Modélisation de la combustion sans flamme « Smoldering » dans une particule de biomasse

Rihab Ellouze¹, Hédi Hachéni¹, Kamel Halouani¹, Olivier Vauquelin² et Philippe Bournot² ¹METS-IESG-ENIS, IPEIS, Université de Sfax, B.P: 1172-3018-Sfax-Tunisie ²IM2/UNIMECA, Jardin du Pharo 58 Charles Livon Marseille 13284, Marseille cedex 07, France Kamel.Halouani@ipeis.rnu.tn

RESUME

L'objectif de ce travail est l'étude de la propagation du phénomène du smoldering dans une particule de biomasse. Un modèle numérique monodimensionnel a été élaboré pour déterminer les paramètres qui affectent la propagation de ce phénomène. Ce modèle est basé sur le couplage du transfert de chaleur et de masse avec la cinétique réactionnelle. Les résultats numériques obtenus permettent de décrire l'évolution de la masse totale de la particule, de sa température et de la consommation d'oxygène au cours du temps.

NOMENCLATURE

А	Facteur pré-exponentiel	(s^{-1})
d	Diamètre de l'échantillon	(m)
$d_{i=f,p}$	Diamètre des fibres, Diamètre des pores	(m)
D	Coefficient de diffusion	$(m^2 s^{-1})$
Ea	Energie d'activation	$(J \text{ mol}^{-1})$
h_{gs}	Coefficient de transfert thermique entre le gaz et le solide	$(Wm^{-2}K^{-1})$
h _e	Coefficient de transfert thermique entre le solide et l'extérieur	$(Wm^{-2}K^{-1})$
K	Perméabilité du bois	
k	Constante cinétique de réaction	(1/s)
L	Longueur de la particule	(m)
M _{moy}	Masse molaire moyenne du mélange gazeux	(g/mol)
р	pression du gaz	(Pa)
S	Section de la particule	(m^2)
u	Vitesse d'infiltration du gaz	(m/s)
V	Volume	(m^3)
v	Vitesse de diffusion	(m/s)
Х	Abscisse	(m)
у	Fraction massique des espèces gazeuse	
Symboles	s Grecs	
Δh	Enthalpie de réaction	$(J kg^{-1})$
δ	Ordre de réaction (=1)	
ν	Coefficient stœchiométrique	
Φ	Porosité du milieu	
μ	Viscosité dynamique	(Pa.s)
σ	Constante de Stephan-Boltzmann	$(5,67.10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{K}^{-4})$

1. INTRODUCTION

La modélisation mathématique du phénomène du smoldering dans différents matériaux solides a fait l'objet de plusieurs travaux dans la littérature [1-7]. Dosanjih et al. [1] ont développé un modèle théorique où deux zones de réactions ont été considérées: une zone de pyrolyse où le combustible solide se transforme en charbon suivie d'une zone d'oxydation du charbon. Buckmaster et Lozinski [2] ont développé un modèle similaire mais ils ont élaboré une meilleure description des fronts de réactions de pyrolyse ainsi que l'oxydation. Schult et al. [3] ont utilisé des méthodes asymptotiques pour trouver la vitesse de propagation du front de la réaction du smoldering. Les résultats obtenus par ce modèle étaient conformes aux résultats expérimentaux trouvés par Ohlemiller et Lucca [4] et les expériences de Fernandez-Pello [5]. Leach et al. [6] ont établit un modèle cinétique basé sur trois réactions simultanées de pyrolyse et d'oxydation du combustible solide ainsi que l'oxydation du charbon résultant de la pyrolyse du solide. Les résultats numériques de ce modèle notamment

pour la vitesse de propagation et le profil de température dans le solide sont assez probants. Cependant, la modélisation mathématique du smoldering dans le bois n'a fait l'objet que de quelques études. Costa et Sandberg [7] ont réalisé une étude qui a ignoré l'aspect cinétique du phénomène et n'a considéré que la conservation d'énergie dans la phase solide ainsi que le séchage du bois au cours du phénomène du smoldering.

Dans ce travail, nous proposons une modélisation mathématique de la combustion sans flamme dans une particule cylindrique de bois basée sur la résolution des équations de conservation couplées à la cinétique réactionnelle. Les équations ont été discrétisées dans l'espace, avec la méthode des différences finies explicite, et résolues dans le temps. Les profils de la température ainsi que la perte de masse du solide ont été examinés afin d'étudier le développement de la combustion sans flamme au sein de la particule.

La vitesse de propagation du front de la réaction a été également déterminée en fonction de quelques paramètres notamment la fraction d'oxygène ainsi que la vitesse de l'air.

2. MODELISATION MATHEMATIQUE D'UNE COMBUSTION SANS FLAMME DANS UNE PARTICULE CYLINDRIQUE DE BOIS

2.1. Description du modèle physique

On se propose d'étudier la propagation unidirectionnelle d'un smoldering dans un morceau de bois cylindrique de diamètre d. En effet la figure 1 illustre l'existence de quatre zones différentes.



Figure 1. Combustion sans flamme unidirectionnelle dans une particule cylindrique de bois

La première zone est le combustible vierge qui n'a pas encore subit de décomposition (unburned fuel). La deuxième zone est le combustible sec (dry fuel). La troisième zone est celle qui contient le charbon résultant de la réaction de pyrolyse (char). La dernière zone est la zone des cendres, celle-ci délimite la zone des pertes de chaleur avec l'extérieur. Chaque zone est délimitée par un front de réaction, qui sont respectivement ; le front de séchage (drying front), le front de pyrolyse (pyrolysis front) et le front du smoldering (smoldering front). Chaque front est caractérisé par une vitesse de propagation.

Afin de simplifier le système des équations, nous admettons les hypothèses suivantes :

- La propagation du smoldering est directe et unidirectionnelle (suivant x) ;
- L'échantillon cylindrique du bois est supposé de longueur infinie (L>5d)
- Les dégagements gazeux engendrés par les réactions de pyrolyse et d'oxydation ne réagissent pas avec le charbon ;
- L'épaisseur de la couche du cendre ne perturbe pas le flux de l'oxydant (air) ;
- Le transfert de la chaleur à la surface de la particule est une combinaison globale de transferts convectif et radiatif ;
- Il n'y a pas de réactions dans la phase gazeuse ;
- La fraction massique de l'oxygène est constante au cours du temps ;
- La masse volumique du solide (bois + charbon+ cendre) est égale à la masse volumique du bois, du charbon et du cendre pondérée par les fractions massique de chaque élément à chaque instant ;
- Les échanges thermiques par rayonnement dans le solide sont inclus dans la conductivité thermique;
- L'influence de la gravité n'est pas considérée ;
- La phase de séchage n'est également pas considérée ;

2.2. Etude cinétique

Il est clair que les réactions qui se passent dans le phénomène du smoldering ne sont pas des réactions en chaîne, car on ne peut pas supposer que l'oxydation du charbon va attendre jusqu'à ce que la réaction de pyrolyse du bois se termine. En effet, le charbon ne résulte pas de la pyrolyse du bois seulement, mais l'oxydation de ce dernier avec l'oxygène présent dans l'air entraîne la formation du charbon aussi. Ainsi, l'oxydation du charbon peu se faire simultanément avec la pyrolyse.

Pour simplifier le système on va considérer un système réactionnel contenant seulement trois réactions ; deux d'oxydation et une de pyrolyse.

$$(bois) + vo_1O_2 \xrightarrow{Oxydation} vc_1(charbon) + vg_1(gaz)$$
(1)

$$(bois) \xrightarrow{Pyrolyse} vc_2(charbon) + vg_2(gaz)$$

$$(2)$$

$$(charbon) + vo_3O_2 \xrightarrow{Oxydation} vr_3(résidu) + vg_3(gaz)$$
 (3)

L'équation (1) est une oxydation, elle est alors une réaction exothermique dont l'enthalpie sera notée Δh_0 . L'équation (2) est une réaction de pyrolyse, elle est alors endothermique dont l'enthalpie sera notée Δh_p . L'équation (3) est une oxydation exothermique dont l'enthalpie sera notée Δh_r .

La perte de masse totale du bois engendrée par les équations (1) et (2) est donnée par l'expression suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m_B}{m_0} \right) = -(k_0 + k_p) \tag{4}$$

$$k_o = A_o \left(\frac{m_B}{m_0}\right)^{\delta_o} y_{o_{2,}(su)} \exp\left(-\frac{Eao}{RT}\right)$$
⁽⁵⁾

Avec :

$$k_{p} = A_{p} \left(\frac{m_{B}}{m_{0}} \right)^{\delta_{p}} \exp\left(-\frac{Eap}{RT}\right)$$
(6)

La perte totale de la masse du charbon engendrée par l'équation (3) est de la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m_c}{m_0} \right) = v c_1 k_0 + v c_2 k_p - k_r \tag{7}$$

La production des cendres est exprimée par :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m_r}{m_0} \right) = v r_3 k_r \tag{8}$$

$$k_r = A_r \left(\frac{m_c}{m_0}\right)^{\delta_r} y_{o_{2,}(su)} \exp\left(-\frac{Ear}{RT}\right)$$
⁽⁹⁾

2.3. Equation de continuité dans le gaz

Dans une combustion sans flamme, le mélange gazeux est composé d'oxygène et d'effluents de pyrolyse et d'oxydations. Ce mélange figure dans les trois réactions et se déplaçant dans les pores du combustible dont la porosité est égale à Φ :

$$\frac{\partial(\phi\rho_g)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g\phi u)}{\partial x} = \phi \Big[v g_2 k_p + k_o (v g_1 - v o_1) + k_r (v g_3 - v o_3) \Big]$$
(10)

Le second terme (terme source) traduit la cinétique des réactions qui engendre des variations dans la composition du gaz.

2.4. Equations de conservation de l'oxygène

Les équations de conservation peuvent s'écrire en terme d'oxygène dans le mélange gazeux et à la surface du solide et un coefficient de transfert de masse.

2.4.1. Conservation de l'oxygène dans le mélange gazeux

$$\frac{\partial(\rho_g\phi_b y_{o_{2,b}})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g\phi_b u_b y_{o_{2,b}})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_g\phi_b v_{o_{2,b}} y_{o_{2,b}})}{\partial x} = -h_m \frac{S_g}{V} (y_{o_{2,b}} - y_{o_{2,su}})$$
(11)

 $(\mathbf{7})$

$$\frac{\partial(\rho_{g,su}\phi_{su}y_{o_{2,su}})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_{g,su}\phi_{su}y_{o_{2,su}})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_{g,su}\phi_{su}y_{o_{2,su}})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_{g,su}\phi_{su}y_{o_{2,su}}y_{o_{2,su}})}{\partial x} = -vo_{1}k_{o}\rho_{B} - vo_{3}k_{r}\rho_{c} + h_{m}\frac{S_{g}}{V}(y_{o_{2,b}} - y_{o_{2,su}})$$

$$(12)$$

On ajoute à l'équation les termes sources relatifs à la cinétique du phénomène puisque les réactions d'oxydation épuisent l'oxygène à la surface des pores du solide. De plus, on estime que la vitesse du gaz à la surface est nulle et que la porosité est très faible (Φ s<< Φ b).

La vitesse de diffusion de l'oxygène dans les pores du solide est donnée par la loi de Fick :

$$v_{o_2} = -D_{o_2} \frac{\partial y_{o_2}}{\partial x} \tag{13}$$

Le coefficient de transfert massique h_m est donné par:

$$\frac{h_{gs}}{h_m} = \rho_g c_g L e^{(1-\beta)} \tag{14}$$

Avec Le = $\lambda g/(\rho c_g D)$ et β un coefficient qui est généralement égale à 1/3 [6].

2.5. Conservation de l'énergie

La conservation d'énergie se fait dans la phase gazeuse ainsi que dans la phase solide puisqu'on suppose qu'il n'y a pas d'équilibre thermique entre la phase gazeuse et la phase solide. Ainsi les équations de conservation d'énergie s'écrivent dans le solide aussi bien que dans le gaz.

2.5.1. Conservation de l'énergie dans le solide :

$$\rho_{s}c_{s}\frac{\partial T_{s}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_{s}\frac{\partial T_{s}}{\partial x}\right) - k_{o}\rho_{B}\Delta h_{o} - k_{p}\rho_{B}\Delta h_{p} - k_{r}\rho_{C}\Delta h_{r} + \frac{h_{gs}S_{g}}{V}(T_{g} - T_{s}) + \frac{h_{e}S_{L}}{V}(T_{0} - T_{s})$$

$$(15)$$

2.5.2. Conservation de l'énergie dans la phase gazeuse :

$$\rho_g \phi c_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + u \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) = \lambda_g \phi \frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2} + \frac{h_{sg} S_g}{V} (T_s - T_g)$$
(16)

u est la vitesse de déplacement du gaz dans les pores du solide. Elle s'exprime à partir de la loi de Darcy.

2.5.3. Le coefficient de transfert de chaleur :

Les transferts radiatifs et convectifs sont réunis dans une même expression et un coefficient de transfert global donné par la relation empirique :

$$h_{gs} = \frac{\lambda_g}{d_f} (2 + 1.1 \text{Re}^{0.6} \text{Pr}^{\frac{1}{3}}) = h_{sg}$$
(17)

Avec Re est le nombre de Reynolds ($\rho u \Phi d_f / \mu$) et Pr le nombre de Prandtl ($c_g \mu / \lambda_g$) [6]. 2.5.4. Conditions initiales et aux limites :

A x=0
$$T_s = 600K; T_g = 300K; y_{o_2} = 0,23$$
 et à x=L $\frac{\partial T_s}{\partial x} = 0; \frac{\partial T_g}{\partial x} = 0; \frac{\partial y_{o_2}}{\partial x} = 0$

2.6. Résolution numérique

La méthode des différences finies explicite est utilisée pour la résolution du système d'équations. Une étude de stabilité via une analyse de fourrier a été effectuée pour assurer la stabilité du schéma de discrétisation.

3. RESULTATS ET DISCUSSION

Pour la simulation du phénomène du smoldering, la face x=0 de la particule cylindrique du bois d'olivier est exposée initialement à une température de 600 K. Cette température est maintenue jusqu'à ce que l'onde du smoldering commence à se propager et ce à partir d'environ 1100 secondes. En effet, l'onde du smoldering se propage à une distance égale à 1cm de la face chauffée

(x=0) avec une vitesse d'air égale à 3 cm/s. Nous avons remarqué aussi que le phénomène se caractérise par une vitesse de propagation très faible et un temps de calcul très élevé (3600s).

La figure 2 présente la perte de masse du solide en fonction de la température. Elle décrit les différentes étapes du phénomène de smoldering suivant l'évolution de la fraction massique du solide en fonction de la température. La perte de masse totale du solide pour différentes sections de la particule est montrée dans la figure 3. On voit que pour différentes positions de la source d'ignition (x=2 cm, x=5 cm, x=6 cm), la perte de masse est très rapide, ceci peut s'expliquer par les hautes températures atteintes dans le solide suite aux dégagements de la chaleur par les réactions d'oxydation. Toutefois, le retard observé sur les courbes de perte de masse (figure 3) est dû essentiellement à la résistance thermique dans le morceau bois.



Figure 2. Perte de la masse totale du solide en fonction de la température



Figure 3. Perte de masse à travers les sections de la particule du bois au cours du temps

3.1. Influence des paramètres sur le phénomène du smoldering

3.1.1. Influence de la vitesse de soufflage d'air

A fin de déterminer l'influence de la variation de la vitesse de soufflage d'air sur le développement du phénomène de smoldering, on applique respectivement deux vitesses différentes 0,8 cm/s et 3 cm/s tout en gardant le même temps d'ignition (1100s). On remarque que pour une vitesse plus faible (0,8 cm/s), on atteint plus rapidement des températures élevées (figures 4 et 5). Ceci s'explique par le dégagement de chaleur par les réactions d'oxydation exothermiques dû à une consommation plus importante d'oxygène (figures 6 et 7). Ainsi, on peut conclure que la vitesse de propagation du front de la réaction augmente lorsque la vitesse de soufflage d'air diminue.



Figure 4. Evolution de la température du solide au cours du temps pour u=0,8cm/s



Figure 5. Evolution de la température du solide au cours du temps pour u=3cm/s

3.1.2. Influence de la fraction massique de l'oxygène dans le gaz

L'étude de la fraction massique de l'oxygène dans le gaz s'avère un facteur essentiel dans le contrôle du phénomène de smoldering. Les figures 8 et 9 montrent l'évolution de la température du solide le long de l'échantillon pour une fraction massique d' O_2 égales respectivement à 0,35 et 0,23. On remarque que pour une fraction plus élevée d'oxygène on atteint des températures plus élevées,

ceci est dû à une meilleure oxydation du solide. Ainsi la vitesse de propagation du smoldering augmente lorsqu'on augmente la fraction massique de l'oxygène.



CONCLUSION

Une modélisation mathématique de la combustion sans flamme d'une particule cylindrique de bois d'olivier est proposée. Les équations de conservation sont couplées à la cinétique réactionnelle. La résolution numérique des équations est effectuée par le code Matlab en utilisant la méthode de différences finies explicite. L'analyse des résultats numériques a montré que la vitesse de propagation du front du smoldering dans la particule est liée essentiellement à la fraction d'oxygène présente dans la zone de réaction.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] S.S Dosanjh, P.J Pagni and Fernandez-Pello, Proceedings of the 1987 ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference, 1987, pp. 165–173.
- [2] J. Buckmaster, D. Lozinski, An elementary discussion of forward smoldering, Combustion and Flame 104 (3), pp. 300-310, 1996.
- [3] D.A. Schult, B.J. Matkowsky, V.A. Volpert and A.C. Fernandez-Pello, Forced forward smolder combustion, Combustion and Flame 104 (1-2), pp. 1- 26, 1996.
- [4] T.J. Ohlemiller and D.A. Lucca, An experimental comparison of forward and reverse smolder propagation in permeable fuel beds, Combustion and Flame 54 (1-3), pp. 131-147, 1983.
- [5] J.L. Torero and A.C. Fernandez-Pello, Forward smolder of polyurethane foam in a forced air flow, Combust. Flame 106, pp. 89–109, (1996).
- [6] S.V. Leach, G. Rein, J.L. Ellzey, O.A. Ezekoye and J.L. Torero, Kinetic and fuel property effects on forward smoldering combustion, Combust. Flame 120 (3), pp. 346–358, (2000).
- [7] F. D. Costa, D. Sandberg, Mathematical Model of Smoldering log, Combustion and flame 139, pp. 227–238, (2004).