

Impact d'un système de récupération de chaleur sur un gazéifieur de biomasse solaire

Valerian FREYSZ*, Abdelhamid BELGHIT

Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement (LaSIE), La Rochelle, UMR CNRS 7356

*(auteur correspondant : valerian.freysz@univ-lr.fr)

Résumé - Aujourd'hui, l'impact sur l'environnement de l'utilisation de l'énergie fossile devient de plus en plus évident. Dans ce contexte, le développement d'énergies alternatives est une nécessité. La production d'hydrogène présente de nombreux avantages : l'hydrogène peut stocker deux fois plus d'énergie que le gaz naturel par unité de masse, sa combustion ne produit que de l'eau, elle est non polluante et non toxique. Mais, pour se substituer aux énergies conventionnelles, sa production doit avoir la plus faible empreinte carbone possible. Dans cette optique, l'utilisation de biomasse, de vapeur d'eau et du soleil comme source d'énergie pour la production d'un gaz de synthèse riche en hydrogène est une approche intéressante. La production de ce gaz nécessite de faire fonctionner le système réactif dans une plage de température comprise entre 600 K et 1200 K. Étant donnée la limite basse du processus, la mise en place et l'optimisation d'un système de récupération de chaleur est alors pertinent.

Dans cet article, nous présentons la modélisation dynamique et unidimensionnelle d'un réacteur à lit compact allothermal dédié à la production d'hydrogène à partir de biomasse et de vapeur d'eau. Les équations de conservation régissant le gazéifieur sont résolues par la méthode des volumes finis. Enfin, une étude de l'impact d'un système de récupération de chaleur sur un tel réacteur est présenté et discuté.

Nomenclature

D	coefficient de diffusion moléculaire, $m^2.s^{-1}$	R	constante universelle des gaz parfaits, $k.J.kmol^{-1}.K^{-1}$
C_p	capacité calorifique à pression constante, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	<i>Symboles grecs</i>	
T	température, K	ε	fraction de vide
t	temps, s	ε_{eff}	efficacité de l'échangeur
Y	fraction massique	ρ	masse volumique, $kg.m^{-3}$
X	taux d'avancement ou fraction molaire	λ	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
k'	constante de vitesse, s^{-1}	<i>Indices et exposants</i>	
ΔH	enthalpie de réaction, $J.kg^{-1}$	c	conduction
\dot{m}''	débit massique surfacique du gaz, $kg.m^{-2}.s^{-1}$	e	effective
\dot{m}'''	débit massique volumique du gaz, $kg.m^{-3}.s^{-1}$	en	entrée
d_p	diamètre des particules, m	i	espèce i
R_{s-v}	rapport surface / volume, m^{-1}	j	réaction j
h_e	coefficient d'échange thermique gaz-solide, $W.m^{-2}.K^{-1}$	o	condition initiale
M	masse molaire, $kg.mol^{-1}$	r	rayonnement
		s	sortie

1. Introduction

L'utilisation de biomasse, de vapeur d'eau et du soleil comme source d'énergie pour la production d'un gaz de synthèse riche en hydrogène est une approche intéressante. Pour optimiser de tels procédés, une modélisation fine et précise des phénomènes ayant lieu au coeur du réacteur est nécessaire. C'est l'objet du modèle de réacteur gaz-solide présenté ici. Les équations de transfert de chaleur et de masse nécessaires à cette modélisation sont présentées et discutées. Ce modèle est ensuite utilisé pour étudier l'impact d'un système de récupération de chaleur entre le gaz d'entrée et le gaz de sortie. En effet, le gaz de sortie est en général refroidi pour être traité [1], et cette énergie est perdue.

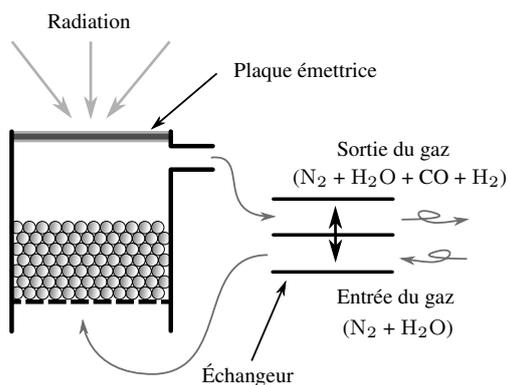


Figure 1: Schéma du réacteur

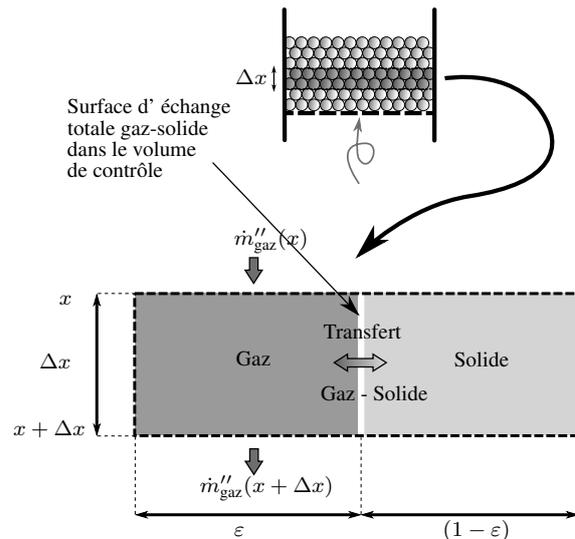


Figure 2: Schéma du volume de contrôle

Le schéma du réacteur étudié est présenté sur la Figure 1. Un gaz composé d'azote et de

vapeur d'eau est injecté dans le réacteur avec une vitesse initiale $V_{\text{gaz, entrée}} = 2,3 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$ [2]. En fonction du cas d'étude, il est préchauffé ou non, grâce à l'échangeur. Une plaque émettrice, en partie haute du réacteur, est placée au plan focal d'un concentrateur solaire. Cette plaque monte en température et réémet sur le lit de particules. Le gaz entre ensuite en interaction avec des particules sphériques de charbon de hêtre. Dans le réacteur, la réaction de cette biomasse avec la vapeur d'eau génère de l'hydrogène et de l'oxyde de carbone.

2. Cinétique chimique

Dans un tel gazéifieur, de nombreuses réactions peuvent avoir lieu. Plusieurs approches peuvent être utilisées pour modéliser ces réactions : multiréactions, approche globale, équilibre thermodynamique, cinétique. Le choix de l'approche se fait en fonction du domaine de température, du type de matériau, des variables que l'on veut étudier en sortie, de la puissance de calcul dont on dispose, etc [3]. Ici, une approche globale a été choisie pour modéliser les réactions ayant lieu dans le réacteur. Piatkowski [2] propose une cinétique pour la réaction globale de charbon de hêtre avec la vapeur d'eau. La réaction globale considérée est la suivante :



Le bilan de matière associé à cette réaction est présenté dans l'équation 2, les paramètres associés sont introduits dans le Tableau 1

$$\frac{dX}{dt} = k'(1 - X)^{2/3} \quad (2)$$

En utilisant l'équation 2 et le Tableau 1, nous pouvons obtenir l'équation :

$$\frac{d\rho_{\text{solide}}}{dt} = -\rho_{\text{solide,o}} k' \left(\frac{\rho_{\text{solide}}}{\rho_{\text{solide,o}}} \right)^{2/3} \quad (3)$$

Taux d'avancement	$X = 1 - \frac{\rho_{\text{solide}}}{\rho_{\text{solide,o}}}$
Constante de vitesse	$k' = k_o \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$
Facteur de fréquence	$k_o = 0,0222 \text{ s}^{-1}$
Énergie d'activation	$E_a = 43154 \text{ kJ.kmol}^{-1}$

Tableau 1: Paramètres de la cinétique [2]

3. Les équations de conservation

La démarche pour obtenir les équations est la suivante : nous utilisons la Figure 2 pour faire les bilans sur chaque phase. Ensuite, nous divisons par le volume de contrôle. Enfin, nous faisons tendre Δx vers 0.

3.1. Conservation des espèces chimiques

3.1.1. Pour le gaz

En suivant le formalisme introduit par Turns [3], chaque espèce i du gaz présent dans le réacteur est régie par l'équation suivante :

$$\varepsilon \frac{\partial(\rho_{\text{gaz}} Y_i)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[Y_i \dot{m}_{\text{gaz}}'' - \rho_{\text{gaz}} D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right] + \dot{m}_i''' \quad (4)$$

Dans cette équation on trouve, de gauche à droite : la contribution due à l'accumulation, à la convection, à la diffusion moléculaire et enfin à la génération (ou destruction) par réaction chimique. Le terme source associé à chaque gaz \dot{m}_i''' , s'exprime par l'équation.

$$\dot{m}_i''' = -\frac{M_i}{M_{\text{solide}}} (1 - \varepsilon) \rho_{\text{solide,o}} k' \left(\frac{\rho_{\text{solide}}}{\rho_{\text{solide,o}}} \right)^{2/3} \quad (5)$$

3.1.2. Pour le solide

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial \rho_{\text{solide}}}{\partial t} = \dot{m}_{\text{solide}}''' \quad (6)$$

L'équation (2) nous permet de déterminer facilement $\dot{m}_{\text{solide}}'''$ en tout point du réacteur. La conversion du solide se fait de manière progressive suivant le livre de Levenspiel [4], c'est-à-dire que la réaction a lieu dans toute la particule solide, ce qui se traduit par une variation de la masse volumique du solide.

3.2. Conservation de l'énergie

3.2.1. Pour les gaz

$$\varepsilon \sum_i^{N_{\text{gaz}}} \frac{\partial(\rho_{\text{gaz}} Y_i C_{p,i} T_{\text{gaz}})}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_i^{N_{\text{gaz}}} C_{p,i} T_{\text{gaz}} \left(Y_i \dot{m}_{\text{gaz}}'' - \rho_{\text{gaz}} D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) - \lambda_{\text{gaz}} \frac{\partial T_{\text{gaz}}}{\partial x} \right] - R_{s-v} h_e (T_{\text{gaz}} - T_{\text{solide}}) \quad (7)$$

Dans cette équation on trouve, de gauche à droite : la contribution due à l'accumulation, à la convection, à la diffusion moléculaire, à la conduction et enfin le transfert thermique entre les phases.

3.2.2. Pour le solide

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial(\rho_{\text{solide}} C_{p,\text{solide}} T_{\text{solide}})}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-\lambda_{\text{effective lit}} \frac{\partial T_{\text{solide}}}{\partial x} \right) + R_{s-v} h_e (T_{\text{gaz}} - T_{\text{solide}}) - \dot{m}_j''' \Delta H_j \quad (8)$$

Dans cette équation on trouve, de gauche à droite : la contribution due à l'accumulation, à la conduction, au transfert thermique entre les phases et enfin à l'énergie consommée par la réaction chimique. ΔH varie en fonction de la température et est présentée dans la Figure 3. Notons que l'on considère que toute l'énergie nécessaire à la réaction est consommée dans le solide étant donné que le ρC_p du solide est très grand devant celui du gaz.

4. Les transferts thermiques

La modélisation des phénomènes de transferts thermiques, associée au rayonnement et à la conduction à travers le lit, se fait grâce à des conductivités thermiques équivalentes associées à chaque phénomène. Ces deux contributions sont ensuite couplées pour former la conductivité thermique effective du lit poreux (équation 9). La convection est, quant à elle, prise en compte à travers l'équation de conservation de l'énergie du gaz (équation 7).

$$\lambda_{\text{effective lit}} = \lambda_e^r + \lambda_e^c \quad (9)$$

La conduction thermique à travers le lit poreux est calculée grâce à une conductivité thermique équivalente ($\lambda_{\text{effective lit}}$), la démarche est présentée en détail dans le livre de Kaviany [5]. Différentes modélisations du transfert thermique dans un lit compact ainsi que des données expérimentales extraites de [2] sont présentées dans la Figure 4. Pour les abréviations, la première lettre représente la conduction avec H pour Hardley, K pour Kunii et G pour géométrique. La deuxième lettre représente le rayonnement avec R pour Rosseland et A pour Van Antwerpen [6]. Enfin la troisième et dernière lettre représente la conduction thermique du solide avec A pour le model Atkinson [7] et C pour une conductivité constante $\lambda_{\text{solide}} = 0,35 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$

La figure 4 nous montre que la meilleure combinaison pour s'approcher des données expérimentales de Piatkowski [2] est le modèle de conduction d'Hardley avec le rayonnement de Rosseland et une conductivité thermique constante du solide. C'est cette combinaison qui est utilisée dans notre modélisation du transfert thermique dans le réacteur.

Enfin le transfert conductif à travers les parois latérales du réacteur, qui est un mode important de transfert thermique dans le réacteur, est modélisé à l'aide d'une plaque de SiC de 6 mm d'épaisseur pour une conductivité thermique λ_{SiC} de $25 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Ce transfert se fait en parallèle du flux conductif à travers le lit poreux.

5. Récupération de chaleur

Dans son régime de fonctionnement optimal du réacteur, le gaz de sortie a une température supérieure à 600 K. Ce gaz est en général refroidi pour être traité [1], et cette énergie est perdue. Ici nous allons étudier l'impact du préchauffage des gaz d'entrée avec les gaz de sortie. Un échangeur air-air haute température adapté à un brûleur de biomasse a été choisi dans la littérature [8]. Il est donné pour une efficacité ε_{eff} de 62,5%. Il est modélisé de manière très simple à l'aide des équations 10, 11 et 12

$$C_{min} = \min \{ \dot{m}_{\text{gaz},s} C_{p,\text{gaz},s}, \dot{m}_{\text{gaz},en} C_{p,\text{gaz},en} \} \quad (10)$$

$$\dot{Q}_{max} = C_{min} (T_{\text{gaz},s} - T_{\text{gaz},en}) \quad (11)$$

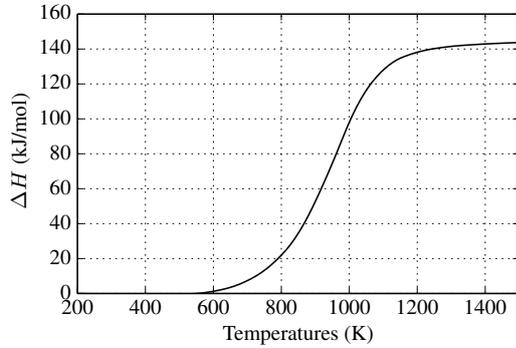


Figure 3: *Enthalpie de réaction calculée en fonction de la température pour l'équilibre thermodynamique.*

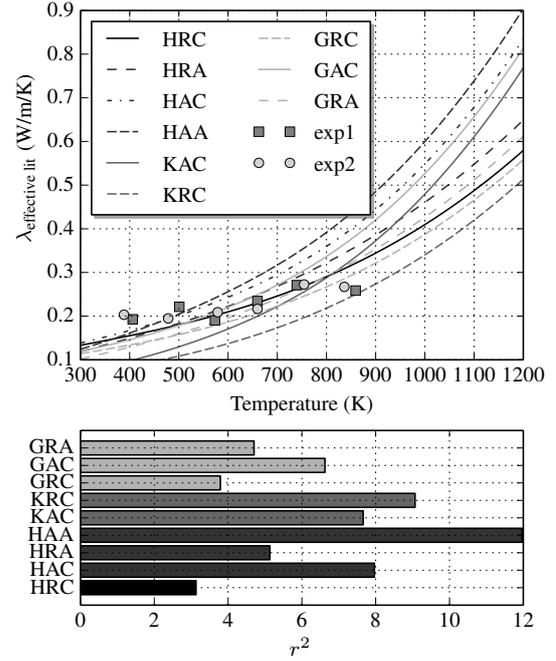


Figure 4: *Comparaison de différentes modélisations du transfert thermique dans un lit compact avec des données expérimentales extraites de [2]. r^2 un coefficient de détermination introduit par Lejeune [10]*

$$\dot{Q} = \varepsilon_{eff} \dot{Q}_{max} \quad (12)$$

Le flux \dot{Q} est ensuite réinjecté à l'entrée du réacteur avec une condition limite variable sur l'équation de conservation de l'énergie du gaz (équation 7).

6. Conditions opératoires

La Figure 1 représente le schéma de principe du réacteur qui, dans cette étude, fait 8 cm de longueur.

Le gaz en entrée est composé de N_2 et de H_2O . Un flux de 3000 W, évalué grâce aux données expérimentales de Piatkowski [2], est appliqué sur la partie supérieure du lit poreux. La température d'entrée du gaz est de 300 K. Les fractions molaires à l'entrée sont $X_{N_2,entrée} = 0,7$ et $X_{H_2O,entrée} = 0,3$.

Le solide est formé de particules sphériques de bois d'hêtre de diamètre $2 \cdot 10^{-3}$ m.

7. Méthode numérique

La résolution des équations régissant le modèle proposé est faite grâce à la méthode des volumes finis dont on peut trouver les détails dans le livre de Versteeg [9]. Les équations sont codées sous Python utilisant la librairie Fipy [11] pour résoudre les équations de conservation. La librairie Cantera [12] est utilisée pour les calculs des données thermodynamiques et de trans-

port.

7.1. Conditions aux limites

En sortie du réacteur des conditions aux limites de Neumann sont imposées sur toutes les variables.

8. Résultats et discussions

Les profils de température du solide et de génération de H_2 dans le réacteur à 10 min sont présentés sur les Figures 5 et 6 respectivement. On peut voir que la mise en place de l'échangeur conduit à une variation de la température du solide de l'ordre de 80 K en sortie du réacteur. Cette augmentation de la température implique une augmentation de la génération de H_2 dans le réacteur comme nous pouvons le voir sur la Figure 6.

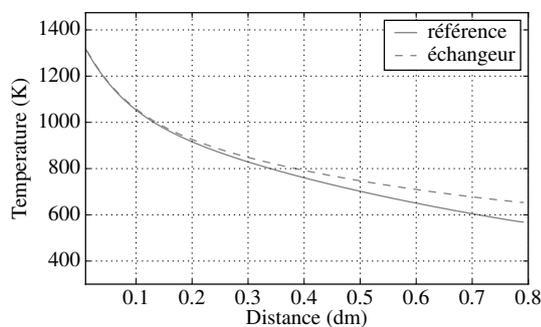


Figure 5: Température du solide dans le réacteur à 10 min

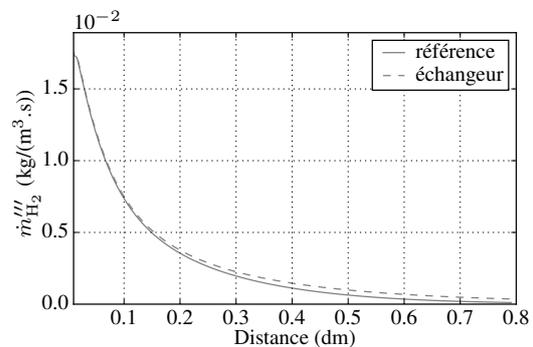


Figure 6: Source de H_2 dans le réacteur à 10 min

La production de H_2 pour nos deux modèles ainsi qu'une mesure expérimentale sont présentées sur la Figure 7. La durée de fonctionnement est de 100 min. L'impact de la mise en place de l'échangeur sur la production de H_2 est de l'ordre de 9% avec 0,229 kg et 0,25 kg pour le cas de référence et le cas avec échangeur, respectivement. Cela montre le potentiel de la récupération de chaleur sur ce type de réacteur.

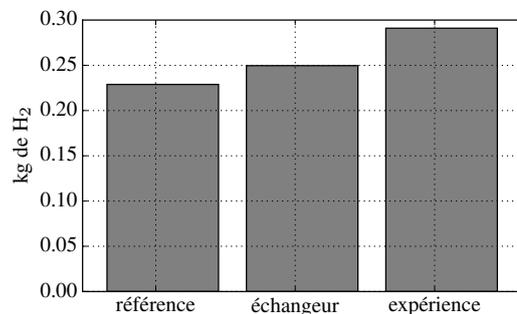


Figure 7: kg de H_2 produit en 100 min. Les mesures expérimentales proviennent de Piatkowski [2]

L'expérience quant à elle, conduit à une production de 0,291 kg, soit un écart de 20 % avec

notre cas de référence. Une analyse des résultats de Piatkowski [2] montre une forte réduction de la hauteur du lit pendant le fonctionnement du réacteur. Cette réduction permet au carbone n'ayant pas réagi d'être plus proche de la plaque émettrice, ce qui conduit à une température plus élevée et donc une génération de H₂ plus importante. Pour se rapprocher des résultats expérimentaux, la modification de la conversion du solide semble être la piste la plus intéressante. En effet, la conversion progressive mise en place ne permet pas de modéliser la variation de la hauteur du lit poreux. Une conversion avec rétrécissement du noyau comblera ce manque et permettra certainement de se rapprocher des résultats expérimentaux.

9. Conclusion

Nous avons présenté un modèle permettant de simuler le comportement d'un gazéifieur de biomasse. À l'aide de ce modèle, nous avons simulé l'impact d'un système de récupération de chaleur des gaz de sortie sur la production d'hydrogène. Nos résultats indiquent une augmentation de 9 % de la production de H₂. De plus, la comparaison de notre modèle avec l'expérience suggère que, dans un lit compact, la conversion avec rétrécissement du noyau doit permettre une meilleure modélisation de ce type de réacteur.

10. Annexe

Le coefficient utilisé dans la figure 4 est présenté dans l'équation 13.

$$r^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (13)$$

où y_i , \bar{y} , \hat{y}_i représentent les valeurs expérimentales, moyennes, et calculées respectivement.

Références

- [1] Liu. *Hydrogen and syngas production and purification technologies*, Wiley ; AIChE (2010).
- [2] N. Piatkowski. Solar-Driven Coal Gasification in a Thermally Irradiated Packed-Bed Reactor, *Energy & Fuels.*, 22-3 (2008) 2043–2052.
- [3] S, Turns. *An introduction to combustion : concepts and applications*, Springer-Verlag (2011).
- [4] O, Levenspiel. *Chemical Reaction Engineering*, Springer-Verlag (1998).
- [5] M, Kaviany. *Principles of heat transfer in porous media*, Springer-Verlag (1995).
- [6] W. van Antwerpen. Multi-sphere Unit Cell model to calculate the effective thermal conductivity in packed pebble beds of mono-sized spheres, *Energy & Fuels.*, 247 (2012) 183–201.
- [7] Atkinson. Mathematical models of the thermal decomposition of coal, *Fuel.*, 62-5 (1983) 553–561.
- [8] Al-attab. Performance of high-temperature heat exchangers in biomass fuel powered externally fired gas turbine systems, *Renewable Energy.*, 35-5 (2010) 913–920.
- [9] H. K., Versteeg. *An introduction to computational fluid dynamics*, Pearson Education Ltd (2007).
- [10] Lejeune, Michel. *Statistique La théorie et ses applications*, Springer (2010).
- [11] J. Guyer. FiPy : Partial Differential Equations with Python, *Computing in Science & Engineering.*, 11-3 (2009) 6–15.
- [12] D, Goodwin. *Cantera : An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes*, Version 2.1, available at <https://code.google.com/p/cantera/>