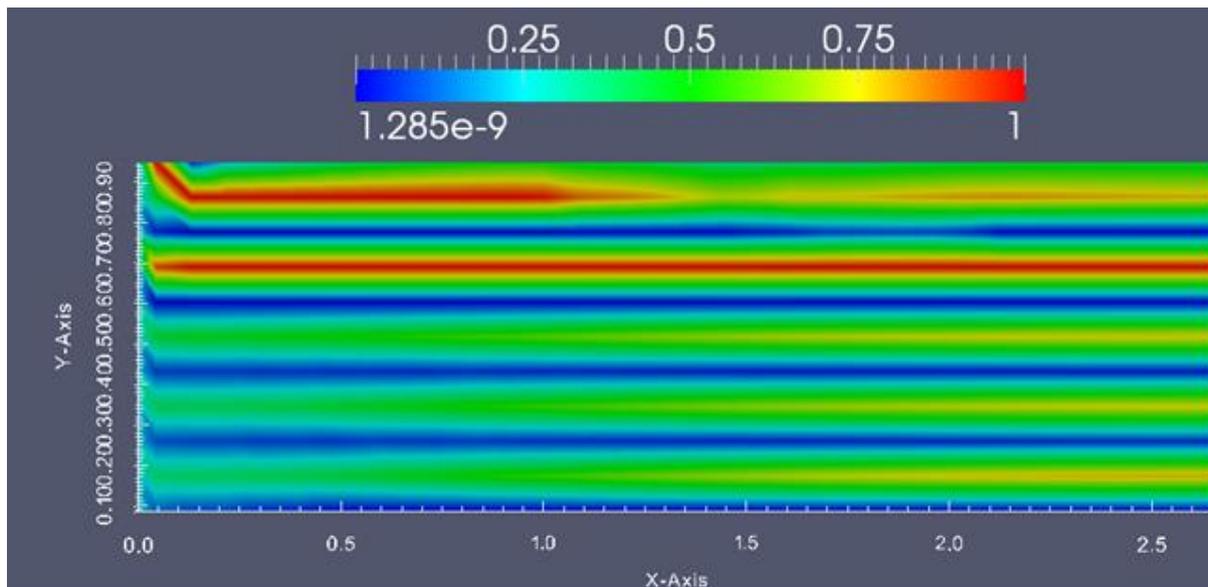


Figure 48 : Profil oscillant à t=60s de la fraction massique en dioxygène

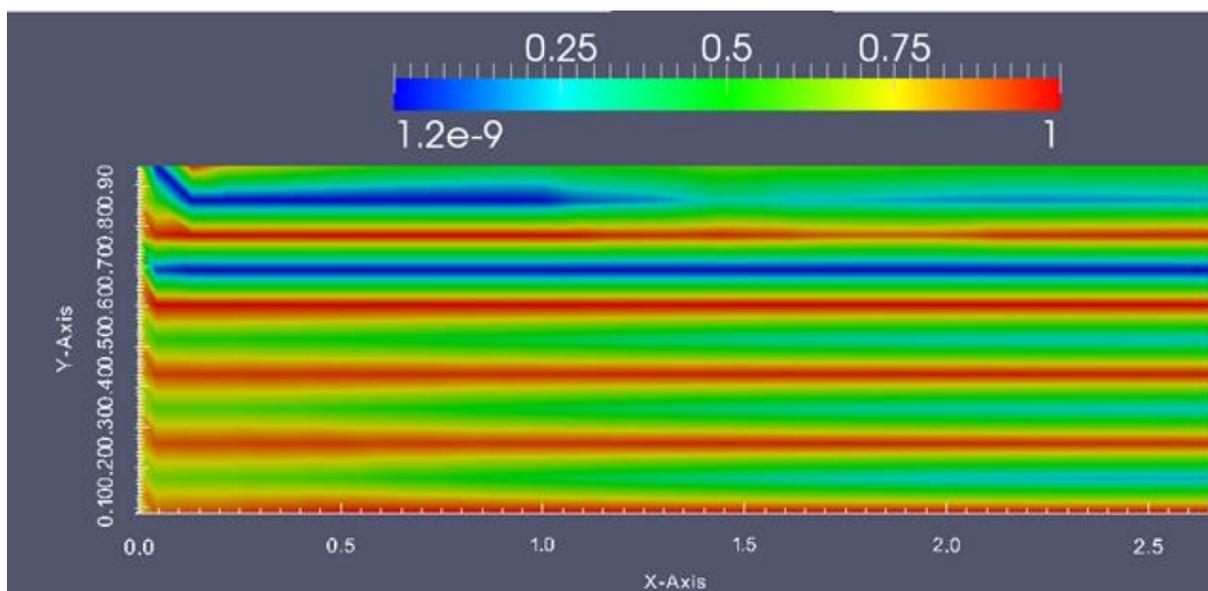
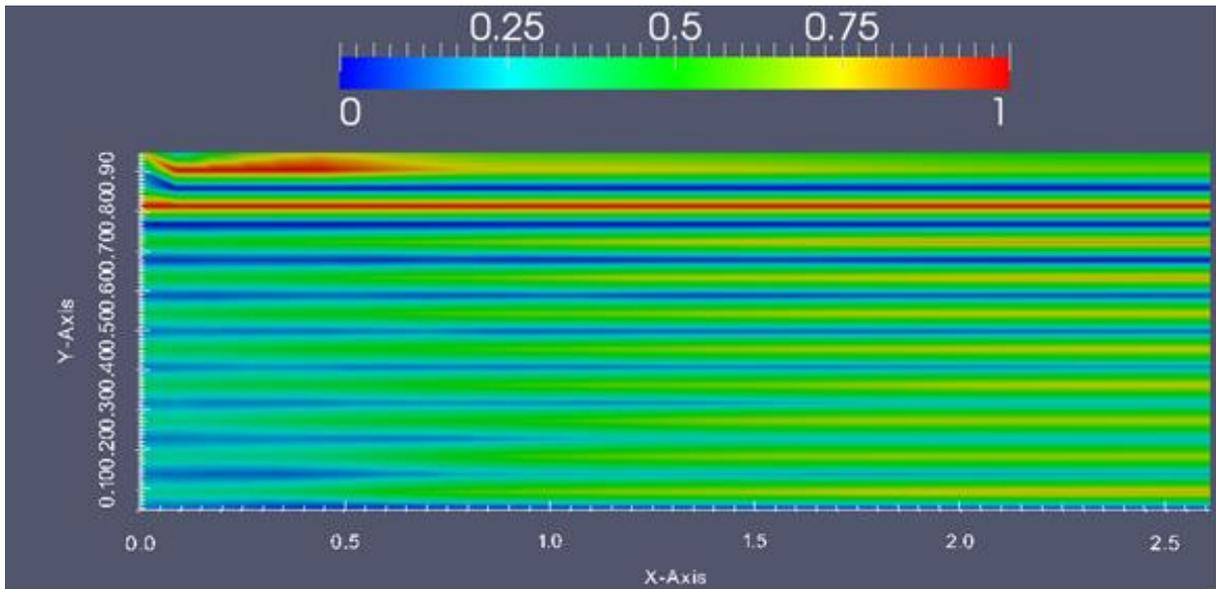


Figure 49 : Profil oscillant à t=60s de la fraction massique en diazote

Ces oscillations ont pour conséquence une divergence du code de calcul.

Une première solution envisagée fut de raffiner le maillage, mais comme le montre la Figure 50, cela n'a pas eu le résultat escompté et n'a fait qu'augmenter le temps de calcul.



**Figure 50 : Profil de la fraction massique en oxygène pour un maillage 31\*21 à t=10 s**

On constate que le raffinement du maillage entraîne des profils oscillants beaucoup plus rapidement mais ne change pas l'amplitude des oscillations. On observe également que les oscillations de valeur équivalente pour le maillage 31x21 et le maillage 31x11 se concentrent dans une zone plus restreinte. Aussi, la solution de raffiner le maillage n'ayant pas été concluante, une autre voie a dû être trouvée.

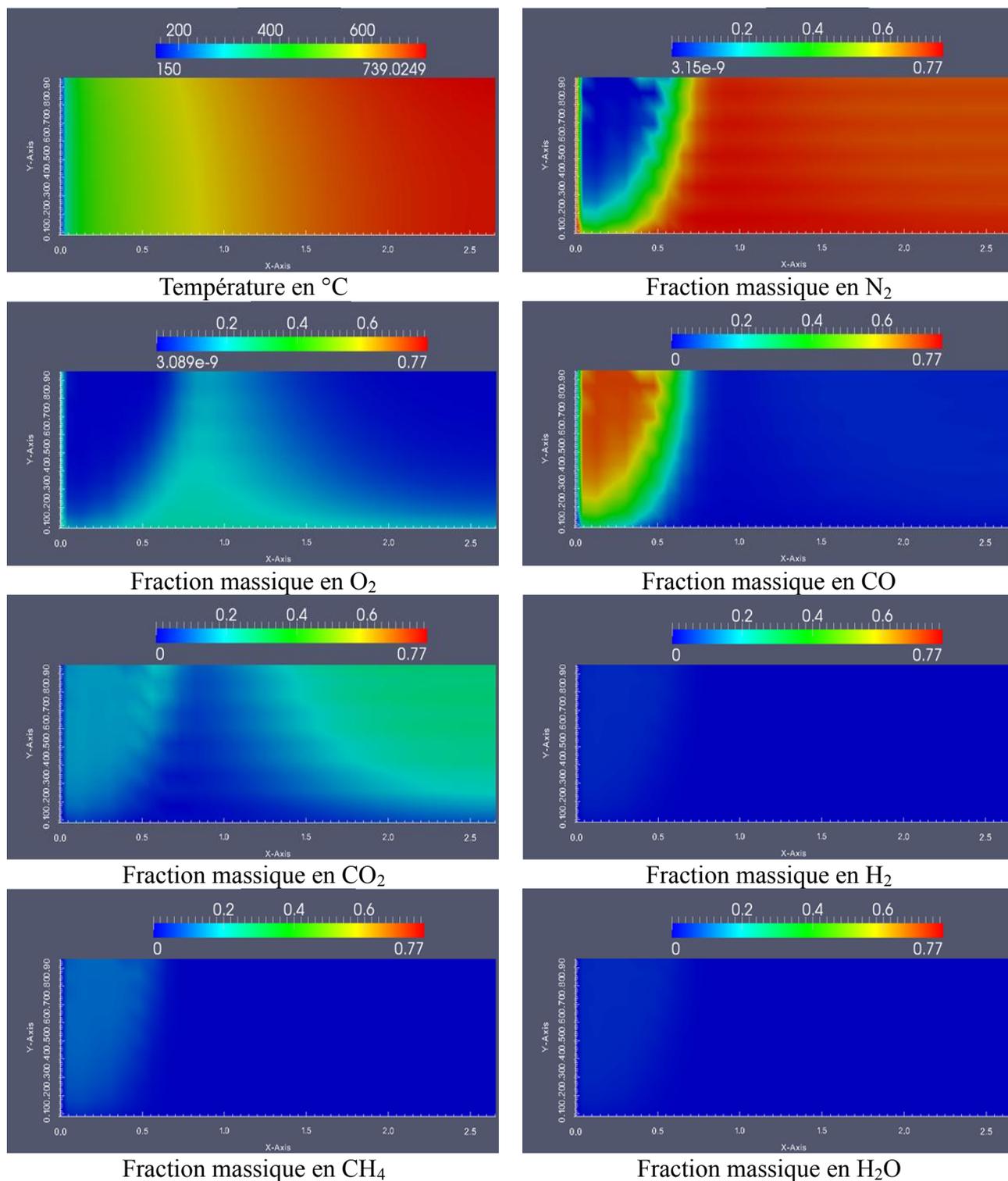
La solution utilisée, afin de palier à cela, consiste à dégrader le code de calcul dans l'optique d'obtenir un état initial plus proche de la solution finale. Cette dégradation aboutit à des valeurs de paramètres du code de calcul (cf. Tableau 11) non caractéristiques du procédé CHO-Power mais permet d'aboutir à un état stationnaire.

Paramètre	Valeur
<b>Flux de rayonnement à la surface supérieure</b>	$8.10^5 \text{ W.m}^{-2}$
<b>Débit d'air de gazéification</b>	$0,56 \text{ Nm}^3.\text{s}^{-1}$
<b>Conductivité thermique</b>	$\lambda = \lambda_{vrai} * 10$

**Tableau 11 : Paramètres pour l'obtention d'un nouvel état initial**

Cet état final stationnaire (cf. Figure 51 et Figure 52) servira d'état initial pour les simulations suivantes.

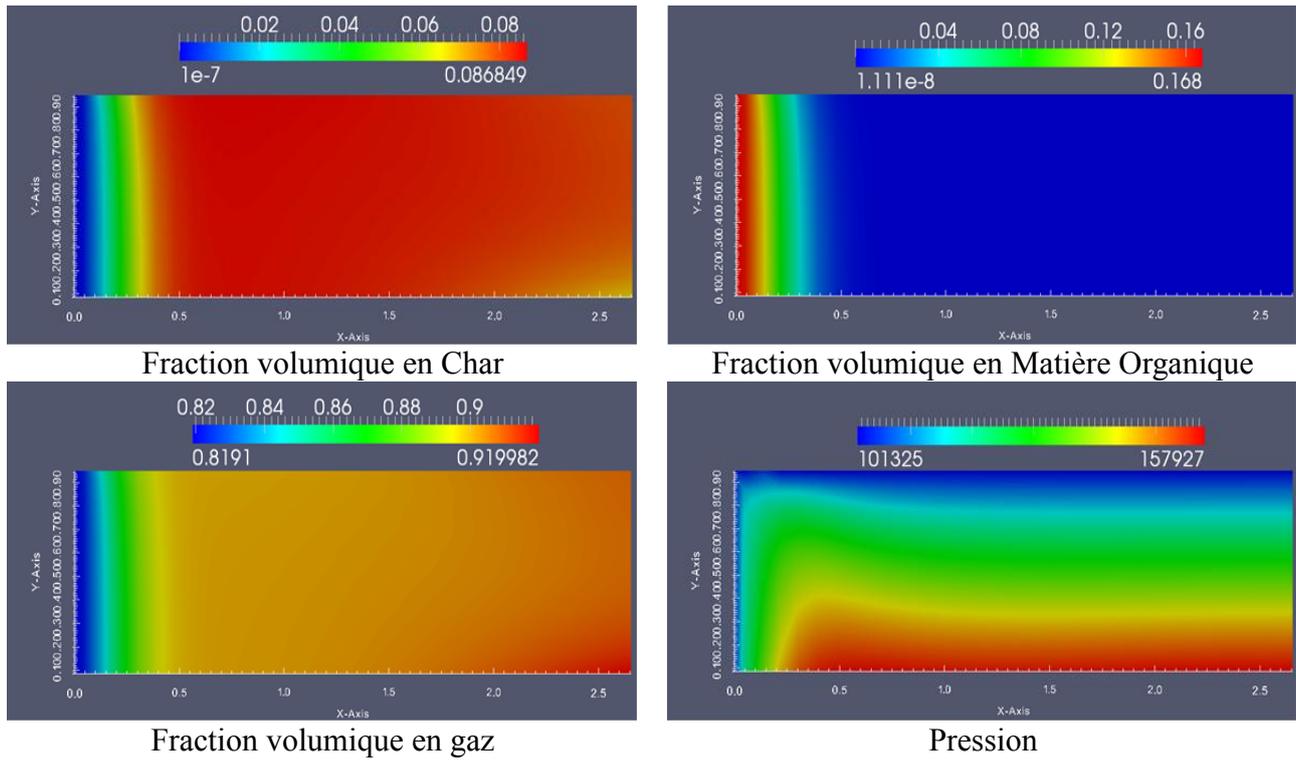
### CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe



**Figure 51 : Profils de température et de fractions massiques pour l'initialisation**

Dans la Figure 52, les échelles des différentes fractions volumiques ne sont pas identiques afin de pouvoir observer plus distinctement l'allure des profils d'initialisation.

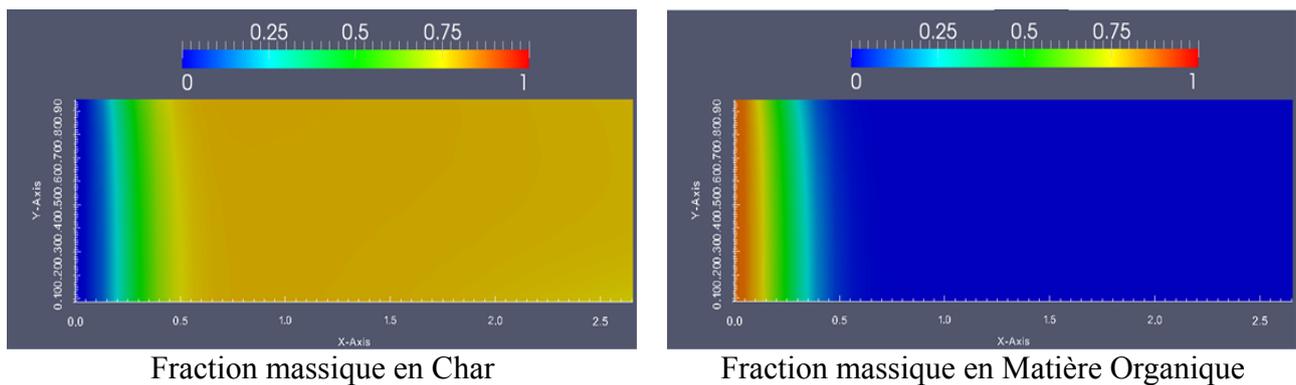
CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe

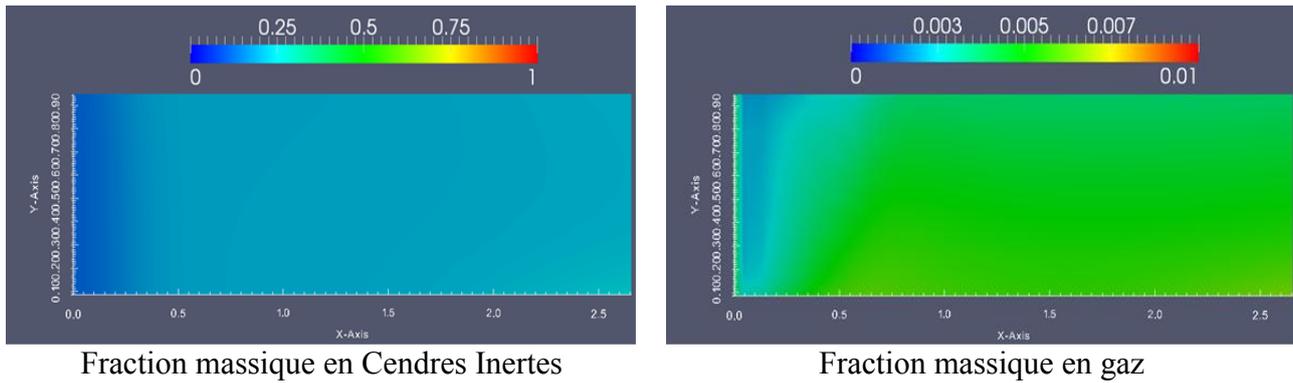


**Figure 52 : Profils de pression et de fractions volumiques de phase pour l'initialisation**

Les fractions massiques de phase sont maintenant représentées et ont pour définition la formulation suivante :

$$\omega_{\alpha} = \frac{\bar{\rho}_{\alpha}}{\sum_{\alpha=g,MO,CI,CR} \bar{\rho}_{\alpha}} \quad \text{III-171}$$





**Figure 53 : Profils de fractions massiques de phase pour l'initialisation**

L'analyse des figures précédentes (cf. Figure 51, Figure 52 et Figure 53), nous permet d'affirmer qu'au niveau thermique en présence, les phénomènes se produisant dans le lit sont uniquement la pyrolyse de la matière organique et l'oxydation partielle du Char.

Entre  $x=0$  et  $x=0,3$  m se trouve la zone de pyrolyse, ce qui se traduit par la consommation de la matière organique et par la production de monoxyde de carbone en forte quantité ainsi que de dioxyde de carbone, de méthane et de dihydrogène. La forme du profil des gaz, qui s'étend jusqu'à  $x=0,75$  m, s'explique par l'injection de l'air de gazéification par le dessous du lit combinée au défilement du lit de la gauche vers la droite. Ainsi, les gaz produits sont transportés de gauche à droite dans le lit et l'action combinée l'injection d'air en dessous de lit provoque le rétrécissement de la zone proche de la surface inférieure et sont évasement au niveau de la surface supérieure.

Entre  $x=0,3$  m et  $x=1,2$  m, on observe une zone où les niveaux thermiques sont trop faibles pour la réalisation de la gazéification du Char et où la pyrolyse est achevée du fait de l'absence de matière organique. Cette zone correspond à l'amorçage de la combustion du Char.

Enfin, la dernière partie du lit, pour  $x>1,2$  m, est la zone de combustion partielle du Char entraînant la production de dioxyde de carbone. On constate que malgré une température plus élevée dans la partie supérieure du lit, la combustion s'effectue préférentiellement dans la zone inférieure du lit. Ceci s'explique par la nécessité d'avoir suffisamment d'oxygène pour que la réaction d'oxydation se produise. Cet oxygène est fourni par l'air de gazéification injecté par le dessous du lit de déchets.

### III.3.3 Simulation CHO-Power

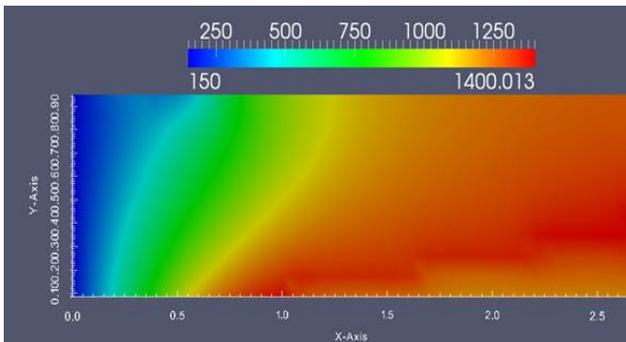
Les données de simulation sont celles décrites dans la partie III.3.2.a de ce chapitre. L'initialisation s'effectue à l'aide des profils précédemment décrits (III.3.2.c). Dans cette simulation, la densité de flux de rayonnement est définie à l'aide de l'expression suivante :

$$Q_{ray} = \sigma \cdot (T_{\infty}^4 - \bar{T}^4) \quad \text{III-172}$$

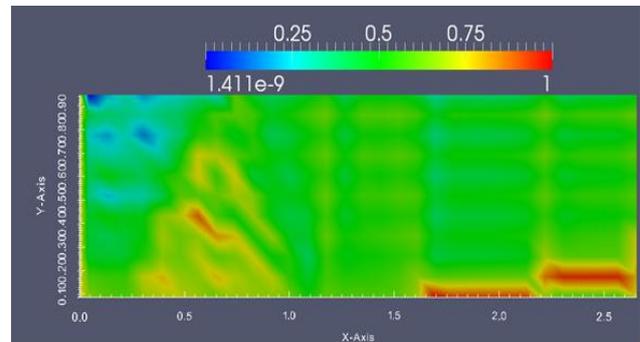
avec  $\sigma$  la constante de Stefan-Boltzmann,  $\bar{T}$  la température à la surface du lit de déchets calculé par le présent modèle et  $T_{\infty}$  la température de l'enceinte extérieure au lit poreux. Le choix de cette température a été effectué à l'aide du modèle d'équilibre développé dans le chapitre I et est prise égale à 1000°C.

### III.3.3.a Simulation 1 : 22,8 % de l'apport stœchiométrique

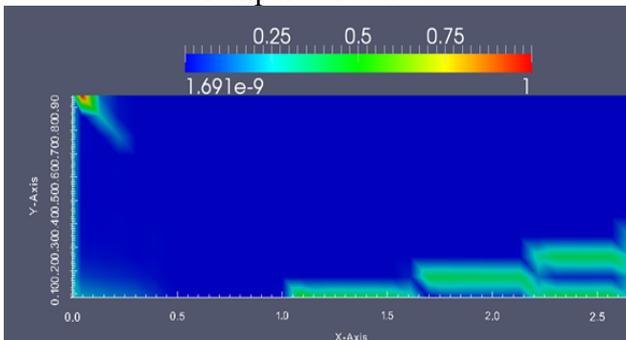
Dans cette simulation, on s'intéresse à l'allure des différents profils une fois le régime permanent établi et ce sachant que l'initialisation se fait avec les profils obtenus dans la partie III.3.2. Le choix de l'apport stœchiométrique à 22,8% provient de l'apport permettant la gazéification complète du char dans le cas idéal de l'équilibre chimique.



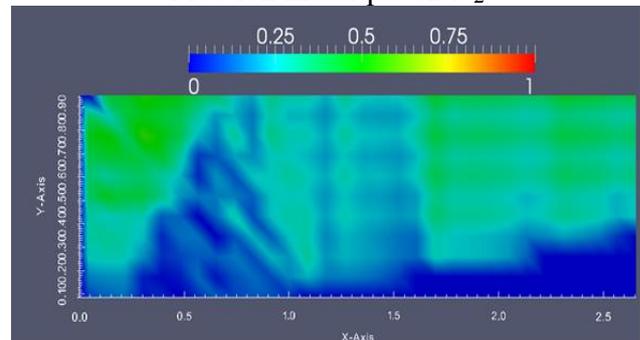
Température en °C



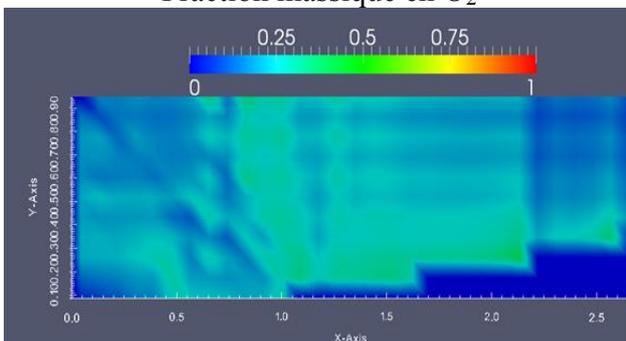
Fraction massique en N<sub>2</sub>



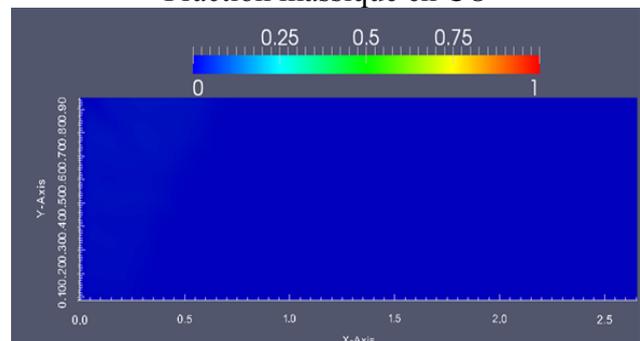
Fraction massique en O<sub>2</sub>



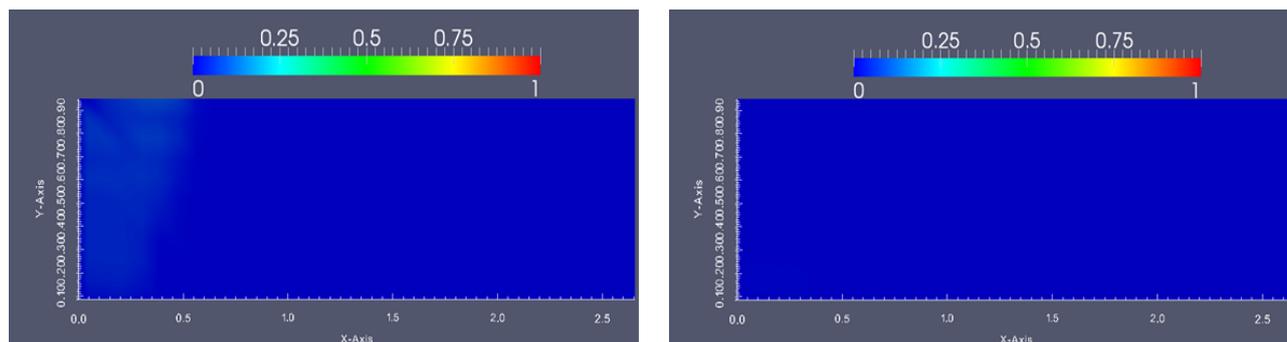
Fraction massique en CO



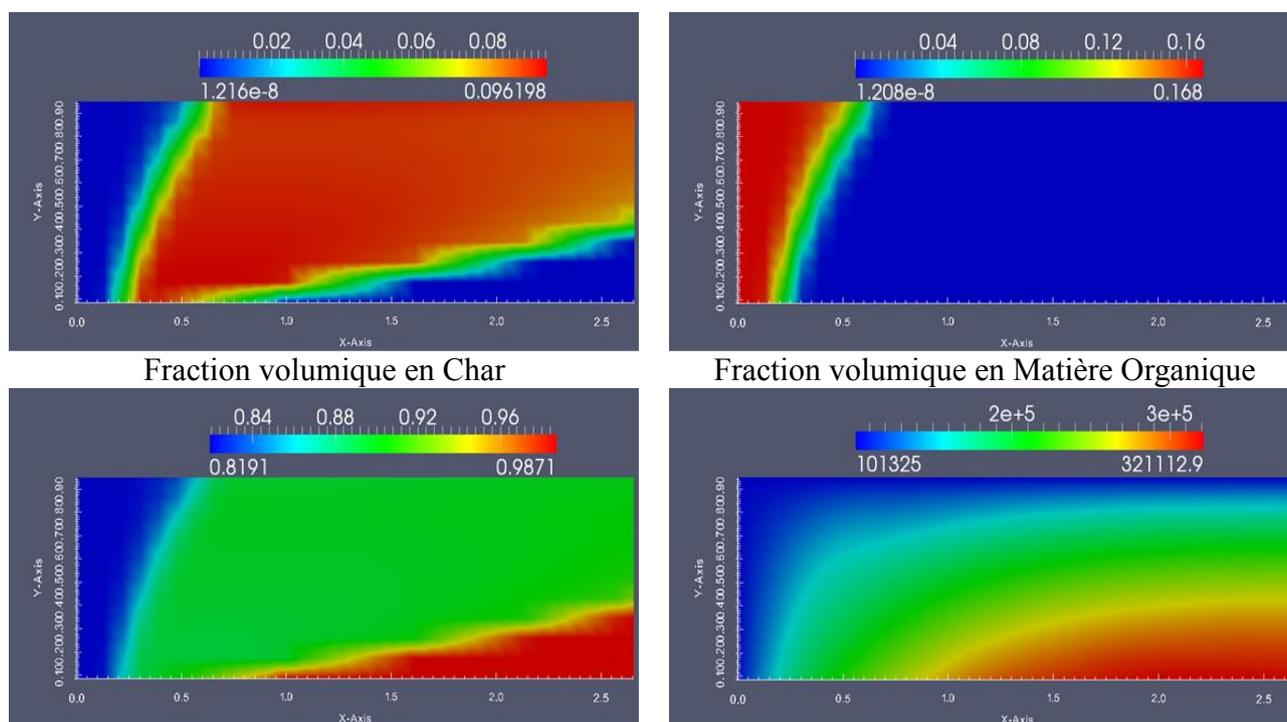
Fraction massique en CO<sub>2</sub>



Fraction massique en H<sub>2</sub>

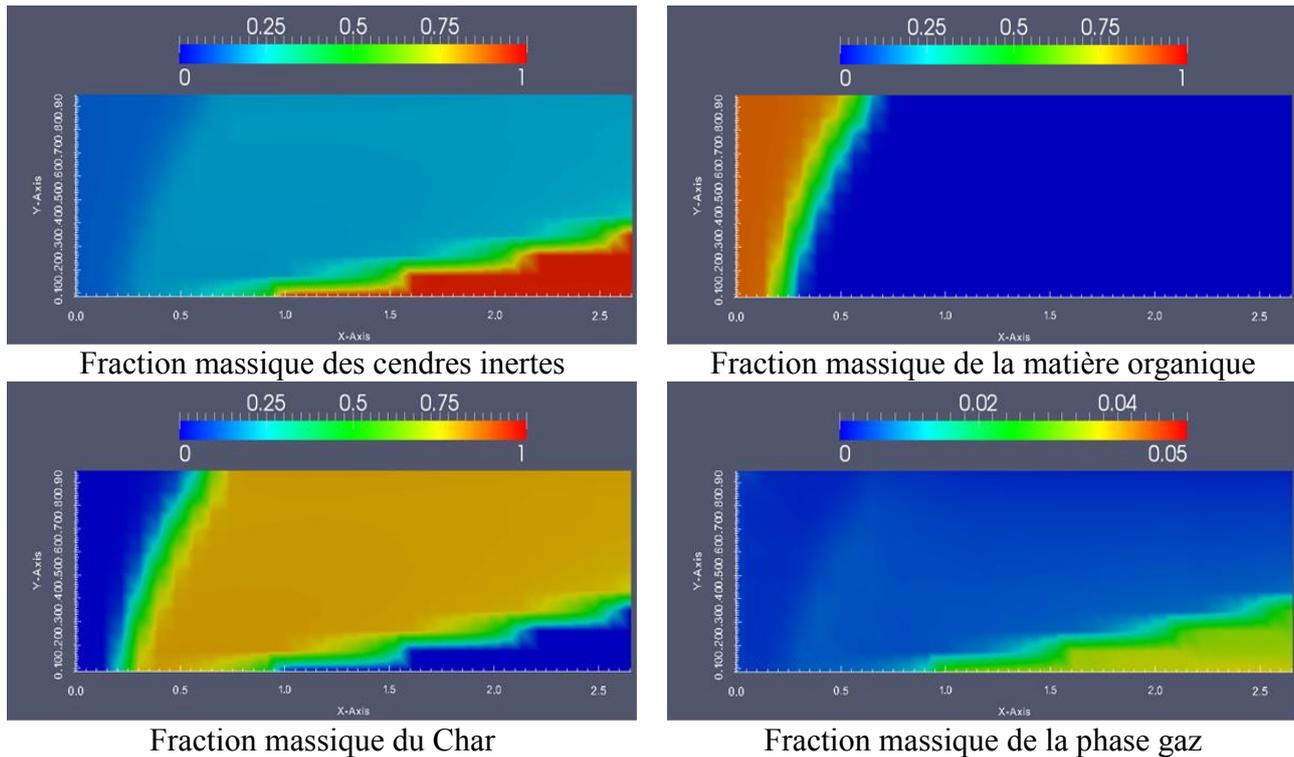


Fraction massique en  $\text{CH}_4$                       Fraction massique en  $\text{H}_2\text{O}$   
**Figure 54 : Profils de température et de fractions massiques pour la simulation 1 en régime stationnaire**



Fraction volumique en Char                      Fraction volumique en Matière Organique  
 Fraction volumique en gaz                      Pression  
**Figure 55 : Profils de pression et de fractions volumiques de phase pour la simulation 1 en régime stationnaire**

Il est également intéressant de représenter les fractions massiques par phase afin de bien appréhender la répartition de chacune des phases dans le lit une fois le régime permanent atteint (cf. Figure 56).



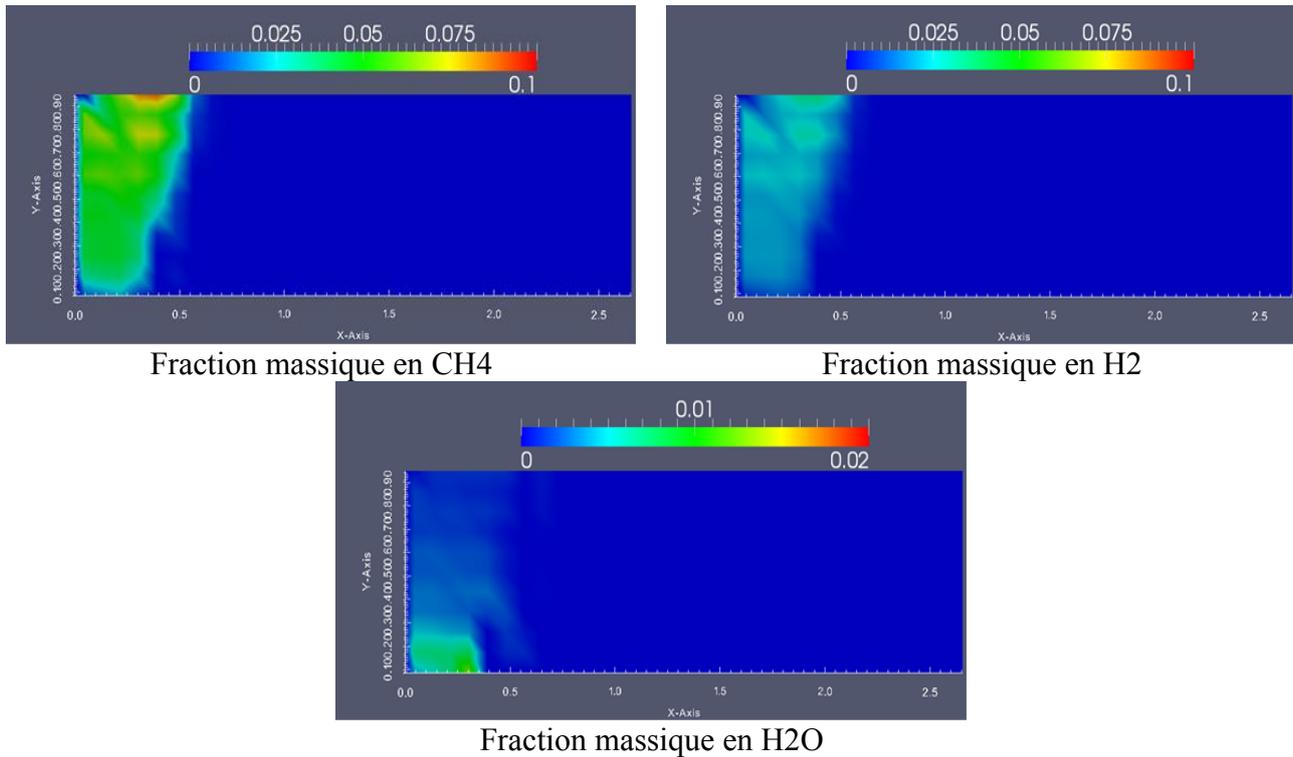
**Figure 56 : Profils de la répartition en masse des différentes phases pour la simulation 1 en régime permanent**

L'échelle pour la fraction massique de la phase gaz est différente afin de mieux observer la répartition massique de cette phase.

Une fois le régime permanent établi, on remarque un certain nombre de variations sur les différents profils (cf. Figure 54 et Figure 55). Néanmoins, comme précédemment, trois zones distinctes peuvent être identifiées : la zone de pyrolyse, celle d'amorçage de la combustion et enfin la zone réunissant la combustion et la gazéification de Char.

- Pour  $x=0$  m à  $x=0,7$  m, on observe la pyrolyse de la matière organique du fait de la consommation de matière organique et de la production de Char et de gaz caractéristiques de cette dégradation thermochimique. Cette zone est plus grande qu'au début de la simulation. Ceci s'explique par le fait que l'initialisation se fait avec les résultats d'une simulation utilisant des paramètres internes du lit différents et un flux à la surface du lit supérieur à celui utilisé dans cette simulation. En effet, le flux de rayonnement imposé au niveau de la surface supérieure est plus faible ici que dans la simulation pour l'initialisation. Ce flux entraîne un abaissement de la température dans les premiers centimètres du lit de déchets ce qui conduit à une diminution de la vitesse de réaction de la pyrolyse. Cette diminution conduit à l'augmentation de la taille de la zone de pyrolyse nécessaire pour dégrader l'ensemble de la matière organique entrant. Si on zoome sur les teneurs en gaz de cette zone,

on obtient les profils pour le méthane, le dihydrogène et la vapeur d'eau représentés sur la Figure 57.



**Figure 57 : Zoom sur les teneurs en H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> et H<sub>2</sub>O pour la simulation 1 en régime stationnaire**

On constate alors que les profils pour la production de gaz ont sensiblement la même allure que précédemment avec une production des différents produits de la pyrolyse. On remarque également la production de la vapeur d'eau ce qui s'explique par l'oxydation des gaz de pyrolyse par l'agent de gazéification produisant du dioxyde de carbone et de la vapeur. Pour le profil en dioxygène, on observe une langue de forte teneur allant même jusqu'à l'exclusivité au niveau de l'angle en haut à gauche, et inversement pour le diazote pour lequel on obtient des teneurs très faibles allant jusqu'à la disparition locale de l'espèce. Ces niveaux et ce type de profils ne semblent pas correspondre à une réalité physique pour notre procédé. Nous pensons que cette aberration pourrait être liée aux approximations faites à la limite supérieure (cf. paragraphe III.1.2.c, équations (III-19) à (III-25) et (III-29)). Comme nous l'avons déjà signalé, il faudrait résoudre itérativement les équations de conservation descriptives des phénomènes au sein de l'environnement et celles associées au milieu poreux. Cette solution, beaucoup trop couteuse en temps de calcul, n'a pu être mise en œuvre dans le cadre de la thèse.

De plus, le choix de nœuds à la surface afin de pouvoir assurer une condition de type valeur imposée semble être à l'origine de nombreux problèmes dans la simulation du procédé

CHO-Power. Au niveau de l'angle en haut à gauche, on impose à la fois une valeur afin d'assurer la pression sur cette surface égale à la pression atmosphérique parallèlement à une condition de flux provenant de l'entrée du lit de déchets. Dans ces conditions, la valeur imposée se trouve être la valeur basse entraînant la pénalisation du constituant afin de respecter la pression égale à la pression atmosphérique. Le fait d'imposer le diazote au zéro numérique entraîne, afin de respecter la somme de fraction massique égale à un, une forte concentration locale en dioxygène, d'où l'apparition de cette langue dans les profils en gaz. Il sera donc nécessaire de revenir à un maillage classique (nœuds internes aux mailles de surfaces) et donc d'adopter la méthodologie décrite au paragraphe III.2.2.b (cas 3, maille pleine).

- Pour  $x=0,7$  m à  $x=1$  m, le lit de déchets est le lieu de la combustion du Char produit par pyrolyse. Cette combustion se caractérise par une augmentation locale de la température au niveau des nœuds de la surface inférieure du domaine. On observe ainsi le début de l'établissement du front de combustion avec la production de dioxyde de carbone en grande quantité et de monoxyde de carbone en quantité plus faible. Ici, le niveau thermique est encore trop bas pour enclencher la gazéification du Char de façon significative. Le mélange gazeux dans cette zone est composé principalement de diazote, dioxyde de carbone et monoxyde de carbone.
- Pour  $x=1$  m à  $x=2,698$  m, on peut observer deux phénomènes bien distincts que sont la combustion du Char et sa gazéification en suivant. En regardant le profil de température, on remarque la présence d'un front plus chaud en parallèle de l'absence de Char en dessous de celui-ci. Ce front correspond à la zone de combustion partielle par le dioxygène injecté par le dessous du lit. La zone située au-dessus du front de combustion est le lieu de la gazéification du Char par le dioxyde de carbone. En effet, si l'on s'intéresse aux profils de teneur en dioxyde de carbone, on remarque que celle-ci décroît à mesure que la température augmente et que la teneur en monoxyde de carbone augmente. Cela provient de la réaction de gazéification qui dégrade le Char à l'aide du dioxyde de carbone pour produire du monoxyde de carbone. Une fois encore, les profils de concentration en gaz sont oscillants avec plus ou moins d'amplitude selon la zone concernée.

Il convient de mettre en lumière le fait que les oscillations sur l'oxygène et le diazote ne respectent pas la physique du problème dans la zone où l'ensemble du Char a été consommé. On constate que dès que les gradients des inconnues deviennent quasiment nuls, alors les profils oscillent fortement. Encore une fois, ces oscillations sont vraisemblablement

### CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe

dues à un mauvais traitement des conditions aux limites au niveau de la surface supérieure, puisqu'un raffinement du maillage n'a eu aucune conséquence sur leur amplitude.

Il est important d'observer que les pertes de charges, une fois le régime permanent établi, sont très importantes pour ce type de procédé en comparaison du retour d'expérience sur ce type d'installation. Deux explications sont possibles, tout d'abord la perméabilité du lit est trop faible pour le cas avec réactions chimiques hétérogènes productrices de gaz d'où le niveau de surpression obtenu. Il faudra modifier ce terme afin d'avoir une perte de charge plus faible, de l'ordre de 500 MPa. La seconde possibilité vient de la quantité d'air injectée sous le lit qui serait trop importante. Toutefois, il semble difficile d'envisager toute diminution du débit d'air injecté qui entraînerait une modification du rapport stœchiométrique.

Les profils de fraction massique de phase (cf. Figure 56) apportent de nouvelles informations sur le lit de déchets. On constate alors que la fraction volumique pour les cendres inertes n'évolue ni dans l'espace ni dans le temps, sa fraction massique prend une part de plus en plus importante au sein du lit du fait de la dégradation de la matière organique et du Char. Ainsi, la partie inférieure droite du lit est composée uniquement de cendres inertes et de gaz. Enfin, alors que la fraction volumique de gaz est de plus en plus importante en bout de lit, on observe cependant que d'un point de vue massique son « poids » est négligeable au regard des autres phases en présence.

Si l'on s'intéresse à une approche plus procédée, les deux informations concernant le PCI du Syngaz sortant ainsi que le taux d'imbrûlés en fin de processus sont proposées au Tableau 12.

Paramètre	Valeur
PCI du Syngaz	4,681 MJ.kg <sup>-1</sup>
Taux d'imbrûlés	70,6%

**Tableau 12 : PCI du Syngaz et taux d'imbrûlés en régime permanent pour la simulation 1**

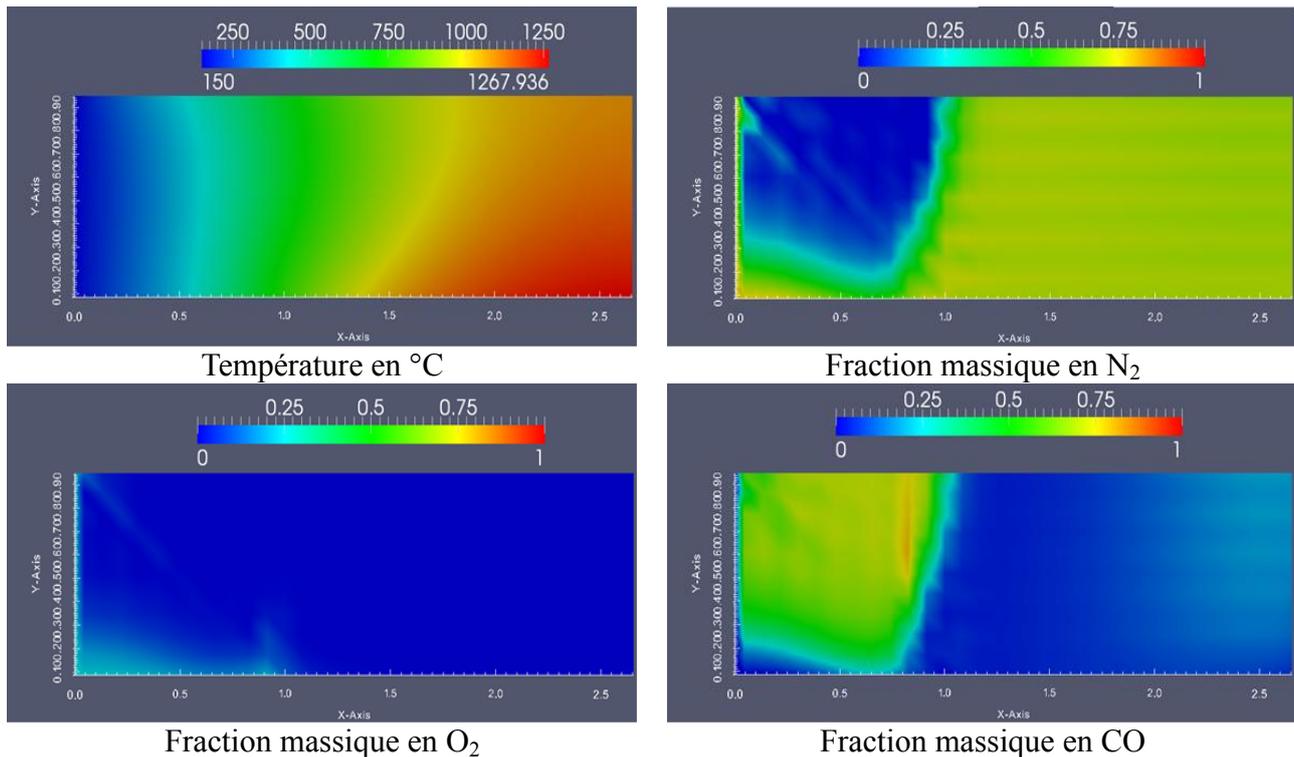
On constate qu'avec les données opératoires choisies pour cette simulation, on obtient un PCI moyen du Syngaz de 4,7 MJ.kg<sup>-1</sup> et un taux moyen d'imbrûlés de plus de 70,6% en sortie de procédé. Le PCI est relativement faible pour ce type de procédé, il est possible d'expliquer cela par le fort taux d'imbrûlés. Ce taux élevé est très loin des normes législatives en vigueur qui imposent un taux inférieur à 5% d'imbrûlés dans les mâchefers en sortie de procédé. Plusieurs pistes sont possibles pour expliquer ce taux, tout d'abord au niveau de l'air de gazéification et ensuite au niveau des paramètres internes de caractérisation du lit de déchets. Pour l'air de gazéification, la principale interrogation est de savoir si cet air fournit suffisamment d'énergie au lit de déchet pour permettre de gazéifier la quasi-totalité du Char produit par la pyrolyse. Afin de pouvoir répondre à cette interrogation, de nouvelles simulations en modifiant les paramètres opératoires seront

nécessaires. De plus, dans les simulations actuelles, la modélisation du flux radiatif de chaleur via les conditions aux limites au niveau de la surface supérieure ne nous permet pas de connaître précisément la valeur réelle de celui-ci. La seconde voie est la caractérisation du milieu interne. Le lit de déchets n'est pas parfaitement caractérisé et des expérimentations afin d'obtenir les paramètres internes du lit (perméabilité, conductivité thermique, etc...) sont nécessaires avant de pouvoir statuer sur la capacité du code de calcul à décrire correctement le procédé CHO-Power.

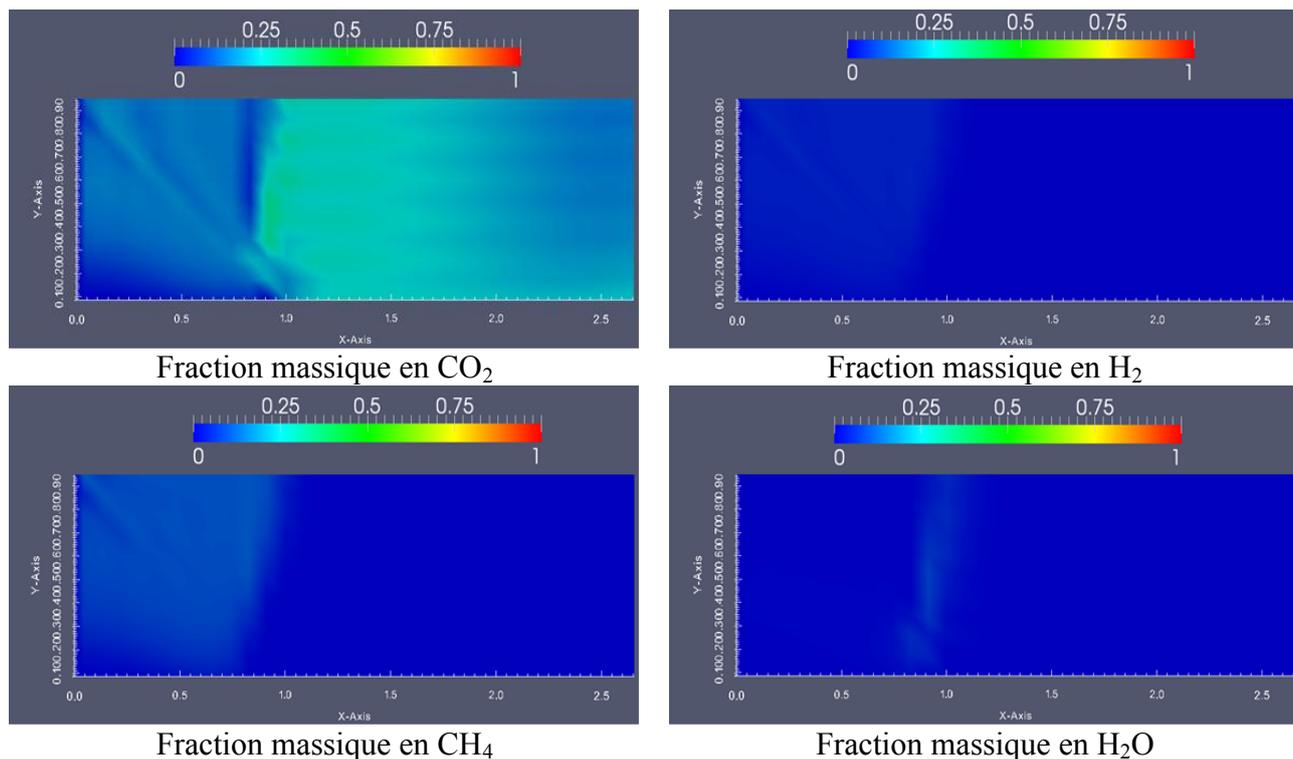
### III.3.3.b Simulation 2 : 7 % de l'apport stœchiométrique

Dans cette simulation, les paramètres opératoires sont les mêmes que pour la simulation 1 à l'exception de l'apport stœchiométrique qui est ici de l'ordre de 7%. Cette valeur, correspondant à une division du débit par environ 3, est choisie de façon à observer l'influence de ce paramètre sur l'amplitude des oscillations ainsi que sur la physique du procédé.

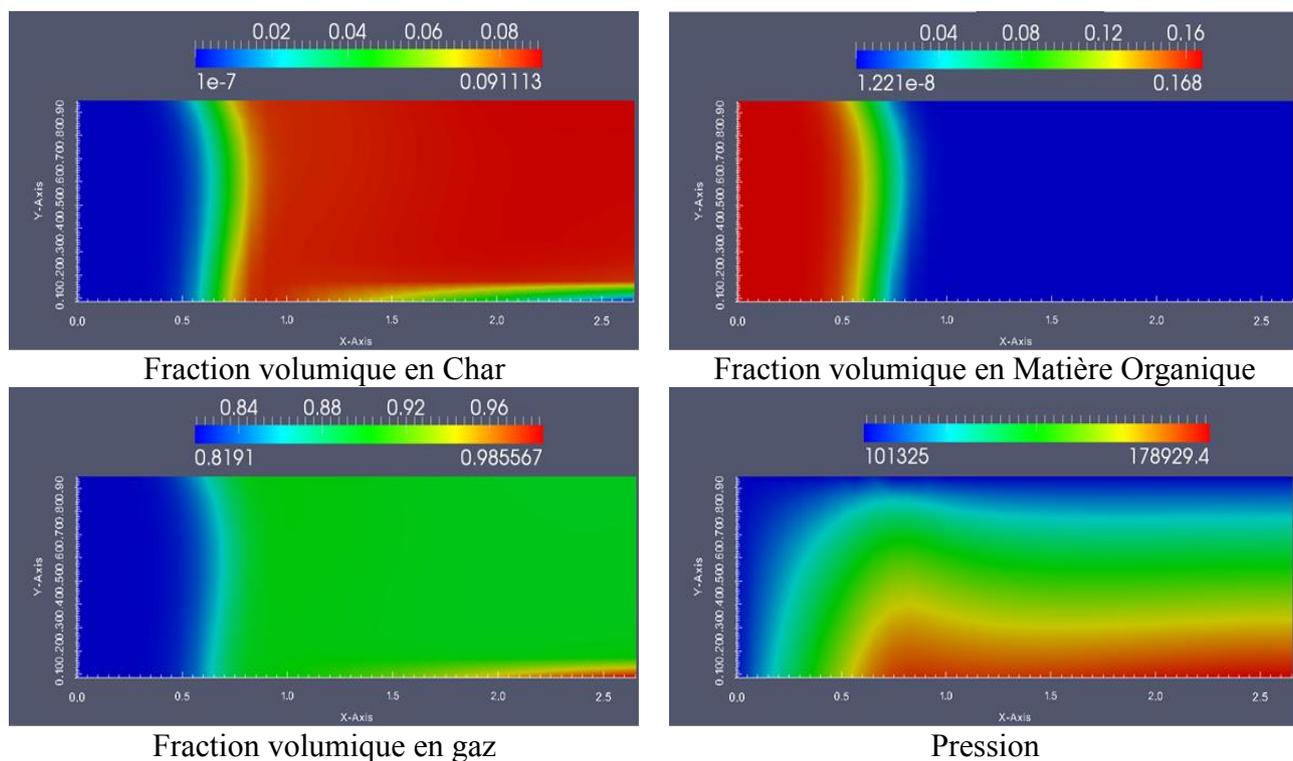
Les profils obtenus pour le régime permanent dans le cas d'un apport stœchiométrique de 7% par l'air de gazéification sont décrits sur les figures ci-dessous (cf. Figure 58 et Figure 59).



CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe



**Figure 58 : Profils de température et de fractions massiques pour la simulation 2 en régime stationnaire**

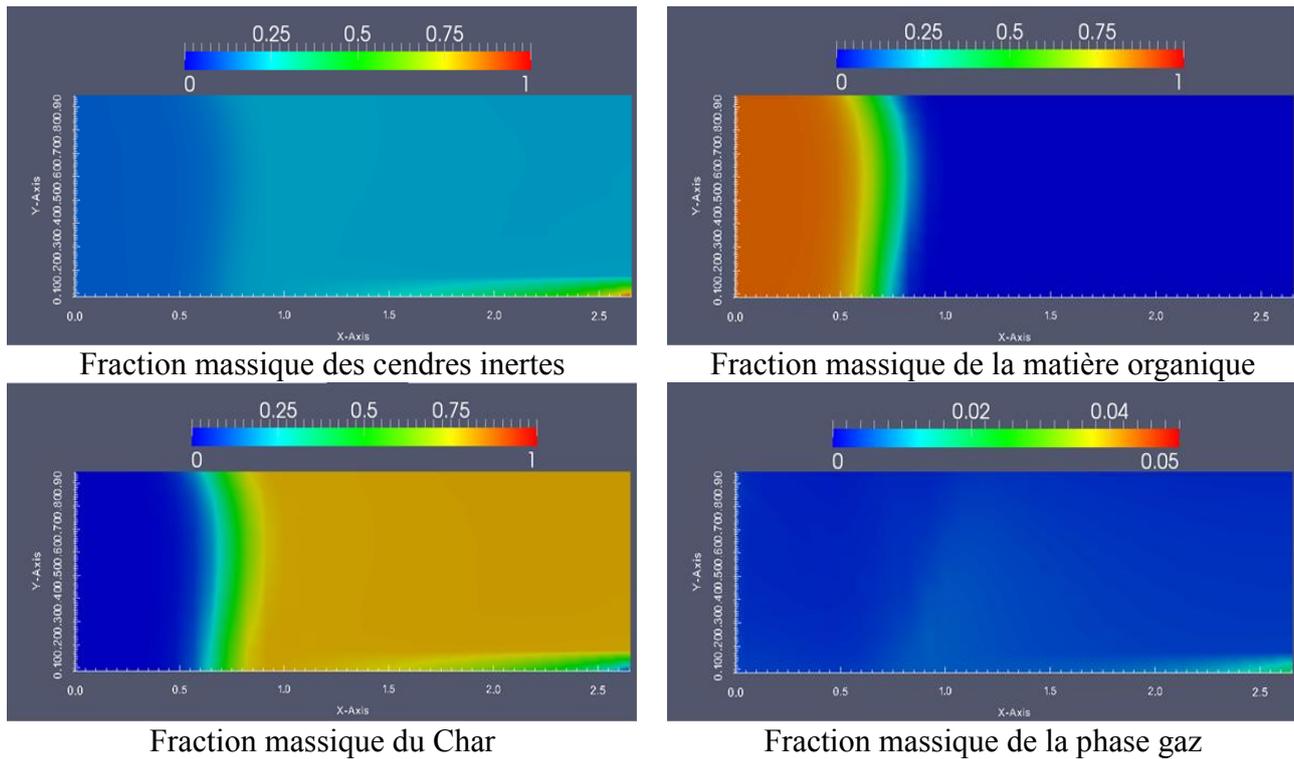


**Figure 59 : Profils de pression et de fractions volumiques de phase pour la simulation 2 en régime stationnaire**

Représentons également les fractions massiques de phase (cf. Figure 60) afin de pouvoir comparer

### CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe

les deux simulations en ces termes une fois le régime stationnaire atteint.



**Figure 60 : Profils de la répartition en masse des différentes phases pour la simulation 1 en régime permanent**

L'observation des profils de la simulation à 7% d'apport stœchiométrique ci-dessus (Figure 58, Figure 59 et Figure 60) et leur comparaison à ceux de la simulation 22,8% de la stœchiométrie, nous permet de proposer l'analyse suivante.

Dans un premier temps, on s'aperçoit que les trois zones décrites pour la simulation 1 sont également présentes pour cette nouvelle simulation.

- De  $x=0$  m à  $x=0,75$  m, se trouve la zone de pyrolyse de la matière organique avec production de Char et du mélange gazeux composé de dioxyde et monoxyde de carbone, de dihydrogène, de méthane. L'oxydation de ces gaz entraîne également une production de vapeur d'eau. On constate que cette zone prend une forme différente ici que pour la simulation type CHO-Power. Ceci vient du fait que le débit d'air de gazéification a été divisé par trois entre les deux simulations changeant ainsi l'aéraulique au sein du lit de déchets. De plus, cette zone est beaucoup plus volumineuse du fait de la diminution du niveau thermique dans celle-ci. Cette diminution de la température provient du fait que l'apport de chaleur sensible a également été divisé par trois, ce qui entraîne une augmentation de la taille de la zone nécessaire pour pyrolyser la matière organique entrante. Les teneurs en espèces gazeuses produites sont plus importantes dans cette simulation, mais

### CHAPITRE III : Application à la simulation d'un gazéifieur à lit fixe

cela est imputable à une dilution des gaz moins forte puisque la quantité d'air injecté est plus faible.

- De  $x=0,75$  m à  $x=1,6$  m, on assiste à la combustion partielle du Char produit par pyrolyse. Cette zone est plus grande que lors de la simulation précédente du fait de niveau thermique plus faible. Dans cette zone, on aperçoit la production de dioxyde et monoxyde de carbone en quantité beaucoup plus faible que dans la simulation type CHO-Power ce qui est en accord avec la diminution du débit d'air de gazéification.
- De  $x=1,6$  m à  $x=2,698$  m a lieu la gazéification du Char par le dioxyde de carbone produit par la combustion partielle ayant lieu dans la zone proche de la surface inférieure. Encore une fois, on constate que les phénomènes en présence sont beaucoup moins forts dans cette simulation que dans la simulation type CHO-Power. L'explication est toujours liée à la diminution du débit d'air injecté sous le lit de déchets.

Au regard des profils obtenus, on s'aperçoit que le comportement du code de calcul est en adéquation avec une diminution du débit d'air injecté. De plus, l'amplitude des oscillations sur les valeurs des fractions massiques en espèces gazeuses est atténuée au sein des différentes zones présentes dans le lit de déchets.

Il est également important de s'intéresser au taux d'imbrûlés en sortie de procédé ainsi qu'au PCI du Syngaz produit afin de pouvoir comparer intégralement les deux simulations. Le Tableau 13 présente les valeurs obtenues pour la simulation 2 avec un rapport stœchiométrique de 7%.

Paramètre	Valeur
PCI du Syngaz	6,615 MJ.kg <sup>-1</sup>
Taux d'imbrûlés	79,1%

**Tableau 13 : PCI du Syngaz et taux d'imbrûlés en régime permanent pour la simulation 2**

En comparant le Tableau 12 et le Tableau 13, on constate que pour la simulation 2 le PCI du gaz sortant est plus important que pour la simulation 1 malgré un taux d'imbrûlés supérieur pour la simulation 2. Ce taux d'imbrûlés plus élevé provient de la diminution de la quantité d'air injecté permettant la combustion partielle du Char et consécutivement sa gazéification. L'augmentation du PCI s'explique alors par le fait que la diminution du débit d'air s'accompagne d'une diminution de l'effet de dilution des gaz produits. De plus, moins d'air injecté implique également moins d'oxydation des constituants gazeux produits et donc de plus grandes teneurs en gaz potentiellement oxydables. Ces deux mécanismes sont à l'origine de l'augmentation du PCI du Syngaz.

L'analyse des résultats de cette simulation a montré que les résultats évoluaient de façon cohérente avec la diminution du débit d'air de gazéification, et ce tout en respectant la physique du procédé.

### ***III.4 Conclusion***

En conclusion, l'analyse des trois simulations réalisées a permis de mettre en lumière un certain nombre de points. Tout d'abord, l'initialisation joue un rôle prépondérant dans le chemin de convergence vers la solution traduisant le fonctionnement stationnaire de l'installation et un soin tout particulier doit être apporté à celle-ci. Ensuite, les oscillations rencontrées au cours des simulations sont un obstacle majeur dans l'aboutissement des simulations et semblent provenir de l'écriture des conditions aux limites sur la surface supérieure. Ce point de modélisation décrit dans la partie III.1.2.c mériterait d'être approfondi. Enfin, ce chapitre a également montré la capacité du code de calcul à fournir des résultats de simulations pour le procédé CHO-Power : pour des conditions de simulations moins intenses (débit d'air de gazéification divisé par trois), on observe une nette atténuation des oscillations numériques et des résultats cohérents avec la physique du processus de gazéification.

***Références Bibliographiques :***

**Chelliah et al.**, 1996, Modeling of graphite oxidation in a stagnation-point flow field using detailed homogeneous and semi global heterogeneous mechanisms with comparison to experiments. *Combustion and Flame*, 104, 469-480.

**Cooper, J. & Hallett, W.L.H.**, 2000, A Numerical Model for Packed-Bed Combustion of Char Particles, *Chemical Engineering Science*, 55, 4451-4460.

**Couture F.**, 1995, Modélisation fine d'un problème de séchage, développement d'outils adaptés, Thèse, Université de Bordeaux I, France.

**Erriguible A.**, 2004, Modélisation des transferts à l'interface d'un milieu multiphasique et de son environnement, thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France.

**Jess A.**, 1996, Mechanisms and kinetics of thermal reactions of aromatic hydrocarbons from pyrolysis of solid fuels, *Fuel*, 75, 1441-1448.

**Marias F., Roustan H., Pichat A.**, 2005, Modeling of a rotary kiln for the pyrolysis of aluminium waste, *Chemical Engineering Science*, 60, 4609-4622.

**Menard Y.**, 2003, Modélisation de l'incinération sur grille d'ordures ménagères et approche thermodynamique du comportement des métaux lourds, Thèse, Institut polytechnique de Lorraine.

**Nozahic F.**, 2008, Production de gaz de synthèse par interactions à haute température du gaz, des goudrons et du résidu carboné issus de la pyrolyse de biomasses, Thèse, Université de Toulouse.

**Petersen I., Werther J.**, 2005, Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed, *Chemical Engineering and Processing*, 44, 717-736.

**Porras Rey G.O.**, 2005, Modélisation des phénomènes de transport en milieu diphasique déformable (solide-liquide binaire) : simulation 2D du séchage convectif, Thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France.

**Ratte J.**, 2009, Modélisation d'un réacteur de pyrolyse lente de bois pollué, Thèse, Université de Pau et des Pays de l'Adour, France.

**Treybal R.**, 1980, Mass transfer operations, Mc-Graw-Hill chemical engineering series, third edition.

**Turns S.R.**, 1996, An Introduction to Combustion, Concepts and applications.



## **Conclusion et Perspectives**



## Conclusion et Perspectives

Un modèle décrivant les transports de masse, de quantité de mouvement et d'énergie en milieu poreux réactif multiconstituant est développé dans ce document. Il est appliqué à la gazéification sur grille dans le cadre du projet CHO-Power dans le but de produire un Syngaz riche en monoxyde de carbone et en dihydrogène à partir d'un mélange de biomasse et de refus de tri de déchets. L'objectif de ce travail de thèse était d'élaborer un outil numérique pour l'optimisation d'une unité industrielle de gazéification et la compréhension de l'ensemble des phénomènes physico-chimiques se produisant lors de la gazéification du lit de déchets. Dans cette optique, ce manuscrit s'articule autour de trois axes majeurs qui sont identifiés par les différents chapitres du document.

Le premier chapitre introductif permet de présenter les enjeux du traitement des déchets et la place potentielle occupée par la gazéification. Les descriptions rapides des différentes filières de traitement, et plus approfondies pour la gazéification, montrent les avantages du procédé CHO-Power par rapport aux autres procédés de traitement des déchets. Enfin, l'état des lieux des différents types de modèle existant dans la littérature met en lumière le caractère novateur de ce travail dans l'approche de type milieu poreux choisie pour la modélisation du lit de déchets.

Dans le second chapitre, le lit est assimilé à un milieu multiphasique, chaque phase étant supposée continue. Les phénomènes de transport au sein de chacune des phases sont modélisés via l'écriture des équations classiques de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Ensuite, les habituelles conditions aux limites des milieux continus (continuité des vitesses tangentielles, des contraintes, des températures et des flux massiques et de chaleur) font le lien entre les différentes phases. Les principales spécificités par rapport à la littérature sont les prises en compte de la diffusion de la matière et de la conduction de la chaleur. Enfin, un changement d'échelle par prise de moyenne volumique des équations afin de se ramener à un milieu homogène équivalent est effectué afin de permettre le passage à la simulation.

Le troisième chapitre consacré à la résolution numérique du modèle, débute par l'écriture de conditions aux limites et initiales propres au gazéifieur auto-thermique à lit fixe du procédé CHO-Power. Ici se situe la principale faiblesse du modèle sur lequel le code est actuellement basé. La prise en compte de la diffusion et de la conduction dans les équations de conservations conduit à un système d'équations aux dérivées partielles d'ordre deux, imposant autant de conditions à la sortie syngaz du lit que d'équations. Ne disposant raisonnablement que d'une seule relation, (la continuité des pressions en supposant toutefois la pression du gaz environnant connue), des hypothèses sont émises pour fermer le problème. Ces hypothèses se sont révélées fortes et leur levée constitue une

## Conclusion et Perspectives

des principales perspectives à ce travail. Ensuite, le choix des inconnues indépendantes pour la résolution et l'expression des gradients moteurs des phénomènes de transport en fonction des variables choisies conduit à un système équivalent développé uniquement en fonction de ces inconnues. Le système d'équations linéaires discrétisées est résolu par la méthode de Gauss-Seidel par bloc. Cette résolution est améliorée à l'aide de quelques aménagements numériques tels que l'adimensionnement des équations, la gestion du pas de temps et de la disparition des espèces. L'analyse des résultats obtenus a permis de mettre en lumière trois points majeurs dans la simulation du procédé de gazéification CHO-Power. Tout d'abord, la nécessité d'une initialisation proche de la solution finale afin de limiter l'apparition d'oscillations très pénalisantes pour l'obtention des résultats. Le second point est l'obligation de bien modéliser les conditions aux limites pour notre système toujours dans la finalité d'obtenir les résultats les moins bruités possible.

### *Perspectives*

Au vu du travail réalisé et des résultats obtenus, plusieurs perspectives, à la fois sur les plans numériques, théoriques et expérimentaux, sont à envisager. Elles sont ici listées dans l'ordre de priorité.

#### **1. Modélisation des conditions aux limites**

Une simulation bidimensionnelle réaliste en conservant la diffusion de la matière et la conduction de la chaleur dans la description des transports internes impose une amélioration de la description des transferts à l'interface entre le lit poreux et le milieu environnant dans lequel le Syngaz est évacué.

La solution se trouve dans la résolution simultanée des équations de conservation descriptives des phénomènes au sein de l'environnement et de celles associées au milieu poreux. Pratiquement, il s'agit de coupler le « code poreux » à un code de type « mécanique des fluides », liés par un jeu de conditions aux limites, en suivant par exemple la démarche itérative suivante.

Résolution des équations de transports internes au lit poreux avec pour conditions aux limites à la sortie Syngaz la continuité des flux de matières et de chaleur, connus dans l'environnement.

Résolution des équations de transport au sein de l'environnement fluide avec pour conditions aux limites à la sortie Syngaz la continuité des concentrations massiques, de la température et de la vitesse du gaz, connue au sein du poreux.

Cette technique sera néanmoins coûteuse en temps de calcul, surtout dans un cas transitoire. Les

## Conclusion et Perspectives

deux codes devront être numériquement optimaux et les moyens de calcul conséquents.

Préalablement, il serait judicieux de vérifier la pertinence de la résolution numérique coté « poreux » en éliminant du modèle actuel la diffusion et la conduction afin de se ramener à un système composé d'une seule équation d'ordre deux (équation d'un des constituants intégrant la loi de Darcy) et d'équations d'ordre un. Ainsi, une seule condition à la sortie Syngaz suffirait, sans doute la continuité des pressions.

### 2. Prise en compte de la phase liquide

Il s'est avéré lors des premières simulations que le traitement de l'eau sous forme vapeur grâce à l'égalité des potentiels chimiques tel qu'il est prévu dans le modèle n'est pas adapté aux niveaux thermiques de la gazéification. En effet, l'eau sous forme liquide disparaît du milieu au cours du procédé. Consécutivement l'écriture de l'équilibre chimique de l'espèce eau dans ses deux états n'a plus aucun sens physique dès lors qu'un des deux états disparaît. La vapeur d'eau doit alors être traitée comme n'importe quel autre constituant gazeux. De plus, dans le cas où la température critique serait atteinte, la phase liquide étant encore présente, les corrélations permettant le calcul de la vapeur saturante sortiraient de leurs domaines de validité.

La difficulté consiste à gérer la disparition locale d'une variable indépendante, la moyenne de la masse volumique de l'eau liquide et de l'équation aux dérivées partielles qui la gère, puis l'apparition locale d'une nouvelle variable indépendante, la concentration massique de l'eau espèce gaz et de l'équation qui la gère. Pour obtenir les résultats exposés dans le document, la difficulté a été contournée en ignorant la phase de séchage, i.e. la présence d'eau liquide.

La solution consiste à associer à l'eau une unique variable indépendante  $X$  dont les évolutions sont gérées par une unique équation aux dérivées partielles. Tant que l'eau liquide est présente, la variable indépendante  $X$  désigne la moyenne de la masse volumique de l'eau liquide, l'équation aux dérivées partielles est la somme des équations de conservation de la masse de l'eau liquide et de l'eau vapeur (III-113), la moyenne de la concentration massique de l'eau vapeur étant une fonction des variables indépendantes via l'équilibre thermodynamique locale. Lorsque l'eau libre disparaît, la variable indépendante  $X$  devient la moyenne de la concentration massique de l'eau vapeur, l'équation aux dérivées partielles est la conservation de la masse d'eau vapeur dont le format est similaire à celui donné par (III-115). L'évolution de l'équation aux dérivées partielles est gérée par la valeur allouée aux coefficients «  $\underline{\alpha}$  et  $\beta$  » intervenant dans sa forme développée par rapport aux variables indépendantes.

### **3. Caractérisation du lit de déchets**

Le lit de déchets est un ensemble constitué d'une multitude de composants comme des plastiques, des cartons, du bois, des matériaux inertes et des matières dégradables. Les simulations du procédé proposées dans le document reposent sur des paramètres de transport internes issus de la littérature, mais non spécifiques au déchet alimentant le procédé CHO-Power. Par exemple, la conductivité thermique du lit est déterminée en sommant celles des phases pondérées par les fractions volumiques. La connaissance des propriétés internes, telles que la conductivité thermique effective, la perméabilité, les viscosités dynamiques ou encore les coefficients de diffusion effectifs, nécessite une caractérisation expérimentale à partir d'un déchet « type ». Ces expérimentations permettront ainsi d'alimenter le code de calcul avec des paramètres physiques représentatifs.

Il sera également nécessaire de caractériser, avec grande précision, les données relatives à la pyrolyse des déchets utilisés dans le procédé. En effet, des cinétiques issues de la littérature ont été utilisées dans ce travail. Pour autant, elles ne permettent pas de représenter la spécificité de l'entrant du procédé CHO-Power. Cette donnée est pourtant fondamentale puisqu'elle devrait nous permettre d'estimer la production des goudrons dans le gazéifieur dont la teneur est stratégique pour le procédé et qui doivent être abattus dans le réacteur Turboplasma situé directement en aval du réacteur de gazéification.

### **4. Validation expérimentale**

En dernier lieu, une des perspectives à mettre en œuvre est la validation expérimentale du modèle et du code de calcul. Ces derniers permettent la simulation numérique du procédé CHO-Power, unité industrielle qui est maintenant construite et dont le démarrage est imminent. Ainsi, une confrontation du code avec la réalité industrielle sera alors possible afin de valider ce travail de thèse. On pourra donc vérifier les niveaux de température et de pression atteints dans le lit ainsi que la composition de ce dernier en fin de gazéification.

## **ANNEXES**



## ANNEXE I : Mise en équations du modèle d'équilibre

Afin de mieux comprendre la mise en équations du système, il convient de définir les différentes notations usitées dans la suite de cette section.

Pour le déchet entrant, on définit alors :

Le débit massique de déchet entrant :  $\dot{m}^0$

La température du déchet entrant :  $T^0$

La composition massique du déchet entrant en inorganiques (INO), matière organique (MO) et humidité :  $y_{INO}^0, y_{MO}^0, y_{H_2O}^0$ . ( Ceci correspond à l'analyse proche du déchet.)

La composition atomique massique de la matière organique en carbone, hydrogène, oxygène, azote, soufre et chlore :  $y_C^{MO,0}, y_H^{MO,0}, y_O^{MO,0}, y_N^{MO,0}, y_S^{MO,0}, y_{Cl}^{MO,0}$ . ( Ceci représente l'analyse ultime de la matière organique.)

Le pouvoir calorifique inférieur du déchet brut entrant:  $PCI^0$

Pour le gaz de séchage, on a :

Le débit massique de déchet entrant :  $\dot{m}^1$

La température du déchet entrant :  $T^1$

La composition massique du gaz entrant dans le sécheur, où  $k$  représente les différentes espèces prise en compte dans le modèle:  $y_k^1$

Pour l'agent de gazéification, on a :

Le débit massique de déchet entrant :  $\dot{m}^4$

La température du déchet entrant :  $T^4$

La composition massique du gaz entrant dans le gazéifieur, où  $k$  représente les différentes espèces prise en compte dans le modèle:  $y_k^4$

La résolution du modèle permet de caractériser l'ensemble des flux gazeux et solide sortant du sécheur et du gazéifieur. Les données fournies par le modèle après résolution sont :

La caractérisation du gaz sortant du sécheur (débit massique  $\dot{m}^2$  , composition  $y_k^2$  et température  $T^2$ ).

La caractérisation du déchet sortant de l'étape de séchage (débit massique  $\dot{m}^3$  , analyse proche du déchet  $y_{INO}^3, y_{MO}^3, y_{H_2O}^3$ , l'analyse ultime de la matière organique  $y_C^{MO,3}, y_H^{MO,3}, y_O^{MO,3}, y_N^{MO,3}, y_S^{MO,3}, y_{Cl}^{MO,3}$  et température  $T^3$ ).

La caractérisation du gaz sortant du gazéifieur, le syngaz (débit massique  $\dot{m}^5$  , composition

$y_k^5$  et température  $T^5$ ).

La caractérisation du résidu solide sortant de l'étape de gazéification (débit massique  $\dot{m}^6$ , analyse proche du résidu solide  $y_{INO}^6, y_{MO}^6, y_{H_2O}^6$ , l'analyse ultime de la matière organique résiduelle  $y_C^{MO,6}, y_H^{MO,6}, y_O^{MO,6}, y_N^{MO,6}, y_S^{MO,6}, y_{Cl}^{MO,6}$  et température  $T^6$ .

Tous ces résultats se basent sur un certain nombre d'hypothèses que nous allons énumérer maintenant.

### ❖ Les hypothèses du modèle

L'écriture et la résolution du modèle d'équilibre thermodynamique ne sont possibles que sous certaines hypothèses. Ces hypothèses sont présentées ici. Tout d'abord les hypothèses communes à l'ensemble du système sont décrites puis les hypothèses spécifiques au séchage et à la gazéification sont présentées séparément.

#### • **Les hypothèses générales**

La première hypothèse est relative au mode de fonctionnement du dispositif représenté. Pour la suite, on supposera que :

Heq1 : Le système fonctionne en régime stationnaire.

La deuxième hypothèse à émettre est relative à la matière inorganique initialement présente dans le déchet. Dans tout ce qui suit, on supposera que :

Heq2 : La matière inorganique est inerte chimiquement dans tout le système. Le débit massique initialement introduit à l'entrée du dispositif est intégralement retrouvé en sortie de dispositif (hypothèse Heq1).

La troisième hypothèse est relative à l'eau d'humidité initialement contenue dans le déchet. Dans ce qui suit on supposera que:

Heq3 : Toute l'eau d'humidité présente initialement dans le déchet est sous la forme d'eau libre. Le coût énergétique associé à sa vaporisation ne prend pas en compte de désorption potentielle de l'eau liée au matériau.

La quatrième hypothèse est liée à la valeur de la pression de travail régnant dans le système. Dans tout ce qui suit, on supposera que:

Heq4 : La pression de travail est fixée à la pression atmosphérique  $P_0=101325$  Pa.

La cinquième hypothèse est relative à la description thermodynamique du système gazeux, présent dans le séchoir et/ou dans le gazéifieur. Compte tenu de la valeur de la pression régnant dans le système, on supposera que :

Heq5 : Le mélange gazeux est un mélange idéal de gaz parfaits.

La sixième hypothèse utilisée est inhérente au mode de représentation retenu pour chacun des deux

étages. Dans ce qui suit, on supposera que :

Heq6 : Les étages de séchage et de gazéification sont représentés par des réacteurs parfaitement agités. Les différentes propriétés (température, composition, ...) sont donc uniformes dans chacune de ces enceintes.

La septième hypothèse est relative aux espèces chimiques gazeuses prises en compte dans le système. Dans la réalité, la gazéification de la matière organique entraîne la production de gaz permanents, de goudrons et de char. Néanmoins, ce modèle basé sur l'équilibre thermodynamique locale ne prend pas en compte la modélisation des goudrons en accord avec les hypothèses énoncées par Prins et al. (2007). On suppose également que l'ensemble du chlore présent initialement dans le déchet se retrouve sous forme HCl et l'azote sous forme d'HCN. Pour le soufre, il est relâché dans les gaz sous forme H<sub>2</sub>S qui peut ensuite être oxydé en SO<sub>2</sub>. On supposera dans tout ce qui suit que :

Heq7 : Les espèces chimiques prises en compte dans le système sont au nombre de NS=11. (O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, HCN, HCl, SO<sub>2</sub>).

Les hypothèses communes étant maintenant décrites, une présentation des hypothèses spécifiques est alors proposée.

- **Les hypothèses du séchage**

Du fait des faibles températures régnant dans l'enceinte de séchage (Air de séchage à environ 200°C), on supposera que la gazéification de la matière organique ne peut pas avoir lieu, soit :

Heq8 : La composition de la matière organique n'est pas affectée par l'étage de séchage.

Afin de quantifier la quantité d'eau (initialement présente dans le déchet) évaporée, il est impératif d'imposer la limite associée à la pression de vapeur saturante de l'eau en phase gaz. Aussi, dans ce qui suit, on supposera que :

Heq9 : La teneur maximale en eau (sous forme vapeur) contenue dans le gaz quittant l'étage de séchage est égale à la teneur à saturation à la température de sortie de cet étage. Aussi, l'évaporation totale de l'humidité initiale du déchet ne sera possible que si cette évaporation conduit à une teneur en eau (vapeur) dans le gaz inférieure à la saturation. Dans le cas contraire, seule une fraction de l'eau d'humidité sera effectivement vaporisée (séchage partiel de la charge).

- **Les hypothèses de la gazéification**

La première hypothèse associée à cet étage est inhérente à la gazéification de la matière organique et de l'eau de séchage éventuellement présente après l'étage de séchage. Ainsi, dans ce qui suit, on supposera que:

Heq10 : L'intégralité de l'eau d'humidité présente à l'entrée de l'étage de gazéification, ainsi

que l'intégralité des éléments constitutifs de la matière organique (H,O,N,S,Cl) à l'exception du carbone solide (pour lequel seul une fraction pourra être gazéifiée) quitteront l'étage de gazéification sous forme de gaz.

La deuxième hypothèse requise pour calculer la composition des flux solides et gazeux quittant l'étage de gazéification est associée au régime de fonctionnement de cet étage. On supposera par la suite que :

Heq11 : Les compositions du gaz et du solide quittant l'étage de gazéification répondent au critère d'équilibre chimique du gaz en équilibre avec la fraction résiduelle de carbone solide dans le déchet (celle-ci pouvant être nulle).

La dernière hypothèse requise pour l'établissement du modèle de gazéifieur est inhérente à l'espèce  $N_2$ , potentiellement présente dans l'agent de gazéification. En effet, la température à l'intérieur de l'enceinte de gazéification est inférieure à  $1200^\circ C$  et dans ce cas, la présence de NO thermique est inconcevable. Dans ce qui suit, on supposera que :

Heq12 : Le diazote entrant dans le gazéifieur par le biais de l'agent de gazéification traverse l'installation sans réaction. Il se retrouve donc intégralement sous forme de diazote dans le gaz quittant le gazéifieur.

### ❖ Modélisation mathématique du système

Cette partie est dédiée à l'écriture des différentes équations mathématiques régissant le fonctionnement du système compte tenu du jeu d'hypothèses précédemment établies. La première partie se focalisera sur la description de l'énergie contenue dans le solide et dans le gaz. Les deuxième et troisième parties traiteront respectivement des équations utilisées pour représenter l'étage de séchage et de gazéification.

#### • **Calcul de l'enthalpie des constituants**

Que ce soit dans l'étage de séchage ou dans l'étage de gazéification, trois phases sont potentiellement en présence. On peut en effet avoir coexistence de la phase solide (composée de matière organique et de matière inorganique) de la phase liquide (eau d'humidité) et de la phase gazeuse. Afin de pouvoir résoudre les bilans d'énergie sur les étages de séchage et de gazéification, il est impératif que la définition des contenus énergétiques de chacune des phases (enthalpie) soit cohérente du point de vue des réactions chimiques se déroulant dans le système.

Le choix de la référence utilisée pour le calcul de l'enthalpie dans chacune des phases est donc primordial. Afin de franchir de la connaissance des quantités de chaleur associées aux réactions de gazéification, il a donc été décidé de calculer les enthalpies en utilisant comme référence l'enthalpie

de formation des différents constituants à la température de référence et à la pression standard de référence.

Ces grandeurs sont parfaitement tabulées dans le cas des gaz. Aussi, l'expression de l'enthalpie massique du gaz à une localisation donnée est calculée par la relation :

$$h_{gaz}^{loc} = \sum_{k=1}^{Ns} y_k^{gaz} \left( h_{f,k}^{0,gaz}(T) + \int_{T_{ref}}^{T_{loc}} C_{p,k}^{gaz}(T) dT \right) \quad \text{A.I-1}$$

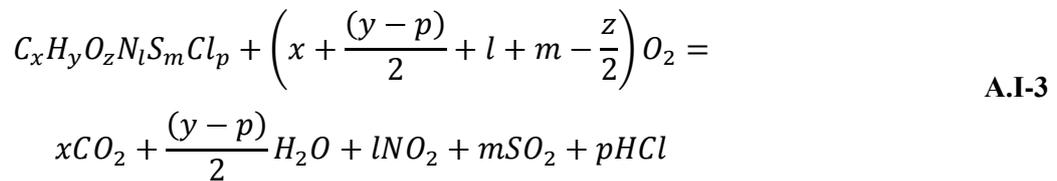
Dans cette dernière expression,  $y_k^{gaz}$  désigne la fraction massique de l'espèce  $k$  dans le mélange gazeux,  $h_{f,k}^{0,gaz}(T)$  désigne l'enthalpie libre standard de formation massique de l'espèce  $k$  gazeuse à la pression standard et à la température de référence tandis que  $C_{p,k}^{gaz}(T)$  désigne la capacité calorifique massique de l'espèce  $k$  à pression constante (donnée sous la forme d'un polynôme de degré 5).

Cette définition étant établie, l'enthalpie massique de l'eau liquide dans le système est calculée par

$$h_{liq}^{loc} = h_{f,H_2O}^{0,gaz}(T_{ref}) - L_{v,H_2O}(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^{T_{loc}} C_{p,H_2O}^{liq}(T) dT \quad \text{A.I-2}$$

où  $L_{v,H_2O}(T_{ref})$  désigne la chaleur massique de vaporisation de l'eau à la température de référence ( $L_{v,H_2O}(T_{ref}) = 2.256 \text{ MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ ) tandis que  $C_{p,H_2O}^{liq}$  désigne la capacité calorifique massique de l'eau liquide (supposé constante,  $C_{p,H_2O}^{liq} = 4180 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ).

Le calcul de l'enthalpie de la matière organique est quelque peu plus complexe, la définition de son enthalpie de formation n'étant pas directement accessible. Le calcul de cette enthalpie de formation se fait donc à partir du pouvoir calorifique inférieur de cette matière organique. Cette méthode provient des travaux de De Souza-Santos (2004). En effet, si on suppose que la matière organique à pour formule chimique molaire  $C_x H_y O_z N_l S_m Cl_p$  son équation de combustion théorique s'écrit



Pour cette réaction, l'enthalpie molaire standard de cette réaction est donnée par :

$$\Delta_r h^0 = xh_{f,CO_2}^{0,gaz} + \frac{(y-p)}{2} h_{f,H_2O}^{0,gaz} + lh_{f,NO_2}^{0,gaz} + mh_{f,SO_2}^{0,gaz} + ph_{f,HCl}^{0,gaz} \quad \text{A.I-4}$$

$$- \left( x + \frac{(y-p)}{2} + l + m - \frac{z}{2} \right) h_{f,O_2}^{0,gaz} - h_{f,MO}^{0,état}$$

où  $h_{f,MO}^{0,état}$  désigne l'enthalpie molaire standard de formation de la matière organique dans son état physique (gaz, liquide, solide) à la température de référence. Le PCI molaire de la matière organique étant par définition l'opposé de l'enthalpie libre molaire de réaction, le calcul de l'enthalpie molaire de formation de la matière organique dans son état physique est possible et découle de la relation :

$$h_{f,MO}^{0,état} = xh_{f,CO_2}^{0,gaz} + \frac{(y-p)}{2}h_{f,H_2O}^{0,gaz} + lh_{f,NO_2}^{0,gaz} + mh_{f,SO_2}^{0,gaz} + ph_{f,HCl}^{0,gaz} - \left( x + \frac{(y-p)}{2} + l + m - \frac{z}{2} \right) h_{f,O_2}^{0,gaz} - PCI_{MO}$$

**A.I-5**

Par ailleurs, connaissant le PCI massique du déchet brut, on déduit le PCI massique de la matière organique par la relation :

$$PCI_{MO} = \frac{PCI^0 + y_{H_2O}^0 L_{v,H_2O}}{1 - y_{H_2O}^0 - y_{INO}^0}$$

**A.I-6**

Les passages respectifs du PCI massique au PCI molaire et de l'enthalpie de formation molaire à l'enthalpie de formation massique se font en utilisant la masse molaire de la matière organique calculée à partir de sa composition.

A une localisation donnée, on peut donc calculer l'enthalpie massique de la matière organique par la relation

$$h_{MO}^{loc} = h_{f,MO}^{0,état}(T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^{T_{loc}} C_{p,MO}^{état}(T) dT$$

**A.I-7**

où  $C_{p,MO}^{état}$  désigne la capacité calorifique massique à pression constante de la matière organique dans son état physique. Elle est supposée constante dans le cadre de ce travail avec une valeur  $C_{p,MO}^{état} = 1000 J.kg^{-1}.K^{-1}$ .

Compte tenu du caractère chimiquement inerte de la matière inorganique (hypothèse Heq2), la valeur de son enthalpie standard de formation n'a pas d'importance. Elle sera supposée nulle dans ce qui suit. Aussi la valeur locale de l'enthalpie de la matière inorganique est donnée par

$$h_{INO}^{loc} = \int_{T_{ref}}^{T_{loc}} C_{p,INO}^{état}(T) dT$$

**A.I-8**

où  $C_{p,INO}^{état}$  désigne la capacité calorifique massique à pression constante de la matière inorganique dans son état physique. Elle est supposée constante dans le cadre de ce travail avec une valeur  $C_{p,INO}^{état} = 1000 J.kg^{-1}.K^{-1}$ .

Compte tenu de ces différentes valeurs, le calcul de l'enthalpie locale du déchet à une localisation donnée se fait par la relation:

$$h_{dech}^{loc} = y_{INO}^{loc} h_{INO}^{loc} + y_{H_2O}^{loc} h_{liq}^{loc} + y_{MO}^{loc} h_{MO}^{loc} \quad \text{A.I-9}$$

• **Modélisation de l'étage de séchage**

L'objectif de la modélisation de cet étage est de pouvoir calculer les NS+13 grandeurs définies au paragraphe I.2.1.a ( $\dot{m}^2, y_k^2, T^2, \dot{m}^3, T^3, y_{INO}^3, y_{MO}^3, y_{H_2O}^3, y_C^{MO,3}, y_H^{MO,3}, y_O^{MO,3}, y_N^{MO,3}$  et  $y_S^{MO,3}$ ), où NS désigne le nombre total d'espèces gazeuses prises en compte (NS=11 d'après Heq7). Ce paragraphe a donc pour objet de définir les équations donnant accès à ces grandeurs.

On utilise tout d'abord l'hypothèse Heq2 pour écrire mathématiquement la conservation de la matière inorganique entre l'entrée et la sortie du sécheur:

$$\dot{m}^0 y_{INO}^0 = \dot{m}^3 y_{INO}^3 \quad \text{A.I-10}$$

Compte tenu de l'hypothèse Heq6, il y a égalités des températures entre le solide et le gaz quittant l'étage:

$$T^2 = T^3 \quad \text{A.I-11}$$

On utilise ensuite l'hypothèse Heq8 pour le calcul de la composition de la matière organique en sortie de sécheur:

$$y_j^{MO,0} = y_j^{MO,3} \quad \text{pour } j = C, H, O, N, S, Cl \quad \text{A.I-12}$$

Cette hypothèse d'inertie chimique de la matière organique dans l'étage de séchage nous permet également d'écrire:

$$\dot{m}^0 y_{MO}^0 = \dot{m}^3 y_{MO}^3 \quad \text{A.I-13}$$

L'utilisation de l'hypothèse Heq9 nous permet de calculer la teneur résiduelle en eau dans le déchet quittant l'étage de gazéification. Pour ce faire, on calcule tout d'abord une fraction massique fictive en eau dans le gaz quittant le sécheur, correspondant à l'évaporation totale de l'eau contenue dans le déchet. Appelons  $y_{H_2O}^{max,2}$  cette fraction calculée en effectuant un bilan sur l'espèce eau dans le séchoir:

$$\dot{m}^2 y_{H_2O}^{max,2} = \dot{m}^0 y_{H_2O}^0 + \dot{m}^1 y_{H_2O}^1 \quad \text{A.I-14}$$

Par ailleurs, en utilisant la relation permettant de calculer la pression de vapeur saturante de l'eau à la température de sortie du gazéifieur, on calcule la fraction massique en eau à saturation dans le gaz quittant le sécheur :

$$y_{H_2O}^{sat,2} = \frac{P_{H_2O}^{sat}(T'^2) M_{H_2O}}{RT'^2 \rho'^2} \quad \text{A.I-15}$$

où  $\rho'^2$  représente la masse volumique du gaz sortant du sécheur. L'exposant <sup>2</sup> caractérise la sortie du sécheur.

On a deux cas de figures possibles :

- $y_{H_2O}^{sat,2} > y_{H_2O}^{max,2}$  le gaz sortant du sécheur n'est pas saturé en eau.

Cela signifie que le séchage du déchet est complet, ce qui se traduit par un déchet entièrement sec soit

$$y_{H_2O}^3 = 0 \quad \text{A.I-16}$$

et toute l'eau présente initialement dans le déchet se trouve dans le gaz

$$y_{H_2O}^2 = y_{H_2O}^{max,2} \quad \text{A.I-17}$$

- $y_{H_2O}^{sat,2} \leq y_{H_2O}^{max,2}$  le gaz sortant du sécheur est saturé en eau.

Dans ce cas le séchage incomplet du déchet, se traduit par :

$$y_{H_2O}^3 = \frac{\dot{m}^0 y_{H_2O}^0 + \dot{m}^1 y_{H_2O}^1 - \dot{m}^2 y_{H_2O}^{sat,2}}{\dot{m}^3} \quad \text{A.I-18}$$

et

$$y_{H_2O}^2 = y_{H_2O}^{sat,2} \quad \text{A.I-19}$$

La conservation de la masse de l'eau dans le sécheur aboutit à :

$$\dot{m}^3 = \dot{m}^0 (1 - y_{H_2O}^2) \quad \text{A.I-20}$$

La conservation des espèces gazeuses à l'exception de l'eau, en considérant l'hypothèse Heq8, conduit à :

$$y_k^2 = \frac{\dot{m}^1 y_k^1}{\dot{m}^2} \quad \text{A.I-21}$$

La normalisation des fractions massiques de la phase gazeuse donne :

$$\sum_{k=1}^{Ns} y_k^2 = 1 \quad \text{A.I-22}$$

Enfin l'écriture de la conservation de l'énergie sur le sécheur permettant de calculer les températures de sortie du déchet et des gaz donne :

$$\dot{m}^0 h^0 + \dot{m}^1 h^1 = \dot{m}^2 h^2 + \dot{m}^3 h^3 \quad \text{A.I-23}$$

Dans cette équation seule la température de sortie du sécheur est inconnue.

### • Modélisation de l'étage de gazéification

Tout comme pour le sécheur, l'objectif de la modélisation de cet étage est de pouvoir calculer les NS+13 grandeurs définies au paragraphe I.2.1.a ( $\dot{m}^5, y_k^5, T^5, \dot{m}^6, T^6, y_{INO}^6, y_{MO}^6, y_{H_2O}^6, y_C^{MO,6}, y_H^{MO,6}, y_O^{MO,6}, y_N^{MO,6}$  et  $y_S^{MO,6}$ ). Ce paragraphe a donc pour objet de définir les équations donnant accès à ces grandeurs.

On utilise l'hypothèse Heq2 pour écrire mathématiquement la conservation de la matière inorganique entre l'entrée et la sortie du gazéifieur:

$$\dot{m}^3 y_{INO}^3 = \dot{m}^6 y_{INO}^6 \quad \text{A.I-24}$$

Compte tenu de l'hypothèse Heq6, il y a égalités des températures entre le solide et le gaz quittant l'étage de gazéification :

$$T^5 = T^6 \quad \text{A.I-25}$$

L'hypothèse Heq10 nous permet de connaître la composition massique de la matière organique en sortie du gazéifieur et d'écrire ceci:

$$y_k^{MO,6} = 0 \quad \text{pour } k = H, O, N, S, Cl \quad \text{A.I-26}$$

$$y_C^{MO,6} = 1 \quad \text{A.I-27}$$

et

$$y_{H_2O}^6 = 0 \quad \text{A.I-28}$$

L'équation suivante traduit la conservation des atomes au sein de l'étage de gazéification. Pour chaque élément chimique j, où j=C, H, O, N, S, Cl, il est possible d'écrire :

$$\dot{m}^3 y_{MO}^3 y_j^{MO,3} + \dot{m}^3 y_{H_2O}^3 v_{H_2O,j} + \dot{m}^4 \sum_{j=k}^{Ns} y_k^4 v_{k,j} = \dot{m}^5 \sum_{j=k}^{Ns} y_k^5 v_{k,j} + \dot{m}^6 y_{MO}^6 y_j^{MO,6} \quad \text{A.I-29}$$

où  $v_{k,j}$  représente la fraction massique de l'élément j dans le constituant k.

La normalisation de la composition de la phase gazeuse s'écrit

$$\sum_{k=1}^{Ns} y_k^5 = 1 \quad \text{A.I-30}$$

La prise en compte de l'hypothèse Heq12, considérant le diazote comme inerte chimiquement, aboutit à :

$$\dot{m}^4 y_{N_2}^4 = \dot{m}^5 y_{N_2}^5 \quad \text{A.I-31}$$

La conservation de la masse globale sur l'étage de gazéification s'écrit :

$$\dot{m}^3 + \dot{m}^4 = \dot{m}^5 + \dot{m}^6 \quad \text{A.I-32}$$

Ainsi la conservation de l'énergie correspondante prend la forme suivante :

$$\dot{m}^3 h^3 + \dot{m}^4 h^4 = \dot{m}^5 h^5 + \dot{m}^6 h^6 \quad \text{A.I-33}$$

Dans cette expression seule la température de sortie de l'étage de gazéification est inconnue.

On utilise maintenant l'hypothèse Heq11 pour écrire les équilibres chimiques du gaz en équilibre avec la fraction résiduelle de carbone solide dans le déchet au sein de l'étage de gazéification. Chacune des constantes d'équilibre est calculée par la relation de Van't Hoff.

$$\Delta_r G_{(T)}^0 = -RT \ln(K_{(T)}) \quad \text{A.I-34}$$

soit

$$K_{(T)} = \exp\left(\frac{\Delta_r G_{(T)}^0}{RT}\right) \quad \text{A.I-35}$$

où  $\Delta_r G_{(T)}^0$  représente l'enthalpie libre standard de la réaction considérée à la température T, et dont la valeur est calculée par le biais de grandeurs thermodynamiques tabulées. La loi d'action de masse découlant de l'hypothèse d'équilibre chimique (Hypothèse Heq11) pour une réaction se traduit par

$$K_{(T)} = \prod_{k=1}^{Ns} \alpha_{k(eq)}^{\nu_k} \quad \text{A.I-36}$$

où  $\alpha_{k(eq)}$  désigne l'activité chimique de l'espèce k à l'équilibre et  $\nu_k$  le coefficient stœchiométrique de l'espèce k dans la réaction. Dans notre cas nous avons des gaz parfaits (Hypothèse Heq5) dans un système travaillant à pression atmosphérique (hypothèse Heq4) donc l'activité est :

$$\alpha_{k(eq)} = \frac{P_k^{eq}}{P_0} \quad \text{A.I-37}$$

avec

$$P_k^{eq} = x_k^{eq} P_0 \quad \text{A.I-38}$$

On peut donc écrire :

$$K_{(T)} = \prod_{k=1}^{Ns} (x_k^{eq})^{\nu_k} \quad \text{A.I-39}$$

avec  $x_k^{eq}$  la fraction molaire de l'espèce k dans le mélange gazeux à l'équilibre.

On peut donc exprimer la constante d'équilibre en fonction des fractions molaires des différentes espèces chimiques entrant en jeu dans la réaction. De plus pour le carbone solide, on a par définition  $\alpha_{C(eq)} = 1$ .

### **Références bibliographiques :**

**De Souza-Santos ML.,** 2004, Solid fuels combustion and gasification: modeling, simulation, and equipment operation. New York: Marcel Dekker

## ANNEXE II : Coefficients du modèle

Expressions des différents coefficients  $\alpha$ ,  $\beta$ , A et Z intervenant dans les équations du système

**Equation du constituant « eau » :**

- si  $X > X_{ps}$

$$\beta_{lMO} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{MO}}$$

$$\beta_{lCR} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{CR}}$$

$$\beta_{lCl} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{Cl}}$$

$$\beta_{ll} = 1 + \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_l}$$

$$\beta_{lT} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{T}}$$

$$\beta_{le} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_e}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lMO} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) + \bar{\rho}_l \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) - \bar{\rho}_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{MO}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lCR} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) + \bar{\rho}_l \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) - \bar{\rho}_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{CR}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lCl} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{Cl}} \right) + \bar{\rho}_l \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_{Cl}} \right) - \bar{\rho}_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{Cl}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{ll} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_l} \right) + \bar{\rho}_l \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_l} \right) - \bar{\rho}_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g} \right)}{\partial \bar{\rho}_l}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lT} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{T}} \right) + \bar{\rho}_l \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{T}} \right) - \bar{\rho}_g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g} \right)}{\partial \bar{T}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{le} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_e} \right) + \bar{\rho}_l \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_e} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_e}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{A}}}_l = -\bar{\rho}_v \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \bar{\rho}_g^g \mathbf{g} - \bar{\rho}_l \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \bar{\rho}_l^l \mathbf{g}$$

- si  $X > X_{ps}$

$$\beta_{lMO} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{MO}}$$

$$\beta_{lCR} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{CR}}$$

$$\beta_{lCI} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{CI}}$$

$$\beta_{ll} = 1 + \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_l}$$

$$\beta_{lT} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{T}}$$

$$\beta_{le} = \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_e}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lMO} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) - \bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_{MO}} - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{MO}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lCR} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) - \bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_{CR}} - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{CR}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lCI} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{CI}} \right) - \bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_{CI}} - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{CI}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{ll} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_l} \right) - \bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_l} - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_l}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{lT} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{T}} \right) - \bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{T}} - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{T}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{le} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_e} \right) - \bar{\rho}_s \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_e} - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{vk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_e}$$

$$\mathbf{A}_l = -\bar{\rho}_v \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}$$

Equations pour les constituants gazeux tel que  $j \neq v$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{jMO} = \bar{\rho}_j \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{jk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{MO}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{jCR} = \bar{\rho}_j \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{jk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{CR}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{jCl} = \bar{\rho}_j \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{Cl}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{jk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{Cl}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{jl} = \bar{\rho}_j \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_l} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{jk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_l}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{jT} = \bar{\rho}_v \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{T}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{jk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{T}}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{je} = \bar{\rho}_j \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_e} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{jk}^{\text{eff}} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_e}$$

$$\mathbf{A}_j = -\bar{\rho}_j \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \bar{\rho}_g^g \mathbf{g}$$

### Equation de la thermique :

- si  $X > X_{ps}$

$$\beta_{TMO} = C_{MO}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{MO}}$$

$$\beta_{TCR} = C_{CR}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{CR}}$$

$$\beta_{TCI} = C_{CI}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CI,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{CI}}$$

$$\beta_{Tl} = Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \bar{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_l} - \bar{\rho}_l \frac{\partial \bar{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w)}{\partial \bar{\rho}_l}$$

$$\beta_{TT} = \bar{\rho}_{MO} C_{MO} + \bar{\rho}_{CR} C_{CR} + \bar{\rho}_{CI} C_{CI} + \bar{\rho}_l \left( Cp_l - \frac{\partial \bar{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w)}{\partial \bar{T}} \right) + \sum_{e \neq v} \bar{\rho}_e \bar{Cp}_e^g(\bar{T})$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \bar{T}} \left[ \bar{\rho}_v \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \right]$$

$$\beta_{Te} = \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_e} + \sum_{j \neq v} \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_j^g(\bar{T}) dT + h_{j,ref} \right) \delta_{ej}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{TMO} = \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \bar{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right)$$

$$+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{TCR} = \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \bar{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right)$$

$$+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( - \frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\}$$

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\alpha}}_{TCI} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \Delta H_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_{Cl}} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{Cl}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{Cl}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} \\
\underline{\underline{\alpha}}_{Tl} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \Delta H_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_l} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_l} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_l} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} \\
\underline{\underline{\alpha}}_{TT} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \Delta H_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{T}} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{T}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{T}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} - \underline{\underline{\lambda}}_{eff} \\
\underline{\underline{\alpha}}_{Tj} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \Delta H_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \frac{\partial \bar{P}_l^l}{\partial \bar{\rho}_j} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_j} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_j} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} \\
\underline{\underline{\mathbf{A}}}_T &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \Delta H_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rl}}{\varepsilon_l \mu_l} \bar{\rho}_l^l \mathbf{g} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}}\cdot\underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \bar{\rho}_g^g \mathbf{g} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_T = & \bar{\rho}_{MO}(C_{MO}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref}) + \bar{\rho}_{CR}(C_{CR}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref}) \\
& + \bar{\rho}_{Cl}(C_{Cl}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{Cl,ref}) + \bar{\rho}_l(Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \\
& + \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \bar{\rho}_e \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\}
\end{aligned}$$

- si  $X < X_{ps}$

$$\beta_{TMO} = C_{MO}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{MO}}$$

$$\beta_{TCR} = C_{CR}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{CR}}$$

$$\beta_{TCI} = C_{Cl}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{Cl,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_{Cl}}$$

$$\beta_{Tl} = Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref} + \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_l} - \bar{\rho}_l \frac{\partial \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w)}{\partial \bar{\rho}_l}$$

$$\begin{aligned}
\beta_{TT} = & \bar{\rho}_{MO}C_{MO} + \bar{\rho}_{CR}C_{CR} + \bar{\rho}_{Cl}C_{Cl} + \bar{\rho}_l \left( Cp_l - \frac{\partial \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w)}{\partial \bar{T}} \right) + \sum_{e \neq v} \bar{\rho}_e \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) \\
& + \frac{\partial}{\partial \bar{T}} \left[ \bar{\rho}_v \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\beta_{Te} = \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_v^g(\bar{T}) dT + h_{v,ref} \right) \frac{\partial \bar{\rho}_v}{\partial \bar{\rho}_e} + \sum_{j \neq v} \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_j^g(\bar{T}) dT + h_{j,ref} \right) \delta_{ej}$$

$$\underline{\underline{\alpha}}_{TMO} = \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( -\frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}_l} \underline{\underline{D}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right)$$

$$+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\underline{k}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{D}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{MO}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\}$$

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\alpha}}_{TCR} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}_l} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{CR}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{T_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} \\
\underline{\underline{\alpha}}_{TCI} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}_l} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_{CI}} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_{CI}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_{CI}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{T_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} \\
\underline{\underline{\alpha}}_{Tl} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}_l} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_l} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_l} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_l} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{T_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} \\
\underline{\underline{\alpha}}_{TT} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}_l} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{T}} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{T}} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{T}} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{T_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} - \underline{\underline{\lambda}}_{eff} \\
\underline{\underline{\alpha}}_{Tj} &= \bar{\rho}_l (Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}^l, a_w) + h_{l,ref}) \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}_l} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_b \cdot \frac{\partial X}{\partial \bar{\rho}_j} \right) \\
&+ \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \left( \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \frac{\partial \bar{P}_g^g}{\partial \bar{\rho}_j} \right) - \bar{\rho}_g^g \sum_{k=1}^{Ne-1} \underline{\underline{\mathbf{D}}}_{ek}^{eff} \cdot \frac{\partial \left( \frac{\bar{\rho}_k^g}{\bar{\rho}_g^g} \right)}{\partial \bar{\rho}_j} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{T_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\} \\
\mathbf{A}_T &= \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \bar{\rho}_e \left( -\frac{\underline{\underline{\mathbf{k}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{k}}}_{rg}}{\varepsilon_g \mu_g} \bar{\rho}_g^g \mathbf{g} \right) \left( \int_{T_{ref}}^{T_g^g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_T = & \bar{\rho}_{MO}(C_{MO}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{MO,ref}) + \bar{\rho}_{CR}(C_{CR}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{CR,ref}) \\
& + \bar{\rho}_{Cl}(C_{Cl}(\bar{T} - T_{ref}) + h_{Cl,ref}) + \bar{\rho}_l(Cp_l(\bar{T} - T_{ref}) - \overline{\Delta H}_D^l(\bar{T}_l^l, a_w) + h_{l,ref}) \\
& + \sum_{e=1}^{Ne} \left\{ \bar{\rho}_e \left( \int_{T_{ref}}^{\bar{T}_g} \bar{Cp}_e^g(\bar{T}) dT + h_{e,ref} \right) \right\}
\end{aligned}$$

## ANNEXE III : Propriétés physiques

### ➤ Viscosité dynamique du gaz

Espèce	Borne inférieure (K)	Borne supérieure (K)	$A_\mu$	$B_\mu$	$C_\mu$	$D_\mu$
N2	63,15	1970	6,56E-07	0,6081	54,714	0
O2	54,35	1500	1,10E-06	0,5634	96,3	0
H2O	273,16	1073,15	6,18E-07	0,67779	847,23	-73930
H2	13,95	3000	1,80E-07	0,685	-0,59	140
CH4	90,69	1000	5,25E-07	0,59006	1,06E+02	0
CO	68,15	1250	1,11E-06	0,5338	94,7	0
CO2	194,67	1500	2,15E-06	0,46	290	0

Tableau 14 : Paramètres pour le calcul des viscosités gaz tirés de la bibliothèque ComponentPlus

### ➤ Conductivité thermique du gaz

Espèce	Borne inférieure (K)	Borne supérieure (K)	$A_\lambda$	$B_\lambda$	$C_\lambda$	$D_\lambda$
N2	63,15	2000	0,00033143	0,7722	16,323	373,72
O2	80	2000	0,00044994	0,7456	56,699	0
H2O	273,16	1073,15	0,0021606	0,76839	3940,5	-445340
H2	22	1600	0,002653	0,7452	12	0
CH4	90,69	1000	6325,2	0,43041	7,70E+08	-3,87E+10
CO	70	1500	0,00059882	0,6863	57,13	501,92
CO2	194,67	1500	3,69	-0,3838	964	1860000

Tableau 15 : Paramètres pour les conductivités thermiques gaz tirés de la bibliothèque ComponentPlus

➤ Enthalpies gaz

Espèce	Enthalpies de formation (J.kg <sup>-1</sup> )	A <sub>e</sub>	B <sub>e</sub>	C <sub>e</sub>	D <sub>e</sub>	E <sub>e</sub>
<b>300 K&lt;T&lt;1000 K</b>						
N <sub>2</sub>	-1,0641E+02	9,7904E+02	4,1796E-01	-1,1762E-03	1,6743E-06	-7,2562E-10
O <sub>2</sub>	-1,6392E+02	8,3482E+02	2,9295E-01	-1,4956E-04	3,4138E-07	-2,2783E-10
H <sub>2</sub> O	-1,3425E+07	1,5630E+03	1,6037E+00	-2,9327E-03	3,2161E-06	-1,1568E-09
H <sub>2</sub>	-9,3327E+02	1,3602E+04	3,4023E+00	-3,3584E-03	-3,9079E-07	1,7053E-09
CH <sub>4</sub>	-4,6684E+06	4,0358E+02	9,0573E+00	-1,4425E-02	1,5805E-05	-6,3430E-09
CO	-3,9463E+06	9,6838E+02	4,4878E-01	-1,1522E-03	1,6568E-06	-7,3463E-10
CO <sub>2</sub>	-8,9419E+06	4,2992E+02	1,8744E+00	-1,9664E-03	1,2972E-06	-3,9999E-10
<b>1000 K&lt;T&lt;5000 K</b>						
N <sub>2</sub>		8,6862E+02	4,4162E-01	-1,6872E-04	2,9967E-08	2,0043E-12
O <sub>2</sub>		9,6075E+02	1,5941E-01	-3,2708E-05	4,6127E-09	-2,9528E-13
H <sub>2</sub> O		1,2332E+03	1,4105E+00	-4,0291E-04	5,5427E-08	-2,9498E-12
H <sub>2</sub>		1,2337E+04	2,8872E+00	-2,3235E-04	-3,8073E-08	6,5277E-12
CH <sub>4</sub>		8,7246E+02	5,3054E+00	-2,0082E-03	3,5166E-07	-2,3339E-11
CO		8,9793E+02	4,2823E-01	-1,6713E-04	3,0234E-08	-2,0513E-12
CO <sub>2</sub>		8,4137E+02	5,9323E-01	-2,4151E-04	4,5227E-08	-3,1531E-12

Tableau 16 : Paramètres pour le calcul des enthalpies tirés des bibliothèques Fluent



# MODELISATION D'UN REACTEUR DE GAZEIFICATION A LIT FIXE

## RESUME

Dans le cadre d'une thématique générale du Laboratoire Thermique Energétique et Procédés de Pau consacré à l'étude et à la valorisation des déchets tels que la pyrolyse, la combustion et la gazéification, la thèse se focalise sur la modélisation des phénomènes de transports de masse, de quantité de mouvement et d'énergie en milieu multiphasique multiconstituant réactif dans le cas d'un réacteur de gazéification à lit fixe.

La première étape de la modélisation consiste à décrire classiquement le mouvement de chacune des phases continues par les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de la chaleur. Bien qu'à cette échelle les mécanismes soient parfaitement décrits, le passage à la simulation impose une étape d'homogénéisation par prise de moyenne. Ce changement d'échelle, décrit dans ce travail, conduit à un système d'équations homogène à l'échelle locale. Ce modèle est appliqué au cas du procédé de gazéification de déchets de la société Europlasma nommé CHO-Power.

Les simulations bidimensionnelles instationnaires du problème ont permis de mettre en lumière les différents mécanismes en présence au cours du procédé ainsi qu'un certain nombre de verrous dans l'obtention du chemin de convergence conduisant au régime permanent.

**Mots clés : Modélisation, Gazéification, Milieu poreux réactif, Prise de moyenne de volumique, lit fixe, déchets.**

---

## SUMMARY

One of the thematics of the "Laboratoire Thermique Energétique et Procédés de Pau" is the study and the valorization of waste as pyrolysis, combustion and gasification for example. In this context, this work deals with modeling of heat, mass and momentum transport in a multiphase multi components reactive medium for a fixed bed gasifier.

Conservation equations are first written for each phase. The macroscopic partial differential equations are expressed by integrating these microscopic conservation laws over a representative volume. This change of scale, described in this work, leads to a homogeneous system of equations. This model is applied to the case of the gasification of waste process of the Europlasma company named CHO-Power.

The unsteady two-dimensional simulations of the problem allowed to highlight the different mechanisms present during the process and a number of locks in obtaining convergence path leading to the steady state.

**Key Words : Modeling, Gasification, reactive porous medium, Volume average method, fixed bed, waste.**