

## MODELE THERMODYNAMIQUE ET ETUDE EXEGETIQUE DU PROCEDE DE GAZEIFICATION

A. Elouafi<sup>1\*</sup>, R. Benelmir<sup>2</sup> et K. Halouani<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*École Nationale d'Ingénieurs de Gabès, Rue Omar Ibn Elkhattab Zrig Gabes 6029 Tunisie*

<sup>2</sup>*Université Henri Poincaré – LERMAB, Faculté des Sciences et Techniques  
Campus Victor Grignard BP 70239, 54506 Vandoeuvre-Les-Nancy, France*

<sup>3</sup>*METS – IPEIS, Route Menzel Chaker km 0,5 - B.P. 1172, 3018, Sfax – Tunisie  
anisp@hotmai.fr, benelmir@lermab.uhp-nancy.fr, kamel.halouani@ipeis.rnu.tn*

### RESUME

La valorisation énergétique de la biomasse et des déchets constitue un enjeu majeur pour l'avenir de notre société. Cette filière présente le plus fort potentiel énergétique pour la production de carburants. La valorisation de la biomasse par voie de gazéification thermochimique semble la plus prometteuse car elle est ouverte à un large éventail de ressources, tant agricoles que forestières, qui pourraient permettre de subvenir à une partie importante de notre actuelle consommation de carburants, d'origine pétrolière. L'étude du traitement thermique de la biomasse se focalise généralement sur le choix des essences et sur l'influence des divers paramètres opérationnels de traitement. La modélisation du procédé est nécessaire afin d'optimiser le procédé de gazéification. Dans ce travail nous proposons un modèle basé sur l'équilibre thermodynamique en se basant sur un mécanisme réactionnel de la gazéification. Ce modèle a pour vocation la description et l'optimisation énergétique des procédés de gazéification du bois. La simulation nous montre une sensibilité significative de la qualité du gaz produit et du rendement exergetique de la gazéification vis-à-vis l'humidité et la température du bois et le rapport air/bois.

Mots clés : biomasse, gazéification, modèle thermodynamique, étude exergetique, rendement.

### 1. INTRODUCTION

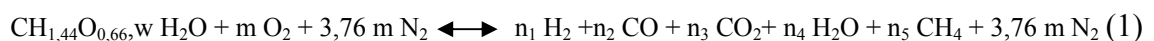
Depuis l'origine de l'humanité, la maîtrise de l'énergie est source de progrès mais aussi objet de rivalités, entraînant désordres et conflits. Mais jamais autant qu'à l'aube du XXIème siècle elle ne s'est trouvée au cœur d'événements qui décident de son avenir. La cause est connue : une 'explosion de la demande énergétique' qui tient principalement à deux facteurs : la croissance prévisible de la population et celle de l'économie dans le monde au cours des prochaines décennies. La demande énergétique mondiale est satisfaite à raison de 80 % par les énergies fossiles qui, par définition, sont épuisables et responsables de la pollution et des changements climatiques dont les conséquences pourraient être particulièrement néfastes et coûteuses. Si on veut atténuer les effets du changement climatique, on doit passer à une économie de l'énergie durable principalement basée sur des sources renouvelable et sans impact sur l'environnement. La biomasse est considérée comme la source d'énergie renouvelable ayant le potentiel (chaleur, électricité, hydrogène) le plus important puisqu'elle est considérée comme neutre vis à vis de le dégagement de CO<sub>2</sub>. La gazéification est un procédé thermochimique qui permet la transformation de la biomasse en gaz combustible non polluant. Cette technologie constitue une nouvelle étape vers l'exploitation propre et efficace

de la biomasse. La gazéification ouvre aujourd'hui la voie à des installations aux performances énergétiques et environnementales supérieures. Elle fait l'objet d'une intense recherche scientifique depuis plusieurs décennies. L'objectif de ce présent travail est le développement et la validation d'un modèle de l'équilibre thermochimique dans le gazéifieur de bois à co-courant. Ce modèle contribue à une études énergétique et exergetique du procédé de gazéification.

## 2. MODELE THERMODYNAMIQUE

D'un point de vue thermochimique, la gazéification est la transformation à haute température d'un combustible solide en gaz (syngaz) sous l'action d'un réactif oxydant qui peut être l'air, la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone ou même l'oxygène. Les réactions fondamentales de la gazéification faisant intervenir le carbone C comme réactif.

La gazéification du bois par l'air peut être représentée de façon simplifiée par l'eq. (1).



w est l'humidité du bois ; m est la quantité d'air introduite pour la gazéification du bois ;  $n_i$ ,  $i=1..5$ , sont les nombres de moles des espèces constituant le gaz produit.

### 1.1 Bilan massique

Selon la réaction globale Eq. (1) les bilans massiques des différents constituants associés aux bilans des espèces C, H et O sont donnés par :

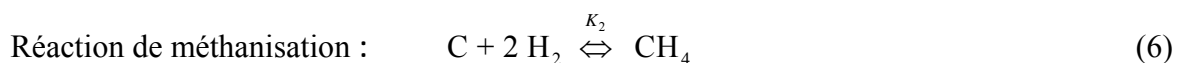
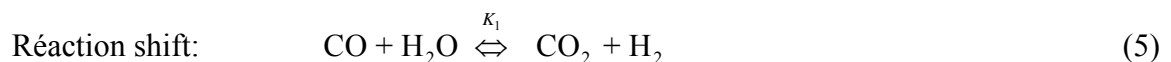
- Bilan de carbone :  $1 = n_2 + n_3 + n_5$  (2)

- Bilan de hydrogène :  $2 w + 1,44 = 2 n_1 + 2 n_4 + 4 n_5$  (3)

- Bilan d'oxygène :  $w + 0,66 + 2 m = n_2 + 2 n_3 + n_4$  (4)

### 1.2 Equilibre thermodynamique

L'algorithme de calcul de la composition du gaz produit est basé sur l'équilibre thermodynamique entre les différents constituants du syngaz ( $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ). Le modèle d'équilibre thermodynamique de processus de gazéification peut être développé par deux approches. La première est basée sur la minimisation de l'énergie libre de Gibbs (l'état d'équilibre d'un système, à une pression et une température données, est celui pour lequel son énergie libre de Gibbs est minimale [1]). La deuxième approche est basée sur les constantes d'équilibre des réactions chimiques simplifiées (élémentaires) qui se produisent dans le gazéificateur. Ces principales réactions sont :



La gazéification est réalisée dans un réacteur à haute température (700 °C à 1000°C) et basse pression (1 atm). Dans ces conditions le syngaz produit est supposé être un gaz parfait, et les constantes d'équilibre  $K_1$  et  $K_2$  sont données par:

$$K_1 = \frac{n_1 n_3}{n_2 n_4} \quad (7)$$

$$K_1 = \frac{n_s n_{tot}}{n_1^2} \quad (8)$$

Les valeurs des constantes d'équilibres en fonction de la température de réaction sont calculées en appliquant la loi d'action de masse.

$$\ln(K) = \frac{\Delta G^\circ}{-R T} \quad (9)$$

$\Delta G^\circ$  est la différence de l'énergie libre de Gibbs entre les produits et les réactifs.

$$\Delta G^\circ = \sum \mu_i G_i^\circ \quad (10)$$

$G_i^\circ$  : énergie libre de Gibbs standard du constituant i ;  $\mu_i$  : coefficient stœchiométrique du constituant i.

### 1.3 Bilan énergétique

Le bilan énergétique du gazéificateur peut être décrit par :

$$H_{\text{prod}}(T_p) = H_{\text{react}} + Q_{\text{net}} \quad (11)$$

$$H_{\text{prod}} = H_{\text{gaz}} + H_{\text{cendre}} \quad (12)$$

$H_{\text{prod}}$  : enthalpie des produits ;  $H_{\text{gaz}}$  : enthalpie de gaz de synthèse produit ;  $H_{\text{cendre}}$  : enthalpie des cendres résultant de la gazéification.

$$H_{\text{react}} = H_{\text{air}} + H_{\text{bois,sec}} + H_{\text{humidité}} + H_{\text{vapeur}} \quad (13)$$

$H_{\text{react}}$  : enthalpies des réactifs ;  $H_{\text{air}}$ ,  $H_{\text{vapeur}}$  : enthalpies de l'air et de la vapeur de gazéification respectivement ;  $H_{\text{bois,sec}}$ ,  $H_{\text{humidité}}$  : enthalpies du bois et de son humidité ;  $Q_{\text{net}}$  : chaleur échangée avec le milieu extérieur.

L'enthalpie standard du bois est calculée par [2] :

$$H_{\text{bois,sec}} = h_{\text{CO}_2}(T_0, 1\text{bar}) + 0,72 h_{\text{H}_2\text{O}(v)}(T_0, 1\text{ bar}) + \text{PCS} + \Delta h_{\text{bois}} \quad (14)$$

$$\Delta h_{\text{bois}} = \left( \frac{0,003867 (T_{\text{bois}}^2 - T_0^2)}{2} \right) + 0,1031(T_{\text{bois}} - T_0) \quad (15)$$

$$\text{PCS} = 0,3491 C + 1,1783 H + 0,1005 S - 0,1034 O - 0,0151 N - 0,0211 K \quad (16)$$

PCS : pouvoir calorifique supérieur du bois sec ; C, H, O, S et K sont les fractions massiques du carbone, hydrogène, oxygène, azote, soufre et des cendres dans le bois sec exprimées en pourcent. Le PCI du bois est estimé par [1] :

$$\text{PCI}_{\text{bois,sec}} = \text{PCS} - 9 H_u L_v \quad (17)$$

$\text{PCI}_{\text{bois,sec}}$  : pouvoir calorifique inférieur du bois sec ;  $L_v$  : chaleur latente de vaporisation de l'eau ;  $H_u$  : humidité du bois.

### 3. IMPLANTATION DU MODELE

L'algorithme de calcul du modèle est programmé avec le logiciel EES « Engineering Equation Solver ». Les données thermodynamiques sont calculées à partir de la table de JANAF (fournie par le EES) avec l'état de référence défini à 298,15 K et 1 atmosphère. La simulation nous permet de déterminer la composition du gaz produit  $n_1, n_2, n_3, n_4, n_5$ . On peut par la suite étudier l'influence des paramètres opératoires sur la qualité du syngaz (température de gazéification, rapport oxydant/combustible).

### 4. VALIDATION DU MODELE

Les résultats fournis par le modèle développé dans ce travail ont été comparés avec des résultats expérimentaux issus de la littérature. Le tableau 1 montre que les résultats du modèle sont en accord les données expérimentales de Jayah et al. [3]. On remarque une légère différence pour les fractions du  $\text{CO}_2$  et  $\text{N}_2$ . Cette différence peut être due aux hypothèses simplificatrices du modèle (conversion de la totalité du carbone présent dans le bois). Les fractions du  $\text{H}_2$  et  $\text{CO}$  sont comparables. Les résultats de ce modèle sont également en bon accord avec des modèles développés par d'autres auteurs (Zainal et al. [4] ; Melgar et al. [5]).

Tableau 1. Comparaisons des résultats du modèle.

Composition du gaz	Hu=18,5 ; R=2,03			Hu=16; R= 2,20			Hu=13,8; R=2,04		
	Résultat modèle	Résultats expérimentaux	Ecart relatif	Résultat modèle	Résultats expérimentaux	Ecart relatif	Résultat modèle	Résultats expérimentaux	Ecart relatif
CO	18,27%	17,2%	0,06	17,65%	20,2%	0,13	19,68%	22,10%	0,11
$\text{H}_2$	20,38%	17,2%	0,18	18,85%	18,3%	0,03	19,66%	12,70%	0,55
$\text{CH}_4$	1,85%	1,4%	0,32	1,58%	1,1%	0,44	1,72%	1,30%	0,32
$\text{CO}_2$	13,99%	9,9%	0,41	13,94%	9,7%	0,44	12,92%	10,50%	0,23
$\text{N}_2$	45,51%	51,9%	0,12	47,98%	50,7%	0,05	46,02%	53,40%	0,14

Hu : Humidité du bois

R : Rapport massique air/bois

### 5. RESULTAT ET DISCUSSION

Le modèle développé dans ce travail permet de décrire l'équilibre thermo-chimique de la gazéification et de calculer la composition du syngaz produit. L'implantation de l'algorithme de calcul du modèle dans le EES nous permet de simuler l'influence des conditions opératoires sur la qualité du syngaz. L'évolution des teneurs du gaz sec en  $\text{CO}, \text{H}_2, \text{CO}_2, \text{CH}_4, \text{CO}_2$  et  $\text{N}_2$  en fonction de l'humidité du bois est présentée dans la figure 1. Elle montre une augmentation de teneur en  $\text{H}_2$  et  $\text{CO}_2$  avec l'humidité du bois. En effet l'augmentation de l'humidité provoque la production du  $\text{H}_2$  et  $\text{CO}_2$  par la réaction shift (Eq.8). La décroissance de la fraction molaire de  $\text{CO}$  est due à sa réduction par l'oxygène de l'air en  $\text{CO}_2$  qui permet la production d'une quantité de chaleur nécessaire au séchage du bois. L'humidité du bois a pour effet de diminuer le PCI du syngaz. Cela s'explique par la diminution de la teneur en  $\text{CO}$ . La figure 2 présente l'évolution des fractions molaires des constituants en fonction du rapport massique air/bois (R). On remarque que la teneur en  $\text{CO}$  et en  $\text{H}_2$  décroît avec l'augmentation du rapport massique R. Cette décroissance s'explique par la réduction du  $\text{CO}$  et du  $\text{H}_2$  par l'oxygène de l'air en  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  et par conséquent l'augmentation du teneur du syngaz en  $\text{CO}_2$  comme montre la figure 2. L'augmentation de température a pour effet d'augmenter la teneur du syngaz en  $\text{H}_2$  et  $\text{CO}$  et par

conséquent le PCI du gaz produit croit considérablement. Les variations de la teneur du syngaz et du PCI avec la température sont présentées dans les figures 3 et 4, respectivement.

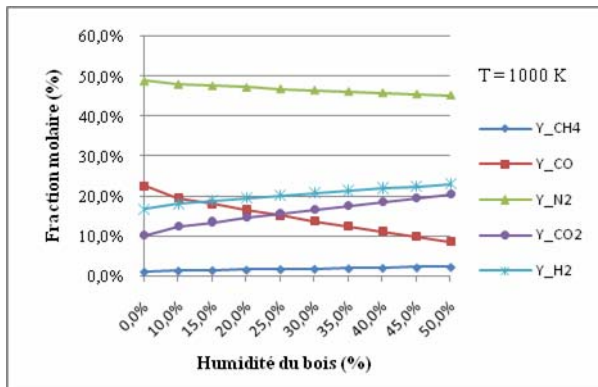


Figure 1 : Evolution des teneurs des gaz en fonction de l'humidité relative du bois

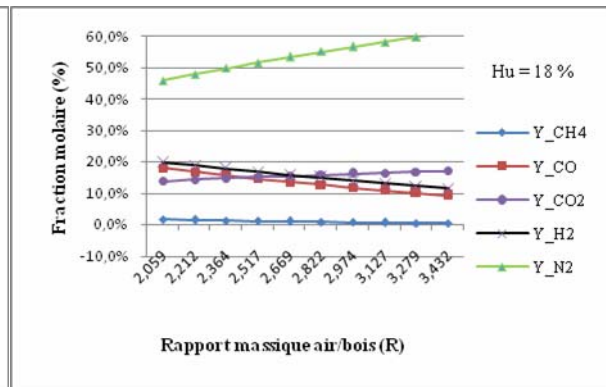


Figure 2 : Evolution des teneurs des gaz en fonction de rapport air/bois (R)

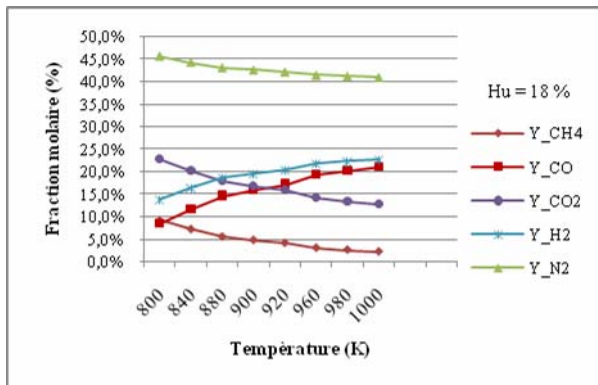


Figure 3 : Evolution des teneurs des gaz en fonction de la température de la réaction

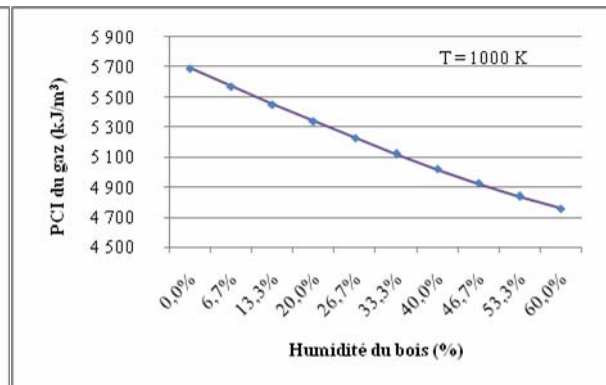


Figure 4 : Pouvoir calorifique inférieur du gaz (PCI) en fonction de l'humidité à T=1000k

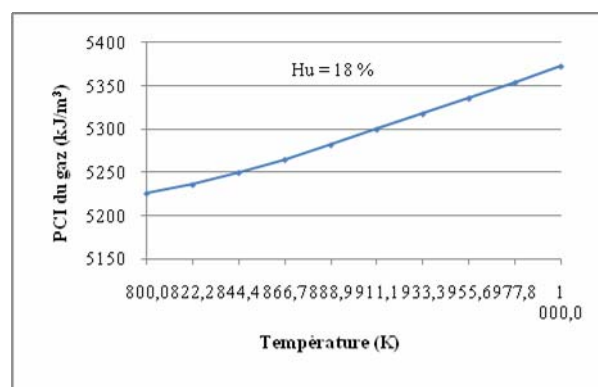


Figure 4 : Pouvoir calorifique inférieur du gaz (PCI) en fonction de la température avec Hu = 18%

## 6. ETUDE EXERGETIQUE

Le concept d'exergie a été développé dans le but de proposer une méthode d'analyse reposant sur les deux premiers principes de la thermodynamique ce concept est très utile pour quantifier la qualité de l'énergie. Contrairement à l'énergie conservative, l'exergie est une grandeur thermodynamique non conservative. L'analyse exergetique du processus de gazéification nous permet d'évaluer l'effet des paramètres opératoires sur le rendement exergetique du procédé. Le rendement exergetique est donné par [7]:

$$\eta_{ex} = \frac{\varepsilon_{ch,g} + \varepsilon_{ph,g}}{\varepsilon_{ch,bois}} \quad (18)$$

L'exergie chimique du bois est donnée par :

$$\varepsilon_{ch,bois} = W_{org} (\beta PCI_{bois,h}) + 9683 W_S + H_u \varepsilon_{ch,eau} + W_{cend} \varepsilon_{ch,cend} \quad (19)$$

$w_i$  : fraction massique du composant  $i$  ;  $\varepsilon_{ch,eau}$  : exergie chimique standard de l'eau ;  $\varepsilon_{ch,cend}$  : exergie chimique des cendres ;  $\varepsilon_{ch,g}$  : exergie chimique du syngaz.

$\beta$  : rapport de l'exergie chimique de la biomasse calculé par les corrélations données par [7]

$$\beta = \frac{1,044 + \frac{H}{C} - 0,3493 \frac{O}{C} \left[ 1 + 0,053 \frac{H}{C} \right] + 0,0493 \frac{N}{C}}{1 - 0,412 \frac{O}{C}} \quad (20)$$

Exergie chimique du syngaz :

$$\varepsilon_{ch} = \sum x_i \varepsilon_{0,i} + R T_0 \sum x_i \ln(x_i) \quad (21)$$

$x_i$  : fraction molaire du composant  $i$  ;  $\varepsilon_{0,i}$  : exergie chimique standard du composant  $i$  en kJ/mole.

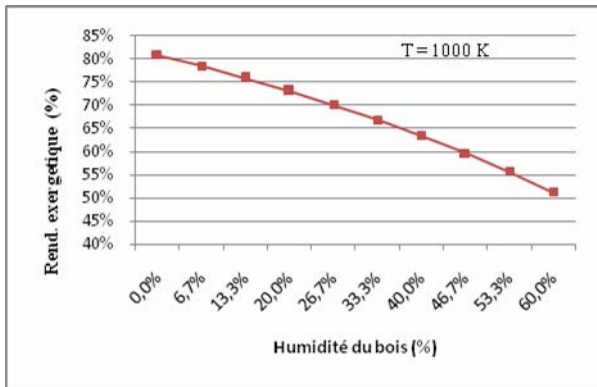


Figure 5. Le rendement énergétique et exergetique de processus de gazéification en fonction de l'humidité à T=1000 K

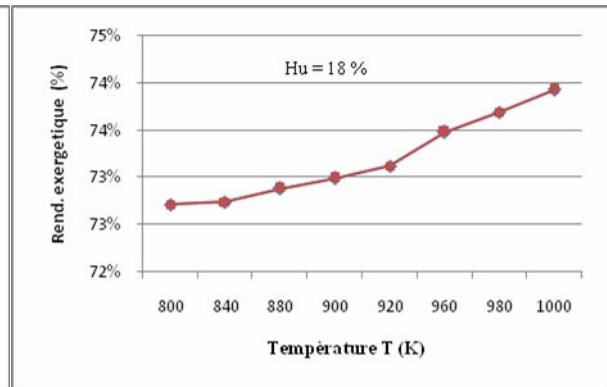


Figure 6. Le rendement énergétique et exergetique de processus de gazéification en fonction de la température avec Hu = 18%

Le rendement exergetique diminue avec l'augmentation de l'humidité (figure 5). Ceci est dû à la diminution de la teneur en CO et en H<sub>2</sub> car ces deux gaz présentent des exergies chimiques standard très importantes (275,1 kJ/mol pour le CO et 236,1 kJ/mol pour le H<sub>2</sub>).

L'augmentation de la température de réaction a pour effet d'augmenter le rendement exergetique à cause de l'augmentation de la teneur en CO et en H<sub>2</sub>.

## 7. CONCLUSION

Un modèle basé sur l'équilibre thermodynamique à été développé pour un gazéificateur à co-courant pour le calcul de la composition du syngaz produit. L'implantation de l'algorithme de calcul du modèle dans le EES nous permet de simuler l'influence de l'humidité, de la température et du rapport air/bois sur la qualité du syngaz. La simulation nous montre que l'humidité du bois à un effet très important sur le processus de gazéification et que la teneur du gaz en CO décroît considérablement avec l'augmentation de l'humidité du bois. Par conséquent le PCI du syngaz diminue. L'augmentation de la température de la réaction permet d'améliorer la qualité du syngaz. En effet la teneur en CO et en H<sub>2</sub> est très importante à haute température. La gazéification étant une combustion incomplète, le rapport air/bois à un effet très important. La simulation nous a montré que la teneur en CO et en H<sub>2</sub> décroît avec l'augmentation du rapport massique R. L'influence de ces paramètres sur la qualité du gaz produit a été confirmée par d'autre auteur (ZA. Zainal, *et al.* [4] Malgar *et al.* [5]). L'étude exergetique montre que le rendement exergetique décroît considérablement avec l'augmentation de l'humidité du bois.

## RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] S. Jarunghammachote, A. Dutta Equilibrium modeling of gasification: Gibbs free energy minimization approach and its application to spouted bed and spout-fluid bed gasifiers, *Energy Conversion and Management* 2008; 49; 1345–1356.
- [2] L. Pellegrini *et al.* Exergy analysis of sugarcane bagasse gasification. *Thermochimica Acta* 2008; 468 ; 1–5.
- [3] Jayah TH, Aye L, Fuller RJ, Stewart DF. Computer simulation of a downdraft wood gasifier for tea drying. *Biomass Bioenergy* 2003;25:459–69.
- [4] ZA. Zainal, *et al.* Lean CH, Seetharamu KN. Prediction of the performance of a downdraft gasifier using equilibrium modeling for different biomass materials. *Energy Convers Manage* 2001;42:1499–515.
- [5] Malgar, A., Pérez, J.F., Laget, H., Horillo, A.. Thermochemical equilibrium modeling of a gasifying process. *Energy Conversion and Management* , 2007;48 (1), 59–67.
- [6] K.J. Ptasiński *et al.* Exergetic evaluation of biomass gasification. *Energy* 2007; 32; 468-574.
- [7] Szargut J, Styrylska T. approximate evaluation of the exergy of fuels. *Brennst. Wärme Kraft* A964; 16 (12): 589-96.