Modélisation de la pyrolyse du lignite dans un milieu poreux à l'aide du code PATO

Application à la sécurité dans les conduits de cheminée
(Etude de l'inflammation des dépôts dans les conduits)

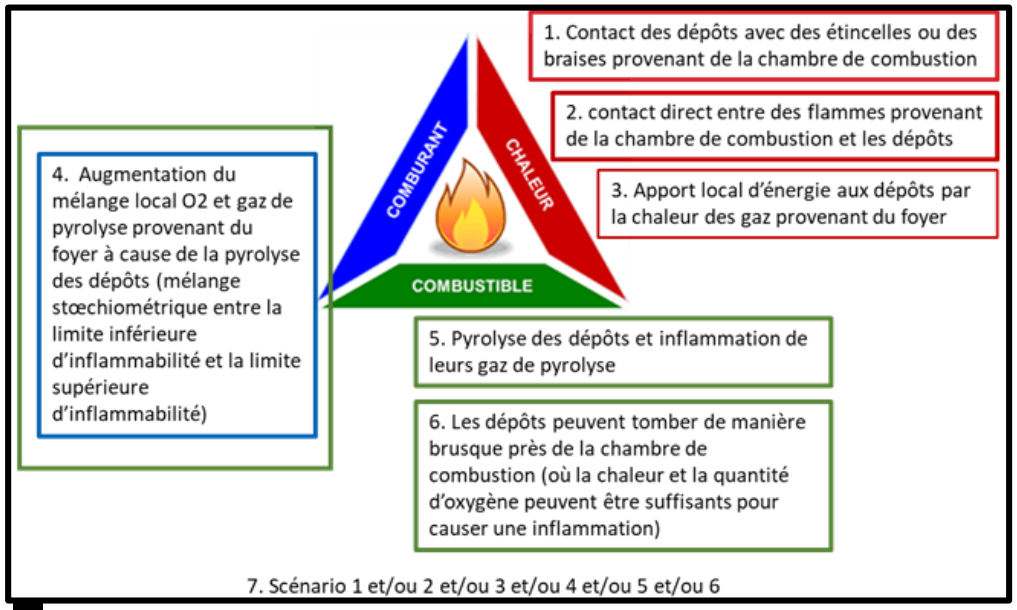
Présentée le 03/12/2020 par

Safae KELLALI (Doctorante Institut PPRIME depuis le 01/11/2019)

Encadrée par **Pr. Thomas Rogaume, Dr. Franck Richard, Dr. Pierre Cremona, Dr. Benjamin Batiot**

Feux de cheminées

Conditions d'inflammation dans le conduit de cheminée
(en présence des dépôts)



LabCom ANR OPTIFUM

Compétences et expertise du Laboratoire CERIC de Poujoulat

Compétences et expertise de l'équipe « Combustion Hétérogène et milieux poreux »

Objectifs

- Modélisation de la pyrolyse du lignite dans un milieu poreux à l'aide du code PATO (objectif scientifique)
- Sécurité des conduits de cheminée : problématique d'inflammation des dépôts dans les conduits (objectif industriel)

Choix du Lignite & validation expérimentale

Etude expérimentale sur **les vrais dépôts** de conduits de cheminée [1]

Notre étude expérimentale concerne le **Lignite**

Hétérogénéité importante (structure, porosité, composition et paramètres thermo-physiques)
entre les différents types de dépôts
(Selon leur source et leurs conditions de génération)

La comparaison a compris :

La décomposition thermique à l'échelle de la matière (ATG) et à la petite échelle (cône calorimètre). Comparaison de :

- L'inflammabilité et la combustibilité
- La nature chimique
- Les propriétés thermiques (essais ATG/DSC, essais de conductivités)
- Les analyses des gaz de combustion par spectroscopie FTIR

Conclusion :

Le lignite et les vrais dépôts se ressemblent en terme de :

- Décomposition thermique
- Inflammabilité et combustibilité
- Nature chimique
- Propriétés thermiques
- gaz de combustion

[1] Caractérisation expérimentale et numérique des scenarios de feu impliquant un conduit de fumée d'appareils de combustion bois, Doctorat de Pierre Cremona

Approche de résolution

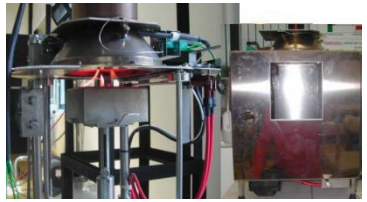
Approche multi-échelle

Complexité des phénomènes physicochimiques – tendance vers les conditions réelles

Echelle intermédiaire
Echelle réelle

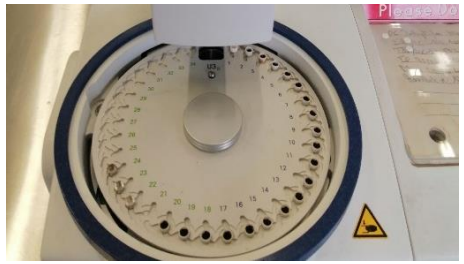
Conduit de cheminée
(1D, 2D, 3D)

Petite échelle



Cône Calorimètre (CC) et Cône Calorimètre à Atmosphère Contrôlée (CCAC)
(1 D, qlq g)

Echelle de la matière

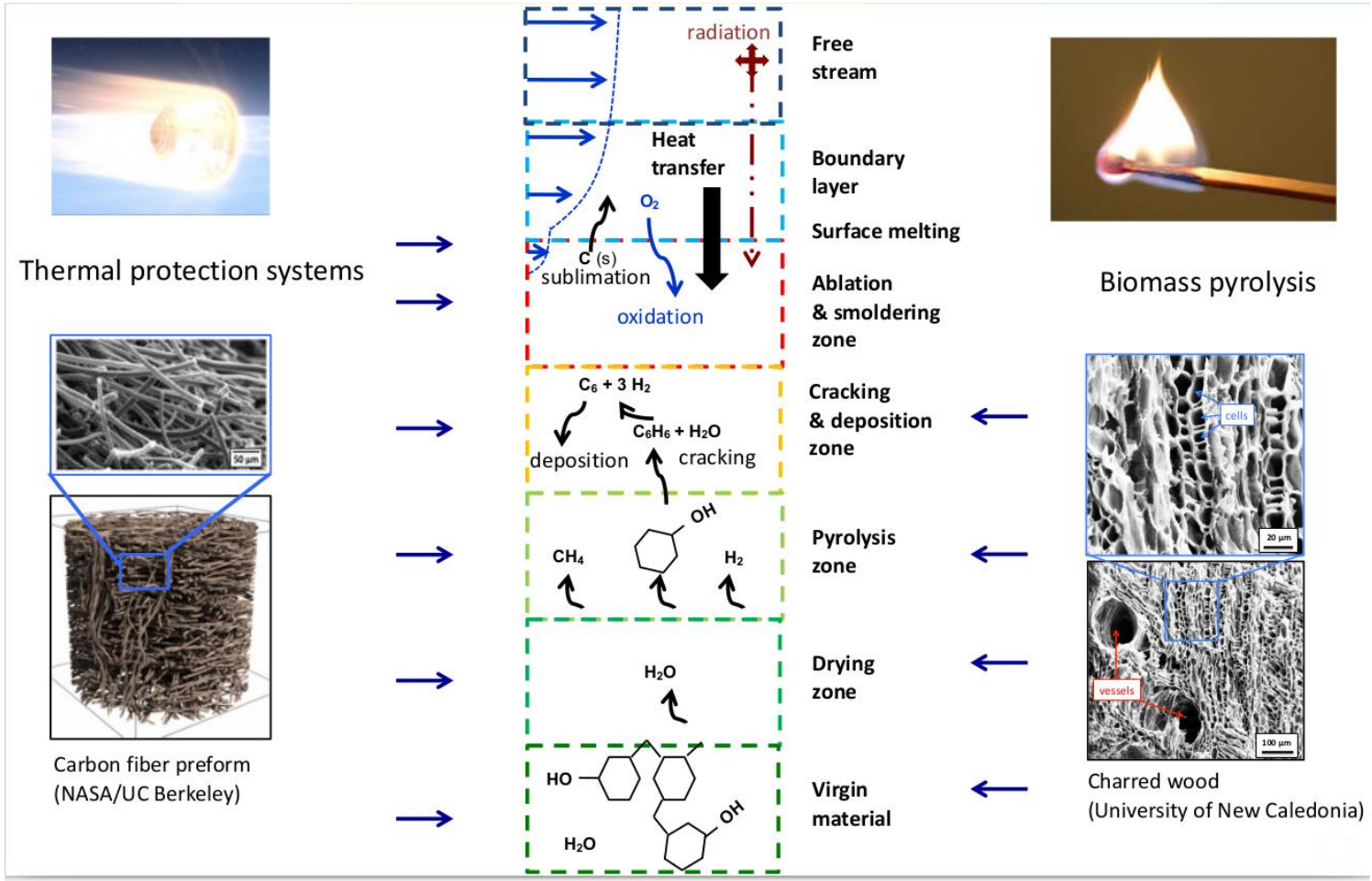


ATG/DSC (0 D, qlq mg)

PATO

PATO is distributed Open Source by NASA. POROUS MATERIAL ANALYSIS TOOLBOX BASED ON OPENFOAM

Main developers : **Dr. Jean Lachaud** (now at the University of Bordeaux), **Jérémie Meurisse** (NASA Ames).



Implémentation des nouveaux modèles de pyrolyse sous PATO

Modèle parallèle complet

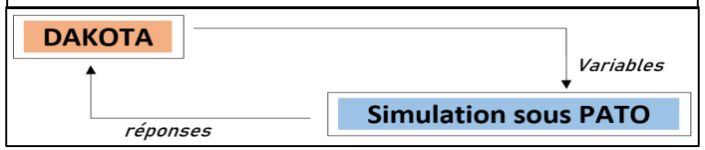
Modèle parallèle simple

Modèle compétitif

- Loi d'Arrhenius
- Ecriture des trois nouveaux modèles en langage C++
- Implémentation dans PATO

→

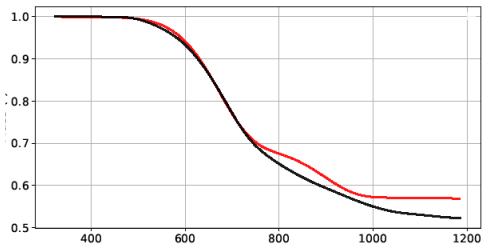
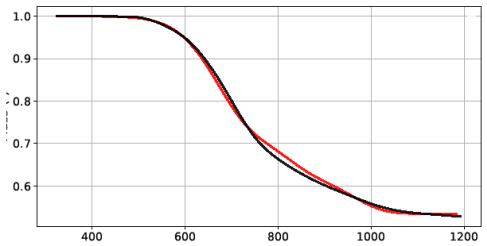
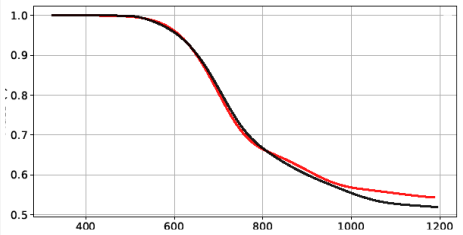
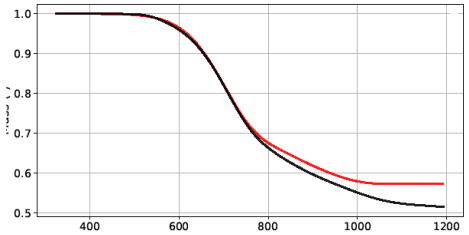
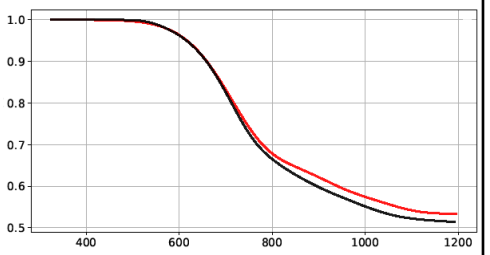
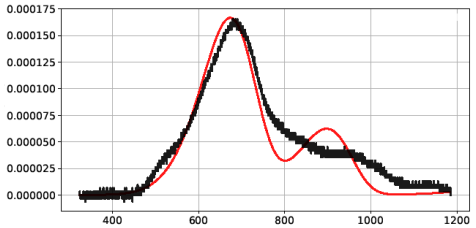
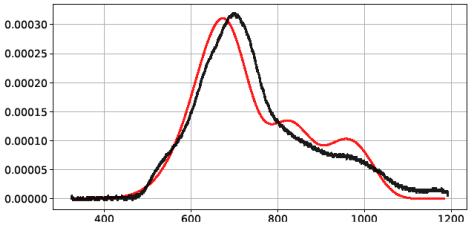
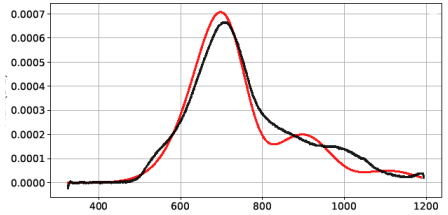
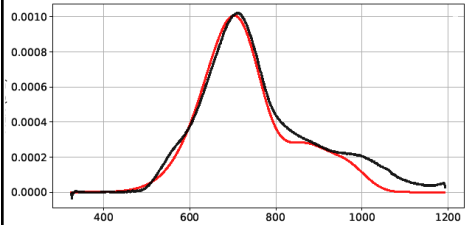
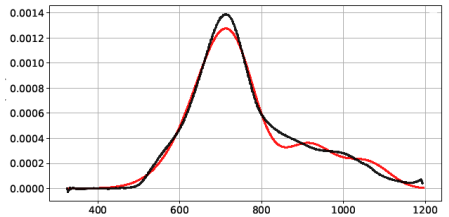
Optimisation par DAKOTA (Design Analysis Kit for Optimization and Terascale Applications)



→

- Validation des trois modèles
- Comparaison entre les trois modèles
- Avantages du modèle compétitif

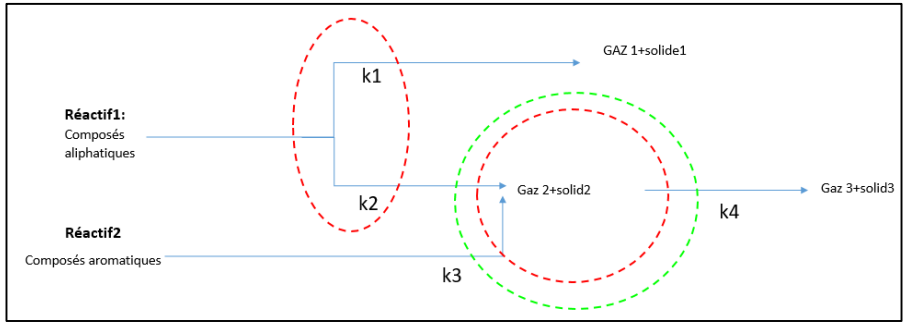
Modélisation de la pyrolyse du lignite sous N_2 (ATG, 0D) sous PATO
Optimisation avec DAKOTA (mécanisme compétitif)

5°C/min	10°C/min	20°C/min	30°C/min	40°C/min
				
				

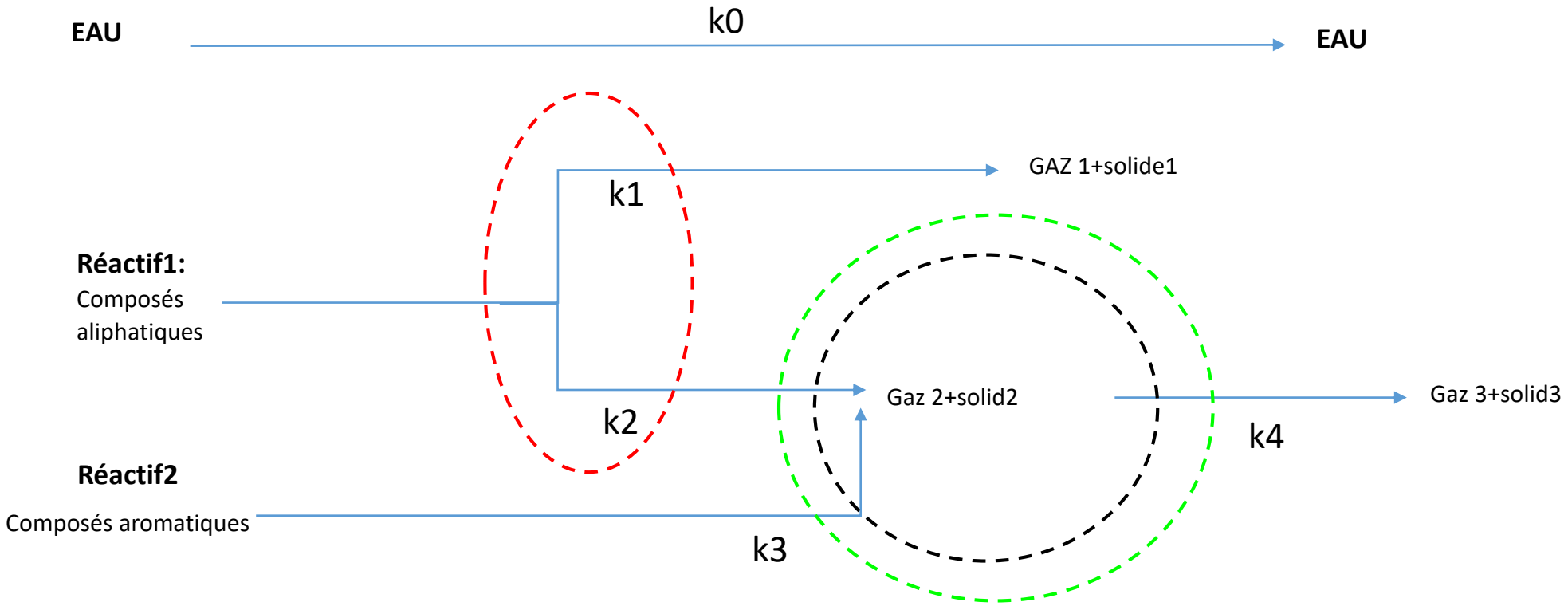
MLR (/s) et masse normalisée en fct de la T(K)

Résultat expérimental

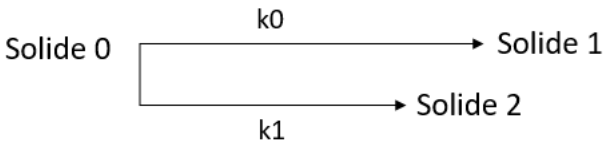
Résultat numérique



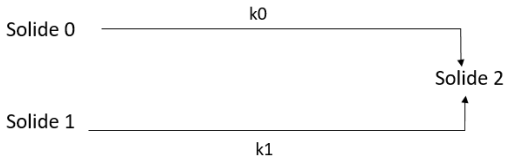
Mécanisme compétitif et ses avantages



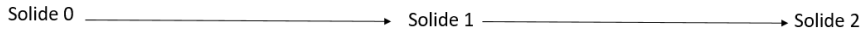
Mécanisme 1 : compétitif



Mécanisme 2 : additif

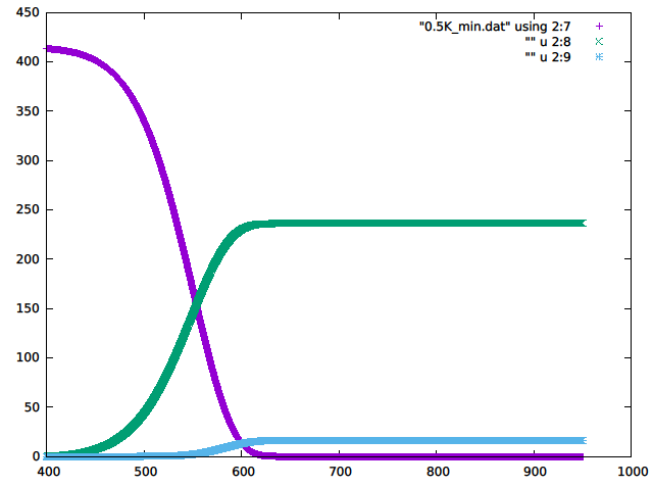


Mécanisme 3 : avec composé intermédiaire

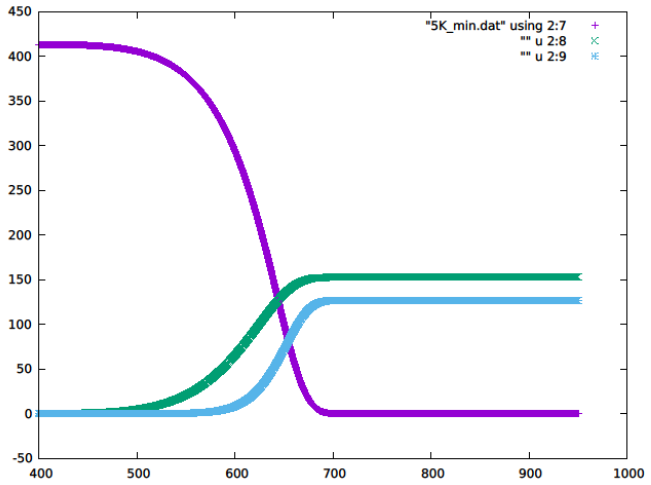


Adaptation du mécanisme 1 par rapport à la vitesse de chauffage

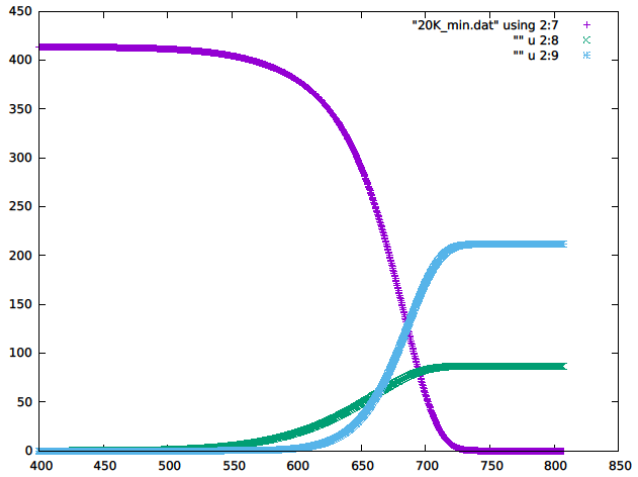
0.5 K/min



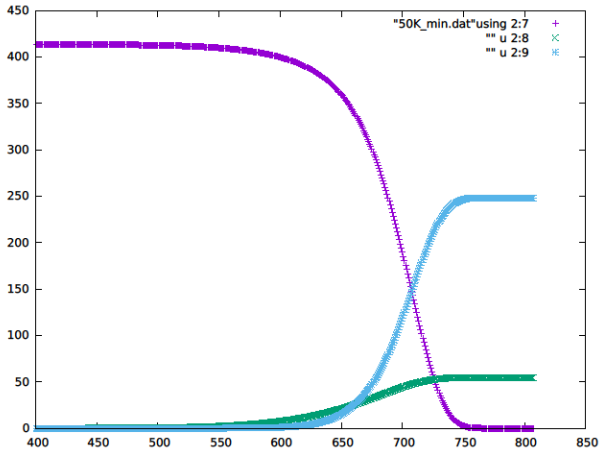
5K/min



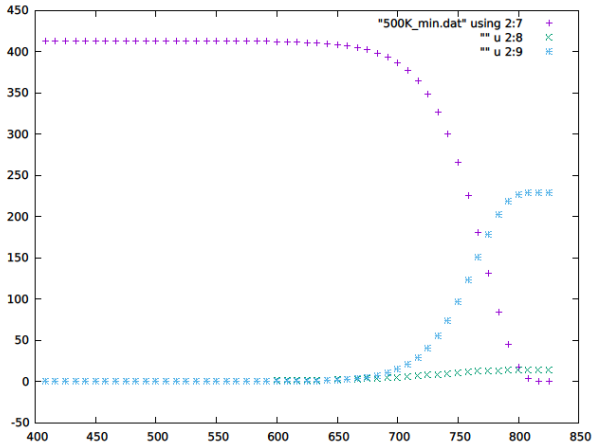
20K/min



50K/min



500k/min



Densité du solide 0

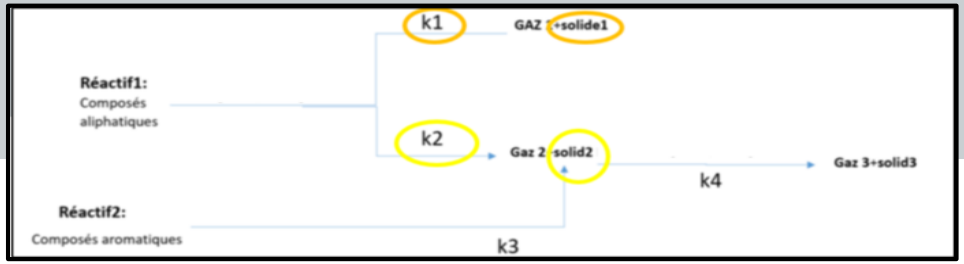
Densité du solide 1

Densité du solide 2

K0 : Réaction lente et a lieu à des faibles températures

K1 : Réaction rapide et peut s'activer qu'à des fortes températures

Adaptation du mécanisme par rapport à la vitesse de chauffage

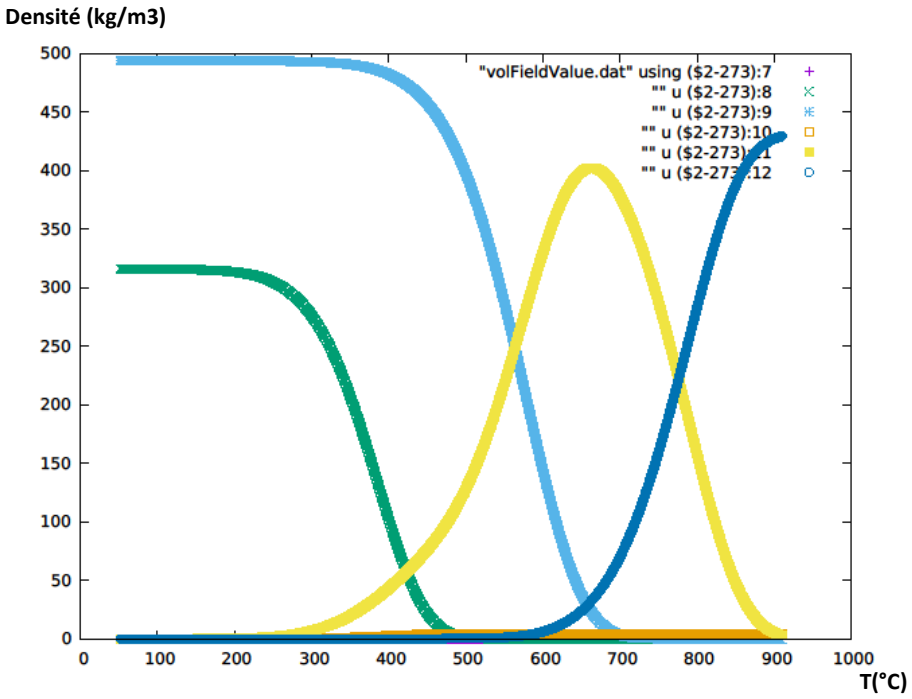


K1 (réaction lente) et a lieu à des températures supérieures
K2 (réaction rapide) et a lieu à des températures inférieures

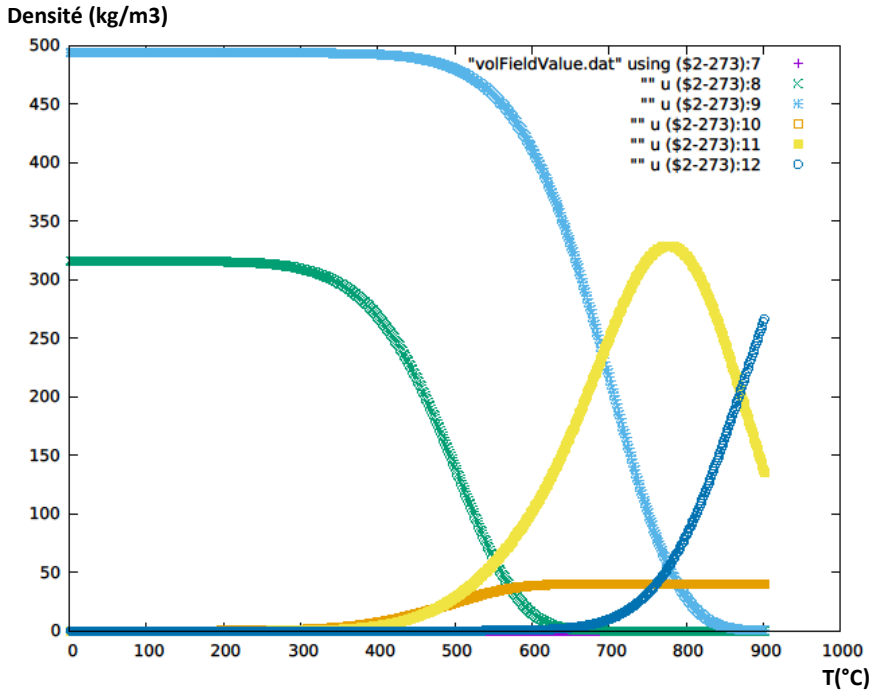
- Composés aliphatiques
- Composés aromatiques
- Composé intermédiaire
- Solide1
- Solide3

Mécanisme compétitif (lignite sec)

10°C/min



80°C/min



Détermination expérimentale des données d'entrée du modèle de pyrolyse sous N_2
Essais en ATG/DSC sous N_2

Objectif de déterminer :
- Cp du lignite et du char
- Chaleurs des réactions

Procédure utilisée (méthode Saphire) :
- Réalisation du Blanc
- Test du Saphire
- Test du Lignite
- Test du résidu du lignite

Résultats des tests saphire :

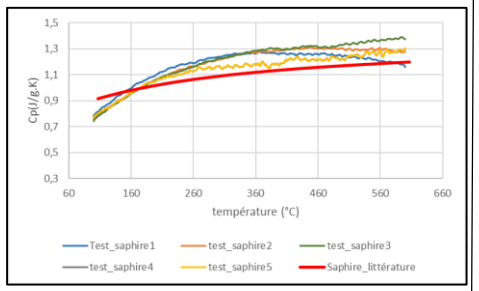


Figure 1 : Cp du saphire

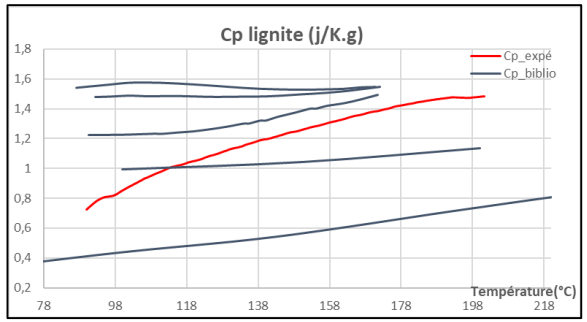


Figure 2 : Cp du lignite

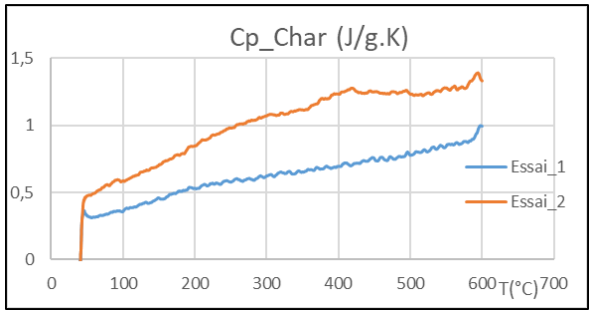


Figure 3 : Cp du char

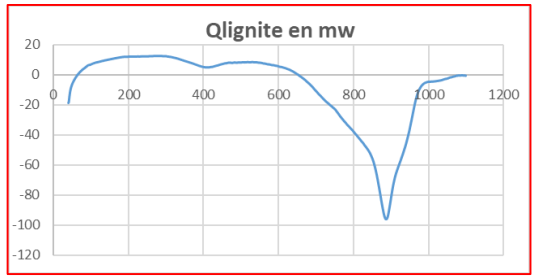


Figure 4 : chaleur dégagée

Q Lignite – Q Sensible

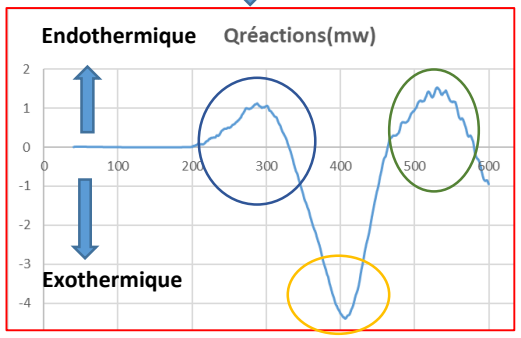


Figure 5 : chaleurs des réactions

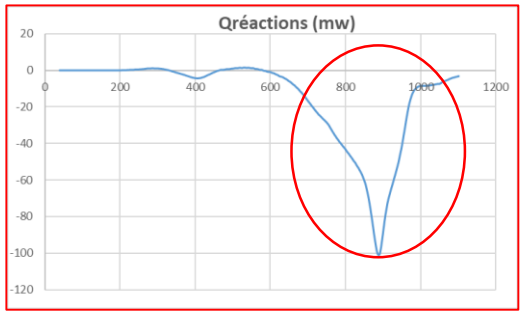


Figure 6 : chaleurs des réactions

Réaction de pyrolyse	Températures
Réaction 1	[250°C, 450°C]
Réaction 2	[300°C, 550°C]
Réaction 3	[400°C, 700°C]
Réaction 4 *Condensation du char*	[600°C, 900°C]

Figure 7 : Réactions de pyrolyse du lignite sec sous N2 (définies dans notre mécanisme)

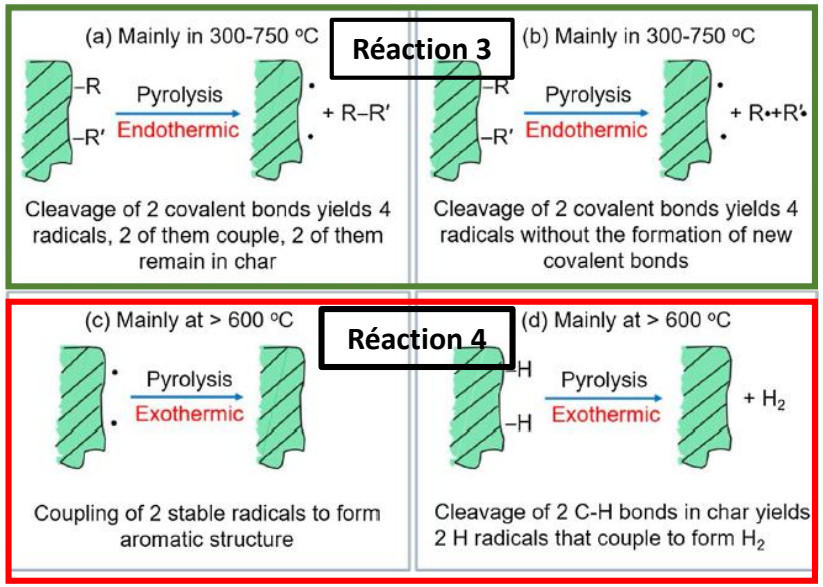


Figure 8 : Condensation du char

Source de la fig.8 : Heat effects of pyrolysis of 15 acid washed coals in a DSC/TGA-MS system Xiaojie Cheng, Lei Shi, Qingya Liu, Zhenyu Liu (22 February 2020)

Pyrolyse du lignite sous N_2 à l'échelle du cône calorimètre

Partie expérimentale

Appareil utilisé : cône calorimètre à atmosphère contrôlée

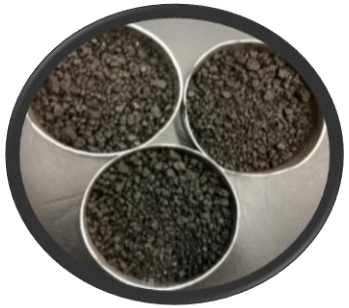
Conditions expérimentales

Mesures	Atmosphère	Puissance (kW/m^2)	Lignite
Masse	N_2	20	Poudre
			Bloc
Température		40	Vrac
Analyses des gaz (FTIR)			Taille intermédiaire

Granulométrie

Bloc

Vrac



Taille intermédiaire

Poudre fine

Porte échantillon

PE_mesure_Δm

PE_mesure_ΔT

3 mesures de T :

- TC 5mm au-dessus de la grille
- TC 2cm au-dessus de la grille
- TC 3,3cm au-dessus de la grille

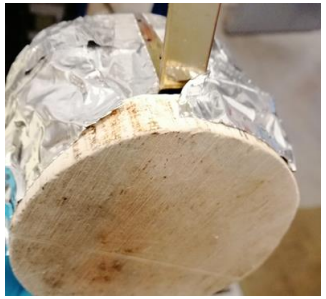
Modélisation de la pyrolyse sous PATO (cône calorimètre, 1D)

Modèles utilisés:

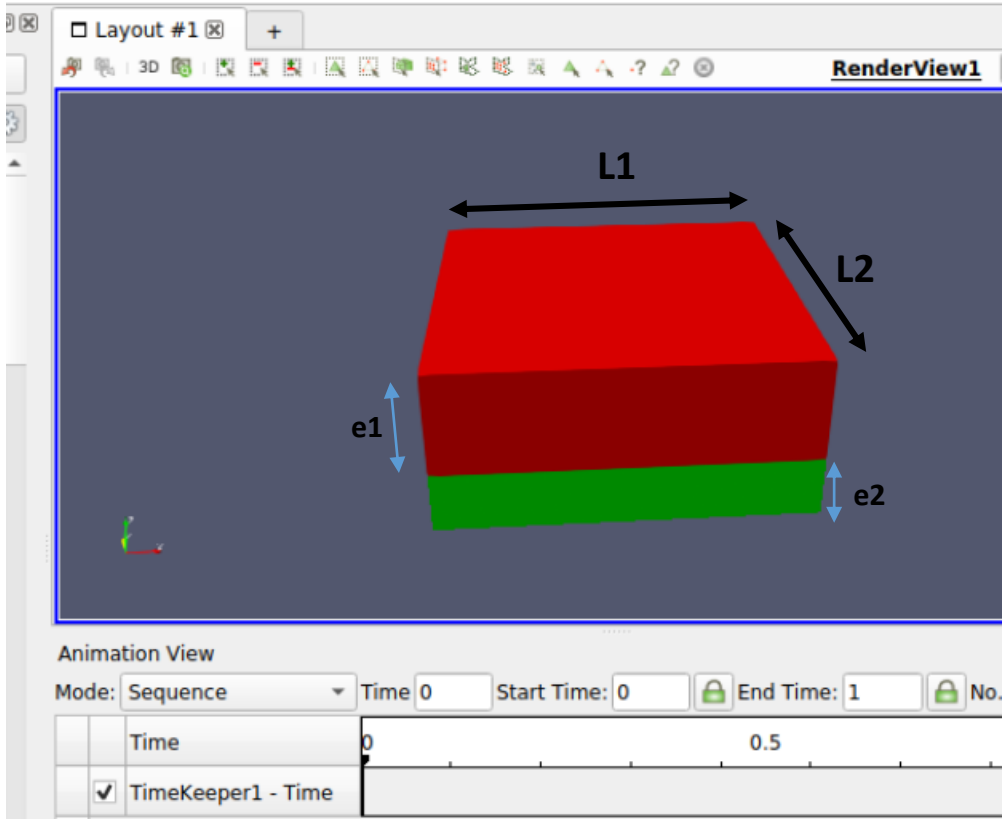
- **Modèles** nécessaires déjà existants dans PATO (de transferts, conditions aux limites…)
- **Modèle de pyrolyse :** le modèle de pyrolyse préalablement développé est implémenté sous PATO

Données d'entrée nécessaires : Cp du lignite, Cp du char, enthalpies des réactions de pyrolyse (à partir de nos essais en ATG/DSC), conductivités thermiques du lignite et du char (à partir de nos essais en TCI), conditions expérimentales initiales et conditions expérimentales aux limites

Conditions réelles



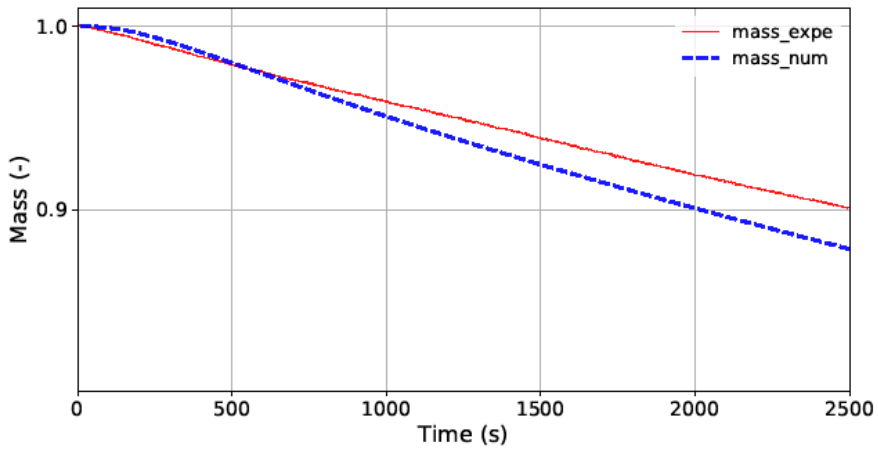
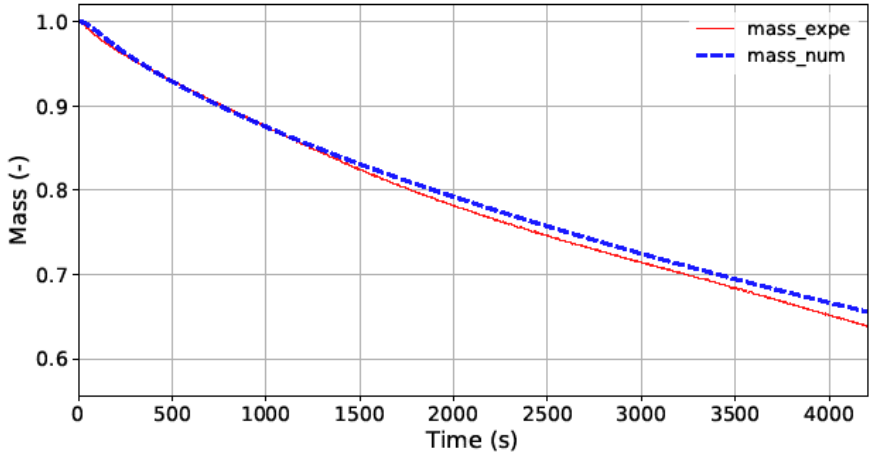
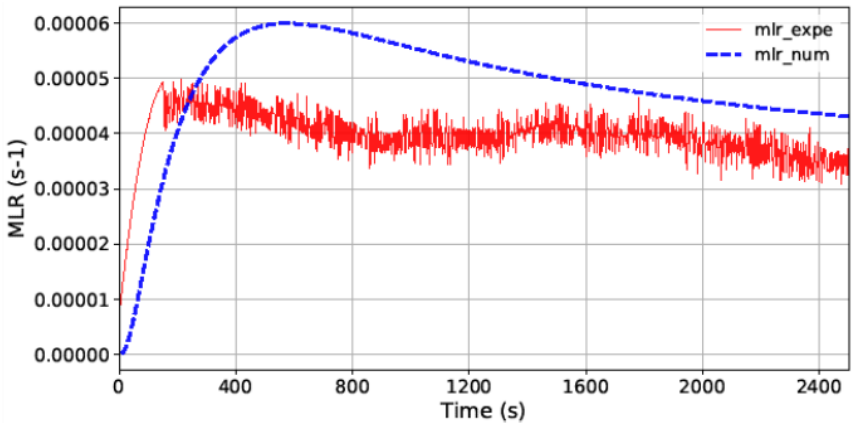
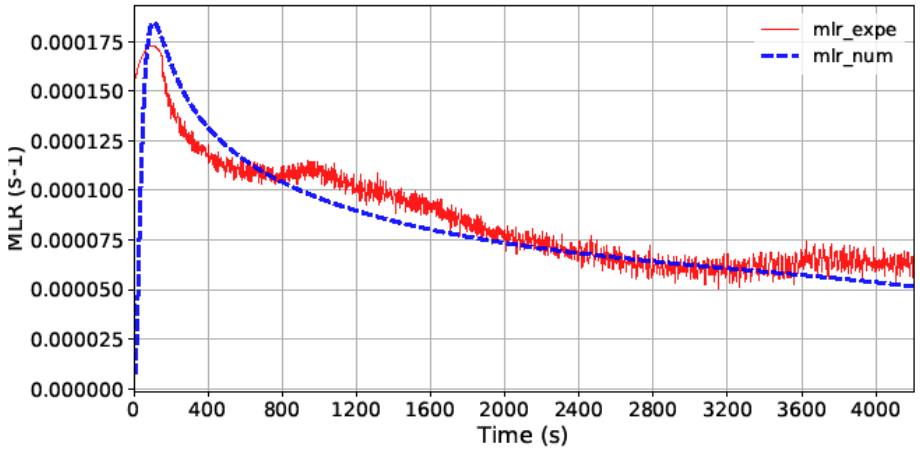
Modélisation numérique



- **En vert :** Disque en silicate
  + laine isolante (entre la grille et le silicate)
- **En rouge** : lignite
  Avec L1= L2
  L1*L2 = surface du porte échantillon
  e1 = épaisseur du lignite
  e2 = épaisseur du disque en silicate +laine

Modélisation de pyrolyse sous N_2 à l'aide de PATO (cas cône, 1D)

Simulation de la perte de la masse

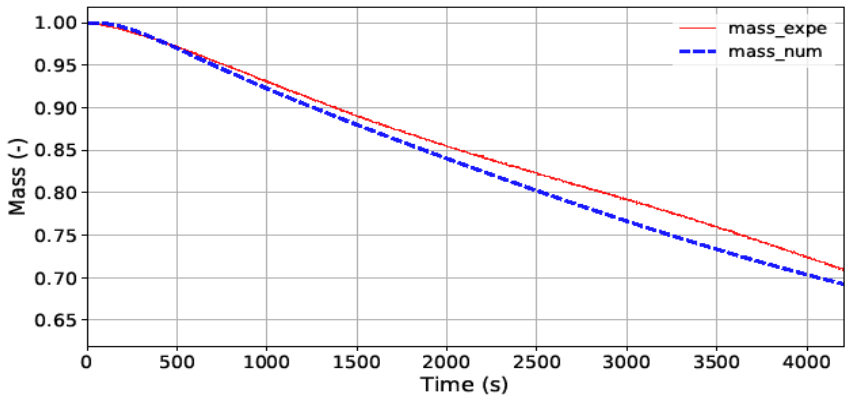
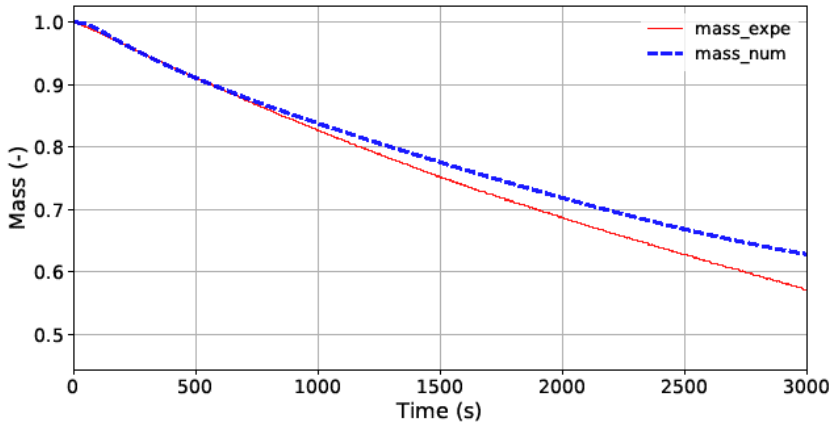
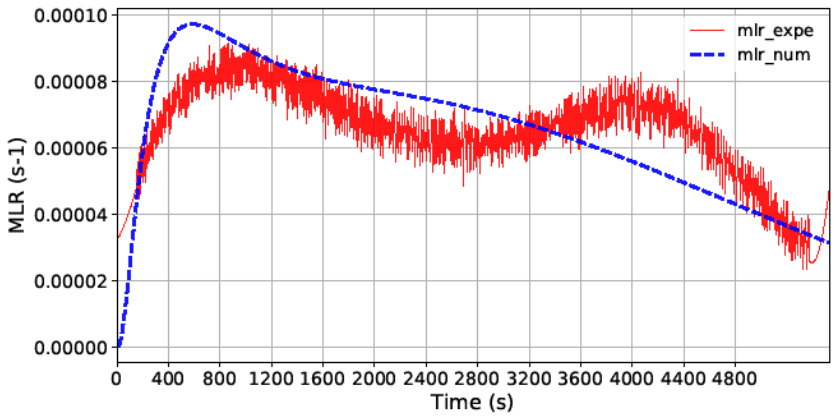
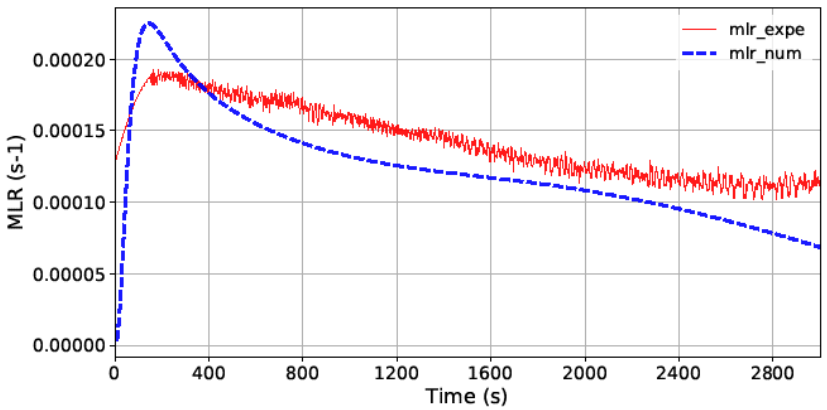
poudre_sec_20kW/m²	poudre_sec_40kW/m²
	
	

Résultat expérimental

Résultat numérique

Modélisation de pyrolyse sous N_2 à l'aide de PATO (cas cône, 1D)

Simulation de la perte de la masse

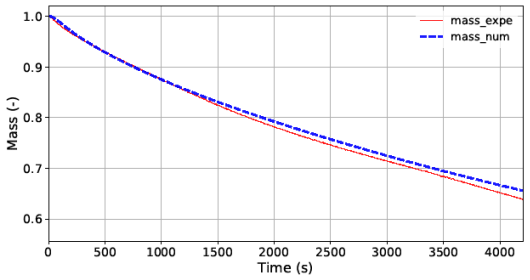
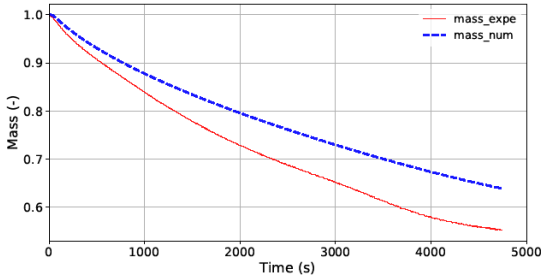
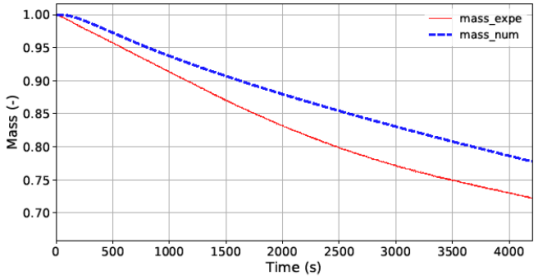
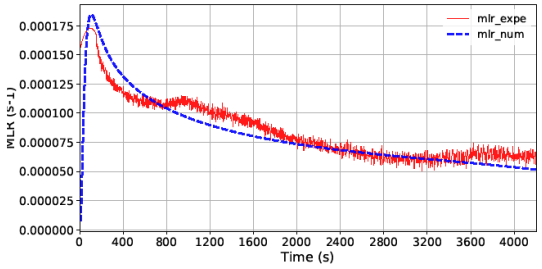
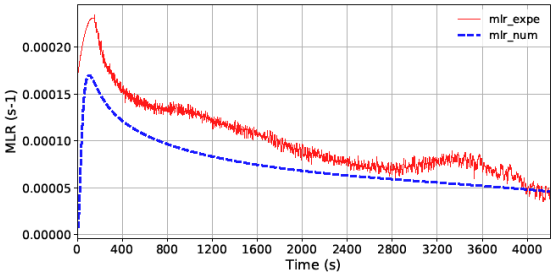
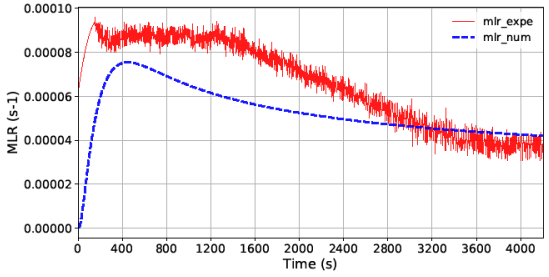
Bloc_sec_20kW/m²	Bloc_humide_40kW/m²
	
	

Résultat expérimental

Résultat numérique

Modélisation de pyrolyse sous N_2 à l'aide de PATO (cas cône,1D)

Simulation de la perte de la masse

poudre_sec_40kW/m²	Taille_intermédiaire_sec_40kW/m²	Vrac_sec_20kW/m²
		
		

Résultat expérimental

Résultat numérique

PERSPECTIVES :

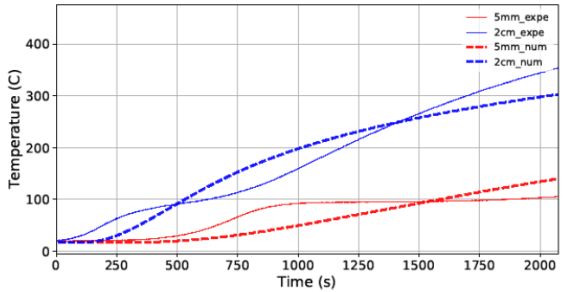
Amélioration du modèle pour tenir compte de la porosité

Modélisation de pyrolyse sous N_2 à l'aide de PATO (cas cône,1D)

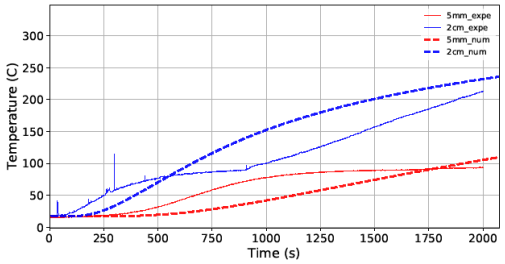
Simulation des températures

TC_5mm_et TC_2cm_en dessus_ de la grille

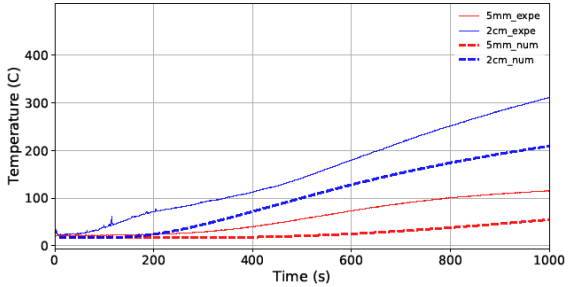
Poudre 40kW/m²



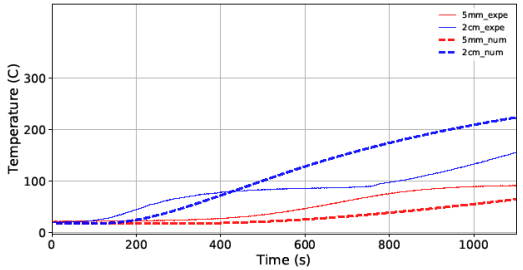
Vrac 20kW/m²



Vrac 40kW/m²

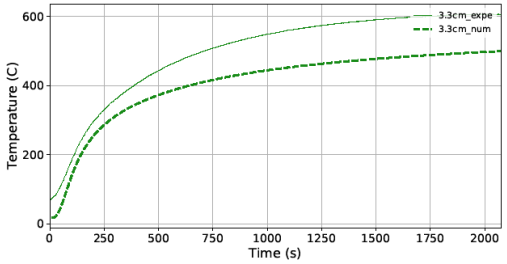


Taille intermédiaire 40kW/m²

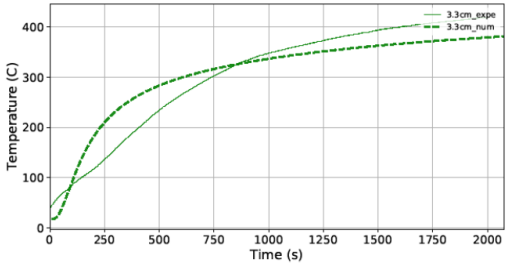


TC_3,3cm_en dessus_ de la grille

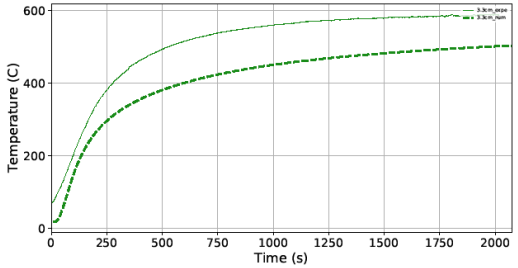
Poudre 40kW/m²



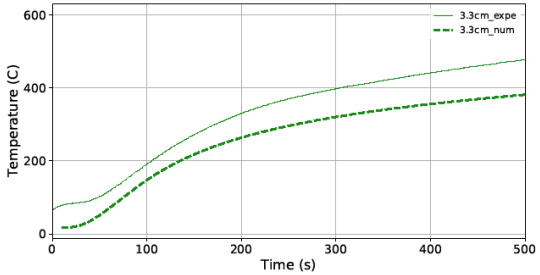
Vrac 20kW/m²



Vrac 40kW/m²



Taille intermédiaire 40kW/m²



Utilisation de Paraview

Fig.1 : Suivi du front de pyrolyse

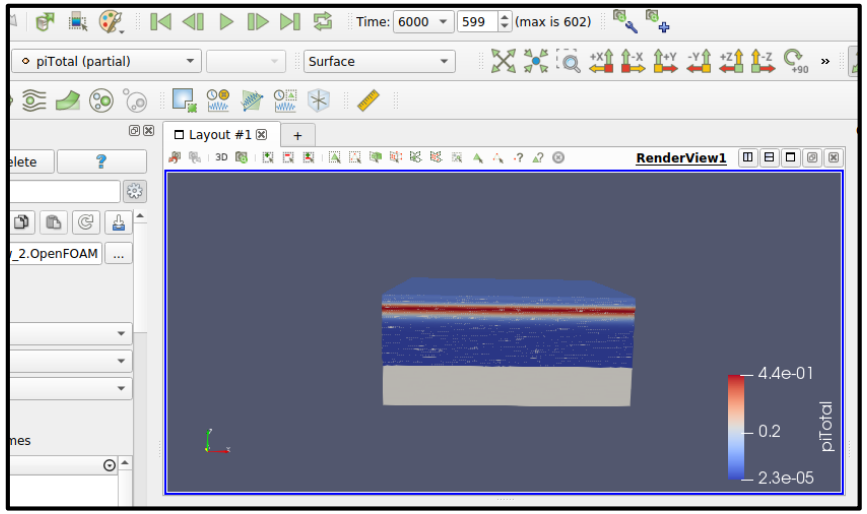
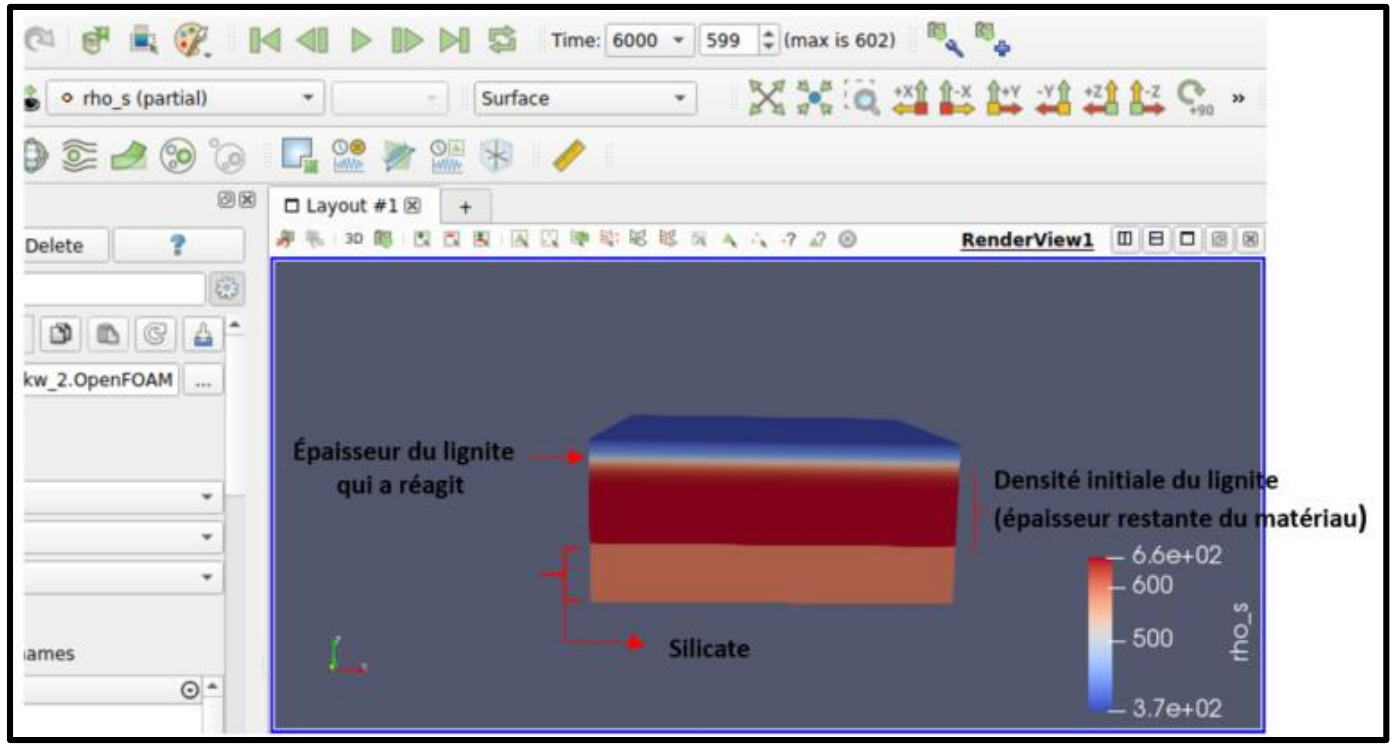


Fig.2 : Densité à l'instant final



À l'instant final, l'épaisseur restante du lignite (lignite qui n'a pas réagi) :
Prédiction du modèle ≈ Mesure expérimentale

Conclusion

- Ressemblance entre les vrais dépôts des conduits de cheminée et le lignite (validation expérimentale à l'échelle de la matière et à la petite échelle)
- Proposition de modèles de pyrolyse du lignite sous N_2 (mécanisme parallèle, mécanisme parallèle simplifié et mécanisme compétitif)
- Validation des mécanismes réactionnels (0D) et modélisation de la pyrolyse sous N_2 (0D) sous différentes vitesses de chauffage (sous MATLAB et sous PATO)
- Adaptation du mécanisme compétitif par rapport aux vitesses de chauffage et sa capacité à mieux prédire la perte de masse pour une gamme plus large de conditions de chauffage
- Détermination expérimentale des paramètres thermiques du lignite (ATG/DSC, essais de conductivité)
- Modélisation de la pyrolyse du lignite sous N_2 à l'échelle du cône calorimètre (1D) à l'aide du logiciel PATO

Perspectives

Scientifiques

- Une meilleure compréhension des phénomènes physico-chimiques mis en jeu lors de la pyrolyse du lignite (sous N_2 et sous air)

Echantillon sorti du ccac (après un test sous air, sous 20kw/m2, pendant 5000 secondes)

- Etude de l'effet de la porosité et intégration de cette dernière dans nos modèles
- …

Industriels

- Campagne expérimentale (tests à l'échelle intermédiaire et réelle) afin de répondre à la question suivante :

Quelles sont les conditions d'inflammations des dépôts dans un vrai conduit de cheminée ?

- Etude de la porosité à l'échelle intermédiaire et réelle
- …

Merci pour votre attention !

Et merci à toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de ce travail
(Equipe « Combustion Hétérogène et milieux poreux & OPTIFUM ») !!!