# Modélisation couplée cinétique/ transferts masse et chaleur

Un modèle alliant cinétique chimique et transfert de masse et de chaleur a été conçu afin de prédire l'auto-échauffement à l'échelle d'un lit fixe de particules de bois torréfiées traversé par un flux gazeux oxydant. Pour ce faire, le logiciel multiphysique OpenFOAM est utilisé. L'approche adoptée ainsi que les résultats obtenus sont explicités dans ce chapitre.

# 6.1 OpenFOAM

OpenFOAM (Open Field Operation And Manipulation) est une boite à outils de modélisation / simulation multiphysique centré sur la dynamique des fluides. Ce logiciel open source est codé en C++. Il a la capacité de résoudre des équations aux dérivées partielles par la méthode des volumes finis. OpenFOAM traite des problèmes multiphysiques à travers plusieurs solveurs (écoulements compressibles et incompressibles, transferts thermiques, combustion ...). Il est équipé d'un mailleur permettant la construction de la géométrie du système étudié.

Le post-traitement des résultats est effectué à l'aide d'un outil de visualisation appelé ParaView. Celui-ci, produit des visuels et des graphiques permettant le traitement les résultats obtenus. Les principaux avantages d'OpenFOAM sont sa gratuité, sa performance, le fait qu'il offre la possibilité d'accéder aux sources avec une facilité de programmer les équations.

# 6.2 Méthodologie

Un modèle bidimensionnel d'auto-échauffement du lit de biomasse a été développé. Ce modèle couple la cinétique de création de la chaleur et son transfert conductif et convectif.

Les hypothèses retenues et les équations régissant ces phénomènes sont présentées dans ce qui suit.

#### 6.2.1 Nombres adimensionnels

Le nombre de Biot est un nombre adimensionnel qui décrit la contribution des résistances aux transferts interne (conduction) et externe (convection) à la particule. Ce nombre est calculé selon l'équation 6.2.1 (Bi = 0.11).

$$Bi = h_{fs}L_c/\lambda_s = 0.11 \tag{6.2.1}$$

Où  $h_{fs}$  est le coefficient d'échange convectif entre la particule solide et la phase gazeuse formulé selon la corrélation empirique de Wakao et al [136] dans l'équation 6.2.15 et dont la valeur figure dans le tableau 6.1. La conductivité thermique du bois torréfié  $\lambda_s$  est tirée des travaux de Lee et al [137] sur le charbon d'érable dans la direction parallèle au flux de chaleur (tableau 3.3).

Si Bi < 0.1, la résistance interne conductive est faible. Ainsi, les gradient thermiques intra-particulaires sont négligeables. Étant à la limite, nous pouvons considérer que la particule est thermiquement homogène.

Le nombre de Péclet thermique correspond au rapport du transfert thermique par convection ( $\rho_g c_{pg} v_g \Delta T$ ) sur le transfert thermique conductif ( $\lambda_g \Delta T/L_c$ ). L'estimation du nombre de Péclet thermique permet de savoir s'il convient de modéliser le transfert dispersif [138]. Dans notre cas, nous obtenons une valeur légèrement inférieure à 1. De ce fait, dans une première approche, nous considérons que la dispersion est négligeable.

$$Pe_p = -\epsilon \rho_g c_{pg} v_g d_p / \lambda_g = 0.85 \tag{6.2.2}$$

Le nombre de Reynolds est un nombre sans dimension exprimant le lien entre les forces d'inertie et les forces de viscosité. Il correspond au rapport de la quantité de mouvement transférée par inertie sur celles transférée par viscosité. Le nombre de Reynolds à l'échelle du pore est évalué à 2.7 selon l'équation 6.2.3.

$$Re_p = \rho_q v_q d_p / \mu_q = 2.7 \tag{6.2.3}$$

#### 6.2.2 Hypothèses

Les hypothèses suivantes ont été retenues :

- Le lit est considéré comme un milieu poreux homogène (faible Biot).
- Une géométrie cylindrique axisymétrique en 2D du lit est retenue.

- Le régime est transitoire et l'écoulement compressible.
- Le transport du solide est négligeable  $(v_s = 0)$ .
- La perméabilité et la conductivité thermique du milieu sont isotropes et constantes dans le temps.
- La vitesse du gaz suit la loi de Darcy étant donné que Re < 10. En effet, selon Bear [139], en régime laminaire, la loi de Darcy est applicable lorsque Re < 1. Cependant, la borne supérieure peut être étendue jusqu'à 10.</li>

#### 6.2.3 Formulation du modèle

Les équations régissant l'auto-échauffement du système étudié sont implémentées dans le solveur de l'outil OpenFOAM dans lequel elles sont résolues selon une méthode ségrégée des volumes finis.

#### Bilans de matière

Les bilans de conservation de la phase gazeuse et de l'oxygène sont exprimés dans les équations 6.2.4 et 6.2.5. Nous considérons le transport de la phase gazeuse incluant l'oxygène et la diffusion de l'oxygène en régime transitoire. La cinétique chimique de l'auto-échauffement est associée à la consommation de l'oxygène exprimée dans les derniers termes des équations 6.2.4 et 6.2.5.

$$\frac{\partial \epsilon \rho_g}{\partial t} + \nabla .(\rho_g \vec{v}) = -\epsilon y_{O_2}^n \rho_g k_{ox}$$
(6.2.4)

$$\frac{\partial \epsilon y_{O_2} \rho_g}{\partial t} + \nabla (y_{O_2} \rho_g \vec{v}) = \nabla (\frac{D \epsilon \rho_g}{\tau} \nabla y_{O_2} - \epsilon y_{O_2}^n \rho_g k_{ox}$$
(6.2.5)

La constante de vitesse  $k_{ox}$  suit une loi d'Arrhénius ( $k_{ox} = A \exp(-Ea/RT_s)$ ) selon les paramètres cinétiques déterminés dans le chapitre 3.

En supposant que l'écoulement est compressible, la masse volumique de la phase gazeuse est exprimée selon la loi des gaz parfaits (éqt. 6.2.6)

$$\rho_g = \frac{PM}{RT_g} \tag{6.2.6}$$

#### Bilan de quantité de mouvement

L'écoulement d'un fluide visqueux et incompressible est décrit par les équations de Navier-Stokes (Eq. 6.2.7)

$$\begin{cases} \rho(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v}.\nabla \vec{v}) = \mu \Delta \vec{v} - \nabla p + \vec{f} \\ \nabla.\vec{v} = 0 \end{cases}$$
(fluide incompressible) (6.2.7)

L'accélération du fluide est décrite par le terme  $\rho(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v}.\nabla \vec{v})$ . Le terme  $\vec{f}$  représentant les forces extérieures agissant sur le fluide, si celui-ci est indépendant du temps, l'équilibre suivant les équations de Stockes peut être retenu (Eq. 6.2.8).

$$\begin{cases} -\mu \Delta \vec{v} = -\nabla p + \vec{f} \\ \nabla . \vec{v} = 0 \end{cases}$$
(6.2.8)

En supposant que les forces visqueuses sont linéaires suivant la vitesse et que les forces extérieures se limitent à la force de gravité, nous obtenons l'équation 6.2.9.

$$-\overline{\overline{K}}^{-1}\mu\epsilon\vec{v}+\rho\vec{g}-\nabla p=0 \tag{6.2.9}$$

Où  $\epsilon$  est la porosité et  $\overline{\overline{K}}$  est le tenseur de la perméabilité. Ceci aboutit à la loi de Darcy exprimée dans l'Eq 6.2.10.

$$\vec{v} = -\frac{\overline{\overline{K}}}{\mu\epsilon} \left(\nabla p - \rho \vec{g}\right) \tag{6.2.10}$$

Compte tenu de la valeur du Re du pore (< 10), nous pouvons appliquer la forme linéaire de l'équation de quantité de mouvement sans tenir compte des effets d'inertie. Par ailleurs, nous négligeons la force de gravité par rapport au gradient de pression et nous considérons le milieu traversé par le fluide comme isotrope. Ainsi, la vitesse superficielle du gaz est exprimée comme dans l'équation 6.2.11.

$$v_g = \frac{K}{\mu} \nabla P \tag{6.2.11}$$

#### Bilans de chaleur

En termes de conservation de la chaleur, il existe deux méthodes de modélisation des transferts thermiques en milieu poreux à l'échelle macroscopique : soit en équilibre thermique local (ETL) soit en non-équilibre thermique local (NETL). L'équilibre thermique local est caractérisé par l'uniformité de la température entre la phase solide et la phase gazeuse. A l'opposé, en non-équilibre thermique local, deux températures différentes sont affectées à chacune de ces phases. Comme mentionné dans le chapitre 1, l'ETL est applicable lorsque les nombres Re et Da sont faibles. D'autres travaux ont démontré que l'ETL n'est pas valide en régime transitoire et dans quelques cas en régime permanent [140, 141]. De ce fait, dans notre cas, il serait plus adéquat de considérer que le système est en non-équilibre local en admettant un gradient de température entre les phases solide et gaz.

$$\frac{\partial \epsilon c_{pg} \rho_g T_g}{\partial t} + \nabla .(\rho_g C_{pg} T_g \vec{v}) = \lambda_{geff} \nabla^2 T_g + h_{fs} a_{fs} (T_s - T_f)$$
(6.2.12)

$$\frac{\partial ((1-\epsilon)c_{ps}\rho_s)T_s}{\partial t} = k_{seff}\nabla^2 T_s + \Delta H \times \epsilon \times k_{ox} \times \rho_{O_2}{}^n + h_{fs}a_{fs}(T_g - T_s)$$
(6.2.13)

La surface spécifique dans un lit fixe est classiquement définie par le ratio de la porosité et du diamètre de la particule [73, 74] (éqt. 6.2.14). Dans un lit fixe, le coefficient d'échange convectif entre les deux phases a été formulé par Wakao et al. [142] selon une corrélation empirique en fonction des nombres Re de pore et Pr (éqt. 6.2.15).

$$a_{sf} = \frac{6(1-\epsilon)}{d_p} \tag{6.2.14}$$

$$h_{sf} = \lambda_f / d_p \left( 2 + 1.1 P r^{1/3} R e_p^{0.6} \right) \tag{6.2.15}$$

#### 6.2.4 Conditions aux limites

Les conditions aux limites ainsi que les conditions initiales retenues sont présentées dans la figure 6.1. La condition convecto-radiative admise aux parois du réacteur nécessite de déterminer le coefficient de transfert convectif dans l'espace annulaire entre la paroi du réacteur et celle du four. Dans notre cas, la paroi du réacteur est uniforme en température et celle du four est isolante, correspondant à la 3<sup>ème</sup> condition aux limites pour un écoulement laminaire entièrement développé dans une conduite annulaire concentrique [143]. De plus, le nombre de Nusselt dépend du ratio de diamètre.

Sachant que  $D_i/D_e = 0.95 \simeq 1$ , le coefficient de transfert convectif est déduit de l'équation



FIGURE 6.1 – Conditions aux limites et conditions initiales implémentées

6.2.16 [143].

$$Nu_i = \frac{h_i D_h}{\lambda_g} = 4.86 \tag{6.2.16}$$

Où,  $D_h = D_e - D_i$  ( $D_h$ : diamètre hydraulique,  $D_e$ : diamètre du four (paroi interne isolante),  $D_i$ : diamètre du réacteur).

A l'entrée du lit, le champs de température est défini à partir des données expérimentales enregistrée au cours du temps. Quant à la condition initiale de température, le champs de température reconstruit sur la base des données mesurées a été implémenté.

#### 6.2.5 Propriétés physiques et chimiques

#### Conductivité thermique et perméabilité effectives du substrat

Le lit de plaquettes de hêtre torréfié est supposé isotrope et homogène. La conductivité thermique effective comprend deux composantes : conductive et radiative (éqt. 6.2.17) [144]. Le milieu poreux étant traversé par un flux de gaz, nous retenons une conduction parallèle entre la phase gazeuse et solide [128]. La conductivité thermique effective est exprimée dans l'équation 6.2.18.

$$\lambda_{eff} = \lambda_{cond} + \lambda_{rad} \tag{6.2.17}$$

$$\lambda_{eff} = \epsilon \lambda_g + (1 - \epsilon)(\lambda_s + \frac{16}{3}\epsilon_{rad}\sigma d_p T_s^3)$$
(6.2.18)

La perméabilité d'un lit fixe de particules sphériques est tirée des résultats expérimentaux de Ergun [73, 145] (éqt. 6.2.19). Dans notre cas, les plaquette de bois ne peuvent pas être considérées comme étant de géométrie sphérique. En effet, le ratio moyen de la plus grande dimension sur la plus est de estimé à 5.4. De ce fait, un facteur de correction  $\Psi$ appelé sphéricité (éqt. 6.2.20), est inclus dans l'équation. La sphéricité a été calculée dans [121] pour chacune des 365 plaquettes mesurées constituant l'échantillon représentatif et la moyenne arithmétique de ces valeurs a été estimé à 0.64.

$$K = \frac{d_p^2 \Psi^2 \epsilon^3}{150(1-\epsilon)^2}$$
(6.2.19)

$$\Psi = \frac{\pi^{1/3} (6V)^{2/3}}{S} \tag{6.2.20}$$

#### Coefficient de diffusion de l'oxygène

Lorsqu'un fluide traverse un lit de particules inertes avec une vitesse élevée (Re > 10), le phénomène de diffusion massique s'amplifie pour donner lieu à une dispersion hydrodynamique. Ce phénomène comprend à la fois la diffusion moléculaire et la diffusion mécanique (convective) [146]. Le coefficient de dispersion longitudinal est classiquement 5 fois supérieur au coefficient de dispersion radial. D'autre part, à faible Reynolds (Re < 1), la diffusion massique est représentée par le coefficient de diffusion moléculaire. Dans le cas présent, à faible Re (1 < Re < 10) nous considérons que la dispersion de l'oxygène est limitée à la diffusion moléculaire selon le coefficient de diffusion moléculaire de l'oxygène (tableau 6.1).

La viscosité dynamique du gaz est décrite selon la loi de Sutherland en fonction de la température (éqt. 6.2.21)

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T_g}{T_0}\right)^{3/2} \frac{T_0 + S'}{T_g + S'} \tag{6.2.21}$$

Où,  $\mu_0$  est la viscosité de référence,  $T_g$ , la température du gaz,  $T_0$ , la température de référence et S', la température effective appelée la constante de Sutherland. Pour le cas de l'air à température et pression modérées, les valeurs des constantes sont :  $\mu_0 = 1.7894 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}, T_0 = 273.11 \text{ K et } S' = 110.56 \text{ K [147]}.$ 

Symbole	Propriété	Valeur	Dimension	Note
D	Coefficient de diffusion de l'oxygène	$2 \times 10^{-5}$	$m^2/s$	Mesurée [148]
K	Perméabilité du lit poreux	$1.208 \times 10^{-7}$	$\mathrm{m}^2$	Estimée $[145]$
$h_i$	Coefficient de transfert convectif	16.28	$W.m^{-2}.K^{-1}$	Estimée $[143]$
	(parois réacteur/ four)			

TABLE 6.1 – Propriétés physiques complémentaires du bois et du gaz

# 6.3 Résultats

# 6.3.1 Prédiction des températures du lit pendant l'auto-échauffement selon la cinétique apparente déterminée

Dans un premier temps, nous avons retenus les paramètres cinétiques issus de l'analyse théorique présentée dans le chapitre 3. La simulation diverge au bout d'une heure.

A ce stade, les températures prédites à différentes hauteurs à l'axe du lit sont comparées aux observations expérimentales dans la figure 6.2. On remarque que les températures prédites dépassent largement les résultats expérimentaux. A 5 cm de hauteur, un auto-échauffement modéré de 13°C est prédit, alors que l'expérience ne montre pas d'auto-échauffement. Au delà, un fort auto-échauffement est prédit entrainant un emballement thermique maximal à 15 cm de hauteur.



FIGURE 6.2 – Évolution de la température à différentes hauteurs (5, 15, 25, 30 cm) pendant l'auto-échauffement à l'essai de référence. Tracé vert : températures expérimentales, tracé bleu : températures prédites

Des simulations ont été réalisées afin d'identifier les limites du modèle conçu. Nous en avons déduit à la fois une forte sensibilité des prédictions aux paramètres cinétiques imposées ainsi qu'aux conditions initiales de température.

Une étude paramétrique faisant varier la cinétique d'auto-échauffement a montré que l'écart entre les résultats expérimentaux et numériques subsiste. Ainsi, cet écart pourrait résulter d'une description biaisée du champs initial de température. En effet, des simulations spécifiques réalisées confirment cette hypothèse : les températures prédites dépendent fortement des conditions initiales de températures.

Afin de pallier ce manque de données, deux solutions sont envisageable : soit rajouter un grand nombre de thermocouple au sein du lit, soit tester expérimentalement des débits plus élevés. La première approche permet de décrire finement le champs de température initial, quoiqu'elle exige plus de moyens. Il est donc plus intéressant de tester des débits plus élevés afin de limiter la dépendance à la condition initiale.

Pour ce faire, l'objectif est de limiter le temps nécessaire pour évacuer la condition initiale de la température en augmentant suffisamment le débit de ventilation. En effet, si le débit est très important, le terme convectif dominera la génération de la chaleur qui sera dissipée par ce dernier. Dans ce cas, l'auto-échauffement est empêché. Ceci ne va pas dans le sens de notre approche dont le but est de créer et de caractériser l'auto-échauffement du bois. Par conséquent, nous retiendrons un débit assez faible pour pouvoir observer un auto-échauffement et assez élevé pour dissiper le plus tôt possible la condition initiale de la température.

Ainsi, il convient d'évaluer le temps nécessaire pour évacuer le champs initial de température. Pour ce faire, la vitesse d'avancée du champs initial de température est calculée sur la base de l'ETL selon l'équation 6.3.2. Nous pouvons en déduire le temps nécessaire pour évacuer le champs initial de la température qui dépend fortement du débit ventilé : environ 5 h pour un débit de ventilation de 30 NL/min et 3h30min pour un débit de 40 NL/min.

$$\rho_{lit}c_{ps}(T_g - T_s)Sdz = v_g S \rho_g c_{pg}(T_g - T_s)dt$$
(6.3.1)

L'équation 6.3.1 exprime l'équilibre entre la quantité de chaleur amenant le volume S  $\times$  dz de la température du solide à celle du gaz entrant (coté droit de l'éqt. 6.3.1) et l'énergie transporté dans ce volume pendant dt (coté gauche de l'éqt. 6.3.1).

$$\frac{dz}{dt} = v_g \frac{\rho_g c_{pg}}{\rho_{lit} c_{ps}} \tag{6.3.2}$$

#### 6.3.2 Modélisation de l'auto-échauffement à plus fort débits

#### Ajustement de la cinétique

Cette étape a consisté à identifier des paramètres cinétiques permettant de prédire, en fin d'auto-échauffement au plus haut débit expérimenté ( $Q_{gaz}$ + en régime permanent), des gradients de température longitudinaux proches de ceux mesurés. Pour ce faire, nous avons testé (à la main) plusieurs jeux de paramètres cinétiques.

Le nouveau jeu de paramètres cinétique est :  $E_a = 100.7 \text{ kJ/mol et A} = 8.33 \times 10^8 \text{ s}^{-1} \left(\frac{kg}{m^3}\right)^{(1-n)}$ .



FIGURE 6.3 – Températures prédites par le modèle alimenté des paramètres cinétiques réajustés



FIGURE 6.4 – Évolution de la température à différentes hauteurs pendant l'autoéchauffement à l'essai  $Q_{gas}$ +

#### Choix des débits d'air adéquats

La cinétique retenue a été appliquée à des débits plus élevés, de façon à créer un auto-échauffement subcritique et dissiper plus vite la condition initiale de la température. L'objectif est de tester expérimentalement ces débits pour ensuite valider une cinétique d'auto-échauffement du lit. Les simulations réalisées montrent qu'à des débit de 40 et 50 NL/min nous obtenons un auto-échauffement de 15 et 10°C en haut du lit, et des gradients croissants de température suivant la hauteur. De plus, comme il a été démontré précédemment, les temps mis en jeu pour évacuer la condition initiale de température diminuent avec le débit d'air (environ 3h30min et 3h pour des débits d'air de 40 et 50 NL/min, respectivement). Néanmoins, sous un débit de 60 NL/min, l'auto-échauffement est réduit à 8°C, avec un faible gradient longitudinal de la température. De ce fait, il convient de tester expérimentalement des débits de 40 et 50 NL/min.

#### Nouvelle approche expérimentale

Nous avons procédé à la même approche expérimentale selon les trois étapes précédemment explicitées (torréfaction, refroidissement inerte, injection d'air), en ventilant cette fois-ci un débit plus élevé. Cependant, des problèmes techniques au niveau de la régulation de la température du préchauffeur et du four nous ont empêché de reproduire l'étape de torréfaction.

Nous présentons dans ce qui suit les prédictions de température correspondant à l'essai où l'étape de torréfaction se rapproche le plus à celle réalisée à plus faibles débits. Le lit est torréfié autour de 230°C au lieu de 250°C (fig. 6.5). Ensuite, après la phase de refroidissement, un débit d'air de 40 NL/min est introduit dans le réacteur (essai  $Q_{gas}++$ ). Étant donné que la torréfaction est plus légère, nous avons réajusté la cinétique d'autoéchauffement en diminuant d'un facteur 5 le facteur pré-exponentiel ( $E_a = 100.7 \text{ kJ/mol}$ ,  $A = 1.67 \times 10^8 \text{ s}^{-1} (\frac{kg}{m^3})^{(1-n)}$ ). En effet, la baisse de l'intensité de torréfaction diminuerait la surface spécifique de la matière et réduirait, par conséquent, le facteur pré-exponentiel A.



FIGURE 6.5 – Évolution de la température à différentes hauteurs (10, 20, 30 cm) durant les différentes phases expérimentées (torréfaction, refroidissement et auto-échauffement) à l'essai  $Q_{gas} + +$ .

Par ailleurs, nous avons retenu les mêmes propriétés physico-chimiques du substrat torréfié que celles mesurées sur l'échantillon torréfié à 250°C. Cette hypothèse est contraignante dans le sens où les propriétés physico-chimiques du matériau carboné sont dépendant de l'intensité du traitement thermochimique qu'il subit.

#### Résultats numériques

Les résultats numériques associés sont présentés dans la figure 6.6.



FIGURE 6.6 – Comparaison des températures expérimentales (tracé vert) et prédites (tracé bleu) à différentes hauteurs (5, 15, 25, 30 cm) pendant l'auto-échauffement à l'essai  $Q_{gas}$  + +.

En bas du lit (à 5 cm), la température s'élève de 10°C suite à l'introduction de l'air dans le milieu. A ce niveau, la température prédite correspond à celle mesurée avec un faible écart allant jusqu'à 3°C. A 10 cm, le modèle surévalue la température du substrat notamment au niveau de la courbure de la montée de température où l'écart atteint 10°C. Ensuite, comme dans l'expérience, la température tend à se stabiliser et l'écart est réduit à 4°C. A 15 cm, initialement, le modèle prédit une légère baisse de température pendant les 10 premières minutes précédant l'auto-échauffement. Néanmoins, l'essai réalisé montre une température quasiment constante pendant les 20 premières minutes précédant l'autoéchauffement. La même allure est observée entre résultats expérimentaux et prédictifs pendant l'auto-échauffement avec une surestimation d'environ 5°C. A partir de 20 cm de hauteur, l'auto-échauffement est précédé par une diminution de la température. Le modèle prédit correctement cette allure quoiqu'il surestime les deux phases d'auto-échauffement et notamment la baisse de température. En haut du lit (20 cm  $\leq z \leq 30$  cm), les résultats numériques pendant l'auto-échauffement correspondent bien aux températures enregistrées avec un écart maximal de 5°C à la fin de l'auto-échauffement.

En conclusion, le modèle conçu décrit qualitativement l'auto-échauffement d'un lit fixe de bois torréfié soumis à un flux convectif d'air.

Dans la suite, nous nous proposons d'extrapoler ce modèle à l'échelle industrielle afin d'étudier l'auto-échauffement des matériaux carbonés stockés. Nous nous y intéressons dans ce qui suit.

# 6.4 Simulation de l'auto-échauffement à l'échelle du silo industriel de stockage

Le modèle numérique construit a été adapté à un cas d'auto-échauffement au sein d'un silo industriel de plaquettes de bois torréfiées. L'objectif étant de se rapprocher de la réalité industrielle de la problématique d'auto-échauffement, nous simulons l'évaluation de la température du lit dans un silo de 15 tonnes, comme étudié pour le cas du charbon dans [60].

La configuration du silo choisie correspond tout aussi bien aux deux types de silos largement utilisés dans l'industrie : le silo à fond plat et le silo à fond conique. Pour le deuxième cas, nous pouvons considérer que la partie conique est de volume négligeable par rapport à la partie cylindrique. Les géométries de ces deux types de silos sont représentées dans la figure 6.7. Un système de ventilation assurerait l'aération du silo par le bas.

Nous considérons que le bois fraîchement torréfié est conduit du réacteur au silo dans lequel il est refroidi par convection forcée d'air à 20°C. On suppose que la température initiale du lit est homogène et égale à 150°C.

L'approche adoptée ici consiste à évaluer l'impact des paramètres suivants : le ratio entre la hauteur et le diamètre (h/d) du silo (à volume fixé) et le débit d'air ventilé.

Pour ce faire, nous nous somme référés au design d'un fournisseur de silos dédiés au stockage de plaquettes de bois. Pour un même volume de 55 m<sup>3</sup> de lit de plaquette, trois configurations sont proposées, de diamètres variables (D = 3, 4 et 4.5 m) [149].

Concernant le choix des débits de ventilation, Arvasis, institut du végétal, recommande un débit d'air de ventilation compris entre 4 et 16 m<sup>3</sup>/(h. m<sup>3</sup> de matériau) est recommandé pour refroidir le silo de stockage des céréales [150]. Nous avons testé un débit correspondant à la borne supérieure de la plage de débits recommandés (20 Nm<sup>3</sup>/min, soit 15 m<sup>3</sup>/(h.



FIGURE 6.7 – Schémas de coupes transversales de silo à fond plat (a) et à fond conique (b)

m<sup>3</sup>). Les résultats ont montré une intensification de l'auto-échauffement pouvant conduire à une auto-combustion pour les silos de 3 et 4 mètres de diamètres. Les résultats associés sont discutées ici. En considérant que ce débit n'est pas suffisamment fort pour refroidir le silo, du fait que la réactivité du substrat étudié est plus importante, nous avons retenu des débits légèrement supérieurs (allant de 19, 20 à 23 m<sup>3</sup>/(h. m<sup>3</sup>), soit 25, 27 et 30 Nm<sup>3</sup>/min).

Des simulations des températures au sein du lit de plaquettes torréfiées sont réalisés pour chacun de ces diamètres et aux différents débit d'air retenus, sur une durée de 24h.

Pour chaque simulation réalisée à des débits allant de 25 à 30 Nm<sup>3</sup>/min, les températures prédites montrent un auto-échauffement plus prononcé en haut du lit, notamment au niveau de l'axe. A plus faible débit débit (20 Nm<sup>3</sup>/min), pour les diamètres d = 3 m et d = 4 m, un emballement thermique se produit. Il se manifeste par la formation d'un point chaud plus bas dans le lit et plus proche de la paroi.

Dans ce qui suit, on s'intéressera aux prédictions temporelles de la température correspondant à la région la plus chaude, soit, en haut à l'axe du lit de bois pour la plage de débits 25-30  $\text{Nm}^3/\text{min}$  et au niveau des points chauds au plus bas débit (20  $\text{Nm}^3/\text{min}$ ) et diamètres d = 3 m et d = 4 m.

Pour d = 3 m, les températures prédites en fonction du temps sont illustrées pour chaque débit dans la figure 6.8. Sous le débit le plus élevé (30  $\text{Nm}^3/\text{min}$ ), la température augmente lentement jusqu'à 180°C au bout d'environ 21 h de ventilation, puis,



FIGURE 6.8 – Températures prédites dans la zone chaude du lit de silo de diamètre d = 3 m à chaque débit testé : 20 Nm<sup>3</sup>/min (tracé bleu), 25 Nm<sup>3</sup>/min (tracé vert), 27 Nm<sup>3</sup>/min (tracé rouge), 30 m<sup>3</sup>/min (tracé cyan)

elle diminue rapidement pour atteindre la température ambiante de l'air introduit. Un faible auto-échauffement de 20°C est prédit dans ces conditions. En diminuant le débit d'air, l'auto-échauffement est accentué : 50°C d'élévation de température pour un débit d'air de 27 Nm<sup>3</sup>/min, au dessous de ces débits (25 et 20 Nm<sup>3</sup>/min), l'intensification de l'auto-échauffement entraîne un emballement thermique qui débute après environ 22 h de ventilation sous  $Q_{air} = 20 \text{ Nm}^3/\text{min}$ , 30 min après, l'emballement thermique débute sous  $Q_{air} = 25 \text{ Nm}^3/\text{min}$ . La dépendance du comportement thermique du lit de bois en fonction du débit de ventilation est également observée en variant le rapport h/d.

En effet, pour d = 4 m, en ventilant aux débits suivant : 25, 27 et 30 Nm<sup>3</sup>/min, le modèle prédit une élévation de la température qui atteint 200°C, 184°C et 174°C, respectivement, suivi d'une baisse de température (voir fig 6.9). Néanmoins au plus faible débit testé (20 Nm<sup>3</sup>/min), la température ne cesse d'augmenter donnant lieu à un emballement thermique.

Par contre, dans le cas du plus large silo, pour tout débit testé, la température simulée révèle un auto-échauffement subcritique plus faible que celui observé précédemment. Les hausses de températures maximales sont estimées à 14, 17, 20 et 40 °C pour les débits  $Q_{air} = 20, 25, 27, 30 \text{ Nm}^3/\text{min}$ , respectivement (fig. 6.10). En effet, un débit fort permet d'évacuer l'énergie thermique créée en limitant, de ce fait, l'intensification de l'auto-échauffement.

Par ailleurs, ces résultats dévoilent une sensibilité de l'auto-échauffement au rapport h/d: sous le même débit de ventilation, l'auto-échauffement décroît en élargissant le silo de 3 à 4,5 m. Pour un débit d'air de 25 Nm<sup>3</sup>/min, à d = 4.5 m, le lit de bois torréfié



FIGURE 6.9 – Températures prédites dans la zone chaude du lit de silo de diamètre d = 4 m à chaque débit testé : 20 Nm<sup>3</sup>/min (tracé bleu), 25 Nm<sup>3</sup>/min (tracé vert), 27 Nm<sup>3</sup>/min (tracé rouge), 30 m<sup>3</sup>/min (tracé cyan)



FIGURE 6.10 – Températures prédites dans la zone chaude du lit de silo de diamètre d = 4.5 m à chaque débit testé : 20 Nm<sup>3</sup>/min (tracé bleu), 25 Nm<sup>3</sup>/min (tracé vert), 27 Nm<sup>3</sup>/min (tracé rouge), 30 m<sup>3</sup>/min (tracé cyan)

s'auto-échauffe légèrement et atteint une température de 170°C, soit, 30°C en moins qu'à d = 4 m et 80°C en moins en comparaison avec le silo de 3 m de diamètre dans lequel un emballement thermique a lieu. En élevant le débit d'air, cet écart baisse mais persiste. En effet, en se référant au silo de d = 4.5 m, le modèle prédit, pour  $Q_{air} = 27 \text{ Nm}^3/\text{min}$ , un échauffement plus important de 16°C et de 33°C lorsque le silo est de 4 et 3 m de diamètre, respectivement. Pour le cas du débit le plus élevé, le lit s'auto-échauffe de 12°C en plus à 4 m de diamètre et de 18°C en plus à 3 m de diamètre en comparant à l'auto-échauffement

prédit dans le silo de d = 4.5 m.

L'écart observé peut être lié aux pertes de chaleur aux parois. Afin de tester la validité de cette hypothèse, nous avons comparé la thermique des lits de largeurs d = 3 m et d = 4 m, en négligeant les pertes de chaleur aux parois. Les prédictions illustrées dans la figure 6.11 montrent que l'écart de température est réduit à 3°C entre les deux silos. Ainsi, l'évolution de la température en fonction du ratio h/d est principalement liée aux pertes de chaleur. Néanmoins, en augmentant le diamètre du silo, pour un volume constant, la surface latérale du silo devrait diminuer, ce qui baisserait le flux de chaleur en parois, puisque le coefficient d'échange est constant et le potentiel de transfert similaire. Ceci est en contradiction avec les résultats observés qui montrent que l'auto-échauffement est moins important dans les silo les plus larges. On a donc pas d'explication pour ce comportement.



FIGURE 6.11 – Températures prédites dans la zone chaude du lit de silo de d = 3 m (tracé bleu) et d = 4 m (tracé vert) sous un débit d'air de 27 Nm<sup>3</sup>/min en négligeant les pertes thermiques aux parois

Ainsi, la configuration optimale pour réduire l'auto-échauffement dans les conditions présentes correspond au plus grands débit (30 Nm<sup>3</sup>/min) et diamètre (4.5 m) pour un volume de lit de 55 m<sup>3</sup> correspondant à un ratio h/d de 0.77. Néanmoins, pour un diamètre de 4.5 m, il est plus prudent, pour des questions d'économie, de retenir le plus bas débit (20 Nm<sup>3</sup>/min). Dans ce cas, il est intéressant de déterminer une température critique à partir de laquelle l'industriel peut basculer d'un refroidissement inerte à un refroidissement sous air, plus économique. Nous avons testé des températures initiales du matériau légèrement supérieures (155°C et 160°C) pour garder les mêmes paramètres cinétiques.

Les résultats montrent que l'échauffement spontané s'accentue et donne lieu à une auto-combustion du lit de bois torréfié au bout de 16h et 12h de refroidissement sous air pour des températures initiales du solide de 155°C et 160°C, respectivement (fig. 6.12). Ainsi, en augmentant la température initiale du solide, le délai de combustion spontanée diminue en raison de l'accélération des réactions exothermiques. En somme, pour la configuration présenté ici, dès que le lit de bois atteint la température critique de 150°C, le silo peut être refroidi sous air au lieu de l'azote. Néanmoins, le suivi de la distribution de la température et de la concentration des gaz demeure préconisé.



FIGURE 6.12 – Températures prédites dans la zone chaude du lit de silo de d = 4.5 m sous un débit d'air de 20 Nm<sup>3</sup>/min (cas optimale) pour les températures initiales du solide de 155°C(tracé bleu) et de 160°C (tracé vert)

### 6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, un modèle numérique a été construit afin de décrire l'auto-échauffement susceptible de se produire dans un lit de biomasse prétraitée. A cette échelle, nous avons constaté une forte dépendance à la cinétique des réactions exothermiques et aux conditions initiales de température. La cinétique de la consommation d'oxygène issue de l'analyse théorique (chapitre 3) a été réajustée dans le but de se rapprocher des observations expérimentales. Afin de s'affranchir de la dépendance aux conditions initiales de température, nous avons opté pour des débits d'air plus forts qui l'évacueraient plus vite avant de créer un auto-échauffement. Ces débits ont été testés expérimentalement après la torréfaction et le refroidissement partiel du lit de plaquettes. Néanmoins, nous n'avons pas pu réaliser la torréfaction telle qu'elle a été réalisée dans les essais précédents pour cause de problèmes de régulation de la température du préchauffeur et du four.

Cependant, après réajustement du modèle, la simulation réalisée à fort débit a été confrontée à l'approche expérimentale. Elle prédit correctement la situation d'auto-échauffement

au sein d'un lit fixe de bois torréfié ventilé.

Ce modèle a finalement été extrapolé à l'échelle industrielle afin d'étudier la tendance à l'auto-échauffement au sein d'un silo de plaquettes de hêtre pendant le stockage. Nous nous sommes intéressés aux paramètres suivant : le ratio de dimensionnement h/d, le débit d'air ventilé et la température critique pour basculer sur un refroidissement sous air.

A l'issue de cette analyse, nous pouvons retenir, parmi les ratios h/d proposés par le fabricant de silos, un rapport critique (h/d = 0.77) permettant de minimiser l'autoéchauffement des plaquettes de bois torréfiées stockées dans le silo étudié. La variation du comportement thermique en fonction du diamètre est principalement due aux pertes thermiques en parois. Quoique, la contribution des pertes aux parois devrait produire la tendance inverse que celle attendue.

Par ailleurs, un débit d'air de refroidissement compris entre 20 et  $30 \text{ Nm}^3/\text{min}$  suffit pour éviter une situation d'emballement thermique et limiter l'auto-échauffement.

La température du substrat stocké ne doit pas excéder 150°C au delà de laquelle un emballement thermique est prédit (dans le cas optimal à  $Q_{air} = 20 \text{ Nm}^3/\text{min et h/d} = 0.77$ ).