



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

MODELISATION D'UN SYSTEME DE PYROGAZEIFICATION DE LA BIOMASSE

THÈSE

Pour l'obtention du grade de
Docteur de l'Université de Lorraine
en Génie des Procédés et des Produits

Par

Riccardo Maione

Sous la direction de :

Dr. Gabriel Wild & Dr. Guillain Mauviel

Soutenue publiquement le 15 juin 2017 devant le jury composé de :

Raffaella OCONE, Heriot-Watt University, Rapporteur

Patrick RICHARD, IFSTTAR, Rapporteur

Marie-Odile SIMONNOT, LRGP, Examineur

Umberto D'ORTONA, M2P2, Examineur

Guillain MAUVIEL, LRGP, Examineur,

Gabriel WILD, LRGP, Examineur

Sébastien KIESGEN DE RICHTER, LEMTA, Invité

Luc VAN DEN BOGAERT, SEA MARCONI France, Invité

*“Ben oltre le idee di giusto
e di sbagliato c'è un campo,
ti aspetterò laggiù”*

(J. Rumi)

Table des matières

Table des matières	1
Nomenclature.....	3
Liste des figures et des tables.....	9
Introduction générale	15
1. Etat de l'art	21
1.1 Les énergies renouvelables	23
1.2 La valorisation énergétique de la biomasse	25
1.2.1 La biomasse	25
1.2.2 Les différents types de valorisation	31
1.2.3 Conclusions et remarques	34
1.3 La pyrolyse-gazéification	35
1.3.1 Utilisations des produits de pyrolyse	36
1.3.2 Les réacteurs de pyro-gazéification	38
1.3.3 Observations et conclusions sur les différents types de réacteurs	43
1.4 Description du pilote de pyro-gazéification de SEA Marconi	44
1.4.1 Schéma général du système.....	45
1.4.2 Calculs préliminaires.....	50
1.5 Modélisation des fours tournants	53
1.5.1 Dynamique des fours tournants	53
1.5.2 Les modèles pour la simulation de la dynamique des tambours tournants.....	59
1.5.3 Trajectoire des grains en régime d'avalanche et les phénomènes de ségrégation...	67
1.6 Conclusions et objectifs de la thèse	70
2. Simulations dynamiques par DEM (Discrete Element Method)	71
2.1 Discrete Element Method.....	73
2.1.1 Algorithme	74
2.1.2 Initialisation.....	74
2.1.3 L'algorithme de recherche des contacts.....	76
2.1.4 Calcul des forces	77
2.1.5 Remarques et limites	86
2.1.6 Le modèle multisphérique.....	87
2.1.7 Le modèle de sphère équivalente (SE).....	89
2.2 Le couplage CFD-DEM.....	89
2.2.1 CFD-DEM «un-resolved».....	91

2.2.2	Les logiciels concernés.....	97
2.2.3	Remarques et limites	100
2.3	Calibration du modèle DEM	100
2.3.1	Expériences et modèles.....	101
2.3.2	Conclusions	119
3.	Simulation du réacteur de pyrolyse de SEA Marconi	121
3.1	Système et modèle dynamique.....	123
3.2	Distribution des temps de séjour (DTS) des solides	125
3.2.1	Essai expérimental	126
3.2.2	Simulation de DTS.....	130
3.2.3	Comparaison avec le modèle dynamique	131
3.2.4	Comparaison avec le modèle de Saeman.....	136
3.3	Effet de la configuration du réacteur	143
3.4	Conclusions sur les simulations dynamiques	145
3.5	Modèle thermique du réacteur tournant de pyrolyse	146
3.5.1	Modèle dynamique	146
3.5.2	Les modalités d'échange de chaleur.....	152
3.5.3	Résultats et étude de sensibilité	168
4.	Couplage CFD-DEM pour les écoulements fluide-solide	171
4.1	Le réacteur d'oxydation partielle du char.....	173
4.2	Validation expérimentale.....	175
4.2.1	Lit fluidisé dense	175
4.2.2	Lit fluidisé jaillissant	177
4.3	Simulations d'un rhéomètre avec un mélange granulaire	180
4.3.1	Géométrie du système.....	180
4.3.2	DEM	182
4.3.3	CFD	184
4.3.4	CFD-DEM et conditions de simulation	185
4.3.5	Résultats.....	186
5.	Conclusions générales et perspectives	189
5.1	Conclusions	191
5.2	Perspectives	193
5.2.1	Perspectives directes de ce travail.....	193
5.2.2	Perspectives plus générales	193
	Références	195
	Annexes	207

Nomenclature

a_{pu}	Paramètre de pompage pour la lubrification
a_{sh}	Paramètre de coupe pour la lubrification
a_{sq}	Paramètre de presse pour la lubrification
b	Bras de levier
$c_{p,Ji}$	Chaleur spécifique du RPA J_i
$C_s(z)$	Nombre de granulés de bois par unité de longueur en fonction de z
\bar{C}_s	Nombre moyen de granulés de bois par unité de longueur
DP	Degré de polymérisation
e	Excentricité
$\langle e \rangle$	Excentricité moyenne
E	Module d'élasticité
$E(t)$	Fonction de distribution des temps de séjour
f	Facteur de remplissage
F	Force
$F(t)$	Distribution cumulative des temps de séjour
F_{ik}^I	Force de lubrification
Fr	Nombre de Froude
G	Module de cisaillement
H_{aj-bi}^c	Terme d'échange de conduction entre un RPA de la série acier et un RPA de la série bois

h_e	Distance effective entre surfaces de deux particules
I_r	Facteur de ségrégation
I_x, I_y, I_z	Moment d'inertie
J	Nombre de RPA dans un model RPAS
k_c	Coefficient de conduction
L	Longueur du tambour
M_μ	Torque frictionnelle
\mathbf{M}_{ik}^I	Torque de lubrification
m_{Ji}	Masse dans le RPA J_i
\mathbf{n}	Direction normale
N	Nombre de particules
$N.R.$	Nombre de rotations
N^a	Particules d'acier dans une bande
N_{tot}^a	Particules d'acier totaux
N_s	Nombre de pales dans le réacteur d'oxydation partielle du char
Pe	Nombre de Péclet
Q_{Ji}	Débit du RPA J_i
r	Rayon d'une particule
R	Rayon du tambour
r_c	Rayon d'une particule cylindrique
r_e	Rayon d'une particule équivalente
r_{skin}	Distance de la surface d'une particule à la surface du volume pour la liste de Verlet
Re	Nombre de Reynolds
Re_p	Nombre de Reynolds pour les particules

\bar{t}	Temps de séjour moyen
\mathbf{t}	Direction tangentielle
T_{J_i}	Température du RPA J_i
T_r	Température de référence
\mathbf{u}	Vecteur unitaire
Y	Rendement de chaque phase sur base sèche

Abréviations

CCNUCC	Convention-Cadre des Nations unies sur les changements climatiques
CER	Crédits d'émission
CFD	Computational fluid dynamics
COV	Composés organiques volatils
DEM	Discrete element method
DTS	Distribution des temps de séjour
EU ETS	European Union Greenhouse Gas Emission Trading Scheme
GES	Gaz à effet de serre
GIEC	Groupe Intergouvernemental sur l'Evolution Climatique
GPL	General Public License
HAP	Hydrocarbures polycycliques aromatiques
HCFC	Hydro chlorine fluorine carbon
HFC	Hydro fluorine carbon
JI	Joint Implementation
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
LIGGGHTS	LAMMPS Improved for General Granular and Granular Heat Transfer Simulations
MDC	Moment à direction constante
MDP	Mécanisme de développement propre
MOC	Mise en œuvre conjointe
NRC	National Research Council

PECC	Programme Européen sur le changement Climatique
PEPT	Positron Emission Particle Tracking
RAEP	Ressort amortisseur élastique plastique
RPA	Réacteur parfaitement agité
RPAS	Réacteurs parfaitement agités en série
SE	Sphère équivalente
TFM	Two Fluid Model
UNFCCC	United Nations Framework Convention on Climate Change
VC	Vitesse de chauffage

Lettres grecques

α	Angle formé par l'axe du cylindre et le plan horizontal (inclinaison du cylindre)
$\alpha(r)$	Angle de remplissage en fonction du rayon r
β	Angle de talus
β_i	Rapport de rayon entre deux particules qui interagissent par lubrification
γ	Angle de remplissage
γ_n	Coefficient d'amortissement en direction normale
γ_r	Coefficient d'amortissement pour le moment de frottement rotatif
γ_t	Coefficient d'amortissement en direction tangentielle
δ	Chevauchement entre deux particules
ΔH^r	Enthalpie de réaction
$\Delta^{seg} (t)$	Degré de Ségrégation
Δt	Pas de temps
Δt_h	Temps caractéristique de Hertz
Δt_r	Temps caractéristique de Rayleigh
Δz	Longueur d'un élément de maillage
ε	Coefficient de restitution

ε_f	Degré de vide
θ	Coefficient de Poisson
μ	Coefficient de frottement de glissement
μ_r	Coefficient de frottement de rotation
ρ	Masse volumique
σ^2	Variance de la distribution
τ	Temps de séjour
ψ	Sphéricité
ψ_l	Angle formé par la tangente à la hauteur du lit et l'axe du cylindre tournant
ω	Vitesse de rotation du tambour

Indices

*	Effectif
a	Relatif à l'acier
b	Relatif au bois
n	Direction normale
p	Granulé de bois
r	Direction Radiale
s	Acier
t	Direction Tangentielle
w	Paroi
z	Direction axiale

Liste des figures et des tables

Figures

Figure 1.1: Usine d'énergie géothermique en Islande	23
Figure 1.2: Parc éolien	24
Figure 1.3: Panneaux photovoltaïques	24
Figure 1.4: Représentation schématique du bois d'après [7]. (a) la structure moléculaire de la cellulose, avec les molécules de glucose alternativement tournées de 180° (ligne pleine, liaisons covalentes, pointillé, liaisons hydrogènes) ; (b) les microfibrilles de cellulose, avec des régions cristallines et non cristalline, regroupées en une macrofibrille ; (c) une macrofibrille d'une paroi cellulaire primaire et (d) la paroi cellulaire du bois, constituée d'une couche primaire et de trois couches secondaires (S1, S2 et S3), avec les microfibrilles de cellulose disposées dans des orientations différentes dans chaque couche.	27
Figure 1.5: une chaîne linéaire d'unités anhydroglucose liées par des liaisons 1,4- β	28
Figure 1.6: Structure ramifiée d'hémicelluloses d'après [10]	29
Figure 1.7: Une structure possible de lignine	30
Figure 1.8: Procédés thermochimiques de valorisation de la biomasse	32
Figure 1.9: Produits de pyrolyse.....	35
Figure 1.10: Gazéifieur à lit fixe contre-courant (gauche) et un profil typique de température [49]	39
Figure 1.11: Gazéifieur à lit fixe co-courant (gauche) et un profil typique de température [49]	40
Figure 1.12: Gazéifieur à lit fluidisé circulant.....	41
Figure 1.13: Gazéifieur à lit fluidisé dense	42
Figure 1.14: Schéma général du procédé SEA Marconi.....	46
Figure 1.15: Module de pyrolyse	48
Figure 1.16: Cycles d'insertion d'air	49
Figure 1.17: Le lit solide et le passage d'air dans le module C	49
Figure 1.18: Température des réacteurs de pyrolyse et d'oxydation partielle en fonction de l'humidité du bois à débit de bois constant égal à 50 kg/h (a) et du débit de bois à humidité relative constante égale à 0.1 (b)	52
Figure 1.19: Température des réacteurs de pyrolyse et d'oxydation partielle en fonction du débit de bois à ER constant.....	52
Figure 1.20: vue radiale (gauche) et axiale (droite) du tambour tournant	54
Figure 1.21: Couche active et région plug-flow, profil de vitesse (gauche) et trajectoires (droite) ..	55
Figure 1.22: Régime de Sliding	56
Figure 1.23: Régime de Surging	57
Figure 1.24: Régime de Slumping	57
Figure 1.25: Régime de Rolling	58
Figure 1.26: Régime de Cascading	58
Figure 1.27: Régime de Cataracting.....	59
Figure 1.28: Régime de Centrifuging.....	59
Figure 1.29: Section du tambour avec la trajectoire d'une particule dans la couche active.....	61
Figure 1.30: Profil de chargement pour deux débits d'alimentation en cas de particules sphériques. x est la distance de la sortie [83]	63
Figure 1.31: le "brazil nut effect"	67
Figure 1.32: un cœur ségrégué.....	68
Figure 1.33: une bande en ségrégation axiale	68
Figure 1.34: ségrégation par percolation.....	69

Figure 1.35: ségrégation par flottation, les particules noires sont plus denses que les particules blanches	69
Figure 2.1: Conséquences d'un Δt trop grand sur la simulation.....	75
Figure 2.2: Liste de Verlet	77
Figure 2.3: Direction normale et tangentielle du contact.....	78
Figure 2.4: Un cycle de charge et décharge typique	80
Figure 2.5: Une sphère qui roule sur un plan sans frottement	82
Figure 2.6: Une sphère qui roule sur un plan avec frottement statique.....	82
Figure 2.7: Une sphère qui roule sur un plan avec frottement statique et déformation	83
Figure 2.8: une pierre (gauche) et sa représentation multisphérique (droite).....	88
Figure 2.9: Une surface compliquée (gauche) et une représentation multisphérique avec des sphères osculatrices (droite)	88
Figure 2.10: une pierre (gauche) et sa représentation sphère équivalente (droite).....	89
Figure 2.11: CFD-DEM Resolved (gauche) et un-resolved (droite)	91
Figure 2.12: Structure de l'algorithme CFD-DEM un-resolved [134]	96
Figure 2.13: Les logiciels concernés dans une simulation CFDEM	99
Figure 2.14: Des plaquettes de bois (gauche) et granulés de bois (droite).....	100
Figure 2.15: Tambour tournant utilisé pour les expériences	101
Figure 2.16: Une sphère d'acier et un granulé de bois	102
Figure 2.17: Fonction cumulée croissante de la distribution de longueur des granulés de bois ...	103
Figure 2.18: approximation multisphérique utilisée (gauche) et approximation SE (droite).....	104
Figure 2.19: Comparaison entre la simulation DEM et l'expérience pour le tambour tournant rempli de particules en acier. a) essai expérimental, b) simulation DEM, $\mu_{sw} = 0.22$, 2106 particules en acier, 40 t/mn.	106
Figure 2.20: Granulés dans le tambour rotatif. 0,35 kg de granulés, 20 tr/min (côté gauche, côté droit résultats d'expérience DEM en utilisant l'approximation multisphérique et un coefficient de frottement de 0.3).....	107
Figure 2.21: Angle de repos moyen pour les différents coefficients de frottement. Approximation multisphérique	107
Figure 2.22: Comparaison entre l'expérience (au centre) et de la simulation avec l'approche multisphère (bois rouges, acier boules en blanc), vue (à gauche) de dessous et vue radiale (à droite), N.R. est l'acronyme de nombre de rotations. Essai A.....	110
Figure 2.23: Vue de dessus axial pour approximation SE (à gauche), expérience (Centre), approximation multisphérique (à droite), essai A. Etat final ($t = 16$ s, N.R. = 8)	110
Figure 2.24: Une prise de vue utilisée pour la mesure avec son maillage (A) et la concentration en acier comme fonction de la position axiale : en carré les résultats expérimentaux, la ligne grise est le SE 1, la ligne pointillée est l'approximation multisphérique et la ligne noire est le SE 2. Essai B (B), Essai D (C).....	112
Figure 2.25: Degré de ségrégation pour l'approximation multisphérique et les approximations SE en fonction de N.R. (nombre de rotations), essai A.	114
Figure 2.26: Degré de ségrégation pour l'approximation multisphérique et les approximations SE en fonction de N.R. (nombre de rotations), essai B.	115
Figure 2.27: Comparaison entre différentes approximations dans les différentes conditions	115
Figure 2.28: Degré de ségrégation en fonction de N.R. Essai A et A'.....	118
Figure 2.29: Degré de ségrégation pour l'approximation multisphérique en fonction de N.R. (nombre de rotations), essai B' et B''.....	118
Figure 3.1: Géométrie externe du réacteur de pyrolyse.....	123
Figure 3.2: Les chicanes utilisées dans le réacteur SEA Marconi, a) et a') cylindres, b) et b') chicane à "cuillère".....	125
Figure 3.3: Les traceurs utilisés pour l'essai de DTS.....	126
Figure 3.4: Schéma de DTS.....	128

Figure 3.5: Schéma général des opérations pour le calcul du temps de séjour des billes d'acier (pour la définition des modules, voir le §1.3).....	129
Figure 3.6: Une section du réacteur	131
Figure 3.7: DTS expérimentale pour le bois dans le module B de pyrolyse	132
Figure 3.8: Comparaison de $F(t)$ entre simulation et expérience en fonction du temps	132
Figure 3.9: Composantes de la gravité pour deux pentes de lit différents (a) et une vue transversal d'un lit solide (b).....	134
Figure 3.10: Une situation ségrégée et une situation mélangée	134
Figure 3.11: Les profils de vitesse pour des cas différents de mélange binaire	135
Figure 3.12: Distribution cumulative des temps de séjour pour l'acier dans la simulation de DTS avec les DTS des réacteur idéaux (Annexe E).....	136
Figure 3.13: Système à sortie conique	138
Figure 3.14: Temps de séjour pour le modèle MP en fonction de la taille des éléments du maillage	140
Figure 3.15: Angle au repos en fonction de la position axiale (a) et un schéma simplifié pour le calcul du coefficient angulaire à la position axiale z_i (b)	141
Figure 3.16: Hauteur relative en fonction de la position axiale pour le DEM et pour le modèle unidimensionnel MP (mélange parfait)	142
Figure 3.17: Temps de séjour moyens pour les modèles unidimensionnels et pour le DEM	142
Figure 3.18: Valeurs de τ (gauche) et de Pe (droite) en fonction de la géométrie utilisée.....	144
Figure 3.19: Position axiale de certaines particules dans la configuration de chicanes b en fonction du temps (en haut) et le passage d'une chicane b dans un lit de particules (en bas)	145
Figure 3.20: Comparaison DTS du bois entre cascade de RPA, réacteur piston avec dispersion axiale et modèle expérimental.....	147
Figure 3.21: Représentation dynamique de l'acier et du bois à l'intérieur du réacteur	148
Figure 3.22: Disposition des deux modèles RPAS	149
Figure 3.23: Température du bois en fonction de la position axiale et des nombres de tour (N. R.) pour le réacteur de chicanes a, où acier et bois échangent de la chaleur seulement par conduction	151
Figure 3.24: Les flux de chaleur dans un four tournant	152
Figure 3.25: Le modèle de Shafizadeh et Chin	160
Figure 3.26: Représentation schématisée du modèle, les flèches en pointillés représentent les flux de chaleur, les flèches pleines représentent les flux de masse	162
Figure 3.27 : Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=650^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits.....	168
Figure 3.28 : Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits.....	169
Figure 3.29 : Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 15% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits.....	169
Figure 4.1: Schématisation du comportement des solides et du gaz dans le réacteur d'oxydation partielle du char	174
Figure 4.2: Lit fixe	175
Figure 4.3: Pertes de charge, simulations (points) Ergun (ligne), $\rho_s=200\text{ kg/m}^3$, $d_s=1\text{ mm}$	176
Figure 4.4: Pertes de charge, simulations (points), Ergun (ligne), $\rho_s=8000\text{ Kg/m}^3$, $d_s=1\text{ mm}$	177
Figure 4.5: Géométrie du lit fluidisé jaillissant, dimensions en millimètres (gauche), positions et vitesses des particules (droite).....	178
Figure 4.6: Vitesse axiale moyenne des particules solides à une hauteur de 0.05 m	179
Figure 4.7: Vitesse axiale moyenne des particules solides à une hauteur de 0.1 m	179
Figure 4.8: Géométrie de simulation pour la contrepartie DEM	181

Figure 4.9: Comparaisons des profils de vitesse moyenne des particules solides en fonction de la position radiale et de la vibration avec 10 t/min	187
Figure 4.10: Comparaisons des profils de vitesse moyenne des particules solides en fonction de la position radiale et de la vibration avec 1 t/min	188
Figure 4.11: Comparaisons des profils de vitesse moyenne des particules solides en fonction de la position radiale et de la vibration avec 0.5 t/min	188
Figure A.1: Effet des nuages sur la radiation.....	207
Figure A.2: Position des pays en 2005 par rapport au protocole de Kyoto : vert, signé et ratifié ; jaune, signé mais non ratifié ; Rouge, signé en attendant la ratification ; Gris, pas de position. ..	209
Figure C.1: Schéma représentatif pour la définition de G	217
Figure D.1: Disposition de vecteur dans le calcul du bras de levier de la force normale appliquée sur une particule cylindrique	220
Figure F.1: Angle de repos statique pour les granulés (à gauche) et le schéma des points de mesure P1, P2, P3 et P4 dont le centre est le point C (à droite).....	224
Figure F.2: Angle au repos statique en fonction du coefficient de frottement granulé-granulé μ_{pp} , représentation multisphérique (résultats de la simulation DEM).	225
Figure G.1: Schéma de l'expérience pour la mesure du coefficient de frottement tournant	227
Figure G.2: Visualisation vectorielle du système expérimental	227
Figure G.3: Essais pour l'évaluation de μ_r , valeurs de t^{**}/t^*	230
Figure K.1: Nombres de pyrolyse en fonction de la température pour les trois réactions	236
Figure L.1: Experimental apparatus. 1. Rotating tumbler, 2a Camera position back view, 2b Camera position radial view, 2c Camera position axial view	239
Figure L.2: A pellet and a steel sphere used in our experiments	240
Figure L.3: Length distribution for pellets	240
Figure L.4: Multisphere and sphere approximation.....	242
Figure L.5: Static angle of repose for pellets (left) and schematic of measurement points P1, P2, P3 and P4 with the center point C (right).....	244
Figure L.6: Static repose angle as a function of pellet-pellet friction μ_{pp} , multisphere approximation (results of DEM simulation).	245
Figure L.7: Comparison between DEM simulation and experience for the rotating tumbler filled with steel particles. a) Experimental case, b) DEM simulation, $\mu_{sw} = 0.22$, 2106 steel particles, 40 rpm.	247
Figure L.8: Pellets in the rotating tumbler. 0.35 kg of pellets, 20 rpm (left side experiment, right side DEM results using the multisphere approximation)	248
Figure L.9: Mean repose angle for the different sliding friction coefficients. Multisphere approximation	248
Figure L.10: Transient phase of the experimental test (center) and of the simulation with the multisphere approach (wood in red, steel balls in white), bottom view (left) and radial view (right), N.R. stands for number of rotations. Run A.....	251
Figure L.11: Axial top view for sphere approximation (left), experiment (center), multisphere approximation (right), run A.....	252
Figure L.12 : A frame used for measurement with its mesh elements (A) and steel concentration as a function of axial position, square are the experimental results, gray line is Sphere 1, dashed line is Multisphere and black line is sphere 2. Run B (B), Run D (C).....	253
Figure L.13 : Segregation degree for the multisphere approximation and the equivalent sphere approximations as a function of N.R. (Number of rotations), run A.	255
Figure L.14 : Segregation degree for the multisphere approximation and the equivalent sphere approximations, Run B.....	255
Figure L.15 : Comparison between approximations for different conditions.....	256
Figure L.16: Comparison between run A and run A', see table I.5.....	258

Figure L.17: Comparison between run B' and run B'', multisphere configuration, see table I.5	259
Figure M.1: Geometry of the tumbler.....	264
Figure M.2: Wood chip approximation by multisphere approach and a wood chip used in the reactor	266
Figure M.3: Bed height as a function of the Froude number for 3 values of particle number (a) and bed section visualization for different values of particle numbers and rotating speed/Froude number (b)	267
Figure M.4: Mean kinetic energy of the particles at different radial positions, 5 rpm.	268
Figure M.5: Particles kinetic energy (J) at different radial positions of baffles, 3000 #p, 5 rpm.	269
Figure M.6: Total contact number to particle number as a function of the total kinetic energy to particle number for different numbers of particles.....	270
Figure M.7: ratio of the bed height to the tumbler radius as a function of Froude number (a) and ratio of the total contact number to particle number as a function of rotation speed (b) for the two approximations	271
Figure M.8: Bed profile, 5 rpm spherical approximation (a) and multisphere approximation (b) (blue spheres are steel, red particles are wood).....	272
Figure M.9: Order parameter evaluated on the radial axis (a) and number of wood chips (b) as a function of radius, 5 rpm, 0° radial position of baffles.	274
Figure M.10: Order parameter evaluated on the radial axis (a) and number of wood chips (b) in the circular crown ($R \in [0.12 \text{ m}, 0.17 \text{ m}]$), as a function of the X coordinate, 5 rpm, 0° radial position of baffles, (the black lines represent the baffle X coordinates).	275
Figure M.11: Schematic behavior of a wood chip inside the solid bed.....	275
Figure O.1: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de rayonnement dans le freeboard (pas d'effet).....	280
Figure O.2: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction entre billes et bois(pas d'effet).....	280
Figure O.3: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction avec la paroi (pas d'effet)	281
Figure O.4: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction entre le gaz interarticulaire et les billes (effet important).....	281
Figure O.5: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction entre le gaz interarticulaire et le bois (effet important)	281
Figure O.6: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : pas de convection entre ciel gazeux et lit	282
Figure O.7: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : pas de convection entre ciel gazeux et paroi.	282
Figure O.8: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : pas de rayonnement (effet très important)	283

Figure P.1: Comparaisons des profils de vitesse moyen des particules solides en fonction de la position radiale et de la viscosité avec = 10 RPM	284
Figure P.2: Comparaisons des profils de vitesse moyen des particules solides en fonction de la position radiale et de la viscosité avec = 10 RPM	284

Tableaux

Tableau 1.1: Comparaison des émissions de polluants dans le systèmes domestiques en mg de polluant produit / MJ d'énergie produite [23].....	32
Tableau 1.2: Polluants du gaz produit, problèmes liés à leur présence et technologies de nettoyage [55]	43
Tableau 1.3: Caractéristiques techniques du système SEA Marconi.....	47
Tableau 1.4: Données géométriques du module de pyrolyse.....	48
Tableau 1.5: Paramètres chimiques obtenus à partir de la littérature.....	50
Tableau 1.6: Paramètres géométriques et dynamiques utilisés dans les simulations.....	50
Tableau 1.7: Les différents régimes dans les tambours tournants [80].....	56
Tableau 2.1: Propriétés des particules	103
Tableau 2.2: Propriétés des particules DEM	105
Tableau 2.3: Matrice de coefficients de frottement pour les espèces simulées	108
Tableau 2.4: Conditions d'utilisation pour les expériences mixtes	109
Tableau 2.5: Simulations à densité égale.....	117
Tableau 3.1: Paramètres constructifs de la géométrie externe du réacteur	124
Tableau 3.2: Conditions opératives pour l'essai de DTS	128
Tableau 3.3: Paramètres de la convergence du maillage.....	140
Tableau 3.4: paramètres utilisés dans les simulations	143
Tableau 3.5: Propriétés de simulation	151
Tableau 3.6: Propriétés de la simulation thermique.....	159
Tableau 3.7: Paramètres cinétiques et thermique des réactions	160
Tableau 4.1: Propriétés Géométrique	181
Tableau 4.2: Propriétés des particules de verre dans le rhéomètre.....	182
Tableau 4.3: Propriétés des fluides et paramètres de simulation.	185
Tableau K.1: Propriétés pour le calcul du nombre de Pyrolyse	235
Tableau L.1: Particle properties	241
Tableau L.2: Dynamic and contact particle properties for DEM simulations	243
Tableau L.3: Friction coefficients matrix for the species simulated	249
Tableau L.4: Operating conditions for mixed experiments.....	250
Tableau L.5: Simulations at equal densities	258
Tableau M.1: Parameters used in simulations.....	265
Tableau M.2: Order parameter at different values of rotation speed.....	274

Introduction générale

Le problème de l'approvisionnement énergétique et de son impact sur l'environnement global est une question que l'humanité a commencé à se poser tout récemment : l'exploitation des combustibles fossiles a commencé au début du XIXe siècle, quand on a cru que l'atmosphère était un système si vaste qu'il ne pouvait pas être perturbé par l'activité humaine. La première prise de conscience publique internationale officielle a eu lieu en 1991 avec la formation de la UNFCCC (United Nations Framework Convention on Climate Change), avec une promesse d'adhérer à certains programmes environnementaux. À ce jour, les effets anthropiques prévus du réchauffement global (immersion partielle des terres, sécheresse, tropicalisation des zones tempérées) sont plutôt troublants.

Il est alors souhaitable de remplacer l'utilisation de combustibles fossiles par des énergies renouvelables et d'utiliser des procédés plus sobres. L'utilisation d'énergies renouvelables est déjà réalisée ou fortement encouragée dans certains pays. En général, les faibles émissions de polluants, la capacité de réduire les émissions de CO₂ dans l'atmosphère et leur capacité à être « inépuisables » sont des caractéristiques qui les rendent extrêmement attrayantes pour aboutir à un développement durable. Il est également vrai, cependant, que les énergies renouvelables ont tout d'abord une forte dépendance géographique : les ressources renouvelables qui abondent dans un pays ne sont pas forcément abondantes dans un autre. Par exemple, la France, avec son abondance de terres agricoles et de forêts, a la possibilité d'utiliser la biomasse énergie pour atteindre les limites imposées par le UNFCCC. Ce travail se place dans le domaine de la transformation thermochimique de la biomasse.

Actuellement, dans le contexte européen, la biomasse est utilisée surtout en combustion et co-combustion (par le biais de la combustion du bois en complément du charbon) pour l'usage industriel et comme une source de chaleur à usage domestique. Mais la combustion du bois n'est généralement pas efficace à cause de son faible pouvoir calorifique et de la difficulté à mobiliser cette ressource rendant nécessaire de développer des itinéraires alternatifs pour son exploitation. En plus d'être une énergie renouvelable, la biomasse est aussi une énergie "neutre en carbone" puisque le CO₂ émis au cours de son utilisation énergétique est à peu près équivalent au CO₂ utilisé par la plante pendant son développement. Une des filières les plus attractives implique des procédés de pyrolyse et de gazéification, capables de produire plus efficacement de l'énergie mais aussi du biochar, qui a plusieurs usages intéressants.

Parmi les procédés de pyrolyse/gazéification, nous nous intéresserons surtout au procédé élaboré par SEA Marconi [1] dans le cadre du projet LORVER [2]. Le système développé par SEA Marconi a plusieurs caractéristiques qui le rendent potentiellement très intéressant d'un point de vue commercial :

- Le procédé SEA Marconi est auto-thermique, l'énergie nécessaire pour les processus de pyrolyse et de gazéification est produite directement dans le système,

- Il s'agit d'un procédé de production combinée de gaz de synthèse et de char,
- Il permet d'utiliser des biomasses d'origine différente et n'exige pas de traitements excessifs en amont avant d'introduire la biomasse dans les réacteurs,
- Les émissions de polluants gazeux pourraient être réduites.

Une installation pilote (capacité 50 kg/h) est installée actuellement sur le site de Homécourt dans le cadre d'un projet soutenu par la région Lorraine (LORVER). Ce projet propose de réaménager les sols pollués pour permettre l'exploitation de ces terres. Elles pourraient alors produire des cultures qui ne peuvent être à usage alimentaire, mais qui peuvent être valorisées en matériau (fibres) ou énergie. Le procédé de pyro-gazéification SEA Marconi est destiné à utiliser cette biomasse issue de terrains pollués pour la valoriser en produisant de l'énergie et du charbon.

Le procédé innovant comprend trois unités :

- Un premier réacteur de type four rotatif où a lieu la pyrolyse du bois, la chaleur nécessaire pour la réaction est transférée par l'intermédiaire de billes d'acier chaudes qui ont aussi la fonction de diminuer sensiblement la taille du char produit ;
- Un réacteur d'oxydation partielle du char, utilisé pour produire la chaleur nécessaire pour chauffer les sphères en acier issus du réacteur de pyrolyse et qui seront ensuite renvoyées à l'intérieur du réacteur de pyrolyse ;
- Une unité de gazéification catalytique des goudrons, pour transformer les goudrons en syngaz.

L'objectif de cette thèse est d'obtenir une bonne compréhension des processus qui se produisent au sein des unités du système SEA Marconi. Le procédé est extrêmement novateur et comme tel a besoin d'une étude approfondie des phénomènes survenant dans les différentes unités pour être optimisé.

À cette fin, une approche numérique sera utilisée, consolidée à partir de différentes expériences en laboratoire et sur l'unité pilote pour démontrer la validité du modèle numérique. Le modèle numérique dûment validé permettra de trouver un fonctionnement optimal du système.

Le premier chapitre présente le contexte des études. Au départ, le chapitre mettra l'accent sur l'importance économique et politique du développement des énergies renouvelables, sur la composition chimique de la biomasse et les différents procédés de valorisation énergétique actuellement connus. Par la suite, le système SEA Marconi est analysé en détail, par rapport aux autres technologies disponibles. Enfin, une attention particulière sera accordée à la dynamique des tambours tournants.

Le deuxième chapitre fournira plus de détails sur l'approche numérique utilisée dans le cadre de cette étude, ainsi que les différents tests pour calibrer et valider le modèle numérique.

Le troisième chapitre portera sur la modélisation du module de pyrolyse, du point de vue chimique, thermique et dynamique des écoulements solides.

Le quatrième chapitre se concentrera sur la conception d'un modèle pour le réacteur d'oxydation du char. Outre les phénomènes évoqués précédemment pour le réacteur de pyrolyse, il faudra également modéliser l'écoulement de la phase gazeuse. Une validation sera exécutée sur ce modèle, afin d'évaluer son potentiel., une modélisation du réacteur industriel étant hors de portée des moyens de calculs dont nous disposons.

Nous terminerons par un certain nombre de conclusions et de perspectives ouvertes par ce travail.

1. Etat de l'art

Dans ce chapitre, une étude bibliographique portant sur le contexte énergétique global, sur l'utilisation des fours tournants dans l'industrie et sur les technologies utilisées et mises en œuvre dans le cadre des travaux expérimentaux est présentée. Une analyse globale des phénomènes physiques et chimiques impliqués dans ces procédés est aussi réalisée.

1.1 Les énergies renouvelables

Pourquoi les énergies renouvelables ont-elles un rôle si important dans le développement d'une politique énergétique durable ?

Le terme « énergie renouvelable » vient du fait que la source de ces énergies est régénérée dans un temps comparable à l'échelle de temps humaine (même le pétrole a un index de renouvelabilité, bien que très faible). Le caractère renouvelable n'est pas la seule chose qui les rend attrayante par rapport à la plupart des formes d'énergie utilisées à l'heure actuelle (pétrole et nucléaire). La plupart d'entre elles peuvent être considérées comme des « énergies propres », c'est-à-dire comme des énergies avec des émissions de polluants et de CO₂ réduites voire nulles. La problématique du réchauffement climatique et des émissions de Gaz à Effet de Serre est décrite dans l'annexe a.

Les principales formes d'énergie renouvelable reconnues sont :

- Géothermie : cette énergie est abondante dans ce qu'on appelle « terres jeunes », c'est-à-dire les terres dont la formation est plus récente (Islande, Italie, Japon, etc.), elle est basée sur l'exploitation du gradient de température de la terre grâce à des équipements dans le sous-sol (figure 1.1).



Figure 1.1: Usine d'énergie géothermique en Islande

- Énergie éolienne : Les centrales éoliennes sont des « moulins » qui exploitent le vent pour produire de l'énergie par le mouvement des pales, qui est ensuite transformé en électricité via un convertisseur (figure 1.2). Le Danemark génère plus de 25 % de son électricité grâce à l'énergie éolienne [3].



Figure 1.2: Parc éolien

- Énergies marines : l'énergie (thermique ou mécanique) présente dans les mers et les océans.
- Énergie solaire : l'énergie émise par le soleil sous forme de lumière peut être absorbée par le biais de panneaux en silicium (figure 1.3) ou par des capteurs thermiques. Elle est la forme première des énergies renouvelables (mis à part pour la géothermie). Elle est aussi utilisée par une grande partie des organismes vivants pour leurs besoins énergétiques quotidiens.



Figure 1.3: Panneaux photovoltaïques

- Énergie de la biomasse : énergie chimique contenue dans la part organique de la biomasse (lignocellulose, lipides, glucides...).

1.2 La valorisation énergétique de la biomasse

La biomasse valorisable énergétiquement correspond à des productions agricoles ou sylvicoles dédiées, des microalgues, des déchets agricoles (pailles) ou sylvicoles (rémanents). Certains déchets industriels et ménagers peuvent être valorisés avec les mêmes procédés, ce qui peut être bénéfique sur le plan environnemental même si ces déchets sont issus de ressources fossiles. L'utilisation de la biomasse à des fins énergétiques n'aggrave pas le phénomène du réchauffement de la planète, parce que la quantité de dioxyde de carbone rejetée dans l'atmosphère lors de la décomposition ou lors de la conversion en énergie équivaut à celle absorbée pendant la croissance de la biomasse. Donc si la biomasse brûlée est remplacée par la nouvelle biomasse, il n'y a aucune contribution nette à l'augmentation de la concentration de CO₂ dans l'atmosphère. L'utilisation de la biomasse en Europe représente une part plutôt marginale de la consommation d'énergie primaire, tout en étant la première source d'énergie renouvelable, mais le potentiel de cette source d'énergie n'est pas encore pleinement exploité. Dans l'exploitation de la biomasse comme source d'énergie, des pays d'Europe centrale et septentrionale sont à l'avant-garde : dans ces pays on a installé des grandes centrales de cogénération et de chauffage urbain alimentées par la biomasse. La France, qui a la plus grande zone agricole en Europe, en se concentrant sur la production de bio-carburants (biodiesel et éthanol), avait adopté une politique d'exonération fiscale complète. La Grande-Bretagne a développé une production de biocarburants et a mis l'accent sur le développement d'un système complet et efficace pour la récupération du biogaz des sites d'enfouissement pour des usages thermiques et électriques. Dans le cadre européen de la consommation d'énergie de la biomasse, l'Italie est dans un état de mal-développement, malgré son grand potentiel.

Le défaut majeur de la biomasse est toujours la faible densité énergétique (exprimée en J / m³ de matière). D'où la nécessité de convertir la biomasse en des vecteurs d'énergie plus appropriés.

1.2.1 La biomasse

La directive européenne 2009/28/CE, reprise dans toutes les lois, se référant à elle, définit la biomasse comme « la fraction biodégradable des produits, déchets et débris d'origine biologique de l'agriculture (y compris les substances végétales et animales), des forêts et des industries connexes, y compris les pêches et l'aquaculture, ainsi que la fraction biodégradable des déchets industriels et municipaux. ».

Le bois est la principale source de biomasse aujourd'hui ; on peut citer en particulier les résidus forestiers (par exemple les arbres morts, les branches et les souches d'arbres), les déchets verts, les résidus de scierie. Souvent la biomasse du bois est également désignée sous le nom de

biomasse lignocellulosique, en raison de sa structure chimique. Le terme concerne la biomasse sèche, principalement composée de polymères (cellulose, hémicellulose et lignine).

La composition chimique du bois ne peut être définie précisément pour une espèce d'arbre donnée ou même pour un arbre donné. La composition chimique varie avec la partie de l'arbre (racine, tige ou branche), type de bois, emplacement géographique, climat et conditions du sol [4,5]. En général, le bois a une composition élémentaire d'environ 50 % de carbone, 6 % d'hydrogène, 44 % d'oxygène [4] sur base sèche et sans cendres. La présence de grandes quantités d'oxygène dans les polymères végétaux signifie que la chimie pyrolytique diffère nettement de celle des combustibles fossiles.

Les parois cellulaires des plantes sont constituées de trois éléments de base : cellulose, hémicellulose, lignine (figure 1.4) : il s'agit dans tous les cas de polymères organiques contenant de l'oxygène. Les principaux composants chimiques structurels sont des polysaccharides (65-75%) : la cellulose, un polymère de glucosane, et l'hémicellulose, qui est un autre type de polyose constitué de pentoses et d'hexoses. La lignine est un polymère à base phénylpropane et représente 18 à 35 % dans une biomasse lignocellulosique. Schématiquement, les parois cellulaires des plantes sont constituées de fibres de cellulose qui renforcent une matrice d'hémicelluloses et lignine en une ou plusieurs couches (figure 1.4 (c)), la fraction volumique et l'orientation des fibres cellulose variant dans chaque couche. D'autres produits à faible poids moléculaire, principalement extraits organiques et minéraux inorganiques, sont également présents dans le bois (habituellement 4-10 % sur base sèche) [6].

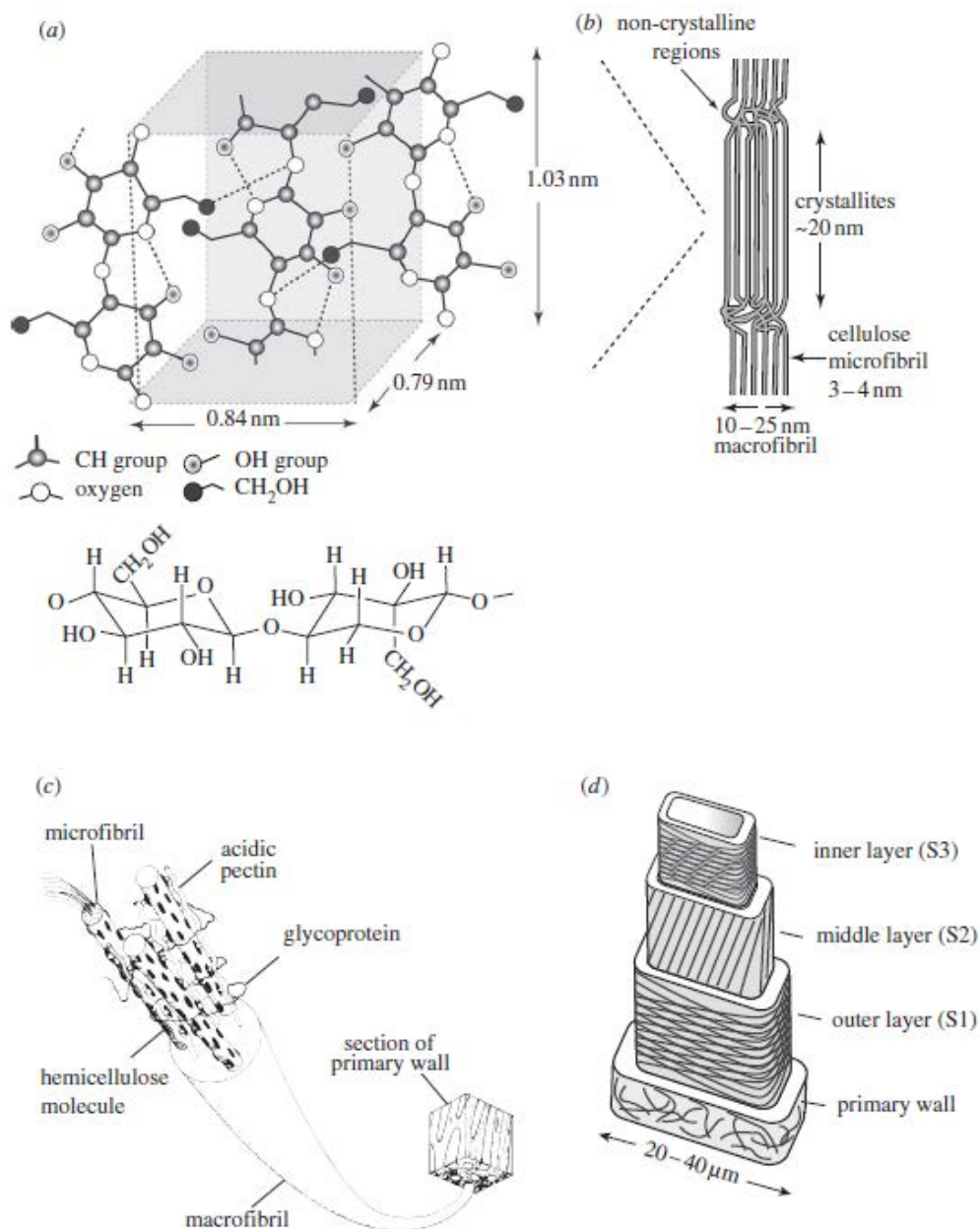


Figure 1.4: Représentation schématique du bois d'après [7]. (a) la structure moléculaire de la cellulose, avec les molécules de glucose alternativement tournées de 180° (ligne pleine, liaisons covalentes, pointillé, liaisons hydrogènes) ; (b) les microfibrilles de cellulose, avec des régions cristallines et non cristalline, regroupées en une macrofibrille ; (c) une macrofibrille d'une paroi cellulaire primaire et (d) la paroi cellulaire du bois, constituée d'une couche primaire et de trois couches secondaires (S1, S2 et S3), avec les microfibrilles de cellulose disposées dans des orientations différentes dans chaque couche.

1.2.1.1 Cellulose

La cellulose est la fibre structurale principale dans le règne végétal et possède de remarquables propriétés mécaniques pour un polymère : son module de Young est à peu près 130 GPa, et sa résistance à la traction est proche de 1 GPa [7]. La cellulose est un polymère de glucane constitué

de chaînes linéaires de glucose liées par des liens 1, 4- β -glycosidique (figure 1.5). (La notation 1, 4- β décrit le lien entre les connexions et la configuration de l'atome d'oxygène entre les unités de glucose adjacentes.)

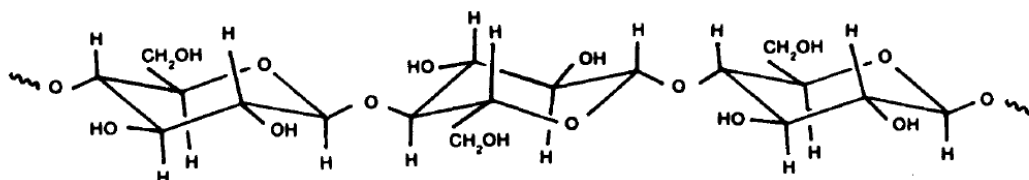


Figure 1.5: une chaîne linéaire d'unités anhydroglucose liées par des liaisons 1,4- β

Le nombre d'unités de sucre dans une chaîne moléculaire est le degré de polymérisation (DP). Même l'échantillon le plus uniforme comporte des chaînes moléculaires avec des valeurs légèrement différentes de DP. La moyenne de DP pour les chaînes moléculaires dans un échantillon donné est désignée par \overline{DP} . Goring and Timell ([8]) ont déterminé le \overline{DP} pour la cellulose native provenant de plusieurs sources de matériel végétal. Ces déterminations de poids moléculaire indiquent que la cellulose de bois a un \overline{DP} d'au moins 9,000-10,000, et peut-être jusqu'à 15,000. Un \overline{DP} de 10,000 reviendrait à une longueur d'une chaîne linéaire d'environ 5 μm dans le bois. En raison de son haut degré de polymérisation et la cristallinité, la cellulose est responsable de la force dans le sens de la fibre de bois [9].

1.2.1.2 Hémicellulose et pectine

Les hémicelluloses (figure 1.6) sont un mélange de polysaccharides du bois presque entièrement basés sur le glucose, le mannose, galactose, xylose, arabinose, acide 4-O méthylglucuronic et résidus d'acide galacturonique. L'hémicellulose se lie à la surface des microfibrilles de cellulose, tandis que la pectine lie les molécules d'hémicellulose de microfibrilles adjacentes (figure 1.4, c).

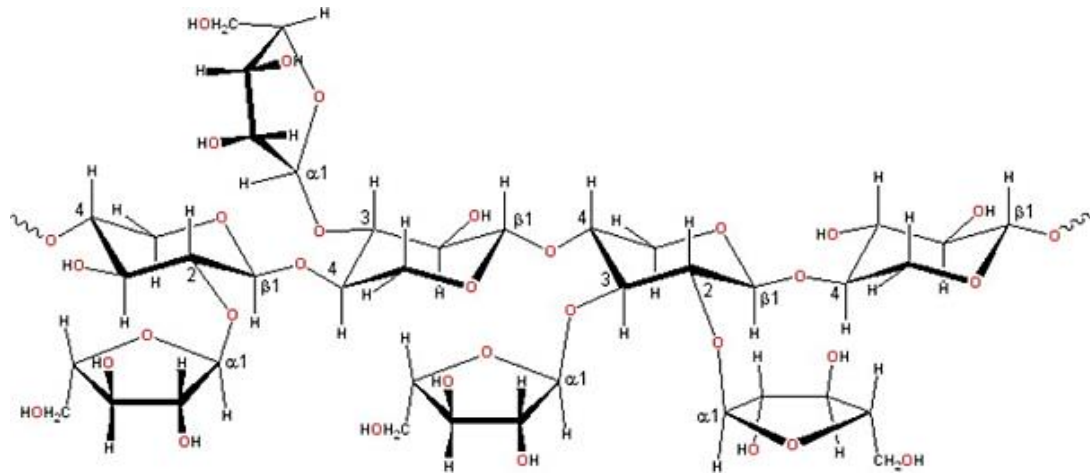


Figure 1.6: Structure ramifiée d'hémicelluloses d'après [10]

1.2.1.3 Lignine

La lignine est une macromolécule racémique réticulée (figure 1.7) de masse moléculaire supérieure à 10 000 Da, constituée de différents polymères complexes amorphes, stables, relativement hydrophobes et à haut poids moléculaire [5]. Elle est relativement hydrophobe et aromatique dans la nature. Le degré de polymérisation est difficile à mesurer, car les polymères sont fragmentés au cours de l'extraction et la molécule se compose de divers types de sous-structures qui semblent se répéter d'une manière aléatoire. Différents types de lignine ont été décrits selon les moyens de l'isolement : il y a trois monomères majoritaires, méthoxylés à des degrés divers : alcool p-coumarylique, l'alcool coniférylique et alcool sinapylique [11]. Les propriétés mécaniques de la lignine sont semblables à celles de polymères techniques courants avec un module d'environ 3 GPa [12] et, avec l'hémicellulose sont responsable de la rigidité du bois dans le sens perpendiculaire aux fibres.

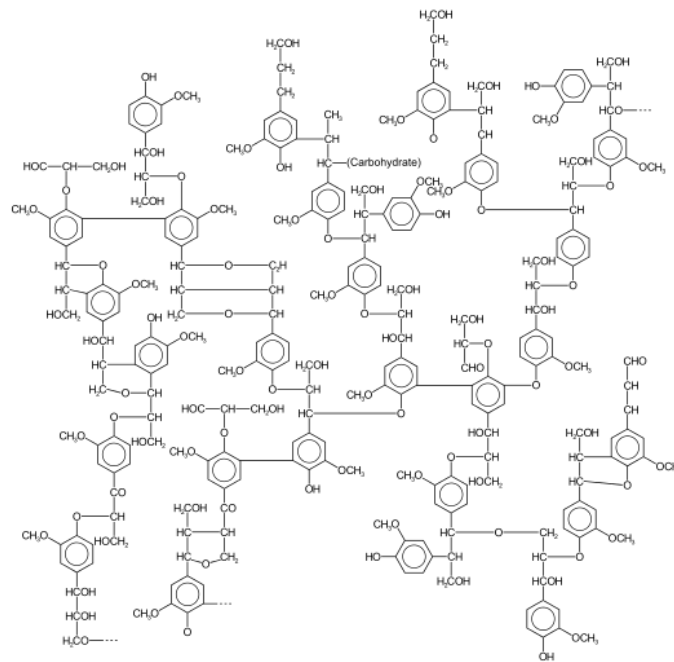


Figure 1.7: Une structure possible de lignine

1.2.1.4 Les minéraux

Les minéraux sont une fraction de composés non organiques trouvés naturellement dans la plante et absorbés à partir du sol. Les minéraux sont utilisés pour former des protéines (comme par exemple nous utilisons le fer pour le site actif de l'hémoglobine). Normalement, après un traitement thermique, les minéraux sont retrouvés sous forme de cendres. Les principaux éléments des biomasses sont Al, K, P, Si, Mg, Ca, Fe et Na [13], dont Si, Ca, K, Na et P sont les plus importants pour la croissance de la biomasse. Leur concentration varie considérablement dans la plante non seulement en fonction de sa croissance, mais aussi en fonction du type de sol et des organes de la plante pris en compte (feuille, tronc, racines, etc.) ; il est de ce fait extrêmement difficile de fournir des concentrations moyennes. Les éléments secondaires, que l'on trouve en faible pourcentage, sont Cu, Zn, Fe, Mn et Mo. Ils jouent des fonctions biochimiques et physiologiques chez les plantes et les animaux. Deux grandes fonctions de ces métaux sont les suivantes : (a) participation à la réaction d'oxydoréduction et (b) participation directe, faisant partie intégrante de plusieurs enzymes. Le cuivre est un métal lourd indispensable pour plus de plantes et d'algues, en particulier pour la photosynthèse ([14,15]), car il peut facilement gagner et perdre un électron, il est un cofacteur de l'oxydase, mono- et di-oxygénase et des enzymes impliquées dans l'élimination des radicaux superoxydes. Plusieurs enzymes contiennent le Zn ; de plus, le zinc est nécessaire pour maintenir l'intégrité du ribosome. Il participe à la formation d'hydrates de carbone et catalyse les processus d'oxydation dans les plantes. Le zinc fournit également un rôle structurel dans les nombreux facteurs de transcription et est un cofacteur du RNA polymérase. Le zinc est considéré comme un

micronutriment essentiel pour les organismes vivants et il est un composant de l'enzyme urease. Le manganèse joue un rôle important dans les réactions des enzymes. Chez les plantes, le cobalt complexe se trouve sous la forme de la vitamine B 12. Le fer est un élément essentiel dans de nombreux processus métaboliques et est indispensable pour tous les organismes [16]. Il est également vrai que certains minéraux non utiles à la croissance sont également absorbés par la plante, lorsqu'ils sont naturellement présents dans le sol ou qu'ils proviennent des activités humaines qui polluent le sol de croissance.

1.2.2 Les différents types de valorisation

Bien que les bûches de bois puissent être utilisées directement, la plupart des usines de conversion à grande échelle utilisent des déchets de bois, obtenus à partir de différentes opérations : résidus de scieries, bois de démolition et de construction, déchets municipaux de bois ou palettes ([17]). Ces résidus pourraient produire environ 40 EJ/an, dans le monde entier ([18]), même si certaines estimations atteignent 115 EJ/an ([19]). Un problème majeur pour les cultures énergétiques (taillis à courte rotation, miscanthus, eucalyptus...), c'est qu'ils sont en concurrence avec les cultures pour la nourriture. L'utilisation de déchets de l'agriculture et de résidus forestiers ne souffre pas de ce problème et pourrait contribuer jusqu'à 270 EJ/an, dont environ 100 EJ/an proviendraient de résidus de récolte et 50 EJ/an de résidus forestiers ([19,20]).

Une caractéristique importante est l'hétérogénéité élevée qui caractérise la biomasse. S'utilise après d'une part c'est un solide léger et humide dont le pouvoir calorifique est faible, ce qui empêche son utilisation dans les moteurs et augmente sensiblement les coûts de transport. De ce fait, la biomasse est parfois transformée par des procédés mécaniques ou chimiques (pelletisation, torréfaction [21]) pour avoir des solides plus denses sur le plan énergétique (par augmentation de la densité, diminution de l'humidité,...).

On peut distinguer deux grands groupes de processus de valorisation énergétique de la biomasse : les processus thermochimiques et les processus biochimiques. Les processus biochimiques visent à transformer la biomasse par des procédés enzymatiques ou bactériens en biocarburants, tels l'éthanol ou le méthane [22–24]. Les procédés thermochimiques visent à obtenir des vecteurs d'énergie gazeux, liquide ou solide grâce à des traitements thermiques sévères. La figure 1.8 présente un aperçu des procédés de traitement thermochimique.

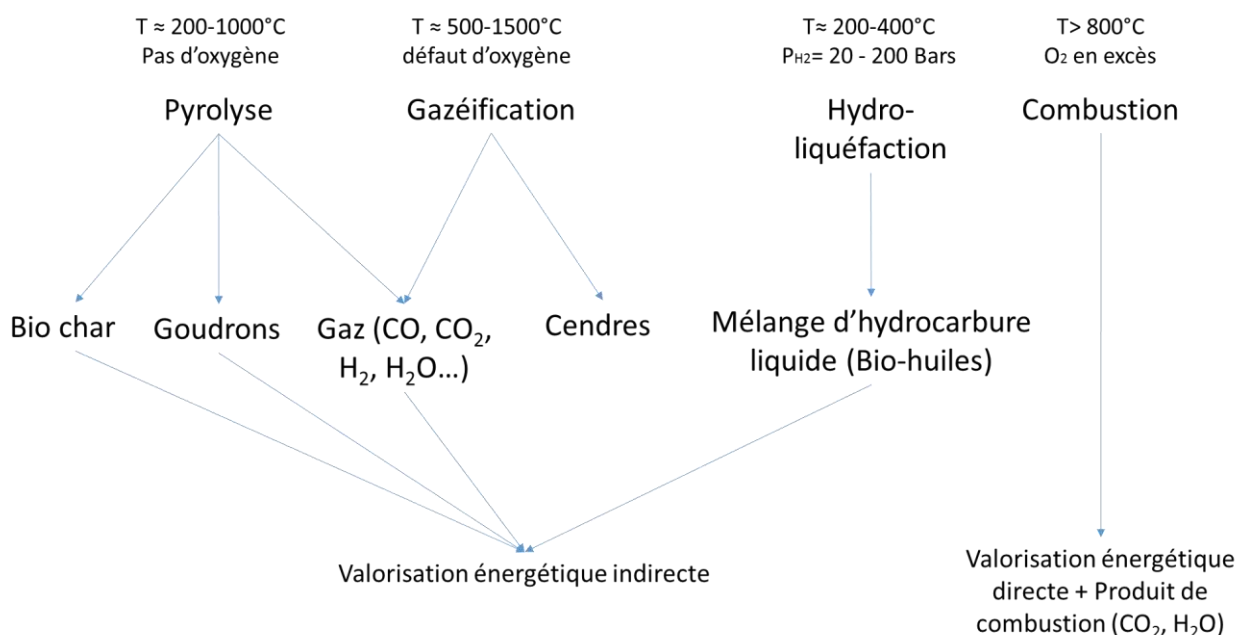


Figure 1.8: Procédés thermochimiques de valorisation de la biomasse

La combustion est certainement le premier procédé thermochimique : elle est connue et utilisée depuis la préhistoire, l'énergie est produite par l'oxydation exothermique de la biomasse dans des foyers ouverts, des poêles ou des chaudières. Dans ce cas il n'est pas nécessaire d'utiliser des traitements préliminaires excessifs. De fait la biomasse passe souvent par un processus de déchiquetage et séchage afin d'augmenter la surface spécifique et la vitesse de combustion. Parfois un procédé de pelletisation en granulés de bois est effectué, pour chercher à améliorer leur densité de puissance. Ce type de valorisation est aussi assez diffusé au niveau résidentiel (cheminées, poêles à bois etc.), mais au niveau environnemental, cela n'est pas l'optimal parce qu'il y a plusieurs problèmes liés à la formation de polluants comme les dioxines, les suies, le CO, les COV (composants organiques volatiles), etc. Dans le tableau 1.1 une comparaison des émissions des différents polluants libérés par des systèmes domestiques est présentée.

	CH_4	CO	COV	HAP	Particules
Poêle à bois	700	5000	400	15	100
Poêle à granulés	0.5	500	2	2	15
Poêle à l'huile	0.5	0.5	0.5	0.01	10

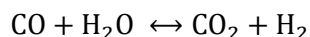
Tableau 1.1: Comparaison des émissions de polluants dans le systèmes domestiques en mg de polluant produit / MJ d'énergie produite [23]

Au niveau industriel, les émissions sont réduites, grâce à une combustion mieux gérée et à la possibilité d'avoir des systèmes de nettoyage des effluents gazeux, mais il y a quand même des

soucis liés aux cendres. Leur fusion à basse température (moins de 1000°C [25]) augmente le risque de formation de mâchefers sur les grilles de distribution d'air.

La pyrolyse est un processus de valorisation thermique indirecte, impliquant le fractionnement endothermique de la biomasse en molécules plus courtes par le biais de la fourniture indirecte de chaleur, en l'absence d'oxygène pour éviter la combustion. Les premières étapes d'un traitement de thermo-valorisation sont presque toujours le séchage et la pyrolyse [26,27]. L'utilisation de la pyrolyse remonte au moins aux temps des antiquités égyptiennes, et est déjà citée dans la Bible, quand les goudrons étaient utilisés pour étanchéifier les bateaux. Certains agents d'embaumement ont été produits par pyrolyse [28]. Les trois produits majeurs de ce procédé sont : le char, une fraction solide à base de carbone qui contient aussi la fraction minérale des matières brutes ; le goudron, la partie de biomasse fractionnée partiellement et dont la composition varie grandement selon les temps de séjour et température du gaz de pyrolyse ; et le gaz, fraction gazeuse composée de gaz simples tels que CO, H₂, CH₄, CO₂, H₂O.

La gazéification est un procédé de valorisation thermique indirecte, qui prévoit une alimentation d'oxygène en défaut par rapport à la combustion totale. On obtient alors principalement CO, H₂, CH₄, CO₂, H₂O et les cendres. Par rapport à la pyrolyse, l'objectif est de favoriser les gaz permanents au détriment des goudrons et du charbon. Parfois de l'eau est ajoutée dans le gazéifieur pour augmenter la quantité d'hydrogène produite à travers la réaction de gaz à l'eau (équation 1.1) :



Équation 1.1

Les problèmes principaux de la gazéification sont :

- La teneur résiduelle en goudrons (des HAP qui ont tendance à encrasser les appareils lors du refroidissement du gaz)
- Le faible pouvoir calorifique du gaz produit, qui contient de l'azote provenant de l'air injecté.

L'hydro-liquéfaction consiste à couper les liaisons chimiques entre les constituants de la biomasse grâce à un solvant (eau, éthanol...) porté à température moyenne (200-400°C) sous haute pression. L'addition d'hydrogène en présence de catalyseur permet de désoxygéner les huiles et de réduire les réactions qui conduisent à la production de gaz. Dans ce cas, l'objectif principal est d'obtenir des huiles.

1.2.3 Conclusions et remarques

L'impact de l'homme sur l'environnement est certainement inquiétant : nous avons aperçu les effets qu'aurait une croissance incontrôlée de certains pays émergents, ainsi que la poursuite de la croissance dans les pays développés. Les conclusions des experts prédisent la désertification, la submersion de certaines terres et des phénomènes météorologiques dangereux.

En revanche, nous espérons que l'utilisation d'énergies renouvelables est une alternative viable à l'utilisation de combustibles fossiles et de l'énergie nucléaire. En général, les faibles émissions de polluants, la capacité de réduire les émissions de CO₂ dans l'atmosphère et leur capacité à être « inépuisable » sont des caractéristiques qui les rendent extrêmement attrayantes pour encourager le développement durable. Il est également vrai, cependant, que les énergies renouvelables ont une forte dépendance géographique : les ressources renouvelables qui abondent dans un pays ne sont pas forcément abondantes dans un autre. Par exemple, la France, avec son abondance de terres agricoles et de forêts, a la possibilité d'utiliser la biomasse énergie pour atteindre les préconisations prônées par l'Europe.

En ce qui concerne la valorisation, le problème principal de la voie biochimique est sa concurrence avec l'industrie alimentaire lorsqu'elle utilise des ressources nobles (sucres, huiles...). De ce fait, la valorisation énergétique par voie thermochimique peut être intéressante pour produire de l'énergie de façon durable, même si des recherches sont encore nécessaires pour développer à une échelle industrielle les procédés de pyrolyse et gazéification. La combustion directe de la biomasse a des limites : elle produit de la chaleur de manière efficace, mais ne permet pas l'obtention de carburant et conduit à un rendement électrique très modeste (moins de 25%). Par contre, la pyrolyse/gazéification constitue une voie assez intéressante pour la production de gaz qui peut en fine être utilisé pour la production efficace d'électricité ou de bio-carburant. En plus, les procédés de pyrolyse et de gazéification constituent une voie intéressante pour valoriser les déchets produits par l'agriculture, l'industrie et les ménages. Cela permet d'éviter les gâchis et le stockage des déchets. Parmi les procédés thermochimiques, la pyrolyse fait l'objet d'un intérêt certain, car les conditions peuvent être modulées afin de maximiser la production de char, de liquides ou de gaz [29]. En particulier, la production de liquides de pyrolyse a été étudiée dans le but d'utiliser la bio-huile directement dans des applications de carburant. Son utilisation dans des moteurs étant difficile, il semble préférable de la désoxygéner pour pouvoir la rendre compatible avec des carburants raffinés ou bien pour obtenir des produits chimiques. Le char solide peut être utilisé comme combustible sous forme de briquettes ou comme un slurry de char-huile/eau. Il peut être transformé en charbon actif et utilisé dans les procédés de purification. Enfin le biochar peut être utilisé pour amender des sols (ce qui est un des objectifs du projet LORVER dans lequel s'inscrit cette thèse ; cette utilisation

sera décrite dans §1.3.1). Les gaz générés ont un faible pouvoir calorifique, mais peuvent être valorisés par combustion dans un moteur pour produire de l'électricité et de la chaleur.

1.3 La pyrolyse-gazéification

Nous avons vu dans la section 1.2.1, que la pyrolyse est un traitement thermique en l'absence d'oxygène, transformant les polymères qui composent le bois en molécules plus simples et exploitables sur le plan énergétique. Un simple aperçu de la pyrolyse est présenté dans la figure 1.9. La pyrolyse est un processus globalement endothermique : une grande partie de la demande thermique provient en fait du séchage du bois et de la montée en température du solide (bois, puis charbon). Les étapes au cours de la pyrolyse sont alors [23]:

- (1) le transfert de chaleur pour augmenter la température à l'intérieur de la biomasse ;
- (2) l'évaporation de l'eau contenue dans la biomasse
- (3) le déclenchement des réactions primaires de pyrolyse à température plus élevée qui libère des substances volatiles et forme du char ;
- (4) la circulation des volatils chauds vers les solides plus froids, qui se traduit par le transfert de chaleur entre les substances volatiles chaudes et la biomasse froide non pyrolysée ;
- (5) la condensation de certaines des substances volatiles dans les parties froides, suivie de réactions secondaires, pouvant produire de goudrons ;
- (6) des réactions auto catalytiques de pyrolyse secondaire et les réactions primaires de pyrolyse (le point 3 ci-dessus) se produisent simultanément en compétition ; et
- (7) décomposition thermique, reformage, réaction de gaz à l'eau, recombinaison des radicaux et déshydratations peuvent également se produire, qui dépendent du temps de séjour / de la température / du profil de pression.

Le profil de pression, la température et le temps de séjour sont des variables clés pour accroître le rendement d'un produit particulier

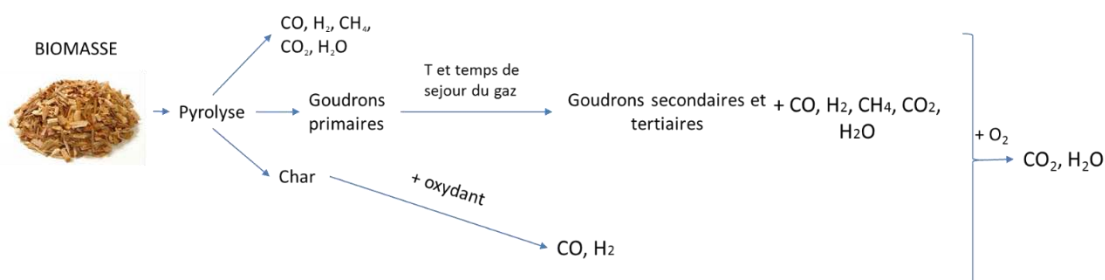


Figure 1.9: Produits de pyrolyse

Généralement on distingue plusieurs types de pyrolyse, selon le type de produit visé :

- pyrolyse lente ou carbonisation lorsque le produit désiré est le char, dans ce cas les conditions sont généralement plus douces (vitesse de chauffage faible, temps de séjour plus long) même si elle peut fonctionner à haute pression pour favoriser la formation de biochar.
- pyrolyse rapide quand le produit désiré est la biohuile. Dans ce cas il faut utiliser des vitesses de chauffage plus élevées et des temps de séjour courts en phase gazeuse, pour réduire les réactions secondaires des goudrons (figure 1.9).
- pyro-gazéification quand le produit désiré est le gaz. Dans ce cas, il faut maintenir les goudrons à haute température pour maximiser leur transformation en gaz. L'augmentation de température peut être réalisée par un apport de gaz oxydant (oxygène ou air).

Les conditions physiques de la pyrolyse de la biomasse, comme la température de la source chaude (sable, gaz, paroi, billes métalliques), l'intensité du transfert de chaleur entre la source chaude et la biomasse, ainsi que les temps de séjour du solide et du gaz ont un effet profond sur les rendements et la composition des produits.

1.3.1 Utilisations des produits de pyrolyse

Le char peut être utilisé comme combustible. C'est aussi, pour certains procédés métallurgiques, un substitut attrayant pour le coke provenant de combustibles fossiles, car il contient de faibles concentrations de métaux. Dans de telles applications, le char est neutre en carbone, c'est-à-dire qu'il libère dans l'atmosphère le carbone que la biomasse dont elle était dérivée avait capturé de l'atmosphère. Lorsqu'ils sont utilisés, les liquides et les gaz de pyrolyse sont aussi neutre en carbone. Le char peut-être un excellent fertilisant : il améliore la texture du sol, il conserve et libère lentement les éléments nutritifs et l'eau et sert de support pour les organismes utiles ([30–32]). C'est dans ce contexte particulier que l'on utilise l'intitulé « biochar ». La fertilité élevée des sols anthropiques, comme *terra preta*, dans l'Amazonie est liée à la teneur élevée en carbone organique sous forme de char et de la pratique de "slash and char" par les peuples indigènes précolombiens de l'Amazonie [33].

L'effet de l'amendement du biochar sur la respiration du sol et sur les émissions de CO₂ peut varier ([34]). La production de CO₂ d'un sol limoneux en Suisse modifié avec des biochars dérivés du bois de pin est inchangée, tandis qu'elle augmente si l'amendement est fait avec un biochar provenant de la pyrolyse d'herbe ([35]). D'après Bell et Worrall ([36]), un amendement de biochar de bois conduit à une augmentation significative de la respiration du sol de parcelles non ensemencées, ce qui n'est

pas le cas pour des parcelles végétalisées. En revanche, Karhu et al. ([37]) ne rapporte aucun effet du biochar sur la respiration du sol d'un champ de blé dans le sud de la Finlande. L'effet de l'amendement par du biochar sur la respiration du sol pourrait être une fonction de la teneur en carbone organique ou de la labilité du carbone du sol et du biochar modifié ([38,39]) ; la respiration microbienne du sol pourrait être faiblement renforcée avec une grande quantité de C labile en entrée ([40–42]). D'après Jones et al. ([43]), l'application du biochar au sol pourrait réprimer le carbone organique natif du sol (COS).

Les biohuiles, obtenues par pyrolyse de déchets de bois ou agricoles sont des mélanges de nombreux composés. Des produits chimiques utiles peuvent potentiellement être extraits de la biohuile, mais cette voie de valorisation est complexe. A l'heure actuelle, la bio-huile est surtout utilisée en tant que combustible liquide. Bridgwater fournit un examen détaillé des propriétés des biohuiles et de leurs applications [44]. Les huiles ont été considérées comme combustibles pour les chaudières, moteurs modifiés de voiture ou camions, générateurs diesel ou turbines pour produire de l'électricité. Les huiles sont des mélanges complexes d'hydrocarbures oxygénés et d'eau (issue de l'humidité de la biomasse et des réactions de pyrolyse). Elles peuvent contenir de faibles quantités de fines particules de char [44]. Selon la composition de la biomasse et les conditions de pyrolyse, la biohuile peut être une émulsion stable ou instable (séparation en une phase aqueuse et une phase organique lourde qui contient toujours une quantité importante d'eau dissoute, ce qui nuit à son pouvoir calorifique). La plupart des composés présents dans la biohuile sont oxygénés, ce qui réduit encore davantage son pouvoir calorifique, qui est généralement d'environ 50 % de la valeur calorifique d'un carburant diesel ([44,45]). La biohuile peut s'oxyder rapidement lorsqu'elle est chauffée et les réactions de condensation/polymérisation conduisent à la formation des gommages. La distillation des huiles conduit alors à l'obtention d'un résidu solide important. Alors que la stabilité de la biohuile à la température ambiante devrait suffire pour le transport, elle doit être renforcée avec des additifs tels que l'éthanol pour le stockage à long terme ([46]). Des améliorations dans la qualité de la biohuile peuvent être obtenues; par exemple, en faisant évaporer les volatils et l'eau sous pression réduite et en ajoutant de l'éthanol à la biohuile restante pour améliorer sa stabilité, réduire sa viscosité et faciliter sa filtration ([47]). Une autre possibilité d'amélioration des biohuiles est leur hydrogénation catalytique pour les transformer en « kérosène synthétique ». Il s'agit d'une voie de recherche de l'équipe Greener du LRGP en particulier lors de la thèse de Olcese : « Valorisation des vapeurs de pyrolyse de lignine par hydrodéoxygénation directe catalysées par le fer » [48].

Le gaz de synthèse, est un mélange de monoxyde de carbone et d'hydrogène. Il est actuellement produit à partir de gaz naturel ou de charbon et peut être utilisé pour produire une variété de produits chimiques comme l'ammoniac ou le méthanol, à l'aide de processus bien établis. Le gaz de synthèse peut également être converti en pétrole synthétique pour utilisation comme carburant ou lubrifiant par synthèse Fischer-Tropsch, en utilisant les technologies qui ont été initialement mises au point

en Allemagne pendant la seconde guerre mondiale et affinées en Afrique du Sud lorsqu'elle a été soumise à un embargo en raison de sa politique de l'apartheid [23]. Le gaz de synthèse pourrait également être utilisé comme produit intermédiaire lorsque le produit désiré est l'hydrogène. Le monoxyde de carbone est alors transformé en hydrogène supplémentaire grâce à la réaction de gaz à l'eau.

La pyrolyse de la biomasse produit un gaz qui contient du CO, mais aussi du CO₂, CH₄ et d'autres hydrocarbures légers. Le contenu en H₂ est très bas lorsque la température du gaz est inférieure à 600°C, mais peut devenir important lorsque les vapeurs d'huiles (goudrons primaires) sont craqués à T>750°C. On parle alors de pyro-gazéification qui produit du charbon et du gaz, plus ou moins chargé en goudrons. Le procédé SEA Marconi est de ce type. La co-production de gaz et de charbon réduit le rendement en gaz par rapport à un procédé classique de gazéification, mais permet l'obtention d'un char valorisable.

1.3.2 Les réacteurs de pyro-gazéification

Bien que la pyrolyse / gazéification de la biomasse ait atteint un statut commercial, beaucoup d'aspects du procédé sont en grande partie empiriques et il y a besoin de plus d'études pour améliorer la fiabilité, la performance et la constance des produits. Cette section offre un panorama des réacteurs de pyro-gazéification les plus utilisés actuellement.

1.3.2.1 *Lit fixe*

Le gazéifieur à lit fixe a été le procédé traditionnel utilisé pour la gazéification, exploitée à des températures autour de 1000° C. Selon la direction du flux d'air, les gazogènes sont classés en co-courant et contre-courant.

Lit fixe contre-courant

Dans le gazéifieur à lit fixe contre-courant, le flux de biomasse solide est introduit par le haut et l'air en bas de l'appareil via une grille (figure 1.10). Immédiatement au-dessus de la grille le char solide formé est brûlé et la température atteint environ 1000° C. La cendre tombe à travers les grilles au fond et les gaz chauds passent vers le haut et sont réduites. Plus en haut, la biomasse est pyrolysée et dans la zone supérieure, l'alimentation est séchée, en refroidissant les gaz à environ 200 à 300° C. Dans la zone de pyrolyse, où les composés volatils sont libérés, des quantités considérables de goudron sont formées. Une partie des goudrons formés condense sur la biomasse froide et une partie sort avec les produits. La température dans la zone de gazéification est contrôlée par l'ajout

de vapeur à l'air utilisé pour la gazéification, ou par humidification de l'air. En raison de la basse température du gaz qui sort du réacteur, l'efficacité énergétique globale du processus est élevée, mais il y a aussi beaucoup de goudron contenu dans le gaz. L'effet de filtration par le lit permet de produire un gaz à faible teneur en particules.

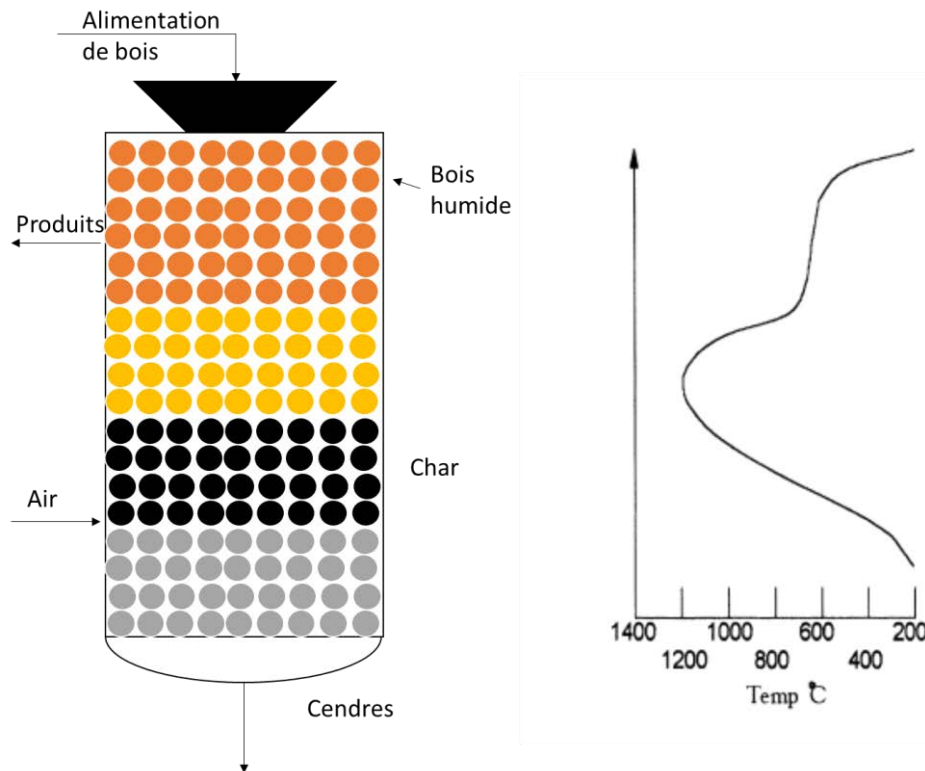


Figure 1.10: Gazéifieur à lit fixe contre-courant (gauche) et un profil typique de température [49]

Lit fixe co-courant

Dans le gazéifieur à lit fixe co-courant, l'alimentation et l'air se déplacent dans le même sens (figure 1.11).

Les gaz produits quittent le réacteur en passant par la zone chaude, ce qui permet le craquage partiel des goudrons formés au cours de la gazéification et donnant des gaz à teneur faible en goudron. Les gaz sortant de l'unité à haute température (environ 900-1000°C), l'efficacité énergétique globale est faible, en raison du flux de chaleur élevée contenu dans les gaz chauds. La teneur en goudron de gaz produit est plus faible que pour un gazéifieur à lit fixe contre-courant, mais la teneur en particules des gaz est élevée.

En raison de sa faible teneur en goudrons dans le gaz, cette configuration est généralement préférée pour la production d'électricité à petite échelle avec un moteur à combustion interne.

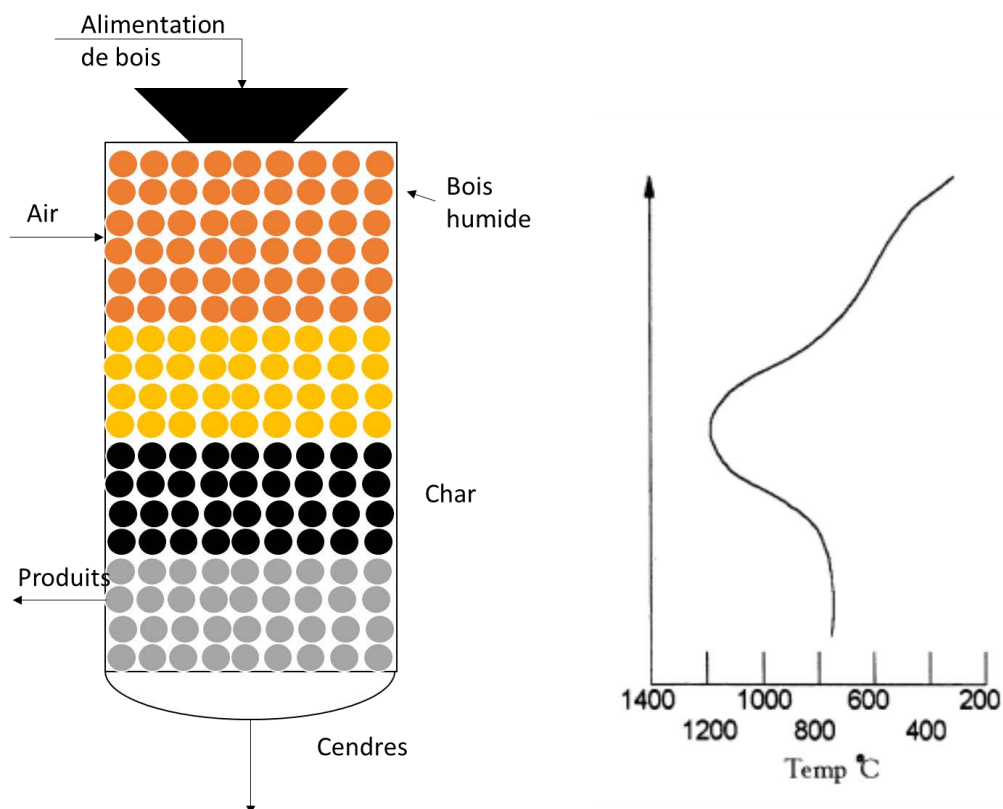


Figure 1.11: Gazéifieur à lit fixe co-courant (gauche) et un profil typique de température [49]

1.3.2.2 Lit fluidisé

Dans les technologies de pyrolyse en lit fluidisé et en lit fluidisé circulant, la chaleur est transférée à la biomasse par un solide caloporteur (sable) qui assure également la fluidisabilité du lit. La limitation de transfert de chaleur est située généralement au sein de la particule, exigeant donc des particules fines - en général pas plus de 3 mm - pour obtenir de bons rendements de liquides. De grandes quantités de gaz vecteur sont nécessaire pour fluidiser. Les réacteurs à lit fluidisé sont caractérisés par un bon transfert de chaleur et un bon mélange des matières premières, ce qui en fait l'outil de choix pour réaliser une pyrolyse avec un rendement maximum en bio-huiles.

Lit fluidisé circulant

Les lits fluidisés circulants (figure 1.12) sont capables de faire face à des débits de grande capacité et sont utilisés dans l'industrie papetière pour la gazéification de l'écorce et des autres forêts résidus. Le matériau du lit est distribué entre le réacteur et un séparateur à cyclone, où les cendres sont supprimées et le matériau du lit et le char retourné dans la cuve de réaction. Les gazéifieurs peuvent fonctionner à des pressions élevées, l'avantage étant pour ces applications finales où le gaz est nécessaire pour être comprimé par la suite, comme dans une turbine à gaz.

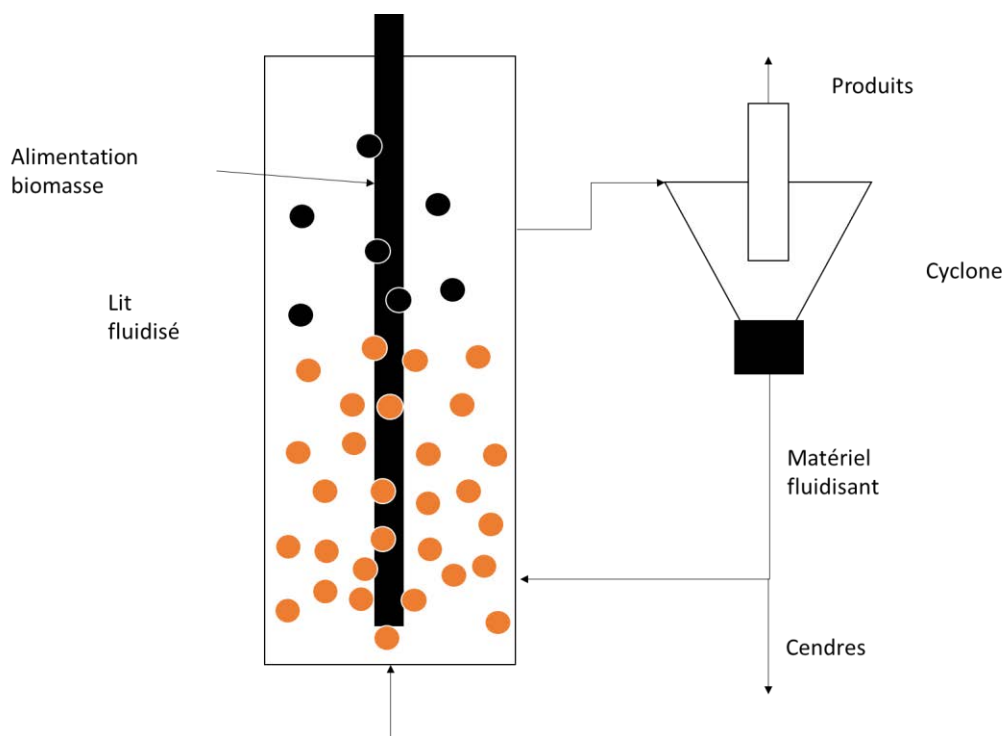


Figure 1.12: Gazéifieur à lit fluidisé circulant

Lit fluidisé dense

Le lit fluidisé dense composé d'un récipient contenant une grille en bas à travers laquelle l'air est introduit (figure 1.13). Au-dessus de la grille, le lit fluidisé est composé de particules fines dans lequel est introduit la biomasse. La température de la chambre est régulée de 700 à 900°C en contrôlant le ratio air/biomasse. La biomasse est pyrolysée dans le lit chaud pour former un char avec des composés gazeux, les composés de haut poids moléculaire étant craqués par le contact avec le matériau du lit chaud, produisant ainsi un gaz à teneur en goudron inférieure à 10 g/Nm³.

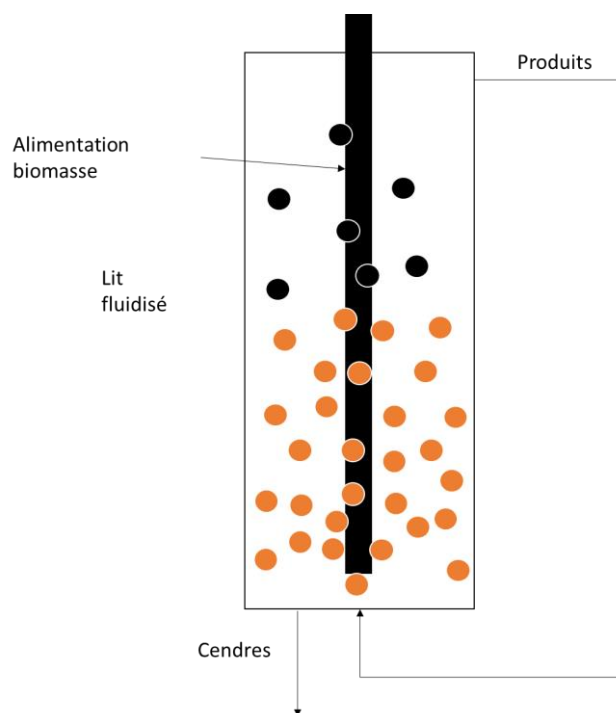


Figure 1.13: Gazéifieur à lit fluidisé dense

1.3.2.3 Four tournant

Le four rotatif est plus efficace que le réacteur à lit fixe pour le chauffage de la matière première. La rotation lente d'un four incliné permet un bon mélange de matière hétérogène. Les réacteurs de type four rotatif sont largement utilisés, mais ils sont typiquement utilisés pour la pyrolyse conventionnelle (pyrolyse lente), qui est caractérisée par une vitesse lente de chauffe avec des proportions importantes de biochar. Les vitesses de chauffe sont en général inférieures à 100°C/min et les temps de séjour du solide atteignent 1 h. Les technologies de pyrolyse de déchets urbains solides les plus fréquemment décrites sont basées sur des fours rotatifs [50], parce que le four rotatif a beaucoup d'avantages par rapport aux autres types de réacteurs. Outre le bon mélange, l'ajustement flexible du temps de séjour à travers l'ajustement de l'inclinaison et de la vitesse de rotation, permet l'alimentation de matériaux hétérogènes, et donc, un prétraitement important n'est pas nécessaire. Par ailleurs, son entretien est simple et sa fiabilité élevée. Les fours rotatifs de pyrolyse sont en général chauffés par l'extérieur à l'aide de gaz de pyrolyse brûlé (chauffage indirect). Le calcul du transfert de chaleur, du transfert de matière et de la conception du four ont été étudiés pour des matériaux homogènes ([21,51–54]).

1.3.3 Observations et conclusions sur les différents types de réacteurs

Les technologies de réacteur analysées ci-dessus représentent les technologies les plus utilisées industriellement. Il faut noter que le choix technologique du réacteur a une influence importante sur le reste du procédé (prétraitement, dépoussiérage, nettoyage du gaz...).

Souvent le prétraitement de la biomasse comporte des étapes de séchage et de réduction de taille. Bien que ces étapes soient toujours souhaitables et nécessaires dans certains cas, elles sont onéreuses. En ce qui concerne les fours rotatifs, la réduction de taille n'est pas nécessaire.

Concernant le post-traitement, il dépend fortement du type de technologie choisi et du type d'utilisation des produits (combustion en chaudière, combustion en moteur, upgrading catalytique). La fonction de base du post traitement consiste à éliminer les contaminants à l'intérieur du gaz produit, ce qui peut être rapidement résumée dans le tableau 1.2.

Polluant	Exemple	Problème	Méthode de nettoyage
Particules fines	Cendres charbon	Erosion et blocage	Filtration et lavage
Métaux alcalins	Composé à base de sodium et potassium	Corrosion	Refroidissement, filtration, adsorption
Goudrons	Aromatiques	Blocage, déposition	Craquage et nettoyage
Soufre, chlore	H ₂ S, HCl	Corrosion, émission	Absorption et lavage

Tableau 1.2: Polluants du gaz produit, problèmes liés à leur présence et technologies de nettoyage [55]

Selon la quantité de contaminants, ces traitements doivent être plus ou moins intenses, influençant fortement les coûts de mise en place.

Le réacteur à lit fixe se caractérise par une faible vitesse de chauffage (VC), la conductivité thermique d'un lit fixe gaz-solide étant médiocre. Par conséquent, la température n'est pas uniforme à l'intérieur du réacteur ([56]), et la matière première est décomposée à des températures différentes selon l'emplacement dans le réacteur. Les réacteurs à lit fixe ont été principalement utilisés pour identifier les paramètres influents les produits de la pyrolyse à des tailles suffisamment petites pour que la température puisse être considérée comme presque uniforme, mais une application industrielle est difficilement envisageable en raison des différents problèmes liés au « scale-up » de ce système. Si la pyrolyse lente (objectif charbon de bois) est envisageable dans des lits fixes, il est difficile d'envisager un processus de pyrolyse rapide en lit fixe [57].

Un réacteur à lit fluidisé a la particularité d'avoir des coefficients de transferts extrêmement importants, ce qui le rend parfait pour fonctionner à des températures élevées et pour éviter les points chauds qui provoqueraient la liquéfaction des cendres et de ce fait des phénomènes d'agglomération, qui, poussés à l'extrême, conduisant à la défluidisation du système et à l'encrassement des parois. En revanche, un lit fluidisé présente toujours l'inconvénient de nécessiter des traitements préalables de la biomasse pour réduire la taille, et donc un coût élevé dû au prétraitement, qui pénalise moins d'autres types de réacteurs analysés. En ce qui concerne les réacteurs tournants, ils ont certainement des coefficients de transfert de chaleur plus bas que les lits fluidisés. Le rapport de la surface des parois à la masse de matière première, et la taille grossière des particules entraîne une faible vitesse de chauffe [50], rendant presque impossible son utilisation pour la production de biohuile, qui, rappelons-le demande des coefficients de transfert de chaleur importants.

Le principal avantage du four tournant réside dans sa capacité à être extrêmement polyvalent pour le traitement des systèmes hautement hétérogènes, ce qui convient par exemple dans le cas de procédés de traitement de déchets, qui sont très hétérogènes par nature [58]. Le mélange continu contribue également à l'uniformité de la température à l'intérieur du lit solide et empêche ainsi la fusion éventuelle des cendres.

1.4 Description du pilote de pyro-gazéification de SEA Marconi

Le projet LORVER utilise et contribue au développement de la technologie de pyro-gazéification de l'entreprise SEA Marconi. Initialement, le système Haloclean a été développé dans le cadre d'un projet européen [59] visant le traitement et la valorisation de déchets électriques et électroniques. La technologie a été réorientée vers la conversion de la biomasse en électricité, en chaleur et en biochar. Le réacteur thermochimique doit alors transformer les matières carbonées (biomasse) en gaz et biochar. Le cœur du système est basé sur la technologie de pyro-gazéification flexible basée sur un brevet [60]. Le combustible gazeux produit pourrait alimenter un moteur pour la production combinée d'électricité et de chaleur (cogénération).

Le projet LORVER vise plus généralement à la création d'une filière de production de biomasse végétale à usage industriel à partir de sites et de matériaux délaissés. En Lorraine, un consortium composé de 4 sociétés, qui comprend SEA Marconi France Sarl, et 8 laboratoires a été mis en place pour réaliser ce projet. Concernant le système de pyro-gazéification, une unité pilote a été installée sur le site de Homécourt de SEA Marconi France, afin de mener des campagnes d'essais sur différents types de biomasse. Aucun moteur ne sera utilisé et le gaz produit sera brûlé par une torche.

1.4.1 Schéma général du système

Cette section décrit les caractéristiques générales, les principes fondamentaux, les éléments, la performance et l'architecture de l'unité pilote de conversion thermochimique de la biomasse en gaz et biochar (capacité 50 à 70 kg/h de biomasse).

Ce procédé a la particularité d'utiliser comme transporteur de chaleur des billes d'acier, qui favorisent le mélange en phase solide et ont aussi la capacité de broyer éventuellement les couches de charbon qui se forment sur la biomasse pendant la pyrolyse. Le procédé de SEA Marconi est formé de trois réacteurs (figure 1.14). Tous les réacteurs sont tournants, ce qui a pour conséquence d'améliorer le mélange en phase solide et les échanges avec le gaz environnant.

Les biomasses à convertir peuvent être des plaquettes forestières, des granulés ou d'autres résidus produits par les membres du projet LORVER. Elles sont stockées dans l'installation, afin d'assurer un approvisionnement continu pendant toute la durée des essais. Si nécessaire, la biomasse a été séchée au préalable pour réduire la teneur en eau afin d'augmenter l'efficacité du processus de pyro-gazéification.

La biomasse végétale séchée est introduite dans le réacteur de pyrolyse par une source d'alimentation appropriée (module A), assurant la continuité de l'approvisionnement, tout en empêchant l'entrée d'air dans le réacteur rotatif de pyrolyse (module B). Ici a lieu la première étape de la réaction, c'est-à-dire la volatilisation des composés organiques provenant de la biomasse, avec la production simultanée de biochar. La température des produits sortants du réacteur de pyrolyse est dans le domaine de 500-600 °C.

Les particules de biomasse injectées dans le réacteur de pyrolyse sont chauffées par des billes d'acier. L'énergie thermique nécessaire à la pyrolyse (qui est un processus endothermique) est fournie aux billes d'acier dans une zone de réaction distincte (module C) qui permet l'oxydation partielle d'une partie du char. La chaleur produite par l'oxydation est transportée par les billes de métal, qui sont introduites directement dans le réacteur de pyrolyse, et la cèdent à la biomasse. Grâce à cette approche, qui est le point crucial et novateur du procédé, l'énergie thermique est directement amenée au sein de la zone de réaction, surmontant ainsi les limites d'un four rotatif classique de pyrolyse amenant la chaleur par les parois. Au cours du démarrage du système et en cas de lacunes dans le fonctionnement, le niveau thermique est assuré à l'aide d'un système de résistances intégrées dans la couche d'isolation. Dans le réacteur de pyrolyse, la biomasse est soumise, en plus de la fourniture d'énergie thermique, à l'action mécanique simultanée de la rotation du réacteur et du mouvement des sphères d'acier. Cela permet de broyer la couche de charbon qui se forme sur les particules, ce qui conduit à une pyrolyse plus homogène et plus rapide.

Les sphères d'acier présentes dans le réacteur représentent l'élément clé du procédé. On peut résumer leur fonction en 4 points :

- Apport de chaleur
- Mélange de la matière
- Broyage du charbon
- Augmentation du coefficient de conduction thermique du lit

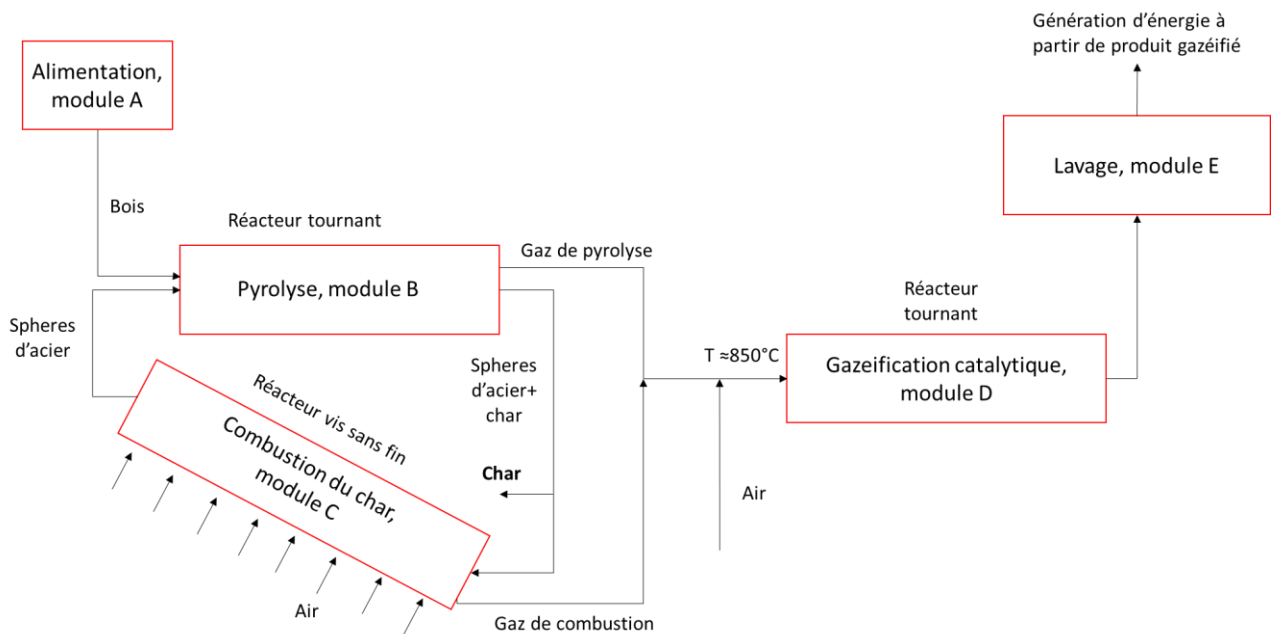


Figure 1.14: Schéma général du procédé SEA Marconi

Le gaz issu de la pyrolyse, contient principalement H_2O , CO , CO_2 , H_2 , CH_4 et des goudrons (composés oxygénés issu de la pyrolyse primaire). Il est mélangé avec le gaz issu de l'oxydation partielle du char dans le deuxième réacteur. L'objectif est d'augmenter la température pour craquer les goudrons, mais pour ce faire, de hautes températures sont nécessaires ($\approx 800^\circ C$). De l'air est ajouté pour brûler une partie du gaz et obtenir la température souhaitée.

Dans le troisième réacteur (gazeification catalytique), on met en œuvre une conversion catalytique des goudrons aromatiques résiduels. La nature du catalyseur est actuellement en cours d'étude.

Le gaz de synthèse obtenu à partir de la gazeification catalytique du module D est traité par un système entièrement intégré (module E). Ce système vise à réduire la concentration des particules, à éliminer tous les goudrons résiduels, à neutraliser les composés acides et à refroidir le gaz à une température qui est compatible avec son utilisation dans un moteur à combustion interne.

Actuellement le système n'est pas connecté à un moteur à combustion interne, donc le gaz produit est ensuite envoyé, après analyse, à une torchère pour la combustion finale.

La torche contient la flamme pilote, la combustion se produit dans une chambre cylindrique recouverte d'une couche de fibres de céramique ce qui permet une combustion meilleure que celles obtenues dans les torches « ouvertes ». Le confinement physique de la phase de combustion permet une température plus basse et un bruit réduit. Pour cette raison, ces torches sont généralement utilisées dans les zones sensibles. Les dispositifs de commande du brûleur, les buses, l'allumage, et la flamme sont directement accessibles depuis le domaine d'application pour permettre une inspection.

Le fonctionnement est entièrement automatisé, et, une fois pleinement opérationnel, le système de pyro-gazéification peut fonctionner de façon autonome (en utilisant l'énergie chimique stockée dans la biomasse végétale elle-même). Dans ce qui suit, nous décrivons plus en détail les réacteurs de pyrolyse (B) et d'oxydation partielle, le choix du catalyseur à mettre en œuvre dans le réacteur de traitement du gaz n'ayant pas encore été fait par notre partenaire industriel, une description détaillée de ce réacteur serait prématurée.

L'installation est conçue pour fonctionner dans les conditions suivantes (tableau 1.3)

Matériaux à convertir	Biomasse végétale
Débit	50-70 kg/h
Taille des particules de la biomasse	5 - 20 mm
Humidité maximum de la biomasse introduite	15%
Température de sortie de pyrolyse	500 – 600 °C
Température de chauffage des billes d'acier	750 °C
Température de gazéification catalytique	850 °C
Diamètre des billes en acier	25 mm
Puissance totale installée	100 kW

Tableau 1.3: Caractéristiques techniques du système SEA Marconi

1.4.1.1 Réacteur de pyrolyse

Le réacteur de pyrolyse est un réacteur de type four rotatif (figure 1.15) dont les données géométriques sont disponibles dans le tableau 1.4. Il est possible d'installer à l'intérieur du réacteur des chicanes, pour augmenter la quantité d'énergie mécanique transférée au solide et donc rendre les chocs plus violents et le broyage plus vigoureux. Au stade de démarrage, le système peut être

chauffé par les parois par des résistances. La rotation est contrôlée par un moteur, la vitesse de rotation maximale est d'environ 10 tours/minute.

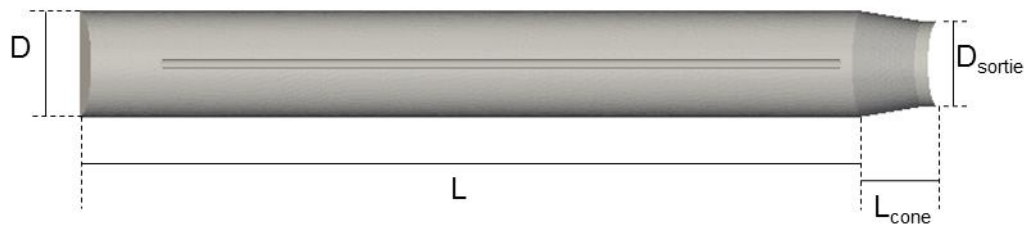


Figure 1.15: Module de pyrolyse

L	L _{cone}	D	D _{sortie}
2.4 m	0.3 m	0.175 m	0.134 m

Tableau 1.4: Données géométriques du module de pyrolyse

1.4.1.2 Le réacteur d'oxydation partielle du charbon

Le module C fournit des fonctions essentielles pour les processus suivants : chauffage des sphères conductrices de chaleur en continu jusqu'à 600 à 750° C selon la température souhaitée dans le module B ; oxydation du biochar grâce à la distribution sélective ; relevage et transport des billes vers le module B ; élimination des cendres. Ainsi, dans ce module, un processus d'oxydation est réalisé dans des conditions sous stœchiométriques, capable de générer une énergie thermique suffisante pour répondre à la demande dans l'ensemble du système et en particulier le module de pyrolyse B. L'injection et la distribution ciblée de gaz oxydants sont faites par un dispositif spécial de distributeur rotatif. La géométrie de ce système est de type vis sans fin, qui permet le transport de matière solide du bas vers le haut ; par ailleurs, des trous en forme de fente sont découverts à chaque demi-tour du réacteur, permettant l'entrée d'air pendant en temps t^* d'environ 1 seconde (figure 1.16).

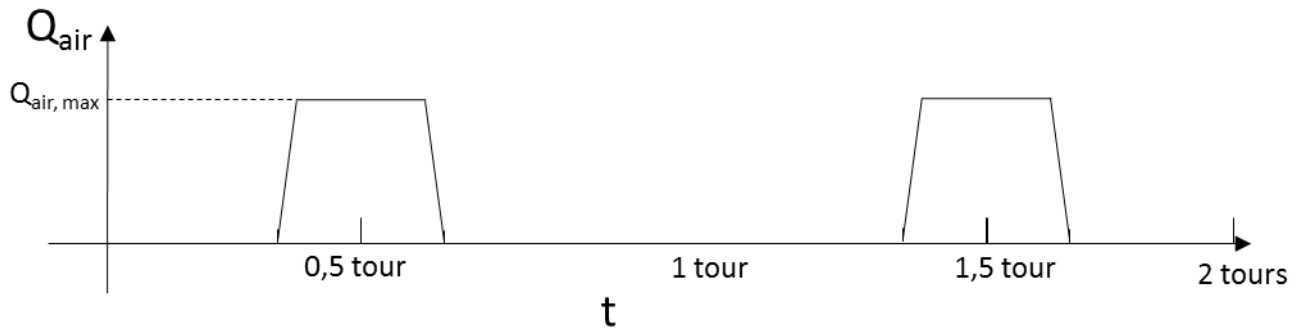


Figure 1.16: Cycles d'insertion d'air

Pour assurer le débit en entrée désiré Q_{air}^d , il faut donc avoir :

$$Q_{air}^d t^{1/2 \text{ tour}} = A_{courbe} = \int_0^{t^{1/2 \text{ tour}}} Q_{air} dt$$

Équation 1.2

Où $t^{1/2 \text{ tour}}$ est le temps nécessaire pour effectuer un demi-tour du réacteur et A_{courbe} est l'intégrale de la courbe dans la figure 1.18 entre 0 et $t^{1/2 \text{ tour}}$.

L'air traverse le lit solide (figure 1.17), en oxydant rapidement le biochar, chauffant ainsi les billes d'acier. Au total 28 fentes sont disponibles sur toute la longueur du réacteur.

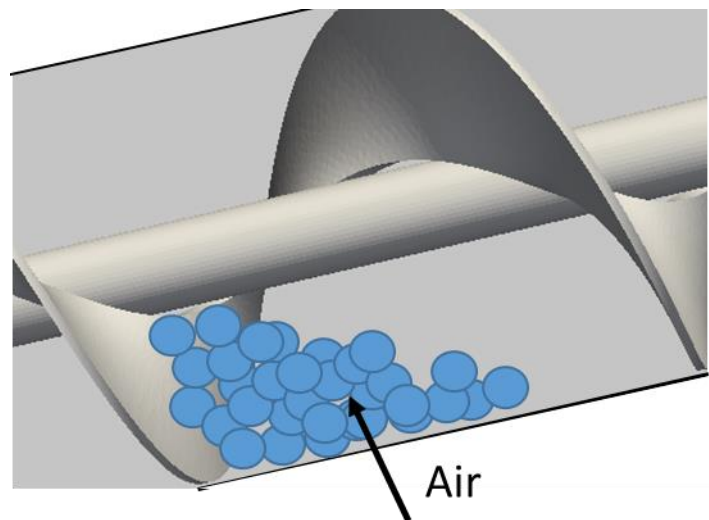


Figure 1.17: Le lit solide et le passage d'air dans le module C

1.4.2 Calculs préliminaires

Un modèle simplifié du procédé a été conçu avant de commencer les simulations numériques. Plusieurs hypothèses ont été faites pour rendre le calcul simple :

- Equilibre thermique entre les phases à la sortie des réacteurs
- Conversion complète des réactifs solides (bois dans le pyrolyseur et charbon dans le réacteur d'oxydation)
- Rendements fixes de pyrolyse en gaz, goudrons et char

Ces hypothèses permettent l'utilisation de bilans globaux pour trouver les différentes températures et compositions au sein du système.

Pour faire les calculs, des données ont été obtenues à partir de la littérature en conditions similaires en partant de l'hypothèse d'équilibre thermique pour toutes les phases. Voici les données que nous avons utilisées pour la pyrolyse de biomasse (tableau 1.5).

Y_{char}	Y_{tar}	$Y_{\text{H}_2\text{O}}$	Y_{gas}	%vol CO_2	%vol CO	%vol H_2	%vol CH_4	$H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}}$	$H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}_2}$	H_{pyro}
[61]	[61]	[62]	[61]	[61]	[61]	[61]	[61]			[63,64]
23%	13%	38%	27%	51.9%	34.2%	1.3%	9.3%	-10 MJ/Kg	-26 MJ/Kg	0.24 MJ/Kg

Tableau 1.5: Paramètres chimiques obtenus à partir de la littérature.

Y représente le rendement de chaque phase sur base sèche, $H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}}$, $H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}_2}$ et H_{pyro} sont l'enthalpie d'oxydation partielle et totale du charbon et l'enthalpie de pyrolyse de la biomasse à 298 K. Les données physiques et géométriques utilisées sont décrites dans le tableau 1.6.

ρ_{bois}	ρ_{acier}	ω	F	H	Q_{acier}	Q_{air}
500 kg/m ³	8030 kg/m ³	5 rpm	50 kg/hr	0.1	940 kg/hr	75 kg/hr

Tableau 1.6: Paramètres géométriques et dynamiques utilisés dans les simulations

ρ_{bois} et ρ_{acier} sont les masses volumiques respectives du bois et de l'acier, ω est la vitesse de rotation du four tournant de pyrolyse, D et L sont le diamètre et la longueur et $Q_{\text{air}}^{\text{air}}$ est le débit d'air en entrée du réacteur d'oxydation partielle.

Des bilans de matière et de chaleur ont permis d'obtenir une première approximation des flux dans les trois réacteurs :

Bilan d'énergie sur le premier réacteur de pyrolyse (réacteur B supposé adiabatique) :

$$\begin{aligned}
 & Q_{\text{steel}} C_{p_{\text{steel}}} (T_{\text{outox}} - T_{\text{outpy}}) \\
 &= -F C_{p_{\text{bois}}} (T_{\text{in}} - 298) + H_{\text{pyro}} F + Q_{\text{tar}} C_{p_{\text{tar}}} (T_{\text{outpy}} - 298) + Q_{\text{char}} C_{p_{\text{char}}} (T_{\text{outpy}} - 298) \\
 &+ Q_{\text{gas}} C_{p_{\text{gas}}} (T_{\text{outpy}} - 298) + Q_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{H}} C_{p_{\text{H}_2\text{O}}}^{\text{H}} (T_{\text{in}} - 298) - \lambda Q_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{H}} + Q_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{H}} C_{p_{\text{H}_2\text{O}}}^{\text{gas}} (T_{\text{outpyro}} - 298\text{K})
 \end{aligned}$$

Équation 1.3

où Q représente le débit massique, λ est l'enthalpie d'évaporation de l'eau à 298 K, $Q_{\text{H}_2\text{O}}$ est la masse d'eau liée à l'humidité initiale du bois, F est le débit de bois anhydre et Cp les chaleurs spécifiques. Les débits ont été calculés selon les données montrées précédemment, par contre la capacité calorifique Cp du tar a été considérée comme celle du lévoglucosane.

Deuxième réacteur (oxydation partielle, réacteur C) :

$$\begin{aligned}
 & H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}_2} Q_{\text{char} \rightarrow \text{CO}_2} + H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}} Q_{\text{char} \rightarrow \text{CO}_2} + Q_{\text{char}} C_{p_{\text{char}}} (T_{\text{outpy}} - 298) \\
 &= Q_{\text{CO}_2} C_{p_{\text{CO}_2}} (T_{\text{outox}} - 298) + Q_{\text{steel}} C_{p_{\text{steel}}} (T_{\text{outox}} - T_{\text{outpy}}) \\
 &+ Q_{\text{N}_2} C_{p_{\text{N}_2}} (T_{\text{outox}} - 298) + Q_{\text{CO}} C_{p_{\text{CO}}} (T_{\text{outox}} - 298)
 \end{aligned}$$

Équation 1.4

Les deux bilans sont liés ; ils ont donc été résolus par itération. Il est clair que ces bilans ont une validité limitée, vu le caractère « fort » des hypothèses faites à la base du modèle, mais ces bilans permettent d'avoir une idée de base sur les températures et les compositions à l'intérieur des trois réacteurs. En plus ils permettent d'effectuer des études paramétriques en fonction des propriétés en entrée, comme par exemple, les effets de l'humidité et du débit de bois en entrée sur le système (figure 1.18).

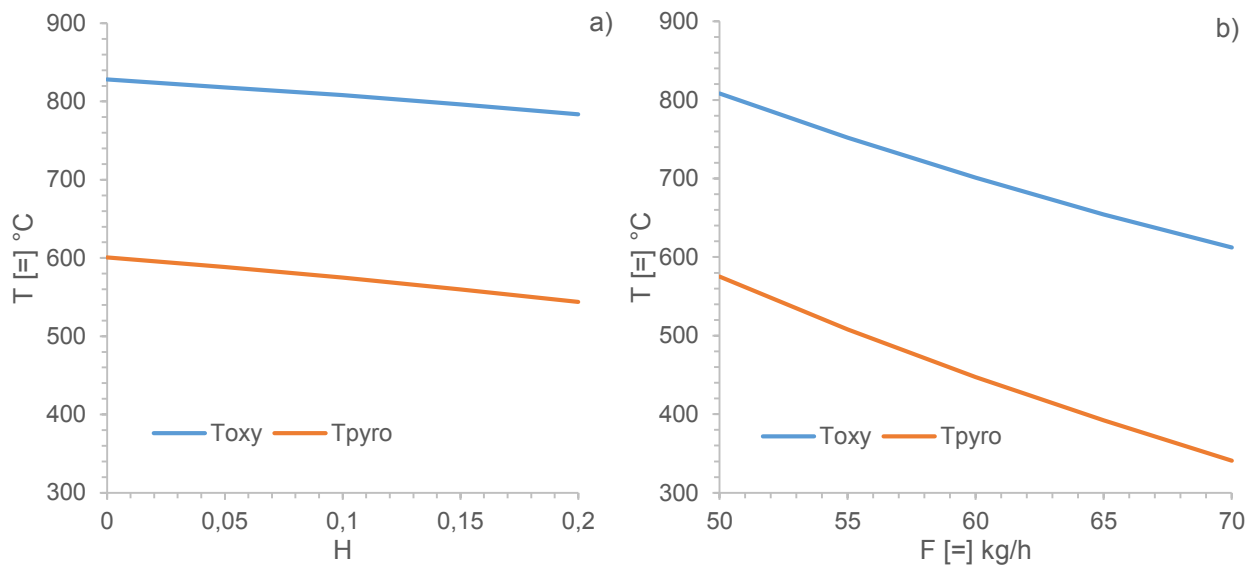


Figure 1.18: Température des réacteurs de pyrolyse et d'oxydation partielle en fonction de l'humidité du bois à débit de bois constant égal à 50 kg/h (a) et du débit de bois à humidité relative constante égale à 0.1 (b)

L'humidité a un effet fort sur les températures des deux réacteurs, même si la différence entre les deux températures reste presque constante. Le débit de bois influence beaucoup plus la différence : lorsqu'on augmente le débit de bois, la capacité thermique du premier réacteur augmente, mais la quantité de char augmente elle aussi, et donc la chaleur produite, jusqu'à la consommation de tout l'oxygène disponible. Une autre analyse intéressante pourrait être faite en augmentant F et en maintenant constant ER (Equivalent Ratio), soit le rapport entre le débit d'air en entrée au module C et le débit de bois en entrée au module B, constant et égal à celui de projet (figure 1.19).

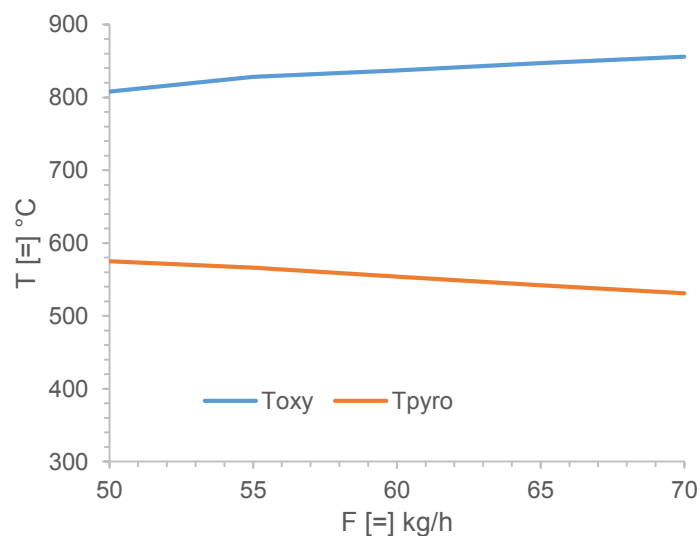


Figure 1.19: Température des réacteurs de pyrolyse et d'oxydation partielle en fonction du débit de bois à ER constant

Dans ce cas, la température du module C augmente, car la quantité de char augmente, tandis que la température du module B diminue, car le débit de matière à réchauffer dans le réacteur augmente.

1.5 Modélisation des fours tournants

Aux Etats-Unis, des projets comme la construction d'un réseau de canaux dans la première moitié du XIX^e siècle, en particulier le Canal Érié en 1818, a créé la première demande à grande échelle de ciment dans ce pays, ce qui a conduit diverses entreprises de production de ciment à concourir pour la part de marché. En 1824, le ciment Portland avait été inventé et mis au point par Joseph Aspdin d'Angleterre ; ceci impliquant la combustion de craie finement moulue avec de l'argile finement divisé dans un four à chaux ce qui produit du CO₂. Dans ces premiers temps, des fours fixes ont été utilisés et on laissait refroidir le produit fritté avant broyage. A la fin des années 1870, Thomas Millen et ses deux fils, tout en expérimentant la fabrication du ciment Portland à South Bend, Indiana, brûlent leur premier ciment de Portland dans un morceau de tuyau d'égout. C'était peut-être la première utilisation expérimentale de four rotatif en Amérique. En 1885, un ingénieur anglais, Frederick Ransome, a breveté un four horizontal légèrement incliné qui pourrait être tourné afin que le matériel passe progressivement d'un bout à l'autre. Le principe qui sous-tend cette invention constitue le phénomène de transport du four rotatif que nous connaissons aujourd'hui. Parce que ce nouveau type de four avait une beaucoup plus grande capacité et brûlait plus complètement et uniformément, il a rapidement remplacé les anciens fours. Actuellement, les fours rotatifs trouvent des applications dans de nombreux domaines de l'industrie et sont utilisés à des fins multiples [21,65–68]; comme dans la production de certains médicaments, pour la pyrolyse et la gazéification des déchets, pour la production de ciment, pour le traitement des minéraux extraits, pour le séchage etc. [59–68].

Dans cette section, nous allons analyser les principales caractéristiques des tambours en rotation. En particulier les caractéristiques dynamiques de la phase solide et de la technologie utilisée pour obtenir des modèles globaux de mécanismes dynamiques des tambours en rotation.

1.5.1 Dynamique des fours tournants

Un tambour rotatif se compose principalement d'un cylindre rotatif qui, par le biais de sa rotation, transporte la matière solide du réacteur vers sa sortie (figure 1.20). Souvent, il est possible d'incliner

le réacteur à un angle par rapport à l'horizontale (angle θ en figure 1.20), pour réduire le temps de séjour du solide dans le système. Le mouvement du système fait que le solide se trouve à une hauteur h qui dépend de la position axiale dans le réacteur (figure 1.20, droite). Une autre caractéristique est l'angle dynamique au repos (angle β dans la figure 1.20), qui représente les caractéristiques de transport de la matière traitée : des matériaux très cohésifs, par exemple, auront des angles au repos dynamiques élevés, alors que des matériaux de faible coefficient de frottement et non cohésifs auront des angles au repos dynamiques plus bas. La vitesse de rotation d'un cylindre rotatif n'est en général pas élevée : une vitesse trop élevée amènerait le lit dans des régimes de cataracte, ce qui réduirait le transfert thermique à la paroi, en augmentant le pourcentage de vide dans le lit, ce qui influence fortement l'efficacité du réacteur.

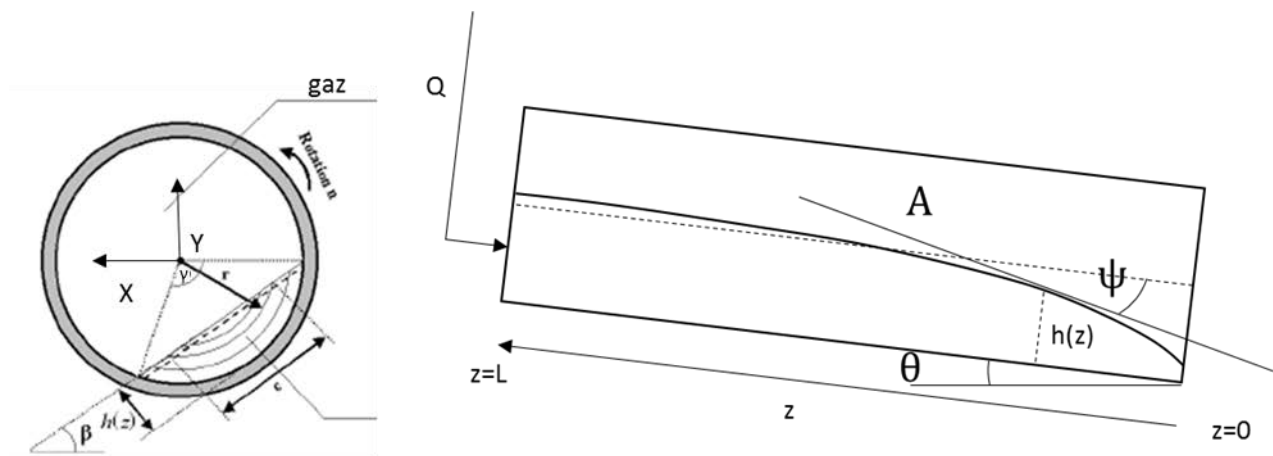


Figure 1.20: vue radiale (gauche) et axiale (droite) du tambour tournant

Le solide à l'intérieur passe par deux régions principales au cours de la rotation des parois extérieures (figure 1.21) :

- Région "Plug-flow" : dans cette section du tambour le solide se déplace parallèlement à la paroi du réacteur (figure 1.20, cette section est représentée par des lignes concentriques de la section du réacteur sur la figure de droite). Dans la région plug-flow la matière granulaire se déplace comme un seul corps rigide solidaire avec le mur.
- Couche active : Quand la matière granulaire atteint l'apex de la région plug-flow, les grains commencent à traverser cette zone en arrivant à la paroi du réacteur (figure 1.20 droite, les lignes obliques)

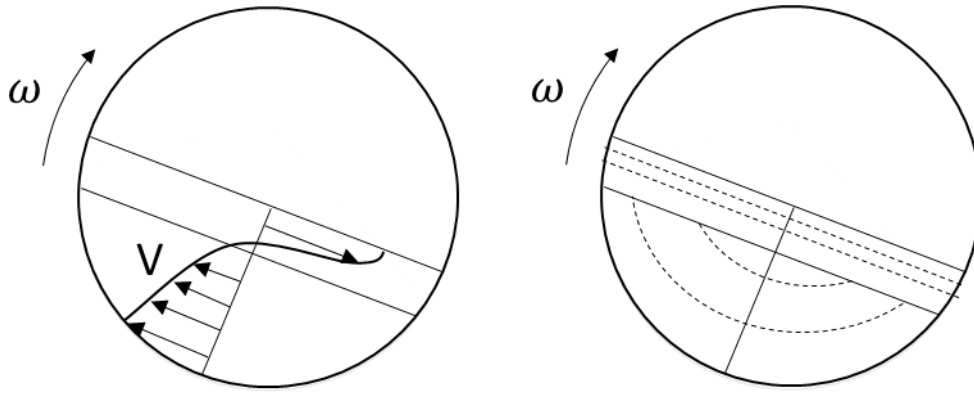


Figure 1.21: Couche active et région plug-flow, profil de vitesse (gauche) et trajectoires (droite)

Ces deux régions du tambour rotatif ont deux dynamiques totalement différentes, qui caractérisent des matériaux granulaires. Dans la première région, le matériel est plus compact et les grains sont en permanence en contact les uns avec les autres, ce qui fait que la plupart des phénomènes de transfert par conduction se produisent dans cette région. En outre, les temps de séjour sont beaucoup plus élevés dans la région plug-flow par rapport à la couche active ; dans les modèles unidimensionnels on a souvent tendance à oublier le temps réellement passé dans la couche active parce que le mouvement dans la région plug-flow est beaucoup plus lent. Dans la couche active par contre le matériel est moins compact et les chocs sont rapides, alors que les vitesses de grains sont beaucoup plus élevées.

Une autre caractéristique des tambours en rotation est la capacité de présenter un comportement très différent en fonction du degré de remplissage et de la vitesse de rotation ; le premier travail à cet égard a été fait par Heinen et al. [79], qui ont mis en évidence deux paramètres fondamentaux qui permettent de caractériser le comportement général du lit : le nombre de Froude Fr et le taux de remplissage f .

$$Fr = \frac{\omega^2 R}{g}; f = \frac{1}{\pi}(\gamma - \sin \gamma \cos \gamma)$$

Équation 1.5

où R est le rayon du tambour rotatif, ω la vitesse de rotation, g l'accélération due à la pesanteur et γ l'angle de remplissage, c'est-à-dire l'angle au centre qui inscrit la section circulaire occupée par le lit solide (figure 1.20 gauche).

En fonction de ces deux paramètres, le lit passe par des comportements différents. Leur classification est présentée en tableau 1.7:

Régimes de glissement		Régimes d'avalanche			Régimes de cataracte	
Continu (Sliding)	Intermittent (Surging)	Intermittent (Slumping)	Continu (Rolling)	Continu à surface en S (Cascading)	Cataracte (Cataracting)	Centrifugation (Centrifuging)
$f < 0.1$	$f > 0.1$	$f < 0.1$	$f > 0.1$		$f > 0.2$	
$0 < Fr < 10^{-4}$		$10^{-5} < Fr < 10^{-3}$	$10^{-4} < Fr < 10^{-2}$	$10^{-3} < Fr < 10^{-1}$	$0.1 < Fr < 1$	$Fr > 1$

Tableau 1.7: Les différents régimes dans les tambours tournants [80]

En fait, le nombre de Fr et f ne déterminent pas seuls un régime ou un autre, car il y a un autre paramètre qui joue un rôle clé : le coefficient de frottement entre le matériau granulaire et les parois du réacteur (μ_w).

Dans le régime de Sliding (figure 1.22) le matériau glisse sur les parois du réacteur, ce qui correspond à une valeur faible de μ_w ; il n'y a pas de mouvement relatif entre les grains sauf de petites oscillations.

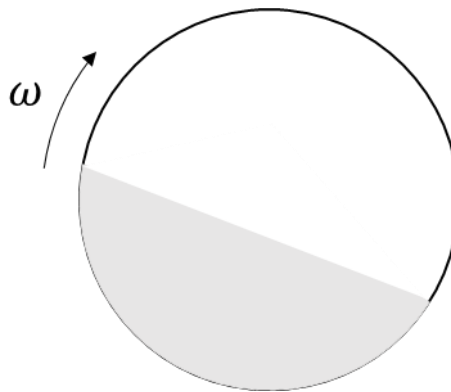


Figure 1.22: Régime de Sliding

Dans le régime de Surging (figure 1.23), le lit démarre périodiquement un mouvement solidaire avec les parois du cylindre, mais, ayant atteint une certaine hauteur, le matériel glisse et revient à la position de départ. Comme pour le régime de Sliding, il n'y a pas un mouvement relatif entre les grains.

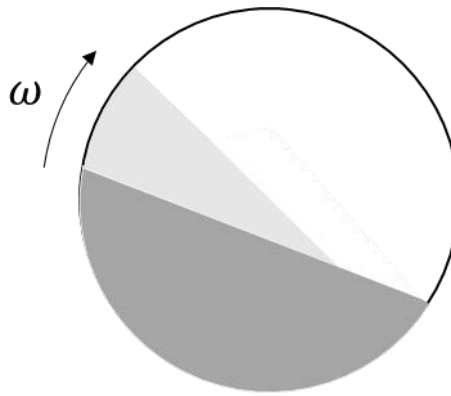


Figure 1.23: Régime de Surging

Dans le régime de Slumping (figure 1.24) il y a des avalanches périodiques dans la couche active ; il est possible de voir le mouvement caractéristique de la couche active. Le lit prend régulièrement différents états qu'il est possible de décrire schématiquement comme suit :

- La configuration initiale, le lit prend un emplacement d'angle de repos β' .
- Le lit se met à tourner, l'angle au repos grandit $\beta > \beta'$.
- Le lit atteint l'angle de repos maximum β'' .
- Des avalanches se produisent dans la couche active
- Retour à la condition initiale β'

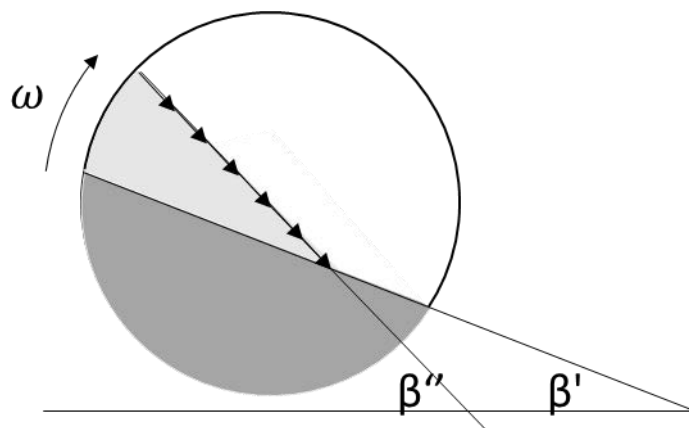


Figure 1.24: Régime de Slumping

Dans le régime de Rolling (figure 1.25), le système atteint un état quasi stationnaire, avec des avalanches qui continuent sans interruption. On peut dire que l'état de Rolling est un état de Slumping où $\beta' = \beta''$.

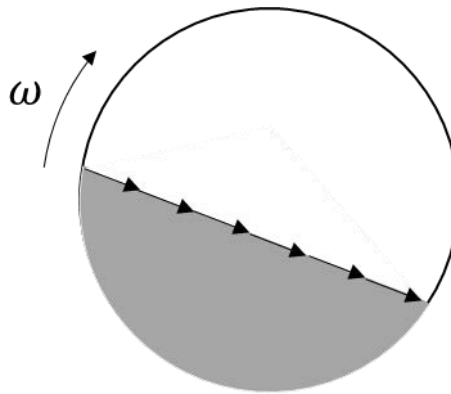


Figure 1.25: Régime de Rolling

Dans le régime de Cascading (figure 1.26), la surface presque plate commence à prendre une forme caractéristique en « S ».

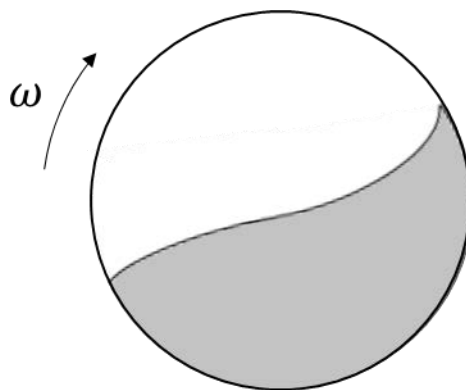


Figure 1.26: Régime de Cascading

Les régimes de Cataracting et Centrifiging se produisent à de très grandes vitesses de rotation ω .

Dans le régime de Cataracting (figure 1.27), ω est suffisamment élevé pour provoquer un détachement de la couche active entraînant une augmentation des forces de contact en général.

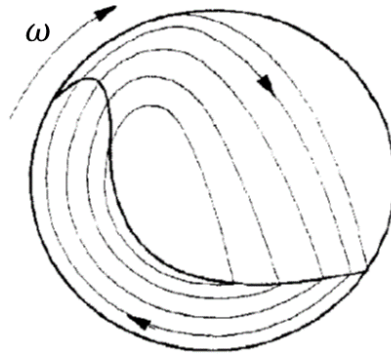


Figure 1.27: Régime de Cataracting

Dans le régime de Centrifuging (figure 1.28), C'est le cas de $Fr \approx 1$, la force centrifuge permet de surmonter la force de gravité et les particules sont disposées le long de la surface du réacteur.

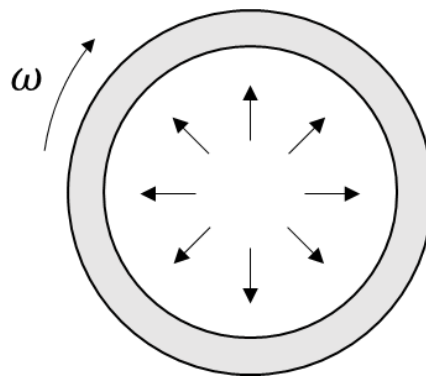


Figure 1.28: Régime de Centrifuging

1.5.2 Les modèles pour la simulation de la dynamique des tambours tournants

Dans cette section, nous allons analyser en détail les modèles généralement utilisés pour la simulation des tambours rotatifs, pour comprendre l'état actuel de la technique dans le domaine.

1.5.2.1 Le modèle de Saeman [81]

Ce paragraphe présente la démarche théorique qui permet d'aboutir à l'expression mathématique du débit volumique local de solide. Les principales étapes du calcul et les hypothèses associées sont reprises et complétées le cas échéant. Le lit de particules est supposé être en régime de Rolling

et le transport axial de la charge est donc assuré essentiellement par la couche active. Saeman suppose que cette couche est d'une épaisseur faible devant la hauteur locale du lit. Les particules situées dans la couche passive suivent des trajectoires circulaires de rayon r à la vitesse de rotation n du tube. On cherche à écrire un modèle qui puisse traiter le système de façon unidimensionnel. A chaque passage dans la couche active, une particule va parcourir en moyenne une distance (notée l_c) selon l'axe du four. Saeman effectue un calcul géométrique complet qui permet d'évaluer cette distance en fonction des différents angles qui interviennent dans le raisonnement. Cette étape est complexe et difficile à suivre dans l'article original [81]. Spurling et al. [82] reprennent tous ces éléments et les détaillent en utilisant une analyse vectorielle. Donc si $h(z)$ est la hauteur du lit en fonction de z , γ est l'angle au repos du lit, ψ est l'angle formé par l'axe du cylindre et la tangente au profil du lit A, l_c est la longueur parcourue par une particule à chaque passage dans la couche active, c'est la longueur parcourue dans le plan X-Y et θ est l'angle d'inclinaison du four selon l'horizontale. Il est alors possible d'écrire (Saeman et al [81])

$$\frac{l_c}{c} = \frac{\tan(\psi_l)}{\tan(\gamma)} + \frac{\tan(\beta)}{\sin(\gamma)}$$

Équation 1.6

La vitesse moyenne de progression axiale d'une particule peut être considérée comme étant égale au produit de la distance l_c parcourue à chaque cascade et du nombre de cascades par unité de temps. Plus simplement, si on néglige le temps passé par une particule dans la couche active devant le temps de séjour local dans la couche passive, il est possible de considérer que la particule a parcouru la distance l_c pendant le temps t_c où t_c est donné par :

$$t_c = \frac{\alpha(r)}{\omega}$$

Équation 1.7

Où α est l'angle parcouru dans la couche passive par une particule et ω est la vitesse de rotation en rad/s (voir figure 1.29)

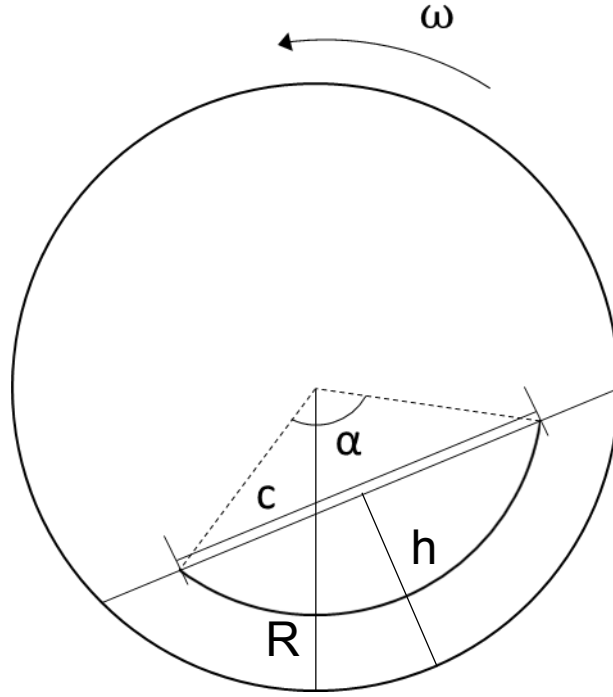


Figure 1.29: Section du tambour avec la trajectoire d'une particule dans la couche active

La vitesse axiale d'une particule qui a parcouru une trajectoire de rayon r dans la couche passive s'exprime alors en utilisant les équation 1.6 et équation 1.7:

$$v = \frac{l_c}{t_c} = \left(\frac{\tan(\psi_l)}{\tan(\gamma)} + \frac{\tan(\beta)}{\sin(\gamma)} \right) \frac{\omega}{\alpha(r)} c$$

Équation 1.8

Débit volumique de la phase solide.

Si on suppose que la particule i a parcouru dans la couche passive une trajectoire sur la circonférence de rayon r , alors la trajectoire parcourue dans la couche active sera une corde de cette circonférence. Selon l'hypothèse formulée, on a alors

$$c = 2\sqrt{(r^2 - r_0^2)}, r \in [R - h, R]$$

Équation 1.9

r_0 représente la valeur minimale du rayon pouvant être parcouru par une particule. Si l'on suppose que l'épaisseur de la couche active est négligeable devant la hauteur de solide et que ce rayon est tangent à la surface du lit, il est donné par :

$$r_0 = R - h(z)$$

Équation 1.10

Il est possible d'exprimer le débit volumique élémentaire de solide qui s'écoule à travers la section transversale de solide dS , le lit granulaire est alors assimilé à un milieu continu :

$$dq = v dS$$

Équation 1.11

La surface élémentaire s'exprime par la relation :

$$dS = r \alpha(r) dr$$

Équation 1.12

Donc :

$$dq = 2 \left(\frac{\tan(\psi_l)}{\tan(\gamma)} + \frac{\tan(\beta)}{\sin(\gamma)} \right) \omega r \sqrt{(r^2 - (R - h)^2)} dr$$

Équation 1.13

Si on intègre sur la section :

$$Q = 2 \left(\frac{\tan(\psi_l)}{\tan(\gamma)} + \frac{\tan(\beta)}{\sin(\gamma)} \right) \omega \int_{R-h}^R r \sqrt{(r^2 - (R - h)^2)} dr = 2 \left(\frac{\tan(\psi)}{\tan(\gamma)} + \frac{\tan(\theta)}{\sin(\gamma)} \right) \omega [(r^2 - (R - h)^2)^{1.5}]_{R-h}^R$$

Équation 1.14

Enfin :

$$Q = \frac{2}{3} \left(\frac{\tan(\psi_l)}{\tan(\gamma)} + \frac{\tan(\beta)}{\sin(\gamma)} \right) \omega [(r^2 - (R - h)^2)^{1.5}]_{R-h}^R = \frac{2}{3} \left(\frac{\tan(\psi_l)}{\tan(\gamma)} + \frac{\tan(\beta)}{\sin(\gamma)} \right) (2hR - h^2)^{1.5}$$

Équation 1.15

ψ étant l'angle formé entre la tangente au profil du lit et l'axe z, alors on a aussi

$$\tan(\psi_l) = \frac{dh}{dz}$$

Équation 1.16

En régime stationnaire, le débit volumique peut être considéré constant s'il n'y a pas de réaction, donc on obtient une équation différentielle en h :

$$\frac{dh}{dz} = \frac{3Q \tan(\gamma)}{2\omega} (2hR - h^2)^{-1.5} - \frac{\tan(\beta)}{\cos(\gamma)}$$

Équation 1.17

Ce modèle très intéressant représente bien le comportement en Rolling de plusieurs matériaux dans un four rotatif ne comportant pas de chicanes. Il est très souvent utilisé et donne des bons résultats en général. Ce modèle a également été validé par Gao et al. [83] avec des particules sphériques, des particules cylindriques et des particules allongées quadrilobes. Un exemple des résultats obtenus est donné (figure 1.30).

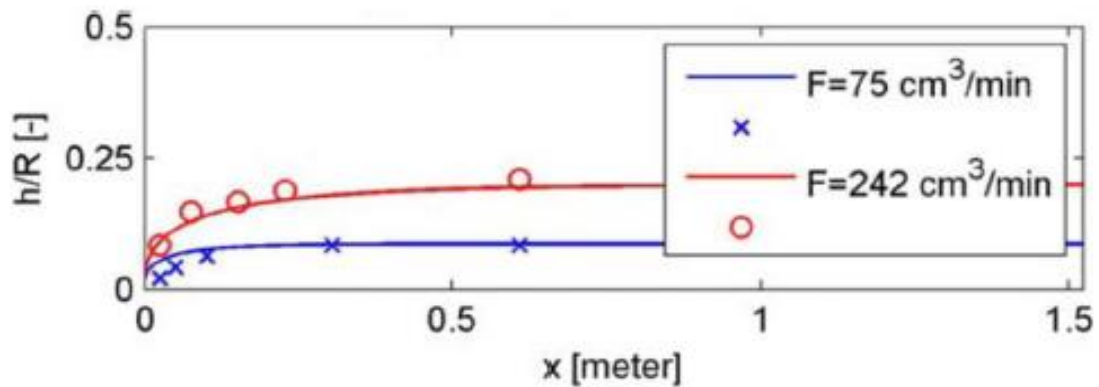


Figure 1.30: Profil de chargement pour deux débits d'alimentation en cas de particules sphériques. x est la distance de la sortie [83]

Les prédictions du modèle (traits continus) sont en adéquation avec les valeurs expérimentales, excepté à la sortie du cylindre pour le faible débit d'alimentation. Il faut cependant noter que, là encore, les particules utilisées sont calibrées. La validité de ce modèle avec un solide granulaire irrégulier n'a pas été prouvée. Enfin, avec quelques modifications, on peut adapter ce modèle au

cas de deux espèces parfaitement mélangées et donc comparer les résultats de ce modèle avec ceux obtenus par DEM.

1.5.2.2 *Discrete element method (DEM)*

Cette méthode s'applique en principe à tous les régimes d'écoulement. Ce modèle numérique a été présenté par Cundall et Strack [84] en 1979, mais ce n'est que récemment qu'il est devenu populaire grâce à la possibilité d'utiliser des ordinateurs de plus en plus puissants. L'algorithme DEM permet la simulation Lagrangienne des grains au sein du système. Chaque grain est considéré comme un organe à part entière et, à chaque instant du temps, on évalue la résultante des forces sur chaque particule et on procède à la mise à jour de sa position dans l'espace. La méthode est intrinsèquement non stationnaire. Les particules sont autorisées à se chevaucher, pour calculer une déformation qui serait par ailleurs extrêmement lourde à calculer ; selon la superposition de volume, il est possible de calculer les forces en raison des contacts particule-particule.

Il est possible de décrire simplement le cycle des calculs effectués par cet algorithme à un instant de temps t' :

- Recherche de contacts : l'algorithme recherche dans un volume fini V au centre duquel se trouve la particule i les contacts au sein de V
- Calcul des forces : selon le chevauchement entre deux particules génériques i et j , on calcule les forces de contact et la force résultante agissant sur la particule i
- Calcul du déplacement sur la base de la force résultante sur la particule i , une intégration numérique est faite pour évaluer la position de la particule i à l'instant $t' + \Delta t$.
- Calcul de la position : en se basant sur la résultante des forces exercées sur la particule i , on effectue une intégration numérique pour calculer la position de la particule i à l'instant $t' + \Delta t$

Cet algorithme a connu une évolution rapide ces dernières années [85–90], et sa capacité a été prouvée à maintes reprises. Cette méthode est effectivement très puissante, mais elle est difficile à appliquer pour des particules non-sphériques et elle souffre de temps de calcul qui, pour les très gros systèmes, peuvent être prohibitifs.

1.5.2.3 La méthode Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo permet de simuler le comportement individuel des particules. Des fonctions de probabilité sont utilisées pour décrire les différentes possibilités de mouvement : probabilité de passer dans la couche active, longueur parcourue dans la couche active, angle de descente lors du roulement. Le choix des probabilités considérées ainsi que les valeurs qui leur sont associées influencent donc fortement les résultats obtenus. Cette méthode peut permettre une description fine de l'évolution du lit mais est très coûteuse en temps de calcul et n'est par conséquent pas utilisée pour les modélisations à l'échelle pilote ou à l'échelle industrielle

1.5.2.4 Représentations empiriques

Les corrélations empiriques sont les plus fréquentes. Elles permettent généralement de relier le temps de passage τ aux paramètres opératoires et éventuellement au produit utilisé. Le temps de passage est le rapport entre la masse retenue dans le cylindre et le débit massique d'alimentation Q .

$$\tau = \frac{m}{Q} [=] \text{min}$$

Équation 1.18

Les corrélations suivantes ont été toutes établies dans des cas de régimes d'avalanches, où la majorité de ces réacteurs sont utilisés. La première corrélation a été établie par Sullivan et al. [91] pour les cylindres sans diaphragme de sortie.

$$\tau = 1.77 \frac{L\sqrt{\gamma}}{2R\omega\alpha}$$

Équation 1.19

Dans cette corrélation, les caractéristiques du cylindre sont prises en compte via sa longueur et son rayon (L et R). L'angle de repos dynamique γ est caractéristique du solide et les paramètres opératoires sont la vitesse de rotation ω et α , inclinaison du cylindre.

De nombreux auteurs se sont ensuite attachés à proposer des relations prenant en compte d'autres paramètres. C'est notamment le cas de Chatterjee et al. [92] qui considèrent que le débit volumique de solide Q_v a une influence sur le temps de passage. La relation suivante est proposée :

$$\tau = K \frac{L^3}{Q_v} \left(\frac{\beta}{\alpha} \right)^{1.054} \left(\frac{Q_v}{L^3 \omega} \right)^{0.981}$$

Équation 1.20

où K est une constante. Il faut cependant noter que, d'après cette expression, l'influence du débit d'alimentation en solide est faible en comparaison avec les autres paramètres de fonctionnement. Sai et al. [93] établissent également une expression du temps de passage. Les matériaux utilisés sont du sable, du charbon et de l'ilménite. La corrélation proposée présente l'avantage de prendre en compte la hauteur du diaphragme (h_d) disposé en sortie du cylindre.

$$\tau = 1315.2 \frac{h_d^{0.24}}{\dot{Q}^{0.072} \omega^{0.88} \alpha^{1.02}}$$

Équation 1.21

Où \dot{Q} est le débit massique de solide (kg/h). Le temps de passage est ici considéré comme indépendant du matériau utilisé.

Plus récemment, Thibault et al. [94] étudient l'écoulement de farine de poisson, farine de soja, sable et sciure dans un séchoir rotatif. Les influences respectives du produit, du débit d'alimentation en solide et en gaz, de l'inclinaison et de la vitesse de rotation du cylindre sont étudiées. Les résultats expérimentaux ont tout d'abord été exploités sous forme de la corrélation suivante.

$$\tau = \rho_s \left(\frac{0.151}{\dot{Q}^{0.81} \omega^{0.6}} \right) (1 - 11.97\alpha)(1 - 5.4\dot{G})$$

Équation 1.22

Où ρ_s est la masse volumique du solide et \dot{G} est le débit massique de gaz. Il faut cependant noter que malgré la présence de releveurs qui augmentent le contact entre le gaz et les particules, l'effet du débit de balayage sur le temps de passage reste faible en comparaison de celui des autres paramètres.

1.5.3 Trajectoire des grains en régime d'avalanche et les phénomènes de ségrégation

Les écoulements granulaires sont extrêmement complexes : ils peuvent se comporter comme des fluides, solides ou ont un comportement moyen entre les deux. Au sein d'un réacteur donné, on trouve souvent un même solide granulaire qui a un comportement très différent selon la zone considérée (comme vu avec les deux régions couche active – région plug flow).

Une autre difficulté à comprendre les mouvements granulaires est la difficulté à séparer les effets de différents paramètres : différence de forme [86], densité, taille ([9–14]), vitesse de rotation ([15]), ou même le frottement entre les particules. Un exemple classique est le "brazil nut effect" (figure 1.31) : on met dans un bol, une sphère (en orange en figure 1.31) ainsi que de petites boules de la même densité ; si on fait vibrer le conteneur, la grosse boule aura tendance à monter.



Figure 1.31: le "brazil nut effect"

Même le tambour rotatif est victime de ces problématiques, qui peut provoquer des problèmes graves en termes d'opération. Il existe deux types de ségrégation dans les tambours rotatifs :

Ségrégation radiale, où rapidement (au bout de 2-5 tours), il commence à se former un cœur de particules distinctes. La figure 1.32 montre un comportement typique de la ségrégation en cas de différence de taille entre les particules du lit.

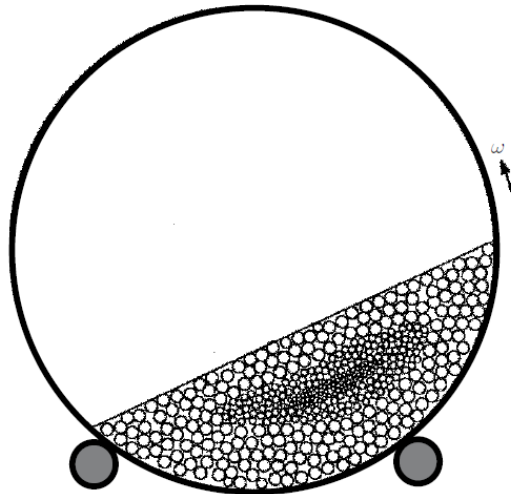


Figure 1.32: un cœur ségrégué

La ségrégation axiale est un phénomène de ségrégation lent métastable qui consiste en la séparation des particules en bandes approximativement perpendiculaires à l'axe, il est initié sur les parois d'extrémité [95–97], avec des bandes qui voyagent à l'intérieur de la cuve tournante et fusionnent entre elles [98]. L'origine de la formation de ces bandes est la création initiale d'un noyau séparé des grains qui se forme dans le sens radial du tambour [99–102].

En figure 1.33 est montré un comportement typique de ségrégation axiale.



Figure 1.33: une bande en ségrégation axiale

Les causes de ces effets sont attribuées généralement à des phénomènes qui proviennent de la couche active, donc, qui entraîne des phénomènes globaux de ségrégation au sein de l'ensemble du lit solide.

L'hypothèse généralement admise est qu'il existe deux principaux mécanismes :

- Phénomène de percolation : au sein de la couche active le niveau de vide est plus grand, cela permet aux plus petites particules de se déplacer entre les particules plus grosses, diminuant ainsi leur concentration dans la couche active (figure 1.34)

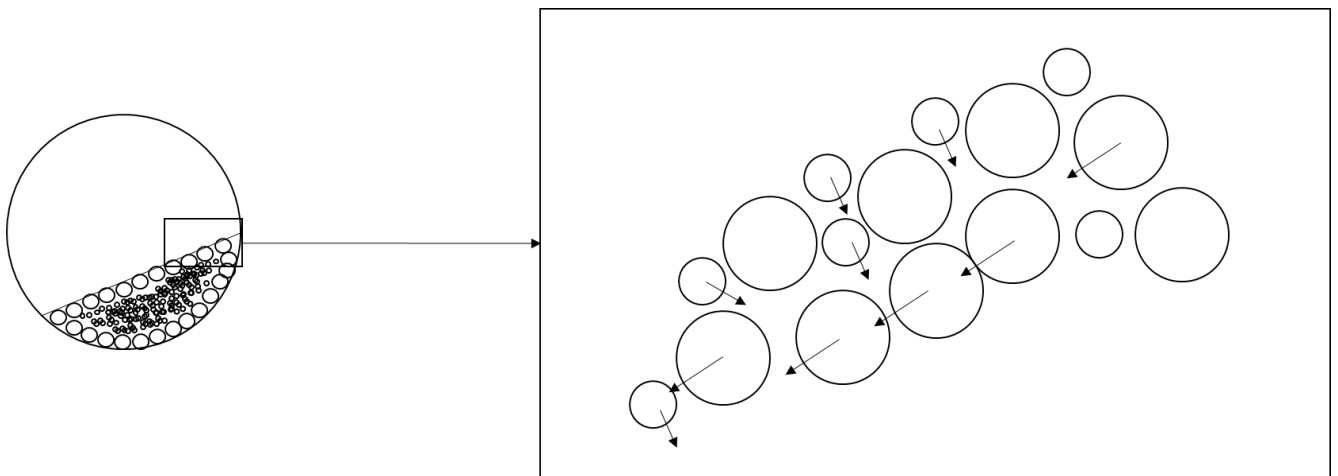


Figure 1.34: ségrégation par percolation

- Phénomène de flottation : dans le cas des particules de masses volumiques différentes (et par conséquent d'inertie mécanique différente), les particules ont tendance à se stratifier dans la couche active. Cela explique la formation d'un cœur de ségrégation composé de particules plus denses autour de laquelle se trouve une couche de particules moins denses

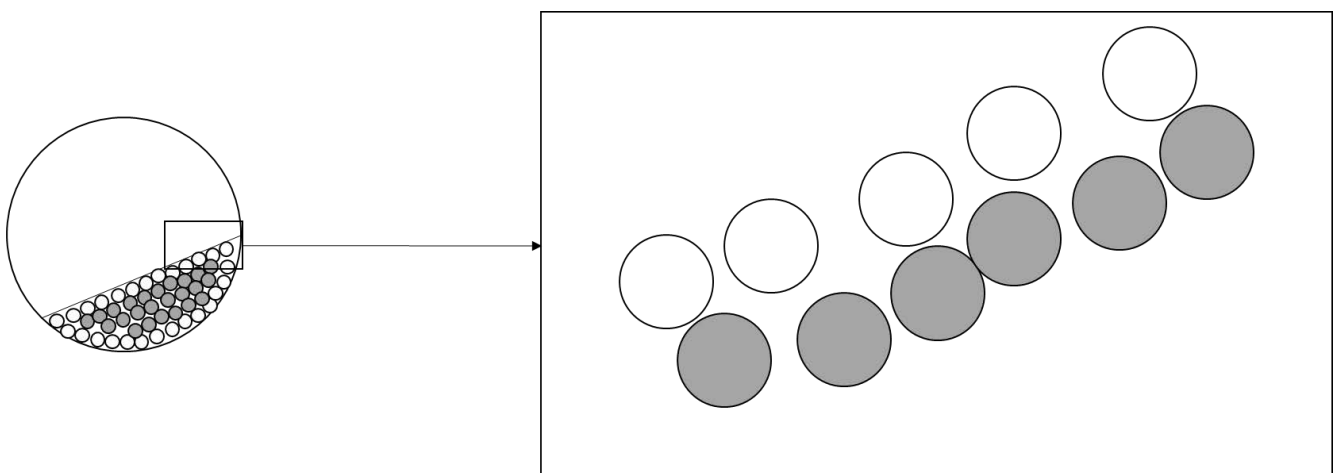


Figure 1.35: ségrégation par flottation, les particules noires sont plus denses que les particules blanches

1.6 Conclusions et objectifs de la thèse

La biomasse lignocellulosique est un composé complexe et d'une grande variabilité. Malgré cette complexité, elle est l'une des principales sources d'énergies renouvelables. Actuellement, elle est la source de nombreuses recherches dans le domaine de la valorisation énergétique, notamment à travers la gazéification. Cela se traduit par de nombreux procédés industriels de valorisation de la biomasse existants ou à l'état de projets.

Le système SEA Marconi a plusieurs avantages par rapport aux procédés actuels de production d'énergie de la biomasse ; il est extrêmement intéressant à étudier du point de vue de la modélisation pour augmenter sa capacité, mais, compte tenu de son caractère novateur, il est également difficile à modéliser. Le cœur du procédé SEA Marconi est le réacteur de pyrolyse, où a lieu la conversion de la biomasse en charbon et gaz de synthèse. Les modèles unidimensionnels actuels ne permettent pas une modélisation appropriée du système de pyrolyse, car ils ne tiennent pas compte du fait que le lit solide se compose de deux matériaux qui peuvent conduire à la ségrégation, d'où la nécessité de simuler le système avec un modèle capable de prendre en compte cet aspect et d'évaluer la ségrégation au sein du système. À cet égard, le DEM est certainement l'un des modèles plus intéressants, bien qu'il existe des difficultés d'application (comme par exemple la non-sphéricité du bois à l'intérieur du réacteur). Un de nos objectifs est de proposer une démarche permettant de prendre en compte la présence de deux solides, dont un non sphérique, dans un four tournant.

En ce qui concerne le réacteur de gazéification du char, le modèle semble encore plus compliqué que le réacteur de pyrolyse, parce qu'en plus du réacteur à caractère novateur, il y a une forte interaction entre les gaz réactifs et le solide présent dans le réacteur (le char et les billes d'acier), ce qui a nécessité la prise en compte dans le modèle de l'atmosphère gazeuse. Encore une fois, le DEM peut être la solution, compte tenu de sa capacité à simuler le comportement de solides en association avec un programme CFD capable de simuler la phase gazeuse ; nous proposerons un premier essai de simulation de ce type.

Dans cette thèse, on donnera dans un premier temps une explication détaillée des modèles utilisés dans ce travail, avec des expériences subséquentes effectuées pour évaluer les paramètres nécessaires au modèle. Ensuite nous décrirons principalement la simulation dynamique du module de pyrolyse, avec la conception d'un modèle thermique et chimique monodimensionnel à partir du modèle dynamique. Cela permettra une évaluation de l'efficacité du réacteur en cours d'analyse. Enfin, un modèle sera conçu et évalué pour la gazéification du char.

2. Simulations dynamiques par DEM (Discrete Element Method)

Comme décrit dans le chapitre 1, il n'existe pas de modèle simple et facile à utiliser permettant de simuler un tambour tournant contenant deux types de particules. Il est donc nécessaire de développer des modèles tridimensionnels. Le modèle utilisé pour la phase granulaire est DEM. Dans cette méthode il est également possible de coupler le calcul avec des logiciels du type CFD pour la phase gaz, ce qui devient nécessaire pour la simulation du réacteur de gazéification du char. Dans ce chapitre, les modèles utilisés dans les calculs seront décrits en détail. A la fin du chapitre nous décrirons aussi de quelle manière sont déterminés les paramètres requis pour mettre en œuvre les simulations.

2.1 Discrete Element Method

DEM (Discrete Elements Method) est une méthode de calcul conçue dès 1971 par Cundall et Strack [84], mais la première simulation d'une certaine importance remonte à 1992 [103], et le nombre de particules considéré n'excédait pas quelques milliers. Vingt ans plus tard, les simulations DEM permettent de simuler le comportement de quelques dizaines de millions de particules dans les ordinateurs plus puissants, et le calcul des systèmes complexes devient possible.

Nous pouvons distinguer trois types de programmes DEM :

- Algorithmes de calcul « Faits maison », grâce à un code qui s'exécute à travers le langage interprété (avec l'aide de Matlab par exemple) ou à travers la compilation de programmes en langage compilé ;
- Par le biais de programmes commerciaux de CFD : la plupart des programmes de mécanique des fluides numérique ont la possibilité de simuler le comportement de particules en DEM couplé avec la simulation d'un fluide ;
- Par des systèmes de logiciels dédiés à la DEM.

La première option n'est praticable qu'à condition d'avoir à sa disposition un code ou de savoir l'écrire ; souvent, ces programmes sont construits quand il y a nécessité d'avoir des options spéciales dans le logiciel.

Des programmes comme Fluent ou OpenFOAM présentent l'option de calcul des matériaux granulaires, couplé à un fluide, souvent, toutefois, on subit l'inconvénient d'avoir à simuler le fluide lorsque cela n'est pas toujours nécessaire, ce qui rend le calcul plus lourd inutilement.

Il y a actuellement à notre connaissance deux systèmes de programmes sur le marché pour effectuer des simulations DEM : LIGGGHTS [104] (**L**AMMPS **I**mproved for **G**eneral **G**ranular and **G**ranular **H**eat **T**ransfer **S**imulations) et EDEM [105]. Les possibilités offertes par ces deux

programmes sont similaires, mais LIGGGHTS offre une partie libre et est moins fermé que EDEM. Dans le cadre de cette thèse, le programme LIGGGHTS sera utilisé. De plus, LIGGGHTS présente l'avantage d'être beaucoup moins onéreux.

LIGGGHTS, comme exprimé par l'acronyme, est dérivé d'un programme de dynamique moléculaire libre (LAMMPS) ; la version gratuite n'a pas d'interface utilisateur, la simulation est initialisée à l'aide d'un script, qui charge la masse, la position, la vitesse initiale des particules et la géométrie du système, qui peut être soit généré dans LIGGGHTS même ou par le biais de l'utilisation de logiciels de fabricants tiers.

2.1.1 Algorithme

Le principe du modèle numérique a été présenté dans le chapitre précédent. On utilise un schéma simple pour décrire le fonctionnement du logiciel après initialisation :

- Recherche de contacts : l'algorithme recherche dans un volume fini V au centre duquel se trouve la particule i les contacts au sein de V
- Calcul des forces : selon le chevauchement entre deux particules génériques i et j , on calcule les forces de contact et la force résultante agissant sur la particule i
- Calcul des déplacements : selon la force résultante sur la particule i , une intégration numérique permet de calculer la position de la particule i à l'instant $t' + \Delta t$.

Ces étapes sont répétées jusqu'au temps final t^* , où l'utilisateur a placé la fin de la simulation dynamique. Dans ce qui suit, toutes les étapes de calcul au cours de la simulation seront analysées en détail.

2.1.2 Initialisation

L'initialisation est la première phase de la mise en œuvre : le programme lit le script, en initialisant les propriétés des particules, en créant la géométrie et en définissant les propriétés générales de la simulation. L'initialisation réalise également l'analyse des positions initiales des particules pour prévenir le chevauchement au cours de la création de particules : le chevauchement des particules peut entraîner des forces énormes et purement numériques (donc non réelles) qui conduiraient à l'explosion de particules. Un autre choix important lors de l'initialisation est le pas de temps Δt choisi pour la simulation. Δt ne doit pas être trop petit, dans le cas contraire, le temps nécessaire pour la

fin de la simulation et pour atteindre le temps final t^* serait prohibitif. Donc on a intérêt à choisir un Δt aussi grand que possible, mais que se passe-t-il si Δt est trop grand ?

Supposons que la particule i dont le centre est situé à la position $\mathbf{P}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ à l'instant t_0 , avec une vitesse \mathbf{v}_1 et rayon r_1 et la particule j dont le centre est situé à la position $\mathbf{P}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ avec une vitesse \mathbf{v}_2 et rayon r_2 sont à une distance $d > r_1 + r_2$ (figure 2.1). Dans les descriptions des modèles, il est souvent fait usage des vecteurs, qui seront indiqués en caractères gras.

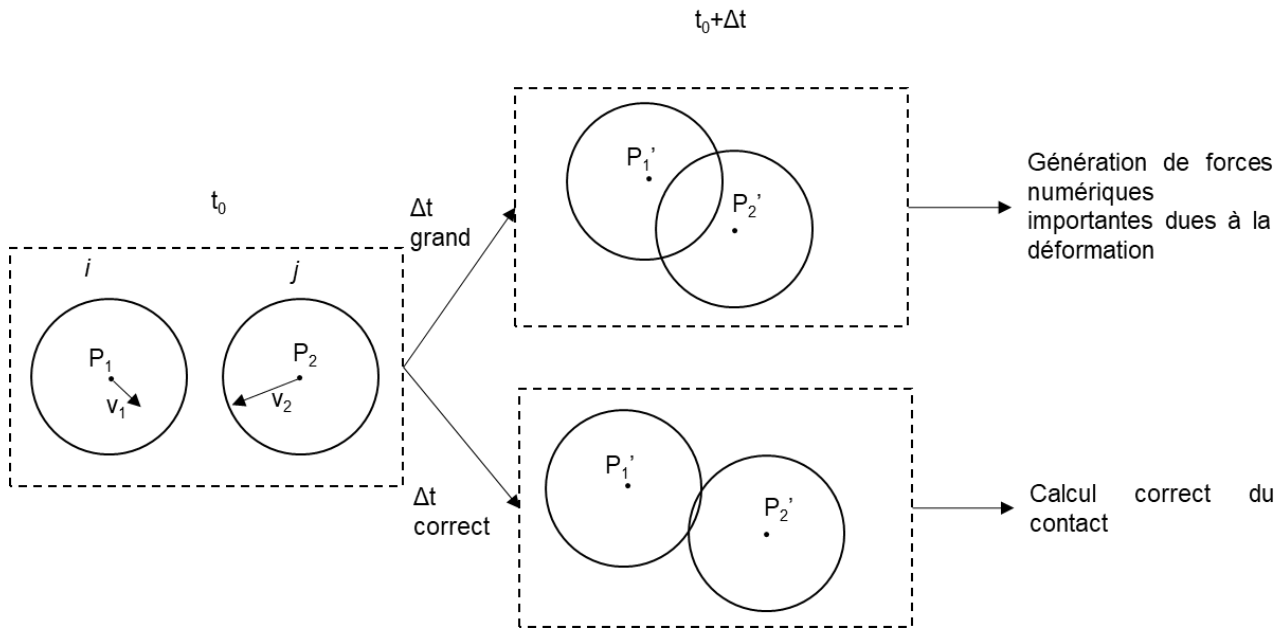


Figure 2.1: Conséquences d'un Δt trop grand sur la simulation

Si i n'est pas en contact avec d'autres particules et qu'il n'y a pas d'autres forces agissant sur la particule, i atteindra l'emplacement $\mathbf{P}_1' = \mathbf{P}_1 + \mathbf{v}_1 \Delta t$ à l'instant $t' = t_0 + \Delta t$ et j atteindra l'emplacement $\mathbf{P}_2' = \mathbf{P}_2 + \mathbf{v}_2 \Delta t$. Si Δt est trop grand, il peut arriver que $|\mathbf{P}_1' - \mathbf{P}_2'| < r_1 + r_2$, en générant des forces extrêmement élevées en raison de l'erreur numérique due au choix d'un pas de temps trop grand. Pour éviter cela, on renvoie habituellement aux deux échelles de temps suivantes [106,107]:

$$\Delta t_r = \pi r \sqrt{\frac{\rho}{G(0.16310 + 0.8766)}}$$

Équation 2.1

$$\Delta t_h = 2.87 \left(\frac{m^{*2}}{r^{*2} E^{*2} v_{\max}} \right)^{0.2}$$

Équation 2.2

Où G est le module de cisaillement des particules, θ le coefficient de Poisson, v_{\max} la vitesse maximale atteinte par les particules à l'intérieur du système et m^* , r^* , E^* la masse effective, le rayon effectif et le coefficient de Young effectif (à l'exception de v_{\max} , ces propriétés sont définies dans les annexes A et B).

L'équation 2.1 représente le temps de Rayleigh, c'est-à-dire le temps caractéristique pour la diffusion de l'onde de Rayleigh causée par l'impact particule-particule à travers une particule solide [108]. L'équation 2.2 représente le temps caractéristique de Hertz, c'est-à-dire le temps caractéristique de contact. Pour les simulations, il est bon que le pas de temps de calcul soit plus petit que ces deux valeurs, généralement inférieur à 20 % de Δt_r et en dessous de 10-15 % de Δt_h . Il faut noter que, pour des mouvements lents où les vitesses caractéristiques sont faibles, le Δt limite sera imposé principalement par la condition de Rayleigh, par contre dans des dynamiques rapides la limite la plus stricte sera liée à la condition de Hertz. Souvent, pour augmenter artificiellement les limites imposées par ces deux paramètres, nous avons recours à un abaissement du coefficient de Young. Ce choix augmente le temps de contact particule - particule, ce qui permet d'augmenter fortement le pas de temps de la simulation. Faire ce type de choix implique des différences avec la réalité [109] ; on sous-estime en particulier les vitesses solides, mais c'est un choix qui s'impose étant donné le temps nécessaire pour atteindre le régime stationnaire du système. Nous estimerons dans quelques cas particuliers l'incidence de ce choix sur les résultats.

2.1.3 L'algorithme de recherche des contacts

Lors de l'initialisation, on fait le choix de ce qu'on appelle distance de peau (r_{skin}), nécessaire pour la recherche des contacts. LIGGGHTS effectue cette recherche par le biais de la liste de Verlet [110]. Dans une simulation DEM c'est une des parties les plus lourdes en termes de calcul et donc, surtout dans les grandes simulations, il faut effectuer une optimisation pour obtenir des simulations plus rapides. Dans une simulation DEM, les interactions se font par contact et donc à une courte distance, sauf s'il existe d'autres forces (comme celle de Coulomb). Donc effectuer la vérification de contact ($|\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j| >> r_i + r_j$) sur les particules éloignées ne sert à rien. La méthode de la liste de Verlet permet de réduire le nombre de particules pour lesquelles le contact est calculé, en considérant seulement le nombre de particules dans un volume sphérique de rayon $r + r_{\text{skin}}$ (figure 2.2). Si r_{skin} est trop grand

la liste de Verlet pour chaque particule sera grande, donc la mémoire demandée par la simulation augmentera de façon importante, en ralentissant excessivement le calcul. Si par contre r_{skin} est trop petit, certains contacts ne seront pas pris en compte ou l'opération de tri, qui est aussi couteuse en temps CPU, sera réalisée trop souvent.

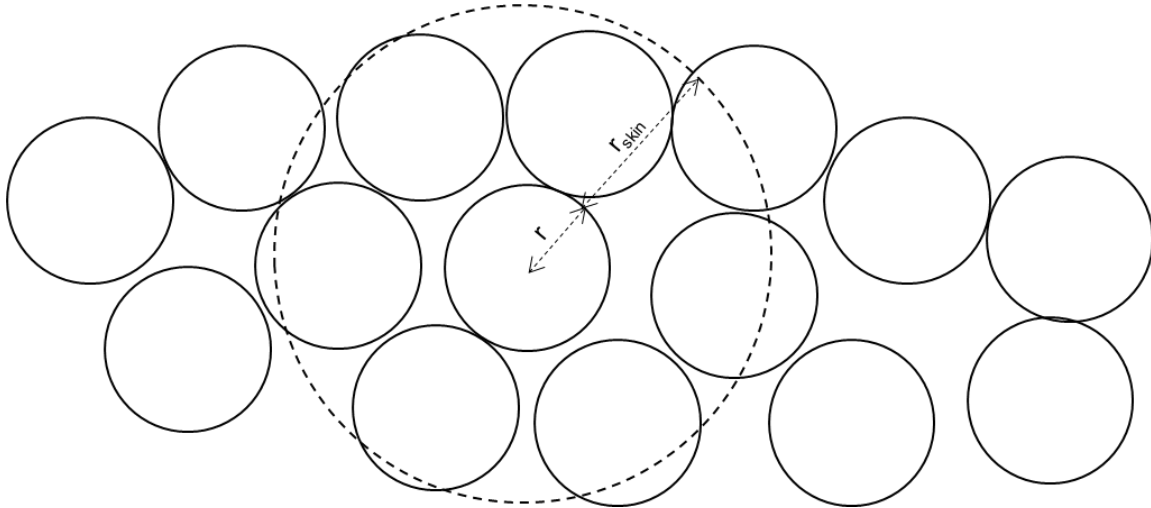


Figure 2.2: Liste de Verlet

Nous calculons pour chaque particule les éléments de la liste de Verlet. Il faut donc analyser chacune des $N(N-1)/2$ couples, avec N le nombre de particules dans la simulation, et sélectionner celles qui se trouvent dans le volume défini par $r+r_{skin}$. Cette étape varie avec le carré de N en termes de vitesse de calcul. La liste de Verlet cesse d'être valable une fois qu'une particule i se déplace d'une distance $\Delta_i > \Delta_{update} = 0.5r_{skin}$. A ce moment, la liste doit être reconstruite, parce que la particule i peut entrer en contact avec une particule j qui n'appartient pas au volume défini par r_{skin} dans l'étape précédente. Ils existent aussi des algorithmes plus rapides, comme par exemple l'algorithme des cellules liées ([107]), mais ils ne sont pas codé dans LIGGGHTS.

2.1.4 Calcul des forces

Après avoir décrit comment LIGGGHTS détermine la liste de Verlet pour les particules et comment les contacts sont identifiés entre deux particules voisines, la prochaine étape est le calcul des forces de contact. Au moment du contact, il se développe une force répulsive, calculée selon le chevauchement entre les deux particules (chevauchement calculé trivialement comme $d = |\mathbf{P}_1' - \mathbf{P}_2'| - r_1 - r_2$). la force de contact est composée de deux termes : une partie normale $F_{i,j}^n$, agissant dans la direction du vecteur \mathbf{n} définie par les centres des deux particules en contact, et une composante

tangentielle $\mathbf{F}_{i,j}^t$, agissant selon le vecteur de direction \mathbf{t} perpendiculaire à \mathbf{n} (figure 2.3). Mathématiquement, si $\mathbf{d}_{i,j} = \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j$ alors $\mathbf{n} = \mathbf{d}_{i,j}/|\mathbf{d}_{i,j}|$, par contre $\mathbf{t} = \mathbf{v}_{i,j}^g/|\mathbf{v}_{i,j}^g|$, où $\mathbf{v}_{i,j}^g$ est la vitesse relative de deux points situés au point de contact des deux particules, définie comme suit:

$$\mathbf{v}_{i,j}^g = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j - \mathbf{n}[(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{n}] - (\mathbf{R}_i \boldsymbol{\omega}_i - \mathbf{R}_j \boldsymbol{\omega}_j) \wedge \mathbf{n}$$

Équation 2.3

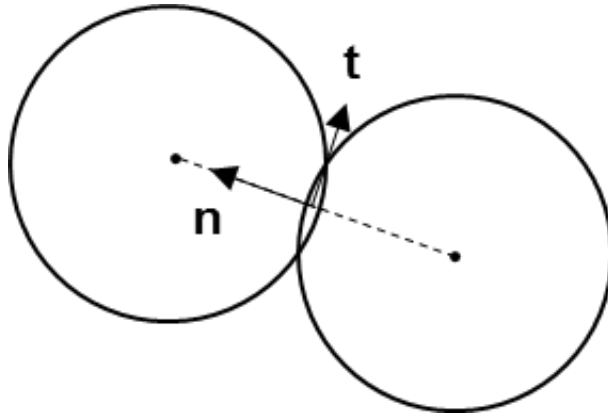


Figure 2.3: Direction normale et tangentielle du contact

Chaque composante est constituée de deux parties : une force élastique, calculée sur la base du chevauchement et une force dissipative qui correspond habituellement à une dissipation visqueuse, utile pour reproduire l'inélasticité de la collision.

2.1.4.1 Force normale

Dans LIGGGHTS, on peut faire usage de deux modèles pour le calcul de la force normale : le modèle de Hertz ([111]) et le modèle de Hooke ([112]), que nous discutons brièvement dans les prochains sous-paragraphe.

Composante élastique : Le contact Hertzien

Hertz ([111]) a proposé un modèle simple de ressort non linéaire pour représenter la composante élastique de la force normale au cours de la collision. Les détails de ce modèle se trouvent dans [113]. Il aboutit à l'équation 2.4 :

$$F_{\text{élastique}}_{i,j} = \frac{2E}{3(1-\nu^2)} \sqrt{r_{i,j}^*} \delta_{i,j}^{3/2} = k_n \delta_{i,j}^{3/2}$$

Équation 2.4

Avec $\delta = (|\mathbf{P}_i' - \mathbf{P}_j'| - r_1 - r_2)$ (le chevauchement sur la particule i) et k_n la constante d'élasticité.

Composante élastique : Le contact de Hooke

Ce modèle peut être écrit simplement comme

$$\sigma_x = \varepsilon_x E$$

Équation 2.5

Où σ_x est la contrainte imposée et ε_x est la déformation. Sans tenir compte de la géométrie de la particule on écrit directement, en se référant au mouvement classique du ressort.

$$F_{\text{élastique}}_{i,j} = k_n \delta_{i,j}$$

Équation 2.6

Où k_n est la constante d'élasticité, fonction des propriétés des particules. La principale différence entre ces deux modèles réside dans l'exposant donné à la déformation, la loi de Hertz représente un ressort non linéaire, alors que la loi de Hooke un ressort linéaire. Cela implique que les simulations effectuées en utilisant la loi de Hertz nécessitent des pas de temps Δt normalement plus petits que les simulations mettant en œuvre la loi de Hooke. Mais il est vrai aussi que la constante k_n de la Loi de Hooke n'est pas facilement définissable par le biais de tests physiques, dans la plupart des cas, il faut l'étalonner.

Composante visqueuse

Il n'y a aucun objet entièrement élastique : n'importe quel objet sur une trajectoire de collision devra franchir un gap d'énergie dû à la friction interne dans chaque corps. Cela se traduit par des déformations résiduelles encore présentes après un contact, la figure 2.4 en présente un aperçu schématique.

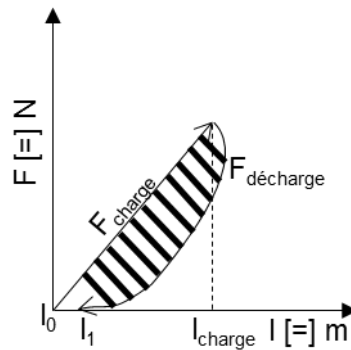


Figure 2.4: Un cycle de charge et décharge typique

La zone en pointillés représente l'énergie totale libérée lors d'un contact

$$W = \int \mathbf{F} d\mathbf{l} = \int_{l_0}^{l_{\text{charge}}} \mathbf{F}_{\text{charge}} d\mathbf{l} - \int_{l_1}^{l_{\text{charge}}} \mathbf{F}_{\text{décharge}} d\mathbf{l}$$

Équation 2.7

Un algorithme « réaliste » devrait inclure l'histoire de la déformation résiduelle appliquée lors d'un contact sur chaque particule ; mais cela nécessiterait une quantité prohibitive de mémoire. Ce qui est fait normalement est l'inclusion de cette partie inélastique dans un terme qui inclut la perte d'énergie due au contact. La résistance est du type

$$F_{\text{dissipative}}^{i,j} = \gamma_n V_{\text{deformation}} = \gamma_n \frac{d\delta_n}{dt}$$

Équation 2.8

Nous utilisons ce type de fonction pour la force dissipative parce que W est fonction de la vitesse de contact à travers le coefficient de restitution (Annexe C). L'expression de γ_n est présentée en annexe.

2.1.4.2 Force tangentielle

La composante tangentielle de la force est due aux frottements entre particules dans le milieu granulaire ; le frottement est de type solide-solide et obéit à la loi de Coulomb [114] (équation 2.9), la constante μ est appelé coefficient de frottement dynamique. La force de frottement tangentielle est limitée selon l'équation 2.9.

$$F_t \leq \mu F_n$$

Équation 2.9

Pour une description plus détaillée des paramètres inclus dans l'équation 2.9 nous nous référons aux annexes (Annexe B et Annexe C).

2.1.4.3 Frottement tournant

Lors d'un contact particule-particule ou particule – paroi dans les programmes DEM on considère aussi un moment opposé à la rotation afin d'éviter des rotations sans fin qui ne correspondraient pas à la réalité.

Considérons une sphère de masse m , de rayon r et de moment d'inertie I qui roule sur un plan Π avec une certaine vitesse du centre de gravité v_0 et une vitesse de rotation ω_0 autour d'un axe O passant par le centre, perpendiculaire à la vitesse v_0 et parallèle au plan Π , comme en figure 2.5.

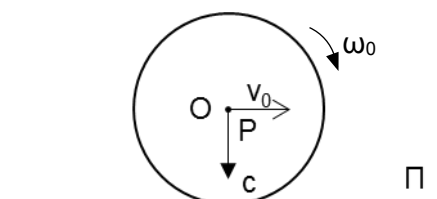


Figure 2.5: Une sphère qui roule sur un plan sans frottement

Si l'on considère le plan et la sphère indéformable et sans frottement, la sphère va glisser sans s'arrêter. Ceci peut être démontré en examinant les équations du mouvement pour la sphère. Si \mathbf{N} est la réaction de contrainte Π et \mathbf{P} est la force poids :

Équilibre des forces

$$m\mathbf{a}_O = \mathbf{P} + \mathbf{N} = \begin{cases} m\mathbf{a}_O = 0, \text{direction parallèle à } \Pi \\ 0 = \mathbf{P} + \mathbf{N}, \text{direction perpendiculaire à } \Pi \end{cases}$$

Équation 2.10

Équilibre des moments sur le pôle O

$$I\alpha_O = 0$$

Équation 2.11

Si la sphère et le plan sont indéformables, la surface de contact est réduite à un seul point C, en rendant nulle n'importe quel genre de friction. Considérant le cas avec frottement (figure 2.6) :

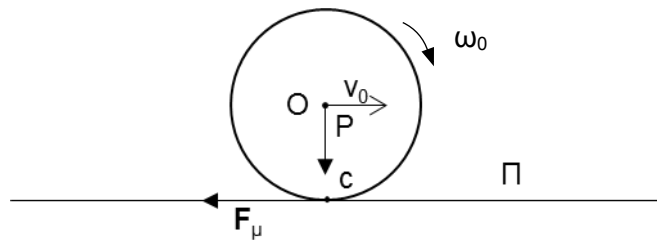


Figure 2.6: Une sphère qui roule sur un plan avec frottement statique

Si \mathbf{F}_μ est la force de frottement les équations deviennent :

Équilibre des forces

$$m\mathbf{a}_O = \mathbf{P} + \mathbf{N} + \mathbf{F}_\mu = \begin{cases} m\mathbf{a}_O = -\mu_s P, \text{direction parallèle à } \Pi \\ 0 = \mathbf{P} + \mathbf{N}, \text{direction perpendiculaire à } \Pi \end{cases}$$

Équation 2.12

Équilibre des moments par rapport au pôle O

$$I\alpha_0 = r \wedge F_\mu$$

Équation 2.13

En fait, ce système est incomplet, car le mouvement provoque une déformation, ce qui entraîne un déplacement du centre d'application c en c'.

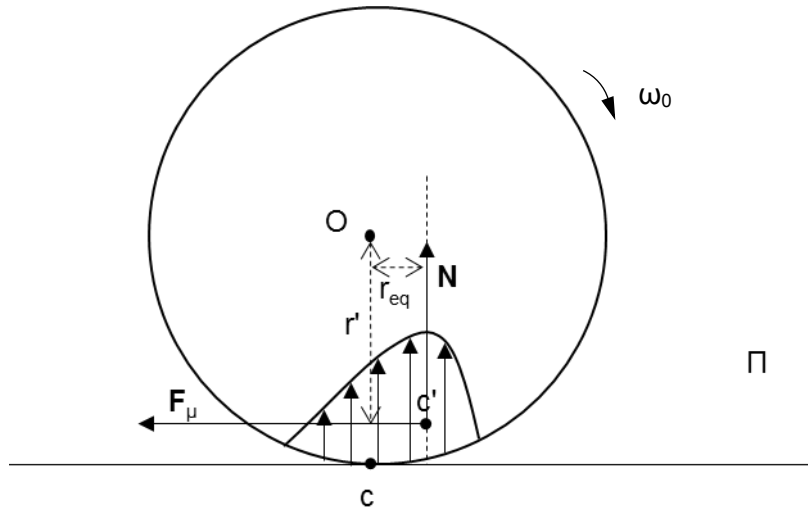


Figure 2.7: Une sphère qui roule sur un plan avec frottement statique et déformation

Si r_{eq} est la distance entre la ligne droite Oc et la ligne parallèle à Oc en passant par c' et r' est la distance entre O et la ligne parallèle au plan Π et passant par c', les équations deviennent

Équilibre des forces

$$m\mathbf{a}_0 = \mathbf{P} + \mathbf{N} + \mathbf{F}_\mu = \begin{cases} m\mathbf{a}_0 = -\mu_s P, \text{ direction parallèle à } \Pi \\ 0 = P + N, \text{ direction perpendiculaire à } \Pi \end{cases}$$

Équation 2.14

Équilibre des moments par rapport au pôle O

$$I\alpha_0 = r' \wedge \mathbf{F}_\mu + \mathbf{r}_{eq} \wedge \mathbf{N}$$

Équation 2.15

Si $r' \approx r$ alors l'équation 2.15 devient

$$I\alpha_0 = (rF_\mu - \mu_r rN)\mathbf{u}_t$$

Équation 2.16

Avec $\mu_r = r_{eq}/r$. Cela signifie qu'il y a un moment cinétique supplémentaire en raison de la déformation appliquée pendant la rotation avec la présence d'un autre paramètre μ_r .

C'est pourquoi dans les programmes DEM on ajoute généralement un moment cinétique supplémentaire opposé au sens de rotation. Ci-dessous, nous pouvons voir les modèles de moment de frottement utilisables dans LIGGGHTS.

Moment à direction constante (MDC)

Le modèle le plus simple est celui d'un moment de frottement de rotation (M_μ) du type :

$$\mathbf{M}_\mu = \mu_r N r_{ij}^* \frac{\boldsymbol{\omega}_{r,shear}}{|\boldsymbol{\omega}_{r,shear}|}$$

Avec $\omega_r = \omega_i - \omega_j$ la vitesse de rotation relative entre les deux particules i et j et $\omega_{r,shear}$ la projection de ω_r sur le plan de coupe.

Modèle ressort-amortisseur élastique plastique (RAEP)

Dans ce cas M_μ est du type :

$$M_\mu = k_r \Delta\theta_r - \gamma_r \frac{d\theta_r}{dt}; \quad k_r = 2.25 k_n \mu_r^2 r_{ij}^{*2}$$

Équation 2.17

Où θ_r est le changement de l'angle depuis le début du contact et γ_r est le coefficient d'amortissement. Dans ce cas, l'expression de M_μ est construite de telle façon qu'elle se présente sur le modèle vu dans le cas de la force normale de Hooke avec amortissement visqueux. Ce moment de frottement est majoré par :

$$M_\mu \leq \mu_r N r_{i,j}^*$$

Équation 2.18

afin d'éviter des valeurs de M_μ trop élevées.

Le premier modèle présente l'avantage d'être un modèle simple et facilement étalonnable dans le cas d'une simulation DEM ; toutefois, le principal problème du modèle MDC réside dans les cas presque statiques, où ce moment devient oscillatoire ([115]).

2.1.4.4 Intégration des équations de mouvement

Nous avons vu qu'à chaque contact générique d'une particule i avec une particule j , une force de contact F_c et un couple M_μ sont appliqués. Déterminer l'emplacement de i à l'instant $t^*=t+\Delta t$ revient à la résolution du système :

$$\begin{cases} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^t + m_i \mathbf{g}) & (a) \\ I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{r}_i \wedge \mathbf{F}_{ij}^t - \mathbf{M}_\mu) & (b) \end{cases}$$

Équations 2.19

avec des conditions initiales t_0 , c'est-à-dire les équations de Newton (système d'équations 2.19, (a)) et d'Euler (système d'équations 2.19, (b)) appliquées à un corps sphérique. L'algorithme utilisé par LIGGGHTS est l'algorithme de Verlet, un des algorithmes les plus simples, mais aussi l'un des plus efficaces ([116]). Cet algorithme utilise les valeurs de coordonnées aux instants t et $t-\Delta t$ et la force

F_c appliquée à la particule i . Il faut tout d'abord écrire le développement en série de Taylor pour la coordonnée x aux instants $t+\Delta t$ et $t-\Delta t$:

$$\begin{cases} x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta x(t)\Delta t + \frac{F_c}{m} \frac{\Delta t^2}{2} + \Delta^3 x(t) \frac{\Delta t^3}{3!} + o(\Delta t^3) \\ x(t - \Delta t) = x(t) - \Delta x(t)\Delta t + \frac{F_c}{m} \frac{\Delta t^2}{2} - \Delta^3 x(t) \frac{\Delta t^3}{3!} + o(\Delta t^3) \end{cases}$$

Équations 2.20

En additionnant les deux séries de Taylor :

$$x(t + \Delta t) + x(t - \Delta t) = 2x(t) + \frac{F_c}{m} \Delta t^2 + o(\Delta t^3)$$

Équation 2.21

on obtient :

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) + \frac{F_c}{m} \Delta t^2 - x(t_0 - \Delta t)$$

Équation 2.22

La vitesse v_i est alors déterminée par différence centrée :

$$v_i = \frac{x(t + \Delta t) - x(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$

Équation 2.23

La même chose est faite pour la vitesse angulaire

2.1.5 Remarques et limites

L'algorithme DEM, comme nous l'avons vu, est extrêmement puissant : en utilisant des lois conformes à la réalité, ce type de simulation donne une grande quantité d'informations sur les particules à l'intérieur du système, en outre le large éventail de modèles rend ce type de simulation adaptable à de nombreux systèmes couramment utilisés. Néanmoins, ce type de simulations a des inconvénients qui compliquent parfois son application :

- Les calculs sont considérables et parfois même prohibitifs : nous avons vu que ce système simule chaque particule, résolvant pour chacune les contacts vus dans les paragraphes 2.1.3 et 2.1.4 et le système d'équations 2.19. Il faut considérer que le nombre de particules N croît avec le système analysé par une augmentation proportionnelle à $1/r_i^3$, où r_i est le rayon moyen des particules. Ceci rend le nombre de calculs prohibitif pour des rapports $V_{\text{système}}/V_i$ trop grands, avec V_i volume d'une particule et $V_{\text{système}}$ volume total du solide.
- Nous avons vu la situation dans le cas de particules sphériques, mais cela correspond rarement à la réalité : la forme sphérique simplifie grandement la recherche des contacts, étant donné que la vérification du contact est réduite à la condition $|\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j| > r_i + r_j$, mais cette condition n'est pas suffisante dans le cas de particules non-sphériques et d'autres équations fondées sur l'orientation doivent être ajoutées. En outre, même les expressions des forces vues jusqu'à présent doivent en général être modifiées pour les rendre applicables pour des particules non-sphériques, rendant les calculs encore plus compliqués [117].

Le second aspect surtout peut être trop limitant, étant donné que la plupart des systèmes industriels mettent en œuvre des particules extrêmement hétérogènes. Plusieurs modèles permettent la simulation de particules non-sphériques dans un environnement DEM, comme l'ellipsoïde [118], les sphéro-cylindres [119], les polyèdres [120,121] et l'approche multisphère ([122–125]). Dans LIGGGHTS, seule l'approche multisphérique est utilisable, approximation que nous verrons dans la prochaine section.

2.1.6 Le modèle multisphérique

Le modèle multisphérique consiste dans la composition d'une particule complexe par des sphères simples (figure 2.8).



Figure 2.8: une pierre (gauche) et sa représentation multisphérique (droite)

Ce modèle a l'avantage de préserver une condition de contact simple pour les sphères et le modèle des forces. Notez que les sphères peuvent se chevaucher sans générer des forces en raison de la déformation au cours de la formation de particules multisphériques. Ce qu'on essaie en général de faire, est de représenter la surface de la particule réelle grâce à l'utilisation de particules sphériques "osculatrices" (du Latin « qui embrasse », donc tangentes à la surface réelle, figure 2.9) dans l'environnement DEM, c'est-à-dire un nombre fini de sphères ayant des points en commun avec la surface de la particule non sphérique, en imposant un certain nombre de particules n par particule multisphérique. Il est clair qu'en augmentant n , on augmente la précision avec laquelle la surface est représentée.

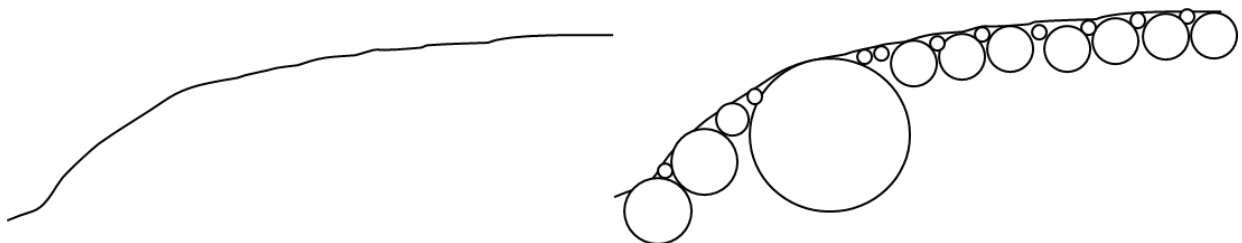


Figure 2.9: Une surface compliquée (gauche) et une représentation multisphérique avec des sphères osculatrices (droite)

Lors du contact, les propriétés utilisées telles que la masse et la vitesse, sont celles de la particule multisphérique complète. Des sphères d'une même particule multisphérique ne peuvent pas effectuer de mouvements relatifs par rapport aux autres sphères de la même particule. Par rapport à la simulation d'une sphère unique, cette représentation est encore plus coûteuse en termes de temps de calcul : Selon le nombre de particules utilisées pour une seule particule multisphérique n , pour simuler N particules multisphériques, il faut simuler nN particules sphériques, qui, pour des représentations très précises (n grand) peut considérablement augmenter le poids de la simulation. En plus pour des particules réelles très hétérogènes dans la forme (comme la pierre de figure 2.8)

il faudra utiliser plusieurs particules multisphériques de formes différentes pour obtenir un résultat satisfaisant, qui n'est pas toujours possible.

2.1.7 Le modèle de sphère équivalente (SE)

Souvent une représentation multisphérique peut être très coûteuse surtout pour N très grand ; il est donc parfois préférable d'utiliser une représentation beaucoup plus simple : la sphère équivalente (SE). Dans ce cas on choisit comme représentant de l'objet de géométrie complexe une sphère unique i de même volume et de même masse (figure 2.10)

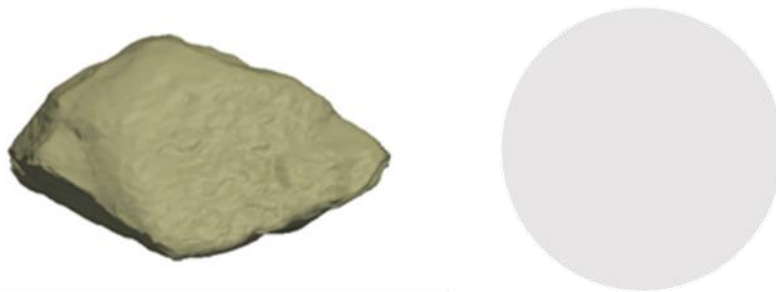


Figure 2.10: une pierre (gauche) et sa représentation sphère équivalente (droite)

Il est évident que le comportement d'une sphère équivalente ne sera pas le même que celui de la particule réelle, sauf à appliquer des modifications aux autres paramètres, comme les coefficients de frottement. Il sera donc nécessaire d'effectuer une calibration pour évaluer les paramètres de friction qui permettraient de reproduire un comportement semblable à celui des particules réelles. Dans ce cas, μ et μ_r changent de sens, et deviennent des paramètres ajustables.

2.2 Le couplage CFD-DEM

Dans la plupart des applications, les matériaux granulaires sont entourés de fluide ayant une influence sur leur comportement. Dans certains cas, l'effet du fluide peut être négligeable, mais une représentation exacte d'un processus dépend généralement de la prise en compte du fluide. Une procédure couramment utilisée pour le traitement des problèmes de fluides purs est la mécanique des fluides numériques (CFD). La méthode utilise une décomposition du domaine spatiale, appelée maillage et résout les équations discrétisées sur chaque cellule du maillage. Dans ce cas, le mouvement du fluide est considéré en des points déterminés. Une telle approche est dite Eulérienne.

Si l'on veut travailler sur les problèmes qui impliquent des interactions entre fluides et particules solides, un couplage entre les CFD et le « soft sphere » DEM est nécessaire : dans les deux méthodes, les équations prennent en compte tous les termes représentant les influences extérieures, alors pourquoi ne pas étendre chacune des équations par une autre expression, qui prend en compte l'interaction entre fluide et solide. Cette idée est basée sur la troisième loi de Newton, qui stipule « action = réaction ». La classe obtenue des méthodes couplées de CFD-DEM est de type Euler-Lagrange.

Les problèmes de particules solides entourées par un fluide se présentent sous des formes différentes. D'une part, les particules elles-mêmes peuvent varier par exemple de poudres collantes sur granulés presque sphériques de quelques millimètres de diamètre à des morceaux non sphériques de coke, voire à des étoiles et des planètes. Par ailleurs, le rapport entre la taille des particules et la taille totale du problème est aussi important : dans certains cas, on veut enquêter sur le comportement exact de quelques particules relativement grosses, dans d'autres, le comportement global d'une grande quantité d'objets assez petits nous intéresse. En raison des défis variés On distingue – entre autres - entre « resolved » et « un-resolved » CFD-DEM. Dans la catégorie « resolved » CFD-DEM les particules sont beaucoup plus grandes que les cellules de fluides, ce qui signifie que, lorsqu'une particule est représentée dans le maillage, elle recouvre plusieurs cellules à la fois (figure 2.11, gauche). Cette méthode est utilisée pour les cas où seules de petites quantités de particules - disons quelques centaines ou milliers- doivent être considérées. Le champ fluide autour de chaque particule est résolu avec beaucoup de détails, et la force sur chaque particule est calculée individuellement. Cette méthode appartient à la classe des méthodes DNS (Direct Numerical Simulations). Cette méthode nécessite des maillages extrêmement fins pour décrire le champ d'écoulement autour des particules, ce qui la rend peu apte à la simulation des systèmes industriels tels que ceux décrits dans cette thèse, puisqu'il faudrait des temps extrêmement longs pour le calcul du système CFD. Pour cette raison, nous nous référerons uniquement au CFD-DEM « un-resolved », traité dans les paragraphes suivants.

La catégorie « un-resolved » de CFD-DEM est par contre conçue pour manipuler de grandes quantités de particules. Les particules considérées sont sensiblement plus petites que les cellules de la maille, par conséquent la cellule peut contenir plusieurs particules à la fois. Dans cette méthode, la plus grande partie des coûts informatiques se pose sur le côté DEM. En fonction des ressources de calculs disponibles, des systèmes contenant plusieurs millions d'objets peuvent être traités.

Une schématisation des maillages en ce qui concerne les particules dans les deux méthodes est présentée dans la figure 2.11.

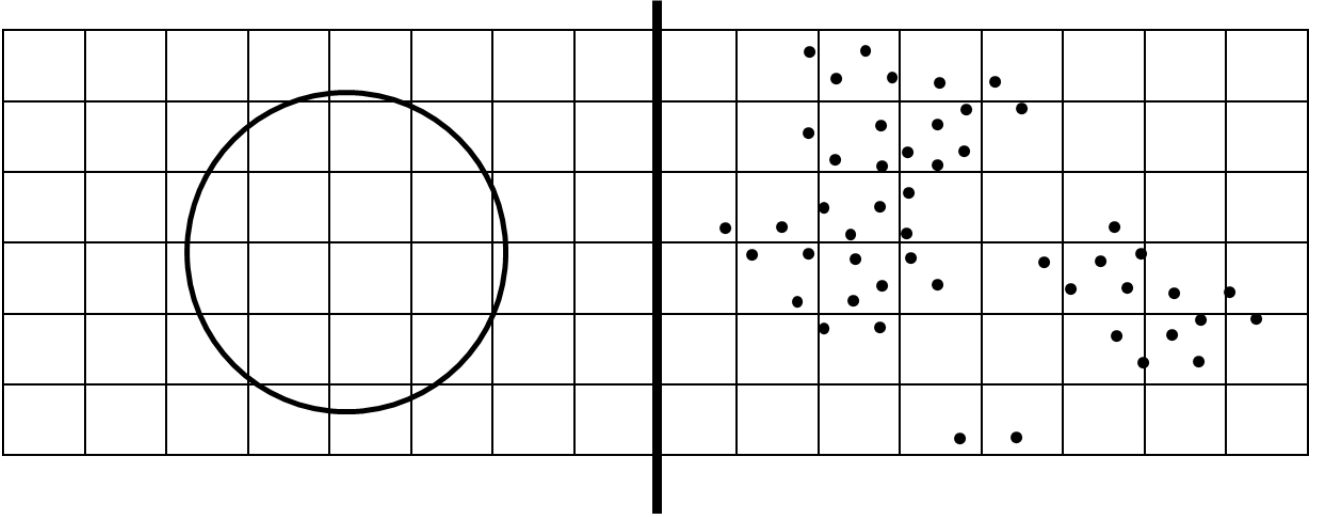


Figure 2.11: CFD-DEM Resolved (gauche) et un-resolved (droite)

2.2.1 CFD-DEM «un-resolved»

Les flux de particules et de fluides peuvent être traités par plusieurs méthodes. Une méthode populaire est le modèle de deux fluides (two fluids model en anglais, TFM). Dans le TFM, les phases fluide et solide sont traités avec l'approche du continuum, en utilisant les équations de Navier-Stokes. Les équations du CFD-DEM « un-resolved » sont une combinaison de l'approche du continuum pour la phase fluide et une approche discrète pour les solides. La littérature fournit un certain nombre de formulations différentes, dont certaines ont été recueillies par Zhou et al. [126,127]. L'introduction présentée à la méthode et ses équations s'inspire de cette publication. Les équations du mouvement du fluide sont formulées comme suit :

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon_f\mathbf{v}_f)}{\partial t} + \nabla(\rho\varepsilon_f\mathbf{v}_f\mathbf{v}_f) = \nabla\sigma_f - \mathbf{F}_{\text{échange}} + \rho\varepsilon_f\mathbf{g}$$

Équation 2.24

avec $\mathbf{F}_{\text{échange}}$ la force qui tient compte de la présence de solides, σ_f le tenseur des efforts fluides ε_f le volume occupé par la fraction de gaz, avec $\varepsilon_f = 1 - \varepsilon_s$, là où précisément ε_s la fraction de volume remplie par le solide. À cela s'ajoute l'équation de continuité qui, pour un fluide incompressible, est :

$$\frac{\partial(\varepsilon_f)}{\partial t} + \nabla(\varepsilon_f\mathbf{v}_f) = 0$$

Équation 2.25

Suite à la discussion de Zhou et al. [126], le terme $F_{\text{échange}}$ peut être divisé en deux facteurs distincts, un terme tenant compte des changements induits par la présence de matières solides dans le tenseur fluide et d'un terme tenant compte du changement des lignes de courant autour de la particule ; on obtient une expression de type.

$$\mathbf{F}_{\text{échange}} = \varepsilon_s \nabla \sigma_f - \mathbf{F}_{sf}$$

Équation 2.26

Avec F_{sf} la force entre solide et fluide. Dans le cas d'un fluide newtonien, le tenseur des contraintes peut être exprimé comme suit :

$$\sigma_f = -p\mathbf{I} + \tau$$

Équation 2.27

où p est la pression du fluide, \mathbf{I} la matrice d'identité format 3 x 3 et τ le tenseur des contraintes de cisaillement, c'est-à-dire :

$$\tau = 2\mu_f(\nabla \mathbf{v}_f + \nabla \mathbf{v}_f^T)$$

Équation 2.28

En introduisant l'équation 2.28 dans l'équation 2.24 on obtient :

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon_f \mathbf{v}_f)}{\partial t} + \nabla(\rho \varepsilon_f \mathbf{v}_f \mathbf{v}_f) - \nabla \varepsilon_f \tau = -\varepsilon_f \nabla p + \mathbf{F}_{sf} + \rho \varepsilon_f \mathbf{g}$$

Équation 2.29

D'autres types de formulation CFD-DEM existent, mais celle-ci sera la formulation utilisée ci-après. F_{sf} peut être exprimée en fonction de la différence de vitesse solide-fluide : $F_{sf} = k_{sf}(\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s)$, avec k_{sf} le coefficient d'échange solide-fluide. Dans le modèle implémenté, il faut tout d'abord calculer les

forces de traînée exercées sur les particules. Pour obtenir les coefficients de k_{sf} , les forces dans chaque maille agissant sur les particules sont calculées. Vu que les contributions des termes de viscosité et de pression sont déjà contenues par l'intermédiaire du tenseur des contraintes (équation 2.26), il faut seulement ajouter le terme de traînée.

$$k_{sf} = \frac{\sum_{i=1}^N f_{k,i}}{V_k}$$

Équation 2.30

avec i la particule générique située dans la maille k , N le nombre de particules dans la maille k , $f_{k,i}$ la force d'interaction entre le fluide dans la maille k et la particule générique i et V_k le volume de la maille k . Quant à la particule générique i les équations décrivant son mouvement seront encore celles qui sont indiquées dans le système d'équations 2.19, bien qu'il faille d'ajouter un terme $f_{k,i}$ dans l'équation (a) du système d'équations 2.19 pour tenir compte des interactions solide-fluide. Les équations qui tiennent compte de la phase fluide pour le solide sont à peu près les mêmes, avec l'ajout d'un terme pour l'échange fluide solide :

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^t + m_i \mathbf{g}) + \mathbf{F}_{p,f}$$

Équation 2.31

$\mathbf{F}_{p,f}$ inclue tous les termes d'interaction fluide solide, que dans le cours de la tractation sera considéré comme la somme de la force de drag, du gradient de pression et de force visqueux.

2.2.1.1 Les forces d'interaction

La force de traînée

Les forces sont prises en compte par différents modèles. Un modèle couramment utilisé pour la traînée est celui de Gidaspow et al. [128] qui combine les relations de traînée par Ergun et Orning [129] et Wen and Yu [130].

Une autre approche a été publiée par Di Felice [131] ; c'est cette approche que nous utilisons et qui est décrite ci-dessous.

Modèle de Di Felice :

Ce modèle utilise la fraction de vide dans le système et le nombre de Reynolds pour les particules Re_p qui est défini comme

$$Re_p = \frac{\rho \varepsilon_f |\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s| d_p}{\mu_f}$$

Équation 2.32

En ce qui concerne le modèle de force de traînée, il est présenté dans le système d'équations 2.33 :

$$\begin{cases} \vec{F}_d = \pi r_i^2 |\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s| C_d \rho_f \varepsilon_f^{2-\chi_i} \\ C_d = \sqrt{0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{Re_p}}} \\ \chi_i = 3.7 - 0.65 e^{-\sqrt{\frac{1.5 - \log(Re_p)}{2}}} \end{cases}$$

Système d'équations 2.33

Modèle de Koch et coll.

Un autre modèle souvent utilisé a été développé par Koch et Hill [132] et Koch et Sangani [133]. Le terme de force de traînée y est donné comme

$$f_d = \frac{V_p |\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s| \beta_s}{\varepsilon_f}$$

Équation 2.34

Avec V_p le volume d'une seule particule et β_s le coefficient d'échange, défini comme :

$$\beta_s = \frac{18 \mu_s \varepsilon_f^2 (1 - \varepsilon_f)}{d_p^2} \left[F_0(\varepsilon_f) + \frac{F_3(\varepsilon_f) Re_p}{2} \right]$$

Équation 2.35

Avec F_0 et F_3 donnée par les relations suivantes :

$$F_0(\varepsilon_f) = \begin{cases} \frac{1 + 3\sqrt{\frac{(1-\varepsilon_f)}{2}} + 135(1-\varepsilon_f)\ln(1-\varepsilon_f) + 16.14(1-\varepsilon_f)}{1 + 0.681(1-\varepsilon_f) - 8.48(1-\varepsilon_f)^2 + 8.16(1-\varepsilon_f)^3} & \text{avec } \varepsilon_f > 0.6 \text{ (a)} \\ \frac{10(1-\varepsilon_f)}{\varepsilon_f^3} & \text{avec } \varepsilon_f \leq 0.6 \text{ (b)} \end{cases}$$

$$F_3(\varepsilon_f) = 0.0673 + 0.212(1-\varepsilon_f) + \frac{0.0232}{(1-\varepsilon_f)^5} \quad (c)$$

Équations 2.36

Autres forces d'interaction :

Il s'agit de la force du gradient de pression $f_{\nabla p}$ et la force de viscosité f_μ

La force de gradient de pression s'exprime comme suit

$$f_{\nabla p} = -V_p \nabla p$$

Équation 2.37

et la force de viscosité f_μ à la place est donnée par

$$f_\mu = -V_p \nabla \cdot \tau$$

Équation 2.38

2.2.1.2 Algorithme

La base de l'outil couplé est un solveur CFD qui utilise des fonctions pour obtenir les données du DEM et déclencher les calculs des particules. Au départ, un maillage CFD avec les conditions initiales et limites et l'état initial de la phase particulaire est requis. La structure principale d'un solveur couplé CFD-DEM est illustrée par la figure 2.12:

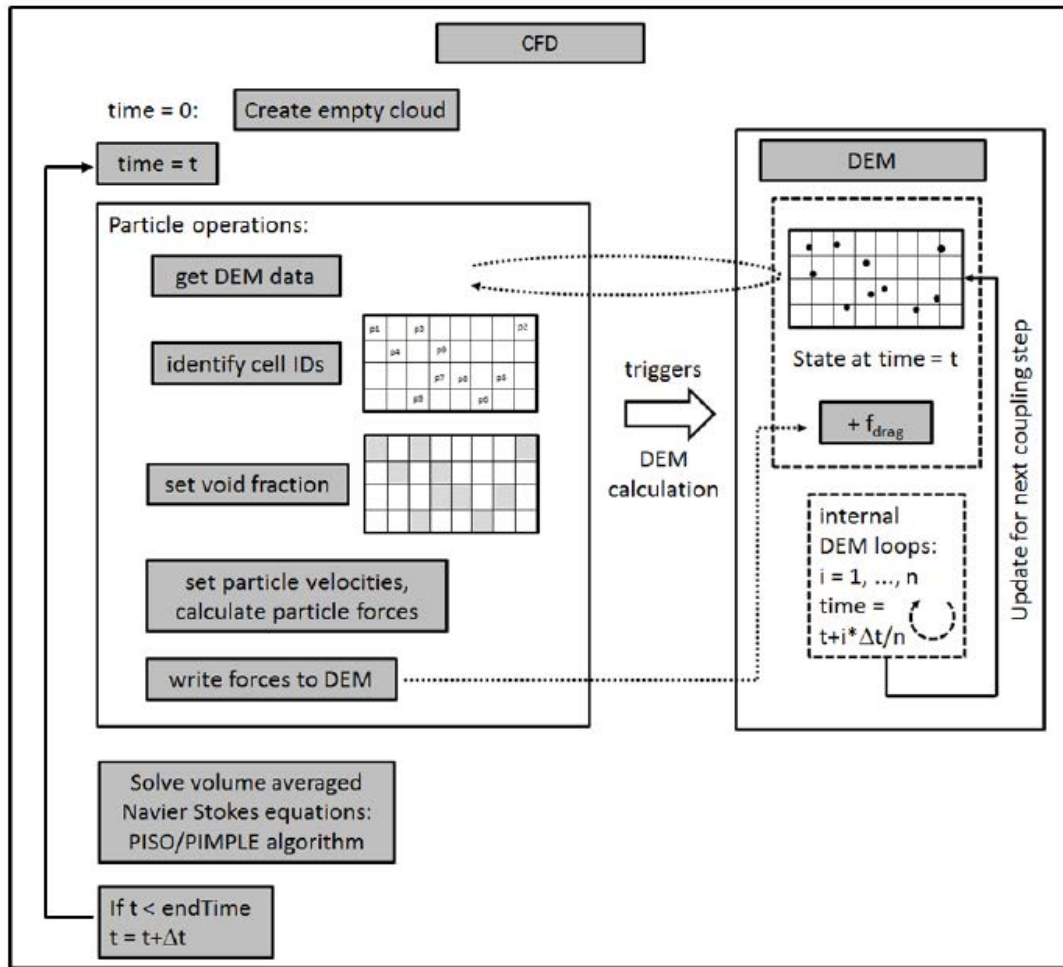


Figure 2.12: Structure de l'algorithme CFD-DEM un-resolved [134]

Dans la première étape du calcul une structure de données est créée, qui contiendra par la suite toutes les données sur les particules. Dès que ceci est accompli, la boucle de calcul est démarrée. Au début de chaque pas de temps, les opérations associées aux particules sont exécutées :

- Tout d'abord, les données DEM au pas de temps présent sont collectées. Les informations sont stockées dans la structure de données préparées.
- Ensuite, les particules sont situées dans la maille fluide.
- Après ce processus de localisation, le champ de fraction de vide est généré : Selon la quantité de matière dans une cellule, on lui attribue une valeur comprise entre 0 (solide pur) et 1 (fluide pur). Les modèles de force utilisés dans ces solveurs sont utilisables uniquement dans les cas où les particules sont plus petites que les cellules fluides, c'est-à-dire qu'une fraction de vide de 0 ne peut pas être gérée correctement. Pour être sûr d'avoir une fraction de vide toujours >0 , une fraction de vide minimale est définie pour éviter les problèmes de divergence du solveur. Si la fraction de vide est corrigée et le maillage est fait de façon appropriée, l'erreur produite est minime.

- Sur la base de la vitesse des particules (discrète), du champ de la fraction de vide et du champ de vitesse du fluide, on calcule le champ de vitesse des particules qui alimente les calculs CFD (du fluide).
- Ces données sont utilisées pour évaluer la force de traînée qui agit sur chaque particule.
- Enfin, l'information sur les forces pour chaque particule est communiquée au solveur DEM.

Le solveur CFD déclenche le solveur DEM, qui commence ses calculs. Si le pas de temps DEM est inférieur au pas de temps CFD, plusieurs itérations DEM ont lieu jusqu'à ce que le prochain couplage soit établi. Du côté CFD, les équations de Navier-Stokes sont résolues pour le pas de temps présent. Avant de passer au prochain pas de temps, les conditions aux limites sont ajustées. Les différentes classes de modules sont décrites ci-dessous :

- Modèle de calcul de la moyenne : ce modèle est responsable du transfert des données entre le nuage lagrangien de particules et la structure de mailles eulérienne. Les paramètres possibles sont « dilués » et « denses » pour la manipulation de différentes phases de particules diluées et dense.
- Modèle de l'horloge : le modèle de l'horloge a une fonction de minuterie qui fournit des informations sur le moment de l'exécution de certaines parties du calcul.
- Modèle d'échange de données : dans la plupart des cas, les calculs CFD et DEM sont couplés de manière deux voies-MPI.¹ Néanmoins, d'autres options, telles que les données de transfert via des fichiers ou couplage unidirectionnel peuvent être choisies.
- Module de calcul de force : dans la littérature, on peut trouver un grand nombre de modèles qui peuvent servir à calculer les forces que le fluide exerce sur les particules. Le choix des modèles utilisés a été présenté plus haut.
- Module IO (input/output) : Si l'option du modèle IO « Ecrire » est activé, un dossier nommé « Lagrangien » est généré dans chaque dossier de pas de temps de calcul CFD. Position, vitesse et rayon de chaque particule permettent une visualisation directe du nuage de particules Lagrangien dans le post-processeur Paraview.
- Module de commande LIGGGHTS : comme de coutume pour CFDEM, le solutionneur CFD est le processus maître qui appelle un script d'entrée LIGGGHTS.

2.2.2 Les logiciels concernés

Comme nous l'avons vu dans l'introduction au chapitre, il existe principalement 3 types de programmes DEM et parmi eux, il existe quelques programmes de CFD qui sont en mesure d'utiliser DEM comme autre caractéristique, comme par exemple Ansys FLUENT [135] ou OpenFOAM [136],

¹ MPI est multi parallel interface, deux voies signifie que le champ fluide est calculé en fonction du champ solide et le champ solide est calculé en fonction du champ fluide.

mais dans certains cas, il est préférable d'ajouter un programme de communication afin de permettre de faire travailler les programmes CFD et DEM en parallèle, pourquoi ?

Les programmes CFD qui ont des capacités DEM sont certainement plus faciles à utiliser, bien que souvent, on préfère la deuxième option pour augmenter la vitesse de simulation. Pour effectuer des simulations très « lourdes », la parallélisation des calculs devient nécessaire. Le calcul parallèle est un type de calcul dans lequel beaucoup de calculs sont effectués simultanément. Les gros problèmes peuvent souvent être divisés en plus petits, ces sous-processus peuvent alors être résolus en même temps. La parallélisation atteint son maximum lorsque ses sous-processus ont des poids similaires, c'est-à-dire lorsque la charge est bien répartie. Dans une simulation DEM, le poids est réparti uniformément sur les sous-processus lorsque le nombre de particules assigné à chaque sous-processus est plus ou moins égal. Ce n'est pas nécessairement vrai, parce que même à nombre de particules équivalent, il peut arriver qu'une zone soit moins dense que d'autres, nécessitant beaucoup moins de mémoire que les autres sous-processus via l'algorithme de contact. Dans tous les cas, une fois que la simulation est divisée en sous processus, il faut que le nombre de particules par sous-processus soit comparable pour avoir une simulation plus rapide. En ce qui concerne un programme CFD, nous choisissons au nombre de mailles pour une parallélisation optimale, bien que, comme dans le cas précédent, ce n'est pas nécessairement vrai. En tout cas, pour optimiser la vitesse d'exécution d'une simulation CFD-DEM en parallèle, il faut assigner à chaque sous-processus un poids équivalent. Dans le cas des simulations CFD-DEM mettant en œuvre un logiciel unique, on ne peut pas mettre en œuvre une parallélisation différente pour le DEM et le CFD, alors que cela est possible pour un programme CFD-DEM exécuté à plusieurs logiciels, rendant théoriquement la vitesse d'une simulation effectuée à 3 logiciels supérieure à celle d'une simulation réalisée avec un logiciel unique.

Après avoir utilisé LIGGGHTS, qui est bien adapté comme programme DEM, il est possible d'utiliser la suite CFDEMcoupling (figure 2.13), qui permet d'effectuer des simulations CFD-DEM avec OpenFOAM, qui s'occupe du CFD, et avec CFDEM, qui gère les termes d'échange entre les deux phases, et LIGGGHTS, qui traite le DEM.

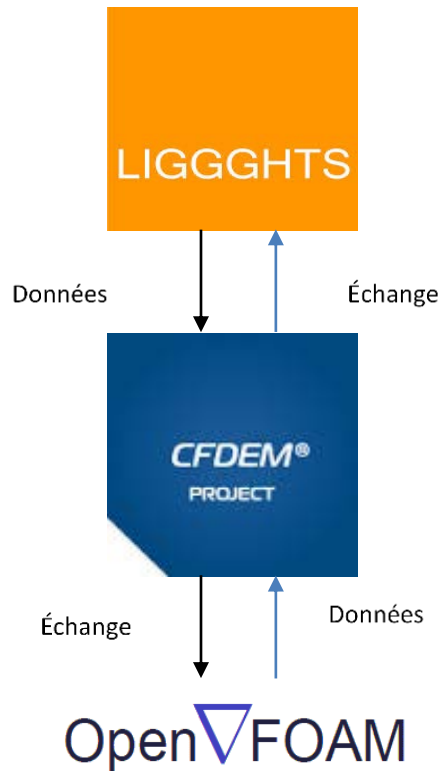


Figure 2.13: Les logiciels concernés dans une simulation CFDEM

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) est essentiellement une boîte à outils C++ pour personnaliser et étendre les solutions logicielles pour la simulation. C'est un finaliseur (solveur) basé sur la théorie de la mécanique des milieux continus qui comprend la mécanique des fluides numérique (CFD, Computational Fluid Dynamics). OpenFOAM est livré avec une bibliothèque complète de solveurs, toujours élargie, applicables à beaucoup de problèmes.

OpenFOAM est un des premiers paquets logiciels scientifiques écrits en C++. OpenFOAM est produit par la société britannique OpenCFD Ltd. et publié sous licence GPL (General Public License). Le programme est livré avec le code source, il est donc possible de modifier et d'étendre ses fonctions.

En ce qui concerne la suite CFDEM, Il gère l'échange entre les deux programmes. Ce logiciel est écrit également en C++, utilisant la même structure de langage que OpenFOAM. Dans le paquet, il y a des solveurs pour le CFD-DEM « resolved » et des solveurs pour le « un-resolved », mais, comme mentionné précédemment, seule la partie « un-resolved » sera utilisée ci-dessous.

2.2.3 Remarques et limites

Les limites de cette approche sont représentées par la taille du problème (ou à partir de la relation $V_{\text{système}}/V_i$, voir la section 2.1.5) et par le maillage fluide: plus encore que pour le DEM simple le rapport $V_{\text{système}}/V_i$ devient crucial, parce qu'avec l'ajout de plus de « poids » sur la simulation CFD-DEM, ces rapports doivent être nécessairement plus petits que dans le cas du DEM pur ; mais le principal problème réside dans les cellules du maillage, puisque elles doivent nécessairement être plus grosses que les particules solides (la taille d'une seule cellule doit être au minimum de 3 à 10 fois supérieure au diamètre d'une particule) pour avoir des simulations stables et fiables. Ces deux problèmes limitant l'application générale de l'algorithme de simulation, cependant l'algorithme est extrêmement puissant par rapport à d'autres algorithmes de simulation solide-fluide, tels que le TFM (two-fluid model) ([126]).

2.3 Calibration du modèle DEM

Aucun modèle n'est meilleur que les données sur lesquelles il se base. Pour mettre en œuvre les algorithmes décrits plus haut, il est nécessaire d'estimer un ensemble de paramètres réalistes pour que les simulations reflètent la réalité en bonne approximation. Dans le chapitre 1, nous avons analysé en détail la composition du lit solide à l'intérieur du réacteur de pyrolyse : il s'agit de particules sphériques (billes d'acier) et de particules non sphériques (plaquettes de bois, figure 2.14, gauche). Dans un premier stade, des granulés de bois seront utilisés (figure 2.14, droite), qui sont sans doute plus faciles à simuler que les plaquettes de bois, compte tenu de leur forme plus homogène. Par ailleurs, nous avons pu mettre en œuvre des expériences dans un banc d'essai utilisant de telles particules.



Figure 2.14: Des plaquettes de bois (gauche) et granulés de bois (droite)

Dans les prochaines sections, nous décrivons des tests effectués pour calibrer les coefficients de frottement pour 2 types de matériau en environnement DEM : les sphères d'acier, et les granulés de bois, qui peuvent être décrits par l'approximation de la sphère équivalente (SE) ou par l'approximation multisphérique. Il s'agit d'évaluer adéquatement les avantages et les inconvénients d'une approximation sur l'autre en termes de dynamique. Enfin, pour évaluer la qualité de la simulation pour ces deux approximations, des essais expérimentaux sont effectués avec un mélange de granulés et de billes d'acier en tambour tournant

2.3.1 Expériences et modèles

La première partie de ce travail consiste en l'étalonnage de différents coefficients de frottement (glissement et roulement) pour les différentes approximations du bois. Pour atteindre cet objectif, nous avons réalisé des mesures de l'angle de talus [85,137–139], le résultats de cette mesure sont disponibles dans l'Annexe F. Le coefficient de frottement par roulement des billes d'acier a été déterminé par des expériences de roulement sur plan incliné (voir Annexe G)

Pour valider l'ensemble des simulations de la dynamique du solide en four tournant, nous avons mis en œuvre le système expérimental présenté dans la figure 2.15. Il a été mis à notre disposition par le LEMTA. Le tambour rotatif (en figure 2.15, élément 1) a un diamètre de 0.12 m et une longueur de 0.135 m, les parois sont toutes transparentes pour permettre une observation visuelle. Le système est fermé pour les particules solides. L'essentiel du contenu de ce qui suit a été publié dans un article paru en 2016 dans la revue Powder Technology, reproduit dans l'Annexe L

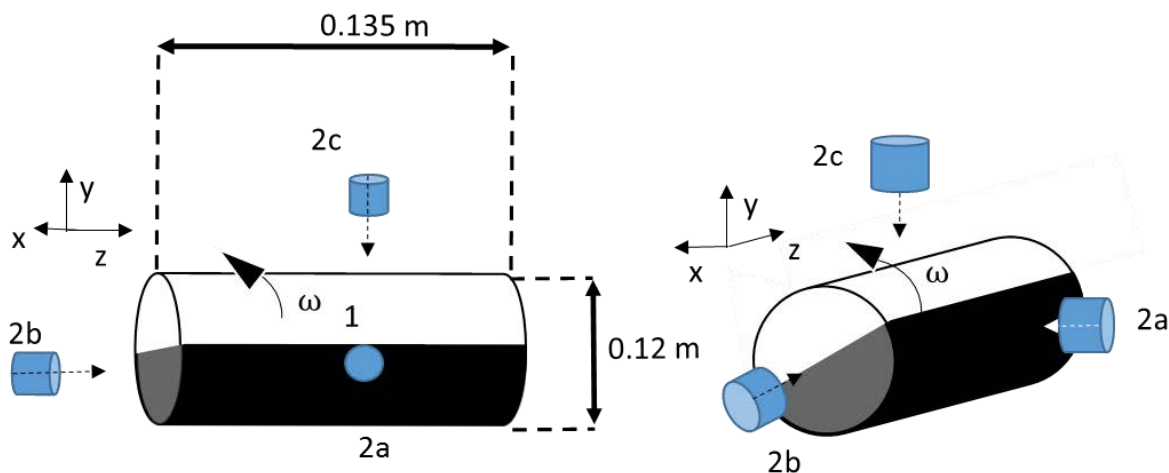


Figure 2.15: Tambour tournant utilisé pour les expériences

Une caméra CCD haute vitesse permet l'enregistrement des images à travers les parois ; une vitesse de 15 images par seconde a été utilisée pour les essais avec les billes d'acier et les granulés mélangés. Trois vues différentes ont été utilisées pour enregistrer les différentes zones du tambour rotatif : les parois du cylindre avant l'avalanche (figure 2.15, élément 2 a), la zone radiale sur les parois d'extrémité (figure 2.15, élément 2b) et la surface du lit (in figure 2.15, 2c). Les images sont ensuite analysées afin d'étudier les régimes de ségrégation et l'angle dynamique de repos par une technique de seuillage des images. Le tambour rotatif est connecté à un moteur électrique, qui permet une rotation précise sans oscillation de vitesse et sans vibrations pour une vitesse de rotation comprise entre 10 et 100 tr/min. L'ensemble du système est monté sur un support réglable, pour assurer l'horizontalité du tambour tournant. Ce système a été utilisé aussi bien à des fins d'étalonnage que pour des études de la ségrégation. Deux types de particules ont été utilisés dans les expériences : des sphères en acier et des granulés de bois du commerce (figure 2.16).



Figure 2.16: Une sphère d'acier et un granulé de bois

Les propriétés mesurées sont présentées dans le tableau 2.1; la distribution de longueur des granulés de bois est présentée dans la figure 2.17. Pour évaluer cette distribution un échantillon d'environ 200 granulés de bois a été mesuré avec un pied à coulisse.

Propriété	Sphères en acier	Granulés de bois
ρ (masse volumique) [=] kg/m ³	8000	1140
r (rayon) [=] m	0.0027	0.003
l (longueur) [=] m	1	0.12 (moyen)
Ψ (sphéricité)		0.834 (moyen)
I_x (Moment d'inertie le long de l'axe principal) [=] kg m ²	$1.44 \cdot 10^{-9}$	$1.74 \cdot 10^{-9}$
$I_y = I_z$ (Moment d'inertie le long de l'axe mineur) [=] kg m ²	$1.44 \cdot 10^{-9}$	$5.51 \cdot 10^{-9}$

Tableau 2.1: Propriétés des particules

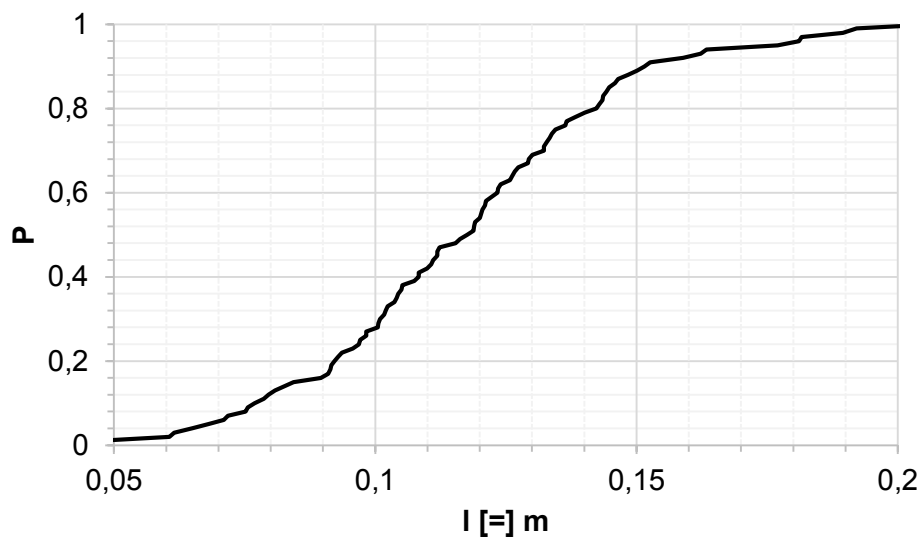


Figure 2.17: Fonction cumulée croissante de la distribution de longueur des granulés de bois

Les granulés de bois sont considérés comme cylindrique ; leur distribution de diamètre est très étroite et considérée comme constante (6 mm) dans ce travail.

2.3.1.1 Calibration des coefficients de frottement pour l'acier et le bois

Deux types d'approximations ont été utilisés pour des granulés de bois dans ce travail : une représentation multisphérique et une approximation par sphère équivalente SE (figure 2.18).

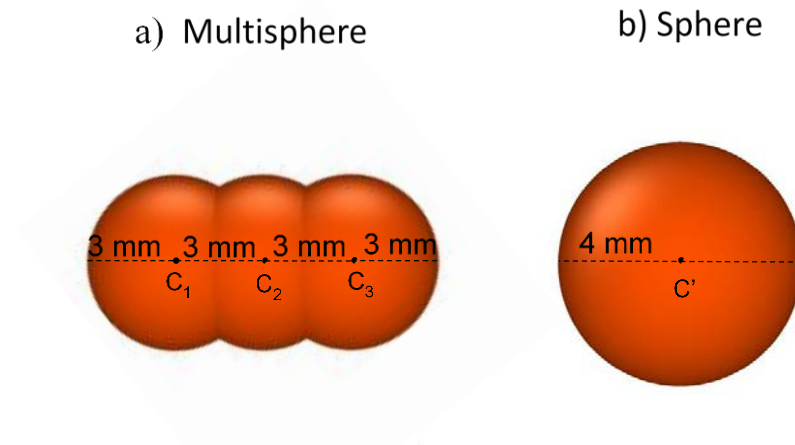


Figure 2.18: approximation multisphérique utilisée (gauche) et approximation SE (droite)

Pour la description multisphérique, les granulés décrits par la figure 2.17 sont représentés par un modèle unique (figure 2.18 gauche) formé par trois sphères de rayon 0.003 m regroupées afin de former la taille moyenne de la distribution en longueur des granulés. La distance entre les centres des sphères voisines est un rayon, Par conséquent, il y a un chevauchement partiel entre elles. La densité du granulé modélisé est ajustée pour obtenir les mêmes masse et moment d'inertie pour la moyenne des particules réelles et les pellets modélisés. Pour l'approximation de la sphère équivalente (figure 2.18, droite), la distribution granulométrique a été utilisée. Le rayon de la sphère équivalente a été choisi afin d'avoir le même volume que les granulés moyens originaux. La raison de ce choix est, qu'en général c'est que le degré de remplissage (donc le rapport volume de solide sur volume du réacteur) est un paramètre clef pour le fonctionnement d'un four tournant. Les propriétés dynamiques et de contact des particules sont présentées dans le tableau 2.2.

Particule	Bille en acier	Bois, sphère	Bois, multisphérique
Ψ (sphéricité)	1	1	0.89
E (Module de Young) [=] N/m ²	1. 10 ⁷	1.*10 ⁷	1.*10 ⁷
ε (Coefficient de restitution)	0.6	0.6	0.6
θ (Coefficient de Poisson)	0.33	0.3	0.3
r (Rayon) [=] m	0.0027	0.0042 ± 0.0003	0.003 (Sphère élémentaire)
ρ (masse volumique) [=] kg/m ³	8000	1140	1140
I_x (Moment d'inertie le long de l'axe principal) [=] kg m ²	1.92 10 ⁻⁹	2.5*10 ⁻⁹	1.43*10 ⁻⁹
$I_y = I_z$ (Moment d'inertie le long de l'axe mineur) [=] kg m ²	1.92 10 ⁻⁹	2.5*10 ⁻⁹	3.81*10 ⁻⁹

Tableau 2.2: Propriétés des particules DEM

Le coefficient de restitution et le coefficient de Poisson du bois utilisés sont tirés de [124]. Un module d'élasticité faible a été utilisé afin d'accélérer le temps pour les simulations, utiliser des valeurs réelles aurait conduit à des temps de calcul prohibitifs ; nous verrons cependant que les résultats ainsi obtenus sont compatibles avec la réalité observée. Le temps de collisions Δt est 10⁻³ s, Par conséquent, afin d'avoir un calcul précis du contact, le pas de temps est choisi pour être $\Delta t/40$, *i.e.* 2.5 10⁻⁵ s. Avec ces coefficients, 24 heures sont nécessaires pour atteindre un état d'équilibre dans le cas d'un système mixte de billes d'acier et de granulés de bois. Les simulations ont été réalisées sur un cluster, en utilisant un processeur Intel Xeon X5650. Afin de comparer les phases transitoires et les phases stationnaires, un état initial commun entre expérience et simulation est défini avec des granulés de bois en bas et les sphères d'acier sur le dessus.

Le coefficient de friction acier / acier (μ_{ss}) et acier / pellet (μ_{sp}) ont été tirés de [140], travail qui est aussi présenté dans les annexes (Annexe L). Les autres coefficients de friction et de friction tournante ont été calibrés par le biais de différents tests (Annexe G et Annexe D).

Une fois que les coefficients de frottement mutuel sont étalonnés, les coefficients de frottement avec la paroi doivent être évalués. Ces coefficients sont d'une importance primordiale pour une représentation correcte de la réalité, car les coefficients de frottement avec la paroi définissent le régime dynamique à l'intérieur de la cuve [141,142] grâce à leur influence sur l'angle dynamique de

repos, qui semble avoir également une forte influence sur la ségrégation axiale [95,143]. Cet étalonnage se fait par le biais de tests simples à des vitesses de rotation différentes avec les sphères en acier ou les pellets de bois seuls à l'intérieur. De nombreuses études de simulation DEM traitent des particules sphériques à l'intérieur d'un tambour rotatif [144,145], du fait de la simplicité de la représentation sphérique. Toutefois, lorsqu'il s'agit de particules non sphériques, le système devient plus complexe pour des raisons aussi bien physiques que numériques.

Pour l'étalonnage en acier, un seul test à 40 tr/min et 1,5 kg d'acier a été effectué. L'acier a tendance à s'organiser en couches (figure 2.19) : une couche en contact avec la paroi et le reste au sein du lit.

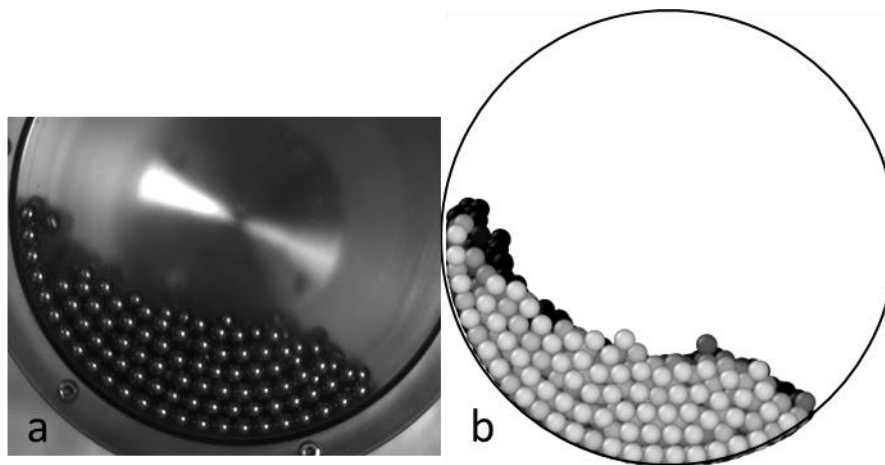


Figure 2.19: Comparaison entre la simulation DEM et l'expérience pour le tambour tournant rempli de particules en acier. a) essai expérimental, b) simulation DEM, $\mu_{sw} = 0.22$, 2106 particules en acier, 40 t/mn.

Pour un lit composé de sphères en acier, il est difficile de définir un angle dynamique au repos, car le lit n'a pas de forme régulière. Par conséquent, afin de pouvoir comparer avec l'expérience, le centre des particules appartenant à la « couche active » est suivi pour calculer une pente moyenne du lit grâce à une régression linéaire effectuée en utilisant la technique des moindres carrés ; Cette procédure s'effectue aussi bien pour des expériences que pour les simulations. L'angle qui en résulte pour les sphères en acier est de 26° (figure 2.19, droite) ce qui conduit à une valeur de 0.22 pour μ_{sw} dans la simulation DEM.

Pour le coefficient de frottement granulé de bois-paroi (μ_{pw}), un essai a été effectué à 20 tr/min, avec 0,35 kg de granulé de bois (figure 2.20).

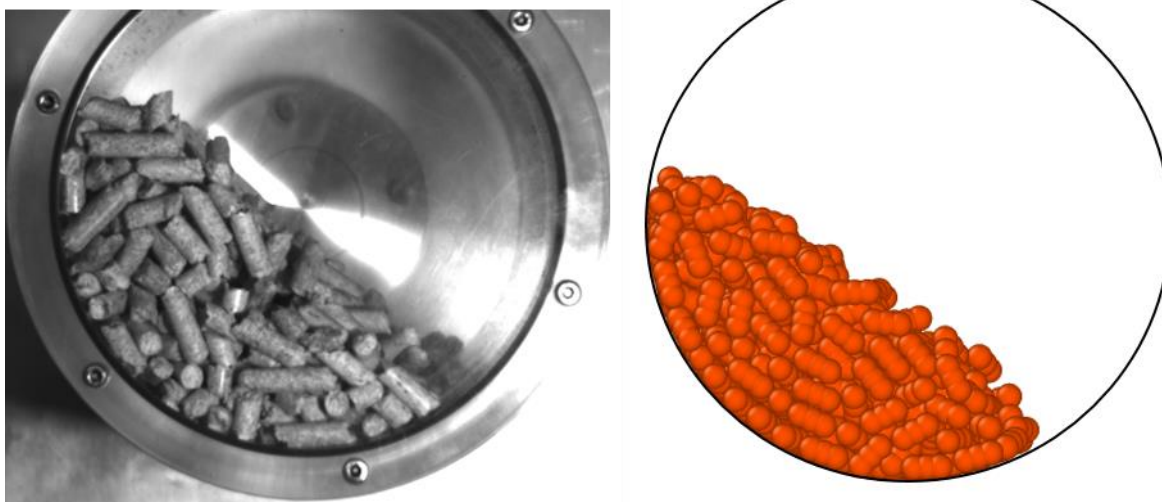


Figure 2.20: Granulés dans le tambour rotatif. 0,35 kg de granulés, 20 tr/min (côté gauche, côté droit résultats d'expérience DEM en utilisant l'approximation multisphérique et un coefficient de frottement de 0.3)

Comme l'ont observé Höhner et coll. [120], une forme non sphérique peut augmenter la résistance au cisaillement du lit de particule, entraînant des cascades non homogènes et un angle variable de repos. La figure 2.21 montre l'angle de repos dynamique de l'approximation multisphérique obtenu par simulation en fonction du coefficient de frottement.

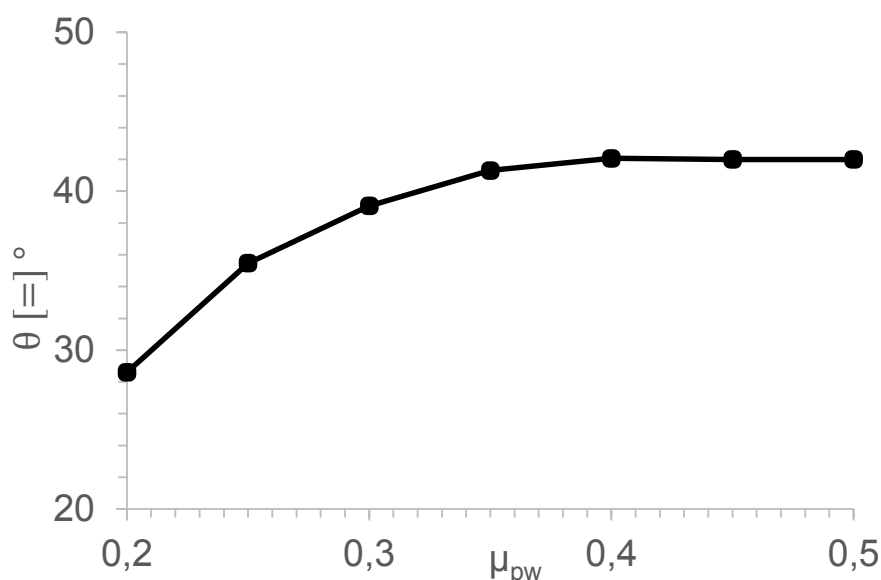


Figure 2.21: Angle de repos moyen pour les différents coefficients de frottement. Approximation multisphérique

La même procédure appliquée pour l'évaluation de l'angle dynamique au repos de l'acier est appliquée pour les granulés de bois, ce qui donne une valeur mesurée de 40°. Pour un faible coefficient de frottement (μ_{pw} de 0.2), le lit de granulés de bois se trouve dans le régime de

« surging » [141], et la valeur de μ_{pw} n'est pas assez grande pour atteindre l'angle de cascade, c'est pourquoi le lit solide glisse simplement sur les parois de verre après avoir atteint l'angle maximal autorisé par μ_{pw} .

L'angle de repos varie considérablement entre « surging » et « rolling », toutefois, lorsque le système est dans le régime de « rolling », l'angle de repos croît lentement avec le frottement au niveau de la paroi, ce comportement particulier est dû à la limite imposée par la résistance au cisaillement de l'agrégat formé par les granulés. Une valeur de $\mu_{pw} = 0.3$ a été choisie, parce que ce coefficient donne un bon accord avec l'angle expérimental de repos dynamique (39°). Le même μ_{pw} a été utilisé pour la représentation par sphère équivalente SE.

2.3.1.2 Ségrégation dans le cas particules de bois et acier – influence de la représentation des particules de bois

Les paramètres déterminés dans l'expérience précédente sont présentés dans le tableau 2.3.

	Acier	Parois	Bois, Multisphere	Bois, Sphere 1	Bois, Sphere 2
μ_s (coefficient de frottement avec l'acier)	0.15	0.22	0.2	0.2	0.2
μ_w (coefficient de frottement avec la parois)	0.22	X	0.3	0.3	0.3
μ_p (coefficient de frottement avec le bois)	0.2	0.3	0.45	0.375	0.26
μ_r (coefficient de frottement de roulement)	0.0025	X	0	0.18	0.3

Tableau 2.3: Matrice de coefficients de frottement pour les espèces simulées

Par souci de simplicité, ici, les différentes conditions sont désignées par les codes d'essais A à F, comme défini dans le tableau 2.4.

Conditions				
ω (TR/MIN)	Granulés (kg)	Acier (kg)	Volume de bois / Volume d'acier	Essai
30	0.2	1	1.07	A
14	0.1	1.5	0.36	B
16	0.1	1.5	0.36	C
16	0.1	1	0.53	D
26	0.1	1	0.53	E
29	0.1	1.5	0.36	F

Tableau 2.4: Conditions d'utilisation pour les expériences mixtes

Le taux de remplissage reste inférieur à 50 %. Chaque condition est simulée avec la description multisphérique et avec les deux approximations SE avec des couples (μ_{pp} , μ_r) différents.

Le comportement global a été capturé aussi bien avec l'approximation de la sphère équivalente qu'avec l'approximation multisphérique. Dans les deux cas, on obtient un comportement de ségrégation axiale qui apparaît rapidement (contrairement à la ségrégation axiale dans des tambours tournants plus longs) : elle est formée après 5-10 tours. Toutes les simulations partent du même état initial, c'est-à-dire avec l'acier sur le dessus et le bois en-dessous (figure 2.22, t_0) ; on part donc d'un mélange axial parfait et d'une ségrégation radiale totale. Afin de voir l'influence de l'état initial sur le temps de mélange, une simulation a été faite avec un état de mélange initial aléatoire : aucune influence n'a été trouvée sur le temps nécessaire pour établir la ségrégation axiale finale.

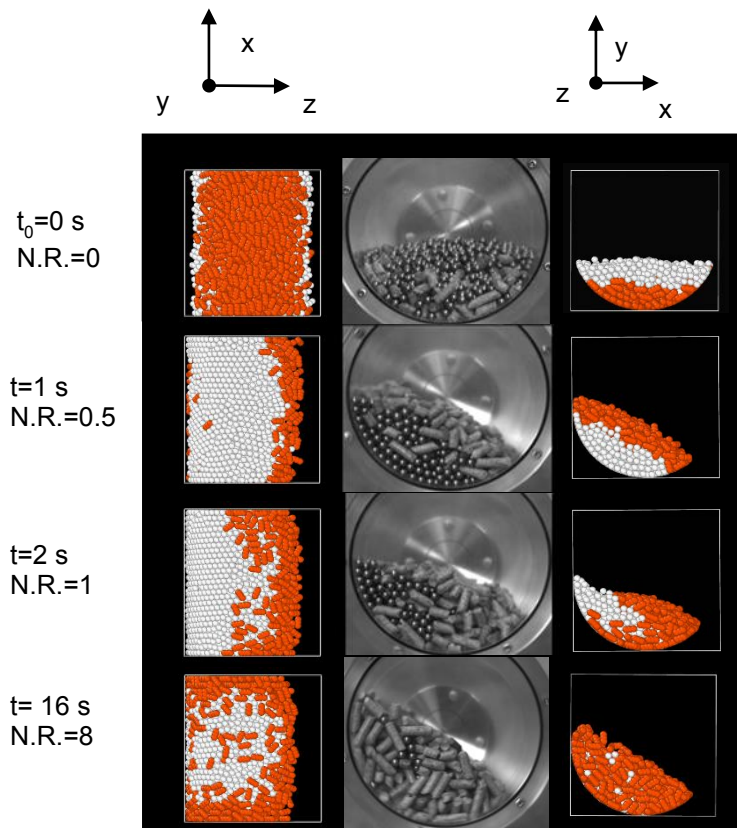


Figure 2.22: Comparaison entre l'expérience (au centre) et de la simulation avec l'approche multisphère (bois rouges, acier boules en blanc), vue (à gauche) de dessous et vue radiale (à droite), N.R. est l'acronyme de nombre de rotations. Essai A.

À $t = 1.0$ s (figure 2.22), les particules de bois passent sur le dessus et l'acier au fond ; les particules de bois sont lentement entraînées par friction. À $t = 2.0$ s (figure 2.22, N.R. = 1 s), la ségrégation se développe, les particules de bois étant « attirées » par les parois latérales. À $t = 16$ s la ségrégation est bien établie : les granulés de bois tombent avec un angle de 60° à l'intérieur de la cuve tournante (figure 2.23).

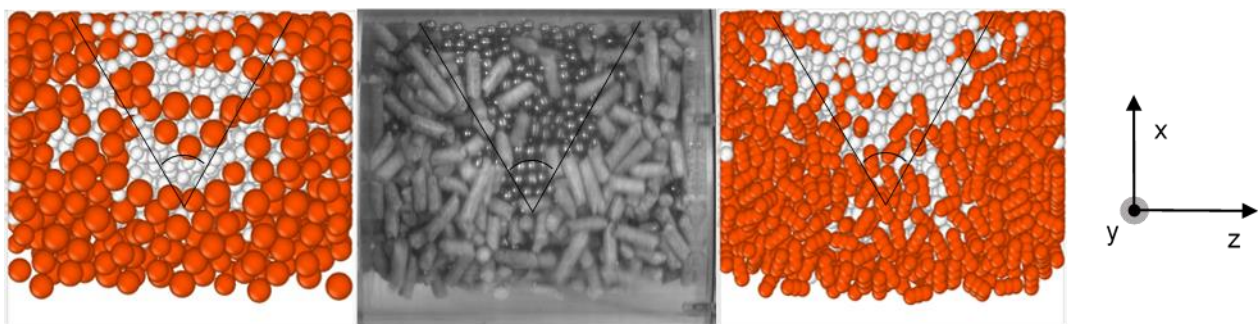


Figure 2.23: Vue de dessus axial pour approximation SE (à gauche), expérience (Centre), approximation multisphérique (à droite), essai A. Etat final ($t = 16$ s, N.R. = 8)

La représentation multisphérique est capable de suivre toute l'histoire depuis ses débuts, avec une bonne précision, reproduisant assez bien aussi l'angle axial (figure 2.23). Normalement, la ségrégation axiale est un phénomène lent, néanmoins, après les premières rotations, les granulés de bois commencent à s'accumuler sur les parois latérales. Cet effet est probablement dû à la faible longueur du tambour, ce qui donne des temps courts de la ségrégation, comme cela a déjà été décrit par Hayter et al. [146]. Après environ cinq tours, le système atteint un état stationnaire.

Pour comparer simulation et expérience, une procédure simple a été utilisée pour interpréter quantitativement les vues prises par la caméra rapide : les particules en acier ont été dénombrées sur le dos du tambour (figure 2.24, correspondant à la vue 2a sur la figure 2.15), afin d'obtenir la distribution des particules en acier.

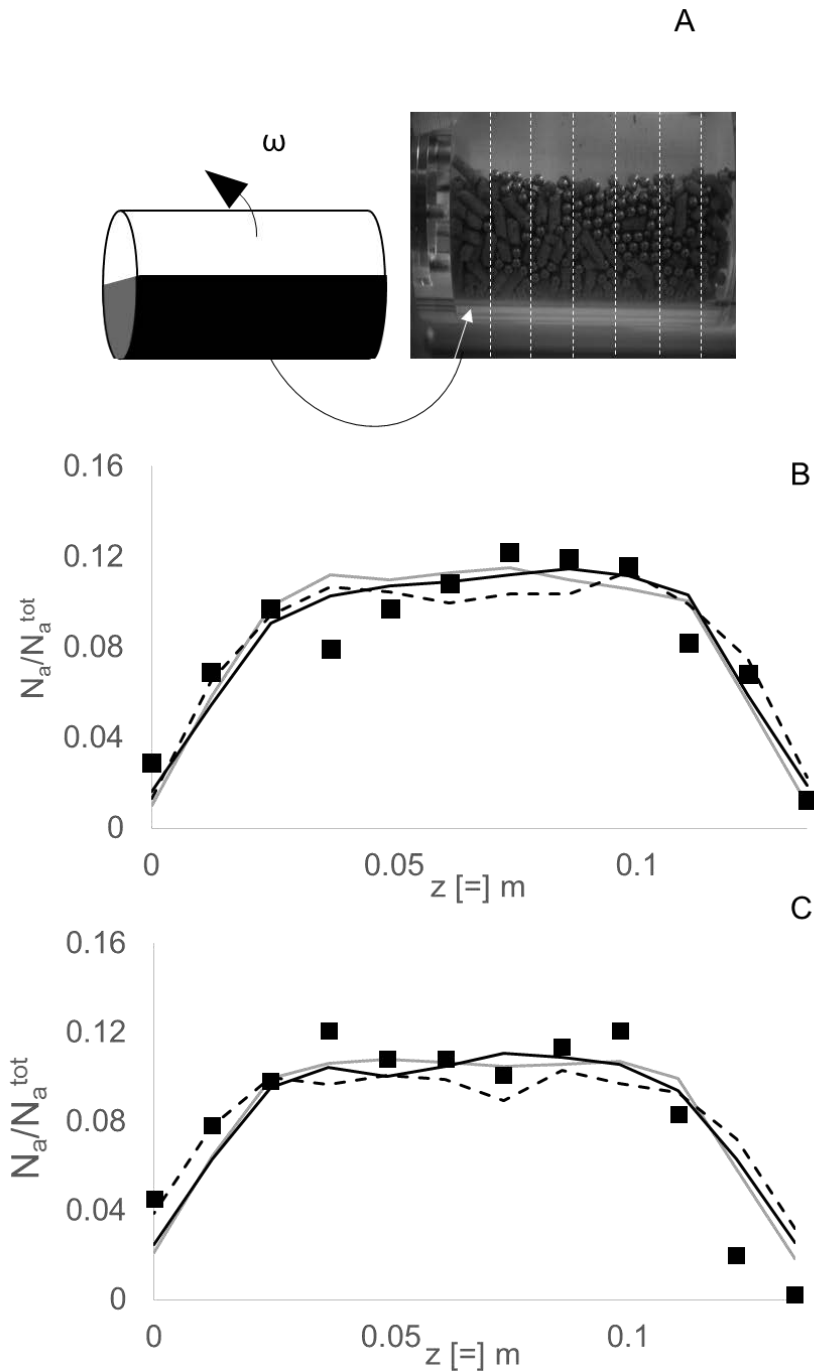


Figure 2.24: Une prise de vue utilisée pour la mesure avec son maillage (A) et la concentration en acier comme fonction de la position axiale : en carré les résultats expérimentaux, la ligne grise est le SE 1, la ligne pointillée est l'approximation multisphérique et la ligne noire est le SE 2. Essai B (B), Essai D (C).

Le nombre de particules en acier pour la partie axiale est divisé par le nombre total de particules en acier sur la prise de vue. Ce ratio est la concentration des particules en acier sur la paroi.

Les particules sont comptées dans un régime établi et en moyenne pendant 20 s avec un intervalle de 0,7 s entre chaque mesure. L'ensemble du système a été divisé en 12 bandes, en calculant les particules appartenant à chaque bande (figure 2.24 A)

Comme le montre la figure 2.24, il y a un bon accord entre les expériences et les simulations, les particules en acier sont concentrées au centre, avec une concentration zéro près des parois, cependant il n'y a pas beaucoup d'écarts entre les différentes conditions et modèles. Cela signifie que ce résultat seul ne permet pas de discriminer les modèles, les différences entre les différentes représentations sont cachées à l'intérieur du lit granulaire. Évaluer directement la ségrégation axiale expérimentalement est complexe, car il est difficile d'avoir un accès visuel à l'intérieur du lit. Bien que cela soit critiquable, il est plus pratique d'avoir un modèle de base se rapprochant le plus de la réalité physique (dans ce cas, la représentation multisphérique) et de comparer ce modèle à des modèles plus simples (comme la sphère équivalente) pour vérifier leur validité.

2.3.1.3 ES et multisphérique

Pour les calculs de ségrégation axiale, nous utilisons le degré de ségrégation défini par Taberlet et al. [98]:

$$\Delta^{\text{seg}}(t) = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{|C_s(z) - \bar{C}_s|}{\bar{C}_s} dz \cong \frac{1}{L} \sum \frac{|C_s(z) - \bar{C}_s|}{\bar{C}_s} \Delta z$$

Équation 2.39

où C_s est le nombre de particules de bois par unité de longueur, \bar{C}_s est le nombre moyen de particules de bois par unité de longueur, L est la longueur du tambour et Δz est la longueur d'un élément de maillage axiale. Ce degré de ségrégation est 0 pour un état axial bien mélangé (notons que le degré de ségrégation sera toujours 0 pour un système qui n'est ségrégé que radialement) et 1 pour les systèmes séparés dans des bandes pures qui occupent le même volume. Afin d'évaluer $\Delta^{\text{seg}}(t)$, un maillage axial est construit. Le maillage axial est optimisé grâce à une procédure de convergence, car un Δz trop petit peut créer une ségrégation artificielle en raison d'éléments vides de maillage ; et un Δz trop grand peut créer un mélange artificiel ; entre ces cas, il y a un domaine, où l'indice de ségrégation ne dépend plus du maillage.

Dans la figure 2.25, le degré de ségrégation en fonction du nombre de rotations est représenté pour l'essai A. Le degré de ségrégation est calculé toutes les 0.25 s via un script Matlab.

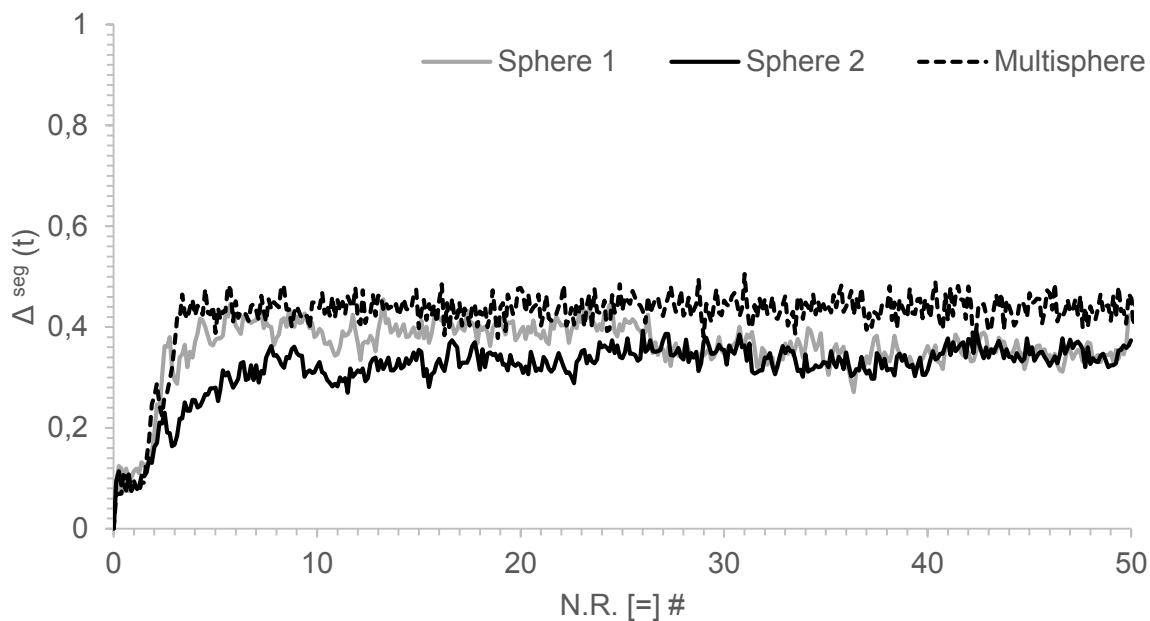


Figure 2.25: Degré de ségrégation pour l'approximation multisphérique et les approximations SE en fonction de N.R. (nombre de rotations), essai A.

N.R. (nombre de rotations) égal à zéro correspond à l'état initial avec des billes en acier au fond et le bois sur le dessus. Le système est inversé après la première demi-rotation (figure 2.22), avec du bois au fond et les billes en acier sur le dessus, le bois tombe lentement par avalanche sur la "couche active", le système commence à se mélanger radialement, mais aucune ségrégation axiale importante n'est encore produite. Après cette phase, la ségrégation axiale se développe rapidement dans le tambour. Le comportement transitoire de la description multisphérique est très bien reproduit pour la description SE 1. L'approximation SE 2 montre une phase transitoire plus longue et un plus petit degré de ségrégation. La SE 1 reproduit assez bien la phase transitoire, mais après environ 30 rotations les degrés de ségrégation pour les deux approximations sphériques deviennent identiques et légèrement plus petits que pour l'approximation multisphérique.

La figure 2.26 indique le degré de ségrégation pour la description multisphérique et pour les deux approximations SE pour l'essai B.

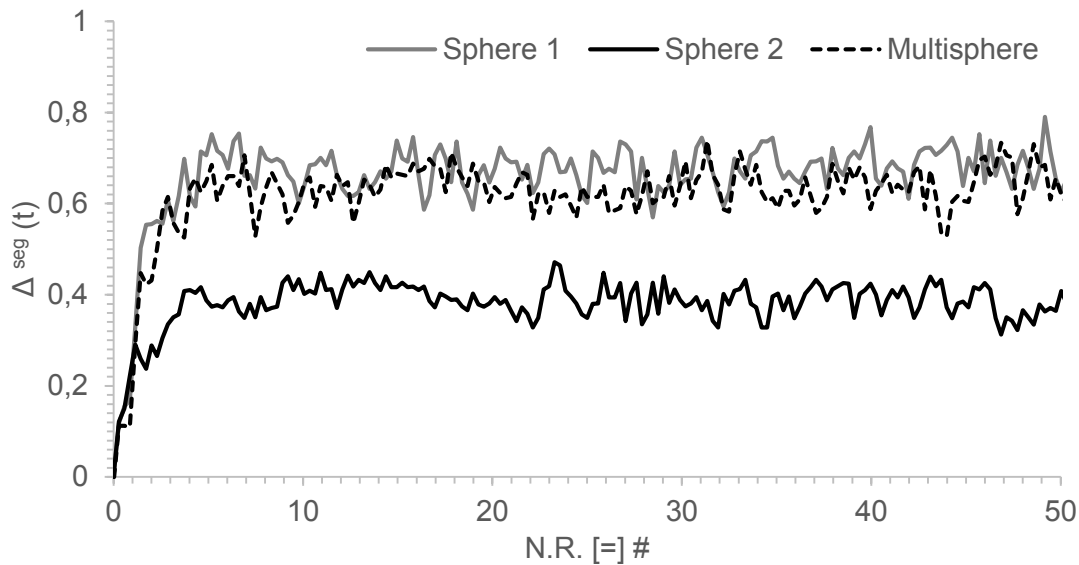


Figure 2.26: Degré de ségrégation pour l'approximation multisphérique et les approximations SE en fonction de N.R. (nombre de rotations), essai B.

Dans ce cas, la SE 1 et la description multisphérique convergent vers le même résultat, alors que ce n'est pas le cas pour la configuration SE 2. Dans la phase transitoire, le degré de ségrégation des différentes approximations augmente de façon monotone jusqu'à ce qu'une valeur stable soit atteinte.

La figure 2.27 montre la comparaison des degrés de ségrégation stabilisés pour les différentes simulations et les différentes approximations de forme.

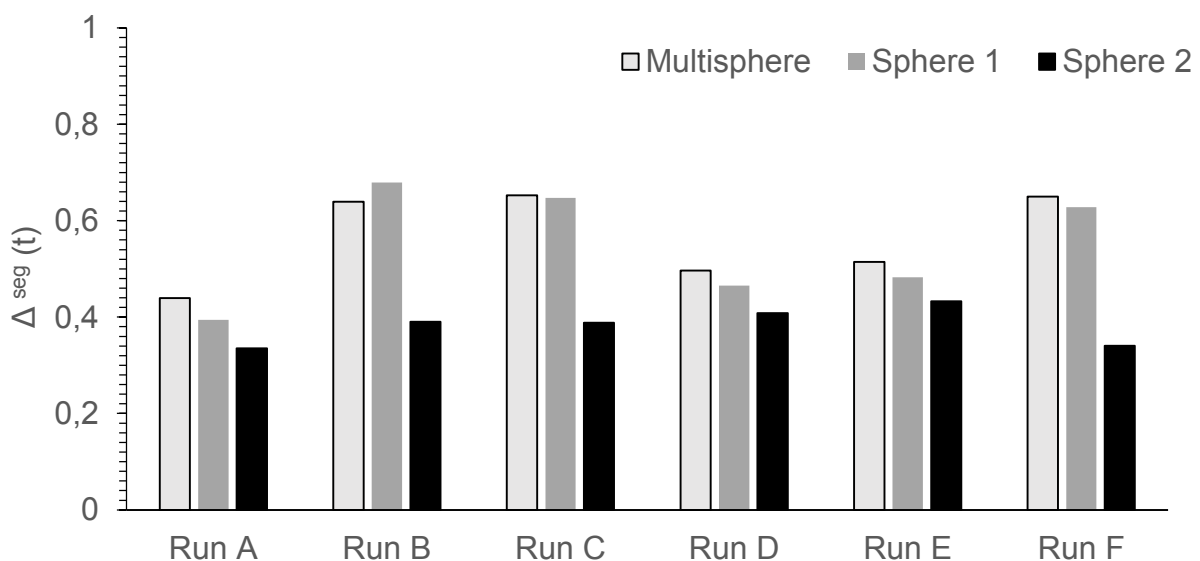


Figure 2.27: Comparaison entre différentes approximations dans les différentes conditions

La description SE 1 reproduit assez bien les résultats de ségrégation axiale trouvées avec la description multisphérique ; cependant, ce n'est pas le cas pour la description SE 2. Il est également intéressant de remarquer que la SE 2 produit de meilleurs résultats lorsque le rapport de volume de bois à volume d'acier est plus faible, alors qu'il diverge si on augmente ce rapport. Il est également intéressant de noter l'influence des paramètres opérationnels utilisés dans les différentes simulations : la vitesse de rotation ne semble pas avoir un grand effet sur la ségrégation dans le domaine étudié.

L'orientation générale a été également étudiée en utilisant le paramètre d'ordre S [147]:

$$S = \frac{1}{N_b^{\text{tot}}} \sum_{k=1}^{N_b^{\text{tot}}} \frac{3}{2} \left[(\sin \theta_k)^2 - \frac{1}{3} \right] \in [-0.5, 1]$$

Équation 2.40

Où $\sin \theta_k$ est le sinus de l'angle formé par la direction principale d'une pastille de bois avec le sens axial dans un système de référence cylindrique et N_b^{tot} est le nombre total de granulés de bois dans le système. Ce paramètre S est égal à 1 si les granulés de bois sont perpendiculaires à la direction axiale, -0.5 lorsque les granulés de bois sont alignés dans le sens axial et 0 lorsque les particules sont dans un état désordonné. Cependant, même des valeurs de 0,1 sont significatives, car S est de l'ordre de 10^{-3} lorsqu'elle est évaluée pour des granulés de bois avec une orientation aléatoire. Ce paramètre indique une valeur générale de -0,1 pour toutes les simulations multisphériques impliquant que les granulés de bois en général s'organisent faiblement dans une direction parallèle à la direction axiale. Cette valeur est probablement fortement influencée par l'angle de chute axial qui est constant pour toutes les simulations et d'environ 60° (figure 2.23).

2.3.1.4 Comparaison des différents mécanismes de ségrégation

Il est clair que la taille et la forme sont le moteur de la ségrégation axiale, mais il n'est pas toujours clair quel est le mécanisme dominant. Par conséquent, afin d'évaluer séparément l'effet de la forme sur la ségrégation, d'autres simulations numériques pour des particules de densité égale ont été effectuées. Pour les coefficients de frottement, les tailles et les paramètres de contact, on peut consulter le tableau 2.2, le tableau 2.3 et le tableau 2.4. Toutefois, la masse volumique du bois est prise égale à 8000 kg/m^3 . Une autre condition est également ajoutée pour vérifier l'effet de la valeur absolue de la masse volumique (essai B''), dans ce cas la densité des deux espèces est maintenue

à une valeur de 1150 kg/m³. L'ensemble des simulations effectuées est présenté dans le tableau 2.5.

Conditions					
ω (TR/MN)	Bois (kg)	Acier (kg)	Volume de bois / Volume d'acier	Essai	Masse volumique des particules (kg/m ³)
30	1.4	1	1.4	A'	8000
14	0.7	1.5	0.46	B'	8000
14	0.1	0.22	0.46	B''	1150
16	0.7	1.5	0.46	C'	8000
16	0.7	1	0.7	D'	8000
26	0.7	1	0.7	E'	8000
29	0.7	1.5	0.46	F'	8000

Tableau 2.5: Simulations à densité égale

La masse de bois injecté est ajusté afin d'assurer le même nombre de particules injecté comme dans les simulations faites au paragraphe 2.3.1.2

La figure 2.28 montre une comparaison entre l'essai A et l'essai A'. La densité a un impact majeur sur la séparation : il est clair que sans différence forte des densités, la ségrégation se développe lentement, avec des valeurs de $\Delta^{\text{seg}}(t)$ qui continuent à augmenter après 80 tours, Cependant, il y a peu de différence pour les valeurs atteintes dans la phase stationnaire.

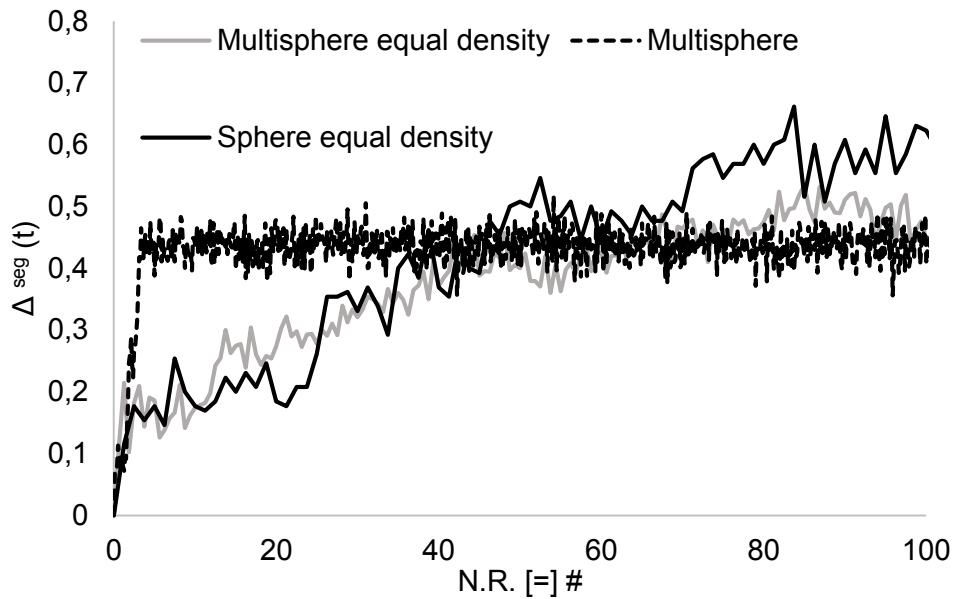


Figure 2.28: Degré de ségrégation en fonction de N.R. Essai A et A'

Un autre résultat intéressant concerne la comparaison entre la sphère équivalente et le modèle multisphérique à densités égales. Le transitoire est alors presque parfaitement reproduit par l'approximation SE, même s'il y a une différence dans la valeur stationnaire.

Les résultats pour les autres essais ne sont pas décrits, car le comportement qualitatif est la même. En ce qui concerne les simulations de l'essai B'', les résultats sont présentés dans la figure 2.29.

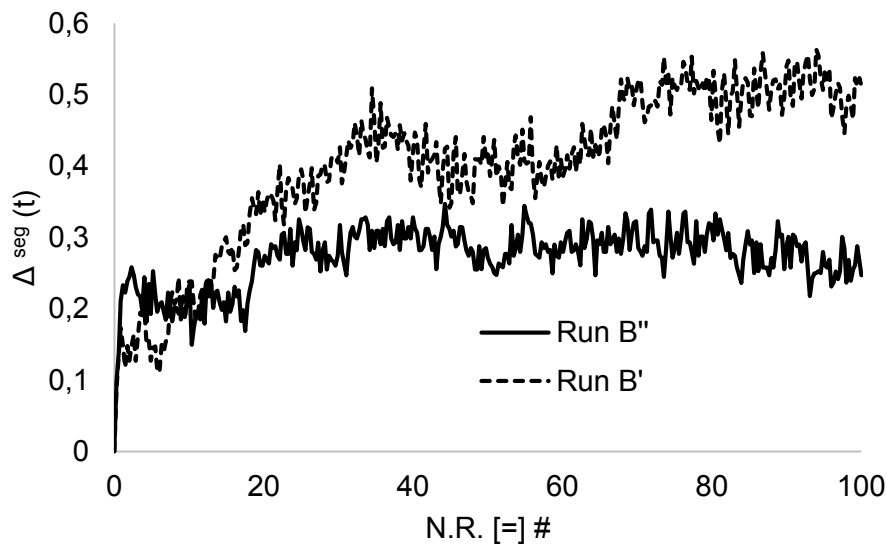


Figure 2.29: Degré de ségrégation pour l'approximation multisphérique en fonction de N.R. (nombre de rotations), essai B' et B''

Même la valeur absolue de la masse volumique a un impact sur la ségrégation axiale, la valeur de l'état stationnaire de $\Delta^{\text{seg}}(t)$ est presque doublée dans le cas de l'essai B' (8000 kg/m³) par rapport à l'essai B'' (1100 kg/m³). L'état stationnaire est atteint à environ 100 N.R. pour B', alors que l'état stationnaire pour B'' est atteint bien plus tôt.

2.3.2 Conclusions

Ce chapitre peut être divisé en trois parties : le calibrage des coefficients de frottement pour le modèle DEM ; sa validation dans le cas d'un tambour tournant avec un lit solide composé d'un mélange binaire de granulés de bois et des sphères en acier simulées par l'approche multisphérique et la comparaison entre les résultats obtenus avec l'approche multisphérique et deux approximations « Sphère Equivalente » différentes. Les tests avec le mélange binaire montrent un comportement de ségrégation axial rapide piloté par la densité, les granulés de bois se concentrant sur les parois latérales et les sphères en acier dans la partie centrale du cylindre. Dans les simulations DEM, ces tests ont été exécutés à l'aide de trois configurations différentes, à savoir l'approche multisphérique et deux approximations de la sphère équivalente avec des couples (μ_{pp} , μ_r) différents : un couple est évalué à l'aide de la méthode proposée par Wensrich et al. [138] (Sphère 1), tandis que pour l'autre un couple différent a été utilisé qui permet cependant de représenter correctement l'angle statique de repos d'une pile de granulés (Sphère 2). L'approche multisphérique reproduit assez bien le comportement expérimental et il est utilisé pour tester la qualité des deux approximations SE. Les résultats de la SE 1 concordent avec les résultats de l'approche multisphérique, tandis que SE 2 sous-estime la ségrégation, ce qui montre l'importance du couple (μ_{pp} , μ_r). Il est ainsi démontré que l'angle statique de repos ne peut être utilisé seul pour calibrer l'approximation sphérique : l'approche de Wensrich basée sur l'excentricité des particules est préconisée. Certains calculs exploratoires ont été réalisés afin d'étudier séparément l'influence de la densité et la forme des particules. Il apparaît que la valeur absolue de la masse volumique a une forte incidence sur le comportement de ségrégation.

3. Simulation du réacteur de pyrolyse de SEA Marconi

Dans le chapitre 1, nous avons donné une brève description de la structure du réacteur de pyrolyse SEA Marconi, en analysant les principaux points critiques liés au modèle. Le problème principal est lié à la présence de deux espèces solides à l'intérieur du lit solide, qui donne lieu à des phénomènes de ségrégation, dus à leurs caractéristiques dynamiques différentes. Cela rend critiquable l'application des modèles classiques en génie chimique pour ce type de réacteur, et il est nécessaire de mettre en œuvre un nouveau modèle, en l'occurrence le modèle DEM. Ce type de modèle est capable de prendre en compte toutes les caractéristiques dynamiques des particules simulées, et d'obtenir une dynamique représentative du système analysé. Dans le chapitre 2, nous avons montré le fonctionnement du modèle DEM et nous avons aussi collecté ou déterminé les paramètres nécessaires à la simulation dynamique du système billes d'acier - granulés de bois. Nous avons comparé deux types d'approximations de forme : la représentation Sphère Equivalente et la représentation multisphérique. Il est connu que les fours rotatifs ont des temps de séjour longs et des dynamiques lentes : il s'en suit que, pour obtenir des simulations avec des temps de calcul raisonnables, nous devons tout d'abord tenter de réduire le nombre de calculs. Pour cette raison, la représentation SE sera utilisée. Le premier point du chapitre 3 permettra de vérifier la validité du modèle dynamique grâce à une expérience menée sur le réacteur de pyrolyse SEA Marconi. Comme expérience de validation, nous avons choisi une expérience de DTS. Après cela, nous explorerons l'impact de certaines variables du procédé (géométrie de réacteur et inclinaison) sur les fonctionnalités du réacteur. Enfin il sera construit un modèle thermique basé sur les expériences de DTS effectuées sur le réacteur principal, en analysant l'influence des paramètres fondamentaux du modèle.

3.1 Système et modèle dynamique

Le réacteur est un réacteur cylindrique avec une extrémité conique. Les parois extérieures du réacteur sont présentées dans la figure 3.1, les valeurs numériques dans le tableau 3.1.

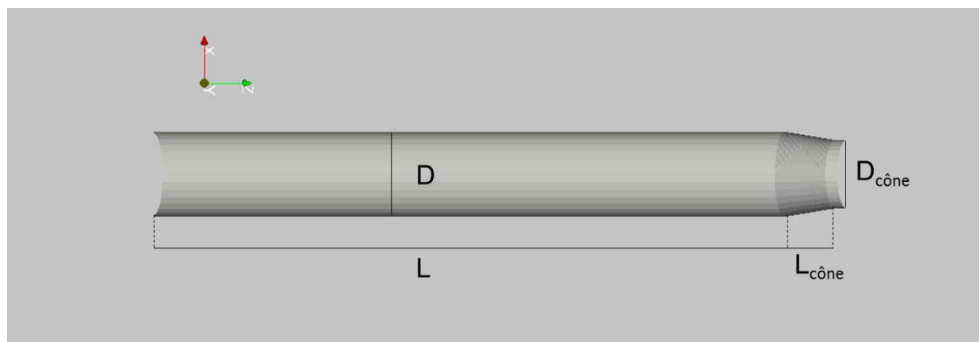


Figure 3.1: Géométrie externe du réacteur de pyrolyse

L	L _{cône}	D	D _{cône}
2.4 m	0.3 m	0.341 m	0.27 m

Tableau 3.1: Paramètres constructifs de la géométrie externe du réacteur

où L et D sont respectivement la longueur et le diamètre de la section cylindrique et L_{cône} et D_{cône} sont respectivement la longueur de la section conique et le diamètre final du cône. En fonctionnement transitoire (démarrage d'installation), il est possible de chauffer les parois du réacteur et le solide contenu dans le réacteur à l'aide de résistances placées dans la calandre qui entoure le réacteur. Il est aussi possible d'incliner le réacteur d'un angle α par rapport au plan horizontal, jusqu'à un maximum de 3°, ou d'insérer des chicanes. Les chicanes utilisées sont de deux types (figure 3.2) : les premières chicanes (chicanes a et a' en figure 3.2, par la suite, nous nous référerons à ces chicanes en les appelant chicanes a) sont des cylindres disposés à 120° les unes des autres. Ces chicanes ne sont pas placées sur toute la longueur du réacteur : elles vont de 0,3 m de l'entrée au début de la section conique de la paroi interne du réacteur. Chaque cylindre a une longueur de 2,1 m et un rayon de 15 mm ; les chicanes de figure 3.2 b et b' sont plus compliquées : il s'agit de « cuillères » qui entrent périodiquement dans le lit plein, remontent du matériau et le reversent. Dans cette configuration, il y a 7 cuillères, chaque chicane est située à un angle de 120° de la chicane suivante en direction axiale. Comme supports de ces chicanes, les cylindres de la configuration a, indiqués dans la figure 3.2 a et figure 3.2 a', sont utilisés. Chaque chicane est longue de 25 cm (dans la direction axiale) avec une distance de 5 cm par rapport à la suivante.

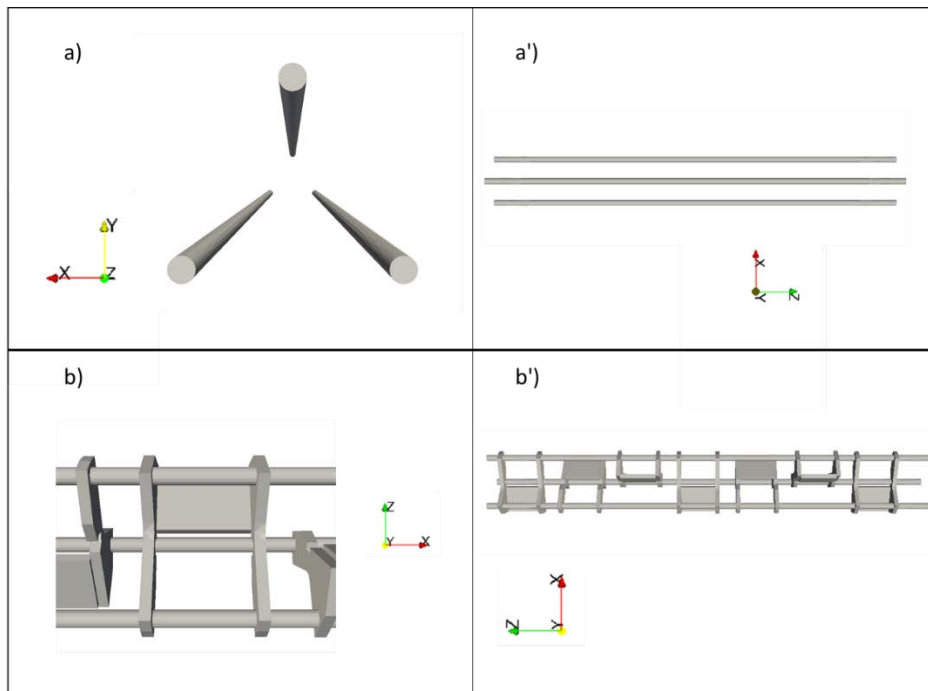


Figure 3.2: Les chicanes utilisées dans le réacteur SEA Marconi, a) et a') cylindres, b) et b') chicane à "cuillère"

Ces deux types de chicanes ont des effets très différents sur le système : Dans le cas de cylindres l'effet est plus ou moins similaire à l'effet de chicanes classiques souvent utilisées ; cela a été présenté dans un article que nous avons publié dans la revue « Powder Technology », article qui figure dans cette thèse (Annexe M) ; dans le cas de chicanes à « cuillère » le passage de la cuillère a pour effet de laisser des espaces vides dans le lit solide, puisqu'une grande partie du lit est capturée par la chicane, Ceci est supposé augmenter la force de l'impact et permettre la destruction de la couche superficielle de char formé au cours de la pyrolyse. Vu la particularité de ces chicanes à cuillère et leurs effets très différents sur le lit, il n'y a aucun modèle qualitatif capable de représenter le comportement du lit granulaire. Il s'agit d'une raison supplémentaire de l'utilisation de modèles plus sophistiqués tels que les modèles DEM, qui sont en mesure d'intégrer des géométries complexes en leur sein, comme nous le verrons plus loin. Les paramètres DEM ont déjà été présentés dans le tableau 2.3, pour le modèle multisphérique et pour le modèle SE.

3.2 Distribution des temps de séjour (DTS) des solides

La DTS est un outil qui permet de caractériser l'hydrodynamique d'un réacteur et d'évaluer l'écart par rapport aux écoulements idéaux obtenus dans un réacteur piston et dans un réacteur parfaitement agité (RPA). Dans le cas d'un écoulement granulaire en four tournant, l'objectif est d'estimer le temps passé par chaque particule dans le réacteur. Pour ce faire, un stimulus est imposé en entrée du cylindre et la réponse en sortie est analysée. Le stimulus consiste en l'injection d'un

traceur sous forme d'une impulsion ou d'un échelon [148]. Ce traceur doit être facilement détectable et marquer le flux sans le perturber. Il doit donc avoir les mêmes propriétés que le solide tracé et être inerte. En four tournant, l'impulsion est couramment utilisée car elle demande de faibles quantités de traceur.

3.2.1 Essai expérimental

Les expériences de traçage sont réalisées à température ambiante car cela facilite la sélection du traceur qui ne doit pas résister aux conditions de la pyrolyse, qui peuvent modifier la dynamique du système. De plus, la conservation d'une atmosphère inerte n'est pas compatible avec un échantillonnage fréquent. Pour les expériences de DTS, l'extrémité du four est donc ouverte, ce qui permet un contrôle visuel du comportement du lit.

Le prélèvement est effectué en aspirant le bois en sortie à travers un aspirateur industriel, pour éviter le prélèvement de l'acier, qui circule en continu dans le système. L'aspiration est conduite pendant 30 s ; ensuite, le traceur est récupéré dans la cuve de l'aspirateur et pesé.

Le type de traceur doit ensuite être sélectionné. Dans ce cas, l'utilisation de granulés de bois colorés n'est pas envisageable, parce que l'acier à l'intérieur du système peut broyer ce type de traceur et influencer grandement les résultats de l'essai. Pour éviter cet effet, les traceurs décrits dans la figure 3.3 sont utilisés.



Figure 3.3: Les traceurs utilisés pour l'essai de DTS

Ces traceurs sont des tourillons, qui ont des caractéristiques dynamiques (forme, poids et dimensions) similaires à celles des granulés de bois dans le réacteur, mais qui ont plus de résistance

aux chocs. Pour permettre leur visualisation à l'intérieur du réacteur, ces traceurs sont colorés grâce à une peinture spray en faible quantité. La peinture a été séchée pendant un jour.

Étant donné les faibles quantités de colorants utilisées, on suppose que ceux-ci ne modifient pas la composition ni l'état de surface des granulés de bois.

Le principe de la DTS faite sur le réacteur SEA Marconi est illustré en figure 3.4. La configuration du réacteur utilisée est la configuration avec chicanes a, sans inclinaison du réacteur par rapport à l'horizontale. Une fois le régime permanent atteint, 475 g de traceur sont injectés au début de l'essai, $t = 0$, pour reproduire une injection en impulsion. Une fois que le traceur est injecté, le fonctionnement est normal avec injection continue de bois et de billes d'acier. Il a été vérifié visuellement que le comportement du lit est du type « rolling », ce qui est indispensable pour l'obtention d'un mélange efficace. En sortie de cylindre, les granulés de bois sont échantillonnés toutes les 30 s pendant la durée de l'essai de 20 min. Un tri manuel est ensuite réalisé pour séparer les traceurs du bois brut. La pesée des traceurs et des particules non colorées permet alors le calcul de la concentration en traceur de chaque échantillon. Pour l'ensemble des expériences, la masse de traceur récupérée atteint 99.7 ± 0.4 % de la masse initialement injectée.

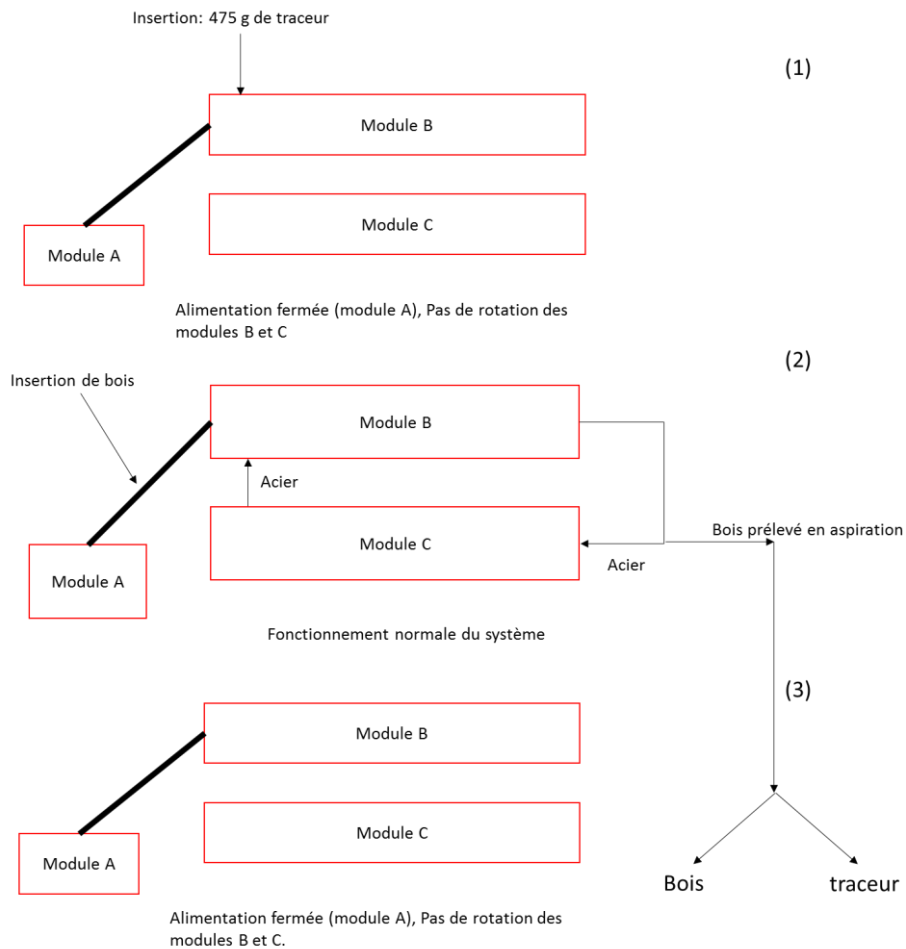


Figure 3.4: Schéma de DTS

ω_b	ω_c	F	H	N_a^{tot}
Vitesse de rotation, module b	Vitesse de rotation, module c	Débit de bois en alimentation	Humidité	Billes d'acier
5 tr/m	5 tr/m	50 kg/hr	0.1	4000

Tableau 3.2: Conditions opératives pour l'essai de DTS

Les conditions opératoires de l'essai sont illustrées dans le tableau 3.2, où ω_b est la vitesse de rotation du module B, ω_c est la vitesse de rotation du module C et N_a^{tot} est le nombre de billes d'acier dans le système. Il faut noter un facteur important : les billes d'acier circulent entre le module B et le module C, donc le débit d'acier est une variable qui dépend du temps de passage dans le module B et de la quantité totale de billes d'acier dans le système (entre module B et module C, figure 3.5).

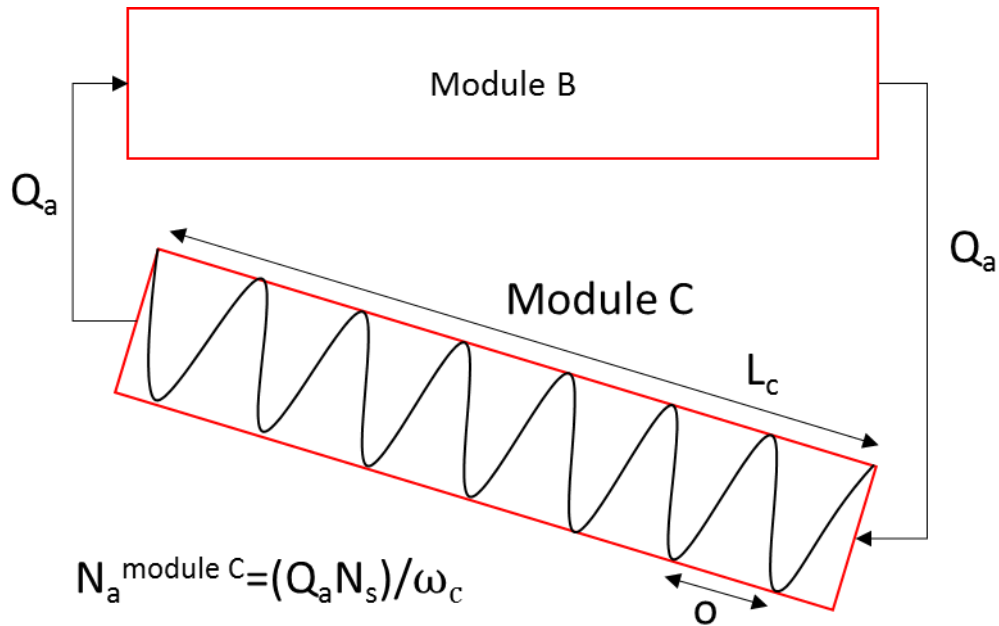


Figure 3.5: Schéma général des opérations pour le calcul du temps de séjour des billes d'acier (pour la définition des modules, voir le §1.3)

Une caméra placée à la sortie du réacteur permet aussi la quantification du débit d'acier. La mesure du débit d'acier permettra aussi de vérifier que le temps de passage des billes d'acier est bien calculé par le modèle de simulation. Pour calculer le temps de passage des billes d'acier dans le module B, une fois que le débit a été quantifié, il faut tout d'abord calculer la quantité de billes d'acier dans le module C. Pour ce faire, il suffit de multiplier le nombre de billes sur un pas de la vis par le nombre de pales (ceci est valable pour une vis sans fin sans recirculation). Le nombre de billes sur un pas de la vis correspond au produit $Q_a T$, où T est la période de la vis égale à $1/\omega_c$. Le nombre de pales N_s est égal à la partie entière du rapport o/L_c . Le nombre de billes dans le module C est alors :

$$N_a^{\text{Module C}} = Q_a N_s T$$

Équation 3.1

Si on néglige le nombre de billes dans les jonctions, on détermine le nombre de billes dans le module B par différence : $N_a^{\text{Module B}} = N_a^{\text{tot}} - N_a^{\text{Module C}}$. Il est alors possible de calculer le temps de passage dans le module B :

$$\tau_a^{\text{Module C}} = \frac{N_a^{\text{Module B}}}{Q_a}$$

Équation 3.2

Par contre, déterminer expérimentalement la DTS de l'acier est difficile, étant donné qu'il y a peu d'espace physique pour accéder à la sortie du réacteur. Les équations ci-dessus partent de l'hypothèse qu'il n'y a pas de volume mort dans le réacteur.

3.2.2 Simulation de DTS

Dans l'environnement de simulation, la procédure est plus lente à cause du temps requis pour atteindre le régime stationnaire, mais la procédure est similaire :

- A partir du débit d'acier mesuré et du débit de bois utilisé dans l'essai, la simulation est configurée. On considère que l'état stationnaire est atteint quand la masse à l'intérieur du réacteur ne varie plus avec le temps. A la fin de la simulation, un fichier de données est sauvegardé, qui contient les données des particules à l'état stationnaire, nécessaires pour démarrer la simulation de DTS d'un état stationnaire.
- Une nouvelle simulation, qui démarre avec le fichier de données de la simulation précédente, est lancée avec l'introduction des traceurs « acier » et « bois », la simulation écrit directement les données relatives aux traceurs dans un fichier en format ASCII.

Les simulations sont conduites avec le modèle SE vu dans le chapitre 2. Avec ces coefficients de simulation, 1 mois de temps de calcul est nécessaire pour atteindre un état d'équilibre dans le cas d'un système mixte de billes d'acier et de granulés de bois pour avoir la courbe de DTS. Les simulations ont été réalisées sur un cluster de calcul, en utilisant 12 processeurs Intel Xeon X5650 en parallèle. Cette procédure demande donc deux simulations conduites en série, la première simulation est démarrée à réacteur vide et décrit le remplissage du réacteur, la deuxième simulation est démarrée en état stationnaire et permet d'obtenir la courbe de DTS des deux espèces. Pour évaluer la DTS, une injection en impulsion est générée dans l'environnement de simulation. Après l'injection impulsive, le réacteur est opéré dans les conditions normales de fonctionnement. La quantité de traceur utilisée pour le bois est celle de l'essai expérimental (500 g) ; en ce qui concerne l'acier, la quantité de traceur est 200 g. Toutes les 0.25 s dans la simulation (soit tous les 10^4 pas de simulation), LIGGGHTS écrit la quantité de traceur qui reste dans le réacteur, ce qui permet d'obtenir la distribution cumulative des temps de séjour $F(t)$, qui est liée à la distribution des temps de séjour à travers la condition de dérivée :

$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt}$$

Équation 3.3

3.2.3 Comparaison avec le modèle dynamique

Visuellement, il est possible de distinguer dans les deux cas que l'acier se trouve vers la périphérie du lit avec accumulation du bois vers le centre (figure 3.6)

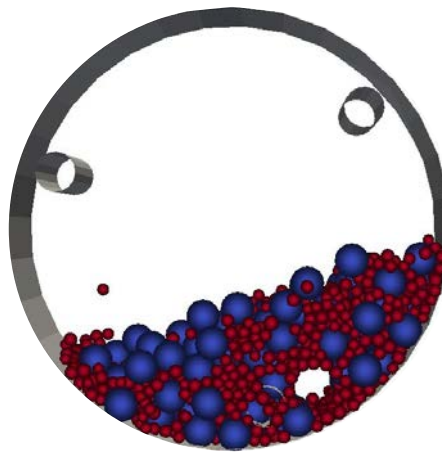


Figure 3.6: Une section du réacteur

Le traçage a commencé à partir d'un état stationnaire (temps $t/\bar{t} = 0$ sur la figure 3.7), en donnant un temps moyen de séjour pour le bois, \bar{t} , de 16.47 min avec un écart type de 2.9 min. Les résultats de l'essai expérimental de DTS sont reportés dans la figure 3.7, en fonction du rapport t/\bar{t} .

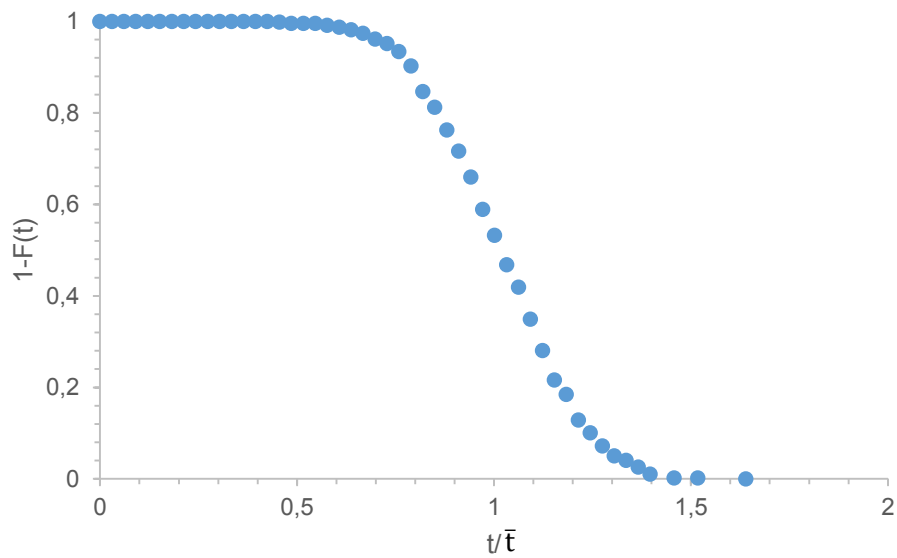


Figure 3.7: DTS expérimentale pour le bois dans le module B de pyrolyse

En ce qui concerne la simulation de DTS dans les conditions du paragraphe 3.2.2, nous retrouvons un \bar{t} pour le bois de 12.3 min avec un écart type $\sigma = 2.1$ min. Il est alors possible de comparer les résultats de l'essai expérimental avec la simulation de DTS (figure 3.7).

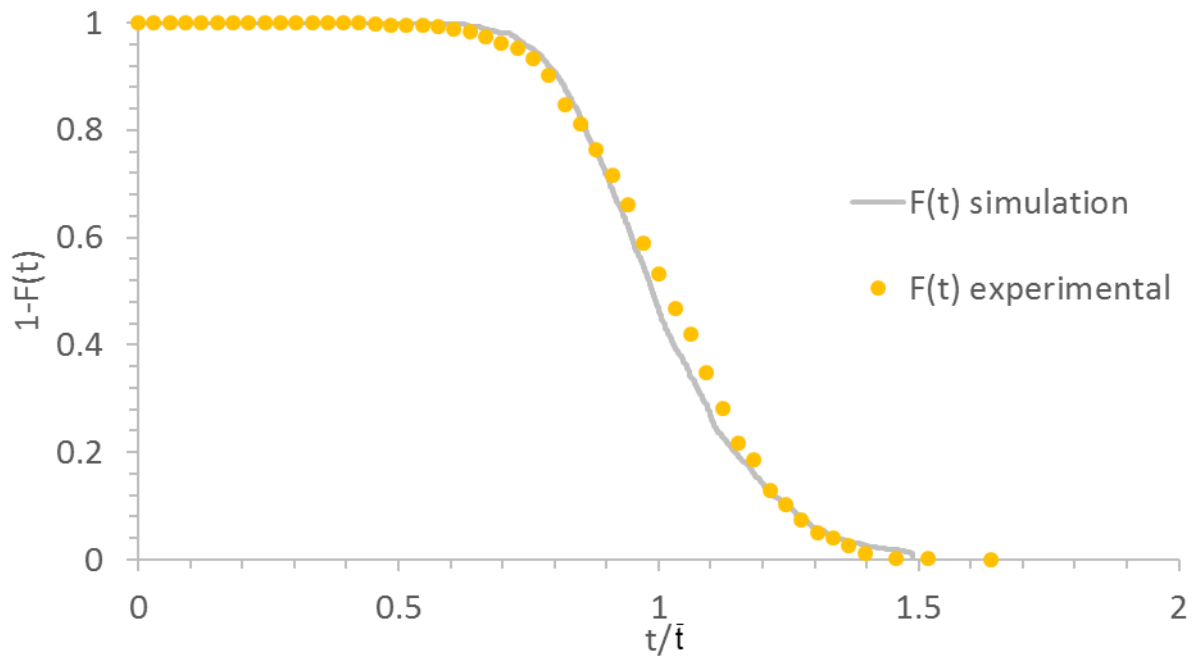


Figure 3.8: Comparaison de $F(t)$ entre simulation et expérience en fonction du temps

Même s'il y a un écart entre les temps de séjour moyens de la simulation et de l'expérience, la courbe de DTS expérimentale est bien reproduite par la simulation, si chaque courbe est normée par le temps \bar{t} correspondant. Plusieurs explications sont possibles à cet écart entre les temps de séjour moyen de la simulation ($\bar{t}=12.3$ min) et l'expérience ($\bar{t}=16.47$ min) :

- L'effet du passage d'une forme cylindrique à une forme sphérique pour les particules de bois a une influence importante sur le système ;
- Les paramètres de simulation n'ont pas été estimés correctement ;
- Il y a un effet de broyage important sur les granulés de bois qui cause une augmentation de l'angle au repos.

Pour tester la première explication, une simulation dans un réacteur du même type de celui utilisé pour l'expérience de DTS a été conduite pour le modèle multisphérique et pour le modèle SE, sauf que la longueur L du réacteur a été réduite à 1 m pour obtenir des résultats dans des délais raisonnables. Les résultats des deux modèles sont identiques, donc nous avons exclu cette explication.

Plusieurs simulations ont été aussi conduites avec des paramètres de simulation modifiés (module de Young, coefficient de frottement, coefficient de restitution). Les résultats obtenus montrent que seuls les coefficients de frottement ont une influence importante sur le système :

- Une réduction des coefficients de frottement acier-paroi ou bois-paroi cause une diminution sensible de l'angle au repos du système, en réduisant fortement les temps de séjour.
- Une augmentation des coefficients de frottement acier-paroi ou bois-paroi n'a pas d'effet, parce que la zone de plateau pour l'angle au repos a été atteinte (figure 2.21).

Donc nous avons conclu que l'explication de cet écart est probablement l'effet de broyage que les billes d'acier exercent sur les granulés de bois. Même s'il s'agit là d'un effet important, il est extrêmement difficile à reproduire dans un environnement de simulation. A notre connaissance, il n'existe pas de modèle qui puisse reproduire cet effet de manière théorique.

L'effet du broyage réduit la dimension des granulés contenus dans le réacteur, en augmentant l'angle au repos θ [51] et en influençant le mélange.

Si θ augmente, nous pouvons considérer la situation de figure 3.9, une particule i qui se trouve dans la position A dans la couche active est soumise à une accélération due à la gravité dans le sens radial et axial à cause des différentes pentes (θ' et ψ) que le lit a dans les deux directions. Si θ' augmente jusqu'à θ'' , la composante de gravité selon la direction transversale augmente (vecteur projection sur la pente du lit g'_a et g'_b), cela a pour conséquence que le temps de séjour dans la

couche active par tour de tambour diminue, en causant une diminution du parcours axial parcouru par tour de tambour.

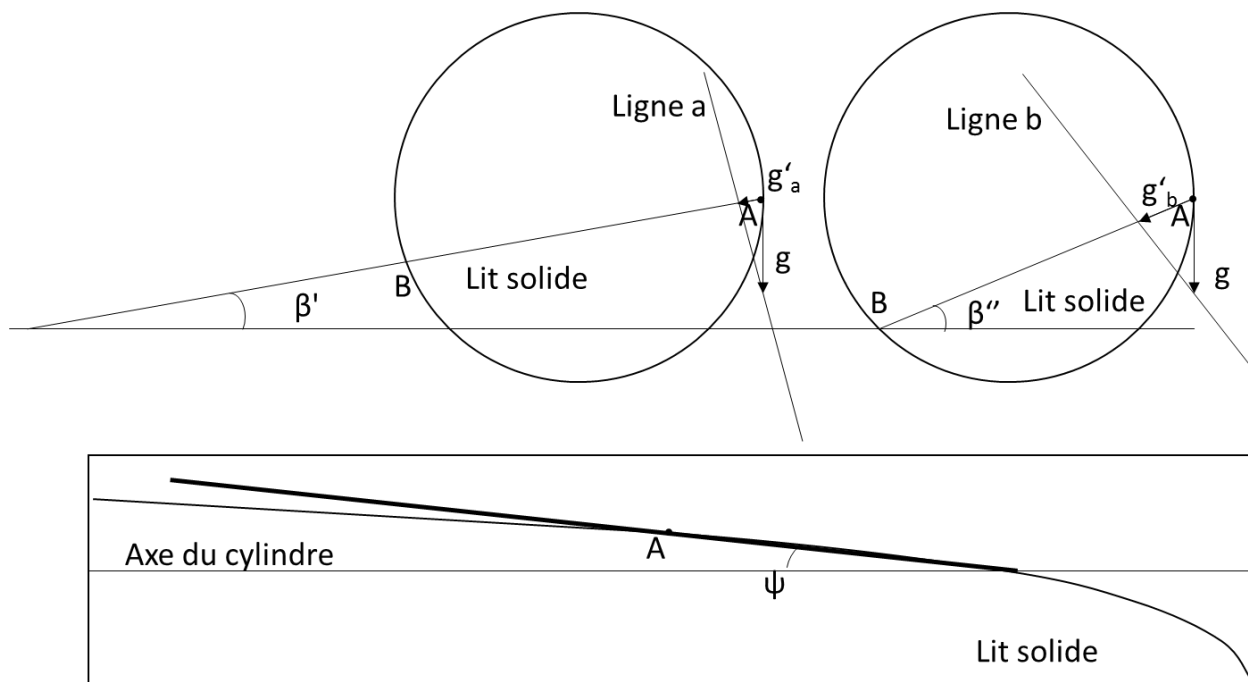


Figure 3.9: Composantes de la gravité pour deux pentes de lit différents (a) et une vue transversal d'un lit solide (b)

Si la taille des particules diminue, cela a un effet sur le mélange (§ 1.5.3), mais aussi un effet sur la DTS, ce que nous allons essayer d'expliquer dans ce qui suit.

Nous pouvons considérer les deux situations de figure 3.9

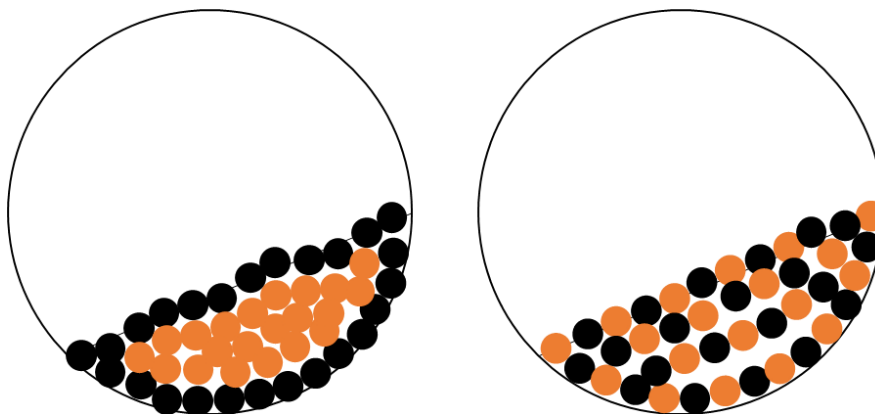


Figure 3.10: Une situation ségrégée et une situation mélangée

Dans la situation ségrégée (figure 3.9 gauche), les particules noires présentes dans la zone « plug flow » sont globalement situées à une distance R plus grande en comparaison des particules orange. Cela signifie que la distance moyenne parcourue par les particules orange dans la couche active (c) sera inférieure à celle des particules noires, il en sera alors de même pour la distance axiale (l_c) parcourue par les deux types de particules (équation 1.6). Selon le même raisonnement, dans le cas d'un bon mélange (figure 3.9 droite), il n'y aura pas de différence entre les deux distances parcourues par les particules noires et les particules orange, comportement qui résultera en deux DTS similaires pour les deux espèces. En général le profil de vitesse axial diffèrera donc pour les deux espèces dans le cas ségrégé comme par exemple illustré en figure 3.10.

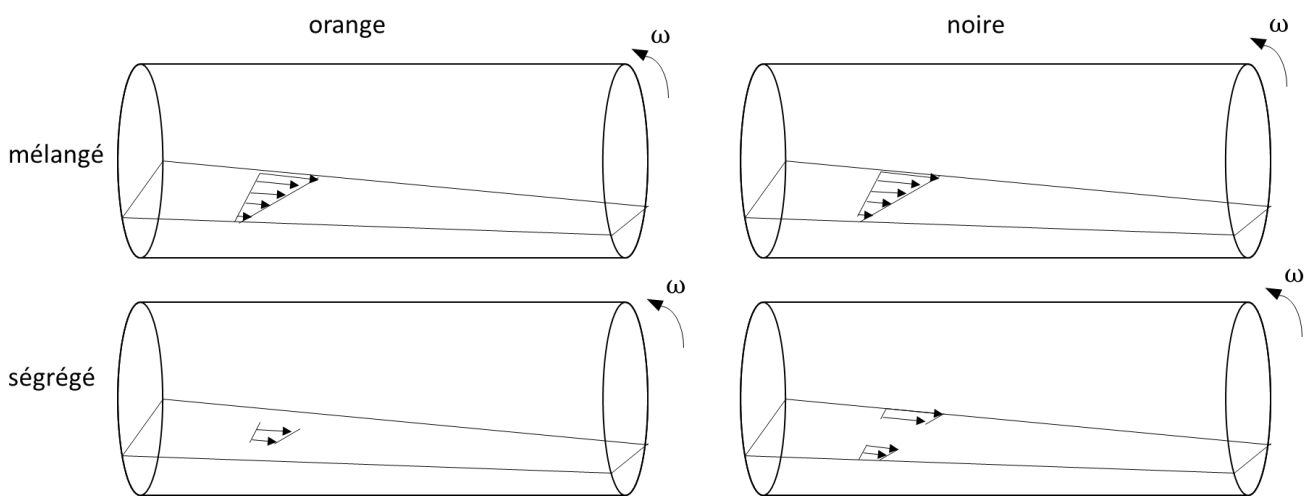


Figure 3.11: Les profils de vitesse pour des cas différents de mélange binaire

Cela a un effet important sur la DTS. D'après les résultats de DTS expérimentaux et numériques, on peut conclure que dans ce cas, le broyage cause une augmentation de l'angle au repos β , et donc du temps de séjour moyen du bois, mais qu'il a peu d'influence sur le mélange pour le système bois acier.

En ce qui concerne l'acier, la valeur mesurée du débit est 4 #/s (# est utilisé pour identifier le nombre de particules). À partir des équations 3.1 et 3.8, il est possible de calculer la valeur du temps de passage pour l'acier qui est de 13.6 min pour l'essai expérimental, tandis que le temps de séjour moyen est de 11.7 min pour la simulation de DTS. L'écart entre ces deux valeurs semble lié à une sous-estimation de l'angle au repos dans la simulation.

En ce qui concerne la DTS obtenue par le modèle DEM de l'acier, les résultats sont représentés en figure 3.11.

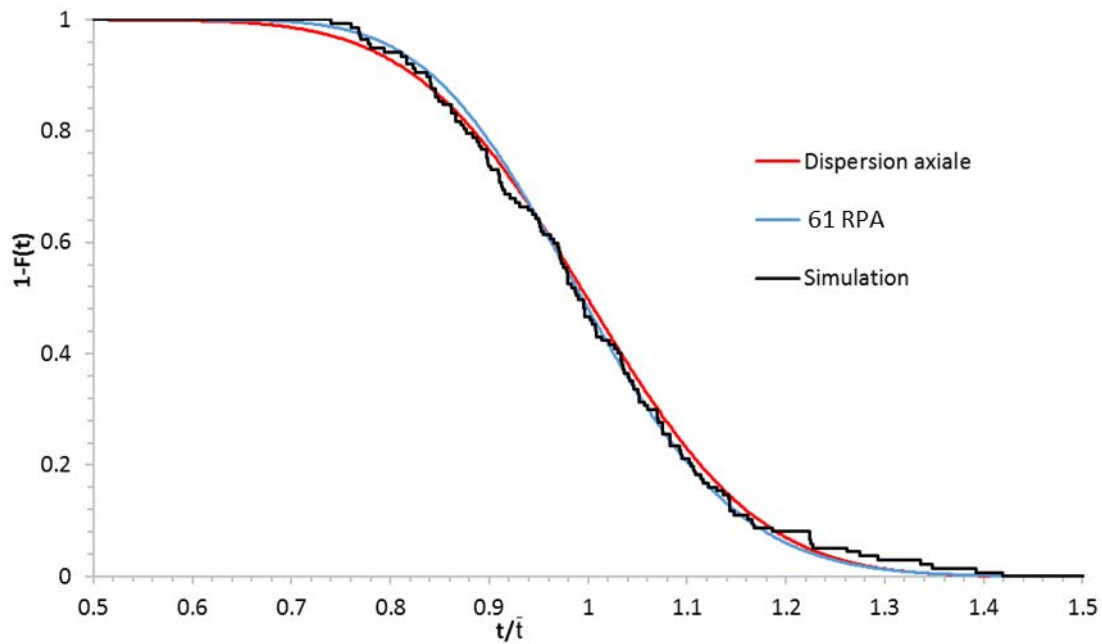


Figure 3.12: Distribution cumulative des temps de séjour pour l'acier dans la simulation de DTS avec les DTS des réacteur idéaux (Annexe E)

Avec un écart type $\sigma = 1.48$ min. On constate qu'un RPAS avec $J=61$ permet de représenter correctement cette DTS simulée par DEM.

3.2.4 Comparaison avec le modèle de Saeman

Le modèle de Saeman présenté dans la section 1.5.2.1 est facilement adaptable au cas de deux solides dans une situation de mélange parfait, Cela nous permet de voir quel type d'impact aurait l'utilisation d'un modèle conventionnel utilisé pour les fours tournants sur le cas SEA Marconi, où l'effet du mélange binaire a un effet extrêmement important. Dans la section suivante, on verra la première de toutes les modifications apportées au modèle présenté dans la section 1.5.2.1, pour comparer le modèle DEM et le modèle de Saeman.

3.2.4.1 Modèle à mélange parfait (MP)

Hypothèse

- 1) Le mélange entre les deux solides est parfait $Q_a/Q_b = V_a/V_b = C = \text{constante}$, où Q_a est le débit volumique d'acier, Q_b est le débit volumique de bois, V_a est le volume de particules d'acier dans le tambour et V_b est le volume de particules de bois dans le tambour

Si on fait cette hypothèse, ce que l'on a vu dans le paragraphe 1.5.2.1 vaut aussi pour deux types de particules qui ne ségrègent pas, Q sera alors le débit volumique de deux solides ($Q_a + Q_b$) et donc on peut calculer le volume total en utilisant l'expression :

$$V = \int_0^L S dz$$

Équation 3.4

Où S est la section transversale occupée par le solide et V est le volume occupé par le solide. Pour trouver enfin les deux temps de séjour, il est possible de résoudre ce système :

$$\begin{cases} V_a/V_b = C \\ V_a + V_b = V = \int_0^{z=L} S dz \end{cases}$$

Système d'équation 3.5

S peut être obtenue par des simples relations géométriques :

$$S = R^2 \arccos\left(1 - \frac{h}{R}\right) - (R - h)\sqrt{h^2 - 2hR}$$

Équation 3.6

Les résultats de ce système donnent les volumes occupés dans le réacteur par les deux espèces bois et acier ; on peut alors calculer le temps de passage des solides.

$$\tau = \frac{V_a}{Q_a} = \frac{V_b}{Q_b} = \frac{V_{tot}}{Q_a + Q_b}$$

Équation 3.7

3.2.4.2 Modèle de sortie conique

La forme des parois du réacteur a été présentée plus haut (Figure 3.1). On voit sur cette figure une sortie de type conique. Cet effet est important pour une représentation correcte du profil de hauteur et du temps de séjour des différentes phases. Les équations mathématiques présentées dans ce paragraphe ont été établies par Spurling [149]. Les effets du cône sont une réduction de rayon du système plus un effet de montée, qui augmentent le temps de séjour. Pour tenir compte des effets engendrés par le cône, il faut modifier les équations écrites dans le paragraphe 1.5.2.1. Le réacteur a deux zones (figure 3.13) : une zone cylindrique, de longueur L_{cylinder} et rayon R^M , et une conique de longueur L_{cone} et de rayon $R(z)$.

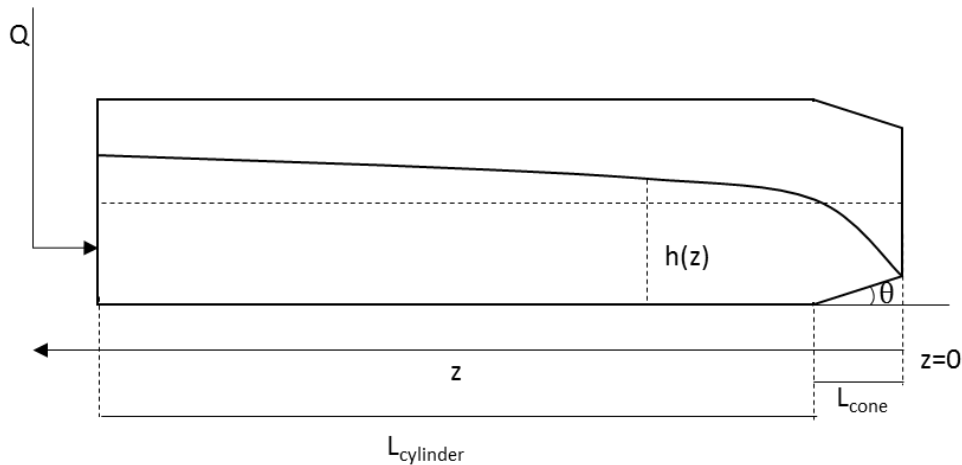


Figure 3.13: Système à sortie conique

Deux types de traitement peuvent être choisis :

- 1) Un traitement à système de référence solidaire avec les parois du réacteur (traitement relatif)
- 2) Un traitement à système de référence fixe et parallèle à l'horizontale (traitement absolu)

Le traitement du type 2 sera choisi. La hauteur sera donc définie sur la base du rayon maximal du système, soit

$$h^a(z) = \max(R^M - Y(z)) = h^r(z) - \Delta R$$

Équation 3.8

Où Y est l'ensemble de toutes les positions radiales du lit solide dans une section transversale, ΔR est la différence entre R^M et $R(z)$, h^r est la hauteur relative (évaluée avec le traitement relatif) et h^a est la hauteur absolue (évaluée avec le traitement absolu). Comme auparavant, les équation 1.6 et suivantes sont valables, mais la distance transversale parcourue dans la couche active c sera

$$c = 2\sqrt{(r^2 - r_0^2)}, \quad r \in [R^M - \Delta R, r_0], r_0 = R^M - h^a(z)$$

Équation 3.9

Vu que l'équation 1.11 est valable elle aussi, il est possible de passer directement à la définition du débit différentiel comme nous l'avons déjà fait pour les autres systèmes

$$dq = v dS = \frac{l_c}{t_c} dS = 2\omega \left(\frac{\tan(\psi)}{\tan(\beta)} + \frac{\tan(\theta)}{\sin(\beta)} \right) r \sqrt{(r^2 - r_0^2)} dr$$

Équation 3.10

On calcule Q par intégration sur la section transversale :

$$Q = \frac{2\omega}{3} \left(\frac{\tan(\psi)}{\tan(\beta)} + \frac{\tan(\theta)}{\sin(\beta)} \right) \left[(R^M - \Delta R)^2 - (h^a - R^M)^2 \right]^{3/2}$$

Équation 3.11

Enfin en connaissant la définition de $\tan(\psi)$ (équation 1.16), il est possible de réarranger le système pour obtenir l'équation différentielle pour la hauteur

$$\frac{dh^a}{dz} = \frac{3Q_b \tan(\beta)}{2\omega} \left[(R^M - \Delta R)^2 - (h^a - R^M)^2 \right]^{-3/2} - \frac{dR}{dz}$$

Équation 3.12

Dans cette expression il y a deux parties relatives au cône : le premier terme, qui lie la hauteur au rayon actuel, et le deuxième terme qui tient compte de l'angle de pente du cône. L'angle θ est négatif, donc dR/dZ augmentera la hauteur et le temps de séjour des particules.

3.2.4.3 Étude de maillage

Avant de réaliser une étude complète avec ce modèle de Saeman, une analyse du maillage a été conduite pour choisir la taille optimale des mailles. Il faut étudier la variabilité des résultats des systèmes étudiés dans les paragraphes 3.2.4.1 avec la taille des mailles qui composent la discrétisation axiale du réacteur. Dans cette analyse, la sortie conique ne sera pas considérée. Cette analyse est très importante pour déterminer la taille optimale en-dessous de laquelle il n'y a plus de variabilité des résultats avec la taille des éléments dn_z . Dans ce travail, le maillage considéré sera uniforme, c'est-à-dire que la longueur de chaque élément est toujours la même. Cette solution n'est pas extrêmement efficace, parce que la zone la plus délicate est la zone de sortie où les dérivées sont importantes et donc un maillage variable permettrait de mailler finement dans la zone de sortie et de façon plus grossière à l'entrée du système, mais le maillage uniforme rend plus facile la transcription en code Matlab. Dans la figure 3.13 le temps de séjour est reporté en fonction de la taille des mailles avec les conditions du système reporté dans le tableau 3.3; on voit que le système atteint une valeur stationnaire vers une taille de maille dn_z de 0.002 m.

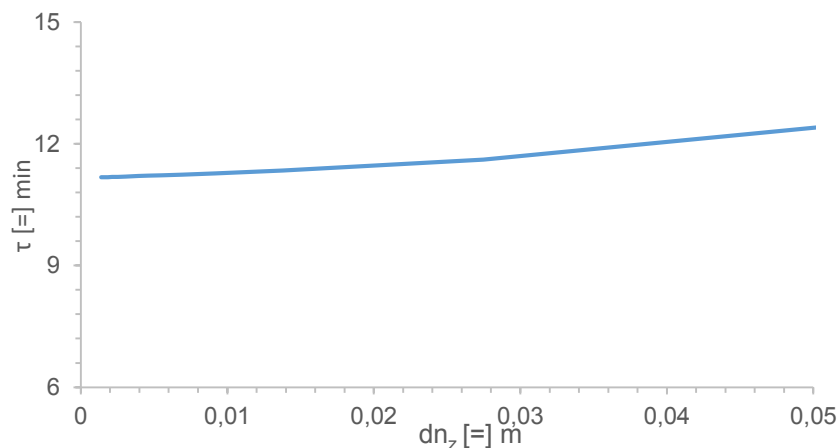


Figure 3.14: Temps de séjour pour le modèle MP en fonction de la taille des éléments du maillage

Q_b (débit de bois) [=] kg/h	50
Q_a (débit d'acier) [=] sphères/s	4.5
L (longueur du réacteur) [=] m	2.775
ω (vitesse de rotation du réacteur) [=] rpm	5
β (angle au repos) [=] °	20
R (rayon du réacteur) [=] m	0.1705
A (rapport Q_a sur Q_b)	3.133

Tableau 3.3: Paramètres de la convergence du maillage

3.2.4.4 Comparaison DEM vs. modèle de Saeman modifié

À ce stade, il est possible de comparer les résultats du modèle de Saeman avec les résultats obtenus avec le modèle DEM. Les seuls facteurs inconnus sont les angles de repos, qui dans ce cas ont été extrapolés à partir du modèle DEM via un script Matlab (figure 3.15). Ce script Matlab divise le réacteur en tranches d'épaisseur 0.1 m. Pour trouver la valeur de β à la position axiale z_i , le script calcule la moyenne sur un tour de la pente de la courbe de régression obtenue par les centres des particules de la couche active.

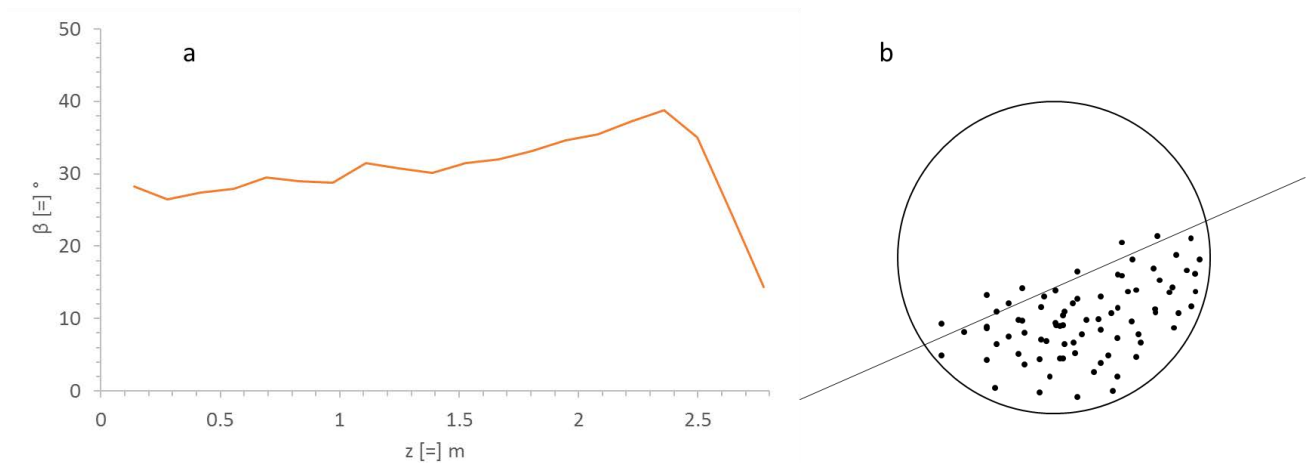


Figure 3.15: Angle au repos en fonction de la position axiale (a) et un schéma simplifié pour le calcul du coefficient angulaire à la position axiale z_i (b)

Il est alors possible d'utiliser les angles au repos obtenus dans la simulation DEM pour le modèle 1D. Tout d'abord, les profils de hauteur du lit ont été comparés (figure 3.16).

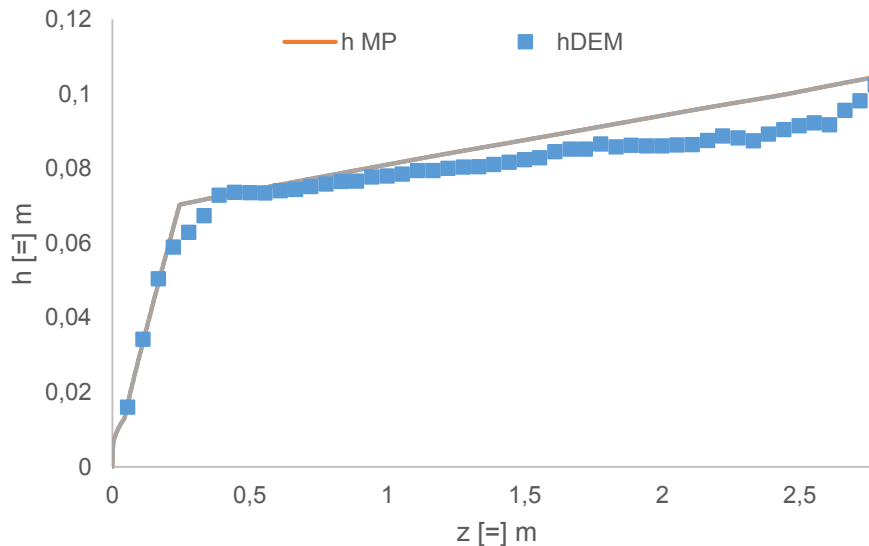


Figure 3.16: Hauteur relative en fonction de la position axiale pour le DEM et pour le modèle unidimensionnel MP (mélange parfait)

Les hauteurs sont bien calculées par le modèle unidimensionnel mais ce sont surtout les résultats concernant les temps de séjour qui sont intéressants (figure 3.16).

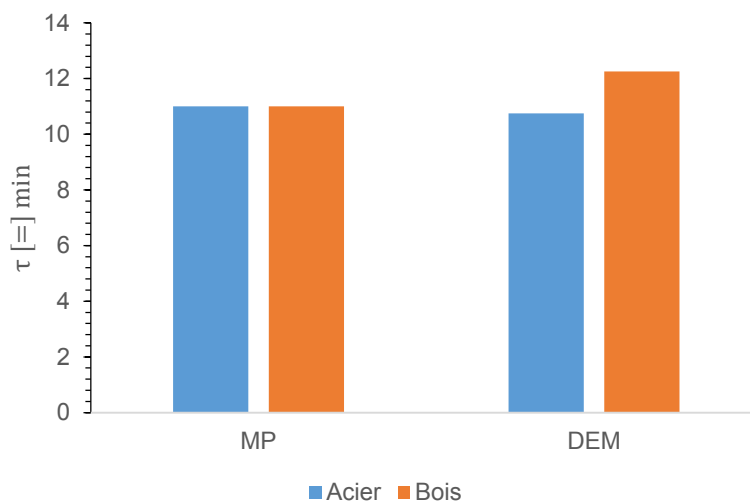


Figure 3.17: Temps de séjour moyens pour les modèles unidimensionnels et pour le DEM

Ce graphique corrobore les indications qualitatives du § 3.2.3 sur le mélange et la ségrégation. Dans le cas du mélange parfait, les valeurs de τ pour le bois et l'acier sont égales par hypothèse, mais ces valeurs se situent entre celles obtenues avec le modèle DEM, où l'un des solides est amené vers les parois du réacteur par la ségrégation et l'autre vers le centre. L'élément amené vers les parois du réacteur reste en moyenne plus de temps dans la couche active, et fait donc en moyenne un parcours axial plus long par tour. Alors que l'élément qui reste dans le cœur du lit solide, couvre

en moyenne une distance axiale plus courte car il reste moins dans la couche active, ce qui entraîne des temps de séjour plus élevés.

3.3 Effet de la configuration du réacteur

L'étude de la Distribution des temps de séjour nous a fait toucher du doigt les limites des modèles numériques mis en œuvre : le fait de ne pas prendre en compte les effets de broyage cause certainement des problèmes de prédiction en termes de comportement du mélange binaire : dans ce cas, le problème réside principalement dans la prédiction du temps de séjour moyen. Néanmoins, le modèle est toujours représentatif du comportement global du système acier-bois et peut nous donner des indices sur les configurations de réacteur plus efficaces dans le processus de pyrolyse. Pour ce faire, nous utiliserons le modèle DEM déjà utilisé au chapitre 2 pour évaluer les effets des différentes configurations du système.

À ce stade, nous pouvons tirer profit du modèle DEM pour tirer des renseignements importants, par exemple, l'impact du type de chicane sur le comportement du module B de pyrolyse (degré de mélange, temps de séjour moyen du bois, temps de séjour moyen de l'acier, taux de remplissage du réacteur...).

Nous allons analyser principalement 3 configurations :

1. La configuration avec chicanes de type a (figure 3.2, a et a'), déjà utilisé pour l'essai de DTS
2. La configuration avec chicanes de type b (figure 3.2, b et b')
3. La configuration de type b (figure 3.2), mais avec inclinaison du réacteur de 1° sur l'horizontale

Les paramètres de fonctionnement de la simulation, sont indiqués dans le tableau 3.4. En ce qui concerne le flux des billes acier, il faut le calculer chaque fois selon le temps de passage à l'intérieur du réacteur, (cf. paragraphe 1.2.1.4). A une valeur donnée du nombre total de billes d'acier dans le système, du débit de bois et de la vitesse de rotation des modules B et C, le débit de l'acier entre les modules B et C est imposé par le système.

ω_b	ω_c	F	H	N_a^{tot}
5 tr/m	5 tr/m	50 kg/hr	0.1	3000

Tableau 3.4: paramètres utilisés dans les simulations

Comme nous l'avons déjà vu, les Distributions des Temps de Séjour des solides sont des données fondamentales pour caractériser les réacteurs ; elles permettent d'avoir des informations sur le mélange des composants, ainsi que sur leur comportement dynamique au sein du système. Cette analyse devient particulièrement intéressante pour comparer des réacteurs de conception différente. En figure 3.18 sont disponibles les données de temps de séjour moyen et le nombre de Péclet en fonction de différente configuration géométrique utilisée.

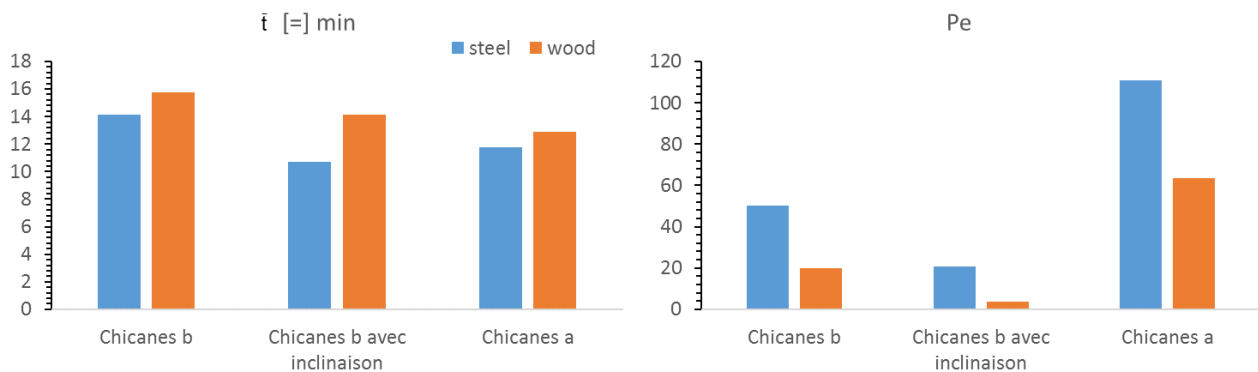


Figure 3.18: Valeurs de τ (gauche) et de Pe (droite) en fonction de la géométrie utilisée

Comme il ressort de la figure 3.18, les chicanes b affectent fortement le comportement dynamique du réacteur, qui se rapproche de celui d'un mélangeur ; de plus, le temps de séjour moyen est plus élevé comparé au cas des chicanes a. Comme montré par [150], les chicanes radiales (c'est-à-dire des chicanes qui ont une section transversale égale pour toutes les positions axiales) n'ont pas d'impact fort sur la dynamique du système, par contre les chicanes b causent des effets de rétro mélange pendant leur passage dans le lit solide, dû à leur mécanisme de capture des particules, qui est schématiquement montré en figure 3.19.

En effet, le passage d'une chicane b cause des « vides » dans le lit solide qui sont remplis surtout par les particules des zones proches, et qui cause une augmentation des temps de séjour moyen et du mélange, avec des Pe beaucoup plus petits. Pour cette raison, des particules peuvent rester « coincées » plusieurs minutes dans une même position axiale, tandis que d'autres vont progresser assez vite vers la sortie. Ce rétro mélange n'est pas souhaitable si l'on souhaite un traitement homogène de toutes les particules de bois.

Le comportement dû à l'inclinaison a été déjà rencontré par Colin et coll. [21] ; l'inclinaison conduit à une diminution sensible du temps de séjour moyen avec un Pe qui se rapproche encore plus de celui d'un mélangeur. Le comportement de l'acier est beaucoup plus sensible à l'inclinaison, probablement à cause de son inertie dynamique beaucoup plus importante.

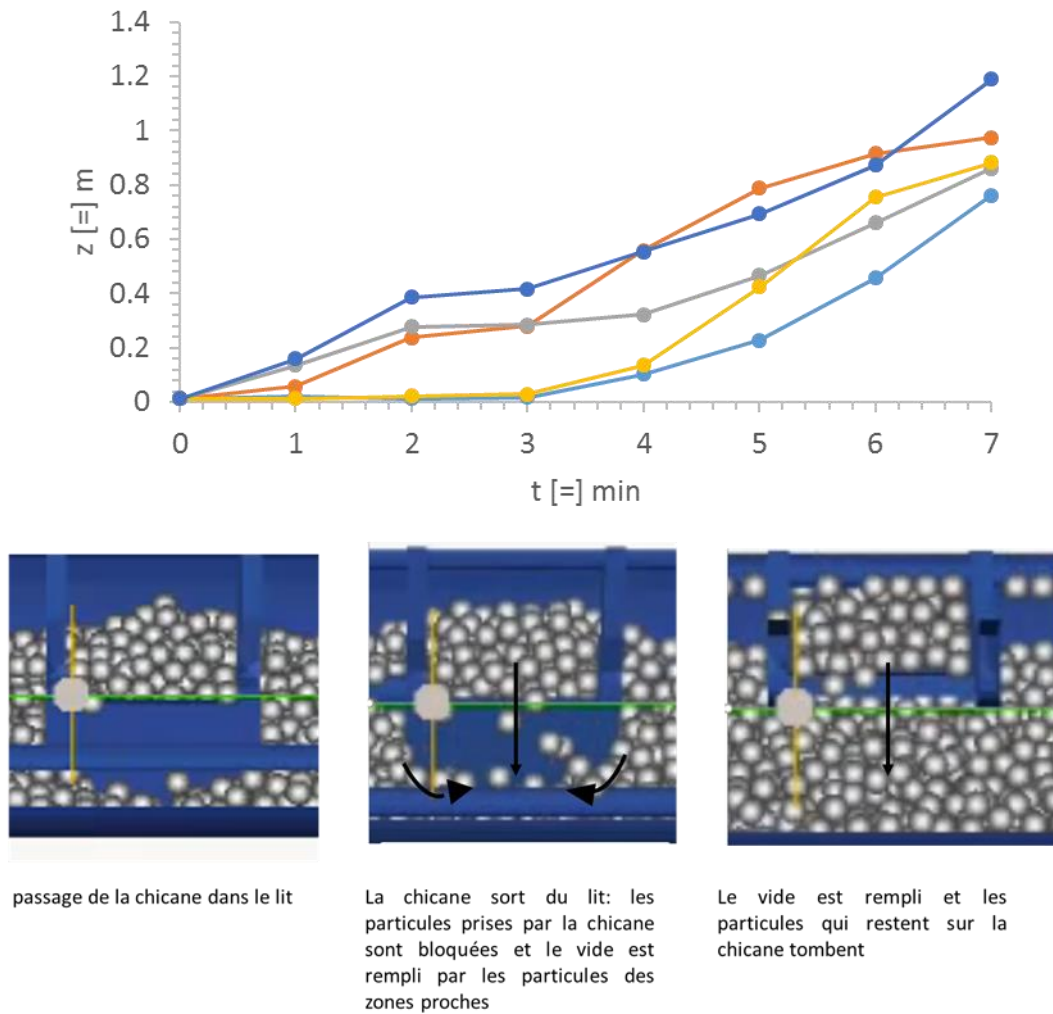


Figure 3.19: Position axiale de certaines particules dans la configuration de chicanes b en fonction du temps (en haut) et le passage d'une chicane b dans un lit de particules (en bas)

3.4 Conclusions sur les simulations dynamiques

Dans la première étape de ce chapitre, nous avons vu les différences entre le modèle et le réacteur expérimental à travers un test de DTS. Nous avons ensuite étudié le comportement en fonction de plusieurs variables, telles que la géométrie du réacteur et son angle par rapport au plan horizontal, en étudiant les différentes configurations grâce à l'utilisation de variables telles que le paramètre I_r et la DTS. La première analyse montre que le phénomène de broyage causé par des éléments en acier devient primordial, causant une augmentation nette des temps de séjour. Le modèle ne peut pas décrire ce genre d'effets et sous-estime donc le temps de séjour réel, bien qu'il soit en mesure de prédire le comportement global du réacteur. Dans tous les cas, à notre connaissance, c'est le premier modèle qui permet d'examiner le comportement d'un mélange binaire à l'intérieur d'un four tournant. Le modèle DEM permet également l'analyse du système configuré avec différentes géométries et inclinaisons : on peut conclure que les chicanes de type b provoquent une ségrégation

supplémentaire entre acier et bois, ainsi qu'un phénomène global de rétro mélange (diminution de Péclet) ce qui est préjudiciable pour obtenir une pyrolyse homogène. Ces chicanes augmentent le temps de séjour moyen à l'intérieur du réacteur, ce qui entraîne « mécaniquement » une augmentation du taux de remplissage. Il faut être attentif à ce que celui-ci ne soit pas trop important, car on pourrait alors aboutir à un engorgement du réacteur.

3.5 Modèle thermique du réacteur tournant de pyrolyse

Le modèle thermique a pour objectif de calculer les températures du lit de plaquettes de bois, de la phase gaz et de la paroi du cylindre.

Il est très difficile d'obtenir un modèle représentatif de la thermique de ce réacteur. Il n'y a pas d'exemple dans la littérature de cas thermiques mettant en œuvre deux types de solides à l'intérieur de ce genre de réacteur.

Des bilans énergétiques vont être réalisés sur ces différentes phases puis couplés avec le modèle de transport.

3.5.1 Modèle dynamique

La DTS a été utilisée pour vérifier le modèle DEM représentatif de la dynamique des solides, comme indiqué dans le sous paragraphe 3.2.3. Elle peut également servir à bâtir un modèle multi-physique du réacteur de pyrolyse, représenté par une association de réacteurs idéaux capable de reproduire la dynamique du système (Annexe E). Actuellement, il n'y a en effet aucun modèle uni-dimensionnel capable de reproduire le comportement du lit. Nous pouvons utiliser des modèles de réacteurs idéaux présentés au dans l'Annexe E pour déterminer quel est le modèle le plus adapté pour approximer de façon adéquate le comportement du réacteur réel. Chacun des modèles présentés requiert deux paramètres de l'expérience de DTS : le temps de séjour moyen τ et l'écart-type σ , nécessaires à l'évaluation des paramètres de base J et Pe , avec $Pe=62$ et $J\approx 31$. Les résultats sont en accord avec la littérature [21], les modèles de réacteur piston dispersif et de J mélangeurs en cascade (qui sera appelée dès maintenant RPAS pour réacteurs parfaitement agités en série) arrivent à bien reproduire le comportement du réacteur réel.

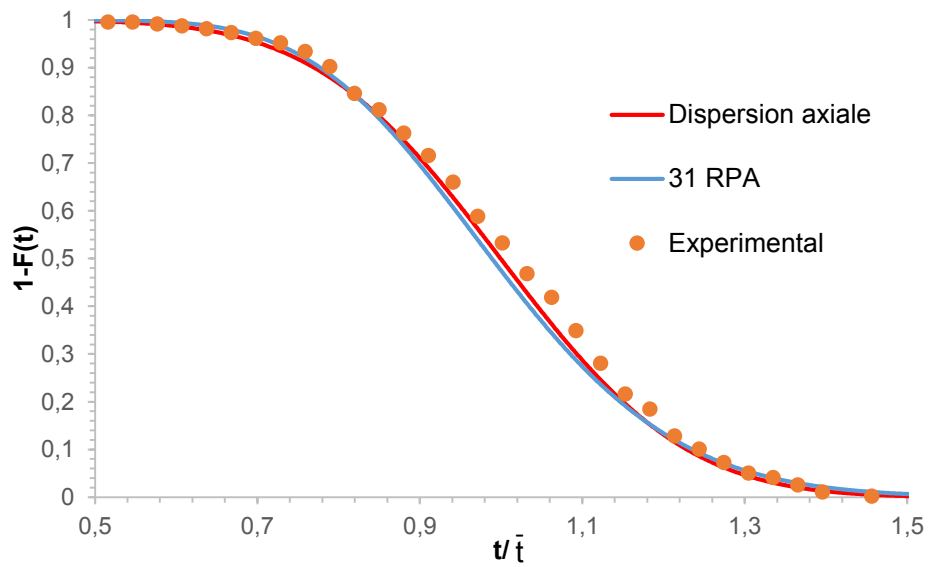


Figure 3.20: Comparaison DTS du bois entre cascade de RPA, réacteur piston avec dispersion axiale et modèle expérimental

Le modèle RPAS pour le bois est certainement plus facile à mettre en œuvre. Notons qu'il doit être inévitablement couplé avec le modèle RPAS de l'acier.

Chaque réacteur a un temps de séjour τ_j égal à :

$$\tau_j = \frac{\bar{t}}{J}$$

Équation 3.13

Le comportement des deux espèces (pellets de bois et acier) est schématisé dans la figure 3.21.

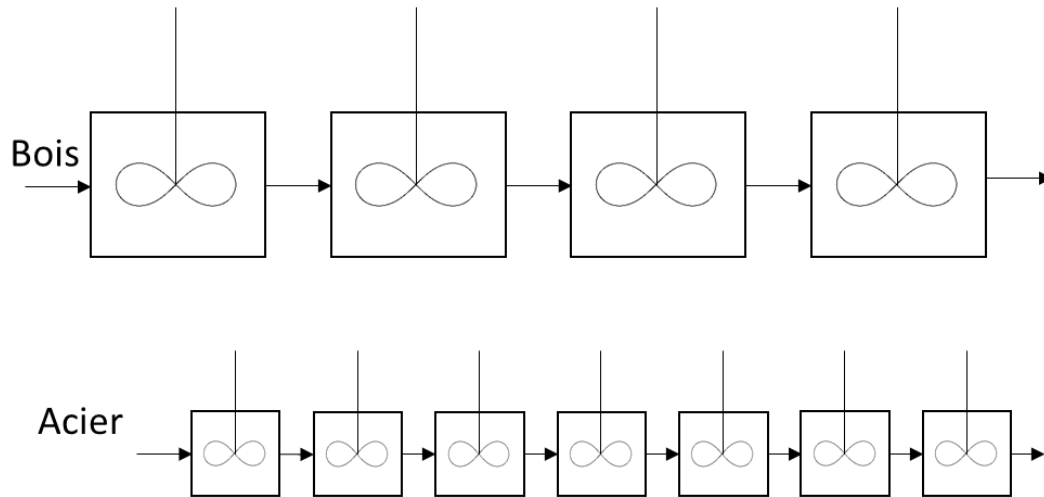


Figure 3.21: Représentation dynamique de l'acier et du bois à l'intérieur du réacteur

Le temps de séjour dans chaque réacteur de la série « bois », τ_J^{bois} , peut être exprimé en fonction de J_{bois} et τ^{bois} et le temps de séjour dans chaque réacteur de la série « acier », τ_J^{acier} , peut être exprimé en fonction de J_{acier} (=61, Annexe O) et τ^{acier} .

Il reste à déterminer les flux de chaleur entre les séries de RPAS bois et acier.

Grâce à l'équation 3.13 et aux analyses de DTS, τ_J^{bois} et τ_J^{acier} sont connus. Puisque la masse de solide au sein de chaque RPA est identique, ils peuvent être identifiés, c'est-à-dire qu'il est possible d'obtenir la position axiale du réacteur $z(J)$.

$$m_{Ji} = Q_i \tau_J^i \text{ où } i = \{\text{acier, bois}\}$$

Équation 3.14

Ceci va permettre d'analyser les échanges de chaleur qui se déroulent à une position axiale donnée entre RPA acier et RPA bois (on néglige les transferts de chaleur longitudinaux).

Cette méthode permet de prendre en compte :

- la ségrégation axiale grâce à la disposition des RPA
- et la ségrégation radiale à l'intérieur du réacteur par les coefficients de transfert de chaleur conductifs entre bois et acier, qui dépendent du nombre de points de contacts entre particules.

Les simulations DEM permettent de déterminer la disposition relative des RPA bois et RPA acier ainsi que les contacts entre les particules de bois et d'acier nécessaire à l'estimation des flux conductifs.

Le modèle DEM permet ainsi de déterminer qu'il y a à peu près 6.4 kg d'acier par RPA_{bois} , soit 2 RPA_{acier} pour 1 RPA_{bois} , sauf dans la première section, ce qui suggère qu'une disposition correcte pourrait être celle de la figure 3.24.

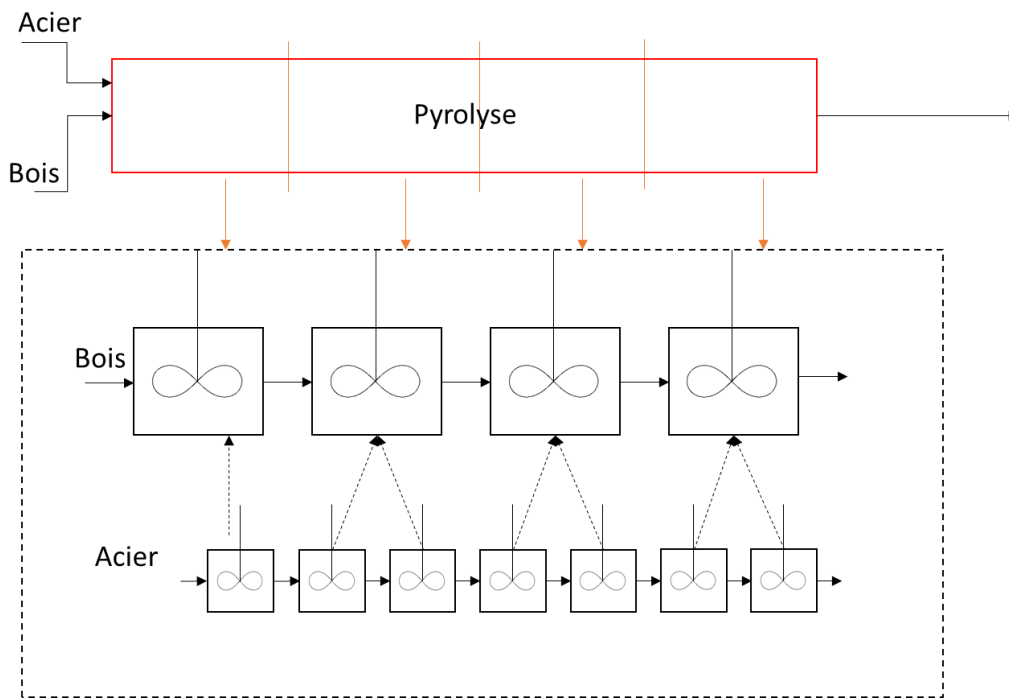


Figure 3.22: Disposition des deux modèles RPAS

À ce stade, il suffit de s'assurer que cet arrangement est correct. Pour cela, il est possible d'envisager un problème de transfert de chaleur simple en utilisant le modèle de simulation DEM. Nous prenons des conditions où l'acier et le bois sont initialement à des températures de 800°C et 25°C. Dans le réacteur DEM les particules en contact vont échanger de la chaleur selon la loi d'échange thermique [151] (Annexe H). Il faut noter qu'ici le solide est supposé se trouver dans le vide.

En écrivant les lois de conservation de l'énergie pour le système envisagé, suivant le schéma de la figure 3.24, on obtient

$$\frac{dT_{J_i}^b}{dt} = \frac{1}{m_{J_i}^b c_{p,J_i}^b} \left[Q_{J_{i-1}}^b c_{p,J_{i-1}}^b (T_{J_{i-1}}^b - T_r) - Q_{J_i}^b c_{p,J_i}^b (T_{J_i}^b - T_r) + H_{a_{j-1}-b_i}^c (T_{J_i}^b - T_{J_{j-1}}^a) \right. \\ \left. + H_{a_j-b_i}^c (T_{J_i}^b - T_{J_j}^a) \right]$$

$$\frac{dT_{J_j}^a}{dt} = \frac{1}{m_{J_j}^a c_{p,J_j}^a} \left[Q_{J_{j-1}}^a c_{p,J_{j-1}}^a (T_{J_{j-1}}^b - T_r) - Q_{J_j}^a c_{p,J_j}^a (T_{J_j}^a - T_r) + H_{a_j-b_i}^c (T_{J_i}^b - T_{J_j}^a) \right]$$

Système de équations 3.15

Où J_i et J_j représentent les RPA considérés respectivement pour le bois et l'acier, les indices supérieurs a et b représentent l'espèce d'où est extrait le paramètre (acier ou bois), T_r est la température de référence pour le calcul de la capacité thermique spécifique, c_p est la capacité thermique spécifique, Q le flux entrant dans un RPA et H^c est un terme d'échange total entre un RPA de la série acier et un RPA de la série bois. Le système de équations 3.15 a les conditions initiales et limites suivantes :

$$\begin{cases} T_0^b = 25^\circ\text{C} \\ T_0^a = 800^\circ\text{C} \end{cases}, \begin{cases} T^b(t=0) = 25^\circ\text{C} \\ T^a(t=0) = 800^\circ\text{C} \end{cases}$$

Systèmes d'équations 3.16 (conditions initiales et limites)

Le seul facteur inconnu dans ce système sont les termes d'échange H^c . Ceux-ci seront trouvé manière suivante, grâce à l'utilisation d'une simulation DEM où les températures des RPA sont maintenues fixes aux températures initiales, et le coefficient global d'échange est mesurée pour chaque RPA de la série, en mesurant la chaleur ΣQ_{J_i} , la somme de tous les chaleurs échangées entre l'acier et de bois dans le RPA J_i , pour obtenir :

$$H_{a-b,J_i}^c = \frac{\Sigma Q_{J_i}}{(T_a - T_b)}$$

Équation 3.17

Les valeurs des paramètres de simulation sont reportées dans le tableau 3.5 :

	c_p [=] J/kgK	k_c [=] W/mK	Q [=] kg/s	ρ [=] kg/m ³	r [=] m
Acier	500	25	0.29	8000	0.0125
Bois	3000	0.64	0.0139	1140	0.0043

Tableau 3.5: Propriétés de simulation

De toute évidence, ces valeurs sont approximatives, parce que le DEM n'offre pas dans ce cas la possibilité d'inclure des propriétés (C_p et k_c) variables avec la température, composition, etc.

La comparaison entre le modèle DEM et le modèle 1D (avec H de l'ordre de 10^{-4} W/K pour une particule de bois) est présentée sur la figure 3.25.

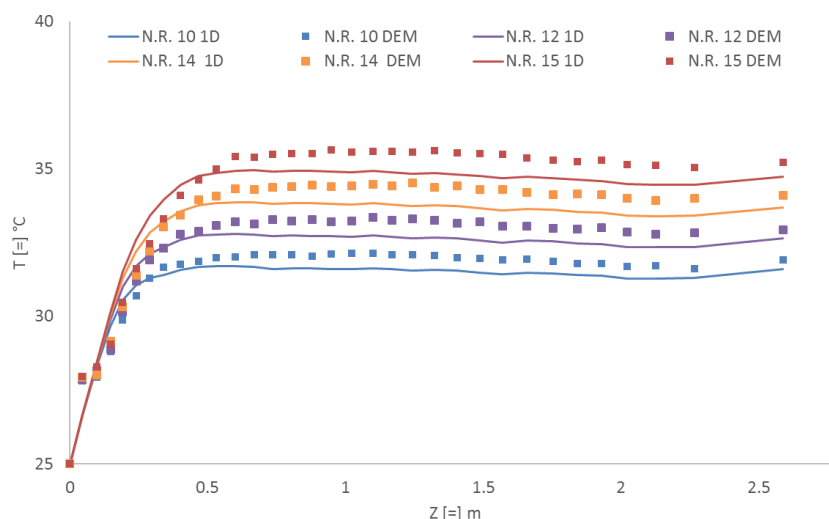


Figure 3.23: Température du bois en fonction de la position axiale et des nombres de tour (N. R.) pour le réacteur de chicanes a, où acier et bois échangent de la chaleur seulement par conduction

On peut distinguer deux zones à l'intérieur du réacteur : une zone où les températures augmentent linéairement avec la position axiale et une zone à température homogène. Il faut noter que la température du bois reste proche de l'ambiante, ce qui montre qu'il n'y a pas des gros flux de chaleur par conduction pure entre le bois et l'acier, comme déjà montré par Shi et al. ([152]), ces coefficients ne peuvent pas être très élevés pour des particules si grosses dans le vide. L'évolution des températures obtenues par DEM est bien suivie par le modèle RPAS, surtout les limites des deux zones sont bien retrouvées par le modèle RPAS. Ceci est considéré comme une validation pour le modèle RPAS, qui sera utilisé pour modéliser le comportement du réacteur SEA Marconi.

3.5.2 Les modalités d'échange de chaleur

Lors de la modélisation d'un procédé de traitement thermique en four tournant, plusieurs types de transferts thermiques doivent être pris en compte. Il y a globalement 5 phases qu'il faut considérer : le bois, l'acier, le gaz interstitiel, le gaz présent dans le ciel gazeux et la paroi. Les échanges thermiques principaux sont représentés en figure 3.24.

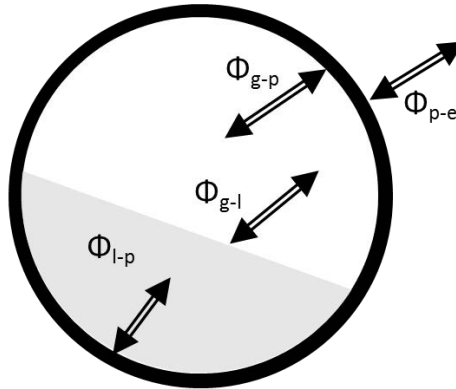


Figure 3.24: Les flux de chaleur dans un four tournant

Où les termes d'échange sont :

- Φ_{g-l} : l'échange entre le gaz et le lit solide¹
- Φ_{g-p} : l'échange entre le gaz et la paroi interne
- Φ_{p-e} : les pertes thermiques vers l'environnement
- Φ_{l-p} : l'échange entre le lit solide et la paroi interne

Ces flux seront globalement formés par conduction, convection et rayonnement, donc :

$$\begin{cases} \Phi_{g-l} = \Phi_{g-l}^{Co} + \Phi_{g-l}^{Ir} \\ \Phi_{g-p} = \Phi_{g-p}^{Co} + \Phi_{g-p}^{Ir} \\ \Phi_{l-p} = \Phi_{l-p}^C + \Phi_{l-p}^{Ir} \end{cases}$$

Système d'équations 3.18

¹ Il est clair que le lit est loin d'être homogène (billes à 800°C et granules entre 20 et 40°C).

Où les indices supérieurs Co, C et Ir signifient respectivement convection, conduction et rayonnement. De plus les échanges entre les différents composés du lit doivent être caractérisés séparément, il y aura donc trois flux au sein du lit, soit :

- Φ_{a-b} : l'échange entre le bois et l'acier
- Φ_{gi-a} : l'échange entre le gaz dans les interstices et l'acier
- Φ_{gi-b} : l'échange entre le gaz dans les interstices et le bois

qui seront également formés par conduction et rayonnement :

$$\begin{cases} \Phi_{a-b} = \Phi_{a-b}^C + \Phi_{a-b}^{Ir} \\ \Phi_{gi-a} = \Phi_{gi-a}^C + \Phi_{gi-a}^{Ir} \\ \Phi_{gi-b} = \Phi_{gi-b}^C + \Phi_{gi-b}^{Ir} \end{cases}$$

Système d'équations 3.19

Ces flux seront explicités dans la suite.

Conduction

Les flux par conduction écrits dans le système d'équations 3.18 et le système d'équations 3.19 sont Φ_{a-b}^C , Φ_{gi-a}^C , Φ_{gi-b}^C , Φ_{l-p}^C . Ces flux sont essentiels parce qu'ils vont déterminer de façon prépondérante la courbe de température du bois à l'intérieur du réacteur. Un problème se pose : en ce qui concerne les 3 premiers flux (Φ_{a-b}^C , Φ_{gi-a}^C , Φ_{gi-b}^C), il n'existe pas de corrélations qui permettent le calcul de ces termes pour des fours rotatifs, parce qu'il n'y a pas de modèles à la connaissance de l'auteur pour représenter des fours rotatifs avec deux espèces solides à températures différentes à l'intérieur du lit. Par conséquent, nous nous proposons de développer une méthode pour calculer ces flux. En général, il est possible d'écrire ces flux comme :

$$\Phi_{j-i}^C = H_{j-i}^C (T_j - T_i) \text{ avec } j, i \in \{a, b, gi\}$$

Équation 3.20

Pour le calcul de H^C , le coefficient de transfert par conduction entre l'acier et le bois utilisé pour la validation des modèles RPAS, la méthode a été décrite brièvement dans l'introduction à ce paragraphe. Cependant, ce coefficient tient compte seulement de l'échange dans un réacteur sous vide, autrement dit, en l'absence de gaz entre les particules solides du lit. Pour tenir compte de la conduction par le gaz, il est possible de se référer à de nombreuses relations qui existent pour le transfert de chaleur entre un gaz et une sphère [153–156], mais il n'existe pas d'accord général dans

la littérature pour la conductivité équivalente d'un lit de particules. Cependant, pour une particule isolée stationnaire dans un fluide infinie, il est bien connu que l'équation de conduction de chaleur se réduit à [154]:

$$Nu = \frac{h_{gi-a,b}^c r}{k_{c,gi}} = 2$$

Équation 3.21

En ce qui concerne le gaz présent dans les interstices, il se trouve dans des conditions de mouvement très limitées, qui permet l'utilisation d'une relation comme l'équation 3.21.

Pour le calcul du flux de chaleur li-paroi Φ_{l-p}^c est quant à elle proche de celle utilisée pour le terme Φ_{a-b}^c , car les corrélations de la littérature supposent que la température à l'intérieur du lit est uniforme, hypothèse irréaliste dans le cas présent. Donc pour calculer H_{l-p}^c nous avons eu recours à la même technique utilisée pour le calcul des H_{a-b}^c , soit par le biais du DEM, en fixant les températures de l'acier et du bois à $T=25^\circ\text{C}$ et celle de la paroi à $T_p=800^\circ\text{C}$.

Convection

Les deux flux convectifs intervenant dans la section du four tournant (Φ_{g-l}^{Co} , Φ_{g-p}^{Co}) sont des flux de convection forcée dus aux matières volatiles produites (auxquels peut s'ajouter le gaz de balayage si présent). Leur expression générale est présentée

$$\Phi_{g-i}^{Co} = h_{g-i}^{Co} A_{g-i} (T_g - T_i) \text{ avec } i \in \{l, p\}$$

Équation 3.22

Où h_{g-i}^{Co} est le coefficient d'échange convectif (en $\text{W/m}^2\text{K}$) entre le lit et le gaz ($i=l$) ou entre le gaz et la paroi ($i=p$), et A_{g-i} est la surface d'échange. Ce coefficient est défini de la manière suivante :

$$Nu_{g-i} = \frac{h_{g-i}^{Co} D_h}{k_{c,g}}$$

Équation 3.23

où D_h est le diamètre hydraulique dont l'expression en fonction du rayon et de l'angle au repos dynamique β , proposée par Tscheng et Watkinson [157] dans le cas d'un four tournant, est présentée dans l'équation 3.31

$$D_h = R \left(\frac{2\pi - \beta + \sin\beta}{\pi - \frac{\beta}{2} + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)} \right)$$

Équation 3.24

Les corrélations de Nu en fonction de Re et de Pr seront présentées ci-dessous.

Transferts gaz-paroi

Parmi les corrélations établies, les plus fréquemment utilisées ont été proposées par Tscheng et Watkinson [157] et par Gorog et al. [158]. Elles sont présentées dans le système d'équations 3.25 comme (a) et (b) respectivement.

$$\begin{cases} \text{Nu}_{g-p} = 1.54 \text{Re}^{0.535} \left(\frac{\rho_g \omega D_h^2}{\mu_g} \right)^{-0.292} & (a) \\ \text{Nu}_{g-p} = 0.036 \text{Re}^{0.8} \text{Pr}^{0.33} \left(\frac{D}{L} \right)^{0.055} & (b) \end{cases}$$

Système d'équations 3.25

Avec Pr le nombre de Prandtl, défini comme $\mu_g c_{p,g} / k_g$ et Re le nombre de Reynolds défini comme $\rho_g v_g D_h / \mu_g$. Il faut noter que ces corrélations ont été établies pour des nombres de Re élevés, correspondant à des écoulements de gaz turbulents. Seghir-Ouali et al. [159] ont développé une corrélation adaptée à des écoulements laminaires :

$$\text{Nu}_{g-p} = 0.01963 \text{Re}^{0.9285} + 8.5101 * 10^{-6} \left(\frac{\rho_g \omega D_h^2}{\mu_g} \right)^{1.4513}$$

Équation 3.26

Cette corrélation a été validée pour des nombres Re compris entre 0 et $3.0 * 10^4$ et pour des rapport $\rho_g \omega D_h^2 / \mu_g$ compris entre $1.6 * 10^3$ et $2.77 * 10^5$. C'est cette dernière corrélation qui sera utilisée, les conditions pour lesquelles elle a été établie étant les plus proches des nôtres (Re de l'ordre de 10^3).

Transferts gaz-solide

Les corrélations les plus couramment employées pour évaluer le coefficient de transfert convectif gaz-solide ont également été établies par Tscheng et Watkinson [157] et par Gorog et al. [158]. L'équation 3.27, proposée par Tscheng et Watkinson, a été établie dans un domaine couvrant les régimes d'écoulement laminaire et turbulent. La corrélation dimensionnelle empirique proposée par Gorog et al. (équation 3.28) permet directement le calcul du coefficient de transfert gaz-solide et a été établie pour des nombres de Re situés entre $2 \cdot 10^5$ et $5 \cdot 10^5$.

$$Nu_{g-p} = 0.46 Re^{0.535} \left(\frac{\rho_g \omega D_h^2}{\mu_g} \right)^{0.104} \left(\frac{H_z}{100} \right)^{-0.341}$$

Équation 3.27

$$h_{g-p}^{Co} = 0.4 \left(\frac{\dot{m}_g}{S_g} \right)^{0.62}$$

Équation 3.28

Où \dot{m}_g est le débit massique de gaz (en kg/h). L'intérêt de ces relations réside principalement dans le fait qu'elles ont été développées spécifiquement pour représenter le comportement des fours tournants. L'utilisation de la relation de Tscheng et Watkinson semble particulièrement faire consensus lors de l'élaboration de modèles de fours tournants à une dimension [160]

Rayonnement

Pour l'étude du rayonnement, nous nous inspirons fortement du travail de thèse de Descoins [20]. Le détail des équations se trouve en Annexe N

Les propriétés des particules

Les modèles pour la conductivité du bois et pour sa capacité spécifique ont été repris des travaux de Christodoulou et coll. [5]. La conductivité thermique effective de la matrice solide lors de la pyrolyse est calculée à partir des corrélations de Thunman et Leckner [161].

$$\begin{cases}
k_{c,bois} = \frac{k_{c,bois}^m + k_{c,bois}^M}{2} & (a) \\
k_{c,bois}^m = \omega_s k_{c,s} + \frac{\omega_g}{[\omega_g(k_{c,g} + k_{rad}) + \omega_s k_{c,s}]} & (b) \\
k_{c,bois}^M = \left[\frac{\omega_s}{k_{c,s}} + \frac{\omega_g}{(\omega_s k_{c,g} + \omega_g(k_{c,g} + k_{rad}))} \right]^{-1} & (c)
\end{cases}$$

Système d'équations 3.29

Cependant, contrairement au modèle développé par Thunman et Leckner [161], nous ne considérons pas de porosité différente entre le charbon et la biomasse, nous considérons une porosité globale de la matrice solide ε_g qui est calculée par le système d'équations 3.31, b. La corrélation utilisée pour les gaz (système d'équations 3.31, a) est issue des travaux de Larfeldt et al. [162]. Pour les fibres de bois, la conductivité thermique intrinsèque choisie est celle de [163]. Celle du charbon correspond à celle du carbone amorphe étant donné que le charbon est composé majoritairement de carbone. De même, nous n'utilisons pas la même corrélation pour la conductivité thermique radiative au sein des pores de la matrice solide.

$$\begin{cases}
k_{c,fiber} = 0.43 \frac{W}{mK} & (a) \\
k_{c,char} = 1.47 + 0.011T [=] \frac{W}{mK} & (b) \\
k_{c,s} = \chi k_{c,char} + (1 - \chi) k_{c,fiber} [=] \frac{W}{mK} & (c)
\end{cases}$$

Système d'équations 3.30

Où χ est le rendement massique en charbon.

$$\begin{cases}
k_{c,g} = 0.009 + 5.6263 * 10^{-5}T & (a) \\
\varepsilon_g = 1 - \frac{\rho_{char}}{\rho_{char,int}} - \frac{\rho_b}{\rho_{b,int}}; \rho_{char,int} = 1950 \frac{kg}{m^3}, \rho_{b,int} = 1480 \frac{kg}{m^3} & (b) \\
\omega_s = 1 - \sqrt{\varepsilon_g} & (c) \\
\omega_g = 1 - \omega_s & (d) \\
k_{rad} = \frac{4}{(1 - \varepsilon_g)} \varepsilon \sigma d T^3 [=] \frac{W}{mK} & (e) \\
\rho_{bois} = \frac{m_{bois}}{V_{bois}} & (f)
\end{cases}$$

Système d'équations 3.31

La capacité calorifique du bois est calculée par la corrélation suivante tirée de [5]. Pour le charbon, nous avons choisi la corrélation de Gupta et al. [164].

$$\begin{cases} c_{p,b} = 3.93T + 107.1 [=] \frac{\text{J}}{\text{kgK}} & (a) \\ c_{p,\text{char}} = -0.0038T^2 + 5.98T - 795.8 [=] \frac{\text{J}}{\text{kgK}} & (b) \\ c_{p,s} = \chi c_{p,\text{char}} + (1 - \chi) c_{p,b} [=] \frac{\text{J}}{\text{kgK}} & (c) \end{cases}$$

Système d'équations 3.32

Toutes les propriétés sont reportées dans le tableau 3.6.

	Acier	Bois	Paroi	Gaz interstitiel	Gaz
ρ [=] kg/m ³	8000	Système d'équations 3.31 (f) 500 - 1140	8000	Équation J.1 ¹ 0.35 - 1.14	Équation J.1 ¹ 0.35 - 1.14
k_c [=] W/mK	25	Système d'équations 3.29 (a) 0.43 – 12.2	25	[165] ¹ 0.025 – 0.062	[165] ¹ 0.025 – 0.062
c_p [=] W/m ² K	500	Système d'équations 3.32 (c) 648 - 3930	500	[165] ¹ 1.08 – 1.35	[165] ¹ 1.08 – 1.35
H		0.2			
\dot{Q} [=] kg/hr	1060	50			
r	0.0125	0.0043			
ε	0.6	0.93	0.6	0.05	0.05
μ [=] kg/ms				[165] ¹ 1.85 10 ⁻⁵ – 4.12 10 ⁻⁵	[165] ¹ 1.85 10 ⁻⁵ – 4.12 10 ⁻⁵

Tableau 3.6: Propriétés de la simulation thermique

3.5.2.1 La réaction

Depuis des décennies, de nombreux modèles cinétiques ont été développés pour décrire la décomposition de la biomasse au cours de la pyrolyse. Les difficultés rencontrées lors de

¹ Calculé en considérant le gaz comme de l'azote

l'établissement de ces modèles sont dues à la nécessité de trouver un schéma et des paramètres cinétiques permettant de représenter avec une précision suffisante l'évolution de la perte de masse (ou du rendement) au cours du temps, quelle que soit la température de traitement. Les modèles globaux sont généralement les plus utilisés. Dans le cadre de cette thèse un modèle du type Shafizadeh et Chin [166] sera utilisé.

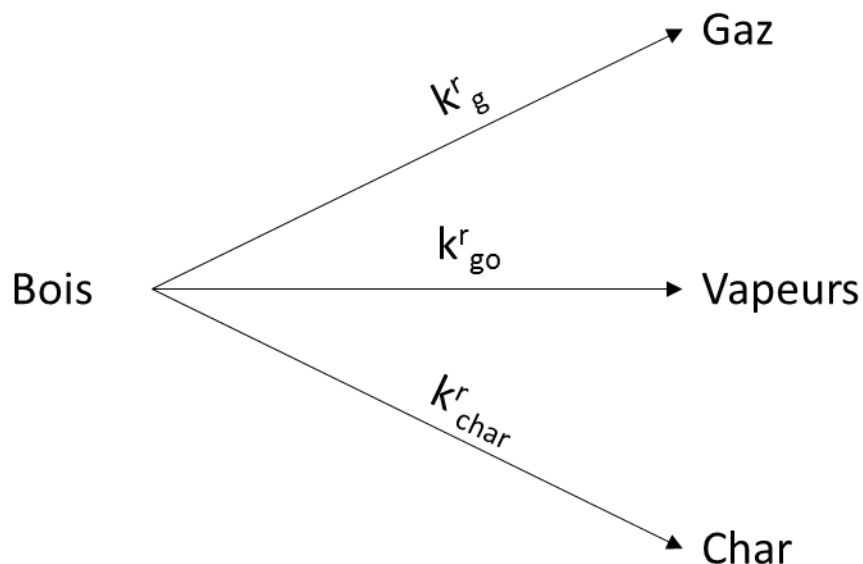


Figure 3.25: Le modèle de Shafizadeh et Chin

Le principal avantage de ce modèle est de prédire l'évolution de la répartition des produits en solide, goudrons et gaz permanents. Les constantes de réaction (facteur pré-exponentiel et énergie d'activation) et les enthalpies sont présentées dans le tableau 3.7. Il s'agit évidemment d'ordres de grandeur, vue la variabilité de la biomasse. Aussi l'évaporation de l'eau a été considérée dans le schéma réactif, vu qu'elle induit une consommation d'énergie importante.

	$A [=] \text{ s}^{-1}$	$E [=] \text{ J/mol}$	$\Delta H [=] \text{ J/kg}$
Bois \rightarrow Gaz	$1.11 \cdot 10^{11}$ [167]	177000 [167]	3525000 [168]
Bois \rightarrow Goudrons	$9.28 \cdot 10^9$ [167]	149100 [167]	-936000 [168]
Bois \rightarrow Char	$3.05 \cdot 10^7$ [167]	125000 [167]	-936000 [168]
Eau \rightarrow Vapeur d'eau	$5.13 \cdot 10^{10}$ [169]	88000 [169]	-2440000

Tableau 3.7: Paramètres cinétiques et thermique des réactions

3.5.2.2 Les hypothèses simplificatrices

Les hypothèses de ce modèle original sont nombreuses

- a) Le modèle développé est un modèle à une seule dimension de RPAS. Dans un volume de contrôle de longueur Δz , chaque phase est donc supposée isotherme. Ainsi, la température de la paroi T_p , la température de la phase gaz T_g et la température des deux solides, T_b et T_a , ne varient que suivant l'axe du four z . Une telle hypothèse implique donc que le mélange transversal de la charge soit efficace et qu'il n'y ait pas de phénomènes de ségrégation trop importants,
- b) Les débits volumiques de la phase solide entre les différents RPAS et le volume de chaque particule de la phase solide sont supposés constants,
- c) Les deux solides sont supposés sphériques, pas seulement pour le modèle dynamique (le DEM) mais aussi pour le calcul des facteurs d'échange entre phases (avec le gaz interstitiel, avec l'autre solide et avec la paroi), qui ont été calculés toujours par DEM,
- d) Le charbon ne subit aucune réaction et s'accumule à la surface de la particule (aucun phénomène d'attrition et de broyage n'est considéré),
- e) Les particules de bois-charbon sont considérées homogènes en température,
- f) Le bois et l'acier sont assimilés à des corps gris opaques pour lesquels la réflectivité et l'émissivité sont liées selon : $\varepsilon = 1 - \alpha$,
- g) Le réacteur est supposé adiabatique,
- h) L'échange radiatif entre bois et acier est supposé à facteur de forme égal à 1, soit

$$\Phi_{a-b}^{Ir} = \frac{\sigma(T_a^4 - T_b^4)}{\left(\frac{1}{\varepsilon_a S_a} + \frac{1 - \varepsilon_b}{\varepsilon_b S_b}\right)}$$

Équation 3.33

- i) Pour le rayonnement qui arrive aux particules par le ciel gazeux (soit Φ_l^{Ir} dans l'Annexe N), on considère que ce flux n'est échangé qu'avec l'acier, hypothèse considérée comme valide vu que la surface du lit est composée principalement par l'acier (82% de la surface du lit est représenté par l'acier, résultat obtenu par DEM).

3.5.2.3 Les bilans d'énergie

La figure 3.26 est une représentation schématique du modèle

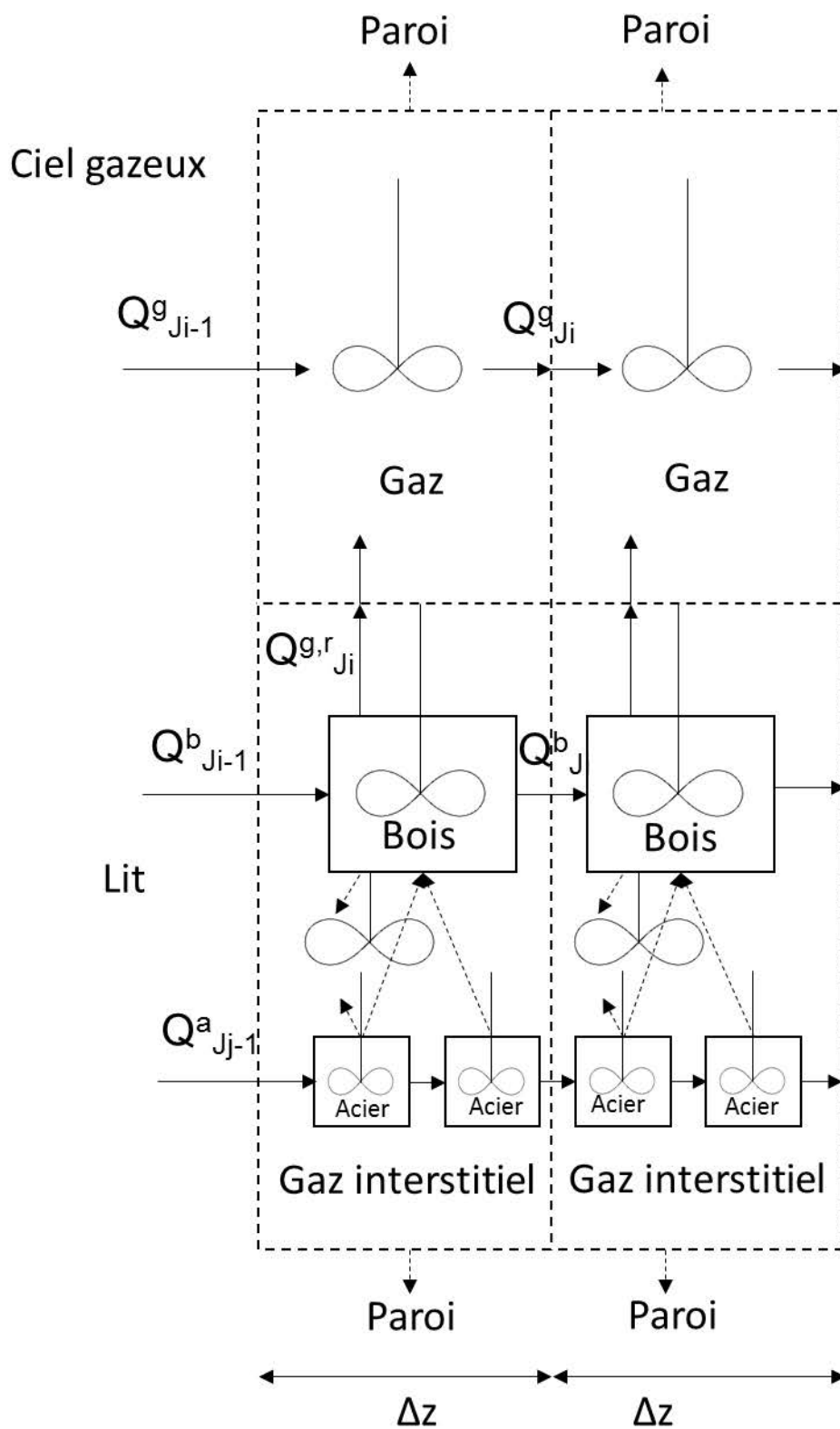


Figure 3.26: Représentation schématique du modèle, les flèches en pointillés représentent les flux de chaleur, les flèches pleines représentent les flux de masse

Comme nous l'avons vu au début de ce paragraphe, il y a 5 espèces qu'il faut considérer, mais en général, il est possible d'écrire une équation de bilan thermique pour une phase i générique dans le RPA générique J_i , pour une phase transitoire :

$$V_{J_i} \rho_{J_i}^i c_{p,J_i}^i \frac{dT_{J_i}^i}{dt} = \dot{Q}_{J_{i-1}}^i h_{J_{i-1}}^i - \dot{Q}_{J_i}^i h_{J_i}^i + \sum \Phi_{J_i,i} + \dot{\theta}_{J_i}^i$$

Équation 3.34

où V_{J_i} est le volume du RPA J_i , $\dot{Q}_{J_{i-1}}^i$ et $\dot{Q}_{J_i}^i$ sont respectivement les débits massiques qui sortent du RPA J_{i-1} et J_i , $h_{J_{i-1}}^i$ et $h_{J_i}^i$ sont respectivement les enthalpies des flux massiques qui sortent du RPA J_{i-1} et J_i et $\dot{\theta}_{J_{i-1}}^i$ est la flux de chaleur généré par réaction. Par la suite pour chaque phase i , l'enthalpie $h_{J_i}^i$ sera considérée comme égale à :

$$h_{J_i}^i = c_{p,J_i}^i (T_{J_i}^i - T_r^i)$$

Équation 3.35

Où T_r^i est la température de référence de l'enthalpie.

Acier

Si nous considérons l'équation 3.34 pour l'acier, nous obtenons :

$$\begin{cases} V_{J_j}^a \rho_{J_j}^a c_{p,J_j}^a \frac{dT_{J_j}^a}{dt} = \dot{Q}_{J_{j-1}}^a c_{p,J_j}^a (T_{J_{j-1}}^a - T_r^a) - \dot{Q}_{J_j}^a c_{p,J_j}^a (T_{J_j}^a - T_r^a) + \sum \Phi_{J_j,a} \\ T_{J_j}^a(t=0) = 800^\circ\text{C} \\ T_{J_0}^a = T_{In}^a = 800^\circ\text{C} \end{cases}$$

Système d'équations 3.36

La résolution de cette équation différentielle requiert une condition initiale et une caractérisation complète du flux en entrée au premier RPA (J_0). Dans cette équation, l'indice général est J_j , indicatif du RPA générique dans le modèle RPAS pour l'acier. $V_{J_j}^a$ est calculé en utilisant la condition sur le

temps de séjour dans les différents RPA, soit $V_{J_j}^a = \tau_{J_j}^a \dot{Q}_{J_{j-1}}^{a,v}$ où $\dot{Q}_{J_{j-1}}^{a,v}$ est le débit volumique de l'acier.

Les flux de chaleur échangés par les différents mécanismes sont définis dans le système d'équations 3.37.

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum \Phi_{J_j,a} = \Phi_{J_j,a-gi}^C + \Phi_{J_j,a-g}^{Co} + \Phi_{J_j,a-b}^C + \Phi_{J_j,a-b}^{Ir} + \Phi_{J_j,a-p}^C \\ \Phi_{J_i,a-gi}^C = H_{J_j,a-p}^c (T_{J_j,a} - T_{J_i,gi}) \\ \Phi_{J_j,a-g}^{Co} = h_{J_j,a-g}^{Co} S_{l,J_j,a-g} a_a (T_{J_j,a} - T_{J_i,g}) \\ \Phi_{J_j,l}^{Ir} = S_l \frac{\varepsilon_l}{(1 - \varepsilon_l)} (\sigma T_{J_j,a}^4 - J_l^r) \\ \Phi_{J_j,a-b}^C = H_{J_j,a-b}^c (T_{J_j,a} - T_{J_i,b}) \\ \Phi_{J_j,a-b}^{Ir} = \frac{\sigma (T_{J_j,a}^4 - T_{J_i,b}^4)}{\left(\frac{1}{\varepsilon_a S_a} + \frac{1 - \varepsilon_b}{\varepsilon_b S_b} \right)} \\ \Phi_{J_j,a-p}^C = H_{J_j,a-p}^c (T_{J_j,a} - T_{J_i,p}) \end{array} \right.$$

Système d'équations 3.37

Bois

Si nous considérons l'équation 3.34 pour le bois, nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{J_j}^b \rho_{J_i}^b c_{p,J_i}^b \frac{dT_{J_i}^b}{dt} = \dot{Q}_{J_{i-1}}^b c_{p,J_i}^b (T_{J_{i-1}}^b - T_r^b) - \dot{Q}_{J_i}^b c_{p,J_i}^b (T_{J_i}^b - T_r^b) - \dot{Q}_{J_i}^{g,r} c_{p,J_i}^g (T_{J_i}^b - T_r^b) + \sum \Phi_{J_i,b} + \dot{\theta}_{J_i}^b \\ T_{J_i}^b(t=0) = 25^\circ C \\ T_{J_0}^b = T_{In}^b = 25^\circ C \end{array} \right.$$

Système d'équations 3.38

Ici aussi, la résolution de cette équation différentielle requiert une condition initiale et une caractérisation complète du flux en entrée au premier RPA (J_0). Dans cette équation, l'indice général est J_i , indicatif du RPA générique dans le modèle RPAS pour le bois. $\dot{Q}_{J_i}^{g,r}$ et $\dot{\theta}_{J_i}^b$ représentent les termes de production massique et thermique dus à la réaction. Les flux échangés par les différents mécanismes sont définis dans le système d'équations 3.39. $V_{J_j}^b$ est calculé en utilisant la condition sur le temps de séjour dans les différents RPA, soit $V_{J_j}^b = \tau_{J_j}^b \dot{Q}_{J_{j-1}}^{b,v}$ où $\dot{Q}_{J_{j-1}}^{b,v}$ est le débit volumique du bois.

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum \Phi_{J_i,a} = \Phi_{J_i,a-g}^C + \Phi_{J_i,a-g}^{Co} + \Phi_{J_i,l}^{Ir} + \Phi_{J_i,a-b}^C + \Phi_{J_i,a-b}^{Ir} + \Phi_{J_i,a-p}^C \\ \dot{\theta}_{J_i}^b = \Delta H_{J_i}^T k_{J_i}^T m_{J_i}^b + \Delta H_{J_i}^{Char} k_{J_i}^{Char} m_{J_i}^b + \Delta H_{J_i}^{Gaz} k_{J_i}^{Gaz} m_{J_i}^b + \Delta H_{J_i}^{Eau} k_{J_i}^{Eau} m_{J_i}^{Eau} \\ \Phi_{J_i,b-g}^{Co} = h_{J_i,b-g}^{Co} S_{l,J_i,b-g} a_b (T_{J_i,b} - T_{J_i,g}) \\ \Phi_{J_i,b-gi}^C = H_{J_i,b-p}^c (T_{J_i,b} - T_{J_i,gi}) \\ \Phi_{J_i,b-a}^C = H_{J_{j-1},b-a}^c (T_{J_i,b} - T_{J_{j-1},a}) + H_{J_j,b-a}^c (T_{J_i,b} - T_{J_j,a}) \\ \Phi_{J_i,b-a}^{Ir} = -\Phi_{J_i,a-b}^{Ir} \\ \Phi_{J_i,b-p}^C = H_{J_i,b-p}^c (T_{J_i,b} - T_{J_i,p}) \end{array} \right.$$

Système d'équations 3.39

Gaz interstitiel

Si nous considérons l'équation 3.34 pour le gaz interstitiel, nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{J_j}^{gi} \rho_{J_j}^{gi} c_{p,J_j}^{gi} \frac{dT_{J_j}^{gi}}{dt} = \dot{Q}_{J_i}^{g,r} c_{p,J_i}^g (T_{J_i}^b - T_r^a) - \dot{Q}_{J_i}^{g,r} c_{p,J_i}^g (T_{J_i}^{gi} - T_r^b) + \sum \Phi_{J_j,gi} \\ T_{J_j}^{gi}(t=0) = 800^\circ C \\ T_{J_0}^{gi} = 800^\circ C \end{array} \right.$$

Système d'équations 3.40

De nouveau, la résolution de cette équation différentielle requiert une condition initiale et une caractérisation complète du flux en entrée au premier RPA (J_0). $V_{J_j}^b$ est le volume de gaz interstitiel pour les différents RPA J_i . En ce qui concerne p et c_p , leur calcul a été présenté plus haut. Les flux échangés sont définis dans le système d'équations 3.41

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum \Phi_{J_i,gi} = \Phi_{J_i,gi-a}^C + \Phi_{J_i,gi-b}^C \\ \Phi_{J_i,gi-a}^C = H_{J_{j-1},b-a}^c (T_{J_i,gi} - T_{J_{j-1},a}) + H_{J_j,b-a}^c (T_{J_i,gi} - T_{J_j,a}) \\ \Phi_{J_i,b-gi}^C = H_{J_i,a-p}^c (T_{J_i,b} - T_{J_i,gi}) \end{array} \right.$$

Système d'équations 3.41

Pour le gaz dans le lit, seuls les flux de chaleur par conduction sont considérés.

Ciel gazeux

Si nous considérons l'équation 3.34 pour le ciel gazeux, nous obtenons :

$$\begin{cases} V_{J_i}^g \rho_{J_i}^g c_{p,J_i}^g \frac{dT_{J_i}^g}{dt} = \dot{Q}_{J_{i-1}}^g c_{p,J_i}^g (T_{J_{i-1}}^g - T_{J_i}^g) + \dot{Q}_{J_i}^{g,r} c_{p,J_i}^g (T_{J_i}^{g,i} - T_{J_i}^g) - \dot{Q}_{J_i}^g c_{p,J_i}^g (T_{J_i}^g - T_{J_i}^g) + \sum \Phi_{J_i,g} \\ T_{J_i}^g(t=0) = 800^\circ\text{C} \\ T_{J_0}^g = 800^\circ\text{C} \\ \dot{Q}_{J_i}^g = \dot{Q}_{J_i}^{g,r} + \dot{Q}_{J_{i-1}}^g \end{cases}$$

Système d'équations 3.42

Les flux massiques de gaz en entrée sont $\dot{Q}_{J_i}^g$, soit le flux massique provenant du RPA J_{i-1} et $\dot{Q}_{J_i}^{g,r}$, soit les gaz produits par la réaction dans le lit. Les flux en entrée sont définis dans le système d'équations 3.43.

$$\begin{cases} \sum \Phi_{J_i,g} = \Phi_{J_i,g-b}^{Co} + \Phi_{J_i,g-a}^{Co} + \Phi_{J_i,g}^{Ir} + \Phi_{J_i,g-p}^{Co} \\ \Phi_{J_i,g-b}^{Co} = h_{J_i,b-g}^{Co} S_{l,J_i,b-g} a_b (T_{J_i,b} - T_{J_i,g}) \\ \Phi_{J_i,g-a}^{Co} = h_{J_i,b-g}^{Co} S_{l,J_i,a-g} a_a (T_{J_i,a} - T_{J_i,g}) \\ \Phi_{J_i,g}^{Ir} = -(\Phi_{J_i}^{Ir_l} + \Phi_{J_i}^{Ir_p}) \\ \Phi_{J_i,g-p}^{Co} = h_{J_i,b-g}^{Co} S_{pd,J_i,b-g} a_b (T_{J_i,b} - T_{J_i,g}) \end{cases}$$

Système d'équations 3.43

Paroi

Si nous considérons l'équation 3.34 pour la paroi, nous obtenons :

$$\begin{cases} V_{J_i} \rho_{J_i}^p c_{p,J_i}^p \frac{dT_{J_i}^p}{dt} = k_{c,parois} \frac{\partial^2 T_{J_i}^p}{\partial z^2} + \sum \Phi_{J_i,p} \\ T_{J_i}^p(t=0) = 800^\circ\text{C} \\ T_{J_i}^p(z=0) = 800^\circ\text{C} \\ \frac{\partial T_{J_i}^p}{\partial z}(z=L) = 0 \end{cases}$$

Système d'équations 3.44

Dans la première équation du système d'équations 3.60 figure un terme de conduction axiale dans la paroi. On suppose que la température de paroi correspondant à RPA du bois est homogène, mais que le flux transféré d'un RPA par conduction dans l'acier de la paroi peut être estimé en discrétisant la dérivée spatiale par un schéma centré (équation 3.45).

$$\frac{\partial^2 T^P}{\partial z^2} = \frac{T^P_{J_i-1} + T^P_{J_i+1} - 2T^P_{J_i}}{2\Delta z^2}$$

Équation 3.45

Les flux en entrée sont définis dans le système d'équations 3.46.

$$\begin{cases} \sum \Phi_{J_i,g} = \Phi^C_{J_i,p-b} + \Phi^C_{J_i,p-a} + \Phi^{Ir}_{J_i,p} + \Phi^{Co}_{J_i,p-g} \\ \Phi^{Co}_{J_i,p-b} = H^c_{J_i,p-a}(T_{J_i,p} - T_{J_i,b}) \\ \Phi^{Co}_{J_i,p-a} = H^c_{J_{j-1},p-a}(T_{J_{j-1},p} - T_{J_i,a}) + H^c_{J_j,p-a}(T_{J_j,p} - T_{J_i,a}) \\ \Phi^{Ir}_{J_i,p} = S_{pd} \frac{\varepsilon_p}{(1 - \varepsilon_p)} (\sigma T_p^4 - J_p^r) \\ \Phi^{Co}_{J_i,p-g} = h^{Co}_{J_i,p-g} S_{l,J_i,p-g} a_b (T_{J_i,p} - T_{J_i,g}) \end{cases}$$

Système d'équations 3.46

3.5.2.4 Les bilans de matière

Enfin, il faut expliciter les équations pour les bilans massiques, présenté dans système d'équations 3.47. Chaque équation correspond au bilan d'une espèce dans un RPA (accumulation= entrée – sortie + production)

$$\begin{cases} \frac{dm_{J_i}^b}{dt} = \dot{m}_{J_{i-1}}^b - \dot{m}_{J_i}^b - (k^r_{Char} m_{J_i}^b + k^r_{Goudrons} m_{J_i}^b + k^r_{Gaz} m_{J_i}^b); \dot{m}_{J_0}^b = \dot{m}_0^b, \dot{m}_{J_i}^b(t=0) = \dot{m}_0^b \\ \frac{dm_{J_i}^{Goudrons}}{dt} = -\dot{m}_{J_i}^{Goudrons} + k^r_{Goudrons} m_{J_i}^b; \dot{m}_{J_0}^{Goudrons} = 0, \dot{m}_{J_i}^{Goudrons}(t=0) = 0 \\ \frac{dm_{J_i}^{Gaz}}{dt} = -\dot{m}_{J_i}^{Gaz} + k^r_{Gaz} m_{J_i}^b; \dot{m}_{J_0}^{Gaz} = 0, \dot{m}_{J_i}^{Gaz}(t=0) = 0 \\ \frac{dm_{J_i}^{Char}}{dt} = \dot{m}_{J_{i-1}}^{Char} - \dot{m}_{J_i}^{Char} + k^r_{Char} m_{J_i}^b; \dot{m}_{J_0}^{Char} = 0, \dot{m}_{J_i}^{Char}(t=0) = 0 \\ \frac{dm_{J_i}^{Eau,l}}{dt} = \dot{m}_{J_{i-1}}^{Eau,l} - \dot{m}_{J_i}^{Eau,l} - k^r_{Eau} \dot{m}_{J_i}^{Eau,l}; \dot{m}_{J_0}^{Eau,l} = \dot{m}_0^{Eau,l}, \dot{m}_{J_i}^{Eau,l}(t=0) = \dot{m}_0^{Eau,l} \\ \frac{dm_{J_i}^{Eau,v}}{dt} = -\dot{m}_{J_i}^{Eau,v} - k^r_{Eau} \dot{m}_{J_i}^{Eau,l}; \dot{m}_{J_0}^{Eau,v} = 0, \dot{m}_{J_i}^{Eau,v}(t=0) = 0 \\ \dot{Q}_{J_i}^{g,r} = \dot{m}_{J_i}^{Eau,v} + \dot{m}_{J_i}^{Gaz} + \dot{m}_{J_i}^{Goudrons} \\ \dot{Q}_{J_i}^b = \dot{m}_{J_i}^b + \dot{m}_{J_i}^{Char} + \dot{m}_{J_i}^{Eau,l} \end{cases}$$

Système d'équations 3.47

Ce système d'équations est fortement lié aux équations thermiques :

- pour les termes réactifs (influence de la température sur la cinétique, influence de la thermicité des réactions sur le bilan d'énergie),
- pour les flux de matières circulant (influence de la température sur la production de volatils, influence du débit de volatils dans le bilan d'énergie)

Ce couplage requiert la résolution de ces équations en parallèle. Avec le système d'équations 3.47, le nombre d'équations à résoudre est $12J_{\text{bois}} - 1$, mais le système est fermé et il est possible de passer à la résolution du modèle.

3.5.3 Résultats et étude de sensibilité

Une analyse par temps caractéristiques est disponible dans l'Annexe K. Un exemple de résultat est donné sur la figure 3.27 pour les conditions envisagées par Sea Marconi.

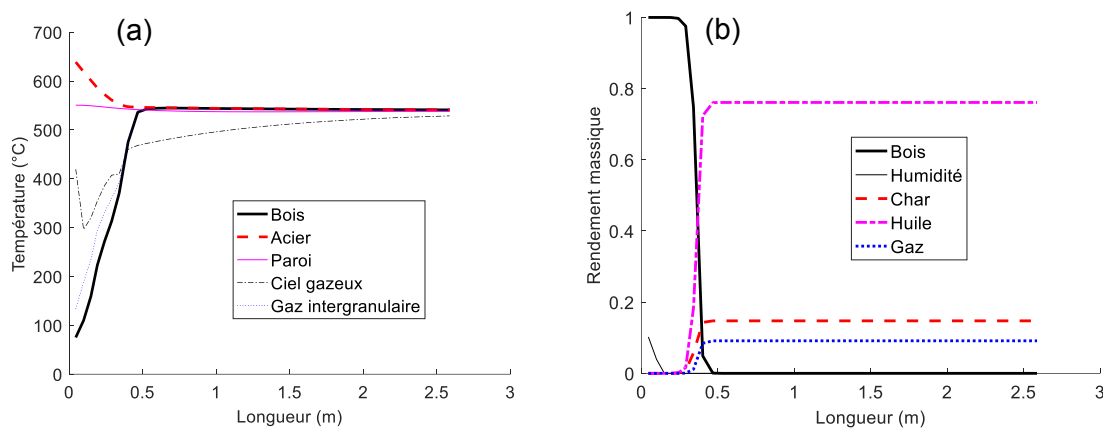


Figure 3.27 : Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=650^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits

On constate que la température des granulés augmente rapidement en début de réacteur pour se stabiliser à près de 550°C . Cela a pour conséquence une conversion totale du bois dans les 50 premiers centimètres.

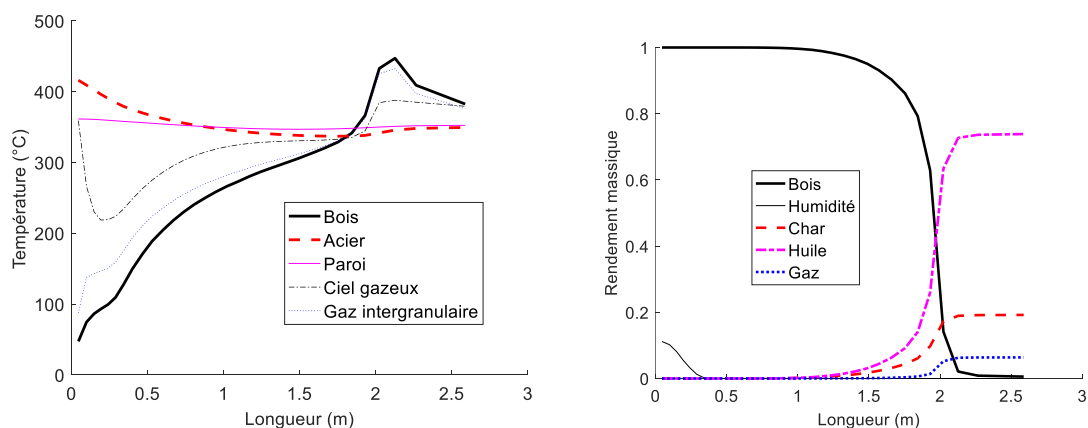


Figure 3.28 : Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T = 420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T = 20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits

Sur la figure 3.28, on constate que le réacteur de pyrolyse serait capable de pyrolyser les granulés, même si la température des billes métalliques entrantes n'était que de 420°C . Dans ce cas, on constate que l'exothermicité de la réaction de formation de charbon provoque un pic de température en fin de réacteur. C'est dans ces conditions que les paramètres opératoires et les grandeurs physico-chimiques ont le plus d'impact sur les résultats. A titre d'exemple, une augmentation de l'humidité de la biomasse de 10% à 15% aurait pour conséquence une très mauvaise conversion (cf. figure 3.29).

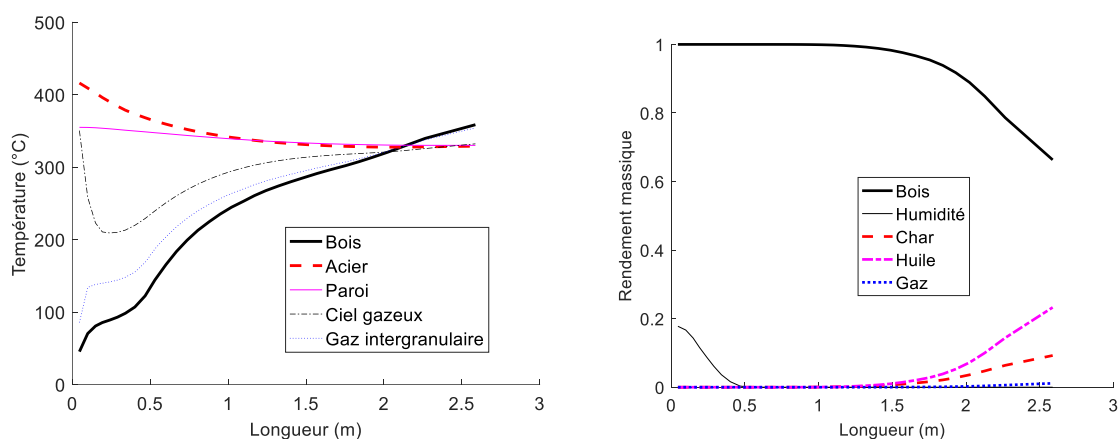


Figure 3.29 : Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T = 420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T = 20^{\circ}\text{C}$ et 15% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits

Si notre modèle surestime la cinétique de transfert de chaleur, nous risquerions également d'avoir cette mauvaise surprise. Une étude de sensibilité est présentée en Annexe afin de préciser l'impact de différentes variables. On constate que le transfert de chaleur vers le bois a lieu principalement

par rayonnement et de manière secondaire par conduction entre billes et bois par le biais du gaz intergranulaire. Par contre, la conduction directe entre les solides (billes, bois, paroi) est négligeable.

Pour éviter le risque d'une conversion incomplète, il est nécessaire de travailler avec des billes métalliques chauffées à plus de 500°C. Pour une température de 650°C (figure 3.27), le réacteur pilote semble surdimensionné pour le traitement de granulés très peu humides. Cependant, ce réacteur est conçu pour pouvoir traiter des plaquettes forestières qui sont plus humides (de 15 à 30%) et surtout plus grosses. Cet effet de taille n'est pas pris en compte dans le modèle développé, puisqu'il considère que les particules sont pyrolysées à une température homogène. Cela peut être considéré correct pour des granulés (faible nombre de Biot), mais ce n'est plus le cas pour des plaquettes forestières (nombre de Biot élevé). Cette résistance au transfert de chaleur interne a pour conséquence d'augmenter le temps de conversion total des particules de bois et - par conséquent - la longueur de réacteur nécessaire.

Pour d'autres simulations, il est possible de consulter l'Annexe O

4. Couplage CFD-DEM pour les écoulements fluide-solide

Dans le chapitre 1, nous avons donné une brève description du réacteur d'oxydation partielle du char SEA Marconi, en analysant les principales criticités liées au modèle. Il s'agit d'un réacteur très compliqué et innovant, qui met en contact intime la phase solide (biochar et billes d'acier « froides ») et le gaz. Vu la complexité du réacteur, il n'y a pas de modèles simples à même de traiter ce système ; cela rend nécessaire l'application de modèles compliqués, comme par exemple le CFD-DEM. Ce type de modèle est capable de prendre en compte toutes les caractéristiques des particules et du gaz, en obtenant une dynamique représentative du système analysé et une analyse des transports de chaleur et de matière avec le traitement de la réaction. Dans le chapitre 2 nous avons montré le fonctionnement du modèle CFD-DEM, avec ses difficultés d'application et ses potentialités. En plus, nous avons vu que dans les solveurs inclus dans la suite CFDEM, il n'y en a pas qui puissent traiter la réaction et l'échange de matière, donc ce solveur devra être codé. Le premier point du chapitre 4 permettra de donner un aperçu sur le modèle CFD-DEM qui pourrait être implémenté dans un solveur pour la simulation du réacteur d'oxydation partielle considéré. L'approche mise en œuvre sera validée en simulant le comportement de deux types de lit fluidisé et ses capacités seront évaluées dans le cas d'un rhéomètre granulaire.

4.1 Le réacteur d'oxydation partielle du char

Le réacteur d'oxydation partielle du char a été déjà décrit partiellement dans le chapitre 1 (§ 1.4.1.2). Il s'agit d'un dispositif du type vis sans fin avec une atmosphère à contenu réduit d'oxygène pour éviter l'oxydation complète du charbon. L'axe de la vis forme un angle de 15° avec le plan horizontal, cette pente permet de relever les billes d'acier, qui sont réalimentées dans le réacteur de pyrolyse vu dans le chapitre 3. L'agent oxydant utilisé est l'air, qui est injecté directement dans le lit solide de char et billes d'acier sous une pale par des fentes ouvertes de manière périodique. Dans le lit solide, l'oxydation partielle du char produit la chaleur nécessaire pour réchauffer les billes d'acier à la température souhaitée. Une partie du char est aussi entraînée par l'air injecté et sort avec le gaz d'oxydation partielle (figure 4.1).

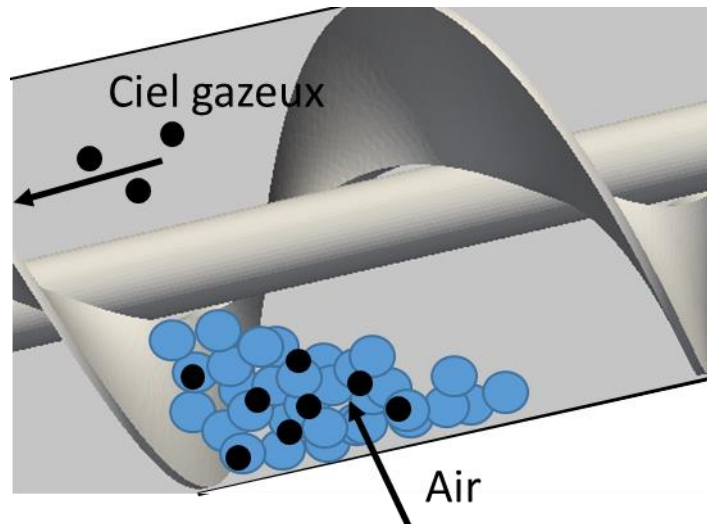


Figure 4.1: Schématisation du comportement des solides et du gaz dans le réacteur d'oxydation partielle du char

Il s'agit donc d'un réacteur compliqué, avec les caractéristiques suivantes :

- 1) Echange de chaleur par convection (gaz-solide) et par conduction (solide-solide) à l'intérieur des couches,
- 2) Hydrodynamique complexe due à la présence de lit solide sur les orifices et à une géométrie non conventionnelle,
- 3) Ecoulement granulaires différents (progression du lit de solide sur la pale, mais aussi élutriation de fines particules par le gaz sortant).
- 4) Réactions d'oxydation du solide (charbon) et des gaz (CO , H_2 ...),
- 5) Particules très grosses (acier) en mélange avec des particules très fines (char pulvérulent),
- 6) Une géométrie tournante et non symétrique,
- 7) Cycle d'ouverture et fermeture des injections d'air.

Les points 1, 2 et 3 peuvent être gérés par un solveur du type CFD-DEM, ainsi que le point 4, même s'il faut coder un solveur qui puisse traiter l'échange de masse entre solide et fluide. Le point 5 constitue un problème pour la construction du maillage, vu qu'un solveur « un-resolved » demande un maillage qui soit plus grand que la plus grosse particule et un solveur « resolved » demande un maillage qui soit plus petit que la plus petite particule, comme on l'a vu dans le chapitre 2. Les points 6 et 7 rendent le réacteur non stationnaire et non simplifiable.

Tous ces aspects contribuent à rendre le réacteur difficile à modéliser dans un temps acceptable et en plus il faut nécessairement coder des nouvelles fonctions dans les solveurs bases de la suite CFDEM. Malgré l'impossibilité d'utiliser ce couplage CFD-DEM pour simuler le réacteur d'oxydation de Sea Marconi, il nous est apparu intéressant dans une perspective plus large de valider

expérimentalement le code développé par nos soins et de l'utiliser pour simuler des expériences originales dans un cas liquide-solide.

Pour la validation expérimentale, on utilisera des données présentes dans la littérature sur le comportement hydrodynamique des lits fluidisés. Des simulations seront réalisées sur un système typiquement utilisé pour évaluer la viscosité de mélanges granulaires lubrifiées par un liquide : un rhéomètre à pales.

4.2 Validation expérimentale

4.2.1 Lit fluidisé dense

Ce nouveau solveur CFD-DEM nécessite une validation. Le premier essai concerne des simulations sur un système lit fixe ou fluidisé avec injection de gaz par le bas à des vitesses variables (Figure 4.2).

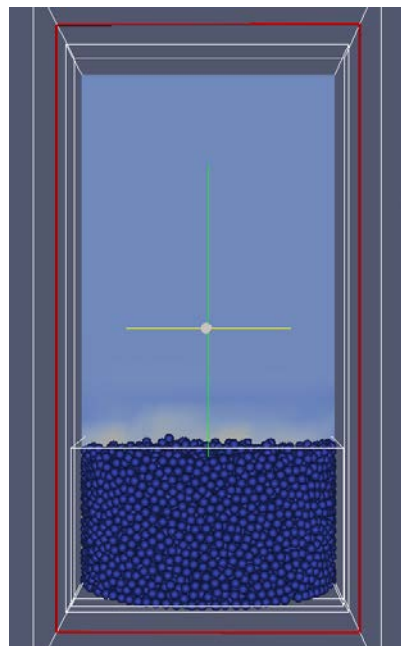


Figure 4.2: Lit fixe

Le but est de chercher à reproduire les pertes de charge décrites par la loi d'Ergun (équation 4.1) et de retrouver la vitesse minimale de fluidisation :

$$\frac{\Delta p}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon_g)^2}{\varepsilon_g^3} \frac{\mu U_g}{d_p} + 1.75 \frac{(1 - \varepsilon_g)}{\varepsilon_g^3} \frac{\rho U_g^2}{d_p}$$

Équation 4.1

Les solides utilisés dans les simulations ont été les suivants :

- type A : des particules de 1mm de diamètre, avec une masse volumique de 200 kg/m³.
- type B : des particules de 1mm de diamètre, avec une masse volumique de 8000 kg/m³.

Ces choix permettent de valider le bon fonctionnement du solveur soit en régime laminaire, soit en régime transitionnel. Des simulations ont été faites avec des vitesses supérieures à la vitesse minimale de fluidisation.

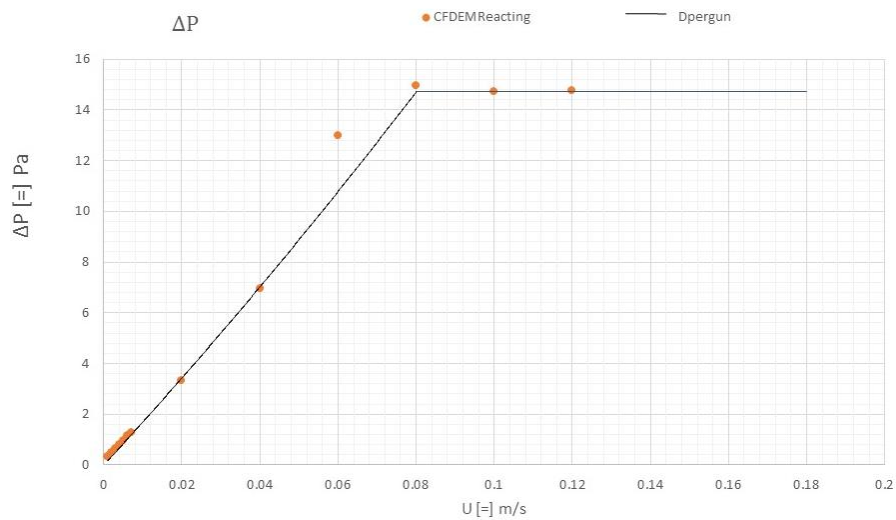


Figure 4.3: Pertes de charge, simulations (points) Ergun (ligne), $\rho_s = 200 \text{ kg/m}^3$, $d_s = 1 \text{ mm}$

Beaucoup de simulations ont été faites pour assurer le bon fonctionnement du cycle de résolution. La figure 4.3 montre que le solveur calcule une perte de charge très proche de la perte de charge calculée avec l'équation d'Ergun (lit fixe) et décrit même la fluidisation.

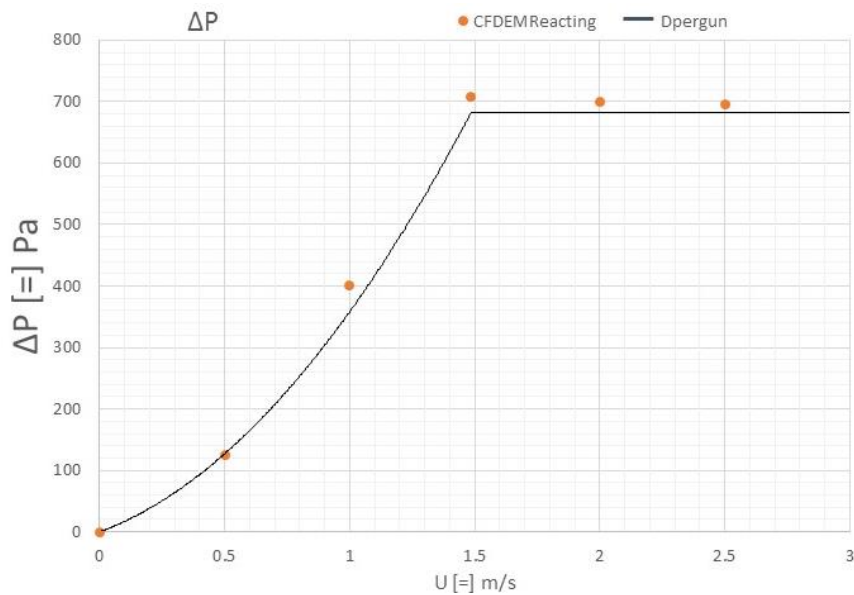


Figure 4.4: Pertes de charge, simulations (points), Ergun (ligne), $\rho_s = 8000 \text{ Kg/m}^3$, $d_s = 1 \text{ mm}$

Pour les résultats de la figure 4.4, le système est en régime transitionnel, c'est-à-dire que les nombres de Reynolds du système correspondent à des conditions intermédiaires entre un régime inertiel et un régime laminaire, un champ de Reynolds qui est souvent très difficile à simuler. Plusieurs simulations ont été réalisées, soit pour le régime lit fixe, soit pour le lit fluidisé. La comparaison avec la relation d'Ergun est probante.

4.2.2 Lit fluidisé jaillissant

Pour vraiment prouver la validité du logiciel développé, il faut trouver des cas simples et complets, pour limiter le nombre des calculs et pour avoir une définition claire du fonctionnement du solveur : un exemple est le cas du lit fluidisé jaillissant pseudo-bidimensionnel (spouted bed) étudié par Link et al. [170] et van Buijtenen et al. [171] expérimentalement et repris par Goniva et al. [85] pour leurs simulations CFD-DEM. Un lit fluidisé jaillissant est un système qui est conçu pour traiter du solide difficilement fluidisable, en concentrant l'injection de gaz sur une petite section. Ce cas constitue un exemple parfait pour valider des solveurs CFD-DEM en étant simple et complet. Les auteurs réalisent des mesures à travers la méthode PEPT (Positron Emission Particle Tracking), en obtenant des données moyennes du flux solide et des vitesses. La Figure 4.5 montre la géométrie du système, ainsi que les écoulements des deux phases. Le gaz est injecté par A et il fluidise les particules qui se trouvent au-dessus. Cette injection de gaz cause un mouvement de circulation du solide.

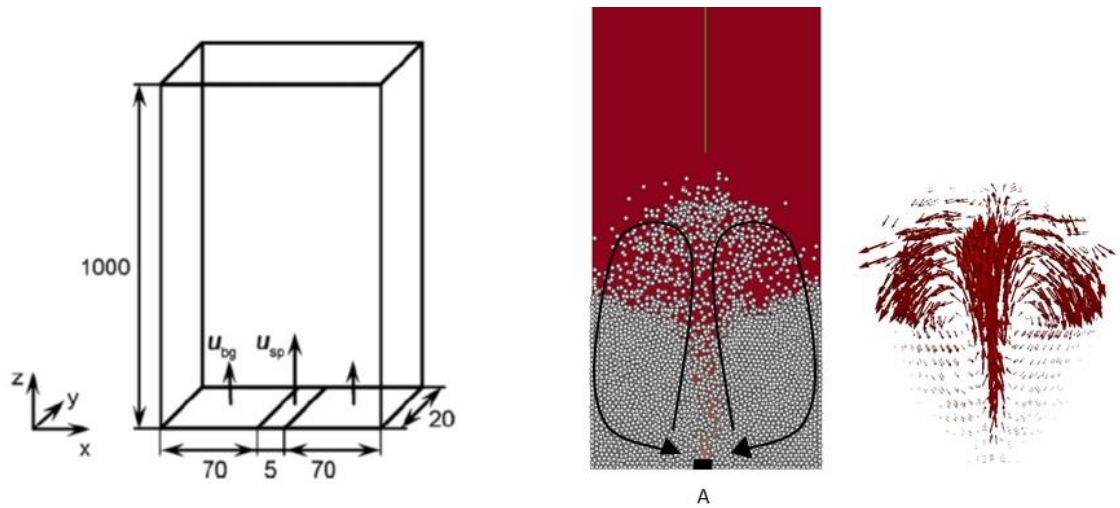


Figure 4.5: Géométrie du lit fluidisé jaillissant, dimensions en millimètres (gauche), positions et vitesses des particules (droite).

Les équations principales du modèle utilisé ont été présentées dans le chapitre 2. L'échange de quantité de mouvement entre les deux phases est calculé selon la relation de Koch et Hill ([132]), établie sur la base de simulations du type Lattice-Boltzmann. En Tableau 4.1 sont indiqués les paramètres physiques utilisés dans la simulation.

Young modulus, E , N/m^2	10^7
Poisson ratio, ν	0.45
Coefficient de restitution, ε	0.97
Coefficient de frottement particule-particule, μ_{pp}	0.1
Coefficient de frottement particule-paroi, μ_{pw}	0.3
Coefficient de frottement tournant particule-particule, μ_{pp}^r	0.125
Coefficient de frottement tournant particule-paroi, μ_{pw}^r	0.125-0.15
Masse volumique du solide, ρ_s , kg/m^3	2505
Rayon des particules, r , m	0.0015
Nombre de particules, N	12000
Viscosité gaz, μ_g , kg/ms	$1.8 \cdot 10^{-5}$
Masse volumique gaz, ρ_g , kg/m^3	1.1

Tableau 4.1: Paramètres physiques de la simulation

Les Figure 4.6 -Figure 4.7 représentent la vitesse axiale moyennée sur le temps à une hauteur de 0.05 m et 0.1 m.

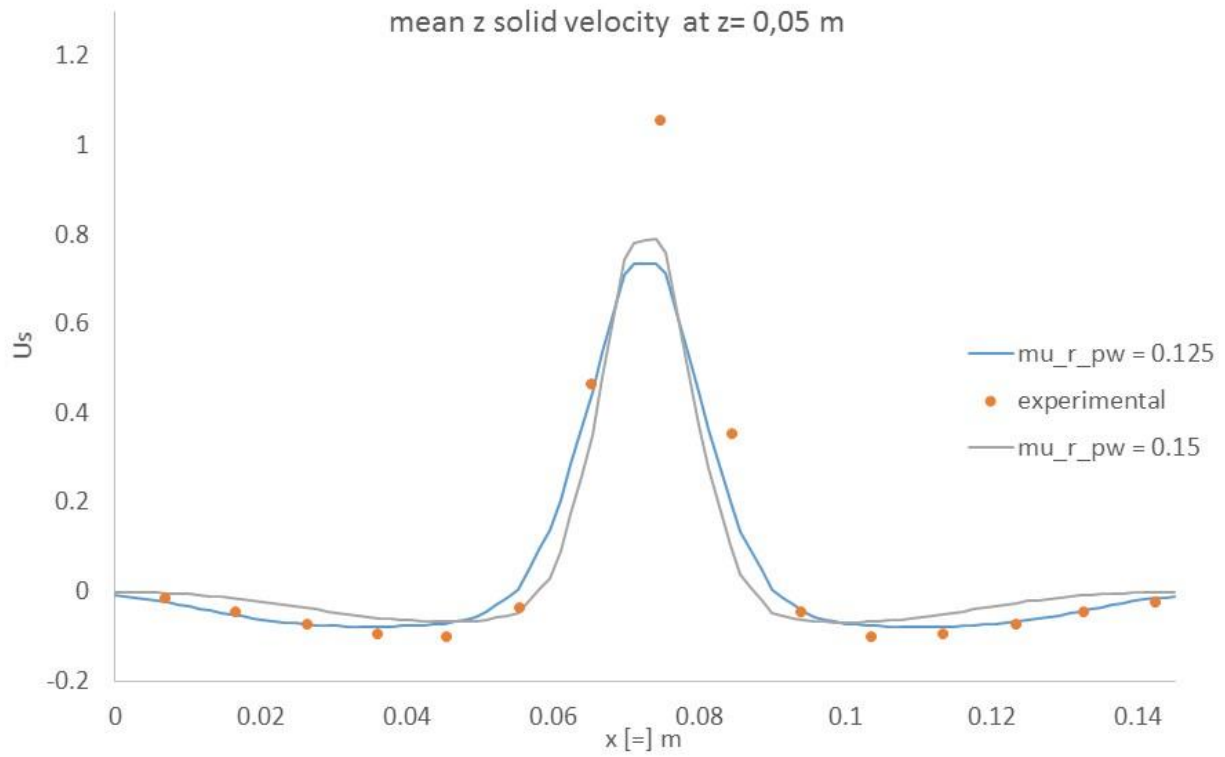


Figure 4.6: Vitesse axiale moyenne des particules solides à une hauteur de 0.05 m

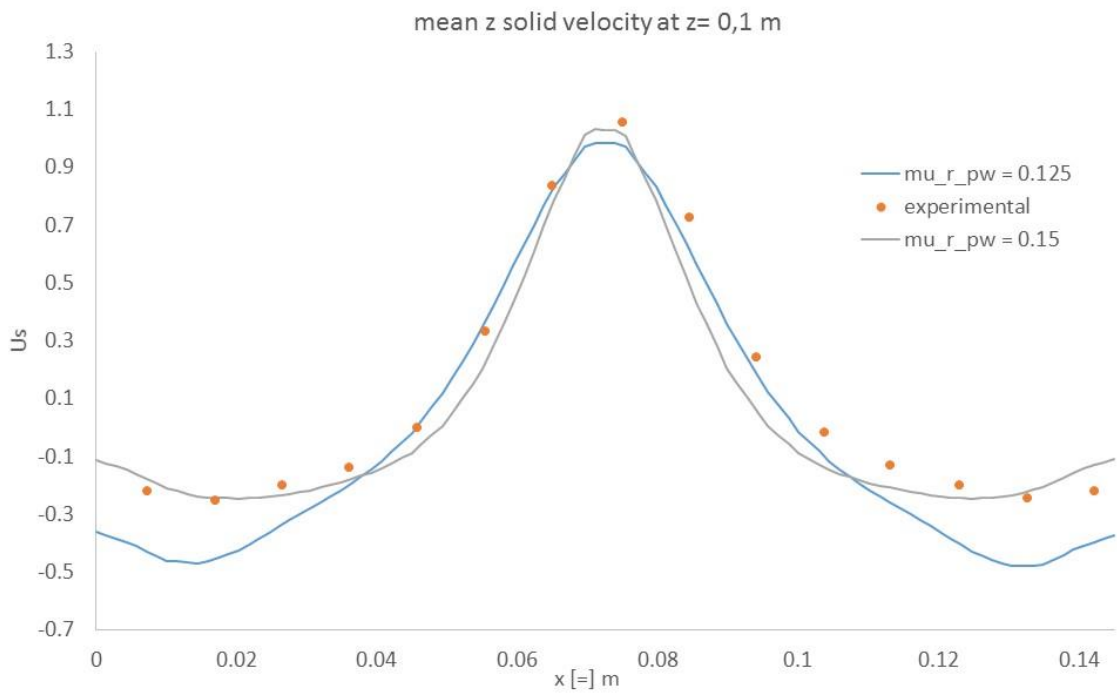


Figure 4.7: Vitesse axiale moyenne des particules solides à une hauteur de 0.1 m

4.3 Simulations d'un rhéomètre avec un mélange granulaire

Nous nous proposons de simuler un rhéomètre granulaire, consistant en un rotor et un stator tous deux munis de pales, l'interstice étant rempli d'un fluide (de l'eau et des liquides plus visqueux) et de grains (billes de verre de 1 mm de diamètre). Une description plus précise est donnée plus loin.

4.3.1 Géométrie du système

Le rhéomètre simulé et utilisé dans les essais expérimentaux est montré dans la figure 4.8, et les propriétés géométriques sont indiquées dans le tableau 4.1. Le rhéomètre a un rotor interne équipé de six lames d'épaisseur w , de largeur a , de hauteur c , avec un angle entre lames α et une distance axiale du fond de la cuve e . Cette configuration permet un meilleur transfert de cisaillement vers la couche radiale du système à étudier, c'est pourquoi cette configuration est toujours préférée pour les matériaux granulaires en comparaison avec d'autres géométries souvent utilisées en rhéologie (comme un cylindre de Couette). En fait le rhéomètre à pales entraîne une partie du mélange granulaire à l'intérieur des lames internes (en bleu dans la figure 4.8) permettant ainsi la transmission de cisaillement entre les grains.

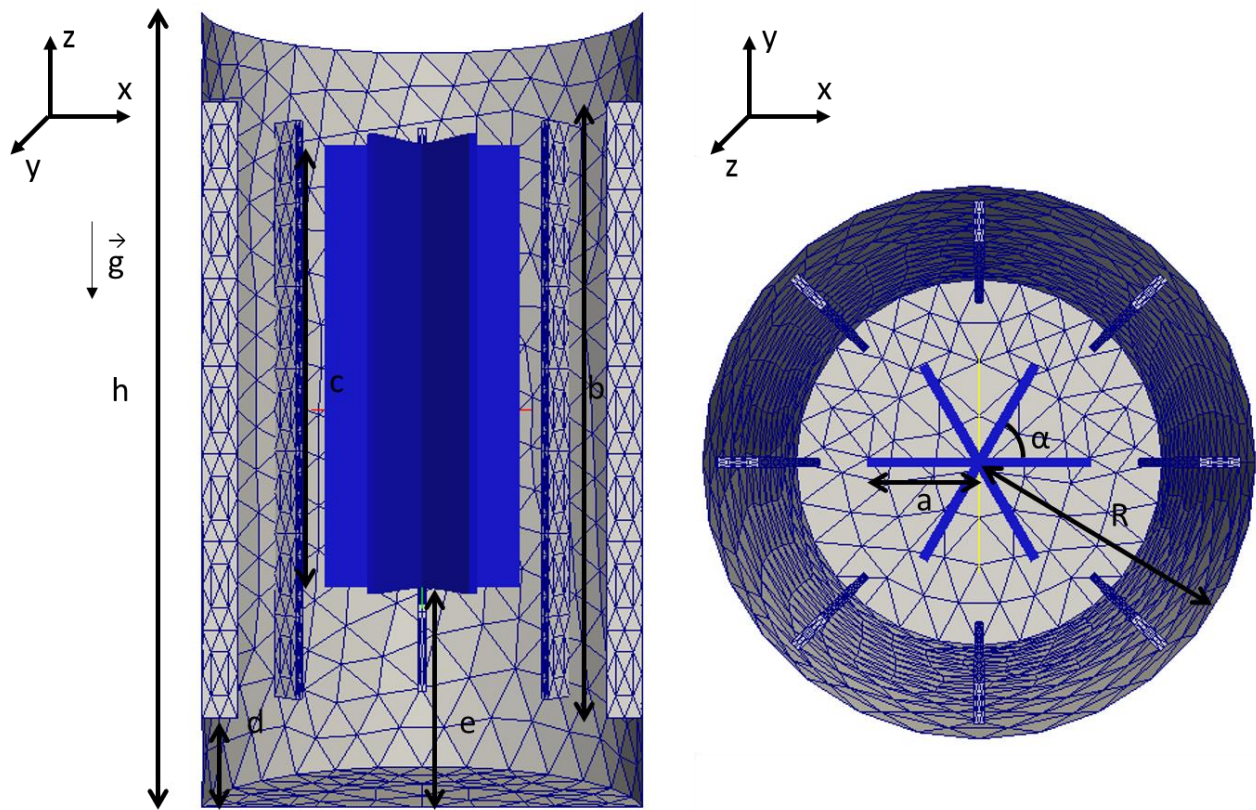


Figure 4.8: Géométrie de simulation pour la contrepartie DEM

α [=] °	60°	e [=] m	0.025
a [=] m	0.011	f [=] m	0.004
b [=] m	0.07	h [=] m	0.09
c [=] m	0.05	R [=] m	0.025
d [=] m	0.01	w [=] m	0.001

Tableau 4.1: Propriétés Géométrique

Le rhéomètre est également équipé de 8 pales radiales d'épaisseur w , de largeur f , de hauteur b , perpendiculaires à la surface du cylindre et avec une distance axiale du fond de la bouteille d . Ces pales radiales sont installées pour la même raison que les pales du rotor interne : il s'agit d'éviter le glissement entre le mélange granulaire et la paroi externe, phénomène qui réduirait la contrainte de cisaillement effective appliquée au système granulaire. En plus dans le système expérimental et dans la simulation, il est possible d'ajouter une vibration sur la cuve externe, pour vérifier son influence sur les effets de lubrification.

4.3.2 DEM

La partie DEM utilisée dans ce travail est un modèle basé sur le travail de Cundall et Strack [172]. Le code DEM utilisé dans ce travail est le logiciel open source LIGGGHTS [173,174], mais les équations sont un peu différentes de celles utilisées dans les chapitres 2 et 3. Les équations suivantes sont alors intégrées pour décrire les mouvements des particules en fonction du temps

$$\begin{cases} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_c} (\mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^t) + \sum_{k=1}^{N_l} \mathbf{F}_{ik}^l + m_i \mathbf{g} \\ I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_c} (\mathbf{r}_i \wedge \mathbf{F}_{ij}^t - \mathbf{M}_\mu) + \sum_{k=1}^{N_l} \mathbf{M}_{ik}^l \end{cases} \quad \begin{matrix} (a) \\ (b) \end{matrix}$$

Système d'équations 4.2

où \mathbf{v}_i , $\boldsymbol{\omega}_i$, m_i , \mathbf{r}_i , I_i et \mathbf{F}_d^i sont respectivement la vitesse, la vitesse de rotation, la masse, le rayon vecteur, le moment d'inertie et la force de traînée de la particule i , \mathbf{g} est l'accélération de la pesanteur, N_c est le nombre de particules en contact avec la particule générique i , N_l est le nombre de particules interagissant par lubrification avec la particule i , $\mathbf{F}_c^{i,j}$, $\mathbf{u}_t^{i,j}$, $\mathbf{M}_\mu^{i,j}$ sont respectivement la force de contact, le vecteur unitaire perpendiculaire à la direction de contact et le couple de friction agissant sur la particule i par une particule en contact j , enfin $\mathbf{F}_l^{i,k}$, $\mathbf{M}_l^{i,k}$ sont respectivement la force de lubrification et le couple agissant sur la particule i par la présence des particules voisines k . Les propriétés des particules sont reportées dans le tableau 4.2. Le module de Young E et a été abaissé afin de réduire le temps de calcul de la simulation.

Restitution coefficient ε	0.6	Young modulus E [=] N/m	$5 \cdot 10^6$
Poisson coefficient θ	0.45	Radius r [=] m	$5 \cdot 10^{-4}$
Friction coefficient μ_s	0.5	Density ρ [=] kg/m ³	2500
Rolling friction μ_r	0.25	Shear modulus G [=] N/m	$1.7 \cdot 10^6$

Tableau 4.2: Propriétés des particules de verre dans le rhéomètre

4.3.2.1 Modèle d'interaction entre grains

Lubrification et contact

Pour complètement simuler des systèmes granulaires denses, il est nécessaire d'inclure les forces de lubrification, qui ajoutent beaucoup d'interaction entre deux particules voisines et ont un grand impact sur le système lorsque le fluide a des valeurs élevées de viscosités et que la distance entre les particules est faible. Le couple générique $\mathbf{M}_i^{i,k}$ appliqué sur la particule i par la particule k via la lubrification et la force générique appliquée sur les particules i par la particule k par l'intermédiaire de lubrification $\mathbf{F}_i^{i,k}$ sont décrits ci-dessous [175].

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{ik}^l = -6\pi\mu_f[a_{sq}(\vec{v}_i - \vec{v}_k) \cdot \vec{n}_{i,k}\vec{n}_{i,k} - a_{sh}\pi\mu_f(\vec{v}_i - \vec{v}_k) \cdot (\mathbf{I} - \vec{n}_{i,k}\vec{n}_{i,k})] \\ \mathbf{M}_{ik}^l = -8a_{pu}\pi\mu_f r_i^3(\vec{\omega}_i - \vec{\omega}_k) \cdot (\mathbf{I} - \vec{n}\vec{n}) \end{cases}$$

Système d'équations 4.3

Avec $\vec{n}_{i,k}$ le vecteur unité de centre à centre de la particule k jusqu'à la particule i , \mathbf{I} le tenseur d'identité et μ_f la viscosité du fluide. Le paramètre de presse a_{sq} , le paramètre de coupe a_{sh} et le paramètre de pompage a_{pu} , pour $\beta = d_k/d_i$, sont donnés par [176,177]:

$$\begin{cases} a_{sq} = \frac{\beta_l^2}{(1 + \beta_l)^3} \frac{r_i^2}{h_e} + \frac{1 + 7\beta_l + \beta_l^2}{(1 + \beta_l)^3} \frac{r_i}{h_e} \ln\left(\frac{r_i}{h_e}\right) + \frac{1 + 18\beta_l - 29\beta_l^2 + 18\beta_l^3 + \beta_l^4}{21(1 + \beta_l)^4} \frac{r_i^2}{h_e} \ln\left(\frac{r_i}{h_e}\right) \\ a_{sh} = 4\beta_l \frac{2 + \beta + 2\beta^2}{15(1 + \beta)^3} r_i \ln\left(\frac{r_i}{h_e}\right) + 4 \frac{16 - 45\beta_l + 58\beta_l^2 - 45\beta_l^3 + 16\beta_l^4}{375(1 + \beta_l)^4} \frac{r_i^2}{h_e} \ln\left(\frac{r_i}{h_e}\right) \\ a_{pu} = \beta_l \frac{4 + \beta_l}{10(1 + \beta_l)^2} \ln\left(\frac{r_i}{h_e}\right) + \frac{32 - 33\beta_l + 83\beta_l^2 + 43\beta_l^3}{250(1 + \beta_l)^3} \frac{r_i}{h_e} \ln\left(\frac{r_i}{h_e}\right) \end{cases}$$

Système d'équations 4.4

Comme dit précédemment, seules les particules voisines sont capables d'appliquer ce genre de contraintes sur les particules i . Les particules voisines sont définies comme une particule k avec un écart avec la particule i (h_e dans les équations ci-dessus) appartenant à l'intervalle $[h_{min}, h_{max}]$, avec h_{min} l'écart de lubrification minimale pour laquelle l'interaction entre les particules est évaluée et h_{max} l'écart maximum. Cet intervalle est défini pour des raisons pratiques numériques : h_{min} trop petit pourrait donner des interactions singulières, un trop grand h_{max} pourrait augmenter considérablement le nombre de particules pour lesquels cette interaction est évaluée et donc augmenter le temps de calcul radicalement. Pour h_{min} , nous avons choisi une valeur de $0.02r_i$ et pour h_{max} de $0.8r_i$. Par

conséquent, pour les systèmes de particules mono dispersées et pour $d_{i,k}$ on obtient l'expression suivante de la distance de centre à centre entre les particules i et la particule k :

$$\begin{cases} h_e = d_{i,k} - 2r_i \text{ si } h_e \in [h_{\min}, h_{\max}] \\ h_e = h_{\min} \text{ si } d_{i,k} - 2r_i < h_{\min} \\ a_{sq}, a_{sh}, a_{pu} = 0 \text{ si } d_{i,k} - 2r_i > h_{\max} \end{cases}$$

Système d'équations 4.5

Quand $d_{i,k} < 2r_i$ alors, les particules sont autorisées à entrer en contact conformément au modèle de Hertz–Mindlin, telle qu'il est implémenté dans les logiciels utilisés. Le lecteur peut le retrouver dans l'Annexe B.

4.3.2.2 Géométrie de simulation, DEM et propriétés de simulation

Le maillage est créé avec gmsh [178]. Le pas de temps Δt_{DEM} est choisi comme inférieur à la fois au pas de temps critique de Rayleigh Δt_R et au pas de temps critique de Hertz Δt_H . Nous choisissons un pas de temps qui est au moins 10% de la limite inférieure, où la limite inférieure est imposée par Δt_R ou par Δt_H , selon lequel est le plus petit. Une valeur de Δt_{DEM} égale à 10^{-5} seconde satisfait les deux critères pour les simulations. Le nombre total de particules N est constant pour toutes les simulations et égal à 115000.

4.3.3 CFD

Pour la CFD, le logiciel gratuit OpenFOAM® [136] a été utilisé, en raison de sa capacité à être couplé avec LIGGGHTS grâce à la suite CFDEM. Dans ce cas, le fluide est simulé parce que les forces de traînée sont un élément clé dans les écoulements granulaires, même si parfois ces forces sont dans la littérature omises [177] ou simplifiées [176] en raison de la difficulté de simuler l'écoulement du fluide. Par souci de simplicité, la géométrie assumée pour l'écoulement du fluide est un cylindre simple, c'est-à-dire que seulement les parois extérieures du rhéomètre ont été prises en compte et pas les chicanes fixes. La partie CFD sera résolue grâce à un algorithme PISO (Pressure Implicit Splitting Operators) pour les solutions non stationnaires. L'écoulement est supposé laminaire dans tous les cas, avec conditions aux limites sans glissement sur les parois extérieures. Une maille cubique avec une taille générale de $2.5 \cdot 10^{-3}$ m a été utilisée (contrainte de l'algorithme CFD-DEM). Pour les simulations CFD-DEM avec les algorithmes non résolus, la maille doit être au moins 3 - 4

fois la taille des particules dans l'environnement de simulation [134]. Un maillage plus grand a également été testé, mais ses résultats ont été trouvés trop approximatifs. Les caractéristiques des fluides et les paramètres de la simulation sont présentés dans le tableau 4.3.

Propriétés	Valeurs ⁴
Masse volumique du fluide ρ_f [=] kg/m ³	1000
Pression p_0 [=] atm	1
Viscosité du fluide μ_f [=] mPa s	1-68-100
Pas de temps CFD Δt_{CFD} [=] s	$1 \cdot 10^{-5}$

Tableau 4.3: Propriétés des fluides et paramètres de simulation.

4.3.4 CFD-DEM et conditions de simulation

Le flux de particules et les fluides peuvent être traités avec plusieurs méthodes. Une méthode populaire est le modèle de deux fluides (TFM). Dans la TFM, des phases liquides et solides sont traitées par l'approche du continuum, en utilisant les équations de Navier-Stokes. Les équations de la CFD-DEM « un-resolved » sont une combinaison de l'approche du continuum pour la phase fluide et une approche discrète pour les solides. La littérature fournit un certain nombre de formulations différentes, cf. Zhou et al. [126,127]. Nous utiliserons le modèle déjà présenté dans le chapitre 2. En ce qui concerne le terme \mathbf{F}_{sf} , il est la somme de trois termes : la force de viscosité due à la contrainte de cisaillement du fluide \mathbf{f}_μ , la force du gradient de pression \mathbf{f}_{vp} et la force de traînée \mathbf{f}_d . Pour la corrélation de la force de traînée, la corrélation de Di Felice [131] a été utilisée, qui est une combinaison de la corrélation d'Ergun [129] et de la corrélation de Wen et Yu [130], sans la discontinuité lorsque $\varepsilon_f=0.8$.

Un autre facteur important est le nombre d'itérations de couplage $\Delta t_{\text{CFD-DEM}}$, dont la valeur est 5 dans ce travail. Le pas de temps de couplage définit combien de itérations DEM doivent être effectuées avant l'actualisation des données (fraction de vide, position et vitesses des particules, etc.) pour les calculs de force. Cette valeur 5 de $\Delta t_{\text{CFD-DEM}}$ est très faible et cela signifie un temps de calcul lourd en raison du temps nécessaire pour redémarrer plusieurs fois la simulation DEM, mais des valeurs de $\Delta t_{\text{CFD-DEM}}$ plus élevées ont tendance à déstabiliser la simulation (empêcher la convergence), surtout pour les fluides très visqueux. Cela est probablement dû au fait que, avec l'apparition de

⁴ Différentes viscosités du fluide ont été mises en œuvre

forces de traînée élevées, le système a une certaine instabilité en raison des flux de fluide élevés entre les éléments de la maille.

18 simulations ont été effectuées :

- 3 simulations à 0.5 t/min de rotation de la pale centrale avec les 3 viscosités du fluide montrées dans le tableau 4.3
- 3 simulations à 1 t/min de rotation de la pale centrale avec les 3 viscosités du fluide montrées dans le tableau 4.3 sans vibration
- 3 simulations à 10 t/min de rotation de la pale centrale avec les 3 viscosités du fluide montrées dans le tableau 4.3 sans vibration
- 3 simulations à 0.5 t/min de rotation de la pale centrale avec les 3 viscosités du fluide montrées dans le tableau 4.3 avec une vibration verticale et sinusoïdale de fréquence 50 Hz et amplitude $3 \cdot 10^{-4}$ m de la cuve
- 3 simulations à 1 t/min de rotation de la pale centrale avec les 3 viscosités du fluide montrées dans le tableau 4.3 avec une vibration verticale et sinusoïdale de fréquence 50 Hz et amplitude $3 \cdot 10^{-4}$ m de la cuve
- 3 simulations à 10 t/min de rotation de la pale centrale avec les 3 viscosités du fluide montrées dans le tableau 4.3 avec une vibration verticale et sinusoïdale de fréquence 50 Hz et amplitude $3 \cdot 10^{-4}$ m de la cuve

Chaque simulation est démarrée d'un état initial stationnaire, avec les billes de verre sédimentées par gravité dans la cuve. Avec ces coefficients, la simulation la plus lente mettait un mois pour atteindre un état stationnaire. Les simulations ont été réalisées sur un cluster, en utilisant en parallèle 12 processeurs Intel Xeon X 5650.

4.3.5 Résultats

En figure 4.9 les comparaisons des profils de vitesse moyen des particules solides en fonction de la position radiale et de la vibration avec 10 t/min sont reportés.

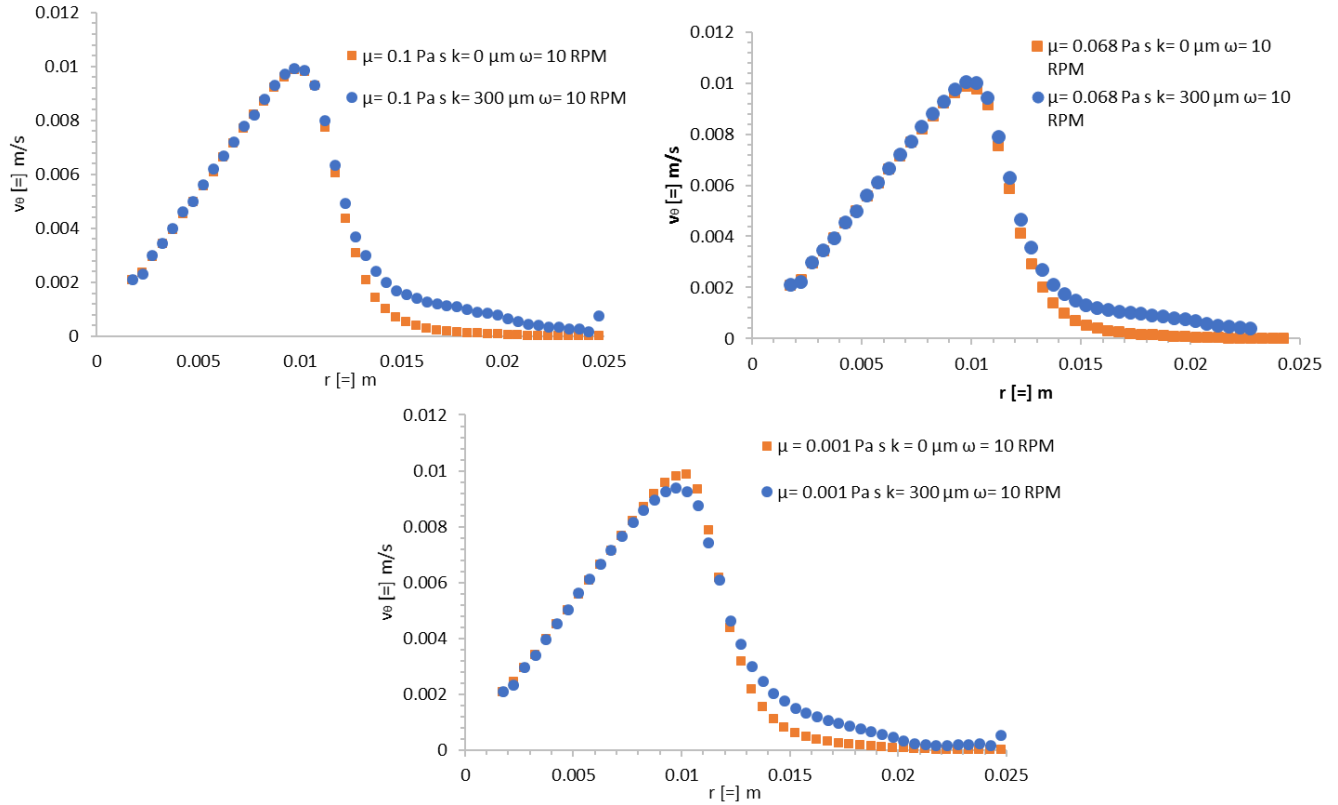


Figure 4.9: Comparaisons des profils de vitesse moyenne des particules solides en fonction de la position radiale et de la vibration avec 10 t/min

Dans ce cas, il y a peu de différences entre les cas sans/avec vibration avant la fin de la pale centrale ($r=0.011$). La vibration augmente la propagation du couple après les pales, en fait pour toutes les simulations sans vibration, on remarque que les particules atteignent une vitesse nulle déjà après 4 millimètres de la fin de la pale centrale, par contre pour les simulations avec vibration la vitesse moyenne ne s'annule qu'à une position radiale proche des pales externes.

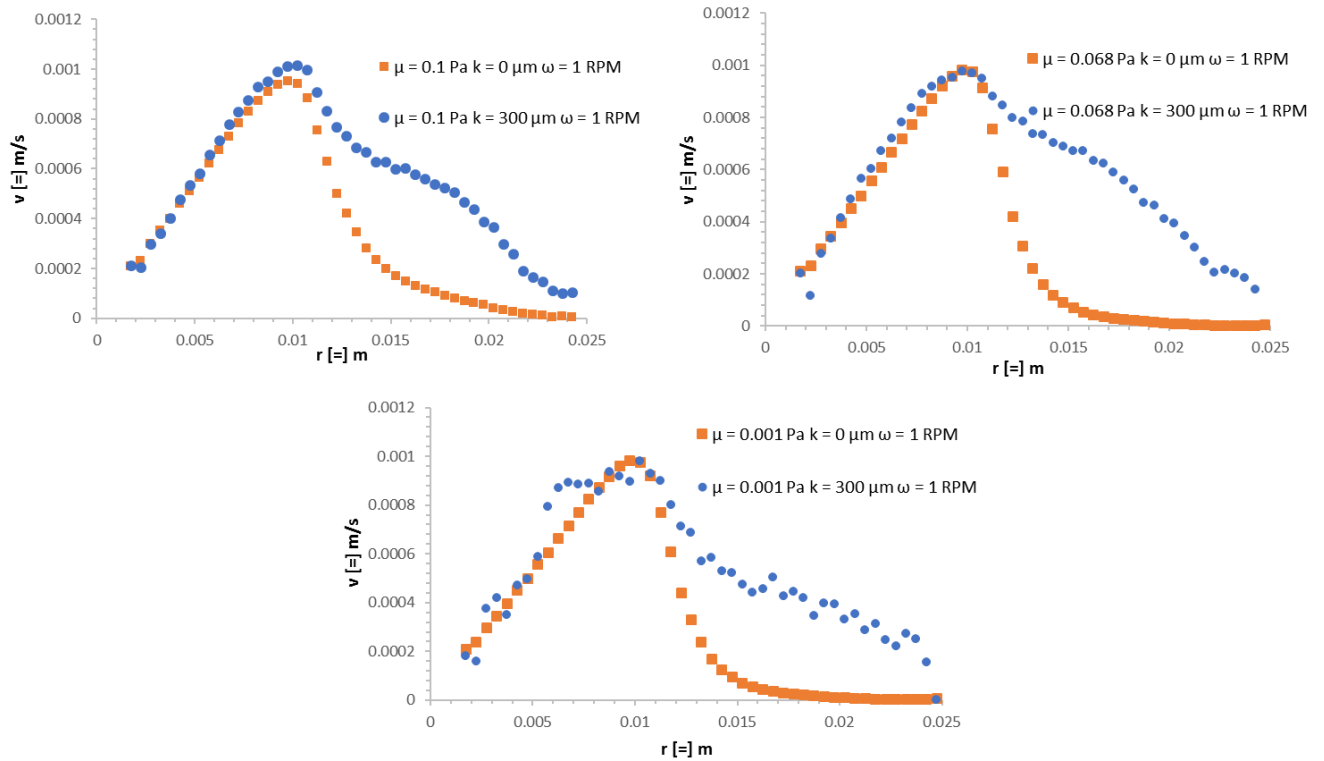


Figure 4.10: Comparaisons des profils de vitesse moyenne des particules solides en fonction de la position radiale et de la vibration avec 1 t/min

L'effet remarqué dans le cas de 10 t/min est visiblement amplifié dans le cas 1 t/min (figure 4.10), où les vitesses diminuent d'un ordre de grandeur. De plus, la diminution de viscosité cause des discontinuités sur les profils de vitesse, vu que la vitesse induite par la vibration commence à devenir comparable avec la vitesse transmise par le couple des pales.

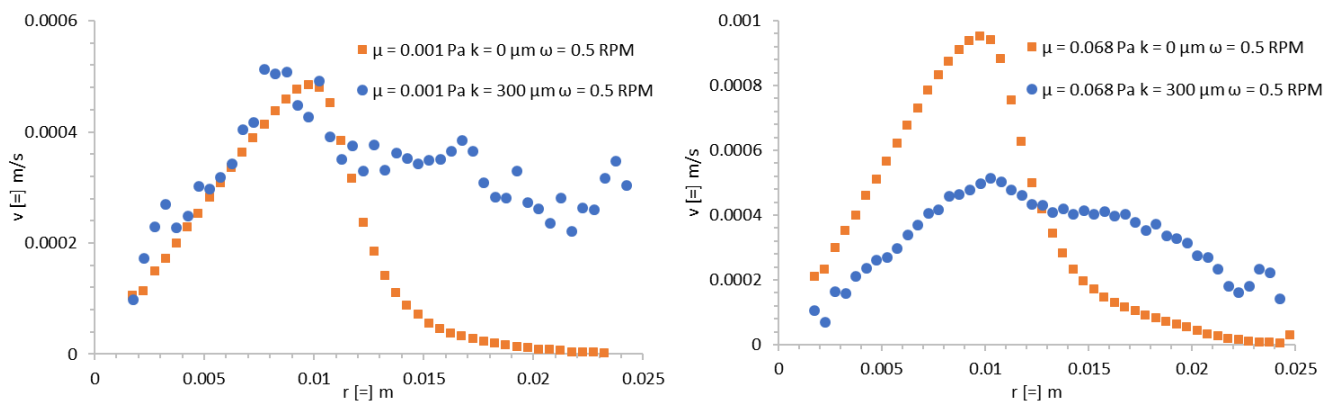


Figure 4.11: Comparaisons des profils de vitesse moyenne des particules solides en fonction de la position radiale et de la vibration avec 0.5 t/min

Avec une vitesse de rotation de 0.5 t/min (figure 4.11), la vibration a un effet aussi sur le profil de vitesse avant les pales. D'autres graphiques sont disponibles dans l'Annexe P.

5. Conclusions générales et perspectives

5.1 Conclusions

J'ai eu la chance de faire un travail de thèse dans le cadre d'un projet interdisciplinaire sur la valorisation de sols contaminés (le projet LORVER soutenu par la Région Lorraine et par l'Union Européenne dans le cadre du programme FEDER). Plus spécifiquement, mon travail concernait un procédé original de valorisation de particules de bois destiné à produire du gaz de synthèse d'une part, du charbon destiné à l'amendement de sols d'autre part. Le cœur du procédé envisagé est un système novateur mis au point par la société SEA MARCONI (Collegno, Piémont, Italie) qui a une filiale à Homécourt. Le démonstrateur installé à Homécourt, sur lequel nous avons pu faire quelques essais, a une capacité nominale de 50 kg de bois par heure. Ce procédé met en œuvre trois réacteurs rotatifs :

- un premier réacteur horizontal de type tambour tournant, dans lequel se produit la pyrolyse du bois, la chaleur de pyrolyse étant apportée par des billes d'acier à haute température
- un second réacteur de type vis sans fin dans lequel a lieu une oxydation partielle d'une partie du charbon produit dans le premier réacteur, oxydation qui sert à chauffer les billes d'acier provenant du premier réacteur. Les billes d'acier tournent en boucle fermée entre ces deux réacteurs
- un troisième réacteur est destiné au craquage catalytique des goudrons produits dans le premier réacteur.

L'étude d'un tel procédé est nécessairement interdisciplinaire, puisque les compétences suivantes sont requises :

- génie des procédés
- mécanique des solides granulaires
- mécanique des fluides
- thermique

La mise en œuvre des logiciels permettant de simuler les mouvements complexes de particules et leur interaction avec les écoulements gazeux, la thermique et la cinétique chimique des réactions, requiert de plus un investissement fort en calcul numérique.

La majeure partie du présent travail concerne la modélisation du premier réacteur, nous avons commencé à traiter le second réacteur, mais n'avons pas considéré le troisième réacteur.

Le premier réacteur est un tambour tournant muni de pales intérieures et contenant deux sortes de particules : des billes d'acier chaude de diamètre 25 mm et des particules de bois de forme variée. La modélisation de ce type d'appareil présente plusieurs défis scientifiques :

- géométrie quelquefois complexes des chicanes
- ségrégation axiale et radiale entre le bois et l'acier

- particules de bois non sphériques
- interaction entre dynamique des solides, thermique et cinétique chimique

Sur les conseils de S. Kiesgen de Richter du Laboratoire de Thermique et Mécanique Appliquée (LEMTA), nous avons décidé de mettre en œuvre une méthode de DEM (Discrete Element Method) qui est à notre connaissance la seule façon de décrire la dynamique de solides granulaires, en particulier la ségrégation, dans des géométries aussi complexes que celles auxquelles nous avons à faire. Nous avons choisi un logiciel « libre » dans sa version de base : LIGGGHTS. Pour tester les programmes que nous avons écrits et déterminer les paramètres requis, nous avons pu effectuer des mesures de ségrégation sur un tambour tournant de laboratoire mis à notre disposition par le LEMTA. Les expériences sur le tambour tournant nous ont permis de calibrer les coefficients du modèle DEM, Les mesures de ségrégation axiale de deux types de particules (sphères d'acier et cylindres de bois) ont confirmé que le DEM arrive à bien reproduire le phénomène de ségrégation dans la phase stationnaire et transitoire, ainsi que la dynamique du système.

Les simulations faites sur le réacteur industriel ont permis de suggérer quelques modifications (modification des pales par exemple) qui ont été implémentées par le partenaire industriel et qui ont permis d'augmenter la productivité du système.

Nous avons pu faire quelques mesures de distributions de temps de séjour des particules de bois dans le réacteur industriel à froid. Cela a validé notre approche, mais en a aussi montré les limites : nous ne sommes pas en mesure de tenir compte dans le modèle DEM de la fragmentation du bois qui influe fortement sur la dynamique du solide.

La comparaison avec la littérature montre que les modèles usuels de représentation des fours tournants ne sont pas à même de décrire de façon adéquate le comportement du réacteur envisagé.

Dans un cas particulier, nous avons pu aller jusqu'à la description des transferts de chaleur et des produits de pyrolyse qu'on peut attendre. Ce modèle nous a permis de prendre en compte la ségrégation des particules (axiale et radiale) de manière simple en utilisant les résultats de la simulation DEM. Cependant ce modèle utilise des hypothèses fortes pour évaluer les échanges de chaleur, en particulier les échanges radiatifs.

Le deuxième réacteur est encore plus compliqué : il met en œuvre des écoulements de gaz complexes et transitoires, le gaz contenant des poussières de charbon, l'écoulement du gaz présentant une interaction avec le mouvement du charbon qui dépend quant à lui du mouvement des billes d'acier et du four. Il est donc nécessaire de mettre en œuvre de façon couplée un logiciel de dynamique du solide (DEM) et un logiciel de mécanique des fluides (CFD). Nous avons développé un code capable d'effectuer ce type de simulation en couplant les logiciels LIGGGHTS et OpenFOAM, l'avons validé sur des données expérimentales de la littérature (lit fluidisé) et avons

testé ces prédictions pour un appareil plus simple : un rhéomètre granulaire. Il n'est malheureusement pas possible d'utiliser ce code pour prédire le comportement du deuxième réacteur dont la complexité est trop importante.

5.2 Perspectives

5.2.1 Perspectives directes de ce travail

- Il serait intéressant de développer un modèle dynamique de type « boîte noire » à partir de calculs DEM pour généraliser les calculs de performance du réacteur (cf § 3.5). Ce modèle permettra d'obtenir plus facilement l'état du réacteur dans différentes conditions pour trouver un optimum du système.
- Une modélisation plus fine du premier réacteur demanderait la prise en compte du broyage des particules de bois et de leur transformation en charbon ; pour la fragmentation, cela est en principe possible dans le cadre de DEM, mais l'investissement nécessaire serait-il justifié ?
- Les modélisations couplant DEM et CFD sont certainement une voie d'avenir, mais la puissance de calcul requise dès qu'on s'éloigne de cas purement académiques devient vite prohibitive. Une alternative peut être constituée par des modèles comme le TFM (two-fluid model), mais ce type de modèle nécessite une calibration.

5.2.2 Perspectives plus générales

Open Source vs logiciel commercial

Dans le cadre de cette thèse nous avons utilisé surtout des logiciels Open Source (des logiciels qui sont gratuits avec la possibilité d'accéder au code source, pour modifier ou ajouter des fonctions de calcul). Il est sûr que cela offre plusieurs avantages dont la versatilité intrinsèque de ces logiciels et la possibilité d'échanger avec une vaste communauté d'utilisateurs et développeurs. Ainsi, certains développements que nous avons réalisés ont été utilisés depuis par d'autres membres de la communauté LIGGGHTS. Cependant il faut aussi dire qu'utiliser ce type de logiciels demande un gros investissement en temps et en effort, ainsi que des prérequis informatiques importants. Par ailleurs, l'interface utilisateur est sommaire, voire inexistante et il n'existe pas de guide utilisateur. A l'opposé, il est possible d'investir dans des logiciels commerciaux, qui sont faciles à utiliser et qui disposent d'un support important par l'équipe de développeurs du logiciel. Cependant ces logiciels

ont souvent des prix prohibitifs et n'offrent pas la possibilité d'ajouter ou modifier les fonctions de base.

Nous avons choisi dans le présent travail d'utiliser des logiciels Open Source plutôt que des logiciels commerciaux (EDEM®, Fluent®). Nous ne regrettons pas ce choix, qui nous a ouvert un monde intéressant et confraternel : nous avons aidé les développeurs de LIGGGHTS (nous avons aidé à corriger une partie de leur code), nous avons été contactés par des collègues d'Allemagne (extension de DEM au cas gaz-liquide-solide), du Brésil (tri de semences en tambour tournant)

Quelle place pour la mécanique en génie des procédés ?

La mécanique des fluides numérique est devenue un outil courant dans les équipes de recherche en génie des procédés. Les logiciels de dynamique de solide granulaire sont-ils appelés à être aussi omniprésents ? Ou vaut-il mieux travailler en collaboration avec nos collègues mécaniciens ? La deuxième solution nous semble préférable.

Même si les chercheurs en génie des procédés ne peuvent pas tous devenir spécialistes en maniement de ce type de logiciel, il nous semble nécessaire qu'ils sachent les bases et possibilités que ces logiciels offrent.

Références

- [1] Sea Marconi, (n.d.). <http://www.seamarconi.com/> (accessed October 6, 2016).
- [2] Lorver, (n.d.). <http://www.lorver.org/programme/index.html> (accessed October 6, 2016).
- [3] L. Junfeng, B. Lohani, E.M. Galàn, P. Monga, P. Mubiru, N. Nakicenovic, K. Nassiep, R. Pachauri, W. Palz, H. Pelosse, others, Renewable Energy Policy Network for the 21st Century, (n.d.). http://environmentportal.in/files/REN21_GSR_2010_full_revised%20Sept2010.pdf (accessed September 19, 2016).
- [4] R.C. Pettersen, The chemical composition of wood, *Chem. Solid Wood*. 207 (1984) 57–126.
- [5] M. Christodoulou, *Pyrolyse de bois dans les conditions d'un lit fluidisé: Étude expérimentale et modélisation*, thèse de doctorat, Université de Lorraine.. (2013)
- [6] C.A. Finch, The chemistry of solid wood. Edited by R. M. Rowell, ACS Advances in Chemistry Series No. 207, American Chemical Society, Washington D.C., 1984.
- [7] L.J. Gibson, The hierarchical structure and mechanics of plant materials, *J. R. Soc. Interface*. 9 (2012) 2749–2766. doi:10.1098/rsif.2012.0341.
- [8] D.A.I. Goring, T.E. Timell, Molecular weight of native celluloses, *Tappi*. 45 (1962) 454–460.
- [9] K.K. Pandey, A study of chemical structure of soft and hardwood and wood polymers by FTIR spectroscopy, *J. Appl. Polym. Sci.* 71 (1999) 1969–1975.
- [10] D.O. Otieno, B.K. Ahring, A thermochemical pretreatment process to produce xylooligosaccharides (XOS), arabinooligosaccharides (AOS) and mannoooligosaccharides (MOS) from lignocellulosic biomasses, *Bioresour. Technol.* 112 (2012) 285–292. doi:10.1016/j.biortech.2012.01.162.
- [11] K. Freudenberg, A.C. Neish, others, Constitution and biosynthesis of lignin., *Const. Biosynth. Lignin*. (1968).
- [12] J.M. Dinwoodie, *Timber, its nature and behaviour*, Van Nostrand Reinhold Co. 190 (1981) 60–1.
- [13] A. Monti, N. Di Virgilio, G. Venturi, Mineral composition and ash content of six major energy crops, *Biomass Bioenergy*. 32 (2008) 216–223. doi:10.1016/j.biombioe.2007.09.012.
- [14] T. Mahmood, K.R. Islam, Response of rice seedlings to copper toxicity and acidity, *J. Plant Nutr.* 29 (2006) 943–957.
- [15] C. Chatterjee, R. Gopal, B.K. Dube, Physiological and biochemical responses of French bean to excess cobalt, *J. Plant Nutr.* 29 (2006) 127–136.
- [16] P.C. Nagajyoti, K.D. Lee, T.V.M. Sreekanth, Heavy metals, occurrence and toxicity for plants: a review, *Environ. Chem. Lett.* 8 (2010) 199–216. doi:10.1007/s10311-010-0297-8.
- [17] B. Falk, Wood recycling: Opportunities for the woodwaste resource, *For. Prod. J.* 47 (1997) 17.
- [18] M. Parikka, Global biomass fuel resources, *Biomass Bioenergy*. 27 (2004) 613–620. doi:10.1016/j.biombioe.2003.07.005.
- [19] G. Berndes, M. Hoogwijk, R. van den Broek, The contribution of biomass in the future global energy supply: a review of 17 studies, *Biomass Bioenergy*. 25 (2003) 1–28. doi:10.1016/S0961-9534(02)00185-X.
- [20] H. Yamamoto, K. Yamaji, J. Fujino, Evaluation of bioenergy resources with a global land use and energy model formulated with SD technique, *Appl. Energy*. 63 (1999) 101–113. doi:10.1016/S0306-2619(99)00020-3.
- [21] B. Colin, J.-L. Dirion, P. Arlabosse, S. Salvador, Wood chips flow in a rotary kiln: Experiments and modeling, *Chem. Eng. Res. Des.* 98 (2015) 179–187. doi:10.1016/j.cherd.2015.04.017.

- [22] G. Candolo, Biomasse vegetali: i possibili processi di conversione energetica, *Agronomia*. 4 (2005) 31–38.
- [23] C. Briens, J. Piskorz, F. Berruti, Biomass Valorization for Fuel and Chemicals Production -- A Review, *Int. J. Chem. React. Eng.* 6 (2008). doi:10.2202/1542-6580.1674.
- [24] D. Mohan, C.U. Pittman, P.H. Steele, Pyrolysis of Wood/Biomass for Bio-oil: A Critical Review, *Energy Fuels*. 20 (2006) 848–889. doi:10.1021/ef0502397.
- [25] M. Öhman, C. Boman, H. Hedman, A. Nordin, D. Boström, Slagging tendencies of wood pellet ash during combustion in residential pellet burners, *Biomass Bioenergy*. 27 (2004) 585–596. doi:10.1016/j.biombioe.2003.08.016.
- [26] S.S. Alves, J.L. Figueiredo, A model for pyrolysis of wet wood, *Chem. Eng. Sci.* 44 (1989) 2861–2869.
- [27] A.V. Bridgwater, D. Meier, D. Radlein, An overview of fast pyrolysis of biomass, *Org. Geochem.* 30 (1999) 1479–1493.
- [28] C.E. LaClaire, C.J. Barrett, K. Hall, Technical, environmental and economic feasibility of bio-oil in new hampshire's north country, *Durh. NH Univ. N. H.* (2004). <http://www.unh.edu/p2/biooil/bounhif.pdf> (accessed September 23, 2016).
- [29] O. Onay, O.M. Kockar, Slow, fast and flash pyrolysis of rapeseed, *Renew. Energy*. 28 (2003) 2417–2433.
- [30] B. Glaser, Prehistorically modified soils of central Amazonia: a model for sustainable agriculture in the twenty-first century, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. B Biol. Sci.* 362 (2007) 187–196.
- [31] J. Lehmann, J. Gaunt, M. Rondon, Bio-char sequestration in terrestrial ecosystems—a review, *Mitig. Adapt. Strateg. Glob. Change*. 11 (2006) 395–419.
- [32] C. Naisse, C. Girardin, R. Lefevre, A. Pozzi, R. Maas, A. Stark, C. Rumpel, Effect of physical weathering on the carbon sequestration potential of biochars and hydrochars in soil, *GCB Bioenergy*. 7 (2015) 488–496. doi:10.1111/gcbb.12158.
- [33] B. Glaser, L. Haumaier, G. Guggenberger, W. Zech, The “Terra Preta” phenomenon: a model for sustainable agriculture in the humid tropics, *Naturwissenschaften*. 88 (2001) 37–41. doi:10.1007/s001140000193.
- [34] A.R. Zimmerman, B. Gao, M.-Y. Ahn, Positive and negative carbon mineralization priming effects among a variety of biochar-amended soils, *Soil Biol. Biochem.* 43 (2011) 1169–1179.
- [35] A. Hilscher, K. Heister, C. Siewert, H. Knicker, Mineralisation and structural changes during the initial phase of microbial degradation of pyrogenic plant residues in soil, *Org. Geochem.* 40 (2009) 332–342.
- [36] M.J. Bell, F. Worrall, Charcoal addition to soils in NE England: a carbon sink with environmental co-benefits?, *Sci. Total Environ.* 409 (2011) 1704–1714.
- [37] K. Karhu, T. Mattila, I. Bergström, K. Regina, Biochar addition to agricultural soil increased CH₄ uptake and water holding capacity—results from a short-term pilot field study, *Agric. Ecosyst. Environ.* 140 (2011) 309–313.
- [38] J.M. Kimetu, J. Lehmann, S.O. Ngoze, D.N. Mugendi, J.M. Kinyangi, S. Riha, L. Verchot, J.W. Recha, A.N. Pell, Reversibility of soil productivity decline with organic matter of differing quality along a degradation gradient, *Ecosystems*. 11 (2008) 726–739.
- [39] A. Cross, S.P. Sohi, The priming potential of biochar products in relation to labile carbon contents and soil organic matter status, *Soil Biol. Biochem.* 43 (2011) 2127–2134.
- [40] C. Steiner, K.C. Das, M. Garcia, B. Förster, W. Zech, Charcoal and smoke extract stimulate the soil microbial community in a highly weathered xanthic Ferralsol, *Pedobiologia*. 51 (2008) 359–366.
- [41] Y. Kuzyakov, I. Subbotina, H. Chen, I. Bogomolova, X. Xu, Black carbon decomposition and incorporation into soil microbial biomass estimated by ¹⁴C labeling, *Soil Biol. Biochem.* 41 (2009) 210–219.

- [42] C.-H. Cheng, J. Lehmann, J.E. Thies, S.D. Burton, M.H. Engelhard, Oxidation of black carbon by biotic and abiotic processes, *Org. Geochem.* 37 (2006) 1477–1488.
- [43] D.L. Jones, D.V. Murphy, M. Khalid, W. Ahmad, G. Edwards-Jones, T.H. DeLuca, Short-term biochar-induced increase in soil CO₂ release is both biotically and abiotically mediated, *Soil Biol. Biochem.* 43 (2011) 1723–1731.
- [44] A.V. Bridgwater, Biomass fast pyrolysis, *Therm. Sci.* 8 (2004) 21–49.
- [45] Q. Zhang, J. Chang, T. Wang, Y. Xu, Review of biomass pyrolysis oil properties and upgrading research, *Energy Convers. Manag.* 48 (2007) 87–92.
- [46] M.E. Boucher, A. Chaala, C. Roy, Bio-oils obtained by vacuum pyrolysis of softwood bark as a liquid fuel for gas turbines. Part I: Properties of bio-oil and its blends with methanol and a pyrolytic aqueous phase, *Biomass Bioenergy*. 19 (2000) 337–350.
- [47] A. Oasmaa, M. Kytö, K. Sipilä, Pyrolysis oil combustion tests in an industrial boiler, *Prog. Thermochem. Biomass Convers.* (2001) 1468–1481.
- [48] R.N. Olcese, Valorisation des vapeurs de pyrolyse de lignine par hydrodéoxygénation directe catalysées par le fer, Université de Lorraine, 2012. <http://www.theses.fr/2012LORR0107> (accessed June 19, 2017).
- [49] P. McKendry, Energy production from biomass (part 3): gasification technologies, *Bioresour. Technol.* 83 (2002) 55–63.
- [50] T. Malkow, Novel and innovative pyrolysis and gasification technologies for energy efficient and environmentally sound MSW disposal, *Waste Manag.* 24 (2004) 53–79. doi:10.1016/S0956-053X(03)00038-2.
- [51] N. Descoins, J.-L. Dirion, T. Howes, Solid transport in a pyrolysis pilot-scale rotary kiln: preliminary results—stationary and dynamic results, *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 44 (2005) 315–321.
- [52] X.Y. Liu, E. Specht, Mean residence time and hold-up of solids in rotary kilns, *Chem. Eng. Sci.* 61 (2006) 5176–5181. doi:10.1016/j.ces.2006.03.054.
- [53] L.G. Ndiaye, S. Caillat, A. Chinnayya, D. Gambier, B. Baudoin, Application of the dynamic model of Saeman to an industrial rotary kiln incinerator: Numerical and experimental results, *Waste Manag.* 30 (2010) 1188–1195. doi:10.1016/j.wasman.2009.09.023.
- [54] A.A. Boateng, Rotary kilns: transport phenomena and transport processes, Elsevier/Butterworth-Heinemann, Amsterdam ; Boston, 2008.
- [55] A.V. Bridgwater, The technical and economic feasibility of biomass gasification for power generation, *Fuel*. 74 (1995) 631–653.
- [56] M.Q. Wang, J. Han, Z. Haq, W.E. Tyner, M. Wu, A. Elgowainy, Energy and greenhouse gas emission effects of corn and cellulosic ethanol with technology improvements and land use changes, *Biomass Bioenergy*. 35 (2011) 1885–1896.
- [57] A.V. Bridgwater, Review of fast pyrolysis of biomass and product upgrading, *Biomass Bioenergy*. 38 (2012) 68–94.
- [58] D. Chen, L. Yin, H. Wang, P. He, Pyrolysis technologies for municipal solid waste: A review, *Waste Manag.* 34 (2014) 2466–2486. doi:10.1016/j.wasman.2014.08.004.
- [59] HALOCLEANAPPLICATION - Waste management and recycling of weee - process integrated thermal-chemical treatment of halogens containing materials, http://cordis.europa.eu/project/rcn/62799_en.html, de 05/2002 à 08/2005, (n.d.).
- [59] A. Hornung, H. Bockhorn, K. Appenzeller, C. Roggero, V. Tumiatti, Plant for the Thermal Treatment of Material and Operation Process Thereof, EP1354172 (A1) Abstract of corresponding document: EP1217318 (A1), 2003. https://worldwide.espacenet.com/publicationDetails/biblio?FT=D&date=20031022&DB=&locale=en_EP&CC=EP&NR=1354172A1&KC=A1&ND=4 (accessed November 24, 2016).
- [61] P.T. Williams, S. Besler, The influence of temperature and heating rate on the slow pyrolysis of biomass, *Renew. Energy*. 7 (1996) 233–250.

- [62] S. Xiu, N. Wang, W. Yi, B. Li, G. Shahbazi, Validation of kinetic parameter values for prediction of pyrolysis behaviour of corn stalks in a horizontal entrained-flow reactor, *Biosyst. Eng.* 100 (2008) 79–85.
- [63] Y. Haseli, J.A. van Oijen, L.P.H. de Goeij, A simplified pyrolysis model of a biomass particle based on infinitesimally thin reaction front approximation, *Energy Fuels*. 26 (2012) 3230–3243.
- [64] Y. Su, Y. Luo, W. Wu, Y. Zhang, S. Zhao, Characteristics of pine wood oxidative pyrolysis: degradation behavior, carbon oxide production and heat properties, *J. Anal. Appl. Pyrolysis*. 98 (2012) 137–143.
- [65] R. Dave, W. Chen, A. Mujumdar, W. Wang, R. Pfeffer, Numerical simulation of dry particle coating processes by the discrete element method, *Adv. Powder Technol.* 14 (2003) 449–470. doi:10.1163/156855203769710672.
- [66] P. Pandey, Y. Song, F. Kayihan, R. Turton, Simulation of particle movement in a pan coating device using discrete element modeling and its comparison with video-imaging experiments, *Powder Technol.* 161 (2006) 79–88. doi:10.1016/j.powtec.2005.09.003.
- [67] A.A. Boateng, *Rotary kilns: transport phenomena and transport processes*, Butterworth-Heinemann, 2015.
https://books.google.fr/books?hl=it&lr=&id=ODodCAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP1&dq=rotary+kilns+transport+phenomena+and+transport+processes&ots=bII6vF4dSw&sig=nI_CiZNaqO_B8-1YGN32Fz22i_Y (accessed February 15, 2016).
- [68] J. Deans, The modelling of a domestic tumbler dryer, *Appl. Therm. Eng.* 21 (2001) 977–990. doi:10.1016/S1359-4311(00)00092-2.
- [69] A. Fontana, *La thermolyse au service du traitement des déchets: Actualité et perspectives*, Univ. Libre Brux. Fac. Sci. Appliquées Fac. Sci. Soc. Polit. Econ. Ecole Commer. Solvay EFE-Paris. (1998).
- [70] S. Shahhosseini, I.T. Cameron, F.Y. Wang, A simple dynamic model for solid transport in rotary dryers, *Dry. Technol.* 18 (2000) 867–886.
- [71] E. Mastorakos, A. Massias, C.D. Tsakiroglou, D.A. Goussis, V.N. Burganos, A.C. Payatakes, CFD predictions for cement kilns including flame modelling, heat transfer and clinker chemistry, *Appl. Math. Model.* 23 (1999) 55–76.
- [72] P. Mureau, Modélisation d'un four rotatif de conversion de l'exafluorure d'uranium en dioxyde d'uranium, 1992. <http://cat.inist.fr/?aModele=afficheN&cpsidt=150137> (accessed October 11, 2016).
- [73] F. Hanrot, Analyse physico-chimique et modélisation de la pyrolyse de grains de charbon en four tournant, 1992. <http://cat.inist.fr/?aModele=afficheN&cpsidt=152442> (accessed October 11, 2016).
- [74] E. Lebas, F. Hanrot, D. Ablitzer, J.-L. Houzelot, Experimental study of residence time, particle movement and bed depth profile in rotary kilns, *Can. J. Chem. Eng.* 73 (1995) 173–180.
- [75] R.T. Bui, G. Simard, A. Charette, Y. Kocaefe, J. Perron, Mathematical modeling of the rotary coke calcining kiln, *Can. J. Chem. Eng.* 73 (1995) 534–545.
- [76] L. Yliniemi, J. Koskinen, K. Leiviska, *Advanced control of a rotary dryer*, University of Oulu Oulu, Finland, 1999.
- [77] F. Marias, A model of a rotary kiln incinerator including processes occurring within the solid and the gaseous phases, *Comput. Chem. Eng.* 27 (2003) 813–825.
- [78] Y.Y. Chen, D.J. Lee, A steady state model of a rotary kiln incinerator, *Hazard. Waste Hazard. Mater.* 11 (1994) 541–559.
- [79] H. Henein, J.K. Brimacombe, A.P. Watkinson, Experimental study of transverse bed motion in rotary kilns, *Metall. Trans. B.* 14 (1983) 191–205.
- [80] J. Mellmann, The transverse motion of solids in rotating cylinders—forms of motion and transition behavior, *Powder Technol.* 118 (2001) 251–270.

- [81] W.C. Saeman, Passage of solids through rotary kilns, *Chem Eng Prog.* 47 (1951). <http://www.citeulike.org/group/19222/article/13396223> (accessed January 28, 2016).
- [82] R.J. Spurling, J.F. Davidson, D.M. Scott, The Transient Response of Granular Flows in an Inclined Rotating Cylinder, *Chem. Eng. Res. Des.* 79 (2001) 51–61. doi:10.1205/026387601528525.
- [83] Y. Gao, B.J. Glasser, M.G. Ierapetritou, A. Cuitino, F.J. Muzzio, J.W. Beeckman, N.A. Fassbender, W.G. Borghard, Measurement of residence time distribution in a rotary calciner, *AIChE J.* 59 (2013) 4068–4076.
- [84] P.A. Cundall, O.D. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique*. 29 (1979) 47–65.
- [85] C. Goniva, C. Kloss, N.G. Deen, J.A.M. Kuipers, S. Pirker, Influence of rolling friction on single spout fluidized bed simulation, *Particuology*. 10 (2012) 582–591. doi:10.1016/j.partic.2012.05.002.
- [86] R. Maione, S. Kiesgen De Richter, G. Mauviel, G. Wild, DEM investigation of granular flow and binary mixture segregation in a rotating tumbler: Influence of particle shape and internal baffles, *Powder Technol.* 286 (2015) 732–739. doi:10.1016/j.powtec.2015.09.011.
- [87] C.T. Jayasundara, R.Y. Yang, B.Y. Guo, A.B. Yu, I. Govender, A. Mainza, A. van der Westhuizen, J. Rubenstein, CFD–DEM modelling of particle flow in IsaMills – Comparison between simulations and PEPT measurements, *Miner. Eng.* 24 (2011) 181–187. doi:10.1016/j.mineng.2010.07.011.
- [88] E. Alizadeh, F. Bertrand, J. Chaouki, Comparison of DEM results and Lagrangian experimental data for the flow and mixing of granules in a rotating drum, *AIChE J.* 60 (2014) 60–75. doi:10.1002/aic.14259.
- [89] C.M. Wensrich, A. Katterfeld, Rolling friction as a technique for modelling particle shape in DEM, *Powder Technol.* 217 (2012) 409–417. doi:10.1016/j.powtec.2011.10.057.
- [90] M.H. Zhang, K.W. Chu, F. Wei, A.B. Yu, A CFD–DEM study of the cluster behavior in riser and downer reactors, *Powder Technol.* 184 (2008) 151–165. doi:10.1016/j.powtec.2007.11.036.
- [91] J.D. Sullivan, C.G. Maier, O.C. Ralston, Passage of Solid Particles Through Rotary Cylindrical Kilns, by John D. Sullivan, Charles G. Macer and Oliver C. Ralston, US Government Printing Office, 1927.
- [92] A. Chatterjee, A.V. Sathe, M.P. Srivastava, P.K. Mukhopadhyay, Flow of materials in rotary kilns used for sponge iron manufacture: Part I. Effect of some operational variables, *Metall. Trans. B.* 14 (1983) 375–381.
- [93] P.S.T. Sai, G.D. Surender, A.D. Damodaran, V. Suresh, Z.G. Philip, K. Sankaran, Residence time distribution and material flow studies in a rotary kiln, *Metall. Trans. B.* 21 (1990) 1005–1011.
- [94] J. Thibault, P.I. Alvarez, R. Blasco, R. Vega, Modeling the mean residence time in a rotary dryer for various types of solids, *Dry. Technol.* 28 (2010) 1136–1141.
- [95] P. Chen, J.M. Ottino, R.M. Lueptow, Onset mechanism for granular axial band formation in rotating tumblers, *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 188002.
- [96] C.-F. Lee, H.-T. Chou, H. Capart, Granular segregation in narrow rotational drums with different wall roughness: Symmetrical and asymmetrical patterns, *Powder Technol.* 233 (2013) 103–115. doi:10.1016/j.powtec.2012.08.034.
- [97] E. Alizadeh, O. Dubé, F. Bertrand, J. Chaouki, Characterization of Mixing and Size Segregation in a Rotating Drum by a Particle Tracking Method, *AIChE J.* 59 (2013) 1894–1905. doi:10.1002/aic.13982.
- [98] N. Taberlet, M. Newey, P. Richard, W. Losert, On axial segregation in a tumbler: an experimental and numerical study, *J. Stat. Mech. Theory Exp.* 2006 (2006) P07013.

- [99] K.M. Hill, A. Caprihan, J. Kakalios, Bulk Segregation in Rotated Granular Material Measured by Magnetic Resonance Imaging, *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997) 50–53. doi:10.1103/PhysRevLett.78.50.
- [100] N. Taberlet, W. Losert, P. Richard, Understanding the dynamics of segregation bands of simulated granular material in a rotating drum, *EPL Europhys. Lett.* 68 (2004) 522.
- [101] Z.S. Khan, W.A. Tokaruk, S.W. Morris, Oscillatory granular segregation in a long drum mixer, *Europhys. Lett. EPL.* 66 (2004) 212–218. doi:10.1209/epl/i2003-10157-4.
- [102] M. Newey, J. Ozik, S.M. van der Meer, E. Ott, W. Losert, Band-in-band segregation of multidisperse granular mixtures, *Europhys. Lett. EPL.* 66 (2004) 205–211. doi:10.1209/epl/i2003-10207-y.
- [103] Y. Tsuji, T. Tanaka, T. Ishida, Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, *Powder Technol.* 71 (1992) 239–250.
- [104] C. Kloss, C. Goniva, LIGGGHTS: a new open source discrete element simulation software, in: *Proc. Fifth Int. Conf. Discrete Elem. Methods Lond. UK*, 2010: pp. 25–26.
- [105] EDEM Software: powered by Discrete Element Method (DEM) technology, EDEM Simul. (n.d.). <http://www.edemsimulation.com/software/> (accessed October 17, 2016).
- [106] B.K. Mishra, A review of computer simulation of tumbling mills by the discrete element method: Part I—contact mechanics, *Int. J. Miner. Process.* 71 (2003) 73–93. doi:10.1016/S0301-7516(03)00032-2.
- [107] N. Taberlet, *Ecoulements gravitaires de matériaux granulaires*, Université Rennes 1, 2005. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00010108/> (accessed October 6, 2016).
- [108] E.M. Smuts, D.A. Deglon, C.J. Meyer, Methodology for CFD-DEM modelling of particulate suspension rheology, in: *Proc. Ninth Int. Conf. CFD Miner. Process Ind. CSIRO Melb. Aust.*, 2012. http://www.cfd.com.au/cfd_conf12/PDFs/107SMU.pdf (accessed October 31, 2016).
- [109] H. Qi, J. Xu, G. Zhou, F. Chen, W. Ge, J. Li, Numerical investigation of granular flow similarity in rotating drums, *Particuology.* 22 (2015) 119–127.
- [110] W.-Q. Li, T. Ying, W. Jian, D.-J. Yu, Comparison research on the neighbor list algorithms: Verlet table and linked-cell, *Comput. Phys. Commun.* 181 (2010) 1682–1686. doi:10.1016/j.cpc.2010.06.005.
- [111] H. Hertz, Über die Berührung fester elastischer Körper., *J. Für Reine Angew. Math.* 92 (1882) 156–171.
- [112] S.P. Timoshenko, J.N. Goodier, *Theory of Elasticity* McGraw, N. Y. (1970).
- [113] K.L. Johnson, K.L. Johnson, *Contact mechanics*, Cambridge university press, 1987. <https://books.google.it/books?hl=it&lr=&id=Do6WQIUwbpkC&oi=fnd&pg=PA1&dq=contact+mechanics+johnson&ots=gpjlmwed9T&sig=g7gKVXzgNewg3FsDxIoEzmUDrWU> (accessed October 18, 2016).
- [114] C.A. Coulomb, Test on the applications of the rules of maxima and minima to some problems of statics related to architecture, *Mem Math Phys.* 7 (1773) 343–382.
- [115] J. Ai, J.-F. Chen, J.M. Rotter, J.Y. Ooi, Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations, *Powder Technol.* 206 (2011) 269–282.
- [116] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding molecular simulations: from algorithms to applications*, Acad. San Diego. (1996).
- [117] A. Džiugys, B. Peters, An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers, *Granul. Matter.* 3 (2001) 231–266.
- [118] E.J.W. Wynn, Simulations of rebound of an elastic ellipsoid colliding with a plane, *Powder Technol.* 196 (2009) 62–73. doi:10.1016/j.powtec.2009.07.004.
- [119] P.A. Langston, M.A. Al-Awamleh, F.Y. Fraige, B.N. Asmar, Distinct element modelling of non-spherical frictionless particle flow, *Chem. Eng. Sci.* 59 (2004) 425–435.
- [120] D. Höhner, S. Wirtz, V. Scherer, A study on the influence of particle shape and shape approximation on particle mechanics in a rotating drum using the discrete element method, *Powder Technol.* 253 (2014) 256–265.

- [121] S. Mack, P. Langston, C. Webb, T. York, Experimental validation of polyhedral discrete element model, *Powder Technol.* 214 (2011) 431–442.
- [122] H. Kruggel-Emden, S. Rickelt, S. Wirtz, V. Scherer, A study on the validity of the multi-sphere Discrete Element Method, *Powder Technol.* 188 (2008) 153–165. doi:10.1016/j.powtec.2008.04.037.
- [123] E.J. Parteli, DEM simulation of particles of complex shapes using the multisphere method: Application for additive manufacturing, in: *AIP Conf Proc*, 2013: pp. 185–188.
- [124] H. Kruggel-Emden, R. Kačianauskas, Discrete element analysis of experiments on mixing and bulk transport of wood pellets on a forward acting grate in discontinuous operation, *Chem. Eng. Sci.* 92 (2013) 105–117.
- [125] H. Kruggel-Emden, S. Wirtz, V. Scherer, An experimental investigation of mixing of wood pellets on a forward acting grate in discontinuous operation, *Powder Technol.* 233 (2013) 261–277.
- [126] Z.Y. Zhou, S.B. Kuang, K.W. Chu, A.B. Yu, Discrete particle simulation of particle–fluid flow: model formulations and their applicability, *J. Fluid Mech.* 661 (2010) 482–510.
- [127] H.P. Zhu, Z.Y. Zhou, R.Y. Yang, A.B. Yu, Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments, *Chem. Eng. Sci.* 62 (2007) 3378–3396. doi:10.1016/j.ces.2006.12.089.
- [128] D. Gidaspow, *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*, Academic press, 1994.
<https://books.google.it/books?hl=it&lr=&id=DTAFZ9rIfQwC&oi=fnd&pg=PP2&dq=Hydrodynamics+of+circulating+beds:+Kinetic+theory+approach+gidaspow&ots=crwCt23dlg&sig=aPUso1wndDLtpnACOSTGaLrKKwg> (accessed October 27, 2016).
- [129] S. Ergun, A.A. Orning, Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds, *Ind. Eng. Chem.* 41 (1949) 1179–1184.
- [130] H.Y.Y. Wen C. Y., Mechanism of Fluidization, *Chem Eng Process Symp. Ser.* 62. (1966) 100–111.
- [131] R. Di Felice, The voidage function for fluid-particle interaction systems, *Int. J. Multiph. Flow.* 20 (1994) 153–159.
- [132] D.L. Koch, R.J. Hill, Inertial effects in suspension and porous-media flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 33 (2001) 619–647.
- [133] D.L. Koch, A.S. Sangani, Particle pressure and marginal stability limits for a homogeneous monodisperse gas-fluidized bed: kinetic theory and numerical simulations, *J. Fluid Mech.* 400 (1999) 229–263.
- [134] A. Hager, *CFD–DEM on Multiple Scales–An Extensive Investigation of Particle–fluid Interactions*, Johannes Kepler Univ. Linz Linz. (2014).
- [135] A.F.U. Guide, Release 14.0, ANSYS, Inc Novemb. (2011).
- [136] H. Jasak, A. Jemcov, Z. Tukovic, others, OpenFOAM: A C++ library for complex physics simulations, in: *Int. Workshop Coupled Methods Numer. Dyn.*, IUC Dubrovnik, Croatia, 2007: pp. 1–20. <http://powerlab.fsb.hr/ped/kturbo/openfoam/papers/CMND2007.pdf> (accessed October 28, 2016).
- [137] Y.C. Zhou, B.D. Wright, R.Y. Yang, B.H. Xu, A.B. Yu, Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation, *Phys. Stat. Mech. Its Appl.* 269 (1999) 536–553.
- [138] C.M. Wensrich, A. Katterfeld, Rolling friction as a technique for modelling particle shape in DEM, *Powder Technol.* 217 (2012) 409–417. doi:10.1016/j.powtec.2011.10.057.
- [139] C.M. Wensrich, A. Katterfeld, D. Sugo, Characterisation of the effects of particle shape using a normalised contact eccentricity, *Granul. Matter.* 16 (2013) 327–337. doi:10.1007/s10035-013-0465-1.
- [140] R. Maione, S.K. De Richter, G. Mauviel, G. Wild, Axial segregation of a binary mixture in a rotating tumbler with non-spherical particles: Experiments and DEM model validation, *Powder Technol.* 306 (2017) 120–129.

- [141] J. Mellmann, The transverse motion of solids in rotating cylinders—forms of motion and transition behavior, *Powder Technol.* 118 (2001) 251–270. doi:10.1016/S0032-5910(00)00402-2.
- [142] H. Henein, J.K. Brimacombe, A.P. Watkinson, Experimental study of transverse bed motion in rotary kilns, *Metall. Trans. B.* 14 (1983) 191–205.
- [143] K.M. Hill, J. Kakalios, Reversible axial segregation of rotating granular media, *Phys. Rev. E.* 52 (1995) 4393–4400. doi:10.1103/PhysRevE.52.4393.
- [144] R.Y. Yang, R.P. Zou, A.B. Yu, Microdynamic analysis of particle flow in a horizontal rotating drum, *Powder Technol.* 130 (2003) 138–146. doi:10.1016/S0032-5910(02)00257-7.
- [145] R. Chand, M.A. Khaskheli, A. Qadir, B. Ge, Q. Shi, Discrete particle simulation of radial segregation in horizontally rotating drum: Effects of drum-length and non-rotating end-plates, *Phys. Stat. Mech. Its Appl.* 391 (2012) 4590–4596.
- [146] D. Hayter, G. Pereira, K. Liffman, B. Aldham, S. Johns, I.D. Sutalo, G. Brooks, P. Cleary, G. Metcalfe, Density segregation of granular material in a rotating cylindrical tumbler, in: *Smart Mater. Nano- Micro-Smart Syst.*, International Society for Optics and Photonics, 2008: pp. 727010–727010. <http://proceedings.spiedigitallibrary.org/proceeding.aspx?articleid=817140> (accessed November 19, 2015).
- [147] R. Maione, S. Kiesgen De Richter, G. Mauviel, G. Wild, DEM investigation of granular flow and binary mixture segregation in a rotating tumbler: Influence of particle shape and internal baffles, *Powder Technol.* 286 (2015) 732–739. doi:10.1016/j.powtec.2015.09.011.
- [148] O. Levenspiel, *Chemical reaction engineering*, 3rd ed, Wiley, New York, 1999.
- [149] R.J. Spurling, *Granular flow in an inclined rotating cylinder: steady state and transients*, University of Cambridge, 2001. <http://ethos.bl.uk/OrderDetails.do?uin=uk.bl.ethos.621072> (accessed November 30, 2016).
- [150] A.S.B. Njeng, Experimental study and modeling of hydrodynamic and heating characteristics of flighted rotary kilns, *Ecole des Mines d’Albi-Carmaux*, 2015. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01291791/> (accessed December 2, 2016).
- [151] B. Chaudhuri, F.J. Muzzio, M.S. Tomassone, Modeling of heat transfer in granular flow in rotating vessels, *Chem. Eng. Sci.* 61 (2006) 6348–6360. doi:10.1016/j.ces.2006.05.034.
- [152] D. Shi, W.L. Vargas, J.J. McCarthy, Heat transfer in rotary kilns with interstitial gases, *Chem. Eng. Sci.* 63 (2008) 4506–4516. doi:10.1016/j.ces.2008.06.006.
- [153] W.E. Ranz, W.R. Marshall, Evaporation from drops, *Chem. Eng. Prog.* 48 (1952) 141446.
- [154] J. Li, D.J. Mason, A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles, *Powder Technol.* 112 (2000) 273–282.
- [155] I.C. Kemp, R.E. Bahu, H.S. Pasley, Model development and experimental studies of vertical pneumatic conveying dryers, *Dry. Technol.* 12 (1994) 1323–1340.
- [156] J. Baeyens, D. Van Gauwbergen, I. Vinckier, Pneumatic drying: the use of large-scale experimental data in a design procedure, *Powder Technol.* 83 (1995) 139–148.
- [157] S.H. Tscheng, A.P. Watkinson, Convective heat transfer in a rotary kiln, *Can. J. Chem. Eng.* 57 (1979) 433–443.
- [158] J.P. Gorog, T.N. Adams, J.K. Brimacombe, Regenerative heat transfer in rotary kilns, *Metall. Trans. B.* 13 (1982) 153–163.
- [159] S. Seghir-Ouali, D. Saury, S. Harmand, O. Phillipart, D. Laloy, Convective heat transfer inside a rotating cylinder with an axial air flow, *Int. J. Therm. Sci.* 45 (2006) 1166–1178. doi:10.1016/j.ijthermalsci.2006.01.017.
- [160] K.S. Mujumdar, V.V. Ranade, Simulation of Rotary Cement Kilns Using a One-Dimensional Model, *Chem. Eng. Res. Des.* 84 (2006) 165–177. doi:10.1205/cherd.04193.
- [161] H. Thunman, B. Leckner, Thermal conductivity of wood—models for different stages of combustion, *Biomass Bioenergy.* 23 (2002) 47–54.
- [162] J. Larfeldt, B. Leckner, M.C. Melaaen, Modelling and measurements of heat transfer in charcoal from pyrolysis of large wood particles, *Biomass Bioenergy.* 18 (2000) 507–514.

- [163] J.F. Siau, Transport processes in wood, Springer Science & Business Media, 2012.
https://books.google.it/books?hl=it&lr=&id=6RzyCAAAQBAJ&oi=fnd&pg=PA1&dq=Transport+processes+in+wood&ots=9qfnZPLL4k&sig=qabe1C2R_BQLONTnkRWUCDc10nU (accessed December 15, 2016).
- [164] M. Gupta, J. Yang, C. Roy, Specific heat and thermal conductivity of softwood bark and softwood char particles☆, *Fuel*. 82 (2003) 919–927.
- [165] R.H. Perry, D.W. Green, Perry's chemical engineers' handbook, McGraw-Hill Professional, 1999. http://www.dnulib.edu.vn:8080/dspace/handle/DNULIB_52011/5086 (accessed December 19, 2016).
- [166] F. SHAFIZADEH, P.P.S. CHIN, Thermal Deterioration of Wood, in: *Wood Technol. Chem. Asp.*, AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 1977: pp. 57–81. doi:10.1021/bk-1977-0043.ch005.
- [167] B.M. Wagenaar, W. Prins, W.P.M. Van Swaaij, Flash pyrolysis kinetics of pine wood, *Fuel Process. Technol.* 36 (1993) 291–298.
- [168] J. Rath, M.G. Wolfinger, G. Steiner, G. Krammer, F. Barontini, V. Cozzani, Heat of wood pyrolysis, *Fuel*. 82 (2003) 81–91.
- [169] K.M. Bryden, M.J. Hagge, Modeling the combined impact of moisture and char shrinkage on the pyrolysis of a biomass particle☆, *Fuel*. 82 (2003) 1633–1644.
- [170] J.M. Link, L.A. Cuypers, N.G. Deen, J.A.M. Kuipers, Flow regimes in a spout–fluid bed: A combined experimental and simulation study, *Chem. Eng. Sci.* 60 (2005) 3425–3442.
- [171] M.S. van Buijtenen, M. Börner, N.G. Deen, S. Heinrich, S. Antonyuk, J.A.M. Kuipers, An experimental study of the effect of collision properties on spout fluidized bed dynamics, *Powder Technol.* 206 (2011) 139–148.
- [172] P.A. Cundall, O.D. Strack, A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique*. 29 (1979) 47–65.
- [173] C. Goniva, C. Kloss, A. Hager, S. Pirker, An open source CFD-DEM perspective, in: *Proc. OpenFOAM Workshop Göteb.*, 2010.
- [174] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger, S. Pirker, Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM, *Prog. Comput. Fluid Dyn. Int. J.* 12 (2012) 140–152.
- [175] R.C. Ball, J.R. Melrose, A simulation technique for many spheres in quasi-static motion under frame-invariant pair drag and Brownian forces, *Phys. Stat. Mech. Its Appl.* 247 (1997) 444–472.
- [176] S. Kim, S.J. Karrila, *Microhydrodynamics: principles and selected applications*, Courier Corporation, 2013.
<https://books.google.com/books?hl=it&lr=&id=aADEAgAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP1&dq=Microhydrodynamics++Principles+and+Selected+Applications.&ots=hGb1fi15Gm&sig=r9SMEAlksArqLxT9IFBITipeww> (accessed January 5, 2017).
- [177] C. Ness, J.Y. Ooi, J. Sun, M. Marigo, P. McGuire, H. Xu, H. Stitt, Linking particle properties to paste extrusion flow characteristics using discrete element simulations, *ArXiv Prepr. ArXiv160806188*. (2016). <https://arxiv.org/abs/1608.06188> (accessed January 5, 2017).
- [178] C. Geuzaine, J.-F. Remacle, Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 79 (2009) 1309–1331. doi:10.1002/nme.2579.
- [179] V. Ramanathan, R.D. Cess, E.F. Harrison, P. Minnis, B.R. Barkstrom, E. Ahmad, D. Hartmann, Cloud-Radiative Forcing and Climate: Results from the Earth Radiation Budget Experiment, *Science*. 243 (1989) 57–63. doi:10.1126/science.243.4887.57.
- [172] *Advancing the Science of Climate Change*, National Academies Press, Washington, D.C., 2010. <http://www.nap.edu/catalog/12782>
- [173] IPCC - Intergovernmental Panel on Climate Change, (n.d.).
https://www.ipcc.ch/publications_and_data/publications_and_data_reports.shtml

- [182] O. Edenhofer, R. Pichs-Madruga, Y. Sokona, J.C. Minx, E. Farahani, S. Kadner, K. Seyboth, A. Adler, I. Baum, S. Brunner, P. Eickmeier, B. Kriemann, J. Savolainen, S. Schlömer, C. von Stechow, T. Zwickel, Intergovernmental Panel on Climate Change, eds., *Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change ; Summary for Policymakers Technical Summary ; Part of the Working Group III Contribution to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, Intergovernmental Panel on Climate Change, Geneva, Switzerland, 2015.
- [183] P.M. Bernstein, W.D. Montgomery, T.F. Rutherford, Global impacts of the Kyoto agreement: results from the MS-MRT model, *Resour. Energy Econ.* 21 (1999) 375–413.
- [184] K.S. Hatzilyberis, G.P. Androutsopoulos, C.E. Salmas, Indirect thermal drying of lignite: Design aspects of a rotary dryer, *Dry. Technol.* 18 (2000) 2009–2049.
- [185] K.S. Hatzilyberis, G.P. Androutsopoulos, An RTD study for the flow of lignite particles through a pilot rotary dryer part i; bare drum case, *Dry. Technol.* 17 (1999) 745–757.
- [186] J. Ai, J.-F. Chen, J.M. Rotter, J.Y. Ooi, Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations, *Powder Technol.* 206 (2011) 269–282.
- [187] N. Descoins, *Outils de simulation des fours tournants dédiés à la pyrolyse de déchets: modélisation dynamique du couplage transport de la charge-transferts de chaleur-réactions chimiques*, Toulouse, INPT, 2003. <http://www.theses.fr/2003INPT048H> (accessed December 14, 2016).
- [188] C. Guizani, F.E. Sanz, S. Salvador, Effects of CO₂ on biomass fast pyrolysis: reaction rate, gas yields and char reactive properties, *Fuel*. 116 (2014) 310–320.
- [189] B. Colin, *Modélisation de la torréfaction de plaquettes de bois en four tournant et validation expérimentale à l'échelle d'un pilote continu de laboratoire*, Ecole nationale des Mines d'Albi-Carmaux, 2014. <http://www.theses.fr/2014EMAC0015> (accessed December 19, 2016).
- [190] H.P. Zhu, Z.Y. Zhou, R.Y. Yang, A.B. Yu, Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings, *Chem. Eng. Sci.* 63 (2008) 5728–5770. doi:10.1016/j.ces.2008.08.006.
- [191] G.G. Pereira, S. Pucilowski, K. Liffman, P.W. Cleary, Streak patterns in binary granular media in a rotating drum, *Appl. Math. Model.* 35 (2011) 1638–1646. doi:10.1016/j.apm.2010.09.040.
- [192] G. Lu, J.R. Third, C.R. Müller, Discrete element models for non-spherical particle systems: From theoretical developments to applications, *Chem. Eng. Sci.* 127 (2015) 425–465.
- [193] O. Dubé, E. Alizadeh, J. Chaouki, F. Bertrand, Dynamics of non-spherical particles in a rotating drum, *Chem. Eng. Sci.* 101 (2013) 486–502. doi:10.1016/j.ces.2013.07.011.
- [194] D. Höhner, S. Wirtz, V. Scherer, Experimental and numerical investigation on the influence of particle shape and shape approximation on hopper discharge using the discrete element method, *Powder Technol.* 235 (2013) 614–627. doi:10.1016/j.powtec.2012.11.004.
- [195] E.J.R. Parteli, DEM simulation of particles of complex shapes using the multisphere method: Application for additive manufacturing, in: 2013: pp. 185–188. <http://scitation.aip.org/content/aip/proceeding/aipcp/10.1063/1.4811898> (accessed January 22, 2015).
- [196] R.D. Mindlin, H. Deresiewicz, Elastic spheres in contact under varying oblique forces, *J Appl Mech.* 20 (1953) 327–344.
- [197] A. Di Renzo, F.P. Di Maio, Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes, *Chem. Eng. Sci.* 59 (2004) 525–541.
- [198] Y. Xu, C. Xu, Z. Zhou, J. Du, D. Hu, 2D DEM simulation of particle mixing in rotating drum: A parametric study, *Particuology*. 8 (2010) 141–149. doi:10.1016/j.partic.2009.10.003.
- [199] P.Y. Liu, R.Y. Yang, A.B. Yu, DEM study of the transverse mixing of wet particles in rotating drums, *Chem. Eng. Sci.* 86 (2013) 99–107. doi:10.1016/j.ces.2012.06.015.

- [200] M. Kwapinska, G. Saage, E. Tsotsas, Mixing of particles in rotary drums: A comparison of discrete element simulations with experimental results and penetration models for thermal processes, *Powder Technol.* 161 (2006) 69–78. doi:10.1016/j.powtec.2005.08.038.
- [201] N. Gui, J. Yan, W. Xu, L. Ge, D. Wu, Z. Ji, J. Gao, S. Jiang, X. Yang, DEM simulation and analysis of particle mixing and heat conduction in a rotating drum, *Chem. Eng. Sci.* 97 (2013) 225–234. doi:10.1016/j.ces.2013.04.005.
- [202] D. Shi, W.L. Vargas, J.J. McCarthy, Heat transfer in rotary kilns with interstitial gases, *Chem. Eng. Sci.* 63 (2008) 4506–4516. doi:10.1016/j.ces.2008.06.006.
- [203] W.L. Vargas, J.J. McCarthy, Heat conduction in granular materials, *AIChE J.* 47 (2001) 1052–1059.
- [204] R.D. Morrison, P.W. Cleary, Using DEM to model ore breakage within a pilot scale SAG mill, *Miner. Eng.* 17 (2004) 1117–1124. doi:10.1016/j.mineng.2004.06.016.
- [205] C.M. Dury, G.H. Ristow, Radial segregation in a two-dimensional rotating drum, *J. Phys. I.* 7 (1997) 737–745.
- [206] G.H. Ristow, Particle mass segregation in a two-dimensional rotating drum, *EPL Europhys. Lett.* 28 (1994) 97.
- [207] G.G. Pereira, N. Tran, P.W. Cleary, Segregation of combined size and density varying binary granular mixtures in a slowly rotating tumbler, *Granul. Matter.* 16 (2014) 711–732.
- [208] G.G. Pereira, P.W. Cleary, Radial segregation of multi-component granular media in a rotating tumbler, *Granul. Matter.* 15 (2013) 705–724.
- [209] M. Moakher, T. Shinbrot, F.J. Muzzio, Experimentally validated computations of flow, mixing and segregation of non-cohesive grains in 3D tumbling blenders, *Powder Technol.* 109 (2000) 58–71.
- [210] N. Nityanand, B. Manley, H. Henein, An analysis of radial segregation for different sized spherical solids in rotary cylinders, *Metall. Trans. B.* 17 (1986) 247–257.
- [211] N. Jain, J.M. Ottino, R.M. Lueptow, Regimes of segregation and mixing in combined size and density granular systems: an experimental study, *Granul. Matter.* 7 (2005) 69–81.
- [212] W.L. Vargas, S.K. Hajra, D. Shi, J.J. McCarthy, Suppressing the segregation of granular mixtures in rotating tumblers, *AIChE J.* 54 (2008) 3124–3132. doi:10.1002/aic.11640.
- [213] D. Shi, A.A. Abatan, W.L. Vargas, J.J. McCarthy, Eliminating segregation in free-surface flows of particles, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 148001.
- [214] M. Jiang, Y. Zhao, G. Liu, J. Zheng, Enhancing mixing of particles by baffles in a rotating drum mixer, *Particuology.* 9 (2011) 270–278. doi:10.1016/j.partic.2010.06.008.
- [215] Q. Huang, H. Zhang, J. Zhu, Experimental study on fluidization of fine powders in rotating drums with various wall friction and baffled rotating drums, *Chem. Eng. Sci.* 64 (2009) 2234–2244. doi:10.1016/j.ces.2009.01.047.
- [216] J. Eberhardsteiner, others, APPROXIMATION OF OBJECTS BY SPHERES FOR MULTISPHERE SIMULATIONS IN DEM, (n.d.).
http://www.researchgate.net/publication/259693012_Approximation_of_Objects_by_Spheres_for_Multisphere_Simulations_in_DEM/file/6a85e52d59a6ea86f5.pdf (accessed January 22, 2015).
- [217] V. Tumiatti, F. Lenzi, Sea Marconi Technologies Sas, I-10093 Collegno (TO) Italy, (n.d.).
<http://www.seamarconi.com/>.
- [218] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *J. Comput. Phys.* 117 (1995) 1–19.
- [219] J. Mellmann, The transverse motion of solids in rotating cylinders—forms of motion and transition behavior, *Powder Technol.* 118 (2001) 251–270.
- [220] D.V. Khakhar, J.J. McCarthy, J.M. Ottino, Radial segregation of granular mixtures in rotating cylinders, *Phys. Fluids* 1994-Present. 9 (1997) 3600–3614.

- [221] P.W. Cleary, DEM simulation of industrial particle flows: case studies of dragline excavators, mixing in tumblers and centrifugal mills, *Powder Technol.* 109 (2000) 83–104. doi:10.1016/S0032-5910(99)00229-6.
- [222] M. Doi, S.F. Edwards, *The theory of polymer dynamics*, Clarendon Press, 1986.
- [223] Y.L. Ding, R.N. Forster, J.P.K. Seville, D.J. Parker, Some aspects of heat transfer in rolling mode rotating drums operated at low to medium temperatures, *Powder Technol.* 121 (2001) 168–181.
- [224] J.P. Gorog, J.K. Brimacombe, T.N. Adams, Radiative heat transfer in rotary kilns, *Metall. Trans. B.* 12 (1981) 55–70.
- [225] T. Ginsberg, M. Modigell, Dynamic modelling of a rotary kiln for calcination of titanium dioxide white pigment, *Comput. Chem. Eng.* 35 (2011) 2437–2446. doi:10.1016/j.compchemeng.2011.03.029.

Annexes

Annexe A. Le contexte énergétique

Les nuages sont les régulateurs du chauffage radiatif de la planète. Ils réfléchissent une grande partie du rayonnement solaire incident augmentant à environ deux fois ce qu'il serait en l'absence de nuages (figure a.1).

Cependant, les nuages ont également un effet sur le rayonnement de grande longueur d'onde thermique normalement émis par la terre, car les nuages ont aussi la capacité de bloquer une partie de ce rayonnement (figure a.1).

Ce phénomène empêche la sortie d'une partie de la radiation provenant de la terre. Les gaz à effet de serre (GES) renforcent cet effet, en augmentant la quantité nette de rayonnement thermique de la terre retenu dans notre système [179].

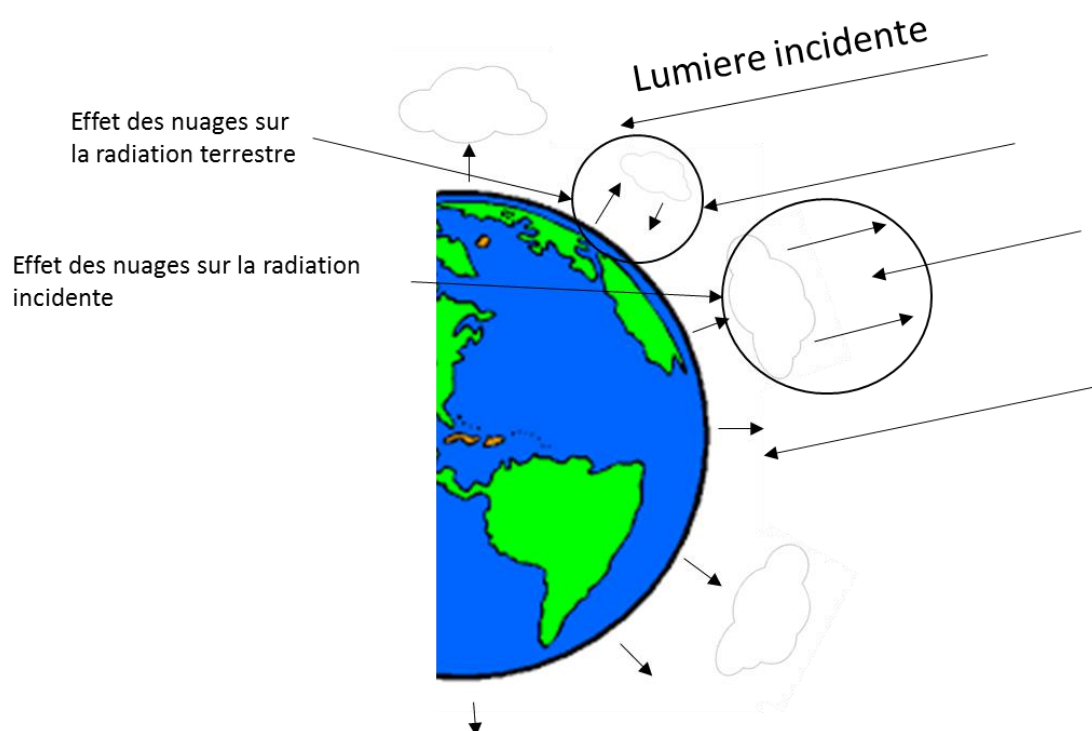


Figure A.1: Effet des nuages sur la radiation

L'activité humaine charge notre atmosphère de CO₂ et d'autres molécules (par exemple les hydrofluorocarbures qui viennent d'être interdits par le protocole de Kigali). Elles augmentent la

température de notre planète, en créant des problèmes dangereux et significatifs pour notre environnement et notre climat. Ces émissions ont pris leur essor il y a 200 ans avec l'augmentation démographique et le développement industriel basé d'abord sur la combustion du charbon, puis du pétrole et du gaz. Il est désormais urgent d'avoir des politiques énergétiques et environnementales pour réduire de façon significative l'impact que l'homme a sur l'écosystème global.

Une évaluation de la littérature par le US National Research Council (NRC) effectuée dans les années 2010 conclut : « Le changement climatique est en cours, il est dû en grande partie aux activités humaines et présente des risques significatifs pour et, dans de nombreux cas, affecte déjà un large éventail de systèmes humains et naturels. » [180].

Le "Groupe Intergouvernementale sur l'Evolution Climatique" (GIEC en français [181], 1988) présente des rapports périodiques pour tenter de prédire les effets des activités humaines sur l'écosystème mondial. Le dernier rapport climatique (2013) [182] indique:

- Sans nouvelles politiques visant à atténuer les changements climatiques, les projections indiquent une augmentation des températures moyennes mondiales en 2100 de 3,7 à 4,8 °C, par rapport aux niveaux préindustriels (valeurs médianes ; cela se situe entre 2,5 à 7,8 °C en tenant compte de l'incertitude climatique).
- La trajectoire actuelle des émissions de gaz à effet de serre n'est pas conforme à limiter le réchauffement planétaire au moins 1.5 ou 2 °C, par rapport aux niveaux préindustriels

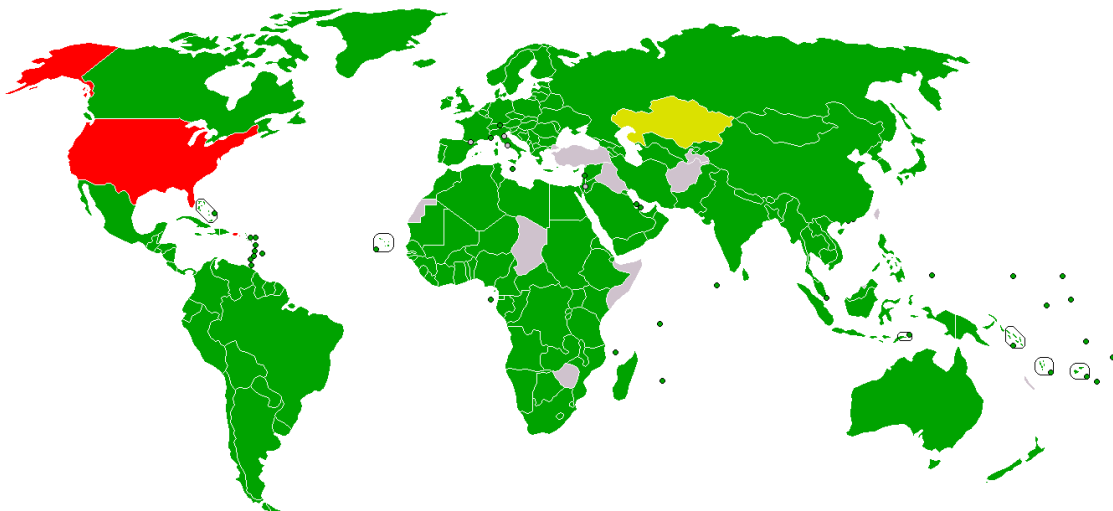
Les conséquences estimées de ce changement climatique peuvent se montrer assez lourdes sur notre écosystème conformément à la United Nations Framework Convention on Climate Change UNFCCC :

- Si les émissions se poursuivent sans relâche, le niveau global de la mer pourrait monter de près d'un mètre d'ici 2100. Si le réchauffement est limité à 2° C, le niveau de la mer augmentera encore de 0,5 m à la fin du siècle par rapport à 1985-2005
- L'intensité et la fréquence des incendies de forêt augmentent, les incendies dans la forêt amazonienne pourraient presque doubler d'ici 2050, avec une hausse de la température de 1,5 à 2° C au-dessus des niveaux préindustriels
- Les fortes précipitations augmenteront probablement dans certaines régions de la terre
- La durée et l'intensité des sécheresses pourraient augmenter dans de nombreuses régions

Il est donc nécessaire d'opérer des choix au niveau politique et énergétique pour limiter l'impact du réchauffement global.

Un des premiers traité sur les émissions anthropiques a été rédigée en 1992 à Rio de Janeiro avec la signature de 154 nations pour former le UNFCCC [183].

A ce jour, 175 pays et une organisation régionale d'intégration économique (CEE) ont ratifié ou ont lancé les procédures de ratification du protocole de Kyoto. Ces pays représentent 61,6 % des émissions de GES.



La Conférence de Paris sur le climat a eu lieu du 30 novembre 2015 à Bourget en France. Elle est à la fois la 21^{ème} conférence des parties (d'où le nom COP21) à la Convention-cadre des Nations unies sur les changements climatiques (CCNUCC) et la 11^{ème} conférence des parties siégeant en tant que réunion des parties au protocole de Kyoto (CMP-11). Chaque année, les participants de

cette conférence se réunissent pour décider des mesures à mettre en place, dans le but de limiter le réchauffement climatique.

Ce sommet international a réuni 195 pays, fixant comme objectif une limitation du réchauffement mondial entre 1,5 C et 2 C d'ici.

À Paris, les délégués des pays participant à la COP21, ont signé un accord dans lequel ils s'engagent à réduire les émissions dans le monde entier. L'importance de l'accord est donnée essentiellement par le fait qu'il a été signé par tous les pays participants : même des marchés émergents, qui profitent souvent de sources d'énergie non renouvelables. L'accord contient quatre engagements pour les pays qui ont souscrit : maintenir la hausse des températures en dessous de 2 degrés et s'efforcer de maintenir dans 1,5 degrés ; Arrêter les émissions de gaz à effet de serre croissantes dès que possible et d'atteindre dans la seconde moitié du siècle une production de nouveaux Gaz à Effet de Serre (GES) suffisamment faible à être absorbé naturellement ; Verser 100 milliards de dollars par an aux pays pauvres pour les aider à développer des sources d'énergie moins polluantes. Certaines de ces dispositions sont juridiquement contraignantes, par exemple, tous les pays sont tenus par le traité de l'objectif de réduction des émissions ayant pour but de fournir et de participer au processus d'examen de cinq ans.

Cela a conduit à la signature d'un autre protocole important, la modification de Kigali (15 octobre 2016). Au Rwanda, environ 150 pays ont trouvé un accord pour éliminer progressivement l'utilisation des HFC, les gaz utilisés dans le congélateur et les conditionneurs d'air, qui contribuent à l'effet de serre, un geste qui pourrait prévenir jusqu'à 0,5 degrés Celsius de réchauffement de la planète à la fin de ce siècle.

Le dioxyde de carbone n'est pas le seul gaz qui, si émis en quantités excessives, provoque une augmentation de l'effet de serre et donc le réchauffement de la terre. Contrairement aux chlorofluorocarbures (HCFC), HFC ne nuire pas à la couche d'ozone, dont éclaircie au cours des dernières années a entraîné le passage du rayonnement ultraviolet excessif du soleil dans l'atmosphère terrestre.

Pour cette raison, les signataires du protocole de Montréal (1987) avaient remplacé l'utilisation des HCFC au HFC. Dans l'intervalle, cependant, les HFC est devenu le troisième type de gaz responsable du réchauffement de l'atmosphère par le biais de réchauffement de la planète, après le dioxyde de carbone et de méthane. Des gaz comme les HFC et HCFC sont tenus responsables par les 8 pour cent de l'impact humain total sur le réchauffement climatique.

Le protocole de Kigali modifie le protocole de Montréal. La réduction de ces gaz sera divisée en trois phases. Auparavant, il incombera aux pays industrialisés, comme les États-Unis et l'Europe qui doivent atteindre en 2019 une réduction de 10 % des émissions HFC. La deuxième phase se concentrera sur les pays en développement, y compris la Chine, pour réduire les émissions à partir

de 2024. Le troisième concerne l'Inde, Pakistan, Iran, Irak et les pays du Golfe, qui commenceront à réduire l'utilisation du gaz de 2028. À la fin de 2040 tous les pays devraient consommer pas plus de 15 à 20 % de leurs parts respectives.

L'Union européenne est depuis longtemps engagée dans les efforts internationaux de lutte contre le changement climatique et se sent le devoir de donner l'exemple par le biais de politiques robustes au niveau local. Au niveau européen, un ensemble complet de mesures pour réduire les émissions de GES a été lancé par le Programme européen de changement climatique (PECC) en 2000.

La Commission européenne a pris de nombreuses initiatives liées au climat depuis 1991, quand a été publiée la première stratégie communautaire pour limiter les émissions de dioxyde de carbone (CO₂) et d'améliorer l'efficacité énergétique. Il s'agit de quelques objectifs principaux à atteindre avant 2020 : une directive vise à promouvoir l'électricité provenant des énergies renouvelables de 20%, augmenter de 20% l'efficacité énergétique⁵, et une réduction de 20% les émissions de GES par rapport à 1990.

⁵ soit la capacité d'adopter des systèmes physiques capables d'obtenir leur résultats en utilisant moins d'énergie

Annexe B. Formules supplémentaires pour le modèle de force de contact

Série d'équations pour le calcul des propriétés supplémentaires dans le modèle de contact de Hertz - Mindlin, les indices i et u indiquent deux particules génériques en contact, la force de contact \mathbf{F}_c est:

$$\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_n + \mathbf{F}_t$$

Équation B.1

Avec \mathbf{F}_n la force normale

$$\mathbf{F}_n = k_n \delta_n \mathbf{n} + \gamma_n \mathbf{v}_n$$

Équation B.2

Et \mathbf{F}_t la force tangentielle

$$\mathbf{F}_t = k_t \delta_t \mathbf{t} + \gamma_t \mathbf{v}_t$$

Équation B.3

\mathbf{F}_n est dirigé sur la ligne qui connecte les centres des deux particules en contact. μF_n est la limite supérieure de la force tangentielle, En utilisant le critère de Coulomb (équation b.4)

$$F_t \leq \mu F_n$$

Équation B.4

Avec μ le coefficient de frottement entre les deux grains en contact. Le coefficient k_n et k_t , le coefficient d'amortissement γ_n et γ_t sont définis comme suit :

$$k_n = \frac{4}{3} E^* \sqrt{r^* \delta_n}$$

Équation B.5

$$\gamma_n = -2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{m^* S_n}$$

Équation B.6

$$k_t = 8 G^* \sqrt{r^* \delta_n}$$

Équation B.7

$$\gamma_t = -2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{m^* S_t}$$

Équation B.8

$$S_{i,j}^n = 2 E_{i,j}^* \sqrt{r_{i,j}^* \delta_n}$$

Équation B.9

$$S_{i,j}^t = 8 G_{i,u}^* \sqrt{r_{i,j}^* \delta_n}$$

Équation B.10

$$\beta = \frac{\ln \varepsilon}{\sqrt{(\ln \varepsilon)^2 + \pi^2}}$$

Équation B.11

$$\frac{1}{E_{i,j}^*} = \frac{(1 - \theta_i^2)}{E_i} + \frac{(1 - \theta_j^2)}{E_j}$$

Équation B.12

$$\frac{1}{G_{i,j}^*} = \frac{(2 - \nu_i)}{G_i} + \frac{(2 - \nu_j)}{G_j}$$

Équation B.13

$$\frac{1}{r_{i,j}^*} = \frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j}$$

Équation B.14

$$\frac{1}{m_{i,j}^*} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$$

Équation B.15

Annexe C. Détermination des paramètres

- Module de Young

Soit P la charge appliquée sur une barre solide A qui génère des contraintes σ dans le corps. Soit δ la déformation relative telle que

$$\delta = \frac{l_0 - l_1}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0}$$

Équation C.1

Où l_0 est la longueur de la barre avant l'application de la charge P et l_1 est la longueur après l'application de la charge, le module de Young ou module d'élasticité s'exprime comme le rapport

$$E = \frac{\sigma}{\delta}$$

Équation C.2

- Module de Poisson

Soit P la charge appliquée sur un corps solide A qui génère des contraintes σ dans le corps. Soit δ_x la déformation relative d' A subie en direction de la force. Soit δ_y la déformation relative d' A dans la direction y , perpendiculaire à la force. Le coefficient de Poisson dans la direction y est le rapport

$$\nu_y = -\frac{\delta_y}{\delta_x}$$

Équation C.3

- Coefficient de frottement statique

Soit A un corps qui subit une force F et en contact avec V , un plan perpendiculaire à la force F . Soit F' une force parallèle au V . V appliquera une force F'' , définie comme force de frottement statique, égal et contraire à F' , dans la limite de

$$F' \leq \mu_s F$$

Équation C.4

Où μ_s est défini comme coefficient de frottement statique. Si F' est supérieur à la limite $\mu_s F$, alors :

$$F'' = \mu_d F$$

Équation C.5

Où μ_d est défini comme coefficient de frottement dynamique.

- Coefficient de restitution

Soit A un corps solide qui subit la force de gravité F , soit V un plan perpendiculaire à la force F . Soit H_0 la distance entre le corps A et le plan V , soit H_1 la hauteur atteint après l'impact avec V . À l'instant $t=t_0$, A tombe sous l'effet de la gravité avec une vitesse initiale $v_0=0$. Soit v' la vitesse avant la collision et soit v'' la vitesse après l'impact. Le coefficient de restitution ε sera :

$$\varepsilon = \frac{v''}{v'}$$

Équation C.6

En étant valable le principe de l'énergie mécanique avant et après l'impact et en considérant négligeable le frottement dû à la présence de l'air :

$$v = \sqrt{2gH}$$

Équation C.7

L'équation c.6 devient

$$\varepsilon = \frac{v''}{v'} = \sqrt{\frac{H''}{H'}}$$

Équation C.8

- Le module de cisaillement

Examinons le système de figure c.1. Considérons une plaque de longueur infinie et d'épaisseur h perpendiculaire à l'axe x , sur les faces de laquelle agissent des contraintes tangentielles (cisaillement) de sens inverse T_1 et $-T_1$. Cela produira un déplacement $\delta l/2$ dans le sens de z positif et $\delta l/2$ dans le sens inverse. Tout se passe comme si une surface reste fixe, et qu'il se produit un déplacement δl . Le déplacement total δL sera lié au cisaillement T_1 et à l'épaisseur h selon le rapport :

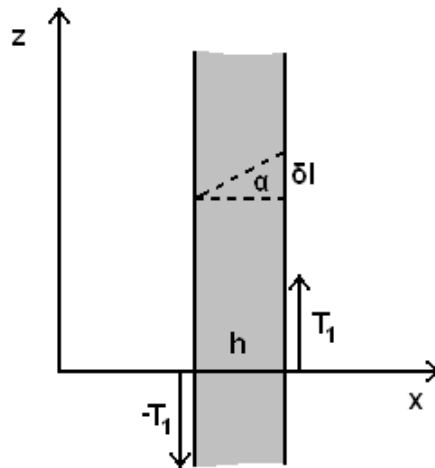


Figure C.1: Schéma représentatif pour la définition de G

$$\delta l = \frac{1}{G} h T_1$$

Équation C.9

où G est le module de cisaillement. Si l'on considère le déplacement angulaire α avec un angle égal à sa tangente, la relation va devenir tout simplement :

$$\alpha = \frac{T_1}{G}$$

Équation C.10

Annexe D. Calcul du coefficient de frottement tournant pour une particule cylindrique

Une méthode simple d'évaluation du frottement de roulement de l'approximation SE est donnée ci-dessous, suite aux travaux de Wensrich [138,139]. Pour une forme géométriquement complexe, le moment appliqué lors d'un contact avec une autre particule par la force normale peut être calculé comme :

$$M_\mu = |\mathbf{F}_n| (\mathbf{n} \times \mathbf{b}) = |\mathbf{F}_n| e$$

Équation D.1

Où $|\mathbf{F}_n|$ est le module de la force normale appliquée et e est l'excentricité, *i.e.* le produit vectoriel de \mathbf{n} , le vecteur unitaire de la force normale, et \mathbf{b} , le bras de levier. Une excentricité moyenne générale $\langle e \rangle$ peut être définie de cette expression :

$$\langle e \rangle = \frac{1}{A_{\text{tot}}} \int_a^{A_{\text{tot}}} |\mathbf{n} \times \mathbf{b}| dA$$

Équation D.2

Où A_{tot} est la surface totale de la particule.

Maintenant, considérons une particule cylindrique homogène de rayon r_c et longueur l dans un cadre de référence cylindrique, avec l'origine de l'axe sur le centre de gravité de cette particule et avec l'axe z parallèle à l'axe du cylindre. Une force normale à la surface \mathbf{F}_n est appliqué sur la particule

et **b** est le bras de levier du point d'application. Une représentation claire du système se trouve sur la figure d.1. Pour une surface cylindrique, il est facile d'écrire les coordonnées paramétriques de chaque point de sa surface :

$$\left\{ \begin{array}{l} z = k; k \in \left] -\frac{l}{2}, \frac{l}{2} \right[\\ x^2 + y^2 = r_c^2; x, y \in [-r_c, r_c] \end{array} \right. ; \left\{ \begin{array}{l} z = \pm \frac{l}{2} \\ x^2 + y^2 \leq r_c^2; x, y \in [-r_c, r_c] \end{array} \right.$$

Équations D.3

Le système d'équations à gauche représente la surface latérale, tandis que le système d'équations à droite représente les bases circulaires. Le bras de levier d'un point générique P situé sur la surface latérale est le rayon-vecteur allant du centre de masse à P ; Il peut être divisé en une partie radiale et une partie axiale :

$$\mathbf{b} = (\mathbf{b}_r + \mathbf{b}_z) = r_c \mathbf{u}_r + k \mathbf{u}_z$$

Équation D.4

Où **b_r** est la partie radiale du bras de levier, **b_z** est la partie axiale du bras de levier, **u_z** est la direction parallèle à l'axe du cylindre et **u_r** est la direction radiale.

Il est à noter que, dans l'équation d.5, les extrémités de la particule cylindrique sont négligées. Cette hypothèse n'est valable que lorsque $l \gg r_c$. Sur tous les points sur la surface latérale du cylindre, le vecteur normal à la surface est parallèle à la direction radiale et perpendiculaire à la direction axiale (figure d.1). Par conséquent, lorsqu'il s'agit du produit vectoriel, la partie radiale du bras élan n'aura aucune influence. Le produit vectoriel est alors :

$$\mathbf{n} \times \mathbf{b}_z = k \mathbf{u}_r \times \mathbf{u}_z = k (\mathbf{u}_t \perp r, z)$$

Équation D.5

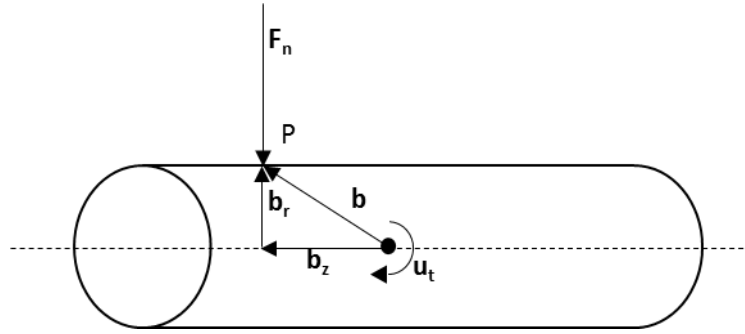


Figure D.1: Disposition de vecteur dans le calcul du bras de levier de la force normale appliquée sur une particule cylindrique

Où \mathbf{u}_t est la normale au plan généré par les deux vecteurs \mathbf{u}_z et \mathbf{u}_r :

$$\langle \mathbf{e} \rangle = \frac{1}{l} \int_0^{\frac{l}{2}} k \, dk = \frac{1}{2l} [k^2]_0^{\frac{l}{2}} = \frac{l}{8}$$

Équation D.6

Avec $dA = 2 \pi r \, dk$ et $A_{\text{tot}} = 2 \pi r \, l$. Maintenant, une expression de $\langle \mathbf{e} \rangle$ est disponible, le frottement tournant peut être évalué selon la méthode de Wensrich et al [138,139]:

$$\mu_{r,e} = \frac{\langle \mathbf{e} \rangle}{2 r_e} = \frac{l}{16 r_e}$$

Équation D.7

Où r_e est le rayon de l'approximation SE.

Annexe E. Théorie de la DTS

En sortie du cylindre, la concentration $C(t)$ en traceur est mesurée au cours du temps. La fonction de Distribution des Temps de Séjour $E(t)$ peut alors être calculée comme suit :

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt}$$

Équation E.1

La fonction $E(t)$ peut être utilisée pour évaluer le temps de séjour moyen \bar{t} et la variance de la distribution σ^2 :

$$\begin{cases} \bar{t} = \int_0^{\infty} tE(t)dt \\ \sigma^2 = \left[\int_0^{\infty} t^2 E(t)dt \right] - \bar{t}^2 \end{cases}$$

Équation E.2

Il est possible d'adimensionnaliser les courbes en traçant la fonction $E(t_{ad})$ en fonction du temps adimensionnel $t_{ad}=t/\bar{t}$, où \bar{t} est le temps de passage. Ceci permet de comparer des écoulements ayant des bases temporelles différentes. Un autre résultat de la DTS est la comparaison du temps de séjour moyen et du temps de passage. Cette comparaison n'est pas possible pour le cas expérimental, par contre est très facile dans la simulation. De manière générale [148], un écart important entre ces deux valeurs met en évidence un dysfonctionnement :

- Si $\bar{t} < \tau$, cela peut être dû à l'existence d'un volume mort dans le cylindre,
- Si $\bar{t} > \tau$, cela peut être dû à un phénomène de court-circuit dans le cylindre.

Les résultats de cette comparaison dans le cas des fours tournants ne sont pas tranchés. Certaines études ne trouvent pas de réelle différence entre \bar{t} et τ [184], alors que d'autres mettent en évidence

que des écarts significatifs entre ces deux valeurs peuvent apparaître pour les temps de séjour élevés [185], vu que dans le cas en examen les temps de séjour ne sont pas élevés et vu que il se vérifie dans la simulation que \bar{t} et τ n'ont pas d'écarts significatives, nous supposeront que ces deux valeurs sont égales.

Les deux principaux modèles utilisés pour représenter l'allure des courbes de DTS sont :

- Le modèle d'écoulement piston avec dispersion axiale qui quantifie la déviation par rapport à un écoulement piston. L'équation e.3 permet de calculer la fonction de distribution des temps de séjour pour ce modèle.

$$E_p = \frac{1}{2\bar{t}} \sqrt{\frac{Pe}{\pi}} \exp \left[-\frac{Pe(\bar{t} - t)^2}{4\bar{t}^2} \right]$$

Équation E.3

Le paramètre d'ajustement est le nombre de Péclet Pe . Plus ce nombre est élevé, plus l'écoulement est proche d'un écoulement piston.

- Le modèle de mélangeurs en cascade (RPAS, réacteurs parfaitement agités en série) qui quantifie la déviation par rapport à un unique mélangeur parfait. L'équation e.4 permet de calculer la fonction de distribution des temps de séjour pour ce modèle.

$$E_m = \left(\frac{J}{\bar{t}}\right)^J \frac{1}{(J-1)!} t^{J-1} \exp\left(-J\frac{t}{\bar{t}}\right)$$

Équation E.4

Le paramètre d'ajustement est le nombre de réacteurs en cascade J . Plus ce nombre est élevé, plus le comportement de l'écoulement s'éloigne de celui d'un mélangeur parfait.

Dans la littérature, deux méthodes ont été utilisées pour déterminer les paramètres Pe et J :

- La définition théorique des nombres Pe et J :

$$\begin{cases} \text{Pe} = 2 \frac{\bar{t}^2}{\sigma^2} \\ J = \frac{\bar{t}^2}{\sigma^2} = \frac{\text{Pe}}{2} \end{cases}$$

Équation E.5

- L'ajustement des paramètres : Pe et J sont alors déterminés afin de minimiser l'écart entre l'expérience et les résultats du modèle.

A partir du nombre Pe il est possible de calculer un coefficient de dispersion axiale D_{ax} (m²/s), défini comme suit.

$$D_{ax} = \frac{uL}{\text{Pe}} = \frac{L^2}{\bar{t} \text{Pe}}$$

Équation E.6

Où u est la vitesse axiale moyenne et L la longueur du cylindre.

Annexe F.Angle de talus

Pour utiliser DEM, il est d'abord nécessaire d'étalonner différents coefficients de frottement (glissement et roulement) pour les différentes approximations du bois. Pour atteindre cet objectif, nous avons réalisé des mesures de l'angle de talus [85,137–139]: les pellets ont été insérés dans un cylindre perforé en bas, placé sur un plan horizontal de bois. En soulevant lentement le cylindre, les granulés commencent à rouler sur le plan support, pour atteindre leur angle statique de repos. L'angle a été évalué en mesurant la hauteur de la pile ainsi que la distance moyenne entre le centre de la pile et quatre points en bord de pile (figure f.1).



Figure F.1: Angle de repos statique pour les granulés (à gauche) et le schéma des points de mesure P1, P2, P3 et P4 dont le centre est le point C (à droite)

Chaque expérience a été faite avec la même masse de pellets, 0.215 kg ; on obtient un angle moyen de 26° avec un écart de 1.3° . L'invariance de l'angle avec la masse, la vitesse du cylindre et la position des points de mesure a été vérifiée. Ces tests peuvent être reproduits directement dans le logiciel DEM, en adaptant les coefficients de friction différentes et les approximations. Les résultats de simulation pour le cas multisphérique sont présentés dans la figure f.2.

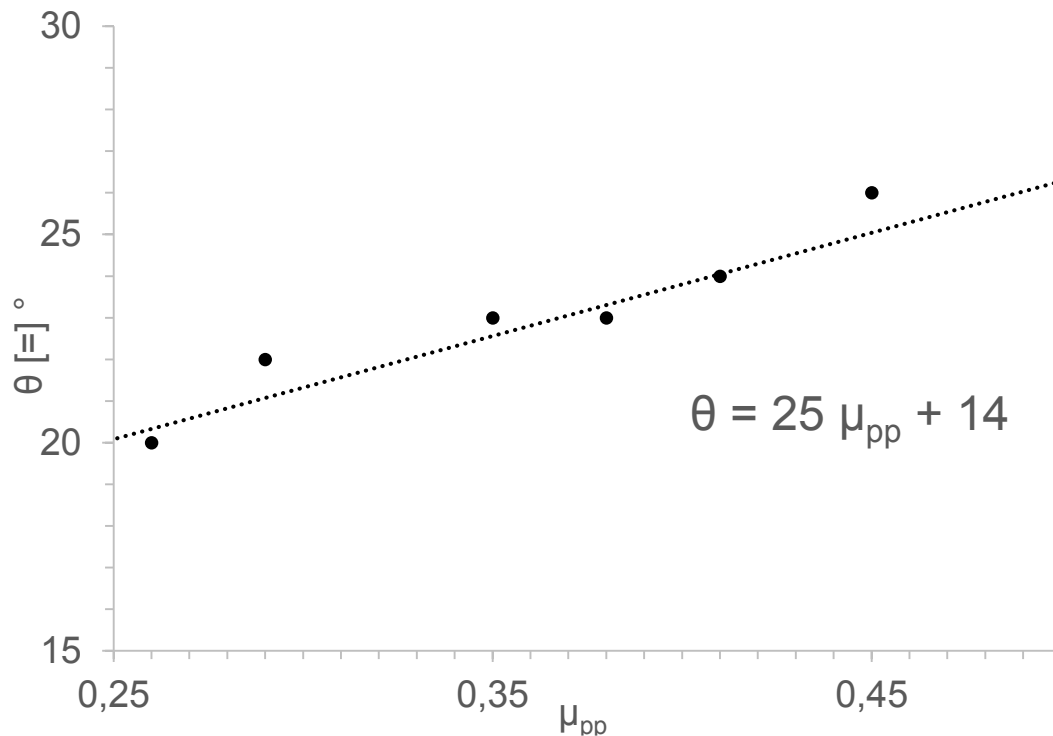


Figure F.2: Angle au repos statique en fonction du coefficient de frottement granulé-granulé μ_{pp} , représentation multisphérique (résultats de la simulation DEM).

La tendance est linéaire, ce qui n'est pas surprenant pour des faibles valeurs de l'angle de repos, étant donné la nature de la force de frottement.

Un μ_{pp} de 0,45 (correspondant à l'angle mesuré de 26°) sera utilisé dans ce qui suit comme coefficient de frottement granulé-granulé dans le cas de l'approximation multisphérique.

Dans le cas de l'approximation de la sphère équivalente, un couple de friction-frottement de roulement a été étalonné à partir de ce test. Le frottement de roulement est souvent utilisé pour reproduire les effets de moment d'inertie des particules non sphériques lors de l'utilisation de l'approche SE [138,139]. Toutefois, le moment d'inertie est une propriété géométrique : l'application d'une force normale sur une particule de forme différant de la forme sphérique donnera un couple dont la direction et la valeur dépendent de la position de ce contact, tandis que, dans le cas de l'approximation sphérique couplée à un modèle de frottement tournant, la force normale appliquée lors d'un contact crée un couple qui s'oppose toujours à la direction de rotation [186]. Cela signifie que, même si le frottement de roulement est utilisé pour expliquer les effets de la géométrie de la particule, il représente dans ce contexte une autre force opposée au mouvement et il y aura alors un nombre infini de couples (μ_{pp} , μ_r) qui donnent le même angle statique de repos. Toutefois un seul couple représentera correctement la forme de l'objet désiré et une condition supplémentaire à l'essai d'angle de talus est nécessaire pour définir le paramètre.

Dans ce travail, nous utilisons l'approche de Wensrich et al. [138,139]. Ces auteurs considèrent une excentricité moyenne pour calculer le coefficient de frottement de roulement d'une sphère équivalente (pour le calcul de l'excentricité moyenne, voir l'annexe d).

$$\mu_{r,e} = \frac{\langle e \rangle}{2 r_e}$$

Équation F.1

Pour la particule considérée, l'équation f.1 conduit à une valeur de $\mu_{r,e}$ égale à 0.18. Dans le cadre de ce travail, le couple (μ_{pp} , μ_r) choisi est (0.375, 0.18), parce qu'il correspond à l'angle expérimental de repos avec le frottement de roulement pour l'excentricité moyenne trouvée. Un autre couple (0.29, 0.3), qui donne aussi l'angle expérimental de repos, sera également considéré afin d'évaluer les effets d'un autre choix pour ce couple.

Une fois que les coefficients de frottement mutuel sont étalonnés, les coefficients de frottement avec la paroi doivent être évalués. Ces coefficients sont d'une importance primordiale pour une représentation correcte de la réalité, car les coefficients de frottement avec la paroi définissent le régime dynamique à l'intérieur de la cuve [141,142] grâce à leur influence sur l'angle dynamique de repos, qui semble avoir également une forte influence sur la ségrégation axiale [95,143]. Cet étalonnage se fait par le biais de tests simples à des vitesses de rotation différentes avec les sphères en acier ou les pellets de bois seuls à l'intérieur. De nombreuses études de simulation DEM traitent des particules sphériques à l'intérieur d'un tambour rotatif [144,145], du fait de la simplicité de la représentation sphérique. Toutefois, lorsqu'il s'agit de particules non sphériques, le système devient plus complexe pour des raisons aussi bien physiques que numériques.

Annexe G. Evaluation du coefficient de frottement tournant pour l'acier

Pour rendre l'expérience pour le calcul, nous avons choisi une géométrie comme celle de figure g.1. Une bille en acier est placée à un temps $t = 0$ sur un plan d'inclinaison α , grâce à l'action de la force poids la sphère commencera à rouler, si $\alpha < \bar{\alpha}$, où $\bar{\alpha}$ est l'angle pour lequel le mouvement commence à être mixte (glissement et roulement). À un instant t^* , la bille a atteint la fin du plan incliné avec vitesse v^* , dès lors, la bille va rouler sur une surface plane et, à cause du frottement de roulement, s'arrête au temps t^{**} .

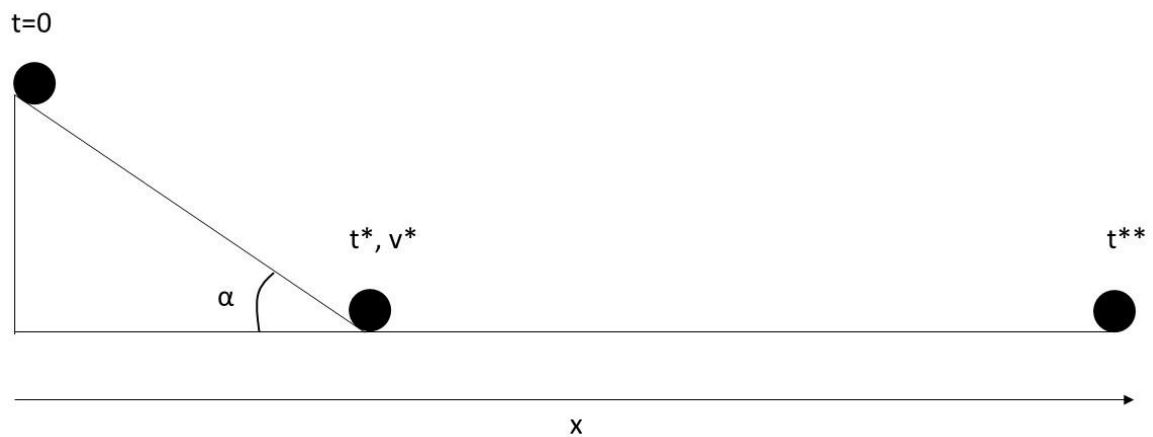


Figure G.1: Schéma de l'expérience pour la mesure du coefficient de frottement tournant

On peut écrire à ce stade les équations du mouvement : deux pour le tronçon sur le plan incliné et deux pour le plan horizontal. La représentation des vecteurs et des bras de levier des moments est fournie sur la figure g.2.

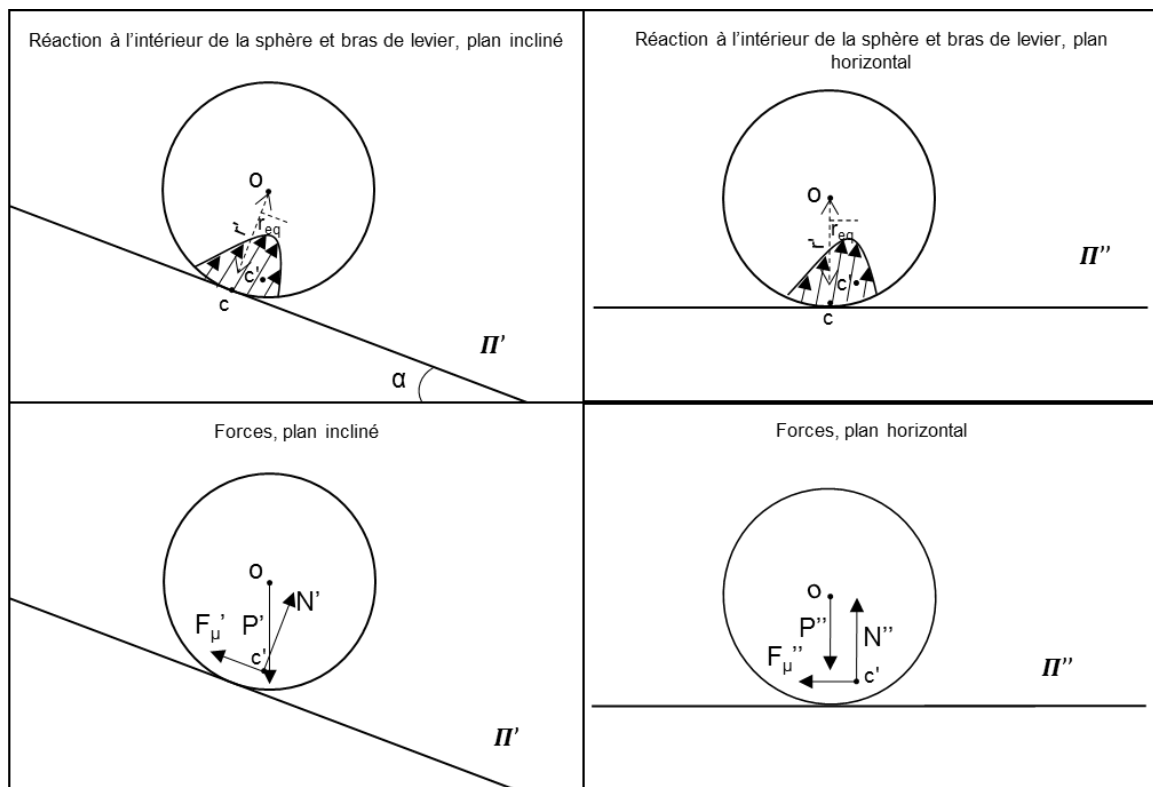


Figure G.2: Visualisation vectorielle du système expérimental

Équations pour le plan incliné, équilibre des forces

$$\mathbf{ma}_0 = \mathbf{P}' + \mathbf{N}' + \mathbf{F}_\mu' = \begin{cases} \mathbf{ma}_0 = -F_\mu' + P'_x, \text{ direction parallèle à } \Pi' & (a) \\ 0 = P'_y + N', \text{ direction perpendiculaire à } \Pi' & (b) \end{cases}$$

Équations G.1

Équilibre des moments par rapport au pôle C

$$(I + mr^2)\alpha_0 = \mathbf{r}' \wedge \mathbf{P}'_x + \mathbf{r}_{eq} \wedge \mathbf{N}'$$

Équation G.2

Équations pour le plan horizontal, équilibre des forces

$$\mathbf{ma}_1 = \mathbf{P}'' + \mathbf{N}'' + \mathbf{F}_\mu'' = \begin{cases} \mathbf{ma}_1 = -F_\mu'', \text{ direction parallèle à } \Pi'' & (a) \\ 0 = P'' + N'', \text{ direction perpendiculaire à } \Pi'' & (b) \end{cases}$$

Équations G.3

Équilibre des moments par rapport au pôle C

$$(I + mr^2)\alpha_1 = \mathbf{r}_{eq} \wedge \mathbf{N}''$$

Équation G.4

Avec \mathbf{P}' et \mathbf{P}'' les forces poids sur le plan incliné et le plan horizontal, respectivement, \mathbf{N}' et \mathbf{N}'' la réaction normale à la contrainte inclinée et horizontale respectivement, $I+mr^2$ est le moment d'inertie par rapport au point C (ou C', si $r' \approx r$), évalué par le théorème de Huygens-Steiner et r' est le nouveau bras en raison de la déformation, qui va désormais être considérée égale à r . Globalement, il y a 8 inconnues (α_0 , α_1 , a_0 , a_1 , N' , N'' , F_μ' et F_μ'') pour 8 équations (les équations g.1 (a) et (b), l'équation g.2, les équations g.3 (a) et (b), l'équation g.4 et deux conditions sur le mouvement de rotation pur: $\alpha_1 = a_1/r$ et $\alpha_0 = a_0/r$). Grâce à ce système, il est possible d'obtenir l'expression de μ_r : l'équation g.2 permet d'évaluer α_0 , sachant que P_x est la projection de la force poids parallèle au plan incliné et est égale à $mg \sin \alpha$ et N' est égal à $mg \cos \alpha$ (en étant $N' = P'_y$, équation (b) du système d'équations g.1). De là, il est possible d'obtenir le coefficient de frottement de rotation, μ_r , égal à r_{eq}/r :

$$\alpha_0 = \frac{rmg(\sin \alpha - \mu_r \cos \alpha)}{(I + mr^2)}$$

Équation G.5

L'équation g.4 permet d'évaluer α_1 , compte tenu de $N'' = mg$ (en étant $N''=P''$, équation (b) du système d'équations g.3) :

$$\alpha_1 = -\frac{\mu_r mgr}{(I + mr^2)}$$

Équation G.6

À ce stade, en utilisant les relations du mouvement de roulement pure, l'évaluation de v_1^* est triviale :

$$v_1^* = \frac{rmg(\sin \alpha - \mu_r \cos \alpha)}{(I + mr^2)} rt^*$$

Équation G.7

À ce stade il faut profiter de la condition $v_2^* = 0$ quand $t = t^{**}$ (équation du mouvement sur un plan))

$$t = t^{**} \Rightarrow v_2^* = 0 = \alpha_2 rt^{**} + v_1^*$$

Équation G.8

Enfin en remplaçant les divers termes :

$$\begin{aligned} -\frac{\mu_r mgr}{(I + mr^2)} rt^{**} + \frac{rmg \sin \alpha - \mu_r mgr \cos \alpha}{(I + mr^2)} rt^* &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{t^{**}}{t^*} &= \frac{\sin \alpha - \mu_r \cos \alpha}{\mu_r} \end{aligned}$$

Équation G.9

Dans cette procédure, on a utilisé implicitement l'hypothèse de l'égalité des μ_r dans le plan avec une inclinaison différente, qui n'est pas nécessairement vrai, parce que μ_r dépend fortement de la déformation du plan qui dépend alors de la force normale appliquée. Sur le plan incliné, la force normale est $N'=P_x'=mg\cos\alpha$, au lieu de cela dans le plan horizontal $N''=P''=mg$ (en étant $N''=P''$, équation (b) du système d'équations g.3). Considérant que α est très petit, l'hypothèse de non-glissement est respectée dans le contexte de l'expérience.

L'expérience est réalisée sur un plan dont l'inclinaison α est égale à 0.76° et avec une longueur parcourue moyenne de 4 cm ($x(t=t^*)-x(t=0)$). Sur la libération, la bille traverse le plan incliné puis elle s'arrête sur le plan horizontal. Les expériences dans lesquelles la bille n'effectue pas une trajectoire rectiligne sur le plan horizontal sont négligées pour éviter les effets parasites sur le système. À considérer que $F_{\mu'} = 0.07 \text{ N} < F_{\mu',\text{lim}} = \mu_s mg \cos\alpha = 0.1 \text{ N}$ et $F_{\mu''} = 0.01 \text{ N} < F_{\mu'',\text{lim}} = \mu_s mg = 0.1 \text{ N}$, où $F_{\mu'}$ et $F_{\mu''}$ ont été obtenues par le système d'équations g.1 et par le système d'équations g.3.

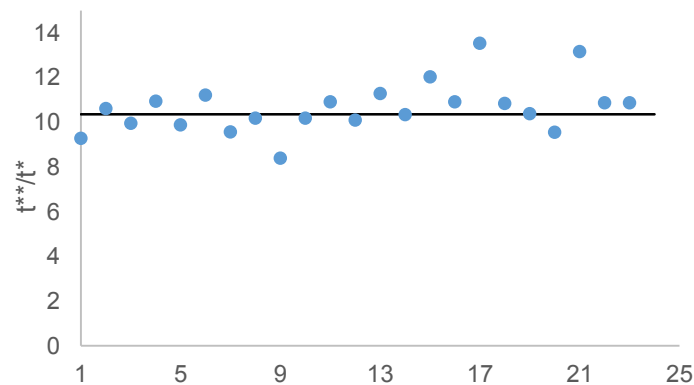


Figure G.3: Essais pour l'évaluation de μ_r , valeurs de t^{**}/t^*

À ce stade, pour dériver μ_r , il suffit de mesurer les deux temps t^* et t^{**} . La figure g.3 affiche les résultats de la preuve expérimentale, qui conduisent à une valeur de μ_r de 0.0025 avec un écart moyen de 0.00032.

Annexe H. Evaluation du transfert de chaleur entre deux particules en contact

Chaudhuri et al. [151] ont lié le transfert de chaleur par conduction entre deux particules en contact à la théorie de Hertz [111]. Selon la théorie de Hertz, pendant le contact entre deux particules sphériques il se développe une surface de contact circulaire de rayon :

$$A_c = \left(\frac{3F_n r^*}{4E^*} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Équation H.1

Il est donc possible de quantifier le flux de chaleur conductif qui traverse cette surface grâce à une loi d'échange linéaire :

$$\dot{Q}_{ij} = 4 \frac{k_i k_j}{k_i + k_j} (T_i - T_j) A_c^{0.5}$$

Équation H.2

Où k_i , k_j , T_i et T_j sont respectivement les conductivités et les températures des deux particules en contact et \dot{Q}_{ij} est le flux de chaleur échangé entre les deux particules i et j .

Si on suppose qu'il n'y a pas de gradient de température à l'intérieur de la particule (soit $dT/dr=0$), il est possible d'écrire l'évolution thermique des deux particules :

$$\begin{cases} T_i^{t+dt} = \frac{\sum \dot{Q}_i}{\rho_i c_{p,i} V_i} dt + T_i^t \\ T_j^{t+dt} = \frac{\sum \dot{Q}_j}{\rho_j c_{p,j} V_j} dt + T_j^t \end{cases}$$

Équation H.3

Où $\sum \dot{Q}_i$ et $\sum \dot{Q}_j$ sont la somme de tous les flux de chaleur qui arrivent sur chaque particule.

Annexe I. Evaluation des surfaces pour le modèle thermique

Les différentes surfaces d'échanges ou volumes qui interviennent dans les formulations mathématiques des modèles sont explicitées dans cette annexe. Ces grandeurs sont définies localement pour chaque RPA selon l'axe du four à partir de la hauteur de solide $h(J, t)$ (interface entre la phase solide et la phase gazeuse).

Les surfaces utiles sont définies ci-dessous :

- S_s représente la surface transversale de la phase solide,
- S_g représente la surface transversale de la phase gazeuse,
- S_l représente la surface "libre" de solide ou surface interface entre les phases gazeuse et solide,
- S_{pc} représente la surface de la paroi interne du tube rotatif couverte par le solide,
- S_{pd} représente la surface de la paroi interne du tube rotatif non couverte par le solide (en contact avec la phase gazeuse),

Il est possible d'exprimer mathématiquement ces grandeurs à partir des variables hauteur de charge ou angle de charge ainsi que des différents rayons, les formules pratiques sont obtenues par des considérations géométriques (les équations i.1 représentent les surfaces relatives au solide et au gaz, les équations i.2 représentent les surfaces relatives à la paroi externe).

$$\begin{cases} S_s = \frac{R^2}{2} (\varepsilon - \sin \varepsilon) \\ S_g = R^2 \left[\pi - \frac{1}{2} (\varepsilon - \sin \varepsilon) \right] \\ S_l = 2L_J \Delta z(J_i) = 2(2Rh(J_i) - h(J_i)^2)^{0.5} \Delta z(J_i) \end{cases}$$

Équations I.1

$$\begin{cases} S_{pc} = R\varepsilon \Delta z(J_i) \\ S_{pd} = R(2\pi - \varepsilon) \Delta z(J_i) \end{cases}$$

Équations I.2

Les volumes de solide ($V_{J_i}^{\text{Tot}}$), de gaz ($V_{J_i}^g$) ou de la paroi ($V_{J_i}^p$) s'expriment par

$$\begin{cases} V^{\text{Tot}}_{J_i} = V^b_{J_i} + V^a_{J_{j-1}} + V^a_{J_j} + V^{\text{gi}}_{J_i} = S_s \Delta z(J_i) \\ V^g_{J_i} = S_g \Delta z(J_i) \\ V^p_{J_i} = \pi(R_e^2 - R^2) \Delta z(J_i) \end{cases}$$

Équations I.3

Annexe J.Evaluation de la masse volumique pour le gaz dans le lit

L'évaluation de la masse volumique des gaz pour le modèle thermique est calculée à travers l'équation des gaz idéaux :

$$\rho = \frac{P \cdot M_g}{RT}$$

Équation J.1

Où $P \cdot M_g$ est le poids moléculaire du gaz, P la pression, R le constant universel des gaz et T la température du gaz

Annexe K. Evaluation de temps caractéristiques

L'objectif de cette analyse est d'évaluer la cohérence de l'utilisation de cinétiques intrinsèques dans le modèle de pyrolyse en four tournant. Ceci nécessite donc d'identifier les phénomènes limitants du procédé. Les phénomènes devant être pris en compte sont d'une part les réactions de pyrolyse et, d'autre part, les transferts thermiques au sein des particules. La comparaison des temps caractéristiques de ces deux phénomènes permettra de conclure sur l'hypothèse d'iso-thermicité des plaquettes de hêtre au cours de la transformation.

Le temps caractéristique des réactions de pyrolyse t_{Py} (s) est calculé suivant l'Équation A.1 [187–189].

$$t_{Py} = \frac{1}{k^r}$$

Équations K.1

Avec k^r (s⁻¹) la constante cinétique des réactions. Elle représente donc le cas le plus défavorable pour l'identification du régime chimique. Le temps caractéristique de diffusion de la chaleur au sein des plaquettes de bois est calculé suivant l'Équation A.2.

$$t_{Tr} = \frac{\rho_{bois} c_{p,bois} r_{bois}^2}{k_{c,bois}}$$

Équations K.2

Où ρ_{bois} (kg/m³) est la masse volumique des particules, $c_{p,bois}$ (J/kgK) leur capacité thermique massique, r_{bois} (m) leur longueur caractéristique et $k_{c,bois}$ leur conductivité thermique (W/mK).

Le nombre de pyrolyse Py est un nombre adimensionnel défini comme le ratio entre le temps caractéristique des réactions et le temps caractéristique de diffusion de la chaleur au sein des particules. Il peut donc être calculé suivant l'équations k.3 :

$$Py = \frac{t_{Py}}{t_{Tr}} = \frac{k_{c,bois}}{k^r \rho_{bois} c_{p,bois} r_{bois}^2}$$

Équations K.3

$c_{p,bois}$ [=] W/kgK	107.1+3.93T
ρ_{bois} [=] kg/m ³	1180
r_{bois} [=] m	0.0043
$k_{c,bois}$ [=] W/mK	0.18

Tableau K.1: Propriétés pour le calcul du nombre de Pyrolyse

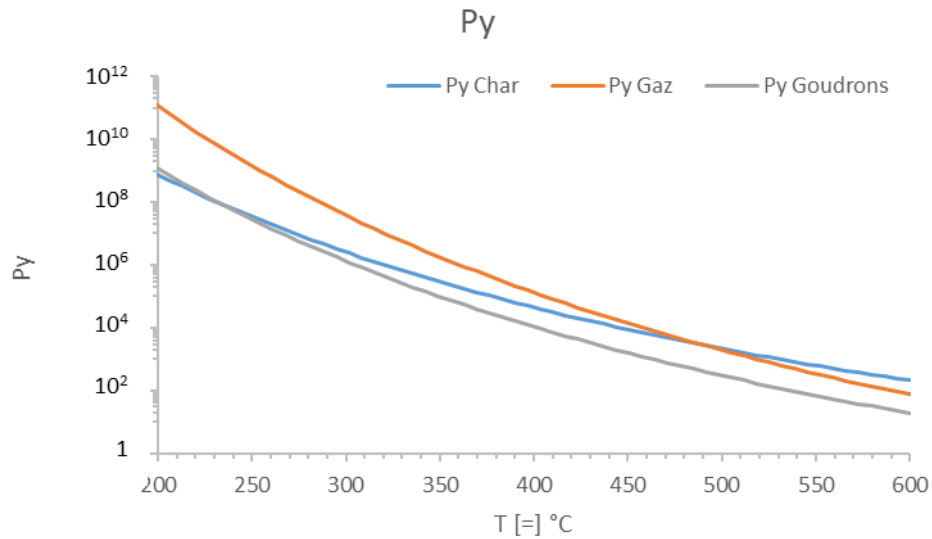


Figure K.1: Nombres de pyrolyse en fonction de la température pour les trois réactions

Les valeurs retenues pour les différents paramètres de l'équation k.3 sont présentées dans le tableau k.1. La figure k.1 présente les valeurs du nombre de pyrolyse, Py , calculées pour différentes températures de Pyrolyse et avec les trois constantes cinétiques (tableau 3.7). En effet, le Py plus bas dans le champ analyse (Py Goudrons), vaut 10^4 et 20 pour des températures de traitement de 400 et 600 °C respectivement. Ceci signifie que le temps nécessaire aux transferts de chaleur intraparticulaires est négligeable devant les temps de réaction dans le champ considéré, mais si la température augmente, il peut y avoir des problématiques liées au transfert de chaleur interne. Il est donc acceptable de considérer des particules homogènes en température et d'utiliser des cinétiques intrinsèques.

Annexe L.Axial segregation of a binary mixture in a rotating tumbler with non-spherical particles: experiments and DEM model validation.

Article paru dans la revue Powder Technology (R. Maione, S. Kiesgen De Richter, G. Mauviel, G. Wild, Axial segregation of a binary mixture in a rotating tumbler with non-spherical particles: Experiments and DEM model validation, Powder Technol. 306 (2017) 120–129.)

Abstract

The axial segregation behavior of a binary mixture made of spherical and non-spherical particles is studied experimentally and numerically using Discrete Element methods (DEM). Two different shape approximations are used for modelling cylindrical particles: the equivalent sphere and the multisphere approximation. The coefficients required by DEM are calibrated partly by separate experiments, partly by geometrical considerations. The main objective is to dispose of a simple procedure to characterize the friction coefficients and to evaluate the main changes imposed by shape in an axial segregated rotating tumbler. The simulations match with the experimental observations in the multisphere case, the transient behavior is caught with accuracy with both approximations.

Highlights

- DEM multisphere approximation can finely reproduce the axial segregation observed experimentally
- Two equivalent sphere approximations are compared with the multisphere model
- A novel procedure is used to calibrate the friction coefficient in DEM algorithm. The results are highly influenced by the calibration procedure

Keywords: Segregation, Discrete element method (DEM), Particle shape, Rotating tumbler, Calibration procedure.

Introduction

Some commercially important issues in granular media concern the optimization of their transport, storage or mixing properties. In fact, most of the energy in these industries is dissipated by the Joule effect during granular materials mixing. Rotating tumblers are simple devices, they find application in many fields of industry and are used for many purposes [21,65–68]; however, their efficiency is often impaired by several operational problems, like segregation. These processes are usually designed from empirical knowledge. The lack of meaningful and robust correlations between the characteristics of the powders and their behavior during mixing storage is critical for the design of industrial solutions. Optimized solutions based on energy savings could be obtained with a better understanding of the property-structure link from the (micro-) scale of the particle to the (macro-) scale of the process. Segregation affects many devices for the treatment of granular material, it is often driven by differences in particle properties, and it is affected by the tumbler geometry. There are two kinds of phenomena: radial segregation, a fast segregation phenomenon in which particles segregate forming a radial core inside the solid bed, and axial segregation.

Axial segregation is a meta-stable slow segregation phenomenon that consists in the separation of particles in bands approximately perpendicular to the axis, it is initiated on the end walls [95–97], with bands traveling inside the rotating tumbler and merging [98]. The origin of the formation of such bands is the initial creation of a segregated core of grains which is formed in the radial direction of the drum [99,100,102]. Understanding this initial radial segregation is a key factor in achieving a better understanding of the complete segregation process.

Both radial and axial segregations in rotating drums occur, for example, when particles differ in density, frictional properties or size. Most studies up to date on the segregation of a granular mixture in rotating cylinders have only considered spherical particle [190]. A challenging case is that in which particles of different shape and density are present. This last situation is of practical importance since many of the granular flows encountered in nature and industry involve particles of different sizes, shapes, and densities. Recently, Some work reported the formation of a streak pattern in a mixture of spherical and non-spherical particles in rotating tumblers [191], suggesting that the percolation mechanism during segregation is hampered by the effect of particle shape [192,193].

In order to improve our understanding, numerical 3D modeling is of paramount importance. One way for doing this is the Discrete Element Method (DEM) [172], a technique that tracks a large assembly of particles using a Lagrangian approach, resolving for each particle the Newton equations of motion and evaluating the forces during contact through a soft-sphere approach. DEM gives detailed information on every particle inside the simulation environment, but it is often difficult to model non-spherical particles. Different methods exist to represent shape [118–122,125,194,195] in the DEM

framework, but most methods are not versatile and lack generality. The multisphere approximation can overcome this problem, it consists of clustering multiple spheres together in order to approximate the desired shape, however high quality approximations may require a high number of spheres and increase considerably the load on the simulation.

In this work, an experimental analysis of axial segregation on a laboratory-scale rotating tumbler for a mix of wood pellets and steel spheres is presented. The choice of these particular materials is principally due to the experimental problem of the SEA Marconi pyrolysis reactor, illustrated in a previous publication [147]. Experimental measurements are compared with DEM simulations. The wood pellets were simulated through two different approaches, the multisphere method, and the equivalent sphere approximation, consisting of a sphere representation of the real particle inside the simulation environment. Two crucial aspects of particle dynamics inside the rotating drum are studied: mixing and radial segregation, as well as axial dispersion. Both experimental and numerical results are consistent with the existence of fast density-driven axial segregation behavior with the wood particles on the end walls and steel spheres concentrating in the central part of the cylinder.

Experimental Setup

The experimental system used in this work is presented in figure I.1. The rotating tumbler (figure I.1, element 1) has a diameter of 0.12 m and it is 0.135 m long, the tumbler walls are all transparent for visual observation. The system is closed to the solid particles.

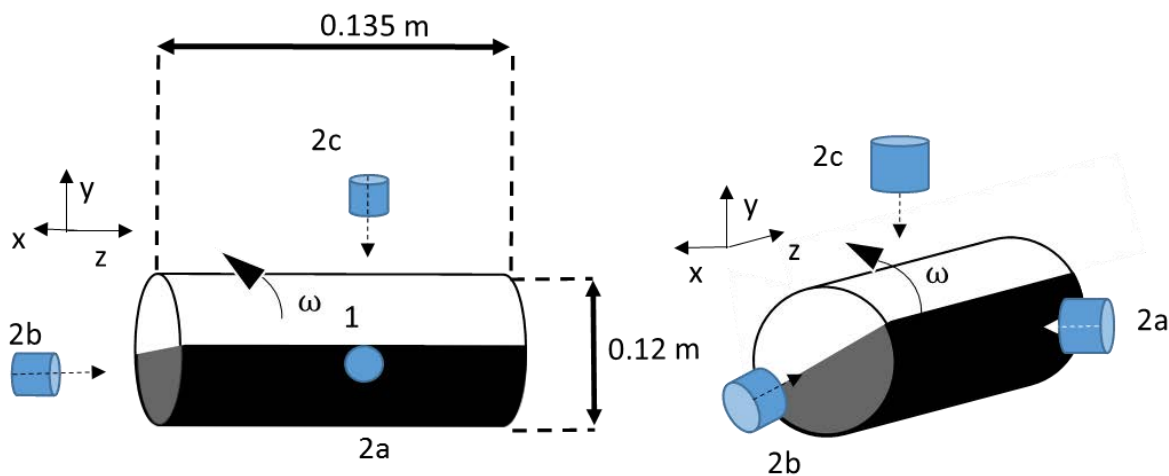


Figure I.1: Experimental apparatus. 1. Rotating tumbler, 2a Camera position back view, 2b Camera position radial view, 2c Camera position axial view

A CCD high-speed camera allows the recording of images through the walls; a speed of 15 frames per second was used for tests with steel balls and pellets mixed together. Three different views were used to record different zones of the rotating tumbler: the cylinder walls before the avalanche (figure I.1, element 2a), the radial zone on the end walls (figure I.1, element 2b) and the surface of the bed (figure I.1, element 2c). The frames are analyzed afterwards to study the segregation regimes and the dynamic angle of repose through thresholding of the images. The rotating tumbler is connected to an electric engine, which allows a precise rotation with no oscillation of speed and no vibrations for a rotation velocity in the range of [10 rpm, 100 rpm]. The whole system is mounted on an adjustable support, to assure the horizontality of the rotating tumbler. This system was used for calibration purposes as well as for segregation studies. Two types of particles were used in the experiments: steel spheres and wood pellets (figure I.2).

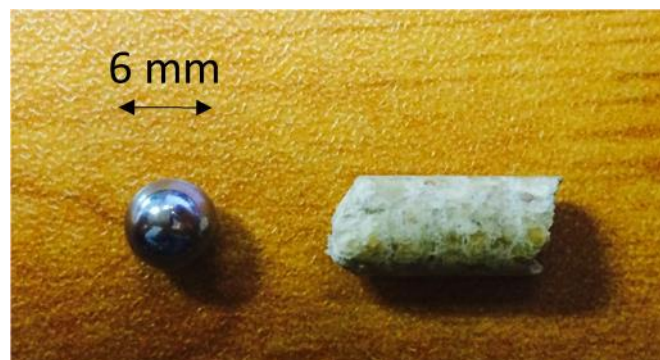


Figure L.2: A pellet and a steel sphere used in our experiments

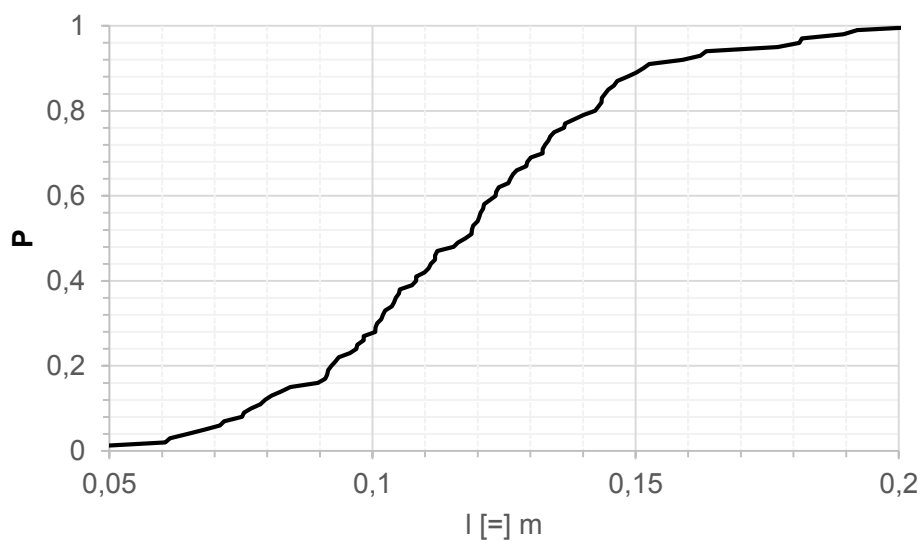


Figure L.3: Length distribution for pellets

The measured properties are presented in table I.1; the length distribution of wood pellets is presented in figure I.3. The wood pellets are considered as cylindrical; their diameter distribution is very narrow and considered constant (6 mm) in this work.

Property	Steel spheres	Wood pellets
ρ (density) [=] kg/m ³	8000	1140
r (radius) [=] m	0.0027	0.003
l (length) [=] m		0.12 (mean)
Ψ (sphericity)	1	0.834 (mean)
I_x (Inertia moment along the major axis) [=] kg m ²	$1.44 \cdot 10^{-9}$	$1.74 \cdot 10^{-9}$
$I_y = I_z$ (Inertia moment along the minor axis axis) [=] kg m ²	$1.44 \cdot 10^{-9}$	$5.51 \cdot 10^{-9}$

Tableau L.1: Particle properties

Simulation methods

The simulations presented in this work are based on the model developed by Cundall and Strack [172], namely the DEM (discrete element method); it consists in a Lagrangian tracking of every particle in the simulation, contact is modeled through the soft-sphere approach, *i.e.* particles are allowed to slightly overlap in order to compute the forces during contact. The DEM code used in this work is the open source software LIGGGHTS [173,174] (**L**AMMPS for **I**mproved **G**eneral **G**ranular and **G**ranular **H**eat **T**ransfer **S**imulations). The contact model used is a modified version of the well-known Hertz-Mindlin model [196,197]. The constitutive equations of the model can be found in the appendix A. Three simulation types were computed:

- Steel spheres in the rotating tumbler
- Wood pellets in the rotating tumbler
- Mixed system with wood pellets and steel spheres at different rotation velocities and different quantities of wood and steel.

The wood pellets are simulated with the multisphere approach and the equivalent sphere approach.

Two types of approximations were used for wood pellets in this work: a multisphere approximation and an equivalent sphere approximation (figure I.4).

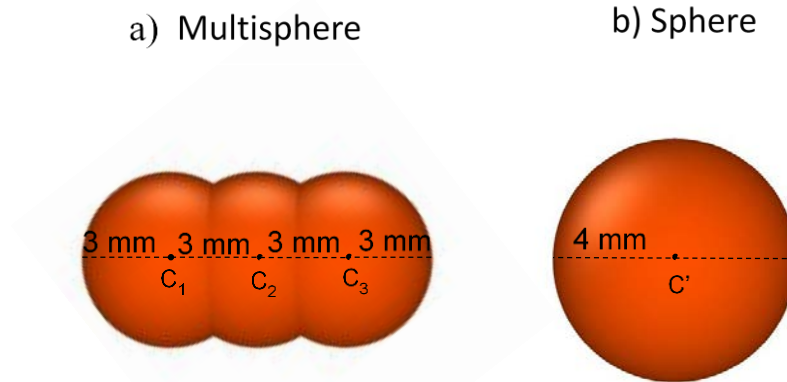


Figure I.4: Multisphere and sphere approximation

For the multisphere approximation, the whole distribution of figure I.3 is represented by a single template (figure I. 4.a) formed by three spheres of 0.003 m radius clustered together in order to form the mean size of the pellet length distribution. The distance between the centers of neighboring spheres is a radius, hence there is a partial overlapping between them. The density of the modeled pellet is adjusted to obtain the same mass and moment of inertia for the average real particle and the modeled pellet. For the equivalent sphere approximation (figure I. 4.b), the particle size distribution was used. The radius of the equivalent sphere was chosen in order to have the same volume as the original pellet.

The dynamic and contact properties of the particles are presented in table I.2.

Particle	Steel, sphere	Wood, sphere	Wood, multisphere
Ψ (sphericity)	1	1	0.89
E (Young modulus) [=] N/m ²	$1 \cdot 10^7$	$1 \cdot 10^7$	$1 \cdot 10^7$
ε (restitution coefficient)	0.6	0.6	0.6
θ (Poisson ratio)	0.33	0.3	0.3
r (radius) [=] m	0.0027	0.0042 ± 0.0003	0.003 (elementary sphere)
ρ (density) [=] kg/m ³	8000	1140	1140
I_x (Inertia moment along the major axis axis) [=] kg m ²	$1.44 \cdot 10^{-9}$	$2.5 \cdot 10^{-9}$	$1.43 \cdot 10^{-9}$
$I_y = I_z$ (Inertia moment along the minor axis axis) [=] kg m ²	$1.44 \cdot 10^{-9}$	$2.5 \cdot 10^{-9}$	$3.81 \cdot 10^{-9}$

Tableau L.2: Dynamic and contact particle properties for DEM simulations

The restitution coefficient and the Poisson ratio used were taken from [124]. A low Young modulus was used in order to speed up simulations, the time for collision Δt is 10^{-3} s, hence, in order to have a precise computation of the contact, the time step is chosen to be $\Delta t/40$, *i.e.* $2.5 \cdot 10^{-5}$ s. With these coefficients, 24 hours are required to achieve a steady state in the case of mixed system of steel balls and wood pellets. The simulations were performed on a cluster, using an Intel Xeon X5650 processor. In order to compare the transitory and the stationary phases a common initial state between experience and simulation is defined with wood pellets on the bottom and steel spheres on top.

The steel – steel friction (μ_{ss}) coefficient and steel – pellet (μ_{sp}) friction coefficient were taken from [147]. The other friction and rolling friction coefficients were calibrated externally through different tests.

Results

Static angle of repose

The first part of this work consists in the calibration of the individual coefficients of friction (sliding and rolling) for the different wood approximations. In order to achieve this goal, experiments of static angle of repose were performed [85,137–139]: the pellets were inserted in a cylinder perforated at

the bottom, placed on a horizontal wood plane. By slowly lifting the cylinder, pellets start to roll on the wood plane, achieving their static angle of repose. The angle was evaluated by measuring the height of the pile and the distance from the center of four points at the end of the pile (figure I.5, points P1, P2, P3 and P4 are the measurement point and C is the center of the pile).



Figure I.5: Static angle of repose for pellets (left) and schematic of measurement points P1, P2, P3 and P4 with the center point C (right)

Every experiment was done with the same mass of pellets, 0.215 kg, measuring a mean angle of 26° with a standard deviation of 1.3° . The invariance of the angle with mass, cylinder speed and the position of the measurement points has been verified.

These tests can be reproduced directly in the DEM software, on varying the different friction coefficients and the approximations. The simulation results for the multisphere approximation are presented in figure I.6. The trend is linear, which is not surprising for low values of the angle of repose, given the nature of the friction force.

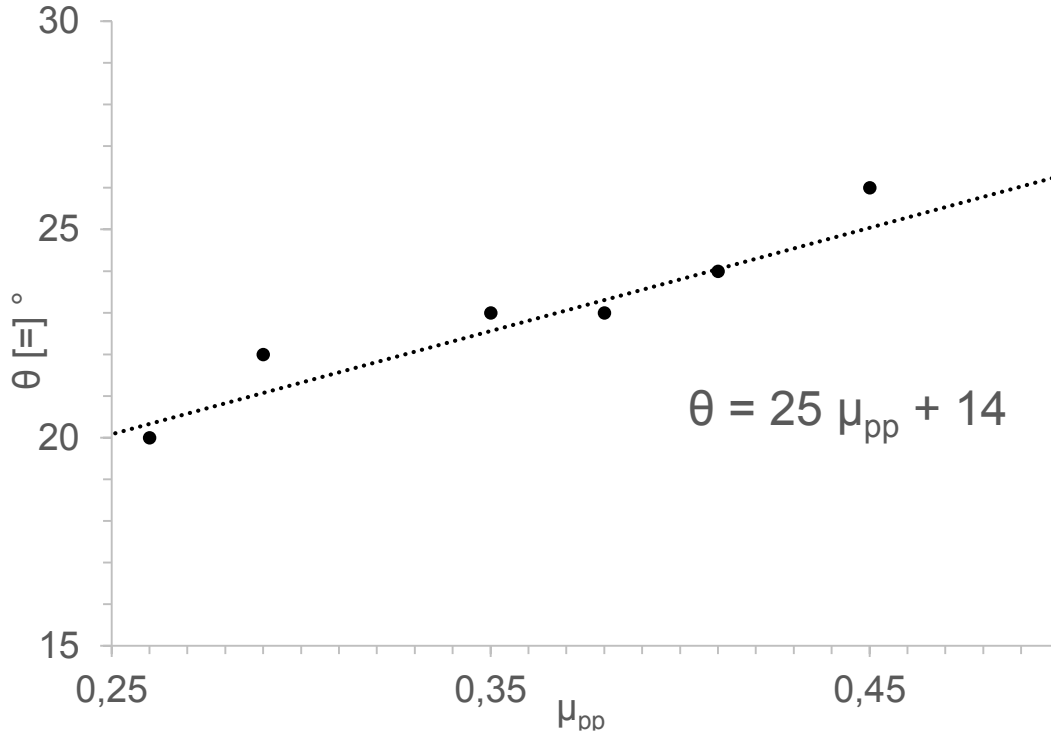


Figure L.6: Static repose angle as a function of pellet-pellet friction μ_{pp} , multisphere approximation (results of DEM simulation).

A μ_{pp} of 0.45 (corresponding to the measured angle of 26°) will be used in the following for pellet - pellet friction in the case of multisphere approximation.

In the case of the equivalent sphere approximation, a couple friction-rolling friction was calibrated based on this test. Rolling friction is often used to account for the effects of the inertia momentum of non- spherical particles when using the equivalent sphere approach [138,139]. However the inertia momentum is a geometric property: applying a normal force on a particle of generic shape will give a torque with direction and magnitude depending on the position of this contact, while, in the case of the spherical approximation coupled with a rolling friction model, the normal force applied during contact creates a torque always opposed to the direction of rotation [186]. This means that even if rolling friction is used to account for the effects of particle geometry, in this context it represents another force opposed to movement and there will be an infinite number of couples (μ_{pp} , μ_r) that yield the same static angle of repose. However only one couple will represent fairly the shape of the desired object and a condition is needed to set one of the parameter.

In this work we use the approach of Wensrich et al. [138,139]. These authors considered a mean eccentricity to calculate the rolling friction coefficient of an equivalent sphere approximation (for the calculation of the mean eccentricity, see the appendix).

$$\mu_{r,e} = \frac{\langle e \rangle}{2 r_e}$$

Équations L.1

For the particle considered, equation 1 leads to a value of $\mu_{r,e}$ equal to 0.18. In the frame of this work, the couple (μ_{pp} , μ_r) chosen is (0.375, 0.18), because it corresponds to the experimental angle of repose with the rolling friction found with the mean eccentricity. Another couple (0.29, 0.3), which also yields the experimental angle of repose, will also be considered, in order to assess the effects of an other choice for this couple.

Rotating tumbler with a single species

Once the mutual friction coefficients are calibrated, the sliding friction coefficients with the wall must be evaluated. These coefficients are of paramount importance for a correct representation of reality, because the sliding friction coefficients with the wall define the dynamic regime inside the tumbler [141,142] through the establishment of the dynamic angle of repose, which is thought to have also a strong influence on axial segregation [95,143]. This calibration was done through simple tests with steel and wood pellets alone inside the tumbler at different rotation velocities. Many DEM simulation studies deal with spherical particles inside a rotating tumbler [144,145], thanks to the simplicity of the spherical representation. However, when dealing with non-spherical particles, complexities are added to the system: a numerical complexity related to a fair shape representation within the DEM framework, and physical complexities.

For steel calibration, a single test at 40 rpm and 1.5 kg of steel was made. The steel tends to organize itself in layers (figure I. 7): the layer in contact with wall and the bulk.

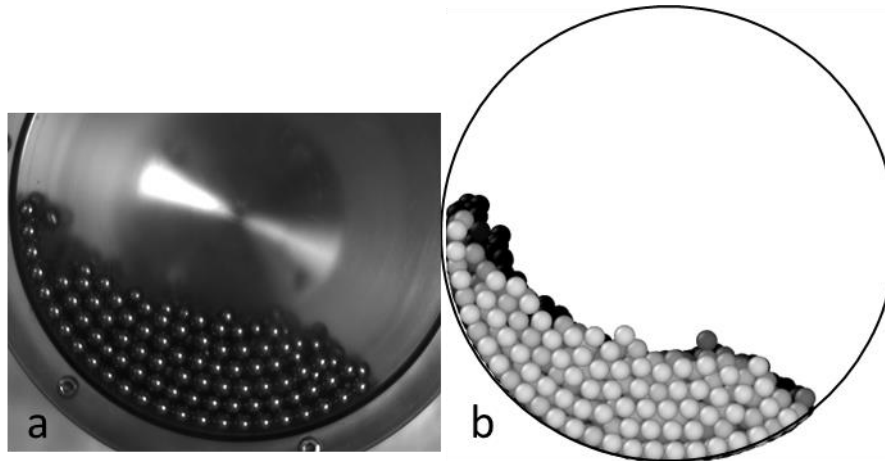


Figure L.7: Comparison between DEM simulation and experience for the rotating tumbler filled with steel particles. a) Experimental case, b) DEM simulation, $\mu_{sw} = 0.22$, 2106 steel particles, 40 rpm.

For a bed composed by steel spheres, it is difficult to define a dynamic angle of repose, because the bed has no regular shape. Hence, in order to compare with the experience, the center of the particles belonging to the 'active surface' is tracked to compute a mean inclination of the bed through a least mean square linear regression; this procedure is carried out both for experiences and simulations. The resulting angle for steel spheres is 26° (figure I. 7.b) and resulting in a value of 0.22 for μ_{sw} in the DEM simulation.

For the wood pellet-wall sliding friction coefficient (μ_{pw}), the test was conducted at 20 rpm, with 0.35 kg of wood pellets (figure I. 8). As observed by [120], a non-spherical shape can increase the resistance to shear of the particle bed, leading to in-homogeneous cascading and a varying angle of repose. The agreement between experience and simulation proves to be quite satisfactory.

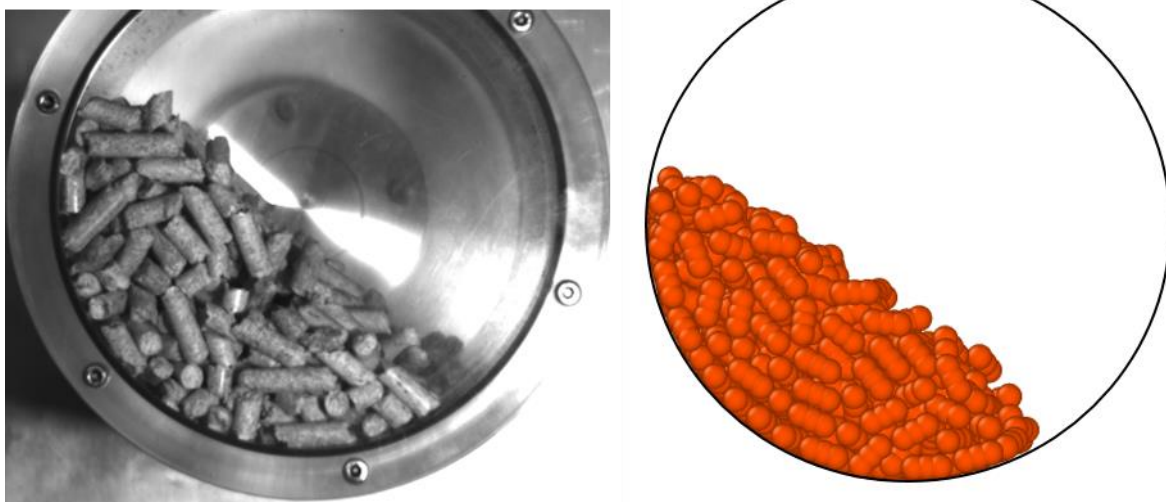


Figure L.8: Pellets in the rotating tumbler. 0.35 kg of pellets, 20 rpm (left side experiment, right side DEM results using the multisphere approximation)

Figure I. 9 shows the multisphere dynamic repose angle obtained by simulation.

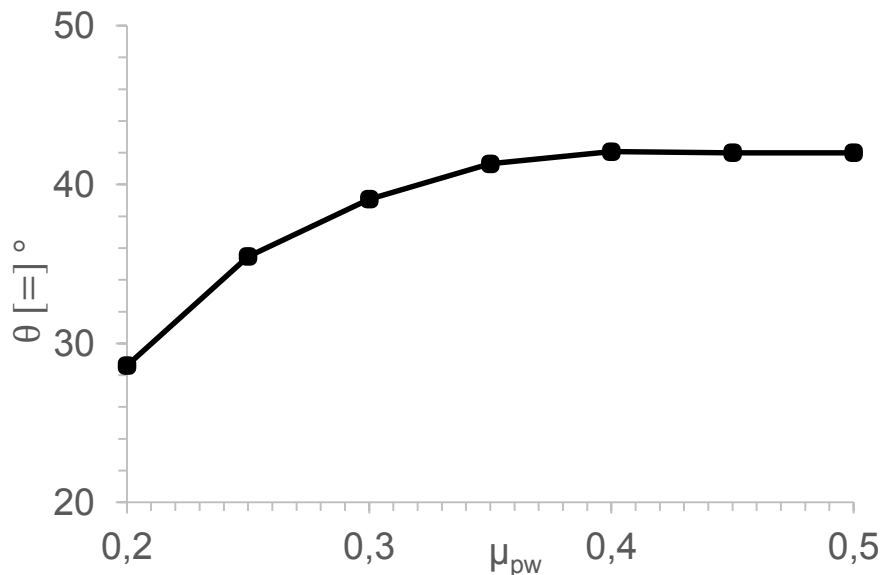


Figure L.9: Mean repose angle for the different sliding friction coefficients. Multisphere approximation

The same procedure applied for the evaluation of the steel dynamic angle of repose is applied for wood pellets, giving a measured value of 40°. For a low sliding friction coefficient (μ_{pw} of 0.2), the wood pellet bed is in the ‘surging’ regime [141], that is the value of μ_{pw} is not large enough to reach

the avalanching angle, hence the solid bed simply slips on the tumbler walls after reaching the maximum angle allowed by μ_{pw} .

The repose angle varies greatly from surging to continuous avalanching, however when the system is in the rolling regime, the repose angle grows slowly with sliding friction at the wall, this particular behavior is caused by the limit imposed by the shear resistance of the aggregate formed by pellets. A value $\mu_{pw} = 0.3$ is chosen, because this coefficient gives good agreement with the experimental angle of repose. The same μ_{pw} was used for the equivalent sphere approximation.

Mixed Configuration, experimental validation

The parameters calibrated through the previously defined experiment are presented in table I.3.

	Steel	Wall	Wood, Multisphere	Wood, Sphere 1	Wood, Sphere 2
μ_s (sliding friction coefficient with steel)	0.15	0.22	0.2	0.2	0.2
μ_w (sliding friction coefficient with wall)	0.22	X	0.3	0.3	0.3
μ_p (sliding friction coefficient with wood)	0.2	0.3	0.45	0.375	0.26
μ_r (rolling friction coefficient)	0.0025	X	0	0.18	0.3

Tableau L.3: Friction coefficients matrix for the species simulated

Density axial segregation mechanism is expected to dominate in this case, with accumulation of light particles (wood pellets) on the end walls [95]. For the sake of simplicity, in this work the different runs will be called as defined in the table I.4.

Conditions				
ω (RPM)	Pellets (kg)	Steel (kg)	Volume of wood / Volume of steel	Experiment
30	0.2	1	1.07	A
14	0.1	1.5	0.36	B
16	0.1	1.5	0.36	C
16	0.1	1	0.53	D
26	0.1	1	0.53	E
29	0.1	1.5	0.36	F

Tableau L.4: Operating conditions for mixed experiments

The filling degree is kept below 50%. Every run is computed with the multisphere approximation and the two equivalent sphere approximations with different couples (μ_{pp} , μ_r).

In all cases, the overall behavior was captured by equivalent sphere approximation and multisphere approximation; in both cases, an axial segregation behavior is obtained. Axial segregation appears rapidly (in contrast with axial segregation in longer drums); it is established after about 5-10 rotations.

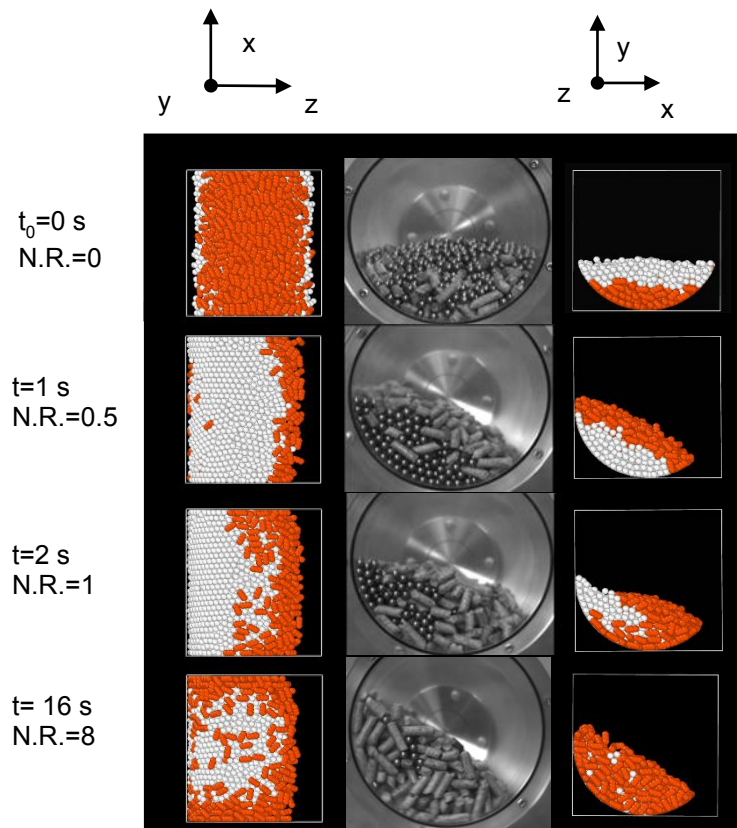


Figure L.10: Transient phase of the experimental test (center) and of the simulation with the multisphere approach (wood in red, steel balls in white), bottom view (left) and radial view (right), N.R. stands for number of rotations. Run A.

All the simulations start from the same initial state, *i.e.* with steel on top and wood on the bottom (figure I.10, t_0), that is perfectly mixed axially and segregated radially. In order to see the influence of the initial state on the mixing time, a simulation was started with a random mixing state: no influence was found on the times needed to establish complete axial segregation. At $t = 1.0$ s (figure I. 10, N.R. = 0.5 s), the system is turned over with wood particles on the top and steel on the bottom, wood particles are slowly entrained by friction. At $t = 2.0$ s (figure I. 10, N.R. = 1 s), segregation is developing, with wood particles being attracted by the end walls. At $t = 16$ s segregation is well established: wood pellets flow with an axial angle of 60° inside the rotating tumbler (figure I. 11).

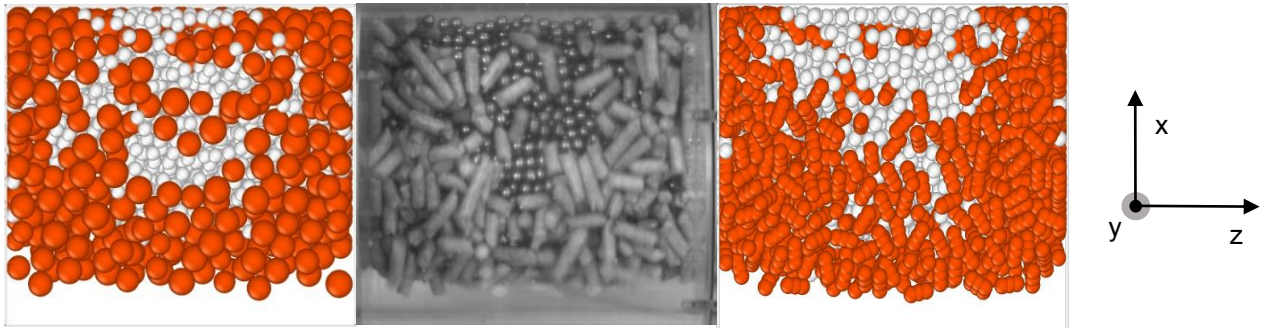


Figure L.11: Axial top view for sphere approximation (left), experiment (center), multisphere approximation (right), run A.

The multisphere approximation is able of following the entire history from its beginning, with a good time precision, reproducing quite well also the axial angle (figure I. 11). Normally, axial segregation is a slow phenomenon, nevertheless in the present case, after the first rotations, wood pellets start to accumulate on the end walls; this effect is probably due to the small length of the tumbler, yielding short segregation times, as found also by Hayter et al. [146]. After about five tours, the system reaches a stationary condition.

To compare with experience, a simple procedure was used: steel particles were counted on the back of the tumbler (figure I.12, corresponding to the 2a view on figure I. 1), in order to obtain the distribution of the steel particles). Once obtained, the number of steel particles per axial part is divided by the total number of steel particles on the frame. This ratio is the concentration of steel particles at the wall.

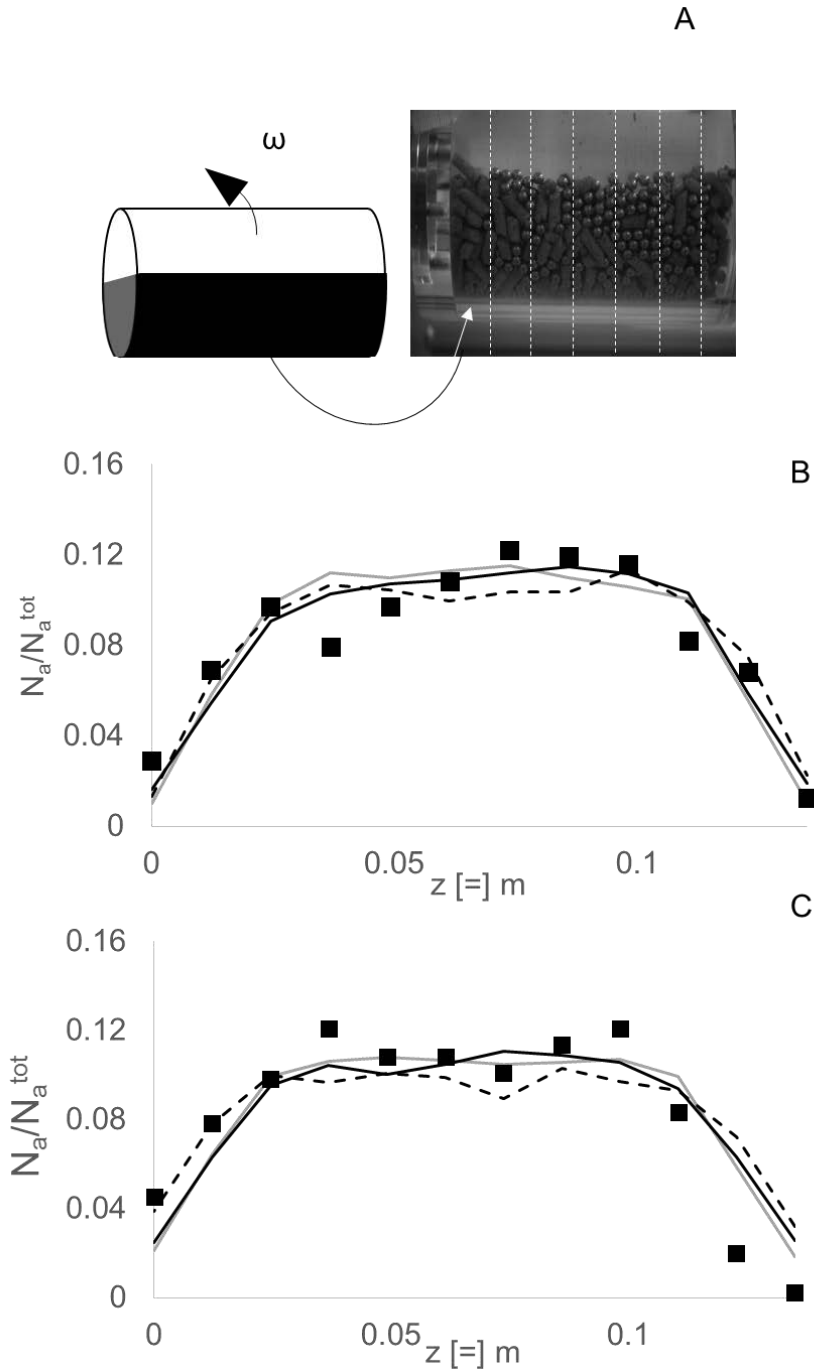


Figure L.12 : A frame used for measurement with its mesh elements (A) and steel concentration as a function of axial position, square are the experimental results, gray line is Sphere 1, dashed line is Multisphere and black line is sphere 2. Run B (B), Run D (C).

The particles were counted in conditions of well-established segregation and averaged for 20 s with an interval of 0.7 s between each measure. The entire system was divided axially in 11 parts, counting the particles belonging to each band (figure I. 12 A)

As shown in figure I.12, there is a good agreement between experiment and simulations, steel particles concentrate at the center, with a near zero concentration on the end walls, however there is not much difference between the simulations. This means that this result alone cannot validate the models, but this also means that the differences related to segregation are concealed inside the granular bed. To evaluate directly experimentally axial segregation is difficult, because it is difficult to have a visual access inside the bed, hence it can be far more practical to have a base model which can well reproduce the experimental behavior (in this case the multisphere approximation) and then compare this model to simpler models (like the equivalent sphere approximation) to verify their validity. The multisphere model has been shown to simulate reality quite well; hence, the multisphere model will be used as a base model to validate the equivalent sphere approaches. The comparison with the equivalent sphere approximations will be presented in the next paragraph.

Comparison between the shape approximations

For the calculations of axial segregation, we make use of the segregation degree defined by Taberlet et al. [98]:

$$\Delta^{\text{seg}}(t) = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{|C_s(z) - \bar{C}_s|}{\bar{C}_s} dz \cong \frac{1}{L} \sum \frac{|C_s(z) - \bar{C}_s|}{\bar{C}_s} \Delta z$$

Équations L.2

C_s Number of wood particles per unit length, \bar{C}_s Mean number of wood pellets per unit length, L is the length of the tumbler and Δz the length of an axial mesh element. This segregation degree is 0 for a mixed axial state (meaning that the segregation degree will still be 0 for a system segregated only radially) and 1 for systems separated in pure bands. In order to evaluate $\Delta^{\text{seg}}(t)$, an axial mesh is constructed. The axial mesh is optimized through a mesh convergence procedure, because a too small Δz can create artificial segregation due to empty mesh elements; and a too high Δz can create artificial mixing; in between these cases, there is a domain, where the segregation index does not any longer depend on the mesh size.

In figure I. 13, the segregation degree as a function of the number of rotations is reported for run A. The segregation degree is calculated every 0.25 s through a Matlab script.

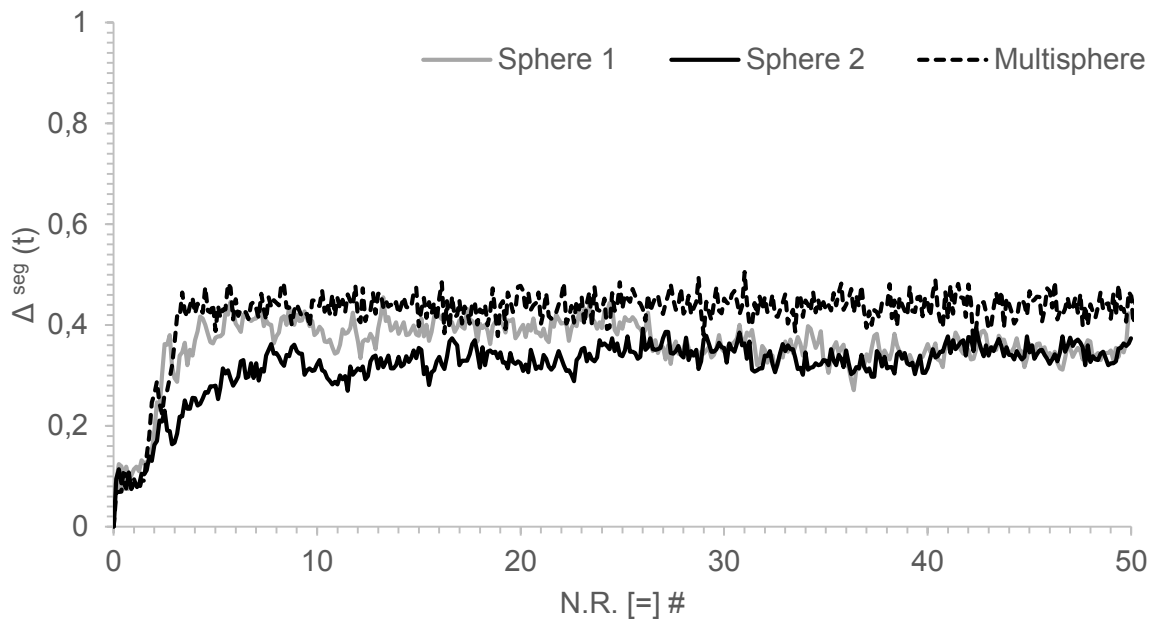


Figure L.13 : Segregation degree for the multisphere approximation and the equivalent sphere approximations as a function of N.R. (Number of rotations), run A.

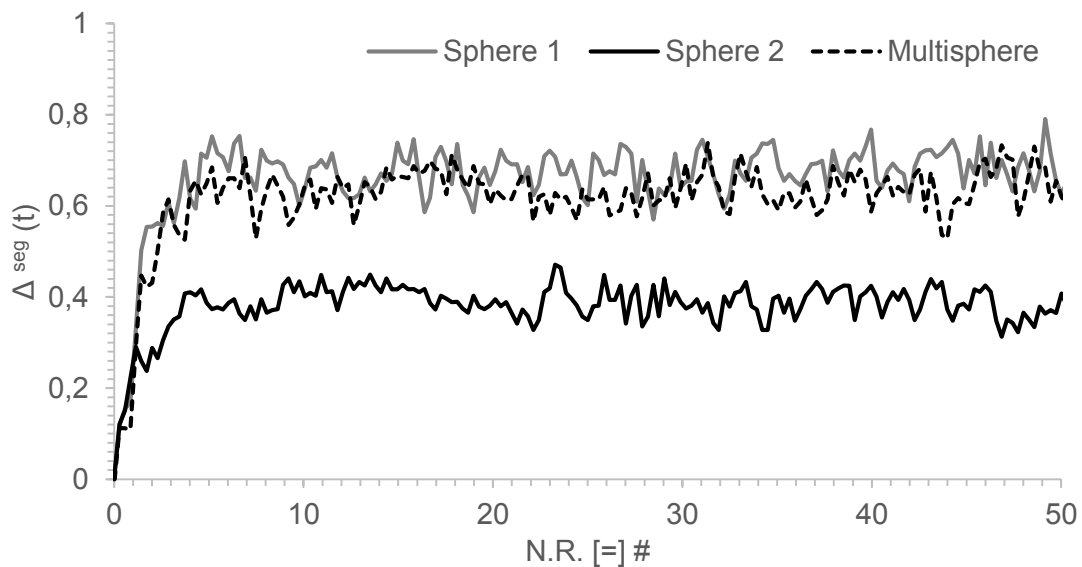


Figure L.14 : Segregation degree for the multisphere approximation and the equivalent sphere approximations, Run B

N.R. (Number of rotations) equal to zero corresponds to the initial state with steel beads on the bottom and wood on top. The system is inverted after the first rotation, with wood on the bottom and steel beads on top, wood slowly avalanches on the active layer, the system starts to mix radially, but still no significant axial segregation is produced. After this phase, axial segregation is rapidly

developed all over the tumbler. The transient behavior is reproduced quite well for the Sphere 1 approximation as well as with the multisphere approximation. The Sphere 2 approximation shows a longer transient phase and a smaller segregation degree. The Sphere 1 reproduces the transient phase quite well, however after about 30 rotations the segregation degree for both spherical approximations become identical and slightly lower than the multisphere approximation.

Figure I.14 shows the different segregation degrees for the multisphere approximation and the two equivalent sphere approximations for run B.

In this situation, the Sphere 1 and the multisphere approximation converge to the same result, while this is not the case for the Sphere 2 configuration. In the transient phase, the segregation degree of the different approximations increases monotonically until a stable value is attained.

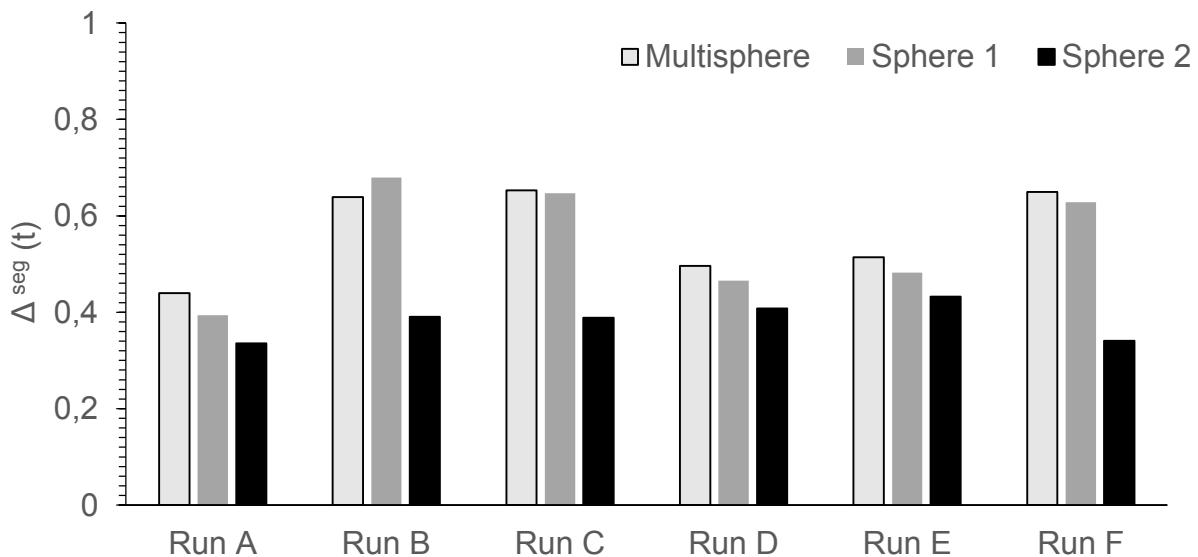


Figure L.15 : Comparison between approximations for different conditions

Figure I. 15 shows the comparison of the mean segregation degree for different simulations and shape approximations. The Sphere 1 approximation reproduces quite well the results for axial segregation found with the multisphere approximation; however, this is not the case for the Sphere 2 approximation. It is also worth noticing that the Sphere 2 produces better results when the ratio volume of wood to volume of steel is lower, while it is inaccurate when increasing this ratio. It is also interesting to note the influence between the operational parameter used in the different simulations: rotation velocity does not seem to have a great effect on segregation in the field investigated.

General orientation was also investigated, using the S order parameter [147]:

$$S = \frac{1}{N_b^{\text{tot}}} \sum_{k=1}^{N_b^{\text{tot}}} \frac{3}{2} \left[(\sin \theta_k)^2 - \frac{1}{3} \right] \in [-0.5, 1]$$

Équations L.3

Where $\sin \theta_k$ is the sinus of the angle formed by the main direction of a wood pellet with the axial direction in a cylindrical reference frame and N_b^{tot} is the total number of wood pellets in the system. This parameter S is equal to 1 when the wood pellets are perpendicular to the radial direction, -0.5 when the wood pellets are completely aligned in the radial direction and 0 when the particles are in a disordered state. However even values of 0.1 are of significance, since S is in the order of 10^{-3} when it is evaluated for wood chips with a random orientation. This parameter shows a general value of -0.1 for all simulations meaning that in general wood pellets tend to organize themselves to a direction parallel to the axial direction. This value is probably highly influenced by the angle of axial chute which is constant for all the simulations and about 60° (figure I.11).

Comparison of the different mechanisms of segregation

It is already clear that in the previous set-up density and shape are driving segregation, but which is the dominant mechanism is still unclear. Hence, in order to evaluate the single effect of shape on segregation, other numerical simulations for particles of equal densities were performed. For the friction coefficients, sizes, contact parameters, see table I.1, table I.2 and table I.3 for details on parameters. however, the densities for the two species steel and wood is kept to 8000 kg/m^3 . Another condition is also added to verify the effect of the absolute value of density (Run B''), in this case density for the two species is kept to a value of 1150 instead. The complete set of simulations performed is presented in table I. 5.

Conditions				
ω (RPM)	Pellets (kg)	Steel (kg)	Volume of wood / Volume of steel	Experiment
30	1.4	1	1.4	A'
14	0.7	1.5	0.46	B'
14	0.1	0.22	0.46	B''
16	0.7	1.5	0.46	C'
16	0.7	1	0.7	D'

26	0.7	1	0.7	E'
29	0.7	1.5	0.46	F'

Tableau L.5: Simulations at equal densities

The wood mass injected is adjusted in order to ensure the same number of particles injected as in the simulations done in the previous paragraph.

Figure I. 16 shows a comparison between Run A and Run A'. Density has a major impact on segregation: it is clear that without the heavy difference in densities segregation is developed afterwards, with values of $\Delta^{\text{seg}}(t)$ still increasing after 80 rounds, however there is little difference on the value attained in the stationary phase.

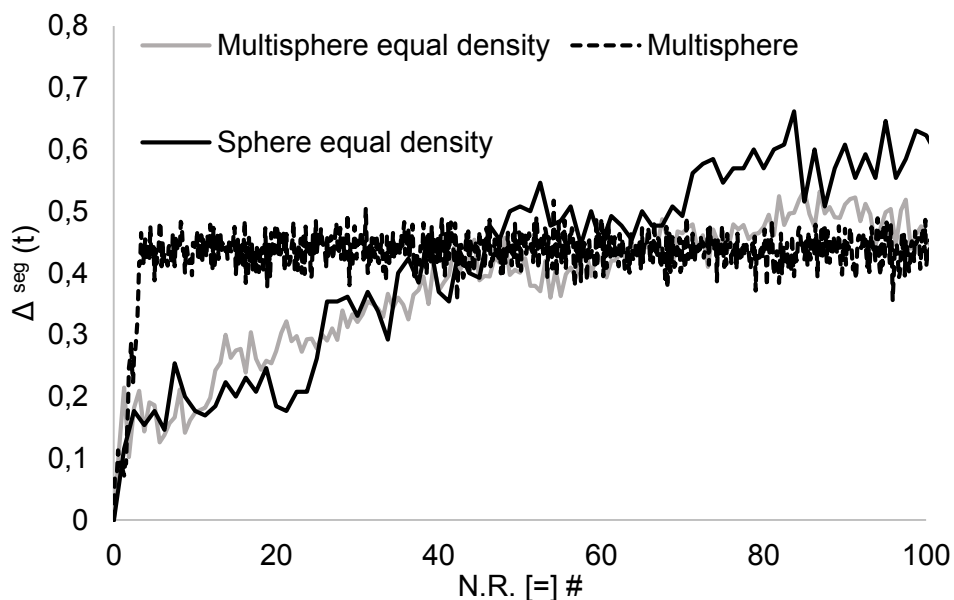


Figure L.16: Comparison between run A and run A', see table I.5

Another interesting result concerns the comparison between equivalent sphere and multisphere models with equal densities. The transitory is then almost perfectly reproduced by the equivalent sphere approximation even if there is a small difference in the stationary value.

The results for the other runs are omitted, since the qualitative behavior is the same. Regarding simulations with in the run B'' conditions, the results are shown in figure I.17.

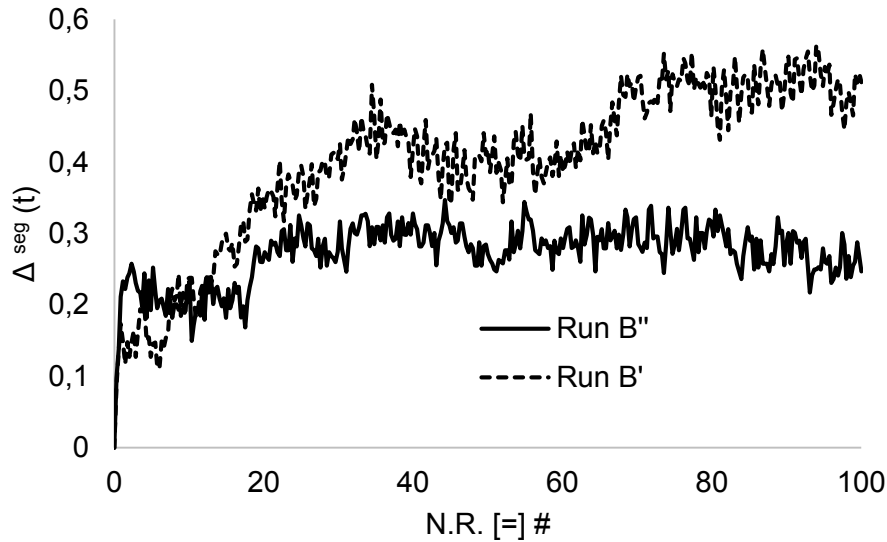


Figure L.17: Comparison between run B' and run B'', multisphere configuration, see table I.5

Even the absolute value of density has an impact on axial segregation, the steady state value of $\Delta^{\text{seg}}(t)$ is almost doubled in the case of Run B', also the steady state is reached at about N.R., where the steady state for Run B' is reached far before.

Conclusions

This work can be divided in three parts: the calibration of the friction coefficients for the DEM model; its validation in the case of a rotating tumbler with a solid bed composed of a binary mixture of wood pellets and steel spheres simulated by the multisphere approach and the comparison between the results obtained with the multisphere approach and two different equivalent sphere approximations. The experimental tests with the binary mixture show a fast density-driven axial segregation behavior with wood pellets on the end walls and steel spheres concentrating in the central part of the cylinder. In the DEM framework, these tests were executed using three different configurations, namely the multisphere approach and two equivalent sphere approximations with different couples (μ_{pp}, μ_r) : one couple is evaluated through the method proposed by Wensrich et al. [138] (Sphere 1), while the other does not (Sphere 2). The multisphere approach reproduces quite well the experimental behavior and it is used to test the quality of the two equivalent sphere approximations. The Sphere 1 results agree with the multisphere approximation results, while the sphere 2 approximation underestimates segregation, showing the importance of (μ_{pp}, μ_r) couple. It is thus shown that the static angle of repose cannot be used alone to calibrate a spherical approximation and a valid alternative is explored. Some exploratory calculations were performed to investigate separately the

influence of density and shape of the particles. It is shown that even the absolute value of density has a high impact on the segregation behavior even modifying the final value of mixing itself in steady state.

Acknowledgements

This study was funded by the Lorraine region (France) and the European Union (FEDER), within the project LORVER. The authors are grateful for their generous support.

The calculations were made using the Institut Jean Lamour (Université de Lorraine, Nancy) cluster, the authors would like to thank the cluster administrators for their technical support.

Annexe M. DEM investigation of granular flow and binary mixture segregation in a rotating tumbler: Influence of particle shape and internal baffles

Article paru dans la revue Powder Technology (R. Maione, S. Kiesgen De Richter, G. Mauviel, G. Wild, DEM investigation of granular flow and binary mixture segregation in a rotating tumbler: Influence of particle shape and internal baffles, Powder Technol. 286 (2015) 732–739. doi:10.1016/j.powtec.2015.09.011.)

Abstract

A horizontal rotating tumbler provided with internal baffles and containing a mixture of two types of particles is investigated by Discrete Element Method (DEM) simulations. The main objective of this study is to characterize the dynamics of a rotary kiln containing spherical steel balls and wood particles, investigating the effect of internal baffles and wood chip particle shape on segregation. The results show that the presence of baffles imposes a cyclic behavior to the solid bed and that the magnitude of this cyclic behavior depends on the solid holdup. The wood particles shape effects are analyzed considering two different approaches: a spherical approximation and a multisphere approximation. The differences between these two approaches are mitigated at relatively high velocity. This type of simulation can also serve for baffle sizing.

Highlights:

- DEM modeling of a rotating tumbler equipped with internal baffles
- Non spherical particles are approximated by multisphere or sphere approximations
- Transient behavior in the presence of baffles is influenced by solid holdup
- The two particle approximations converge at high tumbler rotation velocity

1. Introduction

Granular materials can be found in many applications, but research on this topic is still necessary in order to understand properly the microscopic and macroscopic aspects affecting their dynamic behavior. As a matter of a fact, granular dynamics are really complex and solid particles can behave both like a fluid and like a solid. Moreover, granular material can be characterized by a high

heterogeneity in dynamic properties (mass, size, anisotropy etc.) adding further complexity to the system. Discrete element method (DEM) is a powerful resource in the modeling of granular material, giving an important insight of all the events affecting the granular bed, where it is often difficult to have reliable measurement by experimental means. DEM modeling was first developed by Cundall and Strack [172] in 1979, even though only in the last years has it been possible to compute simulations with such methods thanks to the increase in computational power.

One of the industrial applications of granular media is the rotating drum, widely spread as an industrial device for mixing, drying, milling, heating, chemical reactions etc. of granular material; its behavior is still not fully understood, and the literature in these last years concerning the DEM modeling of rotating tumblers is extensive [198–204], as it constitutes a powerful tool in the rotating drum modeling. A great problem of these devices is segregation, limiting the applicability of such a simple industrial device. This is why different attempts have been made in order to limit this problem. Segregation in rotary tumblers has been widely studied and results show that segregation pattern can be affected by size, density ([145,205–209]) and rotation speed ([210]), resulting in axial segregation and radial segregation. The radial segregation patterns may vary, depending on its driving source and even reverse at high rotation speed: when particles have different dimension, the smaller particles fall from the shear layer to the core of the bed through the void left by larger particles, however when the phenomenon is driven by density difference, the shear layer is band divided, with less dense particles flowing at the surface and denser particles sinking into the core ([211]) with a formation of a dense particle core and an outer accumulation of lighter particles. This behavior can cause several problems in rotary kiln application like poor heat transfer and bad mixing limiting the quality of the products.

In order to limit segregation, rotary drums are often equipped with baffles [212,213]. Baffles can have several effects on the solid bed, other than limit segregation [214], bring an early onset of all the flow regimes [215], add further potential energy to the system, change heat transfer characteristics, etc. However, research is still needed to assess the real influence of baffles on mixing and on the general properties of a solid bed.

In the frame of DEM models, spherical shape particles are often preferred, mostly because a spherical shape allows a faster contact detection algorithm, but in industrial application, the majority of granular materials has very heterogeneous and complex shapes, and there is a need to model this properly. For example, in pyrolysis applications, lignocellulosic biomass can be introduced as wood chips into rotary kilns, making the feed highly heterogeneous, and the modeling of dynamics, heat transfer and chemical reactions taking into account all the phenomena very tricky. Several ways exist to model non-spherical granular particles, like ellipsoid [118], spherocylinder [119], polyhedra [120,121] and multisphere approach ([122,124,125,195,216]). The multisphere approximation consists of clustering multiple spheres together in order to form complex shapes, while still using the

contact detection algorithm of sphere modeling. Multisphere approach is interesting due to the gain in flexibility in the shape approximation. However, high quality approximations by multisphere approach may require a high number of spheres, since each physical particle is represented as an assembly of a number of elementary spheres and hence simulations may become demanding in memory and computational time.

In this study, the aim is to develop a model capable to represent the main dynamic phenomena in a simplified version of a rotating wood pyrolysis reactor developed by SEA Marconi [217]. The solid bed in this reactor is formed by a mix of steel balls and wood chips. In the industrial application, the steel balls are heated in another equipment and have a multiple function: heating rapidly the wood chips so that they are pyrolysed, yielding pyrolysis gas and char, and crushing the char particles. This work is focused on segregation and on the macroscopic properties of the solid bed (bed height, kinetic energy, etc.). Heat transfer, kinetics and crushing will be treated separately. Simulation results are presented for purely mono-disperse steel balls; then the behavior of a mixture of the steel balls with wood chips is modeled, the latter being represented either by spheres or by multisphere templates. The following topics will be discussed: the influence of baffles on the flow regime and the effect of wood particle shape, Froude number and solid hold-up on segregation.

2. Simulation methods

The model used in the simulations is based on the method developed by Cundall and Strack [172], i.e. the particle-particle and particle-wall collision is modeled through the soft-sphere approach and particle motion is modeled in a deterministic way through the resolution of the Newton equations of motion. The DEM scheme used is based on the open-source software LIGGGHTS [173,174], which is an extension for granular matter and granular heat transfer of the base molecular dynamic code LAMMPS [218]. The contact model used is a modified version of the Hertz-Mindlin nonlinear spring-dashpot model, often used by commercial and noncommercial software.

2.1 Geometry and particle properties

The geometry used in simulations is presented in Figure M.1. The drum has an internal diameter of 0.31 m, and it is 2.4 m long, the drum is provided with four straight baffles (width 5 cm; thickness 5 mm; length 2.4 m). The tumbler walls are made of steel. 3 different cases were simulated in this work:

- case a) tumbler filled with steel particles;
- case b.1) steel particles with wood chips simulated using a spherical approximation;
- case b.2) steel particles with wood chips simulated using a multisphere approximation;

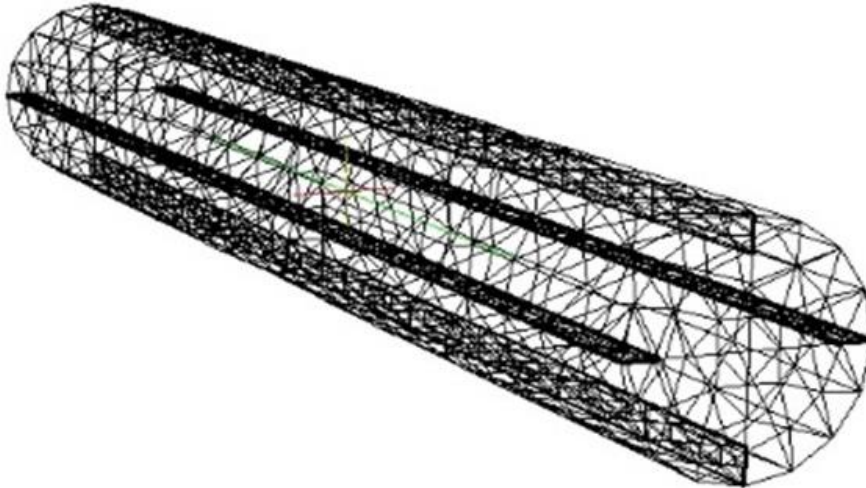


Figure M.1: Geometry of the tumbler

The main objective of these simulations is to simulate the dynamic behavior of a rotary kiln for wood pyrolysis. The number of particles is 8208 for case b.1 and b.2 (3000 particles with steel-like properties, and 5208 particles with wood like properties). The sphere approximation is a simple method; in the simulation environment, a wood chip is represented by a sphere, the radius of spheres was chosen in order to have the same volume as the original wood chip (considered as a 2 cm x 2 cm x 8 mm parallelepiped). The chip template (Figure M.2) in the case of multi sphere model is formed by 50 spheres of 4 mm diameter each. The density, position and size of the spheres have been chosen to get the moment of inertia and mass of the template equal to the mass and the moment of inertia of a wood chip of same dimensions. Considering the high variability of wood chip shape and their number in the reactor, a rigorous representation by the multi sphere approach is impossible. Hence a configuration with non-overlapping particles was chosen, this allows also to reduce the computational cost of simulation by reducing the number of particles, and to impose a friction depending on the “dis-homogeneity” of the surface, typical of this type of solid objects. The radius of the elementary spheres in the poly-disperse spheric simulation was chosen to be the radius that ensures a volume equal to that of the original wood chip. The density of the elementary particles was calculated to obtain an average density equal to that of wood. These simulations were started from an unmixed state, where low density particles are inserted first and, after settling on the tumbler

walls, 3000 steel-like particles were injected, so that the chips/ steel ratio and the total number of particles are the same for the two configurations. Rotation speed has been varied between 1 and 60 rpm. In the case of multi sphere simulations, the time for the simulation to attain a stationary state was of one or two weeks depending mostly on Froude number in the case of spherical approximation, the time for the simulation to finish was two days. The simulations were performed on a cluster, using 12 processors Intel Xeon X5650 2.66GHz in parallel. The initial time, $t_0=0$, is defined as the moment when all particles are settled.

Case	Properties of steel balls in all cases	Properties of wood chips Case b.1	Properties of wood chips Case b.2
ρ [=] kg/m ³ (density)	8000	500	500
Ψ (sphericity)	1	1	0.7292
μ (friction coefficient)	0.15	0.2	0.2
μ_r (rolling friction coefficient)	0.03	0	0
E [=] N/m ² (Young's modulus)	$2.10 \cdot 10^{11}$	$9.18 \cdot 10^8$	$9.18 \cdot 10^8$
ε (restitution coefficient)	0.8	0.6	0.6
r [=] mm (particle radius)	12.5	9.142	2 (elementary sphere)
Number of steel balls	3000-7500	3000	3000
Number of wood chips	0	5208	5208
Rotation speed for the different cases	1-60 rpm	1-30 rpm	1-30 rpm
Elementary spheres per wood chip template		1	50

Tableau M.1: Parameters used in simulations

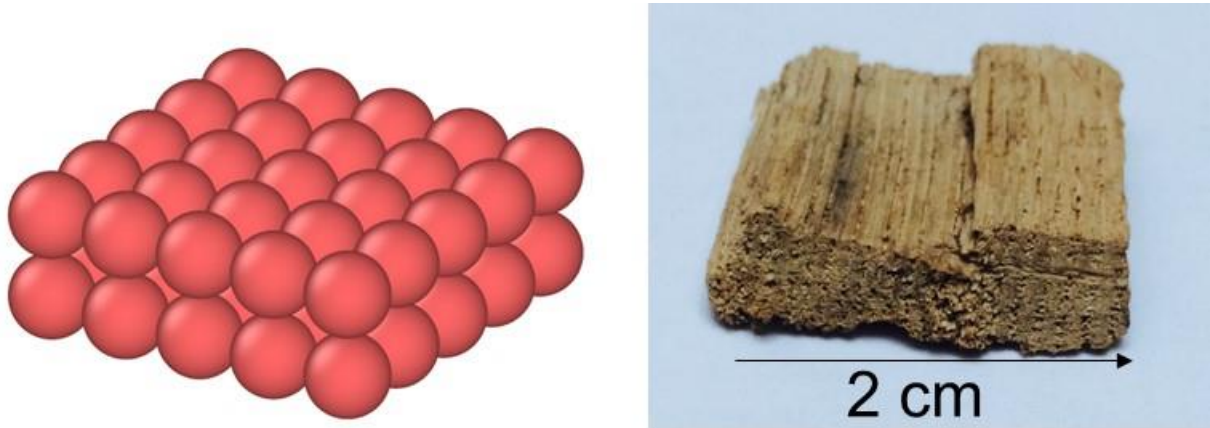


Figure M.2: **Wood chip approximation by multisphere approach and a wood chip used in the reactor**

Results

Tumbler filled with steel balls

The bed considered here consists only in steel balls. The bed height H is defined as the distance between the tumbler wall and the bed surface (see left side of Fig. 4). Dimensionless parameters like the ratio of bed height, to tumbler radius and the Froude number (defined as $\omega^2 R/g$) are of great importance in characterizing the behavior of the solid bed in a rotary kiln ([142,219]). In Figure M.3, the ratio of bed height to the radius is reported as a function of Froude number for mono-disperse systems. A wide range of conditions and bed behaviors are covered. With the increase of tumbler rotation speed, the bed is likely to fluidize, this is the reason for the increase in bed height. For very high speed of rotation, defining a bed height becomes problematic, due to the fluidization of the bed (Figure M.3).

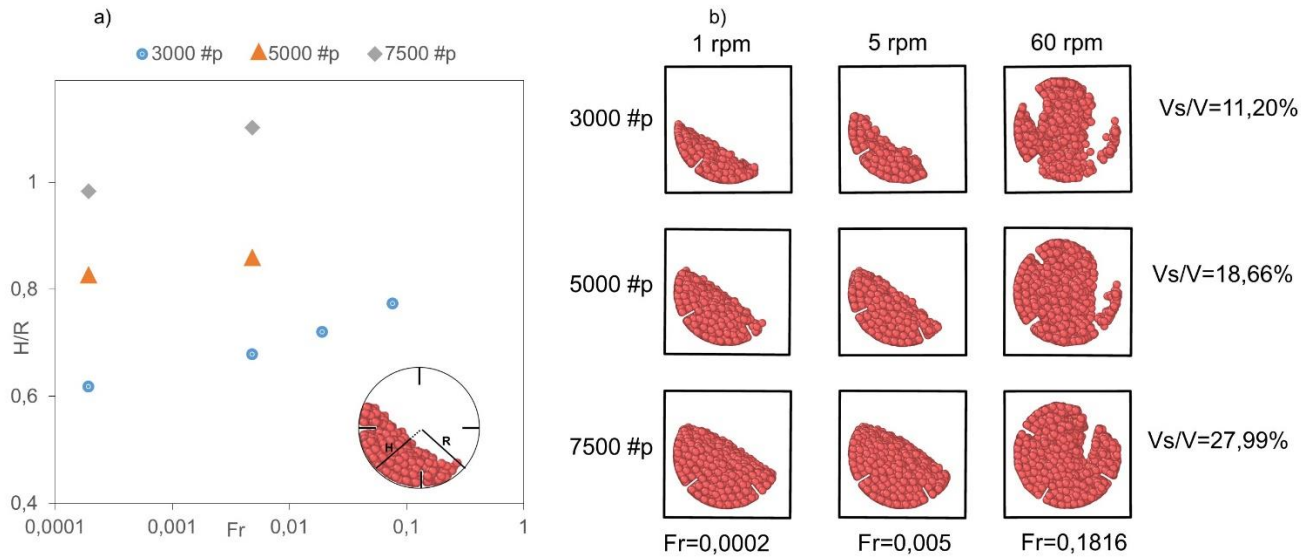


Figure M.3: Bed height as a function of the Froude number for 3 values of particle number (a) and bed section visualization for different values of particle numbers and rotating speed/Froude number (b)

Particles behave in many different ways as the rotation speed varies from 1 to 60 rpm (Figure M.3). For all values of solid holdup, at 1 rpm, particles are in slumping regime, i.e. periodic avalanches are observed followed by periods of repose angle growth (defined as the angle made by a horizontal line and the bed surface). At 5 rpm, particles start to behave differently, because rolling regime conditions are attained, i.e. particle avalanches are continuous and uninterrupted. At 60 rpm, the rotation is such that the solid bed becomes fluidized, with particles entrained by baffles and thrown out of the surface of the bed.

In the forthcoming part, the region where particles follow the baffles and do not move with respect to neighboring particles will be termed “plug flow” region. While the other particles compose the “active layer”.

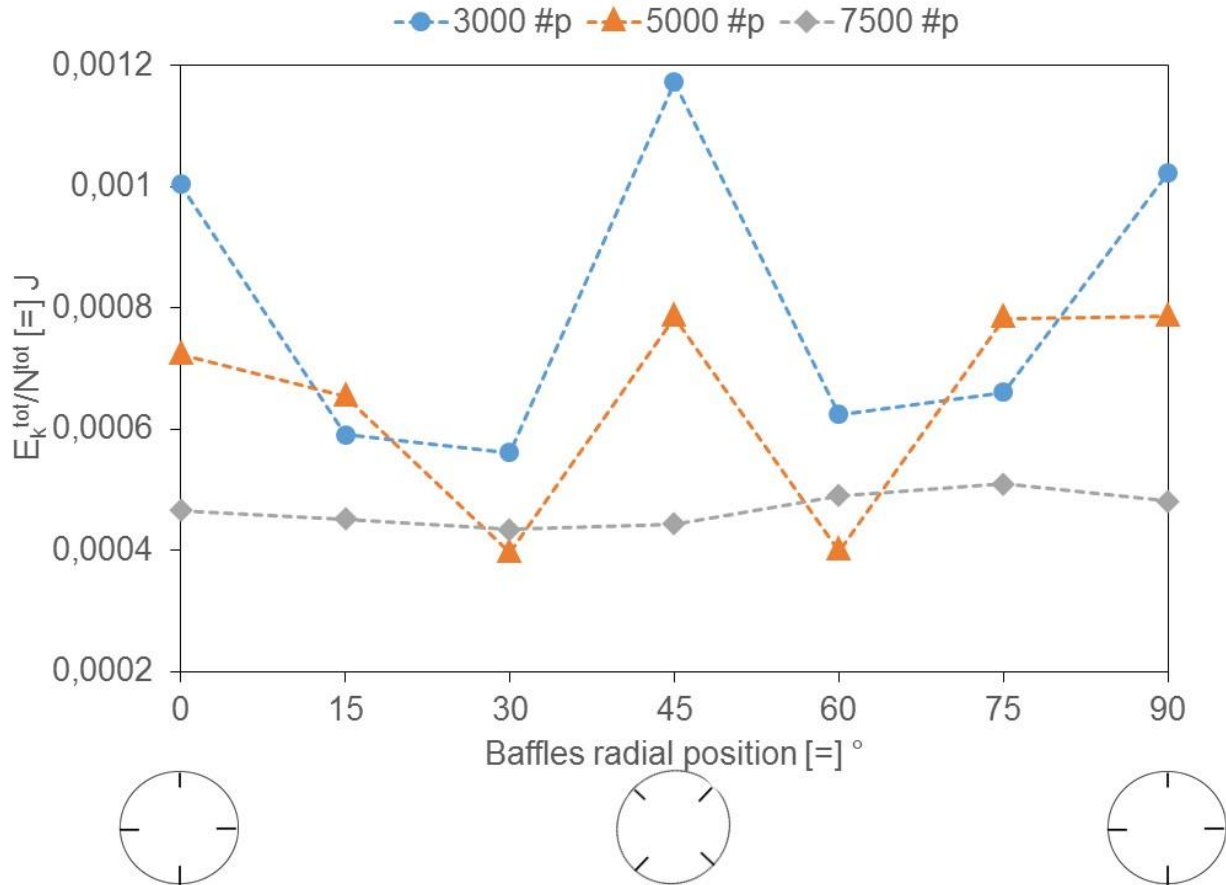


Figure M.4: Mean kinetic energy of the particles at different radial positions, 5 rpm.

The kinetic energy of the particles depends on the position of the baffles (Figure M.4). At 0° and 90°, the configuration is in fact the same. As expected, the kinetic energy of the particles at 0°-90° configurations are identical in all cases. The presence of baffles gives to the system a periodic behavior instead of a constant profile in rolling regime. With the increase in number of particles, the system tends to converge to the configuration without baffles, and the kinetic energy is independent of the baffles radial position. This is due to baffle width: with the increase in particles number, baffles can have a negative angle with respect to the horizontal when they pass the surface of the bed; the effect is that only a few particles will be captured by baffles to be released at higher height and hence with higher energy.

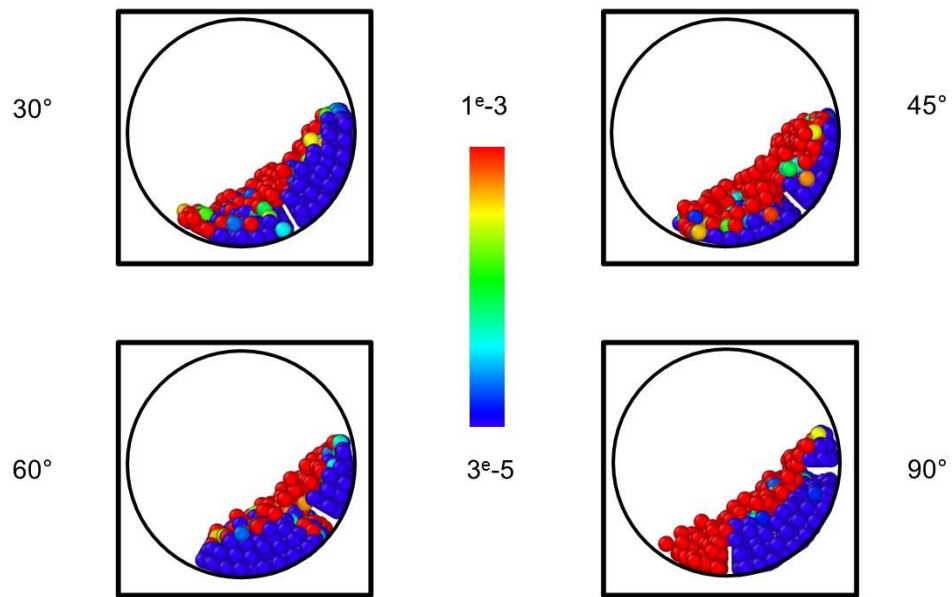


Figure M.5: **Particles kinetic energy (J) at different radial positions of baffles, 3000 #p, 5 rpm.**

At 5 rpm, baffles affect the active layer, which alternately grows and shrinks (Figure M.5). The system exhibits a maximum when the baffle is at 45°. When the baffles are in the dimension of the bed height, baffles can immobilize a part of the solid bed, and hence affect the active layer thickness.

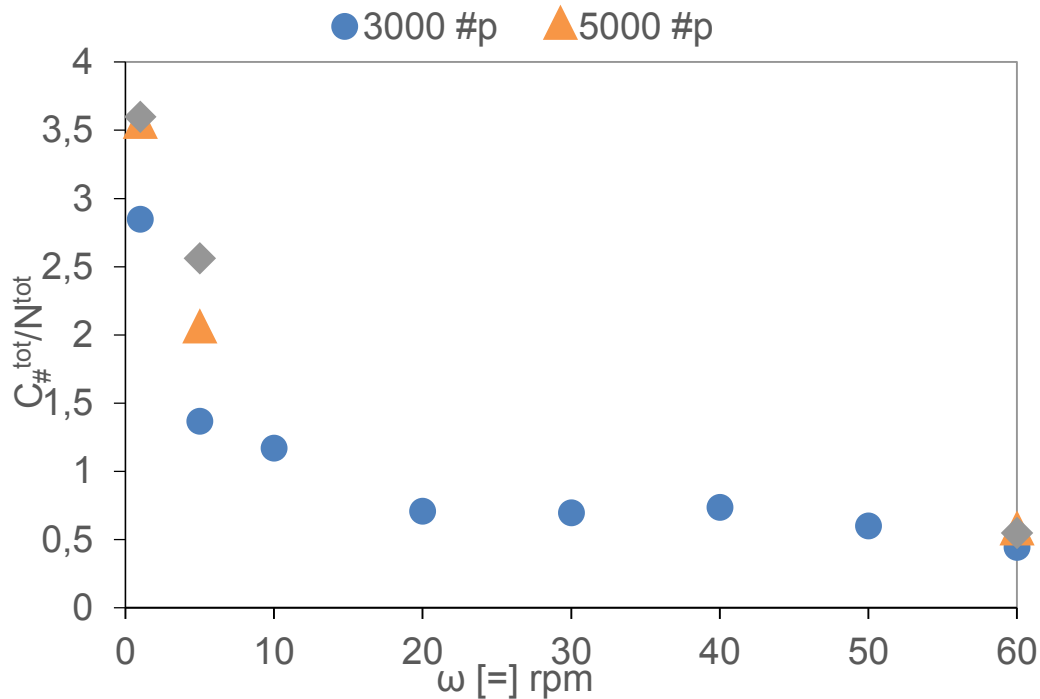


Figure M.6: **Total contact number to particle number as a function of the total kinetic energy to particle number for different numbers of particles**

On Figure M.6, the ratio of the total number of inter-particle contacts of the system to the total number of particles is shown as a function of rotation speed. The $C_{\#}^{\text{tot}}/N^{\text{tot}}$ decreases with rotation speed and increases with the solid, this effect can be explained by considering the filling degree: at high filling degree (that is, at high solid holdup) and low rotation speed, a large part of the bed is in the plug flow region, and only a small percentage of solid particles are in the active layer where particles flow and hence there are much more contacts. When the rotation speed increases, the solid bed expands, so there is much more space between one particle and the other, hence particles are more likely to accelerate freely without getting any contact with neighboring particles. Once the bed becomes fluidized, plug flow region does not exist anymore, the mean contact number reaches then a constant value, independent of the filling degree (0.5 contact per particle). This limit corresponds to binary collisions typical for fluidization.

Mixture of wood chips and steel balls - Spherical and multi spherical approximation (case b)

The wood chips are simulated here either by an equivalent sphere per wood chip, or by a multisphere approximation which is nearer to the physical reality of the wood chips, but it requires much more

computation time. The multisphere simulations are compared to results obtained with spherical particles.

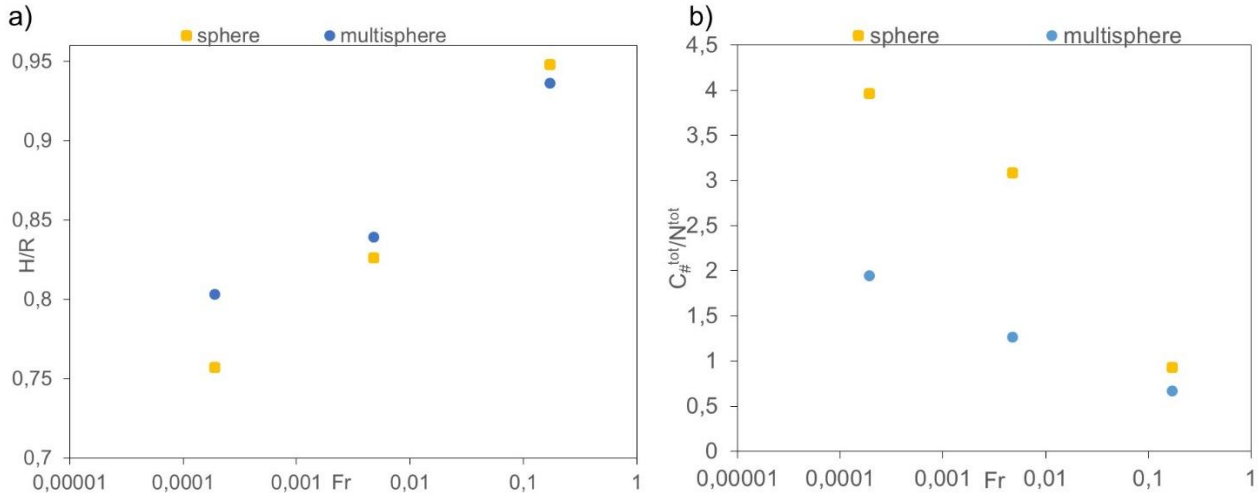


Figure M.7: **ratio of the bed height to the tumbler radius as a function of Froude number (a) and ratio of the total contact number to particle number as a function of rotation speed (b) for the two approximations**

Concerning the ratio of bed height to tumbler radius and the Froude number for multisphere simulation, they are close to those of mono-disperse simulations with 5000 particles (Figure M.7.a). In any case even if the volumes occupied by wood chip templates using the multi sphere approach and the single sphere approach are the same, there is still a non negligible difference in bed height. With an increase of the Froude number, this difference is decreasing. This effect is probably caused by the fluidization of the solid bed. The same effect is observed on the number of contacts per particle (Figure M.7.b): at low values of the rotation speed shape factors are important, but as the rotation speed increases, the effects caused by shape are dampened and the two approximations exhibit a similar behavior, because the distance between a multispherical wood chips and their nearest neighbor surface is higher than the radius of the equivalent sphere (meaning the sphere traced by all possible rotations of the wood chip around its center of mass). Hence it is not surprising that for high speeds of rotation the two simulations converge. In the cases analyzed here, the segregation patterns are in opposition: the segregation pattern imposed by density differences causes steel particles to sink into the bed core [212,220], but the segregation pattern imposed by size differences causes steel particles to be more likely to stick to the surfaces of the tumbler wall [145,212,214]. Density mechanism causes lighter particles flow to the top of the shear layer with denser particles flowing on the bottom. This creates a zone of lighter particles accumulation at the end of the avalanche (Figure M.8).

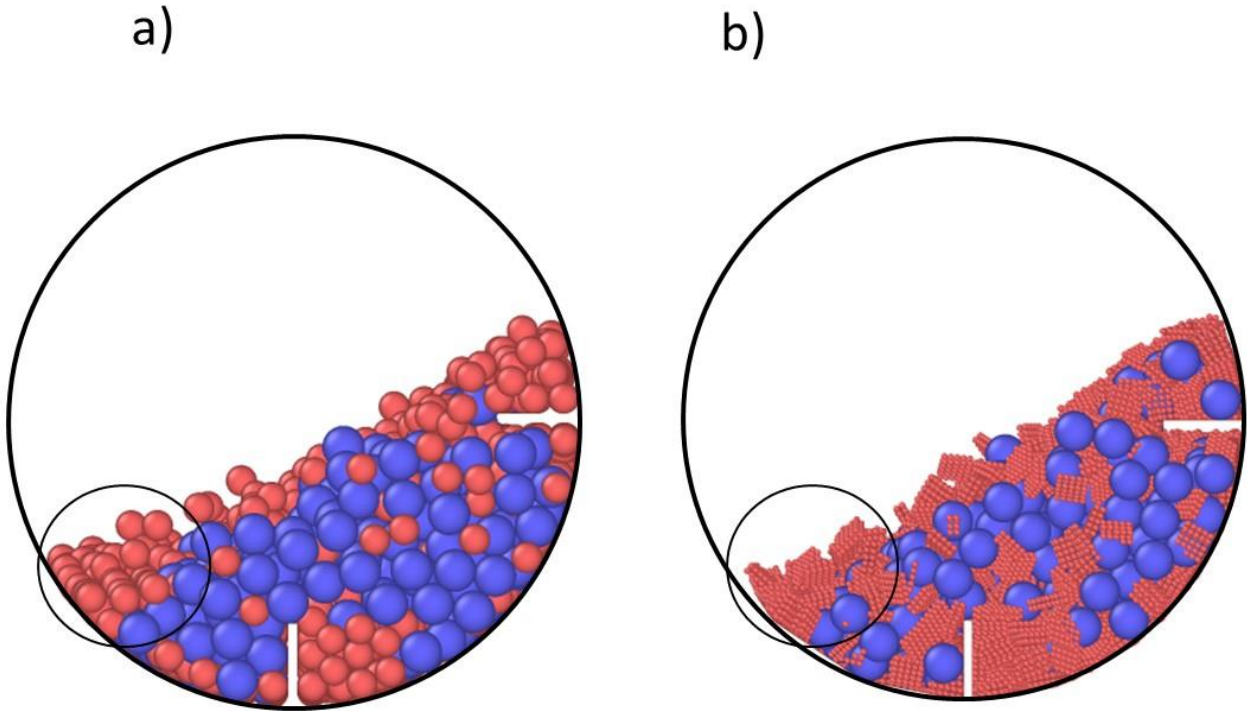


Figure M.8: **Bed profile, 5 rpm spherical approximation (a) and multisphere approximation (b) (blue spheres are steel, red particles are wood).**

Baffles influence the segregation pattern: when a baffle passes near the end of the avalanche, it catches all the light particles accumulated at the end of the active layer, creating a peak of concentration near the baffles. During their entrance into the plug flow region, baffles enhance the degree of mixing in the solid bed, hence some wood particles migrate into the solid bed and some steel particles move towards the tumbler walls, even if the majority of wood particles stick to the baffle surface, however this cannot happen if the baffle is not long enough [212] to penetrate the central core. This phenomenon causes also a band formation on the tumbler walls in the horizontal direction.

Several methods exist to quantify segregation for granular matter, however In this study a segregation factor as defined by [212,220] order to measure segregation:

$$I = \frac{N_b^*}{N_b^{*,H}} - 1$$

Équation M.1

As showed by Vargas et al [212], radial baffles can improve the mixing only if they're long enough. Their length should be enough to penetrate the peri-spherical convection flux lines and induce a transport in the segregated core, hence their efficiency is strongly affected by the bed height. Axial baffles and radial baffles reduce segregation with different dynamics: axial baffles reduce segregation acting on the flowing layer and inducing a periodic flow inversion, radial baffles instead can reduce segregation improving the transport inside the bed. Why sphere and sphere are the same? The essential reason for the significantly different mixing rates arises from the nature of the flow. Microstructures of circular particles have very weak resistance to shear and the particle assembly flows partly by avalanching and partly by slumping. This slumping reduces the frequency of avalanches, reduces the proportion of avalanches with both materials present and reduces the energy available in each avalanche. The square particles have much more realistic shear strengths [221]. Where N_b^* is numeric wood chip concentration between the tumbler walls and the end of baffles, $N_b^{*,H}$ is the concentration in the case of a completely mixed system. This ratio ranges from -1 to 1: it is 0 for a perfectly mixed system, it is 1 or -1 for a segregated system.

The particular shape of multi sphere particles inside the bed gives the possibility to study their orientation through the bed. This study was made using the order parameter [222], defined as:

$$S = \frac{1}{N_b^{tot}} \sum_{k=1}^{N_b^{tot}} \frac{3}{2} \left[(\sin \theta_k)^2 - \frac{1}{3} \right] \in [-0.5, 1]$$

Équation M.2

Where $\sin \theta_k$ is the sinus of the angle formed by the main direction of a wood chip with the radial direction in a cylindrical reference frame and N_b^{tot} is the total number of wood particles. This parameter S is equal to 1 when the wood chips are perpendicular to the radial direction, -0.5 when the wood chips are completely aligned in the radial direction and 0 when the particles are in a disordered state. However even values of 0.1 are of significance, since S is in the order of 10^{-3} when it is evaluated for wood chips with a random orientation. In Tableau M.2 the order parameter for different values of speed are reported. The order degree is highly influenced by rotation speed, it grows when the rotation is slower. However, for all the simulation a preferential orientation, perpendicular to radius, is observed.

Rpm	S
1 rpm	0.24

5 rpm	0.17
30 rpm	0.14

Tableau M.2: Order parameter at different values of rotation speed

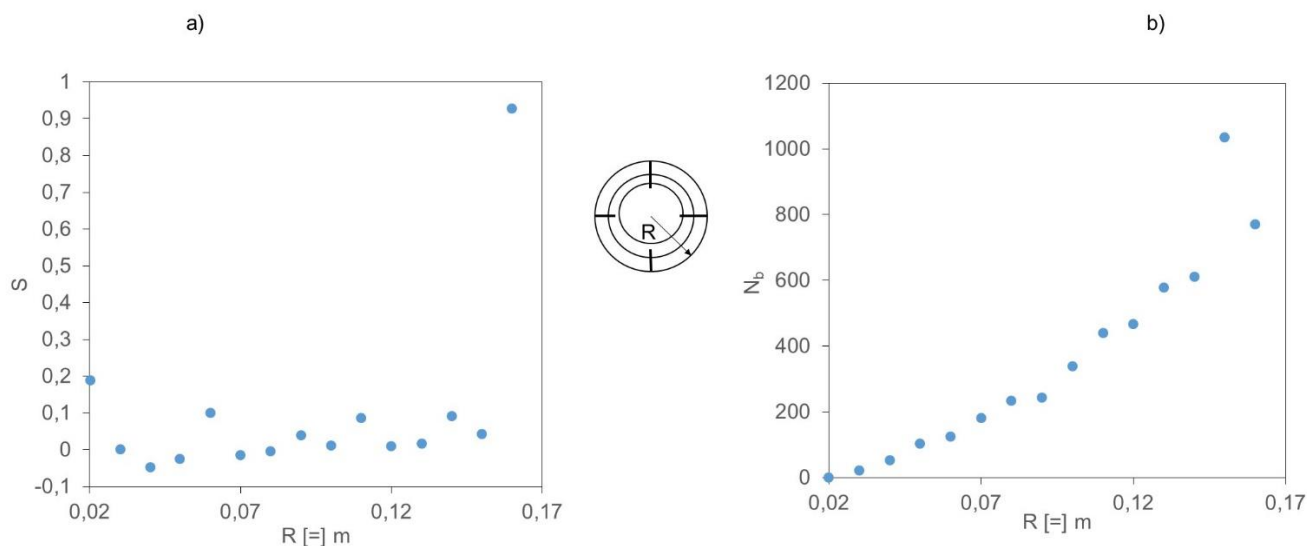


Figure M.9: Order parameter evaluated on the radial axis (a) and number of wood chips (b) as a function of radius, 5 rpm, 0° radial position of baffles.

Figure M.9 reports the value of the order parameter and the number of wood chips as a function of the radial coordinate R . S values fluctuate around 0 far from the tumbler walls, meaning that no preferential orientation is observed, however when R approaches the tumbler radius, S values rise to 1, meaning that wood chips are parallel to the tumbler wall surface. Due to the high number of wood chips near the tumbler walls, the system is globally oriented, even if, as a matter of fact this happens mostly at high values of R .

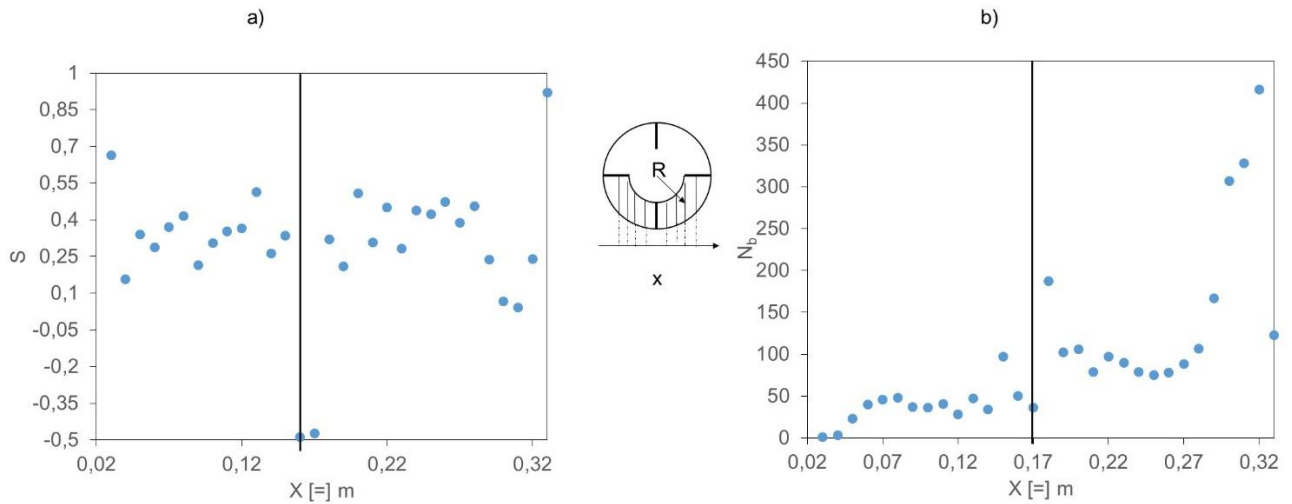


Figure M.10: **Order parameter evaluated on the radial axis (a) and number of wood chips (b) in the circular crown ($R \in [0.12 \text{ m}, 0.17 \text{ m}]$), as a function of the X coordinate, 5 rpm, 0° radial position of baffles, (the black lines represent the baffle X coordinates).**

Figure M.10 reports the value of the order parameter and their number as a function of the X position. Far from the baffle the general trend of Figure M.10 is observed: wood chips in the proximity of the tumbler walls have a preferential orientation parallel to the tumbler surface, but when the X coordinates approach the baffle X coordinate, the S value drops dramatically: wood chips are sticking to the baffle surface assuming a different orientation. This happens because when a baffle passes nearby, it applies a momentum on wood chips, and therefore a rotation is applied, until the orientation is the same as the baffle, because in those conditions momentum is minimized and the wood chips “stick” to the baffle surface (Figure M.11).

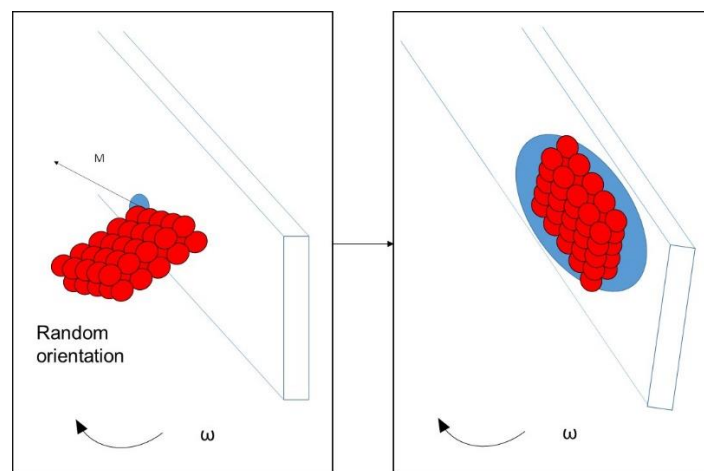


Figure M.11: **Schematic behavior of a wood chip inside the solid bed**

Conclusions

This work, as far as we know, is the first to tackle the influence of the presence of baffles on the behavior of particles in a rotating tumbler, using a rigorous DEM modeling. Another originality is to consider a mixture of two types of particles with different shapes (in this case steel balls and wood chips), the non-spherical particles being simulated by multisphere templates or by equivalent spheres, underlining their different behaviors. The results show that the effects of baffles are strictly related to the solid holdup causing also a transition from a pseudo stationary state, characteristic of a rotating tumbler without baffles, to a cyclic behavior. For the mixture of different types of particles, first information is given on segregation between the different kinds of particles, on their orientation in a tumbler provided with baffles as a function of rotating speed. It appears that, at moderate velocities, the chip plates tend, near the walls and baffles, to align themselves to the solid surfaces. The two approximations tend to converge at relatively high rotation velocity.

Taking into account the main differences observed between a simple spherical approximation and a multisphere approximation, this sphere approach will be used to simulate the breakage of wood chips in such an equipment and the heat transfer between the two types of particles. This kind of simulations can also be used to optimize the process, e.g. by proposing optimal shapes of the baffles.

Acknowledgements

The current study was funded by the Lorraine region (France) and the European Union (FEDER), within the project LORVER. The authors are grateful for their generous support.

Annexe N. Rayonnement

Bien que les transferts radiatifs soient souvent considérés comme négligeables pour des températures inférieures à 300-400 °C [223], certains développements permettent de prendre en compte ce mode de transfert de manière simple. De plus, tenir compte du rayonnement dans un modèle de pyrolyse est indispensable lors de l'exploitation de ce modèle aux températures de traitement les plus élevées. Les travaux menés par Gorog et al. [224] ont permis de tirer plusieurs conclusions sur le comportement radiatif des fours tournants. Ils ont notamment conclu que les transferts par rayonnement dus aux gradients de température dans la direction axiale peuvent être négligés. Ainsi, lors de la modélisation du procédé, le rayonnement est considéré comme significatif uniquement dans un plan transversal, ce qui simplifie considérablement les équations [225]. Ensuite, la paroi du cylindre et le lit de particules peuvent être considérés comme des surfaces grises et diffusantes. Enfin, ils proposent l'expression des facteurs de forme entre la paroi p et le solide s, en fonction des surfaces S_l et S_{pd} (définitions en Annexe I) :

$$\begin{cases} F_{ss} = 0 \\ F_{sp} = 1 \\ F_{ps} = \frac{S_l}{S_{pd}} \\ F_{pp} = 1 - \frac{S_l}{S_{pd}} \end{cases}$$

Système d'équations N.1

Basé sur ces remarques, Descoins [187] propose un modèle simplifié de rayonnement dans un four tournant pilote. La méthode des radiosités est employée. La radiosité J^r est définie comme la somme de l'émittance de la surface et du flux réfléchi par unité de surface et s'écrit sous la forme :

$$J^r = \varepsilon \sigma T^4 + (1 - \varepsilon) E^r$$

Équations N.2

Où ε , T , E^r et σ sont l'émissivité, la température et l'éclairement de la surface et σ la constante de Stefan-Boltzmann. La densité de flux nette perdue par la surface (Équations N.3) est égale à la

différence entre la radiosité (densité de flux quittant la surface par émission et réflexion) et son éclairement (densité de flux arrivant sur la surface).

$$\frac{\Phi_{g-1}^{Ir}}{S} = J^r - E^r = \frac{\varepsilon}{(1 - \varepsilon)} (\sigma T^4 - J^r)$$

Équations N.3

La radiosité prend en compte plusieurs composantes. Si on considère une surface i échangeant avec n surfaces d'indices j :

$$J_i^r = \varepsilon_i \sigma T_i^4 + (1 - \varepsilon_i) \sum_{j=1}^n F_{ij} \tau_g J_j^r + (1 - \varepsilon_i) \varepsilon_g \sigma T_g^4$$

Équations N.4

Le premier terme correspond au flux émis par la surface S_i . Le deuxième correspond au flux émis par la surface S_j , traversant le gaz et étant réfléchi par S_i . Enfin, le troisième est le flux émis par le gaz et étant réfléchi par S_i . Par hypothèse, le gaz est considéré comme gris donc sa transmittivité τ_g vérifie l'Équation 34.

$$\tau_g = 1 - \varepsilon_g$$

Équations N.5

En appliquant l'Équation 33 à la surface de cylindre S_{pd} et à la surface de solide S_i , il est possible d'obtenir un système de deux équations :

$$\begin{bmatrix} A_{ss} & A_{sp} \\ A_{ps} & A_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_i^r \\ J_p^r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_s \\ B_p \end{bmatrix}$$

Équations N.6

Avec :

$$\begin{cases} A_{ss} = 1 - (1 - \varepsilon_s)F_{ss}(1 - \varepsilon_g) \\ A_{sp} = -(1 - \varepsilon_s)F_{sp}(1 - \varepsilon_g) \\ A_{ps} = -(1 - \varepsilon_p)F_{ps}(1 - \varepsilon_g) \\ A_{pp} = 1 - (1 - \varepsilon_p)F_{pp}(1 - \varepsilon_g) \\ B_s = \varepsilon_s \sigma T_s^4 + (1 - \varepsilon_s)\varepsilon_g \sigma T_g^4 \\ B_p = \varepsilon_p \sigma T_p^4 + (1 - \varepsilon_p)\varepsilon_g \sigma T_g^4 \end{cases}$$

Système d'équations N.7

Ce système comporte deux inconnues J_l^r et J_p^r . Après résolution, les flux nets échangés par le solide et la paroi peuvent être calculés suivant le système d'équations n.8

$$\begin{cases} \frac{\Phi_{l}^{Ir}}{S_l} = \frac{\varepsilon_l}{(1 - \varepsilon_l)} (\sigma T_l^4 - J_l^r) \\ \frac{\Phi_{p}^{Ir}}{S_{pd}} = \frac{\varepsilon_p}{(1 - \varepsilon_p)} (\sigma T_p^4 - J_p^r) \end{cases}$$

Système d'équations N.8

Enfin, le flux net du rayonnement de la phase gazeuse est calculé grâce à l'équations n.9

$$\Phi_g^{Ir} = -(\Phi_l^{Ir} + \Phi_p^{Ir})$$

Équations N.9

Cette méthode est donc simple à mettre en œuvre et peu coûteuse en temps de calcul ce qui en fait une méthode de choix pour la modélisation d'un procédé complexe.

Annexe O. Résultats supplémentaires pour le modèle thermique

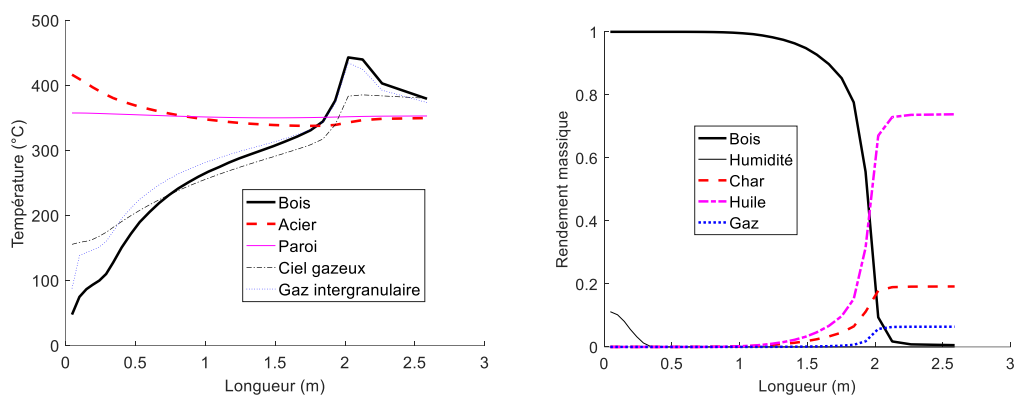


Figure O.1: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T = 420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T = 20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de rayonnement dans le freeboard (pas d'effet)

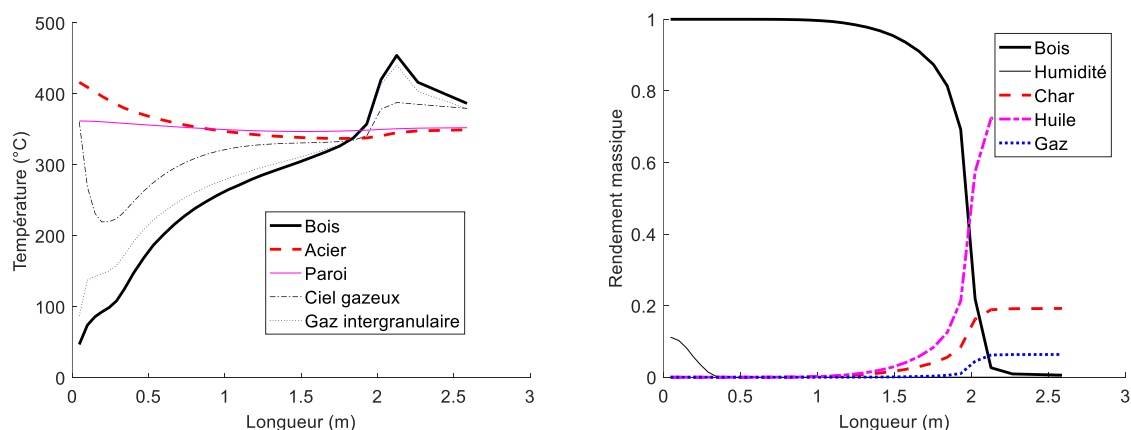


Figure O.2: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T = 420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T = 20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction entre billes et bois (pas d'effet)

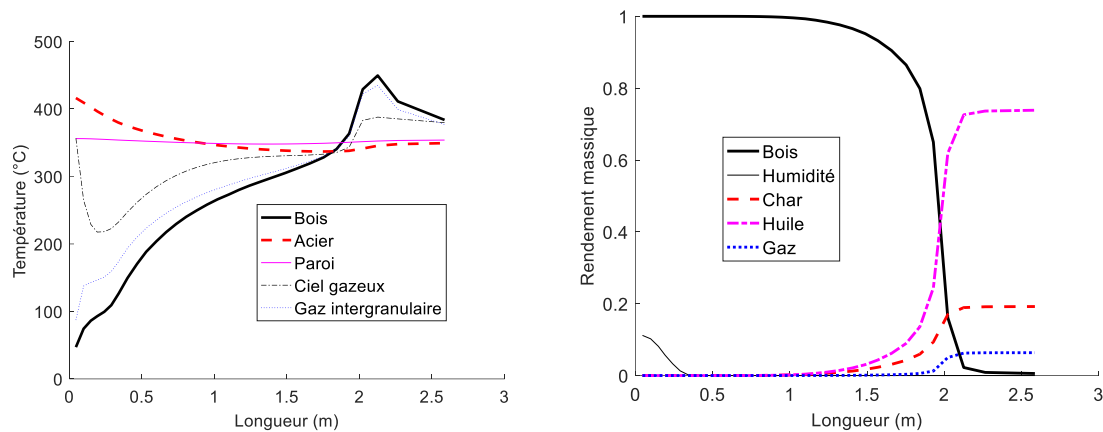


Figure O.3: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction avec la paroi (pas d'effet)

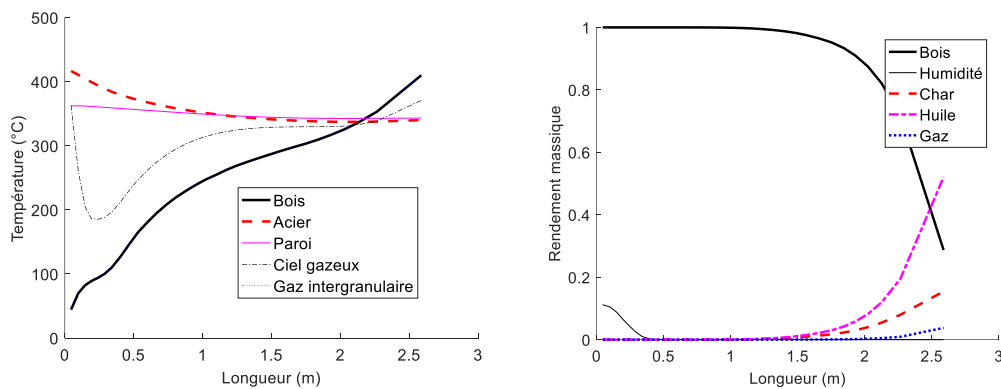


Figure O.4: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction entre le gaz interarticulaire et les billes (effet important)

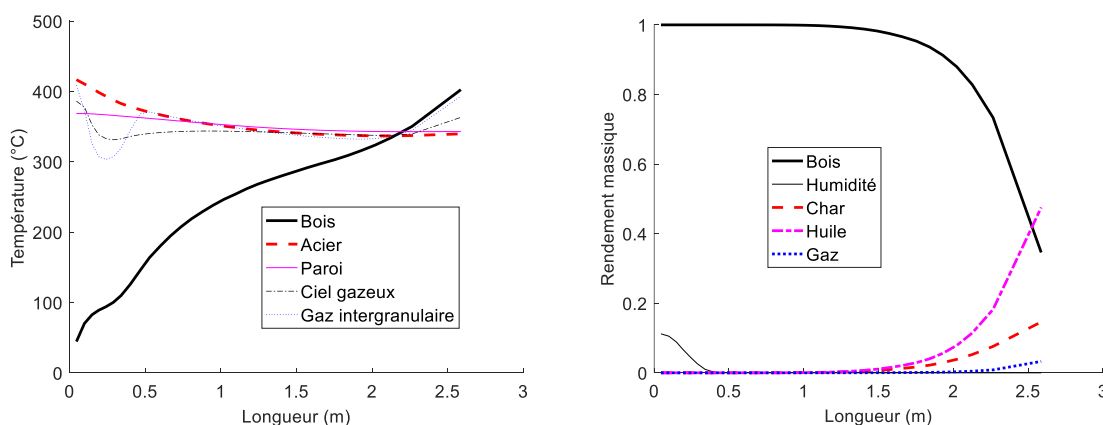


Figure O.5: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : absence de conduction entre le gaz interarticulaire et le bois (effet important)

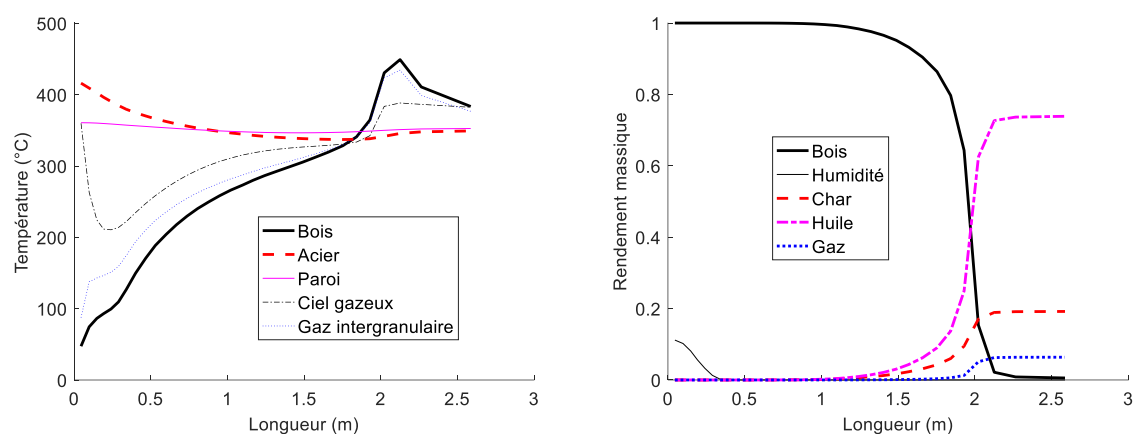


Figure O.6: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : pas de convection entre ciel gazeux et lit

(pas d'effet)

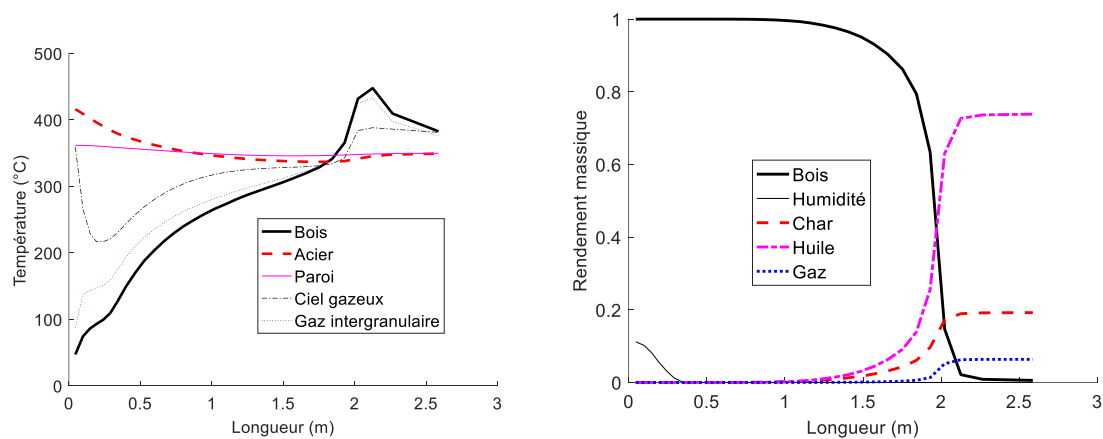


Figure O.7: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T=420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T=20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : pas de convection entre ciel gazeux et paroi

(pas d'effet)

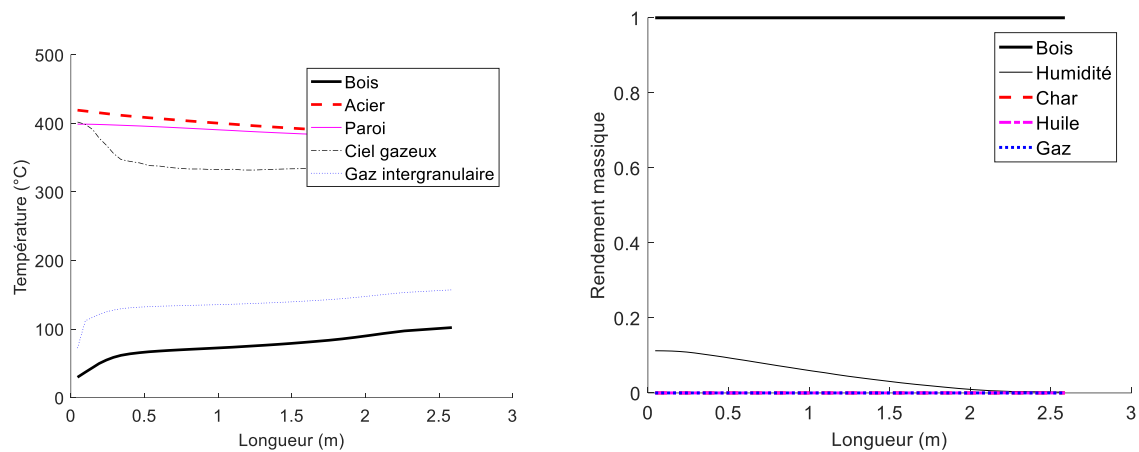


Figure O.8: Modélisation du pyrolyseur en tambour tournant opérant avec 940 kg/h de billes d'acier à $T = 420^{\circ}\text{C}$ et 45 kg/h de granulés de bois à $T = 20^{\circ}\text{C}$ et 10% d'humidité : profil longitudinal (a) des températures et (b) des rendements en produits : pas de rayonnement (effet très important)

Annexe P. Résultats supplémentaires pour le rhéomètre

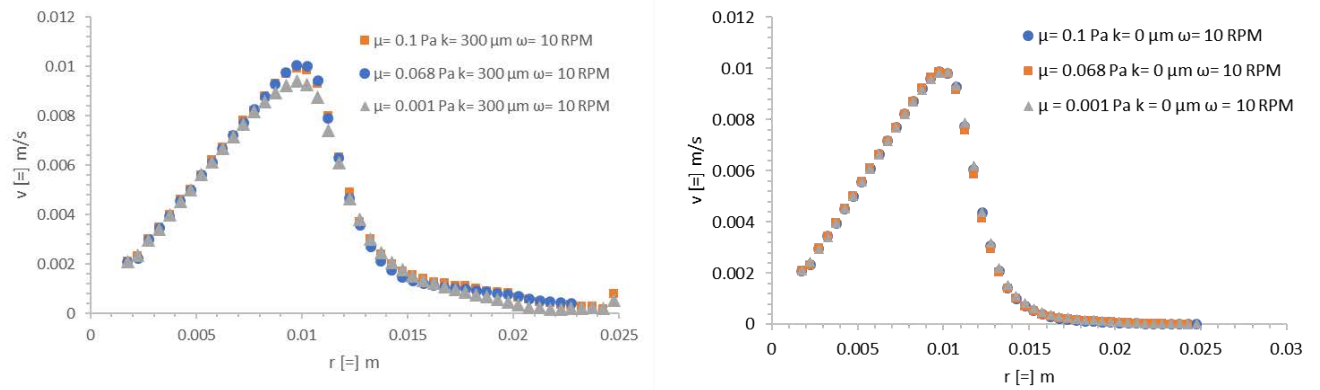


Figure P.1: Comparaisons des profils de vitesse moyen des particules solides en fonction de la position radiale et de la viscosité avec $\omega = 10$ RPM

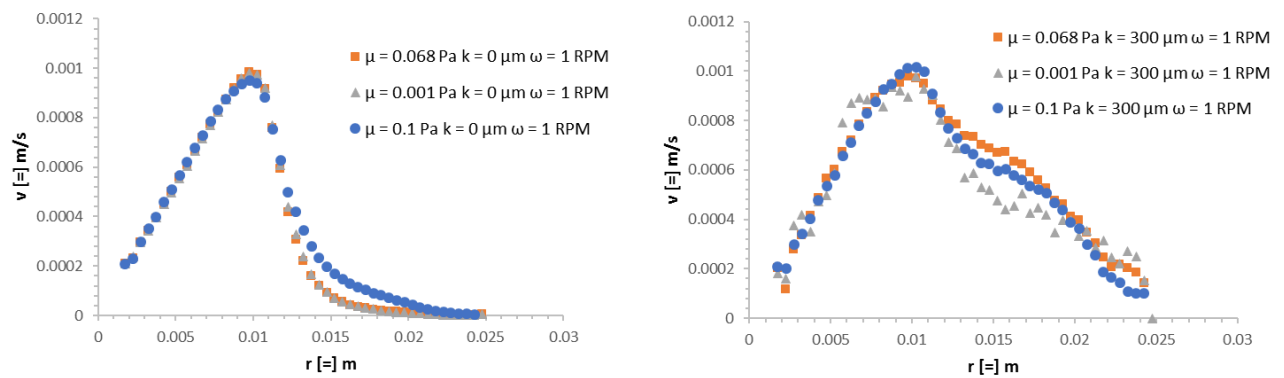


Figure P.2: Comparaisons des profils de vitesse moyen des particules solides en fonction de la position radiale et de la viscosité avec $\omega = 10$ RPM

Résumé

Ce travail s'inscrit dans le projet LORVER, soutenu par la Région Grand Est et le FEDER. Il est destiné à créer une filière de production de biomasse végétale non alimentaire par valorisation de sites dégradés et de sous-produits industriels, en Lorraine. Un des procédés de valorisation de la biomasse produite est un procédé thermochimique de pyro-gazéification qui générerait de la chaleur et de l'électricité. Ce procédé, développé par SEA Marconi, se compose de trois réacteurs différents : un tambour tournant, pour la pyrolyse de particules de bois, la chaleur étant amenée par des billes d'acier chauffées ; un réacteur à vis sans fin pour l'oxydation du char qui permet de réchauffer les billes d'acier ; un réacteur de craquage des goudrons. L'objectif de cette thèse est de réaliser des modèles qui puissent permettre d'avoir une prédiction adaptée du comportement du système. Des modèles 3D du type DEM et CFD-DEM ont été conçus pour la modélisation des phénomènes qui interviennent dans le système. Les paramètres du modèle DEM ont été calibrés dans un tambour tournant de laboratoire. Pour le réacteur de pyrolyse, la simulation DEM a permis de prédire de façon satisfaisante la ségrégation pour des mélanges de billes d'acier et de particules non sphériques de bois, et de concevoir un modèle thermique et chimique 1D, sur lequel une étude de sensibilité a été effectuée. Un modèle CFD-DEM a été codé et validé sur un rhéomètre granulaire, permettant la simulation du réacteur d'oxydation partielle du char, qui n'a pas pu être réalisé dans le cadre de cette thèse.

Mots clefs : pyrolyse, tambour tournant, modélisation, DEM, ségrégation, CFD

Abstract

This work is part of the LORVER project, funded by Grand Est Région and FEDER. It aims to create a non-food biomass production chain by using and upgrading brownfields and industrial by-products in Lorraine. One possible valorization process of the produced biomass is a thermochemical pyro-gasification process that would generate heat and electricity. This process, developed by SEA Marconi, involves three different reactors: a rotating drum, for the pyrolysis of wood particles, the heat required being brought by hot steel balls; an Auger for partial oxidation of the char that allows heating the steel balls; a reactor for tar cracking. The aim of this thesis is to develop models that can predict the behavior of the system. 3D models based on DEM or CFD - DEM were designed for the modeling of phenomena involved in the system. The DEM model parameters were first calibrated in a rotating drum. The DEM simulation was able to predict in a satisfactory manner segregation between steel balls and non-spherical wood particles; it also helped to design a 1D thermal and chemical model, on which a sensitivity study has been done. A CFD - DEM model has been coded and validated on a granular rheometer allowing the simulation of the char oxidation reactor, even if this simulation was not possible during the PhD.

Keywords : pyrolysis, rotary kiln, modeling, DEM, CFD-DEM