



**Titre:** Modélisation d'un procédé de gazéification pour le traitement des  
matières résiduelles

**Auteur:** Geneviève Groleau  
Author:

**Date:** 2019

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Groleau, G. (2019). Modélisation d'un procédé de gazéification pour le traitement  
des matières résiduelles [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal].  
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/3894/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**  
Open Access document in PolyPublie

**URL de PolyPublie:** <https://publications.polymtl.ca/3894/>  
PolyPublie URL:

**Directeurs de  
recherche:** Robert Legros  
Advisors:

**Programme:** Génie chimique  
Program:

**POLYTECHNIQUE MONTRÉAL**

affiliée à l'Université de Montréal

**Modélisation d'un procédé de gazéification pour le traitement des matières  
résiduelles**

**GENEVIÈVE GROLEAU**

Département de génie chimique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

Génie chimique

Avril 2019

# **POLYTECHNIQUE MONTRÉAL**

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

## **Modélisation d'un procédé de gazéification pour le traitement des matières résiduelles**

présenté par **Geneviève GROLEAU**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

**Olivier HENRY**, président

**Robert LEGROS**, membre et directeur de recherche

**Jason Robert TAVARES**, membre

## REMERCIEMENTS

Je souhaite remercier mon directeur, monsieur Robert Legros, de m'avoir offert l'opportunité de faire ma maîtrise au sein de la *Chaire de Recherche sur la Valorisation des Matières Résiduelles* (CRVMR). De plus, je le remercie spécialement de m'avoir donné l'occasion de participer à la conférence « *7th International Symposium on Energy from Biomass and Waste* » à Venise, en octobre 2018. Pendant ces deux dernières, monsieur Robert Legros m'a encouragé et guidé à travers les difficultés.

J'aimerais aussi remercier monsieur Laurent Spreutels, chef des opérations au sein de la CRVMR, de m'avoir grandement aidé à résoudre certaines difficultés rencontrées durant mon projet.

Enfin, je remercie mon copain Alexandre Borowczyk de m'avoir offert son support et son aide.

## RÉSUMÉ

La gazéification représente une alternative intéressante pour la valorisation des combustibles dérivés de déchets (CDD). Ce procédé de traitement convertit la matière carbonée en gaz de synthèse (syngaz), composé de CO et H<sub>2</sub>, pouvant être valorisé en électricité, en chaleur ou en molécules d'intérêts. Dans ce projet, la possibilité d'une valorisation en molécules d'intérêts du syngaz produit à partir de la gazéification de CDD est étudiée. Pour ce faire, un modèle de gazéification combinant différentes approches tirées de la revue de littérature est développé.

Ce modèle est destiné à être inséré dans l'outil d'aide à la décision en gestion des matières résiduelles (GMR) développé au sein de la *Chaire de Recherche sur la Valorisation des Matières Résiduelles* (CRVMR). Cet outil (VMR-Sys), contenant différents modèles phénoménologiques de procédés de traitements des matières résiduelles, est basé sur l'analyse des flux de matières (MFA). Dans une MFA classique, les procédés de traitements sont modélisés à l'aide de coefficients de transferts empiriques provenant d'usines existantes. Ainsi, les effets de la composition et des caractéristiques du flux entrant et des conditions opératoires ne sont pas considérés dans les modèles représentant les procédés de traitements.

Cependant, en insérant un modèle de gazéification phénoménologique au sein d'une MFA, il est possible de combiner la précision du modèle à la rigueur des inventaires de MFA. Ainsi, l'objectif de ce projet est de développer un modèle de gazéification phénoménologique s'insérant au sein d'une représentation par MFA d'un système de GMR comme outil d'aide à la décision. Ce modèle est en mesure de capturer les effets des variations de la composition élémentaire, de la teneur en humidité, de la taille des particules, du ratio ER, du type d'oxydant et de la température sur les performances de la gazéification. Ces performances sont quantifiées en termes du ratio H<sub>2</sub>/CO et du ratio H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub> du syngaz produit. Le bilan énergétique du procédé et la composition en contaminants du syngaz sont aussi pris en considération lors de l'analyse des performances.

Dans ce modèle de gazéification, seuls le C, H, O, N et S font l'objet de transformations. Le Cl, F, Al, Cd, Fe, P, Mg, Na, K, Zn, As, Ni et le Pb sont quant à eux répartis dans les résidus solides et dans les gaz selon des coefficients de transferts provenant de la littérature. Alimenté par VMR-Sys, le modèle de gazéification reçoit des débits massiques de différentes fractions de CDD provenant d'un processus en amont. Au sein de VMR-Sys, ces fractions (biens) sont aussi

exprimées en termes de compositions élémentaires (C, H, O, N, S). Afin que le modèle soit compatible avec la MFA, les biens sont transformés en flux de matières volatiles, de carbone fixe, de cendres et d'eau. Après le traitement par gazéification, les courants de syngaz et de résidus sont réinsérés dans VMR-Sys afin d'alimenter l'inventaire d'analyse de cycle de vie (ACV) de VMR-Imp (autre module de la CRVMR).

Ayant lieu dans un lit fixe co-courants, le procédé de gazéification est modélisé en quatre étapes distinctes : séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction. Une combinaison de plusieurs modèles est utilisée pour représenter ces différentes étapes. Puisque les vitesses de réaction de l'étape de réduction sont considérablement plus lentes que les vitesses de réaction des autres étapes, il est possible de poser l'hypothèse que les étapes de séchage, de pyrolyse et d'oxydation sont instantanées. L'étape de séchage est modélisée par une évaporation complète et instantanée de l'eau contenue initialement dans les CDD. Quant à l'étape de pyrolyse, la quantité de char (résidu solide,  $C_{(s)}$ ) est prédite selon la teneur initiale en carbone fixe des CDD. Trois ratios expérimentaux dépendant de la température ( $CO/CO_2$ ,  $H_2O/CO_2$  et  $CH_4/CO_2$ ) sont utilisés pour prédire les quantités de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O_{(v)}$ , tar ( $C_6H_{6.2}O_{0.2}$ ), char, cendres,  $NH_3$  et  $H_2S$  produits lors de cette étape. Ensuite, ces gaz sont oxydés à l'étape d'oxydation, caractérisée par une alimentation restreinte en oxygène. Afin de prendre en considération les différentes vitesses d'oxydation des réactions impliquées dans cette étape, une approche heuristique est utilisée. Ainsi, les produits de la pyrolyse réagissent avec l'oxygène disponible selon une hiérarchie basée sur un ordre décroissant des vitesses de réaction. Finalement, les gaz d'oxydation et le char sont réduits à l'étape de réduction, modélisée par des cinétiques de réactions, où les flux molaires de chacune des substances impliquées dans ces réactions dépendent de la hauteur de la zone de réduction.

Ce modèle simple et flexible permet de reproduire la tendance générale des résultats expérimentaux présentés dans la littérature. Cependant, les quantités de  $H_2$  sont approximées à la hausse et les quantités de  $CO$  sont approximées à la baisse. Ainsi, le ratio  $H_2/CO$  est légèrement surestimé alors que le ratio  $H_2/CO/CO_2$  est légèrement sous-estimé. Malgré tout, ce modèle consiste en une bonne première approximation d'une unité de gazéification. Dans ce projet, il est démontré qu'un syngaz de ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$  répondant aux exigences établies pour la valorisation moléculaire peut être produit à partir de la gazéification de CDD. Par contre, afin d'affiner ces résultats, des travaux supplémentaires sur ce modèle devraient être faits au sein de la CRVMR.

## ABSTRACT

Gasification appears to be well suited to convert refuse derived fuel (RDF). This thermal treatment converts carbonaceous material into syngas, which is composed of CO and H<sub>2</sub>. This syngas can be used to produce electricity, heat or platform molecules. In this project, the possibility of valorized the syngas into platform molecules is studied. To do so, a gasification model combining different approaches from the literature review is developed.

The present work aims at developing a comprehensive gasification model, to be integrated into the decision-making tool develop within The *Chaire de Recherche sur la Valorisation des Matières Résiduelles* (CRVMR, Research Chair on Advanced Waste Recovery). VMR-Sys, one of the tools' module, contains different phenomenological models of waste treatment processes. This module is based on a Material Flow Analysis (MFA) framework. In traditional MFA, treatment processes are modelled using empirical transfer coefficients from existing plants. Thus, the effects of the composition and the characteristics of the inputs and the operating conditions are not taken into account in these models.

However, by inserting a phenomenological gasification model into an MFA, it becomes possible to combine the accuracy of the model with the robustness of the MFA inventories. Thus, the objective of this project is to develop a phenomenological gasification model design to be integrated into an MFA representation of a Waste Management System (WMS) as a decision-making tool. This model is able to capture the effects of variations of elementary composition, moisture content, particle size, ER ratio, oxidant type, and temperature on the gasification performances. These performances are quantified in terms H<sub>2</sub>/CO and H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub> ratios of the syngas produced. Energy balance and contaminant composition of the syngas are also taken into account in the performance's analysis.

In this gasification model, only C, H, O, N and S are transformed. Elements such as Cl, F, Al, Cd, Fe, P, Mg, Na, K, Zn, As, Ni and Pb are distributed in the solid residues and in the gases, according to literature's transfer coefficients. The gasification model receives mass flows of different fractions of RDF from an upstream process through VMR-Sys. Within VMR-Sys, these fractions (goods) are also expressed in terms of elemental compositions (C, H, O, N, S, ash and water). In order for the model to be compatible with the MFA framework, flows of goods are transformed into flows of volatile matter, fixed carbon, ash and water. After the gasification treatment, syngas

and residue streams are reinserted into the VMR-Sys in order to feed the VMR-Imp module, based on Life Cycle Assessment (LCA) inventory (another module of the CRVMR).

Occurring in a downdraft reactor, the gasification process is modelled into four distinct stages: drying, pyrolysis, oxidation and reduction. A combination of several models is used to represent these different steps. Since the reduction's reaction rates are considerably slower than the reaction rates of the other steps, it is possible to assume that the drying, pyrolysis and oxidation steps are instantaneous. The drying step is modelled as a complete and instantaneous evaporation of the water initially contained in the RDF. As for the pyrolysis step, the amount of char (solid residue,  $C_{(s)}$ ) is predicted according to the amount of fixed carbon initially contains in the RDF. Three temperature-dependent experimental ratios ( $CO/CO_2$ ,  $H_2O/CO_2$  and  $CH_4/CO_2$ ) are used to predict the amounts of  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O_{(v)}$ , tar ( $C_6H_{6.2}O_{0.2}$ ), char, ash,  $NH_3$  and  $H_2S$  produced during this step. Then, these gases are oxidized in the oxidation step, characterized by a restricted supply of oxygen. In order to take into account the different oxidation rates of the reactions involve in this step, a heuristic approach is used. Thus, pyrolysis products are allowed to react with the available oxygen in a decreasing order of reaction rates. Finally, the oxidation gases and the char are reduced in the reduction step, modelled with kinetics. In this step, molar flows are functions of the height of the reduction zone.

This simple and flexible model is able to reproduce the general trend of the experimental results from the literature. However, the amounts of  $H_2$  are approximated upwards and the amounts of  $CO$  are approximated downward. Thus, the  $H_2/CO$  ratio is slightly overestimated while the  $H_2/CO/CO_2$  ratio is slightly underestimated. Nevertheless, this model consists of a good first approximation of a gasification unit. In this project, it is shown that it is possible to produce syngas from RDF characterized by  $H_2/CO$  and  $H_2/CO/CO_2$  ratios meeting the requirements established for molecular valorization. However, in order to refine these results, additional work on this model should be done within the CRVMR.



## TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS .....	III
ABSTRACT .....	VI
TABLE DES MATIÈRES .....	VIII
LISTE DES TABLEAUX.....	X
LISTE DES FIGURES.....	XII
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS .....	XV
LISTE DES ANNEXES.....	XIX
CHAPITRE 1 INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE.....	4
2.1 Caractérisation des combustibles dérivés de déchets (CDD).....	4
2.2 La MFA en gestion des matières résiduelles.....	5
2.3 La gazéification pour la valorisation moléculaire des matières résiduelles .....	8
2.3.1 Étapes de la gazéification.....	8
2.3.2 Voies de valorisation du syngaz.....	9
2.3.3 Effets des conditions d'opérations .....	14
2.3.4 Effets de la composition et des propriétés physiques de l'alimentation .....	15
2.3.5 Types de gazogènes.....	18
2.3.6 Modèles de gazéification.....	26
CHAPITRE 3 OBJECTIFS ET MÉTHODOLOGIE.....	51
3.1 Objectif principal.....	51
3.2 Objectifs secondaires.....	51
3.3 Méthodologie .....	51
3.3.1 Sous-objectif #1.....	51
3.3.2 Sous-objectif #2.....	52
3.3.3 Sous-objectif #3.....	52
3.3.4 Sous-objectif #4.....	52
CHAPITRE 4 DÉVELOPPEMENT ET VALIDATION DU MODÈLE .....	54
4.1 Définition du système à l'étude.....	54

4.2	Données utilisées.....	55
4.3	Description du modèle .....	55
4.3.1	Type de gazogène sélectionné.....	55
4.3.2	Type de modèle sélectionné .....	56
4.3.3	Configuration générale du modèle .....	59
4.3.4	Intégration du modèle dans la MFA.....	60
4.3.5	Hypothèses générales .....	60
4.3.6	Description du sous-modèle de séchage.....	61
4.3.7	Description du sous-modèle de pyrolyse .....	67
4.3.8	Description du sous-modèle d'oxydation.....	72
4.3.9	Description du sous-modèle de réduction .....	77
CHAPITRE 5	VALIDATION DU MODÈLE.....	82
CHAPITRE 6	RÉSULTATS ET DISCUSSION.....	84
6.1	Effets de la variation de la composition élémentaire et des propriétés physiques .....	84
6.1.1	Composition élémentaire.....	84
6.1.2	Teneur en humidité.....	98
6.1.3	Tailles des particules .....	101
6.1.4	Autres paramètres chimiques et physiques .....	103
6.2	Effets des conditions d'opérations .....	104
6.2.1	Ratio ER .....	104
6.2.2	Type d'oxydant .....	107
6.2.3	Températures des zones de pyrolyse et d'oxydation.....	111
6.3	Discussion .....	113
CHAPITRE 7	CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS .....	115
BIBLIOGRAPHIE	.....	117

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2-1 Exigences du syngaz destiné à la synthèse FT, du méthanol, d'alcools mixtes et à un procédé de fermentation (NNFCC & E4tech, 2009).....	14
Tableau 2-2 Résumé des avantages et inconvénients des différents types de réacteurs de gazéification .....	25
Tableau 2-3 Vitesses de réaction ( $\text{kmol/m}^3\text{s}$ ) des différentes réactions impliquées dans la gazéification globale (Tinaut et al., 2008).....	37
Tableau 2-4 Valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels des coefficients de vitesse $k_j$ des différentes réactions impliquées dans la gazéification globale (Tinaut et al., 2008).....	37
Tableau 2-5 Modèles cinétiques de pyrolyse utilisés dans la modélisation du procédé de gazéification .....	40
Tableau 2-6 Vitesses de réaction du sous-modèle d'oxydation (Sharma, 2011) .....	43
Tableau 2-7 Valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels des coefficients de vitesse $k_j$ pour le sous-modèle d'oxydation (Sharma, 2011).....	44
Tableau 2-8 Vitesses de réaction du sous-modèle de réduction (Sharma, 2011).....	44
Tableau 2-9 Valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré exponentiels des coefficients de vitesse $k_j$ pour le sous-modèle de réduction (Sharma, 2011) .....	45
Tableau 2-10 Effets capturés par les différents modèles de gazéification présentés dans la revue de littérature .....	49
Tableau 2-11 Résumé des principales caractéristiques des modèles provenant de la revue de littérature .....	50
Tableau 4-1 Représentation de la matière .....	54
Tableau 4-2 Chaleurs spécifiques ( $\text{J/kg.K}$ ) de différents biens (Faitli, Magyar, Erdélyi & Muranyi, 2015).....	66
Tableau 5-1 Caractéristiques des flux entrants et conditions opératoires des données expérimentales .....	82
Tableau 6-1 Paramètres utilisés pour les différentes simulations du modèle .....	84
Tableau 6-2 Compositions massiques des flux de 20 kg/h .....	85

Tableau 6-3 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD, papiers/cartons, plastiques, organiques et textiles/caoutchoucs (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air).....	97
Tableau 6-4 Éléments traces des syngaz produits à partir de la gazéification des CDD, papiers/cartons, plastiques, organiques et textiles/caoutchoucs (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air).....	97
Tableau 6-5 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD, des papiers/cartons, des plastiques, des organiques et des textiles/caoutchoucs (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air).....	98
Tableau 6-6 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 0%, 5%, 10%, 15% et 20%, (ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air) ....	100
Tableau 6-7 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 0%, 5%, 10%, 15%, 20% (ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air).....	101
Tableau 6-8 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD d'une taille de particule de 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 et 0.1 mètre (humidité 10%, ER=0.5, oxydant=air) .....	103
Tableau 6-9 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD d'une taille de particule de 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 et 0.1 mètre (humidité 10%, ER=0.5, oxydant=air) .....	103
Tableau 6-10 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 10% pour des ratios ER de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 (humidité 10%, Dp=0.06 m, oxydant=air).....	107
Tableau 6-11 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 10% pour des ratios ER de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 (humidité 10%, Dp=0.06 m, oxydant=air) .....	107
Tableau 6-12 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD pour une alimentation d'air (21% O <sub>2</sub> , 79% N <sub>2</sub> ), d'air enrichi à 35% de O <sub>2</sub> , d'air enrichi à 50% de O <sub>2</sub> , d'oxygène pur et de vapeur d'eau (humidité 10%, Dp=0.06 m, ER=0.5) .....	110
Tableau 6-13 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD pour une alimentation d'air (21% O <sub>2</sub> , 79% N <sub>2</sub> ), d'air enrichi à 35% de O <sub>2</sub> , d'air enrichi à 50% de O <sub>2</sub> , d'oxygène pur et de vapeur d'eau (humidité 10%, Dp=0.06 m, ER=0.5) .....	110

## LISTE DES FIGURES

Figure 1-1 Outil d'aide à la décision de CRVMR.....	3
Figure 2-1 Représentation des analyses ultime et proximale ainsi que de la composition du char, des volatiles et des différentes manières de représenter la composition des CDD (Basu, 2013) .....	5
Figure 2-2 Systèmes MFA en termes de biens et en termes de substances .....	6
Figure 2-3 Configurations de lits fixes A) lit fixe à co-courants B) lit fixe à contre-courants (Basu, 2010a).....	19
Figure 2-4 Configurations de lits fluidisés A) lit fluidisé à bulles B) lit fluidisé circulant (Basu, 2010b).....	22
Figure 2-5 Configuration d'un lit entraîné (Basu, 2010b) .....	24
Figure 2-6 Modèles de gazéification présentés dans la littérature .....	26
Figure 2-7 Configurations possibles des modèles d'équilibre thermodynamique et des modèles cinétiques (Budhathoki, 2013) .....	30
Figure 2-8 Système de neurones composé de la couche d'entrée, de la couche cachée et de la couche de sortie (Basu, 2010b).....	35
Figure 2-10 Différentes sections incorporées dans le modèle CFD Euler-Euler (Patra & Sheth, 2015).....	47
Figure 4-1 Configuration générale du modèle de gazéification (flèches bleues=flux de matières, flèches rouges=flux de chaleur) .....	59
Figure 4-2 Insertion du modèle de gazéification dans le cadre MFA de VMR-Sys .....	60
Figure 4-3 Schématisation du sous-modèle de séchage .....	62
Figure 4-4 Schématisation du sous-modèle de pyrolyse .....	67
Figure 4-5 Particule de char, contenant un centre de cendres .....	71
Figure 4-6 Schématisation du sous-modèle d'oxydation .....	72
Figure 4-7 Ordre des réactions d'oxydations .....	73
Figure 4-8 Schématisation du sous-modèle de réduction.....	78
Figure 5-1 Comparaison des prédictions du modèle avec les résultats obtenus dans les études de Jayag et al, 2003 et Garcia-Bacaicoa et al. 2008.....	83

Figure 6-1 Compositions élémentaires en cendres, eau, volatiles, carbone fixe, C, H, O, N et S des flux de CDD, de papiers/cartons, de plastiques, d'organiques et de textiles/caoutchoucs posés à des teneurs en humidité de 10% (fond blanc en kg/s (axe gauche) et fond beige en g/s (axe droite)).....	86
Figure 6-2 Flux massiques des différents produits de la gazéification de CDD à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air) .....	87
Figure 6-3 Flux massiques de CO, CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O et H <sub>2</sub> avant et après l'étape de <i>Water-Gas Shift</i> dans la zone d'oxydation.....	88
Figure 6-4 Flux massiques de CO, CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O et H <sub>2</sub> sans et avec la réaction de <i>Water-Gas Shift</i> dans la zone de réduction.....	89
Figure 6-5 Flux massiques des différents produits de la gazéification de papiers/cartons à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air) .....	90
Figure 6-6 Flux massiques des différents produits de la gazéification de plastiques à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air) .....	91
Figure 6-7 Flux massiques des différents produits de la gazéification d'organiques à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air) .....	93
Figure 6-8 Flux massiques des différents produits de la gazéification textiles/caoutchoucs à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air).....	94
Figure 6-9 Profils des flux molaires des CDD, papiers/cartons, plastiques, organiques et textiles/caoutchoucs dans la zone de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air) .....	95
Figure 6-10 Profils des flux molaires des CDD d'une teneur en humidité de 0%, 5%, 10%, 15% et 20% dans la zone de réduction (ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air) .....	99
Figure 6-11 Profils des flux molaires des CDD d'une taille de particule de 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 et 0.1 mètre (humidité 10%, ER=0.5, oxydant=air).....	102

Figure 6-12 Profils des flux molaires de CDD pour des ratios ER de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 (humidité 10%, $D_p=0.06$ m, oxydant=air) .....	105
Figure 6-13 Profils des flux molaires de CDD pour une alimentation d'air (21% $O_2$ , 79% $N_2$ ), d'air enrichi à 35% de $O_2$ , d'air enrichi à 50% de $O_2$ , d'oxygène pur et de vapeur d'eau (humidité 10%, $D_p=0.06$ m, ER=0.5).....	109
Figure 6-14 Effets d'une température de pyrolyse variant entre 873 K et 1073 K et d'une température d'oxydation variant entre 1200 K et 1600 K sur le ratio $H_2/CO$ .....	112
Figure 6-15 Effets d'une température de pyrolyse variant entre 873 K et 1073 K et d'une température d'oxydation variant entre 1200 K et 1600 K sur le ratio $H_2/CO/CO_2$ .....	113

## LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

### *Abréviations*

ANN	Modèles de réseaux de neurones artificiels ( <i>Artificial Neural Networks</i> )
ACV	Analyse de cycle de vie
CDD	Combustibles dérivés de déchets
CFD	Simulations numériques de dynamiques des fluides ( <i>Computational Fluids Dynamics</i> )
CRF	<i>Char Reactivity Factor</i>
CRVMR	<i>Chaire de Recherche sur la Valorisation des Matières Résiduelles</i>
ER	Ratio d'équivalence (-)
GMR	Gestion des matières résiduelles
HDPE	<i>High-density polyethylene</i>
MaRCOT	Materials Recovery Choice of Technologies
MFA	Analyse des flux de matières ( <i>Material Flow Analysis</i> )
MR	Matières résiduelles
LCA	Life Cycle Assessment
LDPE	<i>Low-density polyethylene</i>
LHV	Lower heating value ( $\text{J/m}^3$ ) ou ( $\text{MJ/m}^3$ )
PE	Polyéthylène
PET	Polyéthylène téréphtalate
PCI	Pouvoir calorifique inférieur ( $\text{J/m}^3$ ) ou ( $\text{MJ/m}^3$ )
PCS	Pouvoir calorifique supérieur ( $\text{J/m}^3$ ) ou ( $\text{MJ/m}^3$ )
PP	Polypropylène
PPB	Parties par milliard
PPM	Parties par million
PS	Polystyrène
RDF	Refuse derived fuel
TPJ	Tonnes par jour
TPA	Tonnes par année
WMS	Waste Managment System



*Variables et paramètres*

$A_j$	Facteur pré-exponentiel de la réaction $j$ (1/s)
$A$	Air du réacteur (m <sup>2</sup> )
$a_c$	Surface volumétrique des particules (1/m)
$C_i$	Concentration de la substance $i$ (kmoles/m <sup>3</sup> )
$Cte$	Constante (s/K <sup>0.75</sup> )
$Cp_k$	Chaleur spécifique du bien $k$ (kmoles/m <sup>3</sup> )
$D_i$	Diffusivité de la substance $i$ (m <sup>2</sup> /s)
$D_i^*$	Diffusivité de la substance $i$ (s/m)
$Dp_i$	Diamètre de la particule de la substance $i$ (m)
$E_i$	Énergie d'activation de la substance $i$ (J/kmol)
$F$	Fonction objective (-)
$g_e$	Contrainte de l'élément $e$ (-)
$\Delta G_{f,i}^\circ$	Énergie libre de Gibbs standard de la substance $i$ (J)
$\Delta G_{f,T}^\circ$	Énergie libre de Gibbs standard total (J)
$\Delta h_{f,i}^\circ$	Chaleur de formation de la substance $i$ (J/kmol)
$\Delta h_{298}^T$	Chaleur sensible de la substance $i$ (J/kmol)
$\Delta h_{vap}$	Enthalpie de vaporisation de l'eau (J/kg)
$k_j$	Constante cinétique de la réaction $j$ (unités varient)
$k_{m_i}$	Coefficient de transfert de masse de la substance $i$ (m/s)
$K_j$	Constante d'équilibre thermodynamique de la réaction $j$ (-)
$M_i$	Masse molaire de la substance $i$ (kg/kmol)
$m_0$	Masse de la matière première à $t = 0$ (kg)
$m_\infty$	Masse de la matière première à $t = \infty$ (kg)
$n_i$	Quantité molaire de la substance $i$ (kmoles)
$P_i$	Pression partielle de la substance $i$ (Pa)
$r_j$	Vitesse de la réaction $j$ (kmol/m <sup>3</sup> s)
$r_j^*$	Vitesse de la réaction $j$ (s/m)
$R$	Constante universelle des gaz (J/kmol.K)
$Re$	Nombre de Reynolds (-)
$Sh_i$	Nombre de Sherwood de la substance $i$ (-)

$Sc_i$	Nombre de Schmidt de la substance $i$ (-)
$T$	Température (K)
$T_\infty$	Température locale de la phase continue (K)
$u_g$	Vitesse des gaz (m/s)
$X$	Conversion (-)
$X_i^{\%}$	Fraction massique de la substance $i$ (-)
$x_i^{\%}$	Fraction molaire de la substance $i$ (-)
$Y_e^{\%}$	Fraction massique de l'élément $e$ (-)
$z$	Hauteur de la zone de réduction (m)

*Variables du modèle*

$\dot{F}_l$	Flux massique du courant $l$ (kg/s)
$\dot{f}_l$	Flux molaire du courant $l$ (kmoles/s)
$\dot{M}_k$	Flux massique du bien $k$ (kg/s)
$\dot{m}_k$	Flux molaire du bien $k$ (kmoles/s)
$X_i$	Masse de la substance $i$ (kg)
$\dot{X}_i$	Flux massique de la substance $i$ (kg/s)
$\dot{x}_i$	Flux molaire de la substance $i$ (kmoles/s)
$\dot{Y}_e$	Flux massique de l'élément $e$ (kg/s)
$\dot{y}_e$	Flux molaire de l'élément $e$ (kmoles/s)

*Lettres grecques*

$\alpha_i$	Coefficient $\alpha$ de viscosité de la substance $i$ (Pa.s)
$\beta_i$	Coefficient $\beta$ de viscosité de la substance $i$ (Pa.s)
$\gamma_i$	Coefficient $\gamma$ de viscosité de la substance $i$ (Pa.s)
$\delta_i$	Coefficient $\delta$ de viscosité de la substance $i$ (Pa.s)
$\varepsilon$	Fraction du vide (-)
$\theta$	Coefficients de transferts
$\rho_i$	Densité de la substance $i$ (kg/m <sup>3</sup> )

$\mu_g$	Viscosité des gaz (kg/m.s)
$\mu_i$	Viscosité de la substance $i$ (kg/m.s)
$\nu_{i,j}$	Ratio stœchiométrique de la substance $i$ dans la réaction $j$ (-)
$\omega$	Ordre de réaction (-)
$\lambda_e$	Multiplicateurs de Lagrange de l'élément $e$ (-)

### *Indices*

$cl$	Cellulose
$e$	Élément
$g$	Gaz
$hc$	Hémicellulose
$i$	Substance
$j$	Réaction
$k$	Bien
$l$	Courant
$lg$	Lignine
$O$	Oxydation
$P$	Pyrolyse
$R$	Réduction
$s$	Solide
$S$	Séchage

## LISTE DES ANNEXES

ANNEXE A Usines de traitements par gazéification .....	124
ANNEXE B Caractérisation des matières résiduelles.....	126
ANNEXE C Coefficients a, b, c, d pour calculé la chaleur sensible des substances i (j/kmol.k) .....	131
ANNEXE D Coefficients de diffusivités du O <sub>2</sub> , du CO <sub>2</sub> , de la vapeur et du H <sub>2</sub> (m <sup>2</sup> /s).....	132
ANNEXE E Coefficients $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ et $\delta_i$ pour calculer la viscosité (Pa.s).....	133
ANNEXE F Répartitions des éléments dans les différents flux de sorties .....	134
ANNEXE G Flux des industries de l'AIEM actuels et flux de la gazéification des matières résiduelles.....	135

## CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Depuis plusieurs décennies, dans la plupart des pays développés, la collecte des matières recyclables se fait séparément de la collecte des matières résiduelles. Plus récemment, la collecte de matières organiques triées à la source a été mise en place afin de recycler cette fraction via la digestion anaérobie ou via le compostage. Cependant, une fois que les matières recyclables et les matières organiques ont été détournées et réintroduites dans l'économie circulaire, d'autres boucles de récupération doivent être mises en place afin de traiter le flux de matières résiduelles restant.

Ce flux, pouvant être transformé en combustibles dérivés de déchets (CDD) peut soit être valorisé énergétiquement ou peut être valorisé en molécules d'intérêts, par l'intermédiaire d'un traitement par gazéification. En effet, ce procédé produit un syngaz ( $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ) pouvant servir à la production de chaleur, d'électricité ou de molécules chimiques intermédiaires, utilisées pour la production de molécules d'intérêts tels que le diesel, le méthanol, l'éthanol, le propanol, le butanol, l'acide acétique et d'autres. Dans ce projet, la possibilité d'une valorisation du syngaz produit à partir de la gazéification de CDD en molécules chimiques intermédiaires est étudiée.

Puisque la qualité du syngaz dépend grandement de la composition et des caractéristiques du flux entrant en plus de dépendre des conditions d'opérations, plusieurs travaux concernant la modélisation du procédé de gazéification ont été faits durant les dernières années afin de réduire les coûts d'immobilisation et d'opérations reliés aux unités de traitement par gazéification. Ces modèles basés sur des équations constitutives, comprenant des expressions cinétiques, des coefficients de transfert de matière, des bilans d'énergie et de quantité de mouvement, sont utilisés pour optimiser les conditions d'opération en fonction du flux entrant, afin d'obtenir un rendement maximal en syngaz.

Bien que ces modèles semblent être appropriés pour prédire les performances de la gazéification, ils sont peu utilisés dans le monde de la gestion des matières résiduelles (GMR), où les outils d'aide à la décision sont principalement utilisés. Au cours des dernières années, l'utilisation de l'analyse des flux de matières (*Material Flow Analysis*, MFA) comme outils d'aide à la décision pour des systèmes de GMR a gagné en popularité. Dans la MFA, différents flux de matières résiduelles sont suivis au travers une panoplie de procédés de traitement; permettant ainsi de comparer différents scénarios de GMR. Cependant, puisque les procédés de traitements sont modélisés à l'aide de données empiriques, les modèles MFA ne peuvent pas capturer les effets de la variation de la

composition et des caractéristiques du flux entrant ainsi que les effets des conditions d'opérations sur les performances de la gazéification. Ainsi, en insérant un modèle de gazéification dans une MFA, il deviendrait possible de quantifier les effets des changements amenés au système de GMR sur le procédé.

Donc, l'objectif du projet est de développer un modèle de gazéification phénoménologique s'insérant au sein d'une représentation par MFA d'un système de GMR comme outil d'aide à la décision. Ce projet est réalisé au sein de la *Chaire de recherche sur la valorisation des matières résiduelles* (CRVMR) de Polytechnique Montréal, qui élabore actuellement une méthodologie pour évaluer la durabilité des systèmes de gestion de matières résiduelles (GMR), basée sur l'intégration de trois outils distincts:

- **VMR-Génération (VMR-Gen):** basé sur des modèles d'agents, destinés à prédire le comportement du générateur de déchets, en fournissant les flux de déchets et la composition des flux de déchets triés à la source;
- **VMR-Système (VMR-Sys):** cadre basé sur la MFA pour calculer les flux produits dans l'ensemble du système de GMR. Des modèles pour chaque technologie de traitement des déchets sont développés et intégrés dans ce cadre;
- **VMR-Impacts (VMR-Imp):** modélisation des ACV pour évaluer les impacts du système de GMR.

Comme illustré à la Figure 1-1, l'outil VMR-Sys est composé de différents modèles de procédés phénoménologiques (compostage, digestion anaérobie, etc.), tous liés entre eux par un cadre MFA (VMR-Sys). Les différents flux de matières résiduelles sont alimentés à VMR-Sys par l'outil VMR-Gen, qui prédit le comportement du générateur. Ces matières résiduelles sont traitées dans différents procédés de traitements compris dans VMR-Sys. De ces traitements, différentes matières à valeurs ajoutées ou résidus sont produits. Ces sorties sont subséquemment utilisées pour construire l'inventaire d'analyse de cycle de vie (ACV) de l'outil VMR-Imp. L'outil d'optimisation MaRCOT (*Materials Recovery Choice of Technologies*) utilise les résultats produits par les trois outils pour prédire la meilleure option de valorisation pour un flux de matières résiduelles donné. Ainsi, cet outil d'aide à la décision développé au sein de la CRVMR est en mesure de déterminer quel procédé de traitement (compostage, digestion anaérobie, gazéification, etc.) est le mieux

adapté au flux de matières résiduelles, tout en prenant en considération les préoccupations sociales, économiques et environnementales.

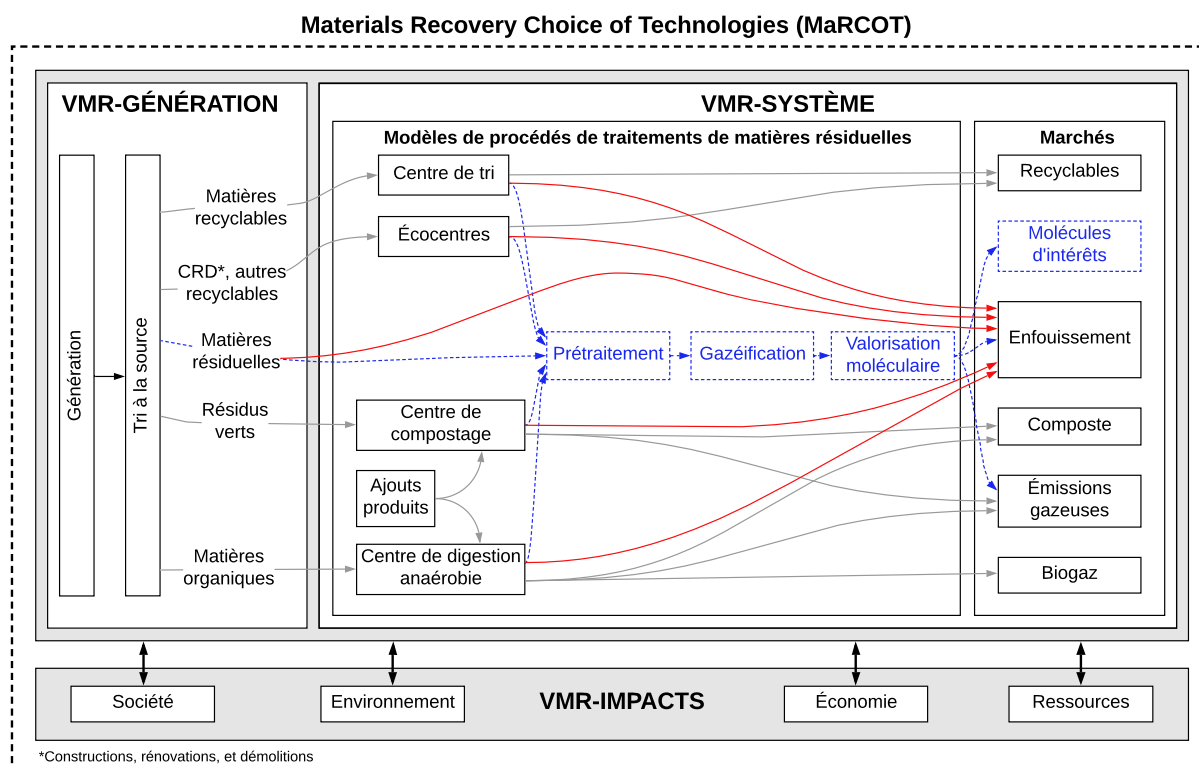


Figure 1-1 Outil d'aide à la décision de CRVMR

Intégré dans la structure MFA de VMR-Sys, le modèle de gazéification est destiné à recevoir des informations détaillées sur la matière première, telles que sa teneur en humidité, sa composition et sa taille de particules, afin de capturer l'influence d'une variation de flux ou de composition des matières résiduelles. Le modèle de gazéification prédit ensuite la composition du syngaz ainsi que les ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$ . Différents contaminants du syngaz sont aussi prédits. Ces sorties seront éventuellement utilisées dans VMR-Imp pour enrichir l'inventaire de données d'ACV et seront ensuite utilisées par l'outil MaRCOT pour l'optimisation de systèmes de gestion des matières résiduelles. Ainsi, en intégrant un modèle de gazéification au sein de VMR-Sys, il est possible de comparer les performances de ce procédé en termes d'impacts sociaux, environnementaux et économiques, ce qui permet de faciliter la prise de décision. Les outils VMR-Gen, VMR-Sys, VMR-Imp et MaRCOT utilisent le langage de programmation *Python*. Ainsi, afin de simplifier son insertion au sein de VMR-Sys, le modèle de gazéification est aussi développé dans le langage de programmation *Python*.

## CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE

Comme mentionné dans l'introduction, la gazéification de certaines fractions de matières résiduelles est prometteuse dans une optique de valorisation moléculaire. L'insertion d'un modèle de gazéification dans un cadre MFA permettrait d'optimiser la qualité du syngaz produit à partir de CDD. Dans ce chapitre, une caractérisation des CDD ainsi qu'une revue de la littérature sur la MFA en GMR sont présentées. Ensuite, les étapes de la gazéification, suivies des voies de valorisation du syngaz et des effets des conditions opératoires, sont présentées. Finalement, une revue de littérature sur les types de gazogènes et les modèles de gazéification sont présentés.

### 2.1 Caractérisation des combustibles dérivés de déchets (CDD)

Une large gamme de déchets solides, liquides ou gazeux provenant de ménages, de commerces, des industries, du domaine de la foresterie et de l'agriculture possédant un certain pouvoir calorifique, peuvent être utilisés comme combustibles dérivés de déchets (CDD) dans des installations destinées à la valorisation énergétique (après un certain prétraitement). Règle générale, les boues des stations d'épuration, la biomasse, les fractions à haut pouvoir calorifique provenant d'usines de traitement mécanique-physique et/ou de traitement mécanique biologique, les fractions hautement calorifiques des matières résiduelles municipales et commerciales, les fractions légères de déchiquetage (véhicules usagés, équipements électriques et électroniques), les pneus usés, les sous-produits alimentaires (graisses, farines animales, etc.), les huiles usagées, et les solvants usés peuvent être considérés comme des combustibles dérivés de déchets (Sarc & Lorber, 2013). Dans ce projet, les CDD représentent le flux de matières résiduelles restant après qu'une partie de la fraction organique et de la fraction recyclable a été retirée du flux principal. Il s'agit donc du bac noir lorsqu'on parle d'un tri à la source de matières organiques (bac brun) et des matières recyclables (bac bleu).

Les CDD contiennent des composés chimiques, de l'eau (humidité) et une faible quantité d'impuretés inorganiques connues sous le nom de cendres. Les composés chimiques comprennent cinq éléments principaux : le carbone (C), l'hydrogène (H), l'oxygène (O), l'azote (N) et le soufre (S). Afin de représenter la composition des CDD, deux types d'analyses sont utilisées :

- **Analyse ultimée:** C, H, O, N, S, cendres, eau
- **Analyse proximée:** Matières volatiles, carbone fixe, cendres, eau



Dans l'analyse proximée, les matières volatiles représentent les vapeurs condensables et non condensables libérées lorsque les CDD sont chauffés alors que le carbone fixe représente la quantité de carbone restant dans le char après la dévolatilisation de la matière. Enfin, les cendres représentent les résidus solides inorganiques restant après une combustion complète de la matière (Basu, 2013). Des analyses ultimée et proximée typique de CDD sont présentées à la Figure 2-1 (Basu, 2013).

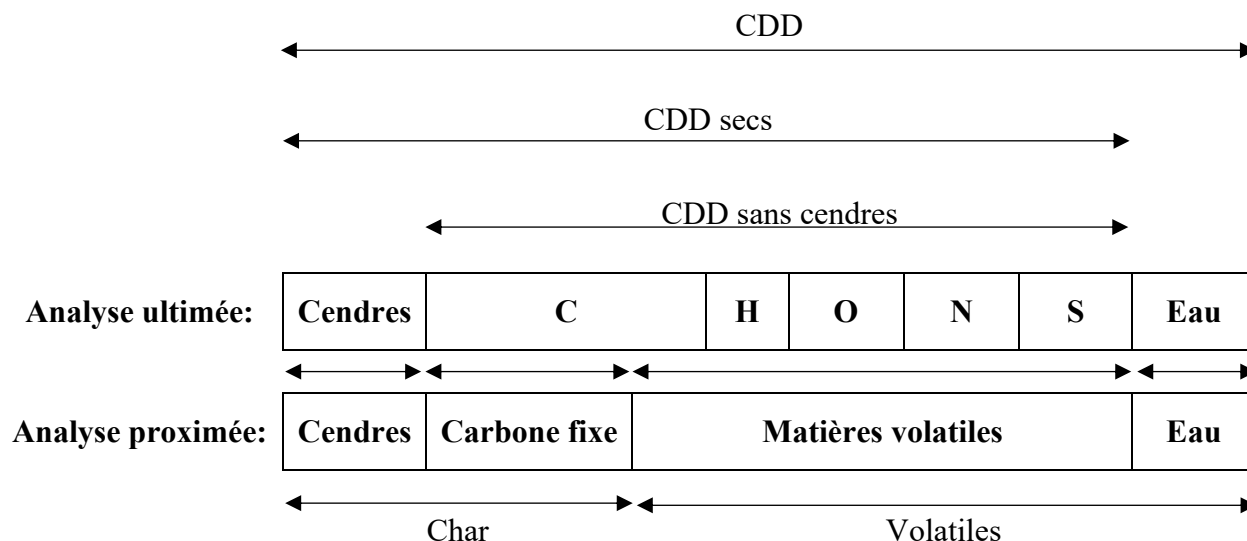


Figure 2-1 Représentation des analyses ultimée et proximée ainsi que de la composition du char, des volatiles et des différentes manières de représenter la composition des CDD (Basu, 2013)

## 2.2 La MFA en gestion des matières résiduelles

L'analyse des flux de matières (ou *Material Flow Analysis*, MFA) est un outil d'aide à la décision très populaire en gestion des matières résiduelles pour comparer différents scénarios de traitements et de valorisation. La MFA fournit un aperçu complet des interactions d'un système (usine, secteur industriel ou région d'intérêt) composé de différentes matières (déchets, méthane, syngaz, recyclables, etc.) avec son environnement. Étant basée sur le principe de la conservation de la matière, la MFA produit un ensemble cohérent d'informations servant à la conception de plans de gestion durables des matières résiduelles (Allesch & Brunner, 2017; Brunner, Rechberger, & Rechberger, 2016).

Ainsi, l'objectif d'une MFA est d'établir un bilan de masse pour un système à l'étude. Ce système peut soit représenter une usine de traitements, un secteur industriel comprenant plusieurs usines de

traitements ou une région d'intérêt composée de plusieurs secteurs industriels. La Figure 2-2 représente deux différents types de MFA, un en termes de biens et l'autre en termes de substances.

Un système MFA est toujours composé des limites du système (ligne pointillée grise), d'un ou de plusieurs procédés de traitements (rectangles bleus) et de flux de matières reliant les différents procédés (flèches rouges). Des coefficients de transferts ( $\theta$ ) venant d'usines existantes sont utilisés pour modéliser les différents procédés de traitements. Les flux de matières sont habituellement exprimés en débits massiques de biens ou de substances (kg/s ou kg/h).

La conservation de la masse est maintenue pour chaque procédé de traitements et pour le système MFA complet. Ainsi, en équilibrant les débits massiques en entrée et en sortie des différents procédés de traitement des matières résiduelles, il est possible de déterminer les sorties du système de GMR. Avec ces sorties, il devient alors possible de comparer les impacts sociaux, économiques et environnementaux de chacun de ces procédés, facilitant ainsi la prise de décision quant à quelle option de valorisation des matières résiduelles est la plus intéressante pour un contexte donné (Allesch & Brunner, 2017; Brunner et al., 2016).

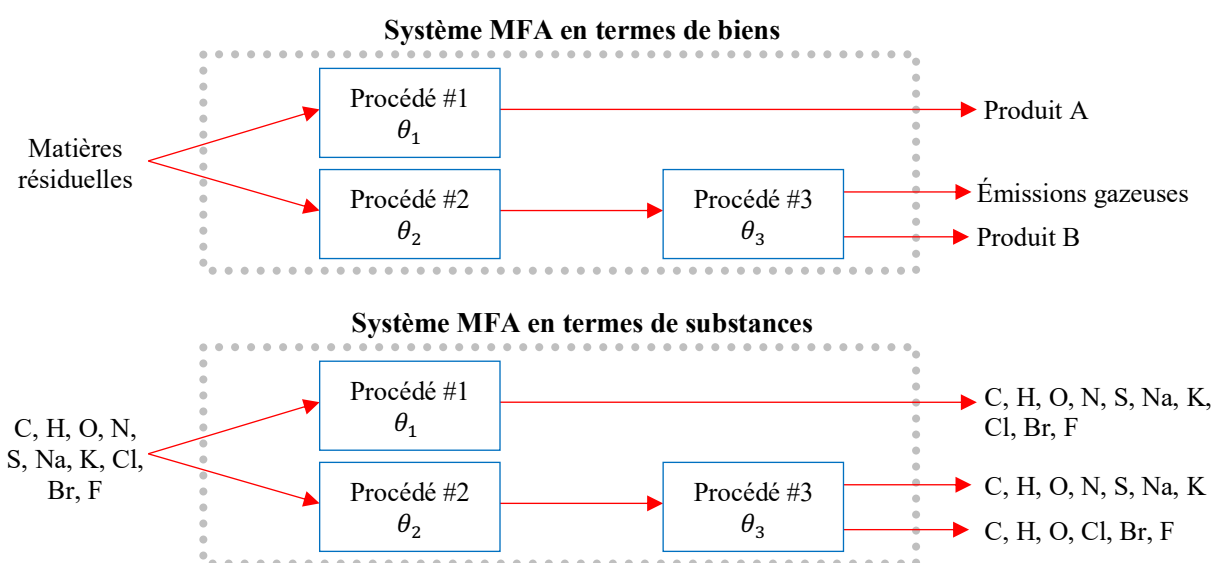


Figure 2-2 Systèmes MFA en termes de biens et en termes de substances

Comme présenté à la Figure 2-2, l'analyse MFA peut se faire au niveau des biens ou des substances. Une MFA au niveau des biens consiste en une analyse des flux de biens pouvant prendre des valeurs économiques positives (carburant) ou négatives (matières résiduelles municipales) (Allesch & Brunner, 2015). Lorsqu'une MFA au niveau des substances est utilisée, quelques éléments ou

composés chimiques sont suivis à travers les différents procédés de traitements afin de quantifier leurs effets.

Il a été mis en lumière dans les travaux de Allesch & Brunner (2015) qu'une analyse MFA au niveau des biens est essentielle pour aider la compréhension du fonctionnement des systèmes de GMR, facilitant ainsi les connexions entre les parties prenantes, les autorités et les sociétés de GMR. En effet, pour la prise de décision, il est essentiel de connaître la quantité de déchets à traiter, comment ces déchets sont transformés, transportés ou entreposés, et quels types de produits sortent ou s'accumulent dans le système. De plus, puisque ce type de MFA permet l'évaluation des efficacités de collecte, des taux de recyclage et des quantités de matériaux traités et éliminés, elle constitue un outil précieux pour la mise en œuvre de mécanismes de réglementation.

Cependant, toujours dans les travaux de Allesch & Brunner (2015), il a été montré que l'analyse MFA au niveau des biens n'offre pas assez d'informations. En effet, il est nécessaire d'utiliser l'analyse MFA au niveau des substances afin d'avoir une traçabilité de certains éléments à risques. Ainsi, en utilisant ce type de MFA, il est possible de garantir que les matériaux récupérés ou recyclés ne présentent pas des risques plus élevés que les matériaux produits à partir de ressources primaires en raison d'accumulation d'éléments traces. Donc, dans les travaux de Allesch & Brunner (2015), il est proposé d'utiliser une MFA au niveau des biens combinée à une MFA au niveau des substances comme outil d'aide à la décision en matière de gestion des matières résiduelles.

Lorsqu'une MFA est utilisée dans un système de GMR, des coefficients de transferts empiriques ( $\theta$ ) provenant d'usines existantes sont utilisés pour représenter la transformation des biens ou des substances au sein d'une unité de traitement donnée (Brunner et al., 2016). Par exemple, dans les travaux de Arena & Di Gregorio (2013), des procédés d'incinération et de gazéification sont modélisés avec des données empiriques provenant de plusieurs usines d'incinération d'Italie et d'usines de gazéification du Japon. Dans cette étude, l'analyse MFA au niveau des substances est utilisée pour comparer les quantités et la composition des résidus solides et des gaz provenant de ces deux types de procédés. Des coefficients de transferts sont utilisés pour prédire la composition des résidus solides et des gaz en termes de C, Cl, S, Al, Cu, Fe, Si, Ca, Na, K, Mg, Pb et Zn. La MFA est bien adaptée pour prédire la composition des produits pour un flux d'intrants donnés. Cependant, les coefficients de transferts utilisés dans cette étude sont propres aux matières

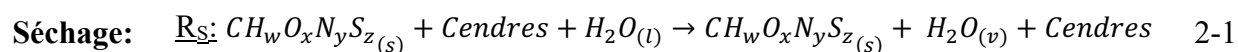
premières et aux conditions d'opérations des usines d'Italie et du Japon. En effet, bien que l'utilisation de coefficients de transferts dans d'autres applications soit commune, elle permet seulement l'optimisation du système global et non l'optimisation des modèles de traitements qui le composent. Ainsi, une nouvelle MFA devrait être effectuée si les conditions d'opérations ou la composition et les caractéristiques des flux entrants changent.

## 2.3 La gazéification pour la valorisation moléculaire des matières résiduelles

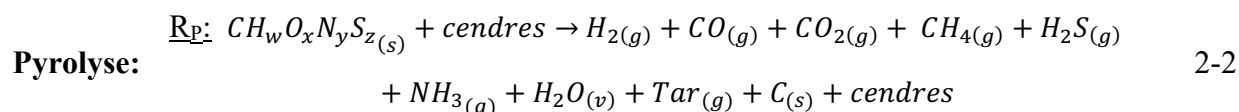
### 2.3.1 Étapes de la gazéification

La gazéification convertit la matière carbonée (biomasse, matières résiduelles, etc.) en produits gazeux, dont le CO et le H<sub>2</sub> (gaz de synthèse ou syngaz) et autres molécules gazeuses, en plus de produire des résidus solides, tels le char et les cendres. Ce procédé traite la matière en présence restreinte d'oxygène à des températures entre 600 et 1500 °C, dépendamment du type de gazéification (Arena, 2012). Globalement, le procédé de gazéification est endothermique. Cependant, ce dernier peut être considéré comme étant autothermique si de l'oxygène est alimenté au procédé (au lieu de la vapeur d'eau) créant ainsi une étape de combustion (ou d'oxydation), fournissant l'énergie nécessaire à la gazéification. À l'inverse, lorsque de la vapeur d'eau est alimentée au procédé, un apport d'énergie externe doit être fourni au procédé de gazéification (Arena, 2012).

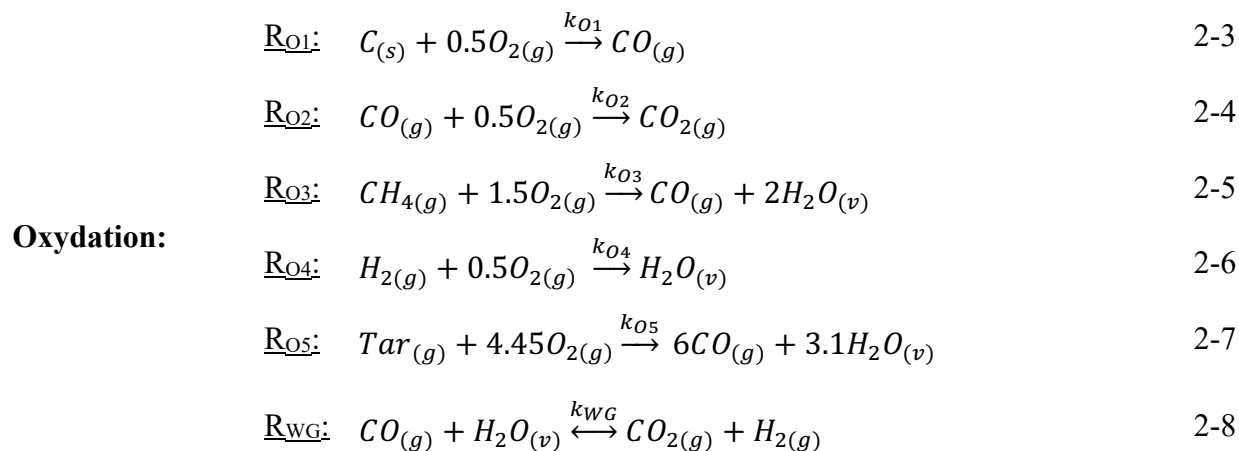
La gazéification de la matière se produit en quatre étapes: séchage, pyrolyse, oxydation et réduction. Lors de l'étape de séchage, l'eau contenue dans la matière carbonée (CH<sub>w</sub>O<sub>x</sub>N<sub>y</sub>S<sub>z</sub> et cendres) est évaporée, comme présenté dans l'équation 2-1 (Gupta & Bhaskaran, 2018).



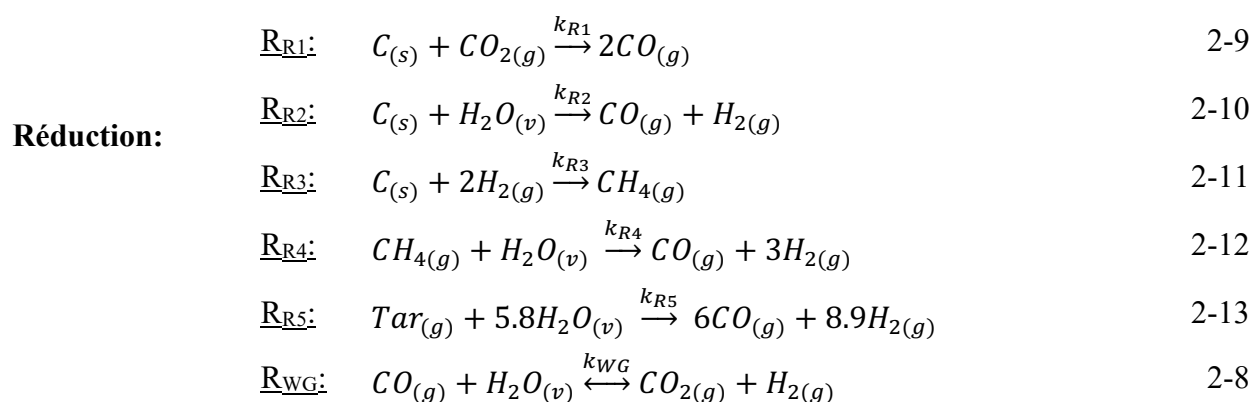
Ensuite, lors de l'étape de pyrolyse, la matière carbonée est dévolatilisée en gaz intermédiaires (CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>S, NH<sub>3</sub>) ainsi qu'en vapeurs condensables, formées de vapeur d'eau (H<sub>2</sub>O<sub>(v)</sub>) et de tar (C<sub>6</sub>H<sub>6.2</sub>O<sub>0.2</sub>). Le carbone fixe ainsi que les cendres initialement contenues dans la matière carbonée restent sous forme solide. Ainsi du char (C<sub>(s)</sub>) est produit à partir du carbone fixe présent dans la matière (Basu, 2010b; Di Blasi & Branca, 2013). L'étape de pyrolyse est représentée à l'équation 2-2 (Sharma, 2011).



Par la suite, comme présenté aux équations 2-3 à 2-8, le char et les gaz de pyrolyse sont oxydés par un agent oxydant (oxygène pur, air ou air enrichi). Ces réactions exothermiques fournissent de la chaleur pour les autres étapes du procédé (Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo, 2008).



Enfin, lors de l'étape de réduction, plusieurs réactions solide-gaz se produisent réduisant alors le char en CO, H<sub>2</sub> et en CH<sub>4</sub>, comme présentés dans les équations 2-9 à 2-13 (Tinaut et al., 2008).



### 2.3.2 Voies de valorisation du syngaz

Le syngaz peut être brûlé, pour produire directement de l'énergie thermique, peut être valorisé dans des moteurs à combustion interne pour produire de l'électricité ou peut être transformé en

molécules chimiques d'intérêts. La valorisation en électricité et en molécule chimique demande un niveau de pureté assez élevé. Plusieurs technologies de nettoyage des syngaz ont été développées durant les dernières années, facilitant ainsi l'utilisation de ce dernier comme matière première dans d'autres procédés. Un syngaz répondant à plusieurs exigences peut servir de matière première dans (NNFCC & E4tech, 2009; Riazi & Chiaramonti, 2018; B.-Q. Xu, Sun, Zhu, & Sachtler, 2000) :

- 1) **La synthèse *Fischer-Tropsch***, où le syngaz est converti via un procédé catalytique chimique en hydrocarbures synthétiques (oléfines:  $C_nH_{2n}$  et paraffines:  $C_nH_{2n+2}$ ), pouvant être utilisé directement comme combustibles liquides ou pouvant servir dans la production de diesel et d'essence ;
- 2) **La synthèse du méthanol** ( $CH_3OH$ ), où le syngaz réagit avec l'hydrogène ( $H_2$ ) dans un procédé catalytique chimique. Cependant, en raison de sa toxicité, le méthanol ne peut pas être incorporé directement dans les carburants de transport, mais peut par contre être utilisé comme matière première dans la production de l'éther diméthylique (DME), de l'essence et du biodiesel ;
- 3) **La synthèse d'alcools mixtes**, où le syngaz est converti via un procédé catalytique chimique en un mélange de méthanol ( $CH_3OH$ ), d'éthanol ( $C_2H_6O$ ), de propanol ( $C_3H_8O$ ), de butanol ( $C_4H_{10}O$ ) et en petites quantités d'alcools plus lourds ;
- 4) **La fermentation du syngaz**, où celui-ci est converti via un procédé biologique anaérobie en éthanol ( $C_2H_6O$ ) ou autres produits chimiques ;
- 5) **La synthèse de l'hydrogène**, via l'optimisation des paramètres d'opérations favorisant un haut rendement en hydrogène de la réaction de *Water-Gas Shift* ;
- 6) **La synthèse du méthane**, via l'optimisation des paramètres d'opérations favorisant un haut rendement en méthane de la réaction de *méthanation* ;

Les quatre premiers procédés sont présentés dans les sections suivantes, soit la synthèse *Fischer-Tropsch*, du méthanol, d'alcools mixtes et la fermentation du syngaz.

### 2.3.2.1 Synthèse *Fischer-Tropsch*

Lors de la synthèse *Fischer-Tropsch* (FT), l'hydrogène ( $H_2$ ) et le monoxyde de carbone (CO) présents dans le syngaz réagissent avec un catalyseur à base de fer (Fe) ou de cobalt (Co) pour

former une gamme de molécules hydrocarbonées (oléfines:  $C_nH_{2n}$  et paraffines:  $C_nH_{2n+2}$ ). Les réactions se conduisent habituellement dans des réacteurs à lits fixes opérants à des pressions entre 10 et 40 bars et des températures entre 200 et 250 °C pour un catalyseur à base de cobalt et entre 300 et 350 °C pour un catalyseur à base de fer (Spath & Dayton, 2003). Les principales exigences relatives au syngaz pour la synthèse FT sont les suivantes (NNFCC & E4tech, 2009):

- 1) **Ratio molaire de  $H_2/CO$  adéquat:** Lorsqu'un catalyseur à base de cobalt est utilisé, le ratio molaire de  $H_2/CO$  doit être supérieur à 2. Si le ratio  $H_2/CO$  du syngaz produit est inférieur, une étape de *Water-Gas Shift* est ajoutée en aval du procédé de gazéification afin de transformer la vapeur d'eau et le CO en  $H_2$ . Par contre, lorsqu'un catalyseur à base de fer est utilisé, le ratio  $H_2/CO$  requis peut être entre 0.6 et 1.7, puisque les catalyseurs à bases de fer favorisent la réaction de *Water-Gas Shift*.
- 2) **Faibles teneurs en soufre (S) et azote (N):** Puisque la présence du soufre ( $COS$ ,  $H_2S$ ,  $CS_2$ ) entraîne une désactivation des catalyseurs, le syngaz peut contenir un maximum de 100 parties par milliard (ppb) de soufres lorsque des catalyseurs à bases de fer sont utilisés et un maximum de 60 ppb de soufre lorsque des catalyseurs à bases de cobalt sont utilisés. La présence d'azote entraîne la formation de  $NH_3$  pouvant empoisonner les catalyseurs. Ainsi, un maximum de 10 ppb est accepté dans le procédé de synthèse FT.
- 3) **Faibles teneurs en halogènes et en métaux alcalins:** la présence d'halogènes (chlore, brome, fluor) dans le syngaz empoisonne les catalyseurs et peut même entraîner un changement structurel du catalyseur. Une limite de 10 ppb est donc imposée. De plus, la présence de métaux alcalins (sodium et potassium) favorise la production d'alcools mixtes, au détriment de la production d'oléfines ( $C_nH_{2n}$ ) et de paraffines ( $C_nH_{2n+2}$ ). Donc, un maximum de 10 ppb est toléré.
- 4) **Faible teneur en tar ( $C_6H_{6.2}O_{0.2}$ ):** Le contenu en tar des syngaz doit être inférieur à 10 ppb puisque la condensation de ce dernier réduit la surface active et la durée de vie des catalyseurs.
- 5) **Faibles quantités de gaz non réactifs:** Les gaz tels que l'azote ( $N_2$ ) et le méthane ( $CH_4$ ) doivent être présents en faibles quantités puisque leurs présences augmentent la taille du réacteur et donc augmentent conséquemment les coûts des équipements. De plus, de trop

grandes quantités de vapeur d'eau inhibent la synthèse FT et la présence de dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>) favorise la production de méthanol (< 5%).

- 6) **Faible quantité de particules:** La présence d'une trop grande quantité de particules (char et cendres) peut engendrer l'érosion des équipements. Ainsi, une teneur maximale de 100 ppb est acceptée.

### 2.3.2.2 Synthèse du méthanol

La production du méthanol à partir du syngaz implique le H<sub>2</sub>, le CO et une petite quantité de CO<sub>2</sub> avec un catalyseur à base d'oxyde de cuivre ou de zinc. La production du méthanol se fait via la réaction de *Water-Gas Shift*, suivie d'une hydrogénation du CO<sub>2</sub>. Le procédé se déroule à des températures entre 220 et 300 °C et à des pressions entre 50 et 100 bars. Tout comme la synthèse FT, plusieurs exigences relatives au syngaz doivent être rencontrées (NNFCC & E4tech, 2009).

- 1) **Ratio molaire de H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub> adéquat:** Le rapport stœchiométrique de (H<sub>2</sub> - CO<sub>2</sub>) / (CO + CO<sub>2</sub>) devrait être supérieur à 2 pour les procédés utilisant un catalyseur à contact gazeux et d'environ 0.68 pour les procédés utilisant un catalyseur à contact liquide.
- 2) **Faibles teneurs en soufre (S) et azote (N)**
- 3) **Faibles teneurs en halogènes et en métaux alcalins**
- 4) **Faible teneur en tar (C<sub>6</sub>H<sub>6.2</sub>O<sub>0.2</sub>)**
- 5) **Faibles quantités de non-gaz non réactifs:** faible teneur en CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> et vapeur d'eau tolérée. En ce qui concerne le CO<sub>2</sub>, bien qu'il participe à la réaction d'hydrogénation, une trop grande quantité de ce dernier peut inhiber le catalyseur.
- 6) **Faible quantité de particules**
- 7) **Faibles quantités d'éléments traces:** la présence de l'arsenic (As), du phosphore (P) et du plomb (Pb) réduit l'activité des catalyseurs, alors que la présence du cobalt (Co) peut engendrer la formation de CH<sub>4</sub> et réduit aussi l'activité des catalyseurs. Finalement, la présence du nickel (Ni) et du fer (Fe) favorise la synthèse FT, au détriment de la synthèse du méthanol.



### 2.3.2.3 Synthèse d'alcools mixtes

La synthèse d'alcools mixtes est très similaire à la synthèse FT et à la synthèse du méthanol. Souvent, les catalyseurs de ces procédés sont utilisés, auxquels sont ajoutés des métaux alcalins afin de favoriser la synthèse d'alcools mixtes. Le procédé produit un mélange de méthanol, d'éthanol, de propanol, de butanol et de certains alcools plus lourds. Lorsque des catalyseurs au soufre dopés avec un alcalin sont utilisés, les exigences relatives au syngaz sont très similaires à celles de la synthèse FT, à la différence près que le ratio  $H_2/CO$  doit être compris entre 1 et 1.2 (NNFCC & E4tech, 2009). De plus, lorsqu'un catalyseur au soufre est utilisé, la présence de soufre dans le syngaz est souhaitée (entre 50 et 100 parties par millions (ppm)) car sa présence favorise la transformation du syngaz en alcools mixtes. Ainsi les coûts associés au nettoyage du syngaz sont réduits lorsque la synthèse d'alcools mixtes est sélectionnée comme voie de valorisation (Spath & Dayton, 2003). Enfin, lors de la synthèse d'alcools mixtes, il faut éviter la présence de traces de cobalt puisque ce dernier favorise la transformation de l'éthanol en méthanol.

### 2.3.2.4 Fermentation du syngaz

Divers micro-organismes utilisent le syngaz comme source d'énergie et de carbone pour la production d'éthanol, de butanol et de bases conjuguées tels que l'acide acétique, l'acide formique et l'acide butyrique (acétate, formiate et butyrate) (Fischer, Klein-Marcuschamer, & Stephanopoulos, 2008). Il s'agit notamment de *Acetobacterium woodii*, de *Butyribacterium methylotrophicum*, de *Clostridium carboxidivorans* P7, d'*Eubacterium limosu*, de Moorella et de *Peptostreptococcus productus* (Henstra, Sipma, & Rinzema, 2007). Les efforts actuels mis sur la fermentation du syngaz sont principalement axés sur la production d'éthanol. Le procédé fonctionne à basse pression (2 bars) et à basse température (37- 55 °C) (NNFCC & E4tech, 2009).

La plupart des micro-organismes présentés précédemment se développent mieux en présence de  $CO$  qu'en présence de  $H_2$ . Ce procédé ne requiert donc pas un syngaz d'un ratio  $H_2/CO$  minimal. La principale exigence du syngaz destiné à la fermentation est d'éviter les traces de tar (inférieur à 10 ppb), car la présence de cette molécule inhibe la fermentation et nuit à la croissance cellulaire. De plus, la présence de  $CO_2$ , de  $NH_3$  et de  $H_2S$  dans le syngaz est tolérée puisque ces molécules aident à la croissance des micro-organismes. Étant donné que les réactions biologiques se déroulent habituellement en milieu aqueux, la présence de vapeur d'eau dans le syngaz est acceptée. Enfin, en vue d'une valorisation biologique du syngaz, ce dernier ne doit contenir aucune trace d'éléments

traces, d'halogènes et de particules (NNFCC & E4tech, 2009). Le Tableau 2-1 présente un résumé des exigences du syngaz destiné à la valorisation moléculaire.

Tableau 2-1 Exigences du syngaz destiné à la synthèse FT, du méthanol, d'alcools mixtes et à un procédé de fermentation (NNFCC & E4tech, 2009)

	Fischer-Tropsch		Méthanol		Alcools mixtes	Fermentation
Conditions opératoires						
Produits	C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> + CO <sub>2</sub>	C <sub>n</sub> H <sub>2n+2</sub> + H <sub>2</sub> O	Méthanol		Mixte d'alcools	Éthanol
Catalyseurs	Fe	Co	Cu/ZnO/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (Gaz)	Cu/ZnO (Liquide)	Métaux alcalins/MoS <sub>2</sub>	Biologique
Température (°C)	300-350	200-250	220-275	225-265	260-350	20-40
Pression (bar)	20-40	10-40	50-100	50	30-175	1-2
Exigences relatives au syngaz						
1) Ratio H <sub>2</sub> /CO	0.6-1.7	> 2.0	Sans importance		1.0-1.2	Ø sensible
Ratio (H <sub>2</sub> /CO/CO <sub>2</sub> )	Sans importance		> 2.0	0.68	Sans importance	
2) Soufre (H <sub>2</sub> S)	<100 ppb	<60 ppb	< 100 ppb		50-100 ppm	< 2 %
Azote (NH <sub>3</sub> )	< 10 ppb		< 10 ppb		< 10 ppb	Toléré
3) Halogènes (Cl, Br, F)	< 10 ppb		< 1 ppb	< 10 ppb	< 10 ppb	Accepté
Métaux alcalins (Na, K)	< 10 ppb		↓		< 10 ppb	Inconnu
4) Tar (C <sub>6</sub> H <sub>6.2</sub> O <sub>0.2</sub> )	< 10 ppb		↓		< 10 ppb	< 10 ppb
5) CO <sub>2</sub>	< 5 %		4-8 %		< 5 %	Accepté
H <sub>2</sub> O	↓		↓		↓	Accepté
CH <sub>4</sub>	< 2%		↓		< 2%	↓
N <sub>2</sub>	↓		↓		↓	↓
6) Particules	< 100 ppb		< 100 ppb		< 100 ppb	0
7) Éléments traces	Sans importance		Ø As, P, Pb, Co, Ni et Fe		Ø Co	0

### 2.3.3 Effets des conditions d'opérations

Les effets du rapport d'équivalence, de la température d'opération, du type d'agent oxydant et du temps de résidence sont présentés dans les sections suivantes.

#### 2.3.3.1 Rapport d'équivalence (ER)

Le rapport d'équivalence (ER) représente le ratio entre la teneur en oxygène alimentée au procédé par rapport à celle requise pour une combustion stœchiométrique complète de la matière. Un ER de 0 correspond aux conditions de la pyrolyse (aucun oxygène alimenté au procédé) alors qu'un ER de 1 correspond aux conditions d'une combustion complète (procédé d'incinération). Une valeur trop faible de ER engendre de grandes quantités de tar dans le syngaz alors qu'une valeur

trop élevée produit un syngaz de faible PCI. De plus, si trop d'oxygène est alimenté au procédé, le syngaz contient une plus grande quantité de  $\text{CO}_2$ , ce qui réduit la qualité du syngaz.

### **2.3.3.2 Température d'opération**

La température d'opération du réacteur est un paramètre important lors de la gazéification. En effet, la température d'opération (ou le profil de température) dicte la composition du syngaz selon les réactions chimiques impliquées, indique la quantité d'énergie à fournir au réacteur (dans un cas d'un réacteur fonctionnant à vapeur d'eau) et détermine l'état des cendres (vitrifiées ou non) (Arena, 2012).

### **2.3.3.3 Type d'agent gazéifiant**

Le type d'agent gazéifiant (air, air enrichi, oxygène pur et vapeur d'eau) affecte directement les bilans massiques et énergétiques. Si de l'air est utilisé à la place de l'oxygène pure, le syngaz produit contient de grandes quantités d'azote ( $\text{N}_2$ ), causant un surdimensionnement des équipements, et donc une augmentation des coûts. Par contre, si de la vapeur est utilisée comme agent de gazéification, le syngaz contient plus de  $\text{H}_2$  par unité de carbone, augmentant ainsi le PCI du syngaz. Lorsque de l'air est utilisé, le PCI du syngaz est entre 4 et 7  $\text{MJ/Nm}^3$ , alors qu'avec de l'oxygène, il est entre 12 et 28  $\text{MJ/Nm}^3$  et avec la vapeur d'eau il est entre 10 et 18  $\text{MJ/Nm}^3$  (Basu, 2013).

### **2.3.3.4 Temps de résidence**

Le temps de résidence des gaz et des matières résiduelles à l'intérieur du réacteur est défini en grande partie par le type et la conception du réacteur. Dans le cas d'un lit fixe, le temps de résidence est directement fonction de la hauteur du lit. Cependant, dans le cas de lit fluidisé, le temps de résidence peut être modifié en changeant la vitesse du gaz (Arena, 2012).

## **2.3.4 Effets de la composition et des propriétés physiques de l'alimentation**

La composition élémentaire, le PCI, la teneur en humidité, la teneur en cendres, la teneur en matières volatiles, les contaminants, la densité apparente et la taille des particules affectent les performances d'un procédé de gazéification.

#### **2.3.4.1 Composition élémentaire**

Il est observé que plus le ratio H/C de la matière gazéifiée est élevée, plus le ratio  $H_2/CO$  du syngaz augmente. Ainsi, la qualité du syngaz destiné à la valorisation moléculaire ou énergétique est améliorée (Cao et al., 2008). En contrepartie, la qualité du syngaz est réduite lorsque la matière gazéifiée contient une quantité importante d'oxygène puisque le ratio  $H_2/CO$  diminue (Basu, 2013).

#### **2.3.4.2 Pouvoir calorifique inférieur (PCI)**

Le PCI de la matière est la quantité d'énergie dégagée lorsqu'elle est complètement brûlée (vapeur d'eau considérée comme non condensée) (Basu, 2013). Ainsi, les rendements énergétiques des procédés de gazéification sont supérieurs lorsque des matières caractérisées par un PCI élevé sont gazéifiées.

#### **2.3.4.3 Teneur en humidité**

Les différents composés des matières résiduelles peuvent être séparés en deux catégories en fonction de leur teneur en humidité: les matières sèches et les matières humides. Les matières combustibles sèches telles que les plastiques, les textiles, le caoutchouc, le cuir et le bois sont caractérisés par une teneur en humidité de 1 à 10%. Les matériaux combustibles humides, tels que les résidus verts, les aliments et autres déchets organiques, contiennent généralement de 50 à 70% d'eau. Enfin, les matériaux secs non combustibles tels que les métaux, les verres et autres composés inorganiques ne contiennent aucune eau et sont considérés comme inertes (Themelis, Kim, & Brady, 2002).

Le taux d'humidité acceptable dépend du type de réacteur. En effet, puisque l'énergie nécessaire pour évaporer l'eau n'est pas récupérée, un taux d'humidité supplémentaire engendre d'importants coûts énergétiques (Basu, 2013). Par conséquent, afin de répondre aux critères d'humidité des réacteurs, les matériaux combustibles humides doivent être éliminés ou partiellement séchés avant d'entrer dans le procédé de gazéification.

#### **2.3.4.4 Teneur en cendres**

Les cendres sont principalement constituées de silice (Si), d'aluminium (Al), de fer (Fe) et de calcium (Ca) et peuvent contenir de petites quantités magnésium (Mg), de titane (Ti), de sodium (Na) et de potassium (K) (Basu, 2013). Puisque la présence de celles-ci dans le syngaz augmente considérablement les coûts associés au nettoyage en aval du procédé, il est conseillé de retirer la

fraction des matières non combustibles sèches (verres, métaux, etc.) (Bailie et al., 1997; Themelis et al., 2002; US Department of Energy, 2008).

#### **2.3.4.5 Teneur en matières volatiles**

La teneur en matières volatiles (provenant de l'analyse proximée) détermine directement la quantité de vapeurs condensables et non condensables libérées lorsque les matières résiduelles sont dévolatilisées (Basu, 2013). Alors, des matières résiduelles caractérisées par une teneur en matières volatiles élevée produisent une quantité plus importante de syngaz.

#### **2.3.4.6 Contaminants**

La présence de certains contaminants peut réduire la qualité du syngaz. En effet, puisque les matières résiduelles peuvent contenir des quantités importantes de soufre (S) et d'azote (N), le syngaz produit à partir de la gazéification des matières résiduelles peut contenir du sulfure d'hydrogène ( $H_2S$ ), du sulfure de carbone ( $COS$ ), du disulfure de carbone ( $CS_2$ ) et de l'ammoniac ( $NH_3$ ) (Sikarwar et al., 2016; US department of Energy, 2008). Ces gaz peuvent contribuer à la désactivation des catalyseurs utilisés dans la conversion en aval du gaz de synthèse (Sikarwar et al., 2016). De plus, le  $H_2S$  peut provoquer la corrosion des équipements. Les matières résiduelles peuvent contenir aussi de grandes quantités d'halogènes tels que le chlore (Cl), le brome (Br) et le fluor (F) et aussi de grandes quantités de métaux alcalins, tels que le sodium (Na) et de potassium (K) (Sikarwar et al., 2016). Ces halogènes et métaux alcalins contribuent aussi à la désactivation des catalyseurs utilisés lors de la conversion du syngaz (Sikarwar et al., 2016).

Puisque les matières résiduelles peuvent contenir des traces d'arsenic (As), de phosphore (P), ainsi que des traces de métaux volatils tels que le cadmium (Cd) et le mercure (Hg), il y a des risques d'empoisonnement du catalyseur (US department of Energy, 2008). Enfin, le syngaz produit à partir de la gazéification de matières résiduelles peut également contenir du tar et des particules (Sikarwar et al., 2016). La présence de tar peut entraîner un blocage de l'équipement alors que la présence des particules engendre un coût supplémentaire de nettoyage des gaz (Sikarwar et al., 2016).

#### **2.3.4.7 Densité apparente**

La densité apparente des particules est le rapport entre la masse d'une particule moyenne et son volume, comprenant le volume vide des pores internes. Cette mesure sert à représenter la porosité

d'une particule. La surface des pores à l'intérieur des particules influence grandement les transferts des gaz à l'intérieur et à l'extérieur de la particule (Souza-Santos, 2010). Des matières résiduelles à plus hautes densités apparentes offrent habituellement de meilleurs rendements en syngaz.

#### **2.3.4.8 Taille de particules**

La taille des particules de la matière alimentée au procédé a un impact direct sur le rendement en syngaz (Sikarwar et al., 2016). En effet, de plus petites particules ont une plus grande surface par unité de masse, et sont caractérisées par une plus grande taille de pores, facilitant ainsi les transferts de chaleur et de masse (Kumar, Jones, & Hanna, 2009). Il a été observé que de plus petites tailles de particules produisent un syngaz d'un meilleur PCI (Kumar et al., 2009; Sikarwar et al., 2016). Par conséquent, une alimentation respectant la taille de particules exigées par le type de réacteur est primordiale afin d'obtenir de bons transferts de chaleur et de masse. Afin d'améliorer la qualité du syngaz, le prétraitement, y compris l'élimination ou le déchiquetage/compactage des matières résiduelles de plus grandes tailles, devrait être envisagé avant le procédé de gazéification (US department of Energy, 2008).

#### **2.3.5 Types de gazogènes**

Plusieurs types de gazogènes ont été développés durant les dernières années. Parmi ceux-ci, il est possible de distinguer cinq principaux types de gazogènes: les lits fixes de configuration co-courants et contre-courants, les lits fluidisés à bulles ou circulants et les lits entraînés (Arena, 2012). Ces types gazogènes se différencient principalement selon (NNFCC & E4tech, 2009):

- La manière dont la matière est introduite dans le gazogène: soit par la partie supérieure du gazogène ou soit sur le côté
- La manière dont la matière circule dans le gazogène: soit par gravité ou soit par flux
- Le type d'oxydant: soit de l'oxygène pur, de l'air, de l'air enrichi ou de la vapeur d'eau
- La plage de température d'opération
- Les pressions d'opération supérieure ou inférieure à la pression atmosphérique

### 2.3.5.1 Lits fixes

Les procédés à lit fixe sont en général simple, robuste, peu coûteux et sont caractérisés par un haut taux de conversion (Basu, 2010a; Lamarche, 2011). Dans ce type de procédé, la matière résiduelle, supportée par une grille, forme un lit dense et se déplace vers le bas (Basu, 2010a). Des profils de concentrations et de température se dessinent à travers les lits fixes, formant ainsi quatre zones bien délimitées de séchage, pyrolyse, oxydation et réduction. Puisque le mélange et le transfert de chaleur à l'intérieur du lit sont plutôt limités, il est difficile d'obtenir une distribution uniforme de matière résiduelle, de température et de gaz au travers du réacteur. Ainsi, les matières résiduelles ont tendance à s'agglomérer et peuvent potentiellement former des agglomérats (Basu, 2010a). Il existe deux principaux types de gazéificateurs à lit fixe ou à lit mobile : à co-courants et à contre-courants. Ces deux types de lits fixes sont illustrés à la Figure 2-3 (Basu, 2010a).

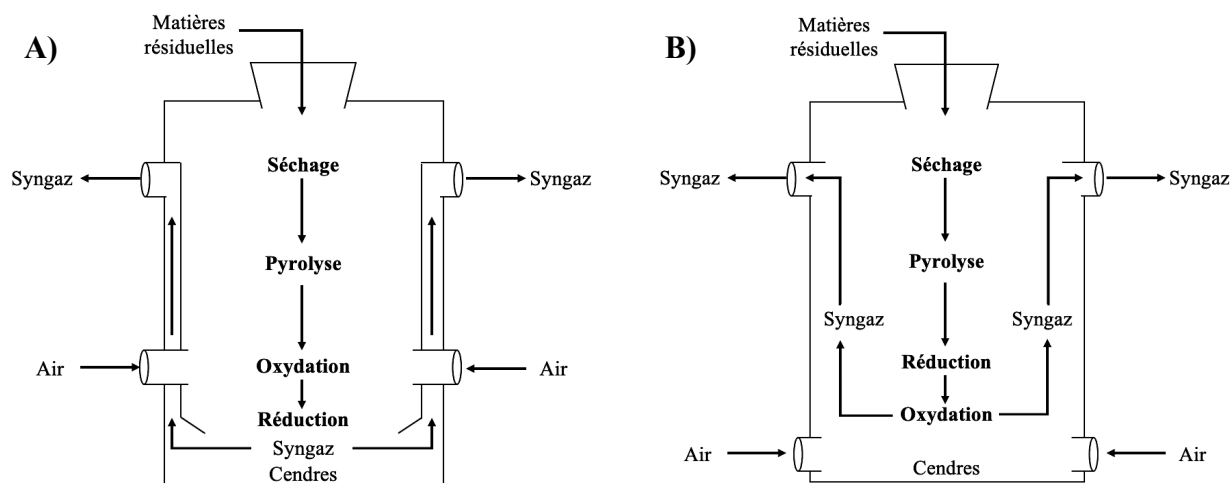


Figure 2-3 Configurations de lits fixes A) lit fixe à co-courants B) lit fixe à contre-courants (Basu, 2010a)

#### Lit fixe à co-courants

Dans un lit fixe à co-courants, les matières résiduelles sont insérées dans le haut du gazogène, alors que l'agent de gazéification est inséré sur le côté du gazogène. En raison d'une différence de pression, le syngaz s'écoule vers le bas et sort au travers du lit de cendres chaudes. L'agent de gazéification provenant d'un ensemble de buses, fixées en périphérie du gazogène, entre en contact avec les produits de la pyrolyse, créant ainsi une zone d'oxydation. Ensuite, les gaz descendants

passent au travers du lit de particules de char et réduisent le char en syngaz (zone de réduction). Les cendres sont entraînées avec le syngaz vers le bas du réacteur (Basu, 2010b).

Les lits fixes à co-courants sont adaptés aux matières résiduelles à faible teneur en cendres (maximum 6%), et humidité (maximum 25%) et d'une taille d'environ 100 mm de diamètre (Basu, 2010b). Puisque le syngaz sort par le bas du réacteur à de hautes températures (800-1400 °C), il contient peu de tar (environs 0.015-3.0 g/Nm<sup>3</sup>) (Basu, 2010b; Riazi & Chiaramonti, 2018). Le syngaz produit est caractérisé par un haut PCI (environs 4.5-5 MJ/Nm<sup>3</sup>) et contient peu de tar (Basu, 2010b). Les lits fixes à co-courants sont souvent combinés à des moteurs à combustion internes aspirant les gaz vers le fond du réacteur (Basu, 2010b). Puisque les gaz chauds n'entrent pas en contact direct avec les zones de séchage et de pyrolyse, il est nécessaire de récupérer la chaleur des gaz en faisant recirculer ceux-ci sur les côtés du réacteur (Riazi & Chiaramonti, 2018). De plus, étant donné que les cendres peuvent atteindre de hautes températures, des risques de fusion de celles-ci sont présents dans le bas du réacteur (Lamarche, 2011).

Les lits fixes à co-courants utilisés pour le traitement des matières résiduelles sont éprouvés à grandes échelles. Par exemple, la compagnie *JFE* au Japon opère une unité de gazéification à lit fixe à co-courants traitant entre 30 et 200 kilotonnes/an de matières résiduelles municipales et de CDD. La compagnie *Nippon Steel Engineering*, aussi au Japon, traite entre 30 et 230 kilotonnes/an de matières résiduelles municipales, de résidus d'incinération et de résidus industriels (Arena, 2012).

### **Lit fixe à contre-courants**

Dans les lits fixes à contre-courants, les matières résiduelles sont introduites dans la partie supérieure du gazogène alors que l'agent de gazéification pénètre dans la partie inférieure du lit à travers une grille ou un distributeur, traversant ainsi le lit de cendres chaud (Arena, 2012; Basu, 2010b). Le syngaz sort au sommet du gazogène alors que les cendres sont collectées dans la grille du fond (Arena, 2012). Cette configuration permet une circulation à contre-courants de la matière et des gaz. Les lits fixes à contre-courants sont adaptés à une alimentation caractérisée par une haute teneur en cendres (jusqu'à 25%), une forte teneur en humidité (jusqu'à 60%) et de 100 mm de diamètre (Basu, 2010b). Puisque les syngaz sortent en haut du gazogène, ils sont refroidis en entrant en contact avec la matière au gazogène. Ainsi, puisque ceux-ci sortent du gazogène à basse température, une grande quantité de tar est présente dans le syngaz (30 à 150 g/Nm<sup>3</sup>) (Basu, 2010a;



Riazi & Chiaramonti, 2018). De plus, les basses températures de sortie peuvent engendrer des risques de condensations du tar, causant ainsi des blocages dans le procédé (Lamarche, 2011).

Dans un lit fixe à contre-courants, l'oxydation se déroule dans le bas du réacteur, où une partie du char produit est brûlé, fournissant ainsi de la chaleur aux syngaz qui traversent les zones de réduction, de pyrolyse et de séchage pour se rendre dans le haut du gazogène (Riazi & Chiaramonti, 2018). Cette récupération interne d'énergie rend ce type de réacteur énergétiquement efficace. Produisant un syngaz caractérisé par un haut PCI (environ 5-6 MJ/Nm<sup>3</sup>) et contenant une grande quantité de tar, il est préférable de valoriser ce syngaz par combustion directe, nécessitant donc ni nettoyage et ni refroidissement (Basu, 2010b). En termes de traitement des matières résiduelles, le lit fixe à contre-courants est peu utilisé.

### **2.3.5.2 Lits fluidisés**

Les lits fluidisés sont caractérisés par une homogénéité de la température et des concentrations à travers le réacteur. Les lits fluidisés sont constitués de solides granulaires qui sont maintenus dans un état de semi-suspension (état fluidisé) par les gaz. Les agents de fluidification utilisés sont généralement des matériaux à base de silice ou d'alumine, ayant une capacité calorifique spécifique élevée et pouvant fonctionner à haute température (Riazi & Chiaramonti, 2018). En raison de l'uniformité de la température à travers le lit, les risques d'agglomération des matières résiduelles sont considérablement réduits. Les syngaz produits sont caractérisés par un contenu moyen de 10 g/Nm<sup>3</sup> en tar et contiennent une grande quantité de cendres et de carbone, nécessitant l'ajout de cyclone pour le nettoyage des gaz. Puisqu'une quantité importante de carbone est emportée avec les syngaz, le rendement de gazéification est réduit. Il existe deux principaux types de lits fluidisés : à bulles et à circulation. Ces deux types de lits fluidisés sont illustrés à la figure Figure 2-4 (Basu, 2010b; Lamarche, 2011).

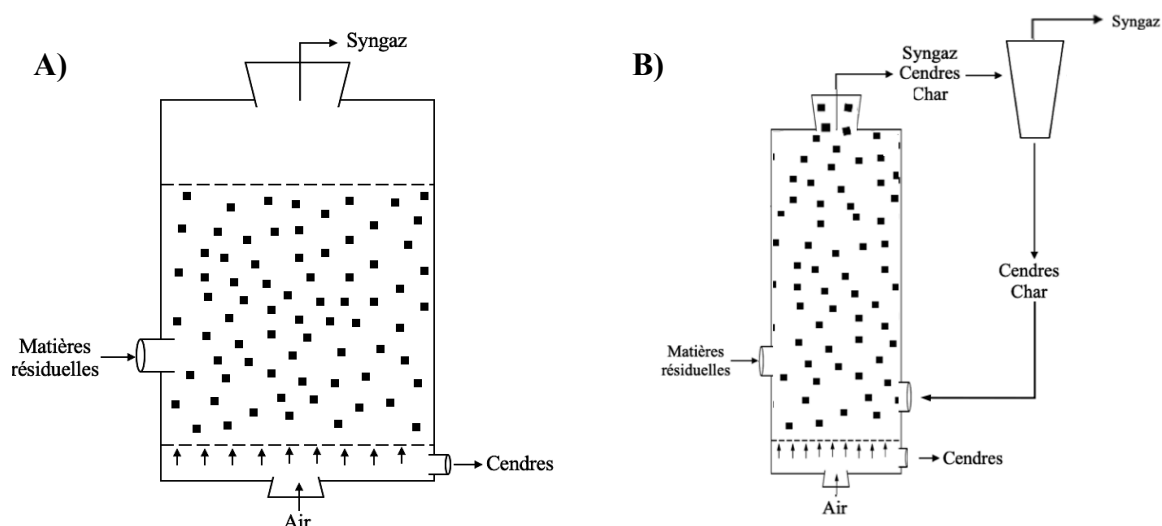


Figure 2-4 Configurations de lits fluidisés A) lit fluidisé à bulles B) lit fluidisé circulant (Basu, 2010b)

### Lit fluidisé à bulles

Dans un lit fluidisé à bulles, l'agent de gazéification est introduit dans le bas du réacteur, est soufflé vers le haut à travers une plaque à orifices et pénètre dans le lit de matériau inerte situé dans le bas du réacteur contenant les matières résiduelles à traiter (Arena, 2012). Les déchets sont généralement acheminés à l'aide d'un ou plusieurs points situés le long des parois latérales et une partie des cendres est évacuée par le fond du lit (Arena, 2012; Basu, 2010a). Les lits fluidisés à bulles sont adaptés aux matières résiduelles caractérisées par une teneur en cendres maximale de 25%, un taux d'humidité (jusqu'à 55%) et des tailles de particules maximales de 150 mm de diamètre (Arena, 2012; Basu, 2010a). Ces types de réacteurs sont sensibles à la distribution granulométrique des intrants. Une distribution uniforme est donc nécessaire (Lamarche, 2011). Puisque l'hydrodynamique joue un rôle crucial dans la conception et le fonctionnement d'un lit fluidisé, la conversion peut gravement être affectée par des problèmes de fluidisation (Arena, 2012). De plus, ce type de réacteur n'est pas très flexible concernant le contrôle du niveau du lit lors de variations de charges (Lamarche, 2011). Les lits fluidisés à bulles utilisés pour le traitement des matières résiduelles sont éprouvés à grandes échelles. Par exemple, la compagnie *Hitachi Zosen* au Japon traite entre 1 et 100 kilotonnes/an de matières résiduelles municipales et de carburants dérivés de déchets alors que la compagnie *Kobelco* aussi au Japon traite de 20 à 170 kilotonnes/an de matières résiduelles municipales (Arena, 2012).

### **Lit fluidisé circulant**

Lorsque la vitesse superficielle des gaz est considérablement supérieure à la vitesse terminale des solides, de grandes quantités de particules sont emportées. Ces mêmes particules, qui sont collectées par un cyclone, peuvent être renvoyées dans le bas du lit, afin d'atteindre un régime permanent. Ce type de lit fluidisé est appelé lits fluidisés circulants, où le terme « circulant » signifie que les systèmes de séparation et de retour des particules constituent des composants essentiels à la conception du réacteur. Dans un lit fluidisé circulant, les matières résiduelles sont alimentées par le côté, sont chauffées rapidement et dévolatilisées, puis réagissent avec l'agent de gazéification. La suspension de gaz et de particules monte le long du réacteur et pénètre dans le cyclone (Arena, 2012). Tout comme les lits fluidisés à bulles, les lits fluidisés circulant sont adaptés aux matières résiduelles caractérisées par des teneurs en cendres maximales de 25% et de haut taux d'humidité (jusqu'à 55%) (Arena, 2012; Basu, 2010a). Les lits fluidisés circulant sont en mesure de traiter des matières résiduelles de 100 mm de diamètres (Arena, 2012). Comparé au lit fluidisé à bulles, le lit fluidisé circulant est caractérisé par une plus grande tolérance concernant la granulométrie du carburant (Lamarche, 2011). Ils peuvent atteindre de grandes conversions (Arena, 2012). En termes de traitement des matières résiduelles, les lits fluidisés circulant sont aussi éprouvés à grandes échelles. Par exemple, la compagnie *Ebara Co. and Ube Industries Ltd* au Japon traite entre 10 et 60 kilotonnes/an de résidus de plastiques alors que la compagnie *Ebara TIFG* aussi au Japon traite de 30 à 135 kilotonnes/an de matières résiduelles municipales, de résidus d'automobiles broyés, de résidus de plastiques et de résidus industriels (Arena, 2012).

#### **2.3.5.3 Lits entraînés**

Dans les lits entraînés, la vitesse de fluidisation est si élevée que la vitesse des particules approche celle des gaz. Dans ces réacteurs, les matières résiduelles sont introduites par pulvérisation (Lamarche, 2011). Des températures entre 1200 et 1500 °C sont atteintes, produisant ainsi un gaz contenant une très faible quantité de tar (Lamarche, 2011). Ces hautes températures permettent aussi de vitrifier les cendres, les rendant ainsi inertes (Arena, 2012). Les lits entraînés sont en mesure de traiter des matières résiduelles d'une teneur en cendres maximale de 20% et d'un faible taux d'humidité (maximum 15%) (Arena, 2012). Ils sont aussi limités en termes de flexibilité, car la taille et le contenu énergétique des carburants doivent se situer dans des fourchettes très restreintes (Lamarche, 2011). En effet, en raison du faible temps de séjour dans le réacteur

(quelques secondes), le carburant doit être finement broyé (1mm de diamètre), ce qui représente d'importants coûts de prétraitement (Lamarche, 2011). Ces types de réacteurs sont donc rarement utilisés pour traiter les matières résiduelles. La Figure 2-5 illustre un lit entraîné (Basu, 2010b).

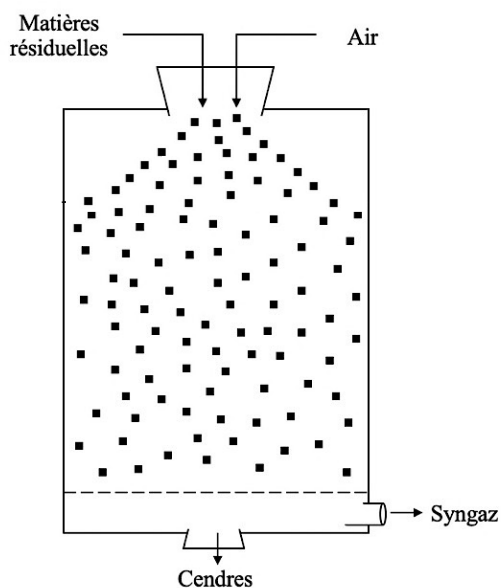


Figure 2-5 Configuration d'un lit entraîné (Basu, 2010b)

#### 2.3.5.4 Synthèse des modes de transfert

Le Tableau 2-2 présente un résumé des avantages et inconvénients de chacun des types de réacteurs. De plus, en ANNEXE A, une gamme d'unités de gazéification de matières résiduelles à travers le monde est présentée.

Tableau 2-2 Résumé des avantages et inconvénients des différents types de réacteurs de gazéification

Réacteurs	Avantages	Inconvénients
Lit fixe co-courants	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Construction simple, robuste peu coûteuse</li> <li>- Gaz relativement propre</li> <li>- Taux de conversion élevé</li> <li>- Produit un syngaz de haut PCI</li> <li>- Éprouvé à grandes échelles</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Distribution de masse et d'énergie hétérogène</li> <li>- Risques de formation d'agglomérat</li> <li>- Matières à faible taux d'humidité acceptées</li> <li>- Possibilités de fusion des cendres dans la grille du réacteur</li> <li>- Flexibilité limitée</li> </ul>
Lit fixe contre-courants	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Construction simple, robuste peu coûteuse</li> <li>- Énergétiquement efficace</li> <li>- Matières à haut taux d'humidité acceptées</li> <li>- Taux de conversion élevé</li> <li>- Produit un syngaz de haut PCI</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Distribution de masse et d'énergie hétérogène</li> <li>- Risques de formation d'agglomérat</li> <li>- Produit de grandes quantités de tar</li> <li>- Risques de condensation du tar</li> <li>- Peu adapté à la production d'électricité ou de molécules chimiques</li> <li>- Peu appliqué aux matières résiduelles</li> <li>- Flexibilité limitée</li> </ul>
Lit fluidisé à bulles	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Distribution de masse et d'énergie homogène</li> <li>- Faibles risques d'agglomération</li> <li>- Bon contact gaz-solide</li> <li>- Éprouvé à grandes échelles</li> <li>- Flexible pour des changements de composition</li> <li>- Matières à haut taux d'humidité acceptées</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Produit des quantités modérées de tar</li> <li>- Haut taux de particules dans les gaz</li> <li>- Perte de carbone avec les cendres</li> <li>- Sensible à la distribution granulométrique</li> <li>- Problèmes de fluidisation pouvant réduire les taux de conversions</li> <li>- Peu flexible pour des changements de débits</li> </ul>
Lit fluidisé circulant	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Distribution de masse et d'énergie homogène</li> <li>- Faibles risques d'agglomération</li> <li>- Bon contact gaz-solide</li> <li>- Éprouvé à grandes échelles</li> <li>- Flexible</li> <li>- Taux de conversion élevé</li> <li>- Moins sensible à la distribution granulométrique que le lit fluidisé</li> <li>- Matières à haut taux d'humidité acceptées</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Haut taux de particules dans les gaz</li> <li>- Perte de carbone avec les cendres</li> <li>- Produit des quantités modérées de tar</li> </ul>
Lit entraîné	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bon contact gaz-solide</li> <li>- Vitrification des cendres</li> <li>- Taux de conversion élevé</li> <li>- Gaz relativement propre</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Matières à faible taux d'humidité acceptées</li> <li>- Nécessite une alimentation caractérisée par une faible taille de particules</li> <li>- Peu appliqué aux matières résiduelles</li> <li>- Flexibilité très limitée</li> </ul>

### 2.3.6 Modèles de gazéification

La Figure 2-6 présente les quatre modèles de gazéification de matières résiduelles et de biomasse les plus présents dans la littérature.

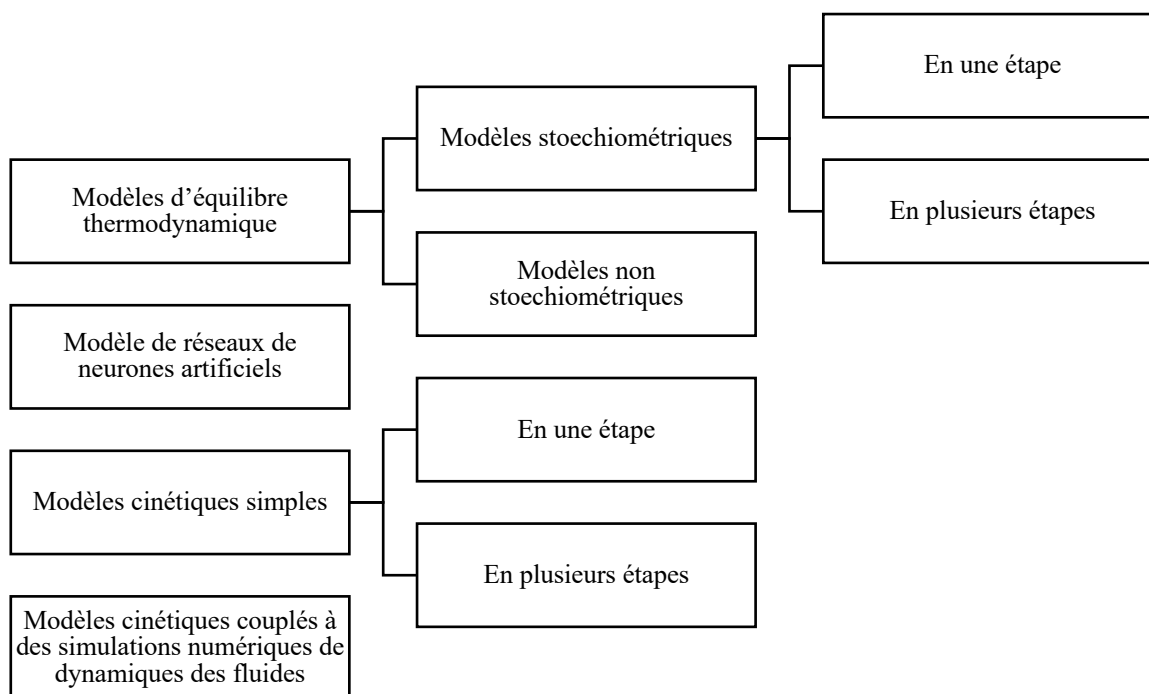


Figure 2-6 Modèles de gazéification présentés dans la littérature

Plusieurs auteurs utilisent une combinaison de ces différents types de modèles pour représenter les différentes étapes de la gazéification: séchage, pyrolyse, oxydation et réduction. Les prochaines sections présentent les caractéristiques de ces différents modèles.

#### 2.3.6.1 Modèles d'équilibre thermodynamique

Comme illustré à la Figure 2-6, les modèles d'équilibre thermodynamique regroupent les modèles stoechiométriques (en une étape ou en plusieurs étapes) et les modèles non stoechiométriques. Les hypothèses que les vitesses de réaction sont assez rapides et que le temps de résidence est assez long pour atteindre l'équilibre sont posées lorsqu'un modèle d'équilibre thermodynamique est utilisé. À l'état d'équilibre, où la composition des substances est la plus stable, le système est décrit par une entropie maximisée et une énergie libre de Gibbs minimisée (Basu, 2010b). Bien que l'équilibre thermodynamique soit rarement atteint dans les gazogènes, ce modèle fournit des prévisions raisonnables quant à la composition finale du syngaz en plus d'être en mesure de

capturer les effets des conditions opératoires. De plus, le modèle d'équilibre thermodynamique s'avère être utile lorsque les voies réactionnelles de gazéification sont inconnues ou peu détaillées (Pandey, Das, Pan, Leahy, & Kwapinski, 2016). Ainsi, ce type de modèle est très utilisé pour modéliser la gazéification des matières résiduelles.

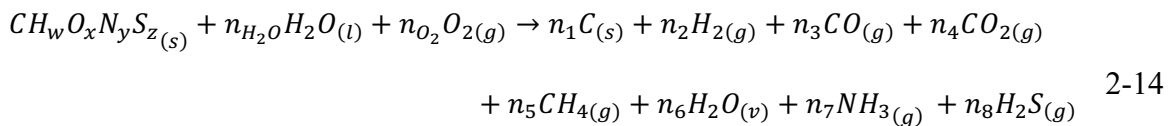
Cependant, ce modèle suppose un mélange parfait des substances et une température uniforme au sein du réacteur (Budhathoki, 2013). Bien qu'il soit en mesure de fournir des prédictions cohérentes, il n'est pas en mesure de prédire l'influence des paramètres hydrodynamiques tels que la vitesse, et l'influence des paramètres géométriques, tels que la hauteur du gazogène. En effet, lorsqu'un modèle thermodynamique est utilisé, le réacteur est considéré comme étant de zéro dimension (Budhathoki, 2013). De plus, ce modèle prédit avec moins de précision la composition des gaz de sortie lorsque la gazéification se déroule dans un environnement à basse température (<800 °C), puisque l'équilibre n'est possiblement pas atteint (réactions plus lentes) (Sharma, 2011). Cependant, ces modèles sont faciles à utiliser et convergent rapidement, faisant en sorte qu'ils peuvent servir de première approximation pour une modélisation (Pandey et al., 2016). Les modèles d'équilibre thermodynamique peuvent être modélisés par des méthodes stœchiométriques ou non stœchiométriques (Budhathoki, 2013).

#### **2.3.6.1.1 Modèles stœchiométriques**

Les modèles stœchiométriques d'équilibre thermodynamique peuvent être utilisés pour un procédé de gazéification en une seule étape ou pour un procédé de gazéification divisé en sous-modèles de séchage, pyrolyse, oxydation et réduction (Budhathoki, 2013).

##### **Modèles stœchiométriques en une seule étape**

Ce modèle incorpore toutes les réactions complexes de la gazéification en une seule réaction générale, présentée à l'équation 2-14 (Ferreira, Monteiro, Brito, & Vilarinho, 2019). Lorsque la gazéification se produit en une étape, le tar n'est pas modélisé.



Dans l'équation 2-14, la variable  $n_{H_2O}$  représente le nombre de kilomoles d'eau initialement contenue dans la matière carbonée et la variable  $n_{O_2}$  représente le nombre de kilomoles d'air nécessaire pour gazéifier la matière. Cette équation contient huit inconnus, soit les  $n_i$ . Afin de résoudre ce système, des bilans élémentaires sur le carbone, l'hydrogène, l'oxygène, l'azote et le soufre sont dressés initialement, comme présenté aux équations 2-15 à 2-19 (Ferreira et al., 2019):

$$\text{Bilan C : } n_1 + n_3 + n_4 + n_5 = 1 \quad 2-15$$

$$\text{Bilan H : } 2n_2 + 4n_5 + 2n_6 + 3n_7 + 2n_8 = w + 2n_{H_2O} \quad 2-16$$

$$\text{Bilan O : } n_3 + 2n_4 + n_6 = x + n_{H_2O} + 2n_{O_2} \quad 2-17$$

$$\text{Bilan N : } n_7 = y \quad 2-18$$

$$\text{Bilan S : } n_8 = z \quad 2-19$$

Par la suite, les constantes d'équilibre sont définies. Pour ce faire, il est nécessaire d'identifier avant tout les réactions indépendantes du système, car d'un point de vue mathématique, s'il existe un groupe de réactions dépendantes, le problème devient sur-spécifié et donc des erreurs de calcul peuvent s'en suivre. Les réactions sont dites dépendantes lorsque celles-ci peuvent être décrites par une combinaison d'au moins deux autres réactions (Ferreira et al., 2019). Alors, en prenant l'exemple de cinq réactions importantes de la gazéification, soit les réactions  $R_{R1}$ ,  $R_{R2}$ ,  $R_{R3}$ ,  $R_{R4}$  et  $R_{WG}$ , il est possible de constater que dix combinaisons sont possibles. Parmi ces combinaisons, huit sont indépendantes et deux sont dépendantes, soit les combinaisons des réactions  $R_{R1}$ ,  $R_{R2}$ ,  $R_{WG}$  et des réactions  $R_{R2}$ ,  $R_{R3}$  et  $R_{R4}$ . Alors, les trois constantes d'équilibre des réactions choisies ne doivent pas faire partie du même groupe de réactions dépendantes. Donc, les trois constantes d'équilibres ( $K_j$ ) choisies peuvent être celles des vitesses de réaction  $R_{WG}$ ,  $R_{R2}$  et  $R_{R3}$ , présentées aux équations 2-20, 2-21 et 2-22 (Ferreira et al., 2019), où  $P_i$  (Pa) représente les pressions partielles des substances  $i$ . Les constantes d'équilibre peuvent être calculées à l'aide de l'équation 2-23, où  $R$ ,  $T$  et  $\Delta G^\circ_{f,T}$  représente la constante des gaz parfaits (J/kmol.K), la température d'opération (K) et l'énergie libre de Gibbs standard total (J).

$$K_{WG,eq} = \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{P_{CO} P_{H_2O}} \quad 2-20$$



$$K_{R2,eq} = \frac{P_{CO}P_{H_2}}{P_{H_2O}} \quad 2-21$$

$$K_{R3,eq} = \frac{P_{CH_4}}{(P_{H_2})^2} \quad 2-22$$

$$\ln K_{j,eq} = \frac{-\Delta G_{f,T}^\circ}{RT} \quad 2-23$$

Les cinq équations des bilans élémentaires et les trois constantes d'équilibre permettent de résoudre les huit inconnus du système, pour ainsi obtenir la composition du syngaz final à une température donnée. Enfin, en supposant un procédé de gazéification adiabatique, le bilan d'énergie du système, présenté à l'équation 2-24, produit un nouvel ensemble d'équations permettant de déterminer la température finale du système. Dans cette équation,  $\Delta h_{f,i}^\circ$  et  $\Delta h_{298}^T$  représente la chaleur de formation (J/kmol) et la chaleur sensible (J/kmol) des substances  $i$ , respectivement (Ferreira et al., 2019). Les modèles stœchiométriques sont souvent résolus en posant une température initiale et en itérant jusqu'à ce que la température posée soit égale à la température calculée à l'aide de l'équation 2-24 (Ferreira et al., 2019).

$$\sum_i n_i (\Delta h_{f,i}^\circ + \Delta h_{298}^T)_{i,Réactifs} = \sum_i n_i (\Delta h_{f,i}^\circ + \Delta h_{298}^T)_{i,Produits} \quad 2-24$$

Un modèle stœchiométrique en une seule étape est utilisé dans les travaux de Arafat & Jijakli (2013) pour modéliser la gazéification de différents flux de matières résiduelles, tels que des papiers, des plastiques, des textiles, du bois, des résidus alimentaires et des résidus verts, tous représentés par des molécules types ( $CH_wO_xN_yS_z$ ). Il est démontré que la gazéification des plastiques et des textiles produit un syngaz à haut PCI alors que les résidus verts produisent un syngaz à faible PCI. Dans les travaux de Lee, Chung, & Ingley (2014), les rendements de quatre différents flux de matières résiduelles (bois, plastiques, caoutchouc et mélange de matières résiduelles) représentés par des molécules types sont étudiés avec un modèle stœchiométrique en une seule étape représentant la gazéification à vapeur d'eau. Il est démontré que le plastique ainsi que le caoutchouc produisent un syngaz à haut PCI.

### Modèles stœchiométriques en plusieurs étapes

Afin de capturer les effets du gradient de température des différentes zones du gazogène, les sous-modèles stœchiométriques sont utilisés, où chaque zone de la gazéification, soit la zone de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction sont modélisées. La composition des produits de sortie du premier sous-modèle devient la composition des produits d'entrée du deuxième sous-modèle et ainsi de suite. Comme illustré à la Figure 2-7, il existe plusieurs combinaisons de sous-modèles dans la littérature, dépendamment des exigences du modèle (Budhathoki, 2013). Il est à noter que l'ordre des zones est sujet à changer, dépendamment du type de réacteur sélectionné. L'approche de résolution de chaque sous-modèle est le même que celle du modèle d'équilibre thermodynamique en une seule étape.

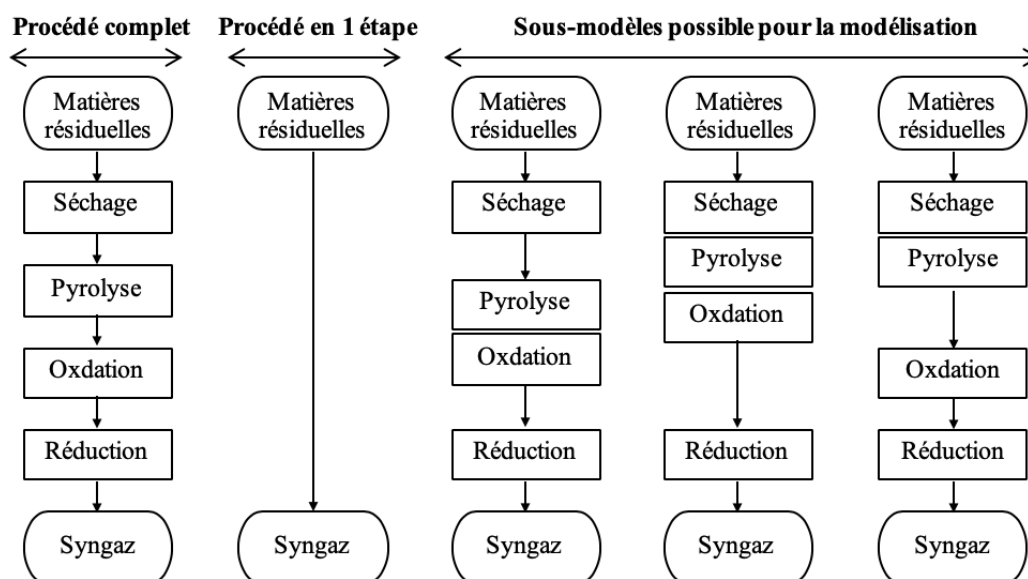
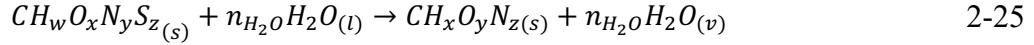


Figure 2-7 Configurations possibles des modèles d'équilibre thermodynamique et des modèles cinétiques (Budhathoki, 2013)

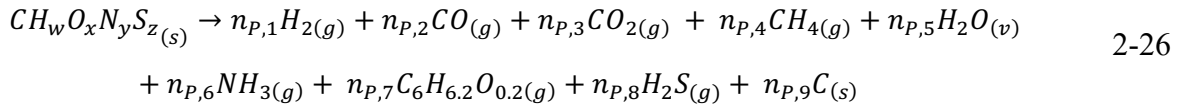
Dans un premier temps, l'eau contenue dans les matières résiduelles est évaporée, comme démontré à l'équation 2-25. Ensuite, les matières résiduelles sèches sont dévolatilisées en char,  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$  et en tar ( $C_6H_{6.2}O_{0.2}$ ), comme démontré à l'équation 2-26. Les gaz ainsi que le char produit durant la pyrolyse sont oxydés avec un ratio sous-stœchiométrique d'air (équation 2-27). Finalement, les produits de l'oxydation sont réduits dans la zone de réduction, présentée à l'équation 2-28. Assumant un réacteur adiabatique, un bilan d'énergie global peut être fait en prenant en considération les réactifs de la zone de séchage et les produits de la zone de réduction,

comme démontré à l'équation 2-29. La température finale de la zone de réduction peut ainsi être calculée (Budhathoki, 2013).

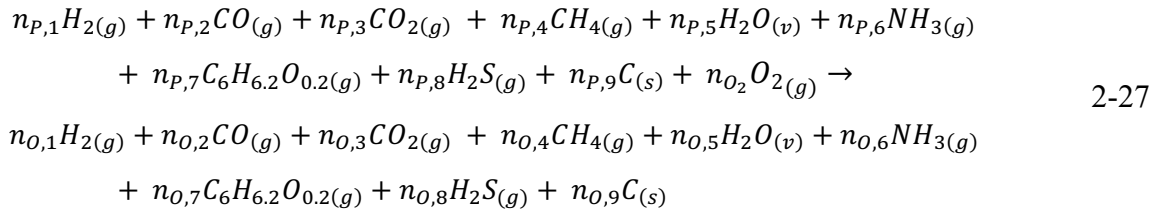
**Sous-modèle de séchage :**



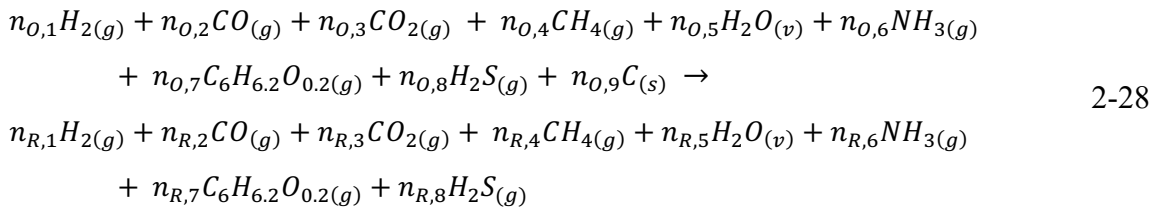
**Sous-modèle de pyrolyse :**



**Sous-modèle d'oxydation :**



**Sous-modèle de réduction :**



**Bilan d'énergie général :**

$$\sum_i n_i(\Delta h_{f,i}^\circ + \Delta h_{298}^T)_{i,Réactifs} = \sum_i n_i(\Delta h_{f,i}^\circ + \Delta h_{298}^T)_{i,Produits} \quad 2-29$$

Cependant, le fait de représenter chaque zone par une seule réaction peut amener des incertitudes (Budhathoki, 2013). En effet, en prenant l'exemple de la pyrolyse, la quantité de tars produits

dépend grandement de la température. Il a été estimé qu'à des températures entre 800 et 1000 K, la quantité de tar produite converge vers zéro (Sharma, Ravi, & Kohli, 2006). De plus, en réduisant la zone d'oxydation en une seule réaction des incertitudes peuvent aussi être engendrées (Budhathoki, 2013).

Dans les travaux de Sharma (2011) sur la gazéification de la biomasse, une approche heuristique faisant intervenir différentes réactions d'oxydation est présentée. Ainsi, au lieu de représenter l'oxydation en une seule réaction, différentes réactions d'oxydation sont utilisées, ce qui permet de mieux modéliser cette zone. Dans cette approche, les produits de la pyrolyse sont autorisés à réagir avec l'oxygène disponible dans un ordre décroissant défini par les différentes vitesses de réaction d'oxydation (voir Tableau 2-6) (Sharma, 2011). Ainsi, puisque l'oxydation de l'hydrogène est beaucoup plus rapide que les autres réactions d'oxydation, ce dernier est complètement oxydé dans un premier temps. Ensuite, s'il reste assez d'oxygène, le monoxyde de carbone est complètement oxydé dans un deuxième temps et ainsi de suite. L'ordre des réactions est décrit comme suit :

- 1) Oxydation de l'hydrogène ( $R_{O4}$ )
- 2) Oxydation du monoxyde de carbone ( $R_{O2}$ )
- 3) Oxydation du méthane ( $R_{O3}$ )
- 4) Oxydation simultanée du char et du tar ( $R_{O1}$  et  $R_{O5}$ )

Lorsqu'il ne reste plus d'oxygène, l'équilibre des substances impliquées dans la réaction de *Water-Gas Shift* ( $R_{WG}$ :  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$ ) est calculée avec un modèle thermodynamique stœchiométrique. Cette approche heuristique proposée dans les travaux de Sharma (2011) permet donc de calculer rapidement les produits de l'oxydation, tout en gardant une précision quant à l'ordre des réactifs oxydés. À noter que dans cette étude, seule l'étape d'oxydation est représentée par un sous-modèle stœchiométrique. L'étape de pyrolyse et de réduction est modélisée par des cinétiques de réactions.

### **2.3.6.1.2 Modèles non stœchiométriques**

La méthode d'équilibre non stœchiométrique implique la minimisation de l'énergie libre de Gibbs, en absence de toute réaction chimique spécifique outre que la réaction de gazéification globale. Ce modèle requiert donc uniquement en entrée la composition élémentaire des matières gazéifiées (C,

H, O, N, S) et la température d'opération globale. Les modèles non stœchiométriques sont adaptés aux systèmes comprenant une série de réactions inconnues (Budhathoki, 2013).

La fonction objective à minimiser est celle de l'énergie libre de Gibbs,  $\Delta G_{f,T}^\circ$ , des  $N$  substances ( $i = 1, \dots, N$ ) produites lors de la gazéification, où  $\Delta G_{f,i}^\circ$  (J) représente l'énergie libre de Gibbs standard des substances  $i$  à la pression et température normale (Brauner, 2016):

$$\min_{n_i} \frac{\Delta G_{f,T}^\circ}{RT} = \sum_{i=1}^N n_i \left( \frac{\Delta G_{f,i}^\circ}{RT} + \ln \frac{n_i}{\sum n_i} \right) \quad 2-30$$

L'équation 2-30 doit être résolue pour des valeurs de  $n_i$  minimisant l'énergie libre de Gibbs,  $\Delta G_{f,T}^\circ$ , tout en gardant un bilan global élémentaire cohérent. Les contraintes du système d'équations (équations 2-15 à 2-19) sont présentées aux équations 2-31 à 2-37 (Brauner, 2016).

$$\text{Bilan C :} \quad g_1 = n_1 + n_3 + n_4 + n_5 - 1 = 0 \quad 2-31$$

$$\text{Bilan H :} \quad g_2 = 2n_2 + 4n_5 + 2n_6 + 3n_7 + 2n_8 - w - 2n_{H_2O} = 0 \quad 2-32$$

$$\text{Bilan O :} \quad g_3 = n_3 + 2n_4 + n_6 - x - n_{H_2O} - 2n_{O_2} = 0 \quad 2-33$$

$$\text{Bilan N :} \quad g_4 = n_7 - y = 0 \quad 2-34$$

$$\text{Bilan S :} \quad g_5 = n_8 - z = 0 \quad 2-35$$

Ces cinq contraintes peuvent être introduites dans la fonction objective en utilisant des Multiplicateurs de Lagrange :  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$  et  $\lambda_5$ . La fonction objective modifiée est présentée à l'équation 2-36 (Brauner, 2016).

$$\min_{n_i, \lambda_e} F = \sum_{i=1}^N n_i \left( \frac{\Delta G_{f,i}^\circ}{RT} + \ln \frac{n_i}{\sum n_i} \right) + \sum_{e=1}^5 \lambda_e g_e \quad 2-36$$

Le minimum de cette fonction est atteint à un point particulier lorsque toutes les dérivées partielles de  $F$  par rapport à  $n_i$  et  $\lambda_e$  sont nulles. La dérivée partielle de  $F$  par rapport à  $n_4$ , par exemple, est présentée à l'équation 2-37 (Brauner, 2016). Les autres dérivées partielles de  $F$  par rapport à  $n_i$  et  $\lambda_e$  peuvent être obtenues de manière similaire. En posant les dérivées partielles de  $F$  par rapport au

sept  $n_i$  et quatre  $\lambda_e$  inconnus égaux à zéro, un système de 11 équations, 11 inconnus est dressé. Il est donc possible de résoudre pour les valeurs de  $n_i$  et  $\lambda_e$  (Brauner, 2016).

$$\frac{\partial F}{\partial n_4} = \frac{\Delta G_{f,4}^\circ}{RT} + \ln \frac{n_4}{\sum n_i} + \lambda_1 + 2\lambda_3 = 0 \quad 2-37$$

Un modèle non stœchiométrique est utilisé dans les travaux de Xu, Jin, & Cheng (2017) pour modéliser la gazéification de différents flux de matières résiduelles, tels que les papiers, les plastiques sans chlore, les plastiques avec chlore (chlorure de polyvinyle, PVC), les textiles, le caoutchouc, les résidus alimentaires et les résidus verts, tous représentés par des molécules types. Les effets de la température de la vapeur d'eau, du ratio de vapeur d'eau et les effets des différents types de matières résiduelles sur le rendement en syngaz, sur la température du réacteur et sur le PCI du syngaz sont étudiés. De plus, les effets des matières inertes tels que le verre ( $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{CaO} \cdot 6\text{SiO}_2$ ), le sable ( $\text{SiO}_2$ ) et le métal ( $\text{Fe} \cdot \text{Cu}$ ) sont analysés. Il est observé que l'ajout de ces matières inertes affecte peu le rendement en syngaz, mais réduit la température d'opération, puisqu'une partie de l'énergie est utilisée pour chauffer ces matières inertes.

### 2.3.6.2 Modèles de réseaux de neurones artificiels (ANN)

Contrairement aux autres modèles, les modèles de réseaux de neurones artificiels (en anglais « *Artificial Neural Networks (ANN)* ») ne sont pas basés sur la modélisation des phénomènes physiques du réacteur (Pandey et al., 2016). Les modèles de neurones artificiels sont composés d'une couche d'entrée, d'une couche cachée et d'une couche de sortie de neurones (Patra & Sheth, 2015). À l'aide de régression non linéaire, les neurones cachés mémorisent la cartographie arbitraire des données d'entrées et de sorties fournies au système. Alors, lorsque les neurones de la couche d'entrée transmettent des signaux aux neurones cachés, ces derniers sont en mesure de prédire les sorties du système par régressions non linéaires mémorisées (Patra & Sheth, 2015). La Figure 2-8 représente un système de neurones, composé de la couche d'entrée, de la couche cachée et de la couche de sortie (Basu, 2010b). Les formations des réseaux peuvent être réalisées avec le logiciel *Statistical Neural Networks* (Pandey et al., 2016).

Ainsi, en fournissant une panoplie de données sur différentes compositions de syngaz produits à partir de différentes conditions d'opérations et d'alimentation, le modèle est en mesure de prédire

la composition du syngaz produit à partir de nouvelles conditions d'opérations et d'alimentations fournies au modèle. Ce modèle possède l'avantage de ne pas demander une compréhension approfondie du procédé de gazéification. C'est donc pourquoi ce modèle est très utilisé pour modéliser la gazéification des matières résiduelles.

Cependant, avec l'utilisation de ce modèle, la fiabilité des résultats peut être affectée lorsque des conditions d'opérations et d'alimentations se situant à l'extérieur des limites des données utilisées pour la construction du modèle sont sélectionnées. De plus, la performance de ces modèles dépend uniquement de la précision des liens formés entre les neurones, et donc dépend aussi de la qualité des informations fournies au système. Donc, afin de former des liens rigoureux entre les neurones, un grand nombre de données expérimentales doit être fourni au système afin de calibrer et d'évaluer les paramètres des neurones (Patra & Sheth, 2015).

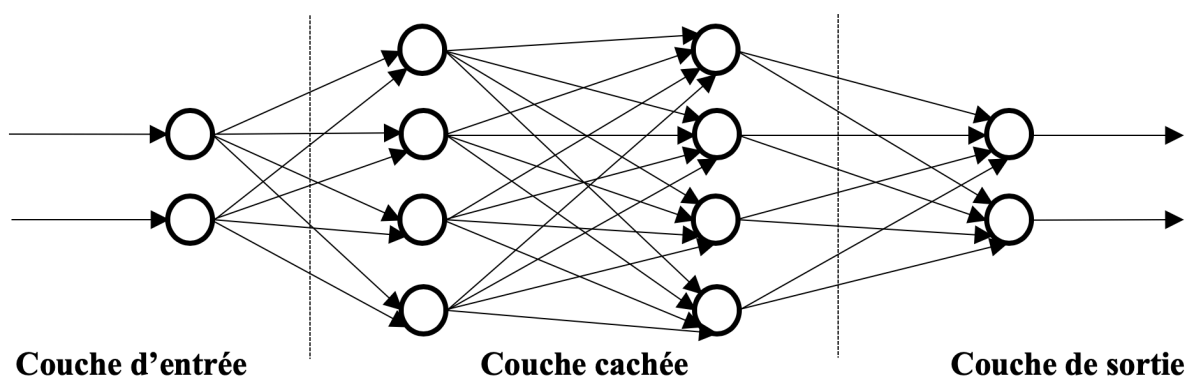


Figure 2-8 Système de neurones composé de la couche d'entrée, de la couche cachée et de la couche de sortie (Basu, 2010b)

Dans les travaux de Pandey, Das, Pan, Leahy, & Kwapinski (2016), un modèle ANN représentant la gazéification de matières résiduelles dans un lit fluidisé à bulles est présenté. Ce modèle est constitué de neuf valeurs d'entrées (C, H, O, N, S, humidité, cendres, ratio d'oxygène, température), fournissant trois valeurs de sorties (PCI du syngaz, PCI du syngaz + contaminant, rendement de syngaz). Pour développer le modèle, 67 ensembles de données d'entrées/sorties ont été utilisés, dont 70% ont été utilisés pour entraîner les neurones et 30% ont été utilisés pour tester et valider le modèle. Il a été démontré que ce modèle est en mesure de prédire des résultats semblables aux données expérimentales utilisées pour la validation.

### 2.3.6.3 Modèles cinétiques simples

Comme illustré à la Figure 2-6, les modèles cinétiques peuvent être utilisés seuls ou peuvent être combinés à des simulations numériques de dynamiques des fluides. Bien qu'étant plus complexes que les modèles d'équilibre thermodynamiques, les modèles cinétiques sont mathématiquement plus précis. En effet, contrairement aux modèles thermodynamiques, les modèles cinétiques peuvent être utilisés pour des systèmes à basse température et sont en mesure de capturer les effets d'un profil de température, et ce, pour un temps de séjour fini dans un volume fini (Sikarwar et al., 2016). Les paramètres tels que les vitesses de réaction, la hauteur du réacteur et les vitesses des produits sont prises en compte dans ces modèles (Budhathoki, 2013). De plus, ils peuvent être jumelés à des modélisations hydrodynamiques afin de mieux décrire les phénomènes se produisant dans le réacteur (Sikarwar et al., 2016).

Cependant, bien que de grands progrès aient été accomplis au cours des dernières décennies, les voies cinétiques et les constantes de vitesse de réaction ne sont pas encore parfaitement comprises (Sikarwar et al., 2016). Il est donc d'autant plus difficile de formuler les voies réactionnelles de molécules plus complexes telles que les matières résiduelles (Budhathoki, 2013; Sikarwar et al., 2016). Dans la littérature, les quatre zones de gazéification peuvent être modélisées simultanément dans un réacteur global ou peuvent être séparées en sous-modèles cinétiques de séchage, pyrolyse, oxydation et réduction. Ces types de modèles sont plutôt utilisés pour représenter la gazéification de la biomasse.

#### 2.3.6.3.1 Modèles cinétiques en une étape

Lorsqu'un modèle cinétique en une seule étape est employé, les réactions cinétiques des zones de séchage, pyrolyse, oxydation et réduction sont évaluées simultanément pour toute la hauteur du réacteur. Cependant, dépendamment de la température, certaines cinétiques apparaissent comme étant dominantes, créant ainsi des similis zones de séchage, pyrolyse, oxydation et réduction. Les vitesses de réaction sont présentées dans le Tableau 2-3 alors que les valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels des coefficients de vitesse  $k_j$  sont présentés dans le Tableau 2-4 (Tinaut et al., 2008).



Tableau 2-3 Vitesses de réaction (kmol/m<sup>3</sup>s) des différentes réactions impliquées dans la gazéification globale (Tinaut et al., 2008)

Réactions	Vitesses de réaction (kmol/m <sup>3</sup> s)	
Rs: $H_2O_{(l)} \xrightarrow{k_D} H_2O_{(v)}$	$k_S [C_{H_2O,l}]$	2-38
Rp: $CH_xO_yN_z \xrightarrow{k_{P1}} Volatiles$ $\xrightarrow{k_{P2}} Tar$ $\xrightarrow{k_{P3}} Char$	$k_{P1} [C_{CH_xO_yN_z}]$	2-39
	$k_{P2} [C_{CH_xO_yN_z}]$	2-40
	$k_{P3} [C_{CH_xO_yN_z}]$	2-41
RO1: $C + 0.5O_2 \rightarrow CO$	$a_c \left( \frac{M_{char}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{k_{O1} \cdot k_{m,O1}}{k_{O1} + k_{m,O1}} \right) [C_{O_2}]$	2-42
RO2: $CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$	$k_{O2} [C_{CO}] [C_{O_2}]^{0.25} [C_{H_2O,v}]^{0.5}$	2-43
RO3: $CH_4 + 1.5O_2 \rightarrow CO + 2H_2O_{(v)}$	$k_{O3} T [C_{O_2}] [C_{CH_4}]^{0.5}$	2-44
RO4: $H_2 + 0.5O_2 \rightarrow H_2O_{(v)}$	$k_{O4} [C_{O_2}] [C_{H_2}]$	2-45
RO5: $C_6H_{6.2}O_{0.2} + 2.9O_2 \rightarrow 6CO + 3.1H_2$	$k_{O5} T P^{0.3} [C_{O_2}] [C_{Tar}]^{0.5}$	2-46
RR1: $C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$a_c \left( \frac{M_{char}}{M_{CO_2}} \right) \left( \frac{k_{R1} k_{m,CO_2}}{k_{R1} + k_{m,CO_2}} \right) [C_{CO_2}]$	2-47
RR2: $C + H_2O_{(v)} \rightarrow CO + H_2$	$a_c \left( \frac{M_{char}}{M_{H_2O}} \right) \left( \frac{k_{R2} k_{m,H_2O}}{k_{R2} + k_{m,H_2O}} \right) [C_{H_2O}]$	2-48
RR3: $C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$0.5 a_c \left( \frac{M_{char}}{M_{H_2}} \right) \left( \frac{k_{R3} k_{m,H_2}}{k_{R3} + k_{m,H_2}} \right) [C_{H_2}]$	2-49
RR4: $CH_4 + H_2O_{(v)} \rightarrow CO + 3H_2$	$k_{R4} [C_{CH_4}] [C_{H_2O,v}]$	2-50
RR5: $C_6H_{6.2}O_{0.2} + 5.8H_2O_{(v)} \rightarrow 6CO + 8.9H_2O$	$k_{R5} [C_{Tar}]^{0.25} [C_{H_2O,v}]^{1.75}$	2-51

Tableau 2-4 Valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels des coefficients de vitesse  $k_j$  des différentes réactions impliquées dans la gazéification globale (Tinaut et al., 2008)

$k_j$	$A_j$	Unités de $A_j$	$E_j/R$
$k_S$	$5.13 \times 10^{10}$	1/s	$1.03 \times 10^4$
$k_{P1}$	$1.44 \times 10^4$	1/s	$1.03 \times 10^4$
$k_{P2}$	$4.13 \times 10^6$	1/s	$1.35 \times 10^4$
$k_{P3}$	$7.38 \times 10^5$	1/s	$1.28 \times 10^4$
$k_{O1}$	$1.7T$	m/s	$1.05 \times 10^4$
$k_{O2}$	$7.07 \times 10^{19}$	$m^{2.25}/kmol^{0.75}s$	$2.0 \times 10^4$
$k_{O3}$	$2.9 \times 10^8$	$m^{1.5}/kmol^{0.5}K.s$	$9.6 \times 10^3$
$k_{O4}$	$1.0 \times 10^{14}$	$m^3/kmol.s$	$5.0 \times 10^3$
$k_{O5'}$	59.8	$m^{1.5}/kmol^{1.5}K.Pa^{0.3}.s$	$1.22 \times 10^4$
$k_{R1}$	$3.42T$	m/s	$1.6 \times 10^4$
$k_{R2}$	$1.67k_{R1}$	m/s	$1.6 \times 10^4$
$k_{R3}$	$1.0 \times 10^{-3} k_{R1}$	m/s	$1.6 \times 10^4$
$k_{R4}$	$3.0 \times 10^6$	$m^3/kmol.s$	$4.3 \times 10^3$
$k_{R5}$	$7.0 \times 10^4$	$m^3/kmol.s$	$2.0 \times 10^3$

Dans la littérature, les modèles cinétiques en une seule étape sont habituellement modélisés avec le « *Shrinking Core Model* ». Ce modèle est utilisé pour capturer les effets de la température sur les réactions gaz-solide. En effet, à haute température, la vitesse de réaction est beaucoup plus rapide que la vitesse de diffusion des gaz dans la particule et, par conséquent, tous les réactifs sont consommés dans la couche externe de la particule, empêchant ainsi la diffusion des gaz à l'intérieur de celle-ci (Basu, 2010b). Comme la vitesse de réaction est très rapide, la réaction globale est contrôlée par la diffusion. À l'inverse, à basse température, la vitesse de réaction est beaucoup plus lente que la vitesse de diffusion, permettant ainsi aux gaz de pénétrer dans les pores de la particule (Basu, 2010b). Comme la cinétique est lente, ce type de régime est contrôlé par la cinétique. Le *Shrinking Core Model* est utilisé pour modéliser ces différents régimes, en prenant la taille de particule comme paramètre principal d'entrée.

Le *Shrinking Core Model* est décrit à l'équation 2-52, où  $k_j$ ,  $C_i$ ,  $a_c$  et  $k_{m_i}$  représentent les coefficients de vitesses (m/s) des réactions hétérogènes présentées dans le Tableau 2-3, les concentrations (kmol/m<sup>3</sup>), la surface volumétrique des particules (1/m) et le coefficient de transfert massique (m/s) des substances  $i$  (O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>), respectivement (Di Blasi, 2000).

$$r_j = a_c \frac{C_i}{\left(\frac{1}{k_{m_i}}\right) + \left(\frac{1}{k_j}\right)} \quad 2-52$$

L'équation pour calculer la surface volumétrique des particules ( $a_c$ ) est présentée à l'équation 2-53, où  $\varepsilon$  et  $d_p$  représentent la fraction de vide dans le lit et le diamètre des particules (m) (Di Blasi, 2000).

$$a_c = \frac{6(1 - \varepsilon)}{D_p} \quad 2-53$$

Le coefficient de transfert de masse  $k_{m_i}$  est défini à l'équation 2-54, où  $D_i$  et  $Sh_i$  représentent le coefficient de diffusivité des substances  $i$  dans la couche limite (m<sup>2</sup>/s) et le nombre de *Sherwood* obtenu avec une corrélation des nombres de *Reynold* et *Schmidt* pour les substances  $i$  (Fogler, 2016).

$$k_{m_i} = \frac{D_i}{D_p} Sh_i \quad 2-54$$

Le *Shrinking Core Model* est utilisé dans les études de Di Blasi & Branca (2013) et de Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo (2008) afin de représenter la gazéification de la biomasse. Cependant, ce modèle est peu populaire pour représenter la gazéification des matières résiduelles dans la littérature.

#### 2.3.6.3.2 *Sous-modèle cinétique de séchage*

Afin de capturer les effets de la température sur le rendement de séchage, des modèles cinétiques sont utilisés. Un modèle cinétique de séchage typique est présenté à l'équation 2-55, où  $r_s$ ,  $A_s$ ,  $E_s$ ,  $T_s$  et  $C_{H_2O(l)}$  représentent le taux d'évaporation ( $\text{kmol/m}^3.\text{s}$ ), le facteur pré-exponentiel de séchage ( $1/\text{s}$ ), l'énergie d'activation de l'évaporation de l'eau ( $\text{J/kmol}$ ), la température de séchage ( $\text{K}$ ) et la concentration en eau ( $\text{kmol/m}^3$ ), respectivement (Salem & Paul, 2018).

$$r_s = A_s \exp\left(-\frac{E_s}{RT_s}\right) C_{H_2O(l)} \quad 2-55$$

Dans l'étude de Salem & Paul (2018), des sous-modèles cinétiques pour l'étape de séchage, de pyrolyse et de réduction sont utilisés, alors qu'un sous-modèle stœchiométrique est utilisé pour l'étape d'oxydation. Dans cette étude, la biomasse est séchée à une température constante de 400 K, dans un lit fixe à co-courants.

#### 2.3.6.3.3 *Sous-modèle cinétique de pyrolyse*

Lorsque l'eau est évaporée, la matière première est transformée en matières volatiles, en tar et char (Sharma, 2011). Le processus de dévolatilisation décrit par un modèle cinétique est présenté à l'équation 2-56, où  $m_0$ ,  $m_\infty$ ,  $X$  et  $\omega$  représentent la masse de la matière première à  $t = 0$  (kg), la masse de la matière première à  $t = \infty$  (kg), la conversion et l'ordre de réaction, respectivement (Grammelis, Basinas, Malliopoulou, & Sakellaropoulos, 2009; Gupta & Bhaskaran, 2018). La constante de vitesse de réaction est exprimée par la vitesse de réaction d'Arrhenius.

$$-\frac{dm}{dt} = (m_0 - m_0) \cdot A_p \exp\left(\frac{-E_p}{RT_p}\right) (1 - X)^\omega \quad 2-56$$

Dans la littérature, il existe plusieurs modèles cinétiques de pyrolyse, tels que (Gupta & Bhaskaran, 2018; Sheth & Babu, 2006) :

- Le modèle global en une étape;
- Le modèle à réactions multiples à une étape;
- Le modèle semi-global à deux étapes.

Ces modèles de pyrolyse sont présentés dans le Tableau 2-5, où  $n$  représente le nombre de moles et  $k_p$  représente la constante de vitesse cinétique constante (Di Blasi, 2000; Gupta & Bhaskaran, 2018; Sheth & Babu, 2006). Dans le modèle global en une étape, la pyrolyse est considérée comme une réaction, où les matières volatiles, le tar et le char sont produits simultanément (Gupta & Bhaskaran, 2018). En revanche, dans le modèle à réactions multiples à une étape, la pyrolyse est représentée par plusieurs réactions compétitrices simultanées. Enfin, dans le modèle semi-global à deux étapes, la pyrolyse est considérée comme une réaction à deux étapes, dans laquelle le produit final (tar primaire) de la première réaction produit un tar secondaire (Sheth & Babu, 2006).

Tableau 2-5 Modèles cinétiques de pyrolyse utilisés dans la modélisation du procédé de gazéification

Modèles	Équations
Modèle global en une étape	$n_{CH_xO_yN_z} \xrightarrow{k_{p1}} n_{Volatiles} + n_{Tar} + n_{Char} \quad 2-57$
Modèle à réactions multiples	$n_{CH_xO_yN_z} \xrightarrow{k_{p2,1}} n_{Volatiles} \quad 2-58$
	$n_{CH_xO_yN_z} \xrightarrow{k_{p2,2}} n_{Tar} \quad 2-59$
	$n_{CH_xO_yN_z} \xrightarrow{k_{p2,3}} n_{Char} \quad 2-60$
Modèle semi-global à deux étapes	$n_{CH_xO_yN_z} \xrightarrow{k_{p3,1}} n_{Volatiles_1} + n_{Tar_1} + n_{Char} \quad 2-61$
	$n_{Tar_1} \xrightarrow{k_{p3,2}} n_{Volatiles_2} + n_{Tar_2} \quad 2-62$

Dans la littérature, les matières volatiles comprennent le CO, le CO<sub>2</sub>, le H<sub>2</sub>, le H<sub>2</sub>O et le CH<sub>4</sub>. Ayant prédit la quantité de matières volatiles produites, il reste à déterminer la répartition de ces

substances. Pour se faire, différentes méthodes sont utilisées. Par exemple, dans une étude de Giltrap et al. (2003), une quantité équivalente de CO, H<sub>2</sub>O et CH<sub>4</sub> est supposée. D'autres études utilisent des données expérimentales pour estimer la répartition de ces substances. Par exemple, dans les travaux de Blasi (2000), des données expérimentales sur la gazéification des copeaux de bois et des écorces de riz sont utilisées pour estimer la distribution du CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et CH<sub>4</sub>.

D'autres études telles que celle de Tinaut et al. (2008) utilisent la méthode suggérée dans les travaux de Thunman, Niklasson, Johnsson, & Leckner (2001), dans laquelle un ensemble d'équations composées de bilans élémentaires et d'enthalpies est résolu pour les fractions massiques des substances volatiles. Des données expérimentales pour les ratios CO/CO<sub>2</sub> et C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>/CO<sub>2</sub> sont utilisées pour résoudre le système (Sharma et al., 2006; Thunman et al., 2001).

Dans les recherches de Sharma et al. (2006), un modèle décrivant la dévolatilisation de la biomasse en termes de cellulose, d'hémicellulose et de lignine est utilisé. Afin de résoudre le système d'équations composé de bilans élémentaires, les ratios expérimentaux de CO/CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> et CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub> sont utilisés (Sharma et al., 2006). Ces ratios, valides seulement pour des températures de pyrolyse ( $T_p$ ) entre 873 K et 1073 K, sont présentés aux équations 2-63, 2-64 et 2-65, où  $X_i$  représente les masses des substances  $i$  (Sharma et al., 2006).

$$X_{CO}/X_{CO_2} = \exp\left(-1.845 + \frac{7730.3}{T_p} - \frac{5019898}{T_p^2}\right) \quad 2-63$$

$$X_{H_2O}/X_{CO_2} = 1 \quad 2-64$$

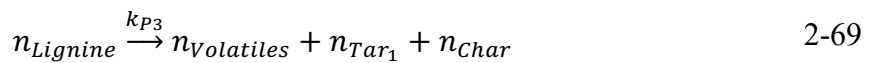
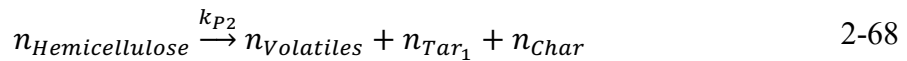
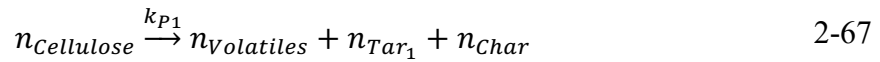
$$X_{CH_4}/X_{CO_2} = 5 \cdot 10^{-16} \cdot T_p^{5.06} \quad 2-65$$

Pour compléter le système d'équations, les fractions massiques de cellulose ( $X_{cl}^{\%}$ ), d'hémicellulose ( $X_{hc}^{\%}$ ) et de lignine ( $X_{lg}^{\%}$ ) contenues dans la matière organique ainsi que les quantités de char produits lors de la dévolatilisation de la cellulose ( $X_{char,cl}$ ), de l'hémicellulose ( $X_{char,hc}$ ) et de la lignine ( $X_{char,lg}$ ) sont utilisées pour prédire la quantité de char ( $X_{char}$ ) produite lors de la dévolatilisation de la matière organique (Sharma et al., 2006). Enfin, comme présenté par Basu (2010) il est aussi possible d'utiliser la fraction de carbone fixe (analyse proximée) pour prédire la quantité de char produit lors de la pyrolyse.

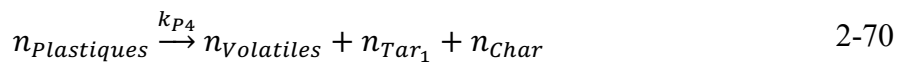
$$X_{char} = X_{cl}^{\%} X_{char,cl} + X_{hc}^{\%} X_{char,hc} + X_{lg}^{\%} X_{char,lg} \quad 2-66$$

Dans la littérature, les modèles cinétiques de pyrolyse sont plutôt utilisés pour représenter la dévolatilisation de la biomasse. En effet, étant plus homogène en termes de compositions et de propriétés physiques qu'un flux de matières résiduelles, un grand nombre de travaux portant sur l'identification des énergies d'activations, des facteurs pré-exponentiels et des cinétiques de réactions existent dans la littérature.

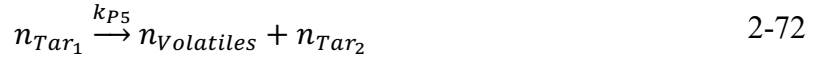
Cependant, dans un faible nombre de travaux, des modèles cinétiques sont utilisés pour représenter la pyrolyse des matières résiduelles. Par exemple, dans les travaux de Zhang, Dor, Biswas, Yang, & Blasiak (2013) et de Couto et al. (2015), des modèles cinétiques sont utilisés pour représenter la pyrolyse dans un lit fluidisé à bulles. Il est à noter que le procédé de gazéification est modélisé en une seule étape dans ces travaux. Ainsi, les matières résiduelles sont représentées par un ratio de matières cellulosiques, de polyéthylène (PE), de polyéthylène téréphtalate (PET), de polypropylène (PP) et de polystyrène (PS). Dans ces études, chaque composé est caractérisé par une cinétique de dévolatilisation propre à chaque substance composant les matières résiduelles (modèle cinétique en une étape). Dans les travaux de Couto et al. (2015), la matière cellulosique est représentée par la cellulose, l'hémicellulose et la lignine (équations 2-67, 2-68 et 2-69) alors que dans les travaux de Zhang, Dor, Biswas, Yang, & Blasiak (2013) la matière cellulosique est représentée par une seule équation cinétique.



La cinétique de réaction du plastique (équation 2-70) peut être obtenue en sommant les cinétiques de réactions des substances  $i$  (PE, PET, PP et PS) comme démontré à l'équation 2-71. Par la suite, le tar primaire est dévolatilisé en tar secondaire et en volatiles, comme présenté à l'équation 2-72 (Couto et al., 2015).



$$k_{P4} = \sum_{i=1}^4 A_i \exp \left( \frac{-E_i}{RT} \right) \quad 2-71$$



Dans les travaux de Couto et al. (2015) et de Zhang et al. (2013), la fraction de matières organiques est représentée par des ratios fixes de cellulose, d'hémicellulose et de lignine. Ainsi, les effets de la variation des substances composant les matières organiques (résidus alimentaires, résidus verts, etc.) ne sont pas capturés. En représentant chacune de ces substances par des ratios fixes de cellulose, d'hémicellulose et de lignine, le modèle cinétique de pyrolyse serait plus en mesure de capturer les effets de la variation de ces substances. Cependant, puisque les compositions des flux de résidus alimentaires et verts peuvent aussi drastiquement varier, cette manière de représenter les substances composant les matières organiques reste encore très approximative. Puisque l'étape de pyrolyse est la plus sensible à la composition élémentaire (C, H, O, N, S) de la matière gazéifiée, l'analyse ultimée reste la meilleure manière de représenter les matières résiduelles pour cette étape.

#### 2.3.6.3.4 Sous-modèle cinétique d'oxydation

Après l'étape de pyrolyse, les matières volatiles, le tar et le char sont oxydés. Les vitesses de réaction d'oxydation sont présentées dans le Tableau 2-6. Les valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels des coefficients de vitesse  $k_j$  sont présentés dans le Tableau 2-7. Ces vitesses de réaction tirées des travaux de Sharma (2011) servent de guide pour établir l'ordre des réactions se produisant dans le zone d'oxydation lorsqu'un approche heuristique est utilisée (voir modèles stœchiométriques en plusieurs étapes).

Tableau 2-6 Vitesses de réaction du sous-modèle d'oxydation (Sharma, 2011)

Réactions	Vitesses de réaction (kmol/m <sup>3</sup> s)
R <sub>O1</sub> : $C + 0.5O_2 \rightarrow CO$	$A_{O1} \exp\left(\frac{-E_{O1}}{RT}\right) [C_{O_2}]$ 2-73
R <sub>O2</sub> : $CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$	$A_{O2} \exp\left(\frac{-E_{O2}}{RT}\right) [C_{CO}] [C_{O_2}]^{0.25} [C_{H_2O,v}]^{0.5}$ 2-74
R <sub>O3</sub> : $C_{1.16}H_4 + 1.58O_2 \rightarrow 1.16CO + 2H_2O$	$A_{O3} \exp\left(\frac{-E_{O3}}{RT}\right) T [C_{O_2}]^{0.8} [C_{CH_4}]^{0.7}$ 2-75
R <sub>O4</sub> : $H_2 + 0.5O_2 \rightarrow H_2O$	$A_{O4} \exp\left(\frac{-E_{O4}}{RT}\right) [C_{CO_2}] [C_{H_2}]^{1.5}$ 2-76
R <sub>O5</sub> : $C_6H_{6.2}O_{0.2} + 4.45O_2 \rightarrow 6CO + 3.1H_2O$	$A_{O5} \exp\left(\frac{-E_{O1}}{RT}\right) TP^{0.3} [C_{O_2}] [C_{Tar}]^{0.5}$ 2-77

Tableau 2-7 Valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels des coefficients de vitesse  $k_j$  pour le sous-modèle d'oxydation (Sharma, 2011)

$k_j$	$A_j$	Unités de $A_j$	$E_j/R$
$k_{O1}$	0.554	1/s	$1.08 \times 10^4$
$k_{O2}$	$2.31 \times 10^{10}$	$\text{m}^{2.25}/\text{kmol}^{0.75}\text{s}$	$1.51 \times 10^4$
$k_{O3'}$	$5.01 \times 10^{10}$	$\text{m}^{1.5}/\text{kmol}^{0.5}\text{s}$	$2.4 \times 10^4$
$k_{O4}$	$5.515 \times 10^{13}$	$\text{m}^{4.5}/\text{kmol}^{1.5}\text{s}$	$3.4 \times 10^3$
$k_{O5}$	$6.54 \times 10^8$	$\text{m}^{4.5}/\text{kmol}^{1.5}.\text{K}.\text{Pa}^{0.3}\text{s}$	$4.2 \times 10^4$

### 2.3.6.3.5 Sous-modèle cinétique de réduction

Après l'étape d'oxydation, les produits passent à l'étape de réduction. Cette étape est principalement dominée par des réactions hétérogènes, où le char est converti en produits gazeux (Gupta & Bhaskaran, 2018). Les réactions survenant au cours de l'étape de réduction sont présentées dans le Tableau 2-8, où  $P_i$  représente les pressions partielles des substances  $i$  (Sharma, 2011).

Tableau 2-8 Vitesses de réaction du sous-modèle de réduction (Sharma, 2011)

Réactions	Vitesses de réaction ( $\text{kmol}/\text{m}^3\text{s}$ )	
$R_{R1}: C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$CRF \cdot k_{R1} \left[ P_{CO_2} - \frac{P_{CO}}{K_{R1,eq}} \right]$	2-78
$R_{R2}: C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$CRF \cdot k_{R2} \left[ P_{H_2O} - \frac{P_{CO}P_{H_2}}{K_{R2,eq}} \right]$	2-79
$R_{R3}: C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$CRF \cdot k_{R3} \left[ P_{H_2}^2 - \frac{P_{CH_4}}{K_{R3,eq}} \right]$	2-80
$R_{R4}: CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	$CRF \cdot k_{R4} \left[ P_{CH_4}P_{H_2O} - \frac{P_{CO}P_{H_2}^3}{K_{R4,eq}} \right]$	2-81

Les valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels des coefficients de vitesse  $k_j$  sont présentés dans le Tableau 2-9 (Sharma, 2011). Le coefficient CRF (en anglais « *Char Reactivity Factor (CRF)* »), capture la réactivité du char dans le réacteur. Dans les travaux de Giltrap, McKibbin, & Barnes (2003) une valeur constante de 1000 pour le CRF est proposée pour la gazéification de la biomasse. Afin de tenir compte du changement de réactivité en fonction de la hauteur du réacteur, un CRF représenté par une relation exponentielle est utilisé dans l'étude de Babu & Sheth (2006). La présence de cette relation exponentielle fait en sorte que le char n'est pas consommé immédiatement à l'entrée de la zone de réduction. Cette approche est seulement utilisée pour une gazéification dans un lit fixe à co-courants.



Tableau 2-9 Valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré exponentiels des coefficients de vitesse  $k_j$  pour le sous-modèle de réduction (Sharma, 2011)

$k_j$	$A_j$	Unités de $A_j$	$E_j/R$
$k_{r1}$	$3.6 \times 10^1$	$\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{Pa}$	$9.3 \times 10^3$
$k_{r2}$	$1.5 \times 10^4$	$\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{Pa}$	$1.5 \times 10^4$
$k_{R3}$	$4.2 \times 10^{-3}$	$\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{Pa}^2$	$2.3 \times 10^3$
$k_{R4}$	$7.3 \times 10^{-2}$	$\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{Pa}^2$	$4.3 \times 10^3$

Ces vitesses de réaction sont par la suite utilisées dans l'équation 2-82, qui décrit la conservation de la substance  $i$  en fonction de la hauteur de la zone de réduction. Dans cette équation,  $u_g$ ,  $v_{i,j}$  et  $z$  représentent la vitesse des gaz (m/s), le ratio stœchiométrique de la substance  $i$  dans la réaction  $j$  et la hauteur de la zone de réduction (m) (Giltrap et al., 2003).

$$\frac{dn_i}{dz} = \frac{1}{u_g} \left( \sum_j v_{i,j} r_j - n_i \frac{du_g}{dz} \right) \quad 2-82$$

Bien que l'utilisation du *Char Reactivity Factor* soit plus populaire pour la modélisation de la gazéification de la biomasse, il est aussi utilisé dans quelques travaux pour modéliser la réduction du char produit à partir des matières résiduelles. En effet, dans les travaux de Thakare & Nandi (2016) le *Char Reactivity Factor* est utilisé pour modéliser la réduction de matières résiduelles dans un lit fixe, où la matière résiduelle est représentée par une molécule type. Par contre, bien que ce modèle capture les effets de la réduction de taille du char dans la zone de réduction, il n'est pas en mesure de capturer les effets d'une variation de tailles de particules de la matière alimentée au réacteur.

#### 2.3.6.4 Modèles cinétiques couplés à des simulations numériques de dynamiques des fluides

Les modèles cinétiques en une seule étape peuvent être couplés à des simulations numériques de dynamiques des fluides (en anglais « *Computational Fluids Dynamics (CFD)* ») afin de capturer les effets de l'hydrodynamique. Ces modèles produisent une solution en accord avec les lois de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie en plus de tenir compte de l'hydrodynamique et de la turbulence du système (Basu, 2010b; Budhathoki, 2013). Dans ces modèles, les flux massiques, de quantité de mouvement et d'énergie entrant et sortant d'un élément sont calculés pour un domaine ou une région définis, à l'aide de conditions limites (Sikarwar et al.,

2016). Les différences finies, les éléments finis et les volumes finis sont trois méthodes utilisées pour la discrétisation du système (Basu, 2010b). Des logiciels commerciaux de discrétisation tels que *ANSYS*, *ASPEN*, *Fluent*, *Phoenix* et *CFD2000* peuvent être utilisés (Basu, 2010b). Peu de modèles CFD sont utilisés pour modéliser les lit fixes, ils sont plutôt utilisés pour modéliser les lits fluidisés (Patra & Sheth, 2015). Actuellement, pour modéliser la gazéification par CFD, il existe deux méthodes, l'approche de Euler-Lagrange et l'approche Euler-Euler.

Dans l'approche Euler-Lagrange, la phase gazeuse est décrite par les équations de Navier-Stokes (conservations de masse, de quantité de mouvement et d'énergie), alors que la phase solide est traitée comme une phase discrète. Étant traitée comme une phase discrète, la trajectoire de chaque particule est calculée par les lois du mouvement de Newton alors que les collisions entre les particules sont décrites soit par les modèles de la collision élastique ou de la collision inélastique (en anglais « *Soft-sphere* » et « *Hard-sphere* »). De plus, la température ainsi que la concentration en gaz sont calculées à l'aide des équations de la conservation d'énergie et de masse, et ce, pour chaque particule. Puisque l'évolution de chaque particule est suivie dans le système, cette approche nécessite des moyens de calculs énormes. De plus, des modélisations de lit fluidisé à grande échelle pouvant contenir des millions de particules peuvent s'avérer difficilement réalisables (Liu, Elkamel, Lohi, & Biglari, 2013).

En comparaison à l'approche Euler-Lagrange, l'approche Euler-Euler nécessite moins de calculs, car la phase solide est aussi traitée comme étant continue. Les équations de conservations de masse, de quantité de mouvement et d'énergie de Navier-Stokes peuvent être utilisées pour prédire le comportement des deux phases. De plus, dans cette approche, les propriétés de transport de la phase solide sont estimées par la *Théorie cinétique de l'écoulement granulaire* (en anglais « *Kinetic theory of granular flows* ») (Liu et al., 2013). Lorsque le système est dans un régime d'écoulement laminaire, les phénomènes hydrodynamiques sont parfaitement capturés par les équations de Navier-Stokes (Basu, 2010b). Cependant, dans le cas d'un écoulement turbulent, la solution au système devient plus complexe à prédire. Il est donc nécessaire d'utiliser certains modèles tels que le modèle de *Simulation numérique direct* (en anglais « *Direct Numerical Simulation* »), le modèle de *Moyenne de Reynolds* ( en anglais « *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* ») et le modèle de *Simulation des grandes structures de la turbulence* (en anglais « *Large Eddy Simulation* ») (Basu, 2010b; Patra & Sheth, 2015). La solution au système devient donc plus complexe. La Figure 2-9

représente les différentes sections incorporées dans le modèle CFD Euler-Euler (Patra & Sheth, 2015).

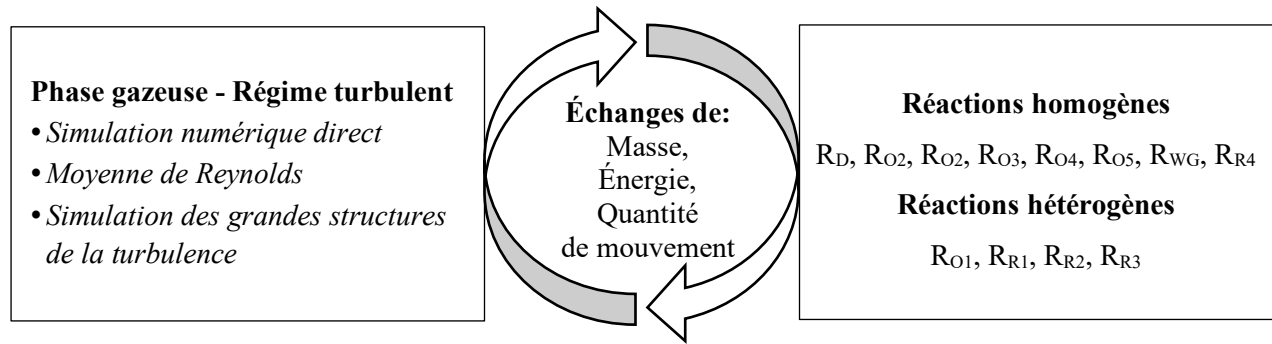


Figure 2-9 Différentes sections incorporées dans le modèle CFD Euler-Euler (Patra & Sheth, 2015)

Dans les modèles CFD, les réactions hétérogènes peuvent être représentées par :

- 1) Le *Shrinking Core Model*
- 2) Le *Kinetic/diffusion-limited rate model*

Ces modèles supposent que la vitesse de réaction de surface est soit déterminée par la cinétique ou par la diffusion (Matveev & Serbin, 2007). Le *Shrinking Core Model* est présenté dans la section du modèle cinétique simple en une seule étape. Lorsque le *Kinetic/diffusion-limited rate model* est utilisé pour représenter les réactions hétérogènes, les équations 2-83, 2-84 et 2-85 sont utilisées. La diffusion des substances  $i$  ( $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ) dans le char est représentée par l'équation 2-83, où  $T_{particule}$ ,  $T_\infty$ ,  $Cte$  et  $D_{i^*}$  représentent la température de la particule (K), la température locale de la phase continue (K), une constante ( $s/K^{0.75}$ ) et le coefficient de diffusion (s/m) (Ariyaratne, Malagalage, Melaaen, & Tokheim, 2015; Matveev & Serbin, 2007). L'équation 2-84 représente la cinétique (s/m) des équations  $j$  ( $R_{O1}$ ,  $R_{R1}$ ,  $R_{R2}$  et  $R_{R3}$ ) alors que l'équation 2-85 représente le taux de réduction la particule, où  $m_{particule}$  et  $P_i$  représentent la masse de la particule (kg) et la pression partielle (Pa) des substances  $i$  ( $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ) (Ariyaratne et al., 2015; Matveev & Serbin, 2007).

$$D_{i^*} = Cte \frac{[(T_{particule} - T_\infty)/2]^{0.75}}{D_p} \quad 2-83$$

$$r_{j^*} = A_j \exp\left(\frac{-E_j}{RT_{particule}}\right) \quad 2-84$$

$$\frac{dm_{particule}}{dt} = -(\pi D_p^2) P_i \frac{D_{i*} r_{j*}}{D_{i*} + r_{j*}} \quad 2-85$$

Bien que l'utilisation de modèles cinétiques couplés à une CFD soit plus populaire pour la modélisation de la gazéification de la biomasse, ces modèles sont aussi utilisés dans quelques travaux pour modéliser la gazéification des matières résiduelles. Par exemple, les travaux de Zhang, Dor, Biswas, Yang, & Blasiak (2013) utilisent le *Shrinking Core Model* pour modéliser les réactions hétérogènes et utilisent la CFD Euler-Euler pour capturer les effets de l'hydrodynamisme du lit fluidisé à bulles. Dans cette étude, la turbulence est modélisée avec le modèle de *Moyenne de Reynolds*. Par contre, dans les travaux de Couto et al. (2015), le *Kinetic/diffusion-limited rate model* couplé à la CFD Euler-Euler est utilisé pour modéliser la gazéification des matières résiduelles. Dans cette étude, la turbulence est aussi modélisée avec le modèle de *Moyenne de Reynolds*.

### 2.3.6.5 Synthèse des modèles de gazéification

Dans le Tableau 2-10, les effets capturés par les différents modèles présentés dans la revue de littérature sont résumés. Ainsi, il est possible d'observer que les modèles d'équilibre thermodynamique ne sont pas en mesure de capturer les effets du profil de température sur les performances de la gazéification, puisque seule une température globale est fournie au modèle. Ainsi, puisqu'une des différences majeures entre un lit fluidisé et un lit fixe réside dans la présence d'un profil de température au sein du lit fixe, ce type de modèle n'est pas en mesure de capturer les effets de la configuration du réacteur sur les performances du procédé. De plus, les modèles d'équilibre thermodynamique ne sont pas en mesure de capturer les effets des tailles de particules sur les performances du modèle. Enfin, le tar, qui est une source de problèmes majeure en industries, n'est pas modélisé dans ces types de modèles. En ce qui concerne les modèles de réseaux de neurones artificiels, ces derniers sont en mesure de capturer les différents effets présentés dans le Tableau 2-10. Cependant, avec l'utilisation de ce modèle, la fiabilité des résultats peut être affectée lorsque des conditions d'opérations et d'alimentations se situant à l'extérieur des limites des données utilisées pour la construction du modèle sont sélectionnées. Enfin, les modèles cinétiques sont en mesure de capturer une gamme d'effets, comme présenté au Tableau 2-10. Cependant, lorsque des modèles cinétiques sont utilisés pour simuler la gazéification des matières résiduelles, des ratios fixes de cellulose, d'hémicellulose et de lignine sont utilisés pour représenter

les matières résiduelles. Ainsi, les effets des compositions élémentaires des matières résiduelles sur les performances de la gazéification ne sont pas capturés.

Tableau 2-10 Effets capturés par les différents modèles de gazéification présentés dans la revue de littérature

	<b>Modèles d'équilibre thermodynamique</b>	<b>Modèles de réseaux de neurones artificiels</b>	<b>Modèles cinétiques</b>
Configuration réacteur: - Profil de température		✓	✓
Conditions opératoires: - Température - Quantité d'oxygène alimentée	✓	✓	✓
Propriétés physiques: - Taille de particules - Teneur en humidité		✓	✓
Présence d'inertes et contaminants : - H <sub>2</sub> S, NH <sub>3</sub> , tar - Particules de cendres - Éléments traces		✓	✓
Composition des matières résiduelles: - C, H, O, N, S	✓	✓	
Possibilités d'extrapolation des conditions opératoires et d'alimentations	✓		✓

Le Tableau 2-11 résume les principales caractéristiques des modèles provenant de la revue de littérature. À partir de ce tableau, il est possible d'observer que plusieurs auteurs utilisent une combinaison de différents modèles pour représenter les sous-modèles de la gazéification (séchage, pyrolyse, oxydation, réduction). Le modèle de gazéification reçoit des débits massiques de différentes fractions de matières résiduelles provenant d'un processus en amont. Ainsi, en variant ces différentes fractions, la composition élémentaire, la teneur en humidité et la taille des particules changent, ce qui engendre des effets sur les performances de la gazéification. Puisque ces effets doivent être considérés, un modèle hybride combinant différentes approches est sélectionné. Ainsi, une combinaison de différents sous-modèles est utilisée pour représenter les étapes de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction.

Tableau 2-11 Résumé des principales caractéristiques des modèles provenant de la revue de littérature

Auteurs	Intrants	Réacteurs	Modèles
(Sharma, 2011)	Biomasse	Lit fixe à co-courants	<b>Pyrolyse</b> : Cinétique <b>Oxydation</b> : Modèle stœchiométrique <b>Réduction</b> : CRF
(Di Blasi & Branca, 2013)	Biomasse	Lit fixe à co-courants	<b>Modèle une étape</b> : Cinétique avec <i>Shrinking Core Model</i>
(Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo, 2008)	Biomasse	Lit fixe à co-courants	<b>Modèle une étape</b> : Cinétique avec <i>Shrinking Core Model</i>
(Salem & Paul, 2018)	Biomasse	Lit fixe à co-courants	<b>Séchage</b> : Cinétique <b>Pyrolyse</b> : Cinétique <b>Oxydation</b> : Modèle stœchiométrique <b>Réduction</b> : CRF
(Giltrap et al., 2003)	Biomasse	Lit fixe à co-courants	<b>Pyrolyse</b> : Modèle stœchiométrique <b>Oxydation</b> : Modèle stœchiométrique <b>Réduction</b> : CRF
(Babu & Sheth, 2006)	Biomasse	Lit fixe à co-courants	<b>Pyrolyse</b> : Modèle stœchiométrique <b>Oxydation</b> : Modèle stœchiométrique <b>Réduction</b> : CRF
(Couto et al., 2015)	Matières résiduelles	Lit fluidisé à bulles	<b>Modèle une étape</b> : CFD avec <i>Kinetic/diffusion-limited rate model</i>
(Arafat & Jijakli, 2013)	Matières résiduelles	-	<b>Modèle une étape</b> : Modèle stœchiométrique
(Zhang et al., 2013)	Matières résiduelles	Lit fluidisé à bulles	<b>Modèle une étape</b> : CFD avec <i>Shrinking Core Model</i>
(Thakare & Nandi, 2016)	Matières résiduelles	Lit fixe à co-courants	<b>Pyrolyse</b> : Modèle stœchiométrique <b>Oxydation</b> : Modèle stœchiométrique <b>Réduction</b> : CRF
(P. Xu et al., 2017)	Matières résiduelles	-	<b>Modèle une étape</b> : Modèle non stœchiométrique
(Lee, Chung, & Ingley, 2014)	Matières résiduelles	-	<b>Modèle une étape</b> : Modèle stœchiométrique
(Pandey et al., 2016)	Matières résiduelles	Lit fluidisé à bulles	<b>Modèle une étape</b> : ANN

## CHAPITRE 3 OBJECTIFS ET MÉTHODOLOGIE

### 3.1 Objectif principal

L'objectif du projet est de développer un modèle de gazéification phénoménologique s'insérant au sein d'une représentation par MFA d'un système de GMR comme outil d'aide à la décision.

### 3.2 Objectifs secondaires

Les objectifs secondaires permettant d'atteindre l'objectif principal sont les suivants :

- 1) Développer un modèle de gazéification afin qu'il soit en mesure de capturer les effets des caractéristiques des CDD, des conditions d'opérations sur les performances du procédé de gazéification
- 2) Valider le modèle avec des résultats expérimentaux provenant de la littérature
- 3) Adapter le modèle de gazéification afin de permettre son insertion dans un cadre MFA
- 4) Analyser les scénarios potentiels utilisant une conversion moléculaire de CDD par gazéification

### 3.3 Méthodologie

Des objectifs secondaires découlent les quatre étapes de la méthodologie.

#### 3.3.1 Sous-objectif #1

L'information recueillie dans la revue de littérature est utilisée pour développer un modèle hybride (combinant différentes approches) de gazéification de CDD étant en mesure de capturer les effets des variations de la composition élémentaire, de la teneur en humidité, de la taille des particules, du ratio ER et de la température sur les performances de la gazéification. Ce modèle doit donc être en mesure de capturer les effets suivants:

- 1) **Configuration du réacteur:** Profil de température
- 2) **Conditions opératoires:** Température et quantité d'oxygène alimentée
- 3) **Composition des matières résiduelles:** C, H, O, N, S
- 4) **Propriétés physiques des matières résiduelles:** Teneur en humidité et taille de particules

- 5) **Présence d'inertes et de contaminants dans les matières résiduelles:**  $H_2S$ ,  $NH_3$ , tar, particules de cendres et éléments traces

Afin de capturer tous ces effets, un modèle hybride combinant différentes approches est sélectionné. Ainsi, une combinaison de différents sous-modèles est utilisée pour représenter les étapes de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction. Les étapes suivantes sont prises pour développer ce modèle de gazéification :

- 1) Développement du sous-modèle de séchage
- 2) Développement du sous-modèle de pyrolyse
- 3) Développement du sous-modèle d'oxydation
- 4) Développement du sous-modèle de réduction
- 5) Calcul du bilan énergétique global du système

### 3.3.2 Sous-objectif #2

Le modèle sera validé à l'aide de données provenant de la littérature. Ainsi, la composition du syngaz produit à partir de différents flux de matières résiduelles sera validée.

### 3.3.3 Sous-objectif #3

Le modèle sera adapté au cadre MFA de VMR-Sys. Ainsi, puisque la matière est exprimée en termes de biens, substances et éléments au sein de VMR-Sys, le modèle devra être en mesure de traiter des matières résiduelles et de fournir un flux de syngaz caractérisé de la sorte.

### 3.3.4 Sous-objectif #4

Différents paramètres de conditions d'opérations et d'alimentations sont alimentés au modèle, afin d'évaluer les effets de ces variations sur les critères de qualité du syngaz. Les effets des variations suivantes sont étudiés:

- 1) Composition des matières résiduelles
- 2) Teneur en humidité des matières résiduelles
- 3) Taille de particules des matières résiduelles
- 4) Quantité d'oxygène alimentée au procédé
- 5) Type d'oxydant



6) Température d'opération du procédé

Les critères de qualité d'un syngaz destiné à la valorisation moléculaire sont les suivants:

- 1) Ratio molaire  $H_2/CO$  ou  $H_2/CO/CO_2$  adéquat
- 2) Faibles teneurs en soufre (S) et azote (N)
- 3) Faibles teneurs en halogènes et en métaux alcalins
- 4) Faible teneur en tar
- 5) Faibles quantités de non-gaz non réactifs
- 6) Faible quantité de particules
- 7) Faibles quantités d'éléments traces

## CHAPITRE 4 DÉVELOPPEMENT ET VALIDATION DU MODÈLE

### 4.1 Définition du système à l'étude

Le modèle de gazéification est destiné à être intégré dans un cadre d'analyse du flux de matière et d'analyse du cycle de vie (MFA-ACV). Alimenté par VMR-Gen, le modèle de gazéification inséré au sein de VMR-Sys reçoit des débits massiques de différentes fractions de matières résiduelles provenant d'un processus en amont. Ces débits de matières sont fragmentés en débits massiques d'éléments. Dans ce modèle de gazéification, seuls les éléments C, H, O, N et S font l'objet de transformations. Le chlore (Cl), le fluor (F), l'aluminium (Al), le calcium (Ca), le cadmium (Cd), le fer (Fe), le potassium (K), le magnésium (Mg), le sodium (Na), le phosphore (P), le zinc (Zn), l'arsenic (As), le nickel (Ni) et le plomb (Pb) sont quant à eux répartis dans les cendres de grilles, les cendres volantes et le syngaz à l'aide de coefficients de transferts provenant de la littérature.

Afin d'être en mesure d'utiliser le modèle de gazéification dans le cadre MFA de VMR-Sys, les flux doivent être définis en termes de courants, biens, substances et éléments. Les courants  $l$  reliant les procédés, sont composés de biens  $k$  représentant différentes fractions de CDD. Ces fractions de CDD peuvent quant à eux être caractérisées en termes de substances  $i$ , comprenant les compositions en volatiles, en carbones fixes, en eau et en cendres ou en termes d'éléments  $e$ , comprenant les compositions en C, H, O, N, S, en eau et en cendres.

À l'exception de la masse totale, seules les quantités massiques d'éléments doivent être conservées dans l'analyse. Les courants, les biens, les substances et les éléments sont définis en termes de débits massiques  $\dot{F}$ ,  $\dot{M}$ ,  $\dot{X}$  et  $\dot{Y}$  et en termes de débits molaires  $\dot{f}$ ,  $\dot{m}$ ,  $\dot{x}$  et  $\dot{y}$ , respectivement. Le Tableau 4-1 présente un résumé des différentes manières de représenter la matière.

Tableau 4-1 Représentation de la matière

Flux	Variables massiques (kg/s)	Variables molaires (kmoles/s)	Indices	Exemples
Courants	$\dot{F}$	$\dot{f}$	$l$	CDD
Biens	$\dot{M}$	$\dot{m}$	$k$	Verres, cartons, papiers, résidus verts, etc.
Substances	$\dot{X}$	$\dot{x}$	$i$	Carbone fixe, matières volatiles, teneur en humidité, cendres
Éléments	$\dot{Y}$	$\dot{y}$	$e$	C, H, O, N, S, cendres, teneurs en humidité, etc.

## 4.2 Données utilisées

Un courant ( $\dot{F}$ ) de CDD est alimenté au modèle. Afin de caractériser ce flux, l'étude menée en 2012-2013 par *Recyc-Québec* et *Éco Entreprises Québec* (ÉEQ) auprès de 4 270 foyers répartis dans 42 municipalités du Québec est utilisée (Recyc-Québec & EEQ, 2015). Au total, 76 sous-catégories d'ordures ménagères sont regroupées en 21. Ainsi, en utilisant cette caractérisation, il est possible d'obtenir les débits partiels de biens  $\dot{M}_k$ . Ces biens sont caractérisés en termes de substances ( $\dot{X}_i$ ) tel que le carbone fixe, les matières volatiles, les cendres et l'eau, provenant du manuel de Bailie et al. (1997) et en termes d'éléments ( $\dot{Y}_e$ ), tel que le C, H, O, N, S, les cendres et l'eau provenant des travaux de Götze, Pivnenko, Boldrin, Scheutz, & Astrup (2016). Les détails de ces flux se trouvent en ANNEXE B.

## 4.3 Description du modèle

Le modèle de gazéification doit être en mesure de capturer les effets des caractéristiques des CDD, des conditions d'opérations et du type de gazogène sur les performances du procédé de gazéification. Dans un premier temps, la sélection du type de gazogène est présentée, suivit de la sélection du type de modèle. Ensuite, la configuration générale du modèle, l'insertion du modèle dans la MFA ainsi que les hypothèses générales sont présentées suivit des descriptions des sous-modèles de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction.

### 4.3.1 Type de gazogène sélectionné

Un lit fixe à co-courants est sélectionné comme type de gazogène pour la modélisation. Étant caractérisée par un fonctionnement plus simple que les autres types de réacteurs, la modélisation d'un lit fixe à co-courants repose sur des équations réactionnelles de bases, toutes autant utilisées pour la modélisation des autres types de réacteurs. En effet, en comparant le lit fixe contre-courants et le lit fixe co-courants, seule la configuration change. Ainsi, en interchangeant l'ordre des zones d'oxydation et de réduction et en modélisant le transfert de masse et d'énergie du syngaz entrant en contact avec les substances des zones de séchage, pyrolyse et réduction, il devient alors possible de modéliser grossièrement un lit fixe contre-courants, à partir du modèle de lit fixe co-courants. De plus, afin de modéliser approximativement un lit fluidisé, les mêmes équations réactionnelles sont utilisées. Cependant, puisqu'un mélange parfait est assumé au sein d'un lit fluidisé, il n'y a pas de profil de température et de concentrations à travers le réacteur. Ainsi, les réactions de

séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction se produisent simultanément et une température globale d'opération peut être utilisée. De plus, pour bien capturer les effets de la configuration du lit fluidisé, une section d'hydrodynamique doit être ajoutée aux équations réactionnelles de bases, utilisées dans la modélisation d'un lit fixe co-courants.

Donc, étant basé sur des équations réactionnelles de bases et étant caractérisé par une configuration relativement simple, le lit fixe co-courants constitue une bonne approximation initiale d'un procédé de gazéification. Afin de modéliser d'autres types de réacteurs, il serait nécessaire d'effectuer quelques modifications à la configuration et d'ajouter une section d'hydrodynamique. Ainsi, ce choix de réacteur n'introduit pas une limite quelconque à l'étude, mais constitue plutôt un point de départ pour la modélisation d'un procédé de gazéification.

### **4.3.2 Type de modèle sélectionné**

Bien que les modèles de réseaux de neurones artificiels (ANN) semblent être une avenue de plus en plus intéressante dans le domaine de la gestion des matières résiduelles, ces modèles s'avèrent être limités par leurs capacités de modélisation. En effet, puisque les performances de ces modèles dépendent uniquement de la qualité et de la quantité des informations fournies au système et qu'aucune interprétation physique ne soit faite, de grandes incertitudes peuvent être introduites lorsqu'un système hors normes est modélisé. Par leurs grandes hétérogénéités, les matières résiduelles peuvent drastiquement changer en termes de compositions et de caractéristiques physiques et donc, une quantité phénoménale de données expérimentales doivent être fournies au système afin qu'il puisse capturer adéquatement les effets des caractéristiques des matières résiduelles sur les performances du procédé. Conjointement, pour que le modèle soit aussi en mesure de capturer les effets des conditions d'opérations, du type et de la conception du réacteur sur les performances du procédé, un nombre additionnel de données expérimentales doivent être alimentées au système. Puisque le nombre de données expérimentales sur la gazéification des matières résiduelles limite les performances du modèle de réseaux de neurones artificiels (ANN), ce dernier est éliminé de la sélection de modèles de gazéification.

Contrairement aux modèles ANN, les modèles de simulations numériques de dynamiques des fluides (CFD) sont en mesure de capturer avec précisions les effets des caractéristiques des matières résiduelles, des conditions d'opérations, du type et de la conception du réacteur sur les performances du procédé, et ce, à l'aide de modèles mathématiques complexes ne requérant pas

l'apport de données expérimentales. Cependant, du fait que ces modèles sont en mesure de capturer un grand nombre de phénomènes physiques se produisant à l'intérieur du réacteur, ils sont considérés comme étant complexes et coûteux en termes de temps de calcul (Patra & Sheth, 2015). De plus, ces modèles sont plutôt utilisés pour modéliser les lits fluidisés. Puisqu'un lit fixe à co-courants est sélectionné dans ce présent modèle et que le degré de complexité des modèles CFD n'est pas nécessaire pour ce présent modèle de gazéification destiné à être intégré dans une MFA, ces derniers sont éliminés de la sélection de modèles de gazéification.

Lorsqu'un modèle thermodynamique d'équilibre est utilisé, les réactions impliquées sont considérées comme étant instantanées puisque le temps ou la distance nécessaire à atteindre l'équilibre n'est pas considéré. De plus, les effets des tailles de particules sur les performances ne sont pas pris en compte dans ce modèle. Cependant, bien que les modèles thermodynamiques d'équilibre ne capturent pas les effets de la taille des particules, du type et de la conception du réacteur, ils s'avèrent être utiles lorsque les cinétiques de réactions sont inconnues. Par contre, ils peuvent seulement être utilisés dans des systèmes à haute température, où l'équilibre des gaz est assurément atteint. Contrairement aux modèles thermodynamiques d'équilibre, les modèles cinétiques sont en mesure de prédire les performances avec précision d'un système à basse température (et à haute température) et capturent les effets des tailles des particules, du type et de la conception du réacteur. De plus, si le besoin se fait ressentir, un module d'hydrodynamiques peut être ajouté au module cinétique afin de représenter plus en détail les phénomènes physiques. Cependant, ces modèles requièrent la connaissance des cinétiques de réactions impliquées dans le procédé. De plus, lorsque des modèles cinétiques sont utilisés pour simuler la gazéification des matières résiduelles, des ratios fixes de cellulose, d'hémicellulose et de lignine sont utilisés pour représenter les matières résiduelles. Ainsi, les effets des compositions élémentaires des matières résiduelles sur les performances de la gazéification ne sont pas capturés.

Puisque le modèle de gazéification doit être en mesure de capturer les effets suivants, un modèle hybride est développé.

- 1) **Configuration du réacteur:** Profil de température
- 2) **Conditions opératoires:** Température et quantité d'oxygène alimentée
- 3) **Composition des matières résiduelles:** C, H, O, N, S
- 4) **Propriétés physiques des matières résiduelles:** Teneur en humidité et taille de particules

5) **Présence d'inertes et de contaminants dans les matières résiduelles:**  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{NH}_3$ , tar, particules de cendres et éléments traces

Ayant lieu dans un lit fixe co-courants, le procédé de gazéification est modélisé en quatre étapes distinctes : séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction, tous alimenté par différentes températures afin de créer « artificiellement » un profil de température. Puisque les vitesses de réaction de l'étape de réduction sont considérablement plus lentes que les vitesses de réaction des autres étapes, il est possible de poser l'hypothèse que les étapes de séchage, de pyrolyse et d'oxydation sont instantanées. Ainsi, l'étape de séchage est modélisée par une évaporation complète et instantanée de l'eau contenue initialement dans les matières résiduelles.

Quant à l'étape de pyrolyse, la composition élémentaire en C, H, O, N, S et cendres des matières résiduelles est utilisée pour prédire les quantités de  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}_{(\text{v})}$ , tar ( $\text{C}_6\text{H}_{6.2}\text{O}_{0.2}$ ), char, cendres,  $\text{NH}_3$  et  $\text{H}_2\text{S}$  produits lors de cette étape. La quantité de char (résidu solide,  $\text{C}_{(\text{s})}$ ) est prédite selon la teneur initiale en carbone fixe des matières résiduelles. De plus, trois ratios expérimentaux dépendant de la température ( $\text{CO}/\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$  et  $\text{CH}_4/\text{CO}_2$ ) sont utilisés pour résoudre ce système. Ainsi, l'étape de pyrolyse est en mesure de capturer les effets de la température de pyrolyse et de la composition élémentaire des matières résiduelles.

Ensuite, ces gaz sont oxydés lors de l'étape d'oxydation, étant caractérisés par une alimentation restreinte en oxygène. Afin de prendre en considération les différentes vitesses d'oxydation des réactions impliquées dans cette étape, une approche heuristique est utilisée. Ainsi, les produits de la pyrolyse réagissent avec l'oxygène disponible selon une hiérarchie basée sur un ordre décroissant des vitesses de réaction. Ensuite, les substances impliquées dans la réaction de *Water-Gas Shift* sont posées comme étant à l'équilibre. Ainsi, un modèle thermodynamique d'équilibre stœchiométrique est utilisé pour prédire la composition du  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}_{(\text{v})}$  à l'équilibre. Faisant intervenir la température d'oxydation lors de cette étape, les effets de celle-ci sont capturés. Finalement, les gaz d'oxydation et le char sont réduits lors de l'étape de réduction, modélisée par des cinétiques de réactions. Le *Shrinking Core Model* est utilisé pour capturer les effets de la température de réduction et de la taille des particules de char sur les performances de la gazéification. Dans le sous-modèle de réduction, la réaction de *Water-Gas Shift* est aussi prise en considération avec une cinétique de réaction. Dans le modèle de gazéification, le  $\text{H}_2\text{S}$ , le  $\text{NH}_3$ , le

tar, les particules de cendres et certains éléments traces (Cl, Br, F, Na, K, As, P, Pb, Co, Ni, Fe) sont suivis.

### 4.3.3 Configuration générale du modèle

La Figure 4-1 illustre la configuration générale du modèle. Dans cette figure, les flèches bleues représentent les flux de matières alors que les flèches rouges représentent les flux de chaleur.

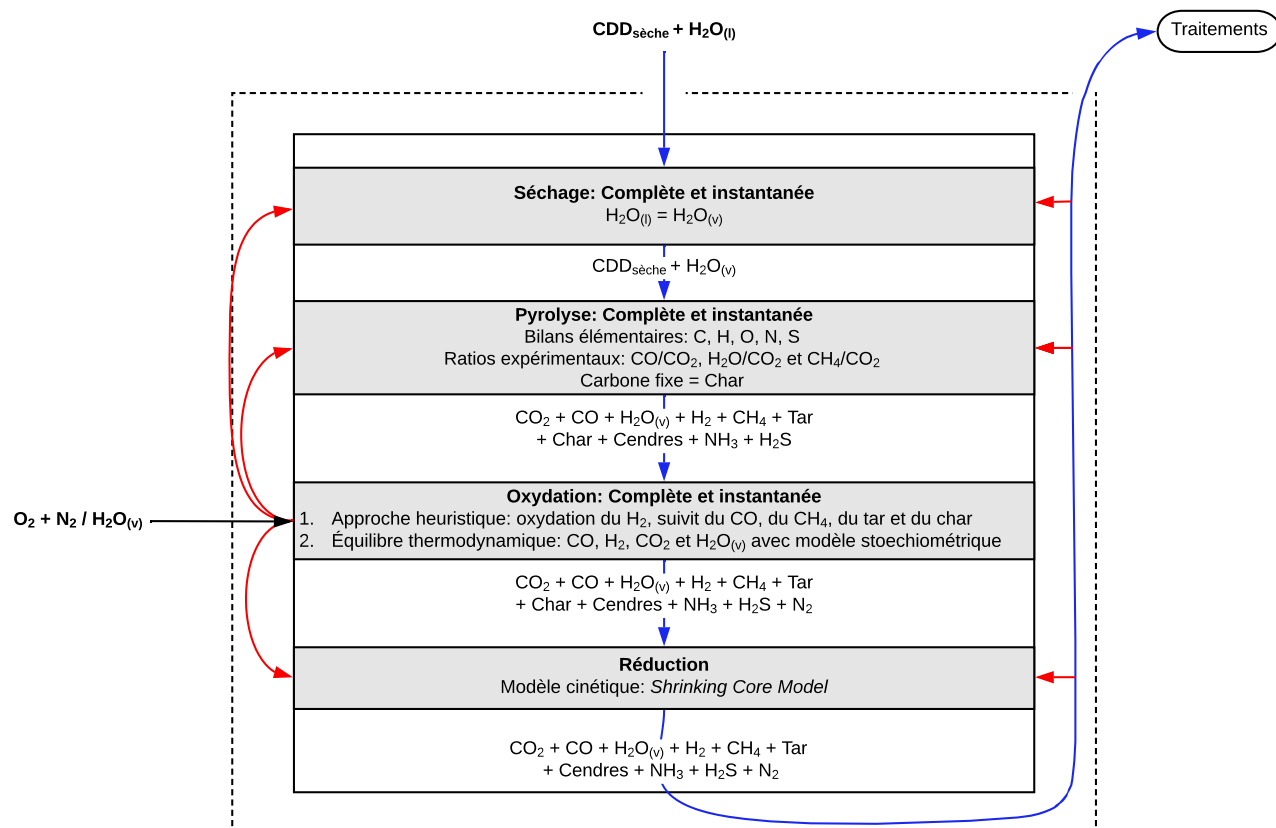


Figure 4-1 Configuration générale du modèle de gazéification (flèches bleues=flux de matières, flèches rouges=flux de chaleur)

Puisqu'un lit fixe co-courants est sélectionné comme type de gazogène, il est possible de modéliser le réacteur en quatre sous-modèles subséquents (séchage, pyrolyse, oxydation, réduction). Ainsi, la sortie du sous-modèle de séchage représente l'entrée du sous-modèle de pyrolyse, et ainsi de suite. L'énergie fournie par la zone d'oxydation ainsi que l'énergie libérée lors du refroidissement du syngaz (circulant dans une chemise externe) fournissent l'énergie nécessaire aux zones de séchage, de pyrolyse et de réduction.

#### 4.3.4 Intégration du modèle dans la MFA

Le modèle reçoit un courant de CDD ( $\dot{F}_{CDD}$ ) composé de biens ( $\dot{M}_{Papiers}, \dot{M}_{Plastiques}, \dots, \dot{M}_k$ ) provenant du cadre MFA de VMR-Sys. Ces biens sont caractérisés par des éléments ( $\dot{Y}_C, \dot{Y}_H, \dot{Y}_O, \dot{Y}_N, \dot{Y}_S, \dot{Y}_{Cendres}, \dot{Y}_{Eau}$ ) et doivent être transformés en flux de substances de matières volatiles, de carbone fixe, de cendres et d'eau ( $\dot{X}_{MV}, \dot{X}_{CF}, \dot{X}_{Cendres}, \dot{X}_{Eau}$ ) afin de fournir l'information nécessaire au modèle. Après le traitement par gazéification, du syngaz ( $\dot{M}_{Syngaz}$ ) composés des substances CO, H<sub>2</sub> et CH<sub>4</sub> ( $\dot{X}_{CO}, \dot{X}_{H_2}, \dot{X}_{CH_4}$ ) et  $\dot{M}_{Autres}$  composés des substances NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>S, cendres, vapeur, CO<sub>2</sub> et tar ( $\dot{X}_{NH_3}, \dot{X}_{H_2S}, \dot{X}_{Cendres}, \dot{X}_{Vapeur}, \dot{X}_{CO_2}, \dot{X}_{Tar}$ ) sortent du modèle. Ces courants sont réinsérés dans le cadre MFA de VMR-Sys pour par la suite alimenter l'inventaire ACV de VMR-Imp. La Figure 4-2 illustre les flux de courants, de biens, de substances et d'éléments impliqués dans l'insertion du modèle de gazéification dans le cadre MFA de VMR-Sys.

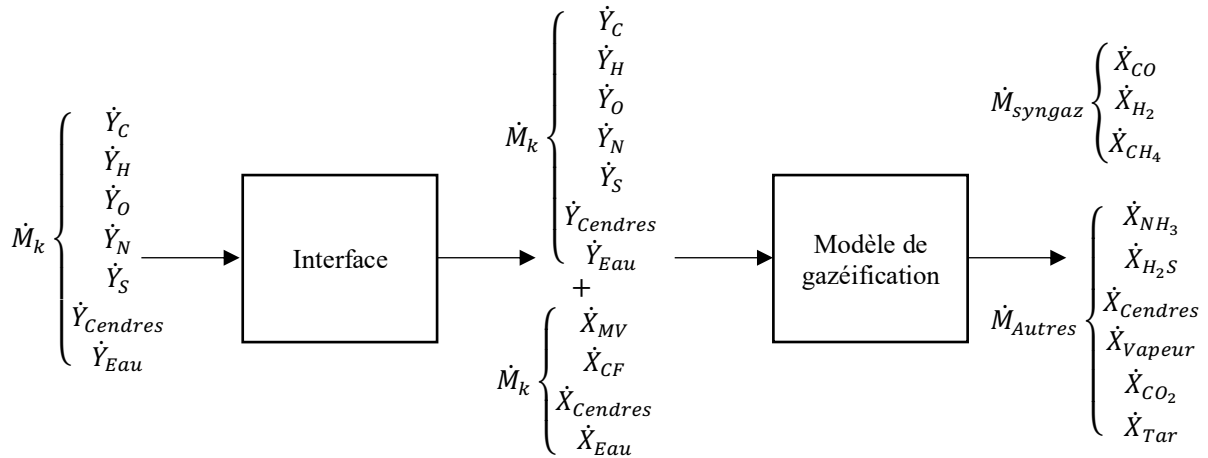


Figure 4-2 Insertion du modèle de gazéification dans le cadre MFA de VMR-Sys

#### 4.3.5 Hypothèses générales

Certaines hypothèses générales s'appliquent pour l'ensemble des sous-modèles.

- Régime permanent Hyp. 1
- Gaz parfaits Hyp. 2
- Effets associés au changement de pression négligeables Hyp. 3
- Particules de CDD de mêmes tailles et sphériques Hyp. 4



- Particules de char de même tailles et sphériques Hyp. 5
- Pas de variations de températures et de concentrations à travers la section du réacteur (seulement selon la longueur) Hyp. 6
- Pas d'agglomération de solides Hyp. 7
- Aucune perte d'énergie à l'environnement Hyp. 8
- Char= $C_{(s)}$ , tar=  $C_6H_{6.2}O_{0.2(g)}$  et cendres=  $SiO_{2(g)}$  Hyp. 9

Il est posé qu'un régime permanent est établi au sein du réacteur, assumant ainsi que la masse de CDD alimentée au procédé est égale à la masse des produits sortants du réacteur (ni accumulations ni pertes) (*Hyp. 1*). De plus, il est posé que les gaz se comportent comme des gaz parfaits, négligeant ainsi les interactions et le volume des molécules de gaz (*Hyp. 2*).

Les effets associés au changement de pression sont considérés comme étant négligeables (*Hyp. 3*) et les particules de CDD et de char sont posées comme étant de tailles uniformes et parfaitement sphériques (*Hyp. 4 & Hyp. 5*) (Di Blasi & Branca, 2013). Bien que les matières résiduelles destinées à la gazéification ne sont pas parfaitement sphériques, le modèle sera en mesure de capturer les effets des différentes formes de particules à l'aide du terme  $a_c$ , représentant la surface volumétrique des particules (1/m). Ce terme est contenu dans les expressions du *Shrinking Core Model*, utilisé pour représenter le sous-modèle de réduction.

Il est assumé qu'il n'y ait aucune variation de températures et de concentrations à travers la section du réacteur (seulement selon la longueur) (*Hyp. 6*) et qu'il n'y a pas d'agglomération de solides (*Hyp. 7*). Enfin, l'hypothèse qu'il n'y a aucune perte d'énergie à l'environnement est posée (*Hyp. 8*) et le char, le tar et les cendres sont approximés comme étant du graphite ( $C_{(s)}$ ), du  $C_6H_{6.2}O_{0.2(g)}$  et du  $SiO_{2(g)}$ , respectivement (*Hyp. 9*).

#### 4.3.6 Description du sous-modèle de séchage

À la Figure 4-4, une schématisation du sous-modèle de séchage est présentée. Le flux entrant des CDD est décrit par les flux des substances d'eau, de cendres, de carbone fixe et de matières volatiles,  $\dot{X}_{H_2O(l),0}$ ,  $\dot{X}_{Cendres,0}$ ,  $\dot{X}_{CF,0}$  et  $\dot{X}_{MV,0}$  (kg/s). Ces flux peuvent aussi être exprimés en termes de courants massiques de CDD ( $\dot{F}_{CDDsecs,0}$  en kg/s) et en termes de flux élémentaires massiques ( $\dot{Y}_{e,0}$  pour  $e = C, H, O, N, S, Cendres$  en kg/s). La taille des particules  $Dp_{CDD,0}$  (m) ainsi que la densité

apparente  $\rho_{CDD,0}$  (kg/m<sup>3</sup>) des CDD alimentés au procédé sont aussi fournis par VMR-Sys. La température initiale des CDD  $T_0$  (K) est posée comme étant de 298 K (*Hyp. 10*). Après l'étape de séchage, les CDD secs ( $\dot{F}_{CDD_{secs},1}$  en kg/s) pouvant aussi être exprimées en termes de substances ( $\dot{X}_{i,1}$  pour  $i = \text{Carbone fixe, matières volatiles, Cendres}$  en kg/s) ou en termes d'éléments ( $\dot{Y}_{e,1}$  pour  $e = C, H, O, N, S, \text{Cendres}$  en kg/s) ainsi que la vapeur d'eau  $\dot{X}_{H_2O(v),1}$  sortent à  $T_1$  (K). Ce flux, caractérisé par une taille de particules  $Dp_{CDD,1}$  et une densité apparente de  $\rho_{CDD,1}$  est alimenté à l'étape de pyrolyse.

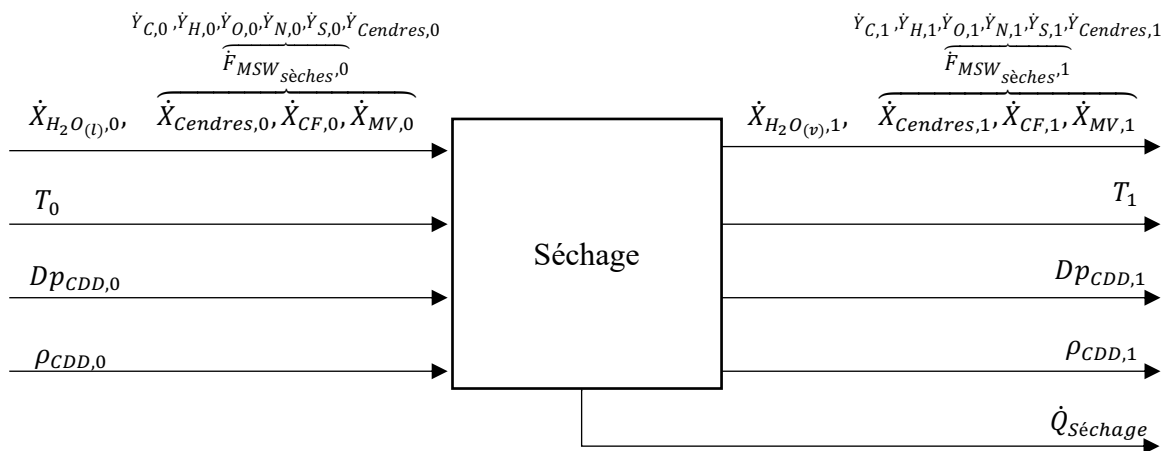


Figure 4-3 Schématisation du sous-modèle de séchage

#### 4.3.6.1 Hypothèses du sous-modèle de séchage

Les hypothèses suivantes sont émises pour le sous-modèle de séchage:

- Matières résiduelles entrent à 298 K *Hyp. 10*
- Flux de cendres, matières volatiles et carbone fixe constants *Hyp. 11*
- Étape de séchage instantanée et complète *Hyp. 12*
- 100% de l'eau libre est évaporé (l'eau liée est incluse dans la composition élémentaire en base sèche) *Hyp. 13*
- Taille de particules constantes *Hyp. 14*
- L'évaporation de l'eau cause une réduction de la densité apparente *Hyp. 15*

#### 4.3.6.2 Bilan massique du sous-modèle de séchage

Il est posé que les flux de cendres, de carbone fixe et de matières volatiles sortants de l'étape de séchage ( $\dot{X}_{Cendres,1}$ ,  $\dot{X}_{CF,1}$  et  $\dot{X}_{MV,1}$ ) sont identiques aux flux entrants (*Hyp. 11*), comme décrit par les équations 4-1, 4-2 et 4-3.

$$\dot{X}_{Cendres,1} = \dot{X}_{Cendres,0} \quad 4-1$$

$$\dot{X}_{CF,1} = \dot{X}_{CF,0} \quad 4-2$$

$$\dot{X}_{MV,1} = \dot{X}_{MV,0} \quad 4-3$$

Durant cette étape, la vaporisation de l'eau contenue dans les CDD commence à 368 K et se termine à 473 K, où la dévolatilisation de la matière débute (Dejtrakulwong & Patumsawad, 2014). Puisque cette étape est rapide en comparaison à la réduction du char, elle est considérée comme étant instantanée et complète (*Hyp. 12*) (Di Blasi, 2000). Il n'est donc pas nécessaire d'utiliser des modèles cinétiques. Une simple relation stœchiométrique suffit pour représenter le procédé instantané et complet de l'évaporation de l'eau. Il est donc posé que 100% de l'eau libre soit évaporée (l'eau liée est incluse dans la composition élémentaire en base sèche) (*Hyp. 13*). Alors, le flux de vapeur d'eau produit lors de l'étape de séchage ( $\dot{X}_{H_2O(v),1}$ ) est égal au flux d'eau entrant dans le procédé ( $\dot{X}_{H_2O(l),0}$ ) comme présenté à l'équation 4-4.

$$\dot{X}_{H_2O(v),1} = \dot{X}_{H_2O(l),0} \quad 4-4$$

De plus, il est assumé que dans cette étape, la taille des particules des CDD reste constante (*Hyp. 14*) (Di Blasi & Branca, 2013; Sharma, 2011). Donc, la taille de particules des CDD sortantes dans l'étape de séchage,  $Dp_{MSW,1}$  (m), est la même que celles des particules entrantes, comme présentées à l'équation 4-5.

$$Dp_{CDD,1} = Dp_{CDD,0} \quad 4-5$$

Enfin, il est posé que l'évaporation de l'eau cause une réduction de la densité apparente des particules de CDD (*Hyp. 15*) (Di Blasi & Branca, 2013; Sharma, 2011). Alors, la densité apparente

initiale,  $\rho_{CDD,0}$  (kg/m<sup>3</sup>), est réduite proportionnellement selon la quantité d'eau évaporée, comme présentée à l'équation 4-6.

$$\rho_{CDD,1} = \rho_{CDD,0} \left( \frac{\dot{X}_{Cendres,1} + \dot{X}_{CF,1} + \dot{X}_{MV,1}}{\dot{X}_{H_2O(l),0} + \dot{X}_{Cendres,0} + \dot{X}_{CF,0} + \dot{X}_{MV,0}} \right) \quad 4-6$$

#### 4.3.6.3 Bilan énergétique du sous-modèle de séchage

En posant une température de séchage  $T_1$  (K), un bilan énergétique entre l'entrée et la sortie du sous-modèle est dressé. La chaleur nécessaire pour évaporer l'eau contenue dans les CDD ( $\dot{Q}_{Séchage}$ , J/s) peut être trouvée à partir de ce bilan, présenté à l'équation 4-7.

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{Séchage} = & \dot{F}_{CDD_{secs},1} \Delta h_{f,CDD_{secs}}^\circ + \sum_{k=1}^N \dot{M}_{k_{secs},1} \int_{T_0}^{T_1} c_{p_{k,secs}} dT \\ & + \dot{X}_{H_2O(v),1} \left( \Delta h_{f,H_2O(v)}^\circ + \int_{T_0}^{T_1} c_{p_{H_2O(v)}} dT \right) \\ & - \dot{F}_{CDD_{secs},1} \Delta h_{f,CDD_{secs}}^\circ - \dot{X}_{H_2O(l),0} \Delta h_{f,H_2O(l)}^\circ \end{aligned} \quad 4-7$$

Afin de calculer  $\dot{Q}_{Séchage}$  il est nécessaire d'exprimer le flux des CDD alimentés en courant ( $\dot{F}_{CDD_{secs}}$ , kg/s) et en biens ( $\dot{M}_{Carton_{secs}}, \dots, \dot{M}_{k_{secs}}$  pour  $N$  biens, kg/s). Il est à noter que le courant de CDD secs ainsi que la somme des biens est égale à la somme des cendres, carbone fixe et matières volatiles, comme présentés aux équations 4-8 et 4-9.

$$\dot{F}_{CDD_{secs}} = \dot{X}_{Cendres} + \dot{X}_{CF} + \dot{X}_{MV} \quad 4-8$$

$$\sum_{k=1}^N \dot{M}_{k_{secs}} = \dot{X}_{Cendres} + \dot{X}_{CF} + \dot{X}_{MV} \quad 4-9$$

Le courant de CDD secs  $\dot{F}_{CDD_{secs}}$  est utilisé pour calculer la quantité d'énergie attribuée à la formation des CDD secs. Pour calculer  $\Delta h_{f,CDD_{secs}}^\circ$  (J/kg), la méthode présentée dans le manuel de Souza-Santos (2010) est utilisée. Cette méthode se base sur le principe du calorimètre, où la matière contenant du C, H, O, N, S et des cendres est complètement brûlée pour produire du CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>(v)</sub>,

NO, SO<sub>2</sub> et des cendres. Afin de calculer la quantité de gaz de combustion produits, il est nécessaire d'exprimer le flux de CDD secs massique ( $\dot{F}_{CDD_{secs},0}$ ) en flux élémentaires massiques  $\dot{Y}_{e,0}$  pour  $e = C, H, O, N, S, Cendres$  en kg/s (équation 4-10). Ensuite, chaque flux élémentaire massique  $\dot{Y}_{e,0}$  peuvent être exprimés en flux élémentaires molaires  $\dot{y}_{e,0}$  (kmoles/s) en divisant par les masses molaires  $M_e$  pour  $e = C, H, O, N, S, Cendres$  en kmoles/kg (équation 4-11).

$$\dot{F}_{CDD_{secs},0} = \dot{Y}_{C,0} + \dot{Y}_{H,0} + \dot{Y}_{O,0} + \dot{Y}_{N,0} + \dot{Y}_{S,0} + \dot{Y}_{Cendres,0} \quad 4-10$$

$$\dot{y}_{e,0} = \frac{\dot{Y}_{e,0}}{M_e} \quad \text{pour } e = C, H, O, N, S, Cendres \quad 4-11$$

Ainsi, il est possible de calculer la quantité de gaz de combustion produits ( $\dot{x}_{i,comb.}$  pour  $i = CO_2, H_2O_{(v)}, NO, SO_2$  en kmoles/s) à l'aide de l'équation 4-12.

$$\begin{aligned} & \frac{\dot{F}_{CDD_{secs},0}}{\dot{Y}_{C,0} + \dot{Y}_{H,0} + \dot{Y}_{O,0} + \dot{Y}_{N,0} + \dot{Y}_{S,0} + \dot{Y}_{Cendres,0}} + \left(1 + \frac{\dot{Y}_{H,0}}{4} - \frac{\dot{Y}_{O,0}}{2} + \frac{\dot{Y}_{N,0}}{2} + \dot{Y}_{Cendres,0}\right) \dot{x}_{O_2,comb.} \\ & \rightarrow \dot{x}_{CO_2,comb.} + \frac{\dot{Y}_{H,0}}{2} \dot{x}_{H_2O_{(v)},comb.} + \dot{Y}_{N,0} \dot{x}_{NO,comb.} + \dot{Y}_{S,0} \dot{x}_{SO_2,comb.} + \dot{Y}_{Cendres,0} \dot{x}_{Cendres,comb.} \end{aligned} \quad 4-12$$

La chaleur libérée lors de la combustion des CDD secs est le  $PCI_{CDD_{sèches}}$  (J/kg). Alors, puisque le  $PCI_{CDD_{sèches}}$  peut être exprimé par la différence entre les chaleurs de formation des produits de combustion ( $\sum_{i=1}^5 \nu_{i,comb.} \Delta h_{f,i,comb.}^\circ$ ) et des CDD ( $\Delta h_{f,CDD_{secs}}^\circ$ ), il est possible d'isoler le terme  $\Delta h_{f,CDD_{secs}}^\circ$ , comme montré à l'équation 4-13, où  $\nu_{i,comb.}$ ,  $h_{f,i,comb.}^\circ$  et  $M_{CDD_{secs}}$  représentent les coefficients stœchiométriques des produits de combustion  $i$ , les chaleurs de formation (J/kmol) des produits de combustion  $i$  et la masse molaire des CDD secs (kg/kmol). La masse molaire des CDD secs peut être obtenue avec l'équation 4-14.

$$\Delta h_{f,CDD_{secs}}^\circ = PCI_{CDD_{secs}} + \frac{1}{M_{CDD_{secs}}} \sum_{i=1}^5 \nu_{i,comb.} \Delta h_{f,i,comb.}^\circ \quad 4-13$$

$$M_{CDD_{secs}} = \sum_{e=1}^6 \frac{\dot{Y}_{e,0} M_C}{\dot{Y}_{e,0} M_e} M_e \quad \text{pour } e = C, H, O, N, S, Cendres \quad 4-14$$

Pour obtenir le  $PCI_{CDD_{secs}}$ , il faut tout d'abord calculer le pouvoir calorifique supérieur  $PCS_{CDD_{secs}}$  des CDD secs (J/kg). Le  $PCS_{CDD_{secs}}$  représente la chaleur dégagée lors de la combustion d'un kilogramme CDD secs, en plus de la chaleur dégagée par la condensation de la vapeur d'eau. Le  $PCS_{CDD_{secs}}$  peut être calculé avec l'équation 4-15, où les  $Y_{e,0}^{\%}$  représentent les fractions massiques de C, H, O, N, S et des cendres dans les CDD secs (analyse ultimée) (équation 4-16). Bien que l'équation 4-15 soit empirique, aucune limite d'applicabilité est fournie dans la méthode présentée dans le manuel de Souza-Santos (2010).

$$PCS_{CDD_{secs}} = 2.326 \times 10^5 (144.5 Y_{C,0}^{\%} + 610.0 Y_{H,0}^{\%} - (65.9 - 31.0 Y_{O,0}^{\%}) Y_{O,0}^{\%} + 40.5 Y_{S,0}^{\%}) (1 - Y_{Cendres,0}^{\%}) \quad 4-15$$

$$Y_{e,0}^{\%} = \frac{\dot{Y}_{e,0}}{\dot{F}_{CDD_{secs},0}} \text{ pour } e = C, H, O, N, S, \text{ Cendres} \quad 4-16$$

Après avoir calculé le  $PCS_{CDD_{secs}}$  il est possible de calculer le  $PCI_{CDD_{secs}}$  avec l'équation 4-17, où  $\Delta h_{vap}$  représente l'enthalpie de vaporisation de l'eau (J/kg).

$$PCI_{CDD_{secs}} = PCS_{CDD_{secs}} - \frac{1}{2} \Delta h_{vap} Y_{H,0}^{\%} \quad 4-17$$

Les courants de biens  $\dot{M}_{k_{secs}}$  sont quant à eux utilisés pour calculer la quantité d'énergie nécessaire pour chauffer les CDD (chaleur sensible). Les chaleurs sensibles des différents biens constituant le flux de CDD sont présentées dans le Tableau 4-2 (Faitli, Magyar, Erdélyi, & Murányi, 2015). Les chaleurs de formations ainsi que les chaleurs spécifiques des autres substances se trouvent en ANNEXE C.

Tableau 4-2 Chaleurs spécifiques (J/kg.K) de différents biens (Faitli, Magyar, Erdélyi & Murany, 2015)

Biens	$Cp_{k,secs}$ (J/kg.K)	Biens	$Cp_{k,secs}$ (J/kg.K)
Papiers	1340	Autres plastiques	1670
Cartons	1340	Herbes	2720
Verres	840	Résidus de jardins	2720
Métaux non-ferreux	480	Résidus alimentaires	2720
Métaux ferreux	480	Feuilles	2720
Autres métaux	480	Couches	2190
PET	1670	Résidus organiques autres	2190
HDPE	1670	Textiles	1290
PS	1670	Bois	2720
PVC	1670	Encombrants	2190

LDPE	1670		
------	------	--	--

### 4.3.7 Description du sous-modèle de pyrolyse

À la Figure 4-4, une schématisation du sous-modèle de pyrolyse est présentée. Les caractéristiques physiques et chimiques des CDD sortant du sous-modèle de séchage constituent les entrées du sous-modèle de pyrolyse. Afin de prédire la composition des gaz de pyrolyse, les CDD secs ( $\dot{F}_{CDD_{secs},1}$  en kg/s) sont exprimées en termes de substances ( $\dot{X}_{i,1}$  pour  $i = \text{Carbone fixe, matières volatiles, Cendres}$  en kg/s) et en termes d'éléments ( $\dot{Y}_{e,1}$  pour  $e = C, H, O, N, S, \text{Cendres}$  en kg/s).

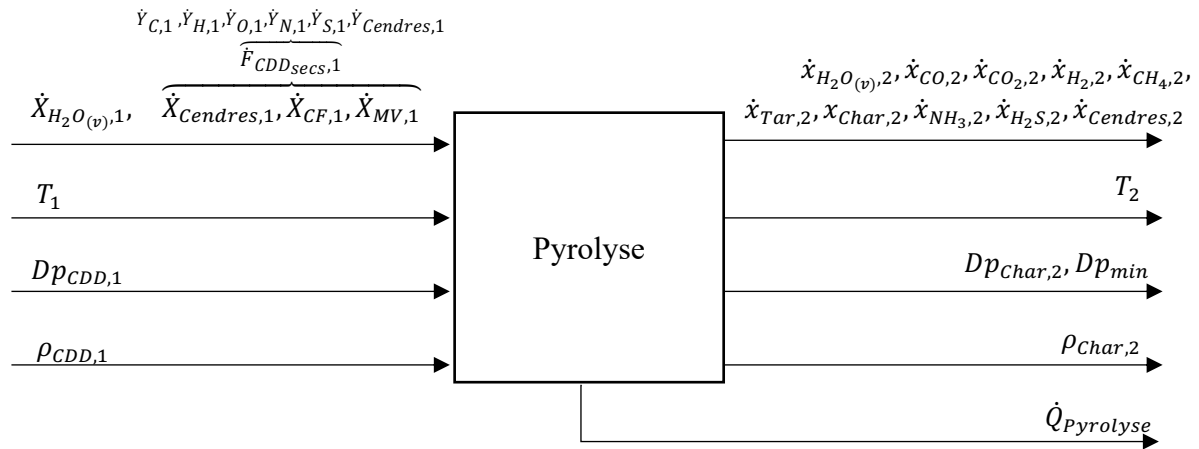


Figure 4-4 Schématisation du sous-modèle de pyrolyse

Après la dévolatilisation des CDD en gaz de la pyrolyse ( $\dot{x}_{i,2}$  pour  $i = CO, CO_2, H_2O_{(v)}, CH_4, H_2, NH_3, H_2S, tar$  en kmoles/s), il reste une substance solide nommée « char » ( $\dot{x}_{Char,2}$ ) et des cendres ( $\dot{x}_{Cendres,2}$ ). Le char est caractérisé par une taille de particules ( $Dp_{Char,2}$ ) ainsi qu'une densité apparente ( $\rho_{Char,2}$ ). Les sorties du sous-modèle de pyrolyse sont exprimées en flux molaires afin de simplifier les équations présentées dans ce présent sous-modèle et les autres à venir.

#### 4.3.7.1 Hypothèses du sous-modèle de pyrolyse

Les hypothèses suivantes sont émises pour le sous-modèle de pyrolyse:

- Étape de pyrolyse instantanée et complète Hyp. 16
- Matières volatiles composées de :  $CO, CO_2, H_2O_{(v)}, CH_4, H_2, NH_3, H_2S$  et tar Hyp. 17  
( $C_6H_{6.2}O_{0.2}$ ), matières solides : Cendres et char

- 100% du carbone fixe se transforme en char Hyp. 18
- Particule de char contient un centre de cendres Hyp. 19
- Quantité de cendres restent constantes Hyp. 20
- La dévolatilisation des CDD cause une réduction de taille de particule Hyp. 21
- La densité apparente du solide est constante Hyp. 22

#### 4.3.7.2 Bilan massique du sous-modèle de pyrolyse

La dévolatilisation des CDD commence à 473 K (Dejtrakulwong & Patumsawad, 2014). Tout comme l'étape de séchage, l'étape de pyrolyse est considérée comme étant instantanée et complète en comparaison avec l'étape de réduction (*Hyp. 16*) (Di Blasi, 2000). Il n'est donc pas nécessaire d'utiliser des modèles cinétiques. Une simple relation stœchiométrique suffit pour représenter le procédé instantané et complet de la dévolatilisation des CDD.

Il est posé comme hypothèse que les CDD secs se dévolatilisent en  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_{(v)}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  et en tar ( $\text{C}_6\text{H}_{6.2}\text{O}_{0.2}$ ), laissant ainsi des cendres et du char sous formes solides (*Hyp. 17*). Afin de calculer la répartition des gaz de pyrolyse, il est nécessaire d'exprimer le flux de CDD secs massique ( $\dot{F}_{CDD_{secs,1}}$ ) en flux élémentaires massiques  $\dot{Y}_{e,1}$  pour  $e = C, H, O, N, S, \text{Cendres}$  en kg/s (équation 4-18). Ensuite, chaque flux élémentaire massique  $\dot{Y}_{e,1}$  peuvent être exprimés en flux élémentaires molaires  $\dot{y}_{e,1}$  (kmoles/s) en divisant par les masses molaires  $M_e$  pour  $e = C, H, O, N, S, \text{Cendres}$  en kmoles/kg (équation 4-19).

$$\dot{F}_{CDD_{secs,1}} = \dot{Y}_{C,1} + \dot{Y}_{H,1} + \dot{Y}_{O,1} + \dot{Y}_{N,1} + \dot{Y}_{S,1} + \dot{Y}_{Cendres,1} \quad 4-18$$

$$\dot{y}_{e,1} = \frac{\dot{Y}_{e,1}}{M_e} \quad \text{pour } e = C, H, O, N, S, \text{Cendres} \quad 4-19$$

Ainsi, il est possible de calculer la quantité de gaz de pyrolyse produits à l'équation 4-20 ( $\dot{x}_{i,2}$  pour  $i = \text{CO}, \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}_{(v)}, \text{CH}_4, \text{H}_2, \text{NH}_3, \text{H}_2\text{S}, \text{tar}, \text{char}, \text{cendres}$  en kmoles/s). Comportant dix valeurs inconnus ( $\dot{x}_{i,2}$ ) il est nécessaire d'ajouter dix spécifications au système d'équations.

$$\overbrace{\dot{y}_{C,1} + \dot{y}_{H,1} + \dot{y}_{O,1} + \dot{y}_{N,1} + \dot{y}_{S,1} + \dot{y}_{Cendres,1}}^{\dot{f}_{CDD_{secs,1}}} \xrightarrow{\text{Pyrolyse}} \quad 4-20$$



$$\dot{x}_{H_2O(v),2} + \dot{x}_{CO,2} + \dot{x}_{CO_2,2} + \dot{x}_{H_2,2} + \dot{x}_{CH_4,2} + \dot{x}_{Tar,2} + \dot{x}_{Char,2} + \dot{x}_{NH_3,2} + \dot{x}_{H_2S,2} + \dot{x}_{Cendres,2}$$

Alors, il est posé que 100% du carbone fixe contenu initialement dans les CDD reste sous-forme solide, produisant ainsi du char (équation 4-21) (*Hyp. 18*).

$$\dot{x}_{CF,1} = \dot{x}_{Char,2} \quad 4-21$$

La particule de char parfaitement sphérique contient un centre de cendres, aussi parfaitement sphérique (Di Blasi & Branca, 2013) (*Hyp. 19*). La quantité de cendres se retrouvant au centre du char est la même que celle initialement contenue dans les CDD (équation 4-22) (*Hyp. 20*).

$$\dot{x}_{Cendres,1} = \dot{x}_{Cendres,2} \quad 4-22$$

Ensuite, les bilans atomiques sur le C, H, O, N, S sont établi (équations 4-23 à 4-27):

$$\mathbf{C}: \quad \dot{y}_{C,1} = \dot{x}_{Char,2} + \dot{x}_{CH_4,2} + \dot{x}_{CO,2} + \dot{x}_{CO_2,2} + 6 \dot{x}_{Tar,2} \quad 4-23$$

$$\mathbf{H}: \quad \dot{y}_{H,1} = 4 \dot{x}_{CH_4,2} + 6.2 \dot{x}_{Tar,2} + 2 \dot{x}_{H_2O(v),2}^* + 2 \dot{x}_{H_2,2} + 2 \dot{x}_{H_2S,2} + 3 \dot{x}_{NH_3,2} \quad 4-24$$

$$\mathbf{O}: \quad \dot{y}_{O,1} = \dot{x}_{CO,2} + 2 \dot{x}_{CO_2,2} + 0.2 \dot{x}_{Tar,2} + \dot{x}_{H_2O(v),2}^* \quad 4-25$$

$$\mathbf{N}: \quad \dot{y}_{N,1} = \dot{x}_{NH_3,2} \quad 4-26$$

$$\mathbf{S}: \quad \dot{y}_{S,1} = \dot{x}_{H_2S,2} \quad 4-27$$

Ayant dix valeurs inconnues (équation 4-20), deux spécifications (équations 4-21 & 4-22) et cinq bilans atomiques (équations 4-23 à 4-27) il est nécessaire d'ajouter trois équations au système pour le résoudre. Ainsi, les ratios présentés dans les travaux de Sharma (2011) sont utilisés (équations 4-28, 4-29 et 4-30). Étant fonction de la température  $T_2$  (K), ces ratios sont en mesure de capturer les effets de la température sur la composition des gaz de pyrolyse. En effet, dans cette étude, il a été observé qu'à haute température ( $>1073$  K), la quantité de tar chute drastiquement vers zéro. Ainsi, pour éviter un flux de tar négatif, ce flux est posé comme étant égal à zéro lorsqu'il devient négatif. En retirant une valeur inconnue du système, il devient donc nécessaire de retirer une spécification afin d'éviter la sur-spécification du système d'équations. Alors, le ratio présenté à l'équation 4-29 est retiré du système lorsque le flux de tar devient négatif.

$$\frac{\dot{X}_{CO,2}}{\dot{X}_{CO_2,2}} = \exp\left(-1.845 + \frac{7730.3}{T_2^2} - \frac{5\,019\,898}{T_2^2}\right) \quad 4-28$$

$$\frac{\dot{X}_{H_2O(v),2^*}}{\dot{X}_{CO_2,2}} = 1 \quad 4-29$$

$$\frac{\dot{X}_{CH_4,2}}{\dot{X}_{CO_2,2}} = 5 \times 10^{-6} T_2^{5.06} \quad 4-30$$

Pour calculer le flux de vapeur d'eau total ( $\dot{X}_{H_2O(v),2}$ ) sortant de l'étape de pyrolyse, le flux de vapeur d'eau produit lors de cette étape ( $\dot{X}_{H_2O(v),2^*}$ ) est additionné à celui de la vapeur d'eau produite à l'étape de séchage ( $\dot{X}_{H_2O(v),1}$ ) (équation 4-31).

$$\dot{X}_{H_2O(v),1} + \dot{X}_{H_2O(v),2^*} = \dot{X}_{H_2O(v),2} \quad 4-31$$

Entraînant une réduction importante de la masse, il est posé comme hypothèse que la dévolatilisation des CDD cause une réduction de la taille des particules (*Hyp. 21*). En supposant une densité apparente constante (*Hyp. 22*), il est possible de calculer la taille des particules de char, sachant que celles-ci sont composées de cendres et de carbone fixe (équations 4-32 & 4-33) (Sharma, 2011). Les flux de cendres, char et CDD présents dans ces équations sont exprimés avec des unités massiques.

$$\rho_{Char,2} = \rho_{CDD,1} \quad 4-32$$

$$Dp_{Char,2} = Dp_{CDD,1} \sqrt[3]{\frac{\dot{X}_{Cendres,2} + \dot{X}_{CF,2}}{\dot{F}_{CDD_{secs},1}}} \quad 4-33$$

De plus, le diamètre minimum de la particule de char peut être calculé avec l'équation 4-34. Ce diamètre représente le diamètre auquel tout le char est consommé, ne restant plus que des cendres. Le  $Dp_{min}$  sera utilisé dans le sous-modèle de réduction.

$$Dp_{min} = Dp_{CDD,1} \sqrt[3]{\frac{\dot{X}_{Cendres,2}}{\dot{F}_{CDDsecs,1}}} \quad 4-34$$

La Figure 4-5 présente une particule de char, de taille  $Dp_{char}$ , contenant un coeur de cendres, de taille  $Dp_{min}$ .

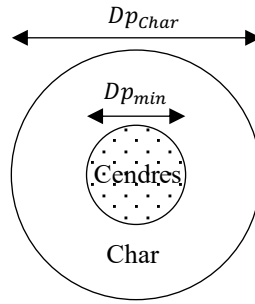


Figure 4-5 Particule de char, contenant un centre de cendres

#### 4.3.7.3 Bilan énergétique du sous-modèle de pyrolyse

En posant une température de dévolatilisation  $T_2$  (K), il est possible de dresser un bilan énergétique entre l'entrée et la sortie du sous-modèle. Ainsi, la chaleur nécessaire pour dévolatiliser les CDD ( $\dot{Q}_{Pyrolyse}$ , J/s) peut être trouvée à partir du bilan présenté à l'équation 4-35, où l'indice  $i$  représente les substances produites lors de la pyrolyse ( $\dot{x}_{i,2}$  pour  $i = CO, CO_2, H_2O_{(v)}, CH_4, H_2, NH_3, H_2S, tar, char, cendres$  en kmoles/s). Dans cette équation,  $h_{f,i}^\circ$  est en J/kmoles alors que  $\int_{T_0}^{T_2} Cp_i dT$  en J/kg.K.

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{Pyrolyse} = & \dot{x}_{i,2} \Delta h_{f,i}^\circ + \frac{\dot{x}_{i,2}}{M_i} \int_{T_0}^{T_2} Cp_i dT - \dot{F}_{CDDsecs,1} \Delta h_{f,CDDsecs}^\circ \\ & - \sum_{k=1}^N \dot{M}_{ksecs,1} \int_{T_0}^{T_1} Cp_{k,secs} dT - \dot{X}_{H_2O_{(v)},1} \left( \Delta h_{f,H_2O_{(v)}}^\circ + \int_{T_0}^{T_1} Cp_{H_2O_{(v)}} dT \right) \end{aligned} \quad 4-35$$

Dans ce sous-modèle, plusieurs effets sont capturés. Pour commencer, les effets de la composition élémentaire des CDD sont capturés par la composition des gaz de pyrolyse produits (ratio H/C/O). Les effets de la teneur en cendres des CDD sont pris en considération par la taille de particule de char (contenant un cœur de cendres). Finalement, les effets des contaminants sont capturés par les quantités de  $NH_3$  et  $H_2S$  présentes dans les gaz de pyrolyse alors que les effets de la température

sont capturés par les ratios des gaz de pyrolyse, présentés aux équations 4-28, 4-29 et 4-30. Tous ces effets viennent indirectement affecter la qualité du syngaz produit à la fin du procédé.

### 4.3.8 Description du sous-modèle d'oxydation

À la Figure 4-6, une schématisation du sous-modèle d'oxydation est présentée. Dans ce sous-modèle, les produits de la pyrolyse ( $\dot{x}_{i,2}$ ) sont oxydés avec un agent de gazéification, qui est dans ce cas-ci composé d'air ( $\dot{x}_{O_2,2}$  et  $\dot{x}_{N_2,2}$ ). Il est à noter que le sous-modèle d'oxydation peut aussi être alimenté avec de l'oxygène pur ou de l'air enrichi en oxygène. Les flux sortants du sous-modèle d'oxydation sont à la température  $T_3$  (K) et le char est caractérisé par une taille de particule  $Dp_{Char,3}$  (m) et une densité apparente  $\rho_{Char,3}$  (kg/m<sup>3</sup>).

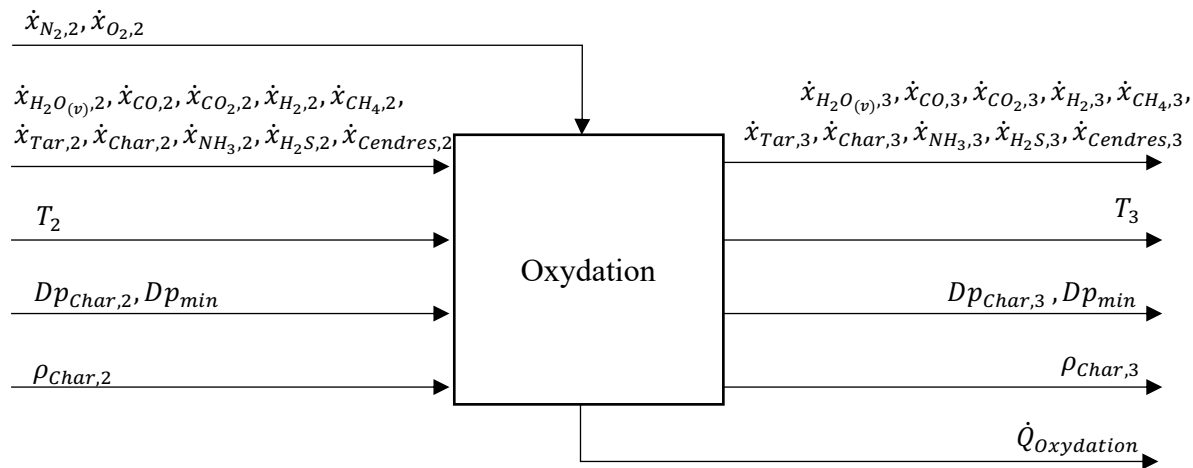


Figure 4-6 Schématisation du sous-modèle d'oxydation

#### 4.3.8.1 Hypothèses du sous-modèle d'oxydation

Les hypothèses suivantes sont émises pour le sous-modèle d'oxydation:

- Étape d'oxydation instantanée et complète Hyp. 23
- Flux d'oxygène et d'azote entrants sont à  $T_2$  (K) Hyp. 24
- Oxydation en ordre :  $H_2$   $CO$ ,  $CH_4$ , char et tar simultanément Hyp. 25
- Étape d'oxydation est à l'équilibre Hyp. 26
- L'oxydation du char entraîne une réduction de taille de particule Hyp. 27
- La densité apparente du char est constante Hyp. 28

#### 4.3.8.2 Bilan massique du sous-modèle d'oxydation

Puisque l'étape d'oxydation est beaucoup plus rapide que l'étape de réduction, elle peut être considérée comme étant instantanée et complète (*Hyp. 23*) (Di Blasi, 2000). Ainsi, des relations stœchiométriques peuvent être utilisées pour représenter ce processus. Afin de prendre en considération les différentes vitesses d'oxydation des produits de pyrolyse, l'approche heuristique proposée dans les travaux de Sharma (2011) est utilisée. Dans cette approche, les produits de la pyrolyse sont autorisés à réagir avec l'oxygène disponible dans un ordre décroissant des vitesses de réaction. Ainsi, plusieurs relations stœchiométriques sont utilisées une après l'autre pour capturer les effets des cinétiques de réactions. Basé sur les valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels présentées au Tableau 2-7, l'ordre des réactions est défini à la Figure 4-7. Les substances  $\dot{x}_{i,2}$  représentent les produits de la pyrolyse alors que les substances  $\dot{x}_{i,3}$  représentent les produits de l'oxydation.

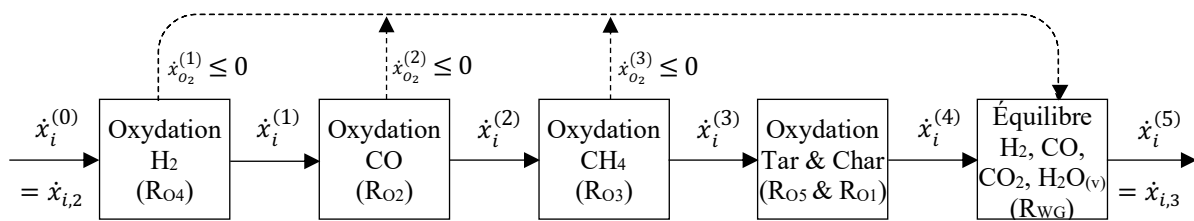


Figure 4-7 Ordre des réactions d'oxydations

Il est supposé que les flux d'oxygène et d'azote entrants dans le sous-modèle sont déjà à  $T_2$  (K) (*Hyp. 24*). Connaissant  $ER$ , il est possible de calculer les flux  $\dot{x}_{O_2,2}$  et  $\dot{x}_{N_2,2}$ , sachant le ratio molaire d'oxygène ( $x_{O_2}^{\%}$ ) dans l'air alimenté au sous-modèle d'oxydation. L'équation 4-36 permet de calculer  $\dot{X}_{O_2,2}$  alors que l'équation 4-37 permet de calculer  $\dot{X}_{N_2,2}$ .

$$\dot{x}_{O_2,2} = ER \left( \frac{\dot{x}_{H_2,2}}{2} + \frac{\dot{x}_{CO,2}}{2} + \frac{3\dot{x}_{CH_4,2}}{2} + \frac{\dot{x}_{Char,2}}{2} + 2.9\dot{x}_{Tar,2} \right) \quad 4-36$$

$$\dot{x}_{N_2,2} = \frac{(1 - x_{O_2}^{\%})}{x_{O_2}^{\%}} \dot{x}_{O_2,2} \quad 4-37$$

Comme illustré à la Figure 4-8, les flux entrants dans la première boîte d'oxydation sont notés  $\dot{x}_i^{(0)}$ . Ces flux sont les mêmes que ceux sortants du sous-modèle de pyrolyse, comme présenté à l'équation 4-38. Ce changement de notation est fait afin de faciliter la compréhension du sous-modèle d'oxydation.

$$x_{i,2} = \dot{x}_i^{(0)} \text{ pour } i = CO, CO_2, CH_4, H_2, H_2O_{(v)}, Char, Tar \quad 4-38$$

Dans ce sous-modèle, l'oxydation du  $H_2$  a lieu en premier, suivi de l'oxydation du  $CO$ , du  $CH_4$  et du char et du tar simultanément (*Hyp.* 25). Ainsi, en prenant l'exemple de l'oxydation de l'hydrogène (équation 4-39), si le flux d'oxygène  $\dot{x}_{O_2}^{(0)}$  est plus grand ou égal à la quantité stœchiométrique d'hydrogène  $\dot{x}_{H_2}^{(0)}$ , l'hydrogène devient le réactif limitant et est complètement consommé (équation 4-40). Ainsi, de la vapeur d'eau  $\dot{x}_{H_2O_{(v)}}^{(1)}$  en quantité stœchiométrique est produite. Le flux d'oxygène restant est donc fonction de la quantité d'hydrogène consommé (équation 4-41).

$$\text{Boîte d'oxydation du } H_2 : \quad \dot{x}_{H_2}^{(0)} + 0.5\dot{x}_{O_2}^{(0)} = \dot{x}_{H_2O_{(v)}}^{(1)} \quad 4-39$$

$$\dot{x}_{O_2}^{(0)} \geq 0.5\dot{x}_{H_2}^{(0)} \rightarrow \text{Oxydation complète du } H_2 \quad 4-40$$

$$\dot{x}_{O_2}^{(1)} = \dot{x}_{O_2}^{(0)} - 0.5\dot{x}_{H_2}^{(0)} \quad 4-41$$

Si  $\dot{x}_{O_2}^{(1)} \geq 0$ , les flux  $\dot{x}_i^{(1)}$  sont alimentés à la prochaine boîte d'oxydation, où le  $CO$  est oxydé. S'il reste toujours de l'oxygène ( $\dot{x}_{O_2}^{(2)} \geq 0$ ), les flux  $\dot{x}_i^{(2)}$  sont alimentés à la boîte d'oxydation du  $CH_4$ . Les réactions impliquées dans les boîtes d'oxydation du  $CO$  et du  $CH_4$  sont présentées aux équations 4-42 et 4-43.

$$\text{Boîte d'oxydation du } CO : \quad \dot{x}_{CO}^{(1)} + 0.5\dot{x}_{O_2}^{(1)} = \dot{x}_{CO_2}^{(2)} \quad 4-42$$

$$\text{Boîte d'oxydation du } CH_4 : \quad \dot{x}_{CH_4}^{(2)} + 1.5\dot{x}_{O_2}^{(2)} = \dot{x}_{CO}^{(3)} + 2\dot{x}_{H_2O_{(v)}}^{(3)} \quad 4-43$$

Après la boîte d'oxydation du CH<sub>4</sub>, si  $\dot{x}_{O_2}^{(3)} \geq 0$ , les flux  $\dot{x}_i^{(3)}$  sont alimentés à la boîte d'oxydation du tar et du char. La méthode utilisée pour calculer les produits en sorties ( $\dot{x}_i^{(4)}$ ) de la boîte d'oxydation du tar et du char est légèrement différente puisque deux réactions d'oxydation se produisent simultanément (équations 4-44 et 4-45).

$$\text{Boîte d'oxydation} \quad \dot{x}_{C_6H_{6.2}O_{0.2}}^{(3)} + 4.45\dot{x}_{O_2}^{(3)} = 6\dot{x}_{CO}^{(4)} + 3.1\dot{x}_{H_2O(v)}^{(4)} \quad 4-44$$

$$\text{du tar et du char :} \quad \dot{x}_C^{(3)} + 0.5\dot{x}_{O_2}^{(3)} = \dot{x}_{CO}^{(4)} \quad 4-45$$

Dans cette boîte, les proportions relatives d'oxygène consommées par les deux réactions sont prises en compte en considérant le rapport entre les deux vitesses de réaction  $r^*$  (équation 4-46), obtenues à partir du Tableau 2-7.

$$r^* = \frac{k_{Char}}{k_{Tar}} \quad 4-46$$

Deux cas peuvent être identifiés: le premier, lorsqu'il y a assez d'oxygène pour oxyder tout le tar et une quantité proportionnelle de char; et le deuxième, lorsqu'il y a moins d'oxygène que nécessaire pour oxyder complètement le tar. Il reste de l'oxygène après l'oxydation du tar et du char si l'équation 4-47 est satisfaite. Dans cette équation, 4.45 kmole/s d'oxygène est utilisé pour oxyder le tar, et le reste est utilisé pour oxyder le char. Ainsi, pour chaque kmole/s de tar oxydé,  $r^*$  kmole/s de char sont aussi oxydées.

$$\dot{x}_{O_2}^{(3)} \geq (4.45 + 0.5r^*)\dot{x}_{Tar}^{(3)} \quad 4-47$$

Dans le cas où il n'y a pas assez d'oxygène pour oxyder le tar et le char (équation 4-48), tout l'oxygène est consommé. Ainsi, l'oxygène devient le réactif limitant.

$$\dot{x}_{O_2}^{(3)} < (4.45 + 0.5r^*)\dot{x}_{Tar}^{(3)} \quad 4-48$$

Dans ce cas, les flux de tar et de char sortants de la boîte d'oxydation peuvent être exprimés selon les équations 4-49 et 4-50, respectivement.

$$\dot{x}_{Tar}^{(4)} = \dot{x}_{Tar}^{(3)} - \frac{\dot{x}_{O_2}^{(3)}}{4.45(1 + r^*)} \quad 4-49$$

$$\dot{x}_{Char}^{(4)} = \dot{x}_{Char}^{(3)} - \frac{\dot{x}_{O_2}^{(3)} r^*}{0.5(1 + r^*)} \quad 4-50$$

Puisque le sous-modèle d'oxydation est caractérisé par une température entre 1200 K et 1600 K, il est possible d'utiliser le modèle d'équilibre thermodynamique stœchiométrique pour prédire les quantités de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O<sub>(v)</sub> à l'équilibre (réaction de *Water-Gas Shift*) (*Hyp. 26*). Ainsi, dépendamment de la quantité d'oxygène alimentée au sous-modèle d'oxydation, soit les flux  $\dot{x}_i^{(1)}, \dot{x}_i^{(2)}, \dot{x}_i^{(3)}$  ou  $\dot{x}_i^{(4)}$  sont alimentés à la boîte d'équilibre. En fait, lorsque le flux d'oxygène atteint zéro, les flux sont automatiquement acheminés à la boîte finale.

Dans la boîte d'équilibre, le ratio des flux impliqués dans la réaction R<sub>WG</sub> est calculé avec le modèle stœchiométrique d'équilibre, présenté à l'équation 4-51, où  $R$ ,  $T_3$  et  $\Delta G_{f,T}^\circ$  représente la constante des gaz parfaits (J/kmol.K), la température d'opération (K) et l'énergie libre de Gibbs standard total (J). L'énergie libre de Gibbs standard total peut être calculée avec l'équation 4-52, où les termes  $\Delta G_{f,i}^\circ$  représentent l'énergie libre de Gibbs standard des gaz  $i = CO, CO_2, H_2O_{(v)}, H_2$ .

$$\dot{x}_{CO_2}^{(5)} \dot{x}_{H_2}^{(5)} / \dot{x}_{CO}^{(5)} \dot{x}_{H_2O}^{(5)} = \exp(-\Delta G_{f,T}^\circ(T_3) / RT_3) \quad 4-51$$

$$-\Delta G_{f,T}^\circ(T_3) = \Delta G_{f,CO}^\circ(T_3) + \Delta G_{f,H_2O_{(v)}}^\circ(T_3) - \Delta G_{f,CO_2}^\circ(T_3) - \Delta G_{f,H_2}^\circ(T_3) \quad 4-52$$

Finalement, les flux sortants de la boîte d'équilibre ( $\dot{x}_i^{(5)}$ ) sont exprimés en termes de flux sortants du sous-modèle d'oxydation ( $\dot{x}_{i,3}$ ) (équation 4-53).

$$\dot{x}_{i,3} = \dot{x}_i^{(5)} \quad 4-53$$

pour  $i = CO, CO_2, H_2, H_2O_{(v)}, CH_4, NH_3, H_2S, Cendres, Char, Tar, N_2, O_2$

Entraînant une réduction de la masse, il est posé comme hypothèse que l'oxydation des CDD cause une réduction de la taille des particules (*Hyp. 27*). En supposant une densité apparente constante



(Hyp. 28), il est possible de calculer la taille des particules de char, sachant que celles-ci sont composées de cendres et de carbone fixe (équations 4-54 & 4-55) (Sharma, 2011). Les flux de cendres et de char présents dans ces équations sont exprimés avec des unités massiques.

$$\rho_{Char,3} = \rho_{Char,2} \quad 4-54$$

$$Dp_{Char,3} = Dp_{Char,2} \sqrt[3]{\frac{\dot{X}_{Cendres,3} + \dot{X}_{CF,3}}{\dot{X}_{Cendres,2} + \dot{X}_{CF,2}}} \quad 4-55$$

#### 4.3.8.3 Bilan énergétique du sous-modèle d'oxydation

En posant une température d'oxydation  $T_3$  (K), il est possible de dresser un bilan énergétique entre l'entrée et la sortie du sous-modèle (Hyp. 8). Ainsi, la chaleur produite lors de l'oxydation des gaz de pyrolyse ( $\dot{Q}_{Oxydation}$ , J/s) peut être calculée à partir du bilan présenté à l'équation 4-56, où l'indice  $i$  inclue les substances produites lors de l'oxydation en plus de l'oxygène et de l'azote alimenté à  $T_2$  et sortants à  $T_3$  (seulement dans le cas de l'azote).

$$\dot{Q}_{Oxydation} = \dot{x}_{i,3} \Delta h_{f,i}^\circ + \frac{\dot{x}_{i,3}}{M_i} \int_{T_0}^{T_3} C p_i dT - \dot{x}_{i,2} \Delta h_{f,i}^\circ - \frac{\dot{x}_{i,2}}{M_i} \int_{T_0}^{T_2} C p_i dT \quad 4-56$$

Ce sous-modèle permet de capturer plusieurs effets. En premier lieu, les effets du ratio d'équivalence ER sont capturés avec la quantité de gaz oxydés et donc la quantité de chaleur libérés par l'étape d'oxydation. Les effets de la température sur la composition des gaz d'oxydation sont pris en considération avec le modèle stœchiométrique d'équilibre thermodynamique.

#### 4.3.9 Description du sous-modèle de réduction

À la Figure 4-8, une schématisation du sous-modèle de réduction est présentée. Dans ce sous-modèle, les produits de l'oxydation ( $\dot{x}_{i,3}$ ) sont réduits en  $\dot{x}_{i,4}$ . Les flux sortants du sous-modèle de réduction sont à la température  $T_4$  (K) et il ne reste plus de char. Les flux molaires produits dans le sous-modèle de réduction ( $\dot{x}_{i,4}$ ) sont fonction de la hauteur de la zone de réduction.

$$\dot{x}_{H_2O(v),3}, \dot{x}_{CO,3}, \dot{x}_{CO_2,3}, \dot{x}_{H_2,3}, \dot{x}_{CH_4,3}, \\ \dot{x}_{Tar,3}, \dot{x}_{Char,3}, \dot{x}_{NH_3,3}, \dot{x}_{H_2S,3}, \dot{x}_{Cendres,3}$$

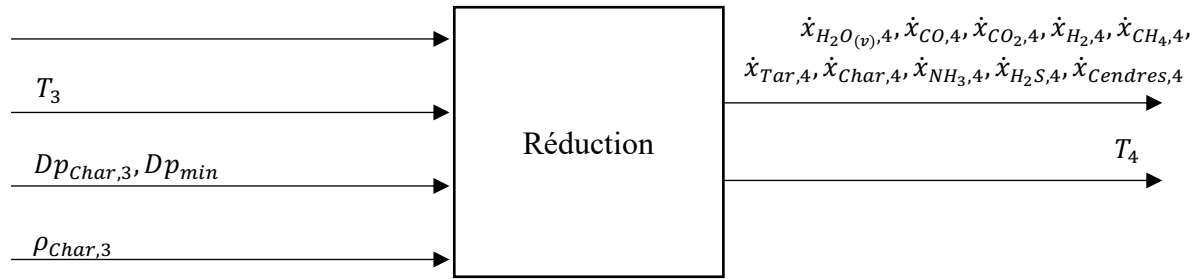


Figure 4-8 Schématisation du sous-modèle de réduction

#### 4.3.9.1 Hypothèses du sous-modèle de réduction

Les hypothèses suivantes sont émises pour le sous-modèle de réduction:

- Étape de réduction non instantanée Hyp. 29
- La réduction du char entraîne une réduction de taille de particule Hyp. 30
- La densité apparente du char est constante Hyp. 31
- $\varepsilon$  varie en fonction de la taille des particules de char Hyp. 32

#### 4.3.9.2 Bilan massique du sous-modèle de réduction

Un modèle cinétique est utilisé pour modéliser la zone de réduction (Hyp. 29). Plus spécifiquement, le modèle présenté dans les travaux de Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo (2008) est utilisé en partie. Dans cette étude, les transferts de masses et d'énergie se font entre les surfaces des gaz ( $A_g$ ) et des solides ( $A_s$ ). Ces termes peuvent être calculés à l'aide des équations 4-57 et 4-58, où  $\varepsilon$  représente la fraction de vide et  $A$  représente l'aire du réacteur (Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo, 2008).

$$A_g = \varepsilon A \quad 4-57$$

$$A_s = (1 - \varepsilon)A \quad 4-58$$

Ainsi, les variables d'états présentées aux équations 4-59 à 4-69 sont utilisées (Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo, 2008). Les valeurs des énergies d'activations et des facteurs pré-exponentiels proviennent du Tableau 2-4 (Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo, 2008).

$$\frac{d\dot{x}_{Char}}{dz} = A_s [-r_{R1} - r_{R2} - r_{R3}] \quad 4-59$$

$$\frac{d\dot{x}_{H_2O(v)}}{dz} = A_s[-r_{R2}] + A_g[-r_{R2} - r_{WG} - 5.8r_5] \quad 4-60$$

$$\frac{d\dot{x}_{H_2}}{dz} = A_s[r_{R3}] + A_g[3r_{R4} + r_{WG} + 8.9r_5] \quad 4-61$$

$$\frac{d\dot{x}_{CH_4}}{dz} = A_s[r_{R3}] + A_g[-r_{R4}] \quad 4-62$$

$$\frac{d\dot{x}_{CO}}{dz} = A_s[2r_{R1} + r_{R2}] + A_g[r_{R4} - r_{WG} + 6r_5] \quad 4-63$$

$$\frac{d\dot{x}_{CO_2}}{dz} = A_s[-r_{R2}] + A_g[r_{WG}] \quad 4-64$$

$$\frac{d\dot{x}_{Tar}}{dz} = A_g[-r_5] \quad 4-65$$

$$\frac{du_g}{dz} = \frac{\sum_{i=1}^9 M_i r_{i,j}}{\rho_g} \text{ pour } \begin{matrix} i = \text{gaz} \\ j = r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_{WG} \end{matrix} \quad 4-66$$

$$\frac{du_s}{dz} = \frac{M_{Char}}{\rho_{Char,4}} [-r_{R1} - r_{R2} - r_{R3}] \quad 4-67$$

Les termes  $u_g$  et  $u_s$  représentent respectivement les vitesses des gaz (m/s) et des solides (m/s).

Leurs valeurs initiales sont calculées à l'aide des équations 4-68 et 4-69.

$$u_g = \frac{\sum_{i=1}^{N_{gaz}} \dot{x}_i M_i}{A_g \rho_g} \text{ pour } i = \text{gaz} \quad 4-68$$

$$u_s = \frac{\sum_{i=1}^{N_{solide}} \dot{x}_i M_i}{A_s \rho_{Char}} \text{ pour } i = \text{solide} \quad 4-69$$

La densité des gaz  $\rho_g$  (kg/m<sup>3</sup>) peut être calculé à l'aide de l'équation 4-70.

$$\rho_g = \sum_{i=1}^{N_{gaz}} C_i M_i \text{ pour } i = \text{gaz} \quad 4-70$$

Le  $\varepsilon$  varie en fonction de la taille des particules de char (*Hyp. 32*). Sa valeur peut être calculée à l'aide de l'équation 4-71 (Gil & Sebastián, 2016).

$$\varepsilon = 0.5 - 0.2 \left( 1 - \frac{Dp}{Dp_{Char,3}} \right) \quad 4-71$$

Au fur et à mesure que le char se fait consommer, sa taille de particule diminue (*Hyp. 30*). La valeur de  $Dp$  est obtenue avec l'équation 4-72 (Sharma, 2011). Il est possible d'observer dans cette équation les indices  $(x)$  et  $(x - 1)$ . Ces indices désignent l'itération  $(x)$  et l'itération  $(x - 1)$ . En effet, une résolution des équations différentielles par la méthode de Euler explicite est utilisée.

$$Dp^{(x)} = Dp^{(x-1)} \sqrt[3]{\frac{\dot{x}_{Char}^{(x)} + \dot{x}_{Cendres,3}}{\dot{x}_{Char}^{(x-1)} + \dot{x}_{Cendres,3}}} \quad 4-72$$

Pour indiquer que tout le char a été consommé, un critère d'arrêt est utilisé (Di Blasi & Branca, 2013). Lorsque  $Dp^{(x)}$  égale à  $Dp_{min}$  (c'est-à-dire le diamètre du cœur de cendres), les réactions  $R_{R1}$ ,  $R_{R2}$  e  $R_{R3}$  sont posées égales à zéros. Pour calculer les coefficients de transferts de masse  $k_{m_i}$  (équation 4-73), il est nécessaire de calculer au préalable le nombre de *Sherwood* (équation 4-74), ainsi que le nombre de *Schmidt* (équation 4-75). Les coefficients de diffusions  $D_i$  (m<sup>2</sup>/s) sont présentés en ANNEXE D.

$$k_{m_i} = \frac{D_i Sh_i}{Dp} \text{ pour } i = CO, H_2O_{(v)}, H_2 \quad 4-73$$

$$Sh_i = 2.0 + 0.6(Re)^{1/2}(Sc_i)^{1/3} \text{ pour } i = CO, H_2O_{(v)}, H_2 \quad 4-74$$

$$Sc_i = \frac{\mu_g}{D_i \rho_g} \text{ pour } i = CO, H_2O_{(v)}, H_2 \quad 4-75$$

Finalement, la viscosité du gaz  $\mu_g$  (Pa.s) est calculé à l'aide de l'équation 4-76. Les viscosités des gaz  $i$  sont calculés avec l'équation 4-77. Les coefficients  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  et  $\gamma_i$  sont présentés en ANNEXE E.

$$\mu_g = \frac{\dot{X}_i \mu_i}{\sum_{i=1}^9 \dot{X}_i} \text{ pour } i = \text{gaz} \quad 4-76$$

$$\mu_i = \alpha_i + \beta_i T_R + \gamma_i (T_R)^2 + \delta_i (T_R)^3 \text{ pour } i = \text{gaz} \quad 4-77$$

Dans ce sous-modèle, la quantité de cendres (équation 4-57) ainsi que la densité apparente de la particule de char restent constantes (*Hyp. 31*).

$$\dot{x}_{i,4} = \dot{x}_{i,3} \text{ pour } i = \text{Cendres}, N_2, \text{tar}, NH_3, H_2S, O_2 \quad 4-78$$

#### 4.3.9.3 Bilan énergétique du sous-modèle de réduction

En posant une température de réduction  $T_4$  (K), il est possible de dresser un bilan énergétique entre l'entrée et la sortie du sous-modèle (*Hyp. 8*). Ainsi, la chaleur nécessaire par l'étape de réduction ( $\dot{Q}_{\text{Réduction}}$ , J/s) peut être calculée à partir du bilan présenté à l'équation 4-79, où l'indice  $i$  représente les substances impliquées dans l'étape de réduction. Le profil de température à travers le réacteur ( $T_1, T_2, T_3$  et  $T_4$ ) ainsi que la température de sortie des syngaz sont posées de manière à ce que le réacteur soit autothermique.

$$\dot{Q}_{\text{Réduction}} = \dot{x}_{i,4} \Delta h_{f,4}^\circ + \frac{\dot{x}_{i,4}}{M_i} \int_{T_0}^{T_4} C p_i dT - \dot{x}_{i,3} \Delta h_{f,i}^\circ - \frac{\dot{x}_{i,3}}{M_i} \int_{T_0}^{T_3} C p_i dT \quad 4-79$$

Ainsi, le sous-modèle de réduction est en mesure de capturer les effets de la taille des particules avec le coefficient de transfert  $k_{m,i}$  et les effets de la température de réduction avec la vitesse de réaction des différentes équations impliquées.

## CHAPITRE 5                      VALIDATION DU MODÈLE

Les prédictions obtenues par le modèle de gazéification sont validées avec les compositions volumiques de CO, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> et CO<sub>2</sub> présentés dans les études expérimentales de Jayah, Aye, Fuller & Stewart (2003) traitant du bois comme matières premières et les études de García-Bacaicoa, Mastral, Ceamanos, Berrueco, & Serrano, (2008), traitant un mélange de bois et de HDPE comme matières premières. Les deux études se conduisent dans des lits fixes à co-courants de tailles pilotes. Les caractéristiques de ces flux ainsi que les conditions opératoires sont présentées au Tableau 5-1.

Tableau 5-1 Caractéristiques des flux entrants et conditions opératoires des données expérimentales

	<b>1</b>	<b>2</b>
Matière	Bois	17.4% HDPE, 82.6% Bois
Débit matière sèche (kg/h)	18.6	30.9
Débit eau (kg/h)	2.73	7.73
Humidité (%)	14.7	25
Densité (kg/m <sup>3</sup> )	330	450
Tailles particules (m)	0.055	0.02
Diamètre gazogène (m)	0.9	0.44
Hauteur gazogène (m)	0.3	2
Débit air (kg/h)	34.6	62.12
Température séchage (K)	373	395
Température pyrolyse (K)	873	634
Température oxydation (K)	1273	1365
Température réduction (K)	1173	1084
Oxydant	Air	Air

Les compositions volumiques de CO, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> et CO<sub>2</sub> présentés à la Figure 5-1 sont obtenues. Il est possible de constater que les résultats obtenus correspondent de manières générales aux résultats présentés dans les deux études expérimentales.

Dans le cas de la validation avec les résultats expérimentaux de Jayah et al., (2003), les compositions élémentaires en termes de C, H, O, N, S et de matières volatiles, carbone fixe, cendres et humidité du bois présentées dans leurs travaux ont été utilisées. Il est possible d'observer d'assez bonnes concordances entre le modèle et les résultats expérimentaux pour le CO<sub>2</sub>, le CH<sub>4</sub> et le CO. Cependant, comme démontré à la Figure 5-1, le modèle prédit de plus grandes quantités de H<sub>2</sub> et de plus faibles quantités de N<sub>2</sub> en comparaison avec les résultats expérimentaux de Jayah, Aye, Fuller & Stewart (2003).

En ce qui concerne la validation du modèle avec les résultats expérimentaux présentés dans les travaux de Garcia-Bacaicoa et al., (2008) traitant un flux de bois mélangé à du HDPE, les compositions élémentaires fournies par VMR-Sys ont été utilisées. Ainsi, la validité du modèle est testée dans son intégralité. Cependant, en observant les données présentées à la Figure 5-1, il est possible de constater que le modèle prédit de plus grandes quantités de H<sub>2</sub> et de CO<sub>2</sub> et de plus faibles quantités de CO. Ceci peut être attribué au fait que les compositions élémentaires décrivant le bois et le HDPE fournis par VMR-Sys diffèrent des compositions élémentaires des matières utilisées dans cette étude.

Par contre, les différences en termes des quantités de H<sub>2</sub> entre les séries de résultats expérimentaux et les prédictions du modèle peuvent seulement s'expliquer par la présence d'hypothèses sursimplificatrices ou l'utilisation de coefficients d'énergies d'activations et de facteurs pré-exponentiels ne représentant pas parfaitement les réactions. En effet, puisque les différences majeures résident dans les quantités de CO et de H<sub>2</sub> produites, il est raisonnable de supposer que la réaction de *Water-Gas Shift* dans la zone de réduction n'est pas en mesure de capturer adéquatement l'équilibre du CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et H<sub>2</sub>. Ainsi, étant caractérisées par une cinétique de réaction trop lente, très peu de H<sub>2</sub> et de CO<sub>2</sub> sont converties en CO et en H<sub>2</sub>O. Ces effets viennent donc augmenter légèrement le ratio H<sub>2</sub>/CO et viennent réduire le ratio H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub> du syngaz produit. Cependant, vue la concordance générale des prédictions du modèle avec les deux études utilisées pour la validation des données, il est acceptable de conclure que les prédictions du modèle sont valides dans le cadre de cette étude, qui représente une première approximation d'un procédé de gazéification.

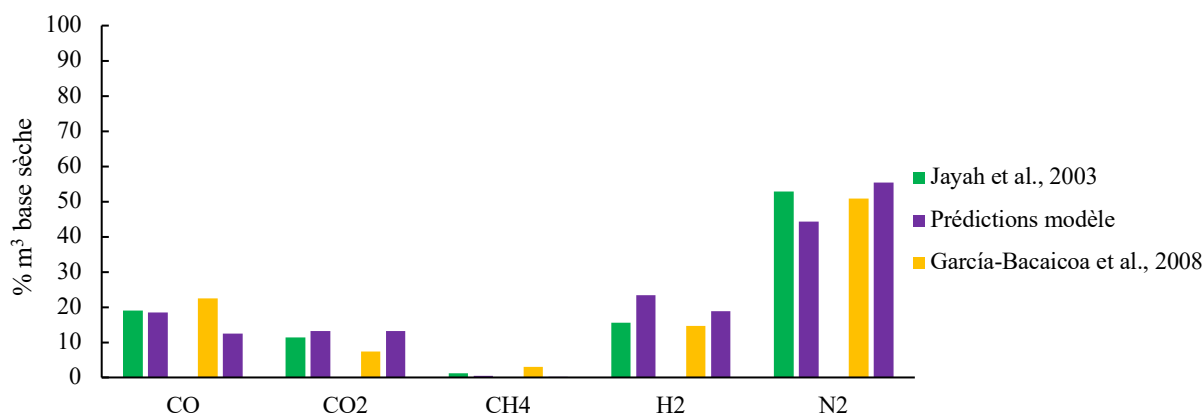


Figure 5-1 Comparaison des prédictions du modèle avec les résultats obtenus dans les études de Jayah et al., 2003 et Garcia-Bacaicoa et al. 2008

## CHAPITRE 6 RÉSULTATS ET DISCUSSION

Dans cette section, les effets des variations de la composition élémentaire, de la teneur en humidité, de la taille des particules, de la densité apparente, du ratio ER et des températures sur les performances de la gazéification sont présentés. Les performances de la gazéification sont comparées selon le ratio  $H_2/CO$ , le ratio  $H_2/CO/CO_2$ , les bilans énergétiques, la composition du syngaz brute et les quantités de contaminants présents dans ce dernier.

### 6.1 Effets de la variation de la composition élémentaire et des propriétés physiques

Pour évaluer les effets de la variation de la composition élémentaire, de la teneur en humidité et de la taille de particules, les paramètres présentés au Tableau 6-1 sont utilisés. Les conditions présentées dans ce tableau représentent des conditions d'opérations et d'alimentations typiques d'un gazogène traitant 20 kg/h de matières résiduelles. En industries, les lits fixes co-courants peuvent traiter des débits allant jusqu'à 400 kg/h (NNFCC & E4tech, 2009). Le modèle est en mesure de traiter de plus grands flux de matières résiduelles.

Tableau 6-1 Paramètres utilisés pour les différentes simulations du modèle

Paramètres	Valeurs
Densité ( $kg/m^3$ )	320
Diamètre gazogène (m)	0.9
Hauteur gazogène (m)	1
Débit alimentation sèche (kg/h)	20
ER	0.5
Température séchage (K)	400
Température pyrolyse (K)	900
Température oxydation (K)	1500
Température réduction (K)	1500
Température air alimenté (K)	298
Température de sortie des syngaz (K)	400
Pression (Pa)	101 925
Oxydant	Air
Itérations	1000

#### 6.1.1 Composition élémentaire

Afin d'évaluer les impacts de la variation de la composition élémentaire sur les performances de la gazéification, cinq flux de 20 kg/h sont alimentés au modèle. Les compositions de ces flux sont



présentées au Tableau 6-2. La composition du flux de CDD provient de la caractérisation faite par Montejo, Ramos, Costa, & Márquez (2010). Des particules de taille uniforme de 10 µm (environ 4") sont utilisées pour les cinq flux à l'entrée du gazogène.

Tableau 6-2 Compositions massiques des flux de 20 kg/h

<b>Flux</b>	<b>Compositions massiques</b>	
CDD	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 14.5% papiers</li> <li>- 14.5% cartons</li> <li>- 0.5% verres</li> <li>- 0.6% métaux non-ferreux</li> <li>- 3.1% métaux ferreux</li> <li>- 1.9% PET</li> <li>- 1.0% HDPE</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 10.9% PS</li> <li>- 11.2 % LDPE</li> <li>- 5.9% couches</li> <li>- 24% organiques</li> <li>- 8.0% textiles</li> <li>- 2.02% bois</li> </ul>
Papiers, cartons	- 50% papiers	- 50% cartons
Plastiques	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 25% PET</li> <li>- 25% HDPE</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- 25% PS</li> <li>- 25% LDPE</li> </ul>
Organiques	- 100% organiques	
Textiles, organiques	- 100% textiles, caoutchouc	

À partir des caractérisations initiales des différentes fractions, les CDD, les papiers/cartons, les plastiques, les organiques et les textiles/caoutchoucs ont des teneurs en humidité de 21.3%, 21.6%, 10.3%, 27.3% et 12.4%, respectivement. Afin d'uniformiser la quantité d'eau présente lors de la gazéification des différents intrants, l'humidité entrante des solides alimentés au gazogène est posée égale à 10%. Ceci permet d'isoler les effets de la composition élémentaire des intrants. L'effet de l'humidité initiale sera pris en compte dans la section suivante. À la Figure 6-1, les différentes quantités de cendres, d'eau, de volatiles, de carbone fixe, de carbone, d'hydrogène, d'oxygène, d'azote et de soufre sont présentées.

En comparaison avec les autres flux, il est possible de constater que les CDD contiennent une grande quantité de cendres, de carbone fixe, d'hydrogène et d'oxygène. Dans le cas des flux de papiers/cartons, il est possible de remarquer que ce flux contient plus de volatiles, de carbone fixe, de carbone, d'hydrogène et d'oxygène. En ce qui concerne le flux des plastiques, ce dernier est caractérisé par une faible quantité de cendres et une grande quantité de volatiles, de carbone et d'hydrogène. Le flux d'organiques contient quant à lui une grande quantité de cendres, de volatiles, de carbone fixe et d'oxygène. Enfin, le flux de textiles et de caoutchoucs est caractérisé par une grande quantité de volatiles, de carbone fixe, de carbone, d'oxygène et d'azote.

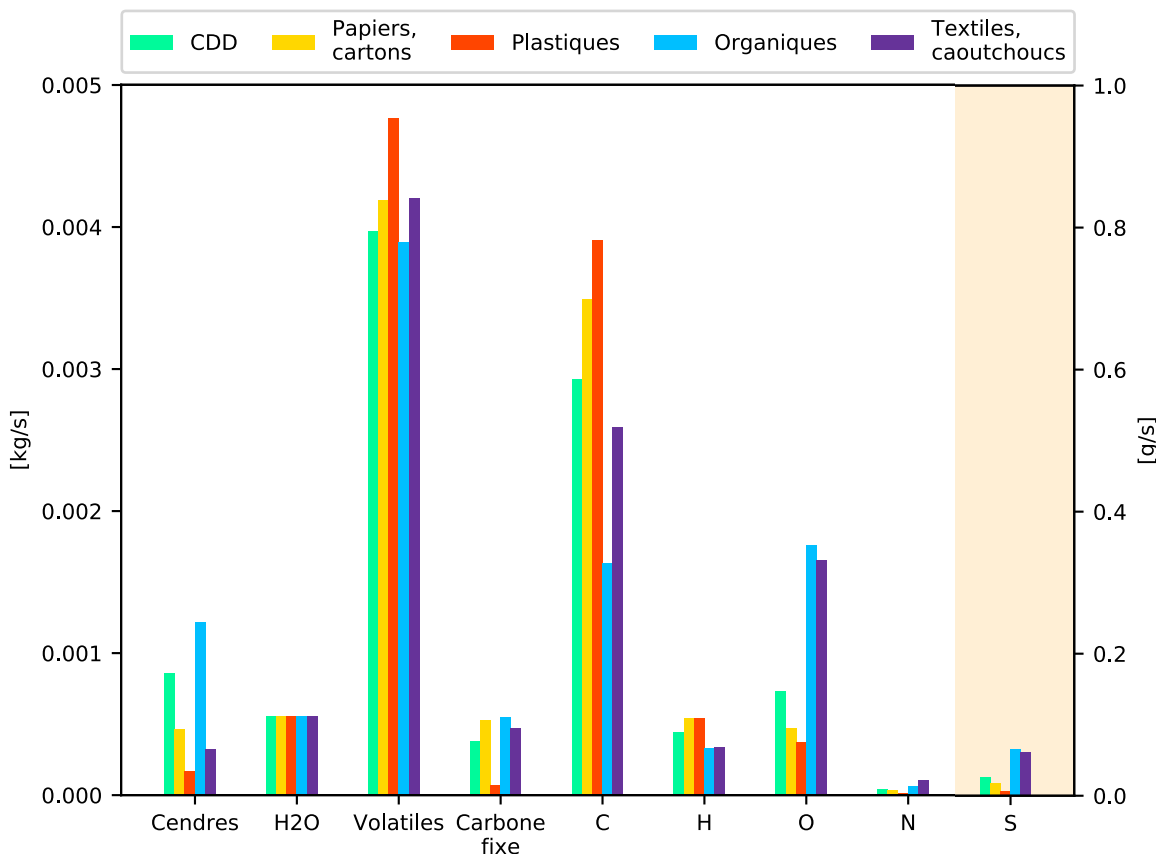


Figure 6-1 Compositions élémentaires en cendres, eau, volatiles, carbone fixe, C, H, O, N et S des flux de CDD, de papiers/cartons, de plastiques, d'organiques et de textiles/caoutchoucs posés à des teneurs en humidité de 10% (fond blanc en kg/s (axe gauche) et fond beige en g/s (axe droite))

### 6.1.1.1 CDD

À la Figure 6-2, les flux massiques de CDD, d'eau, de vapeur, de char, de CO, de CO<sub>2</sub>, de CH<sub>4</sub>, de H<sub>2</sub> et de tar à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction sont présentés. Les flux massiques de NH<sub>3</sub> et H<sub>2</sub>S ne sont pas présentés dans cette figure puisqu'ils sont trop faibles en comparaison avec les autres flux. De plus le flux massique de N<sub>2</sub> n'est pas présenté, car sa valeur est beaucoup plus grande que celles des autres flux. Cependant, les quantités de NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>S et N<sub>2</sub> sont présentées dans le Tableau 6-3. Les zones de séchage, pyrolyse et oxydation sont considérées comme étant instantanées. Ainsi il est possible d'observer qu'à l'étape de séchage, toute l'eau contenue dans les CDD est transformée en vapeur. Par la suite, à l'étape de pyrolyse, les CDD sont dévolatilisés en char, en CO, en CO<sub>2</sub>, en CH<sub>4</sub>, en H<sub>2</sub>, en tar, en H<sub>2</sub>S, en NH<sub>3</sub> et en vapeur d'eau, comme illustré à la Figure 6-2. Par la suite, les gaz de pyrolyse sont oxydés dans la zone d'oxydation. En posant un ER de 0.5, assez d'oxygène est présent pour oxyder complètement le

H<sub>2</sub> (étape 1), le CO (étape 2), le CH<sub>4</sub> (étape 3) et partiellement le tar et le char (étape 4). Lors de l'oxydation de ces réactifs, de la vapeur d'eau et du CO<sub>2</sub> sont produits. Finalement, les gaz d'oxydation et le char sont réduits dans l'étape de réduction. Lors de cette étape, le char et le tar sont complètement consommés. De ce fait même, les quantités de CO et de H<sub>2</sub> augmentent en raison des réactions R<sub>R1</sub>, R<sub>R2</sub>, R<sub>R4</sub> et R<sub>R5</sub>. De plus, la quantité de CO<sub>2</sub> diminue en raison de la réaction du *Water-gas shift*. Enfin, un peu de CH<sub>4</sub> est produit en raison des réactions R<sub>R3</sub> et R<sub>R4</sub>.

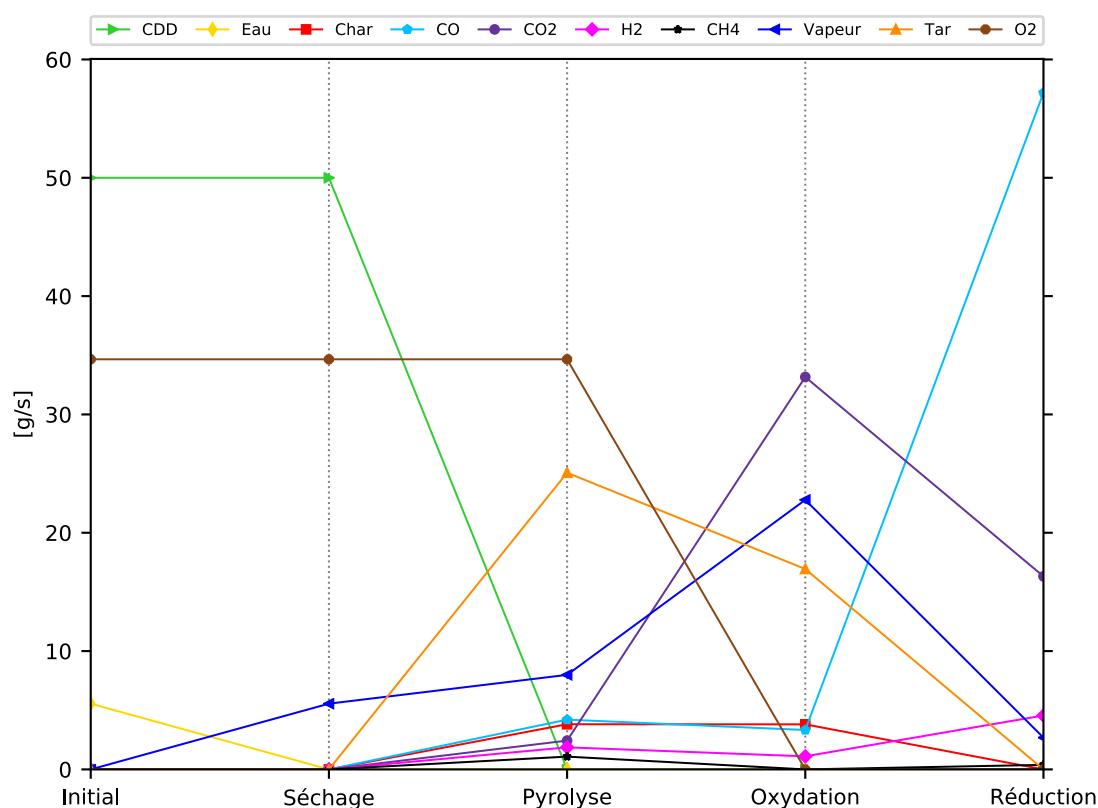


Figure 6-2 Flux massiques des différents produits de la gazéification de CDD à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

La Figure 6-3 présente les flux massiques de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et H<sub>2</sub> avant et après l'étape de *Water-Gas Shift* dans la zone d'oxydation. Il est possible de constater que l'étape d'équilibre du *Water-Gas Shift* dans la zone d'oxydation engendre des différences marquées en termes de composition des gaz impliqués. En effet, puisque beaucoup de vapeur et de CO sont produits par les réactions d'oxydation du H<sub>2</sub>, du CO, du CH<sub>4</sub>, du tar et du char, la vapeur et le CO sont convertit en CO<sub>2</sub> et en H<sub>2</sub> via la réaction de *Water-Gas Shift*.

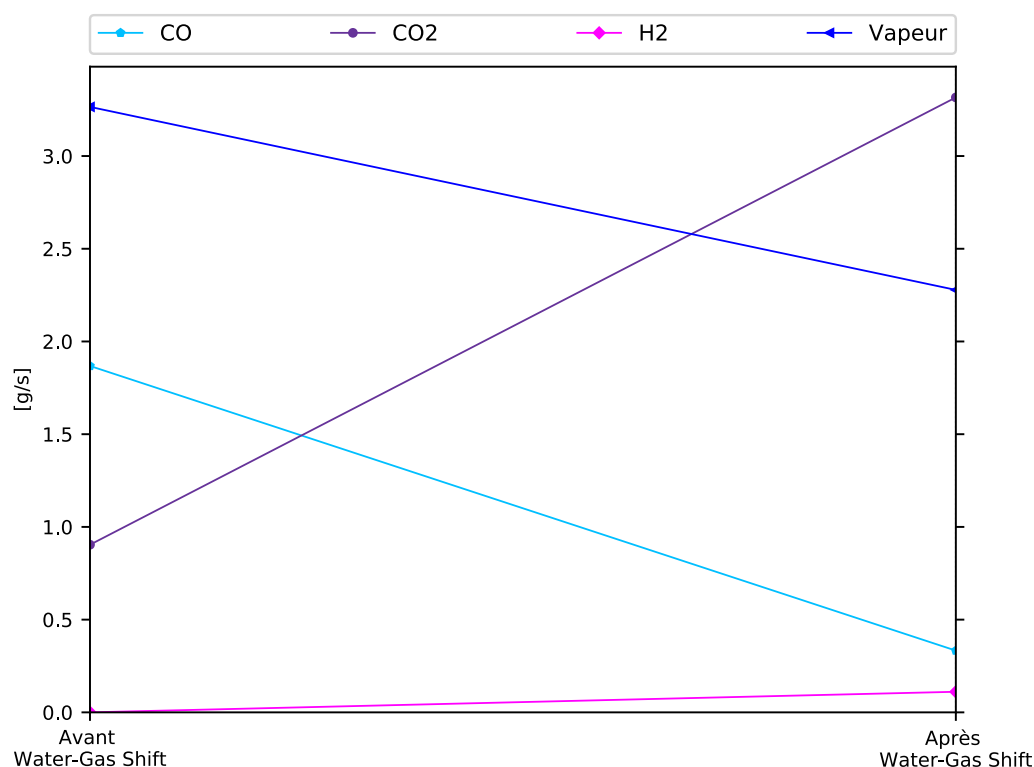


Figure 6-3 Flux massiques de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et H<sub>2</sub> avant et après l'étape de *Water-Gas Shift* dans la zone d'oxydation

La Figure 6-4 présente les flux massiques de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et H<sub>2</sub> sans et avec la réaction de *Water-Gas Shift* dans la zone de réduction. Il est possible de constater que la réaction cinétique de *Water-Gas Shift* dans la zone de réduction engendre de très faibles effets sur les compositions des gaz impliquées. En effet, ceci est attribué au fait que très peu de vapeur est disponible pour être converti en H<sub>2</sub>. La vapeur est consommée rapidement par les réactions de réduction du char, du tar et du méthane. Ainsi, en ajoutant de la vapeur dans la zone de réduction, il deviendrait alors possible de produire plus de H<sub>2</sub>, pour ainsi augmenter le ratio H<sub>2</sub>/CO.

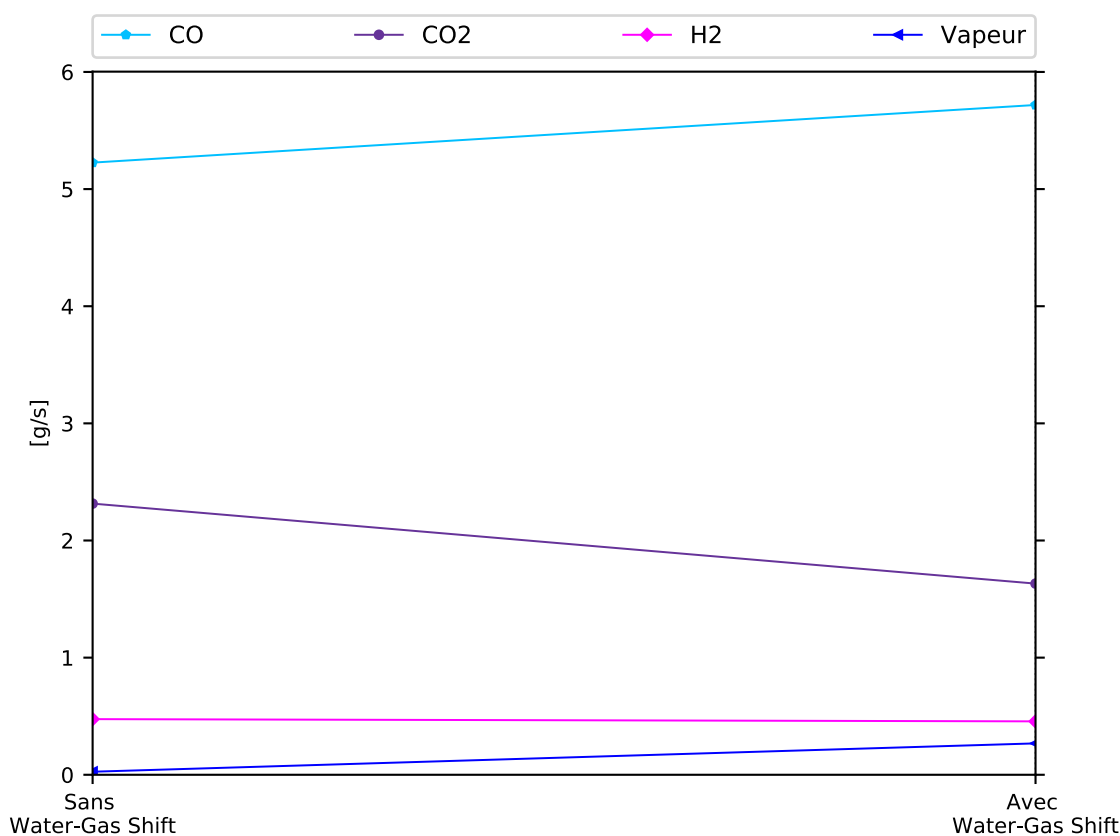


Figure 6-4 Flux massiques de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et H<sub>2</sub> sans et avec la réaction de *Water-Gas Shift* dans la zone de réduction

### 6.1.1.2 Papiers et cartons

À la Figure 6-5, les différents flux massiques impliqués dans la gazéification des papiers/cartons sont présentés. Le flux de papiers/cartons passe initialement dans l'étape de séchage où toute l'eau contenue dans la matière est évaporée. Ensuite, les papiers et cartons sont dévolatilisés dans l'étape de pyrolyse. En comparaison avec la dévolatilisation des CDD, plus de char est produit en raison que le flux de papiers/cartons contient initialement plus de carbone fixe que les CDD. De plus, en comparaison avec les CDD, plus de tar (C<sub>6</sub>H<sub>6.2</sub>O<sub>0.2</sub>) est produit dû au ratio C/H initialement plus élevé des papiers/cartons.

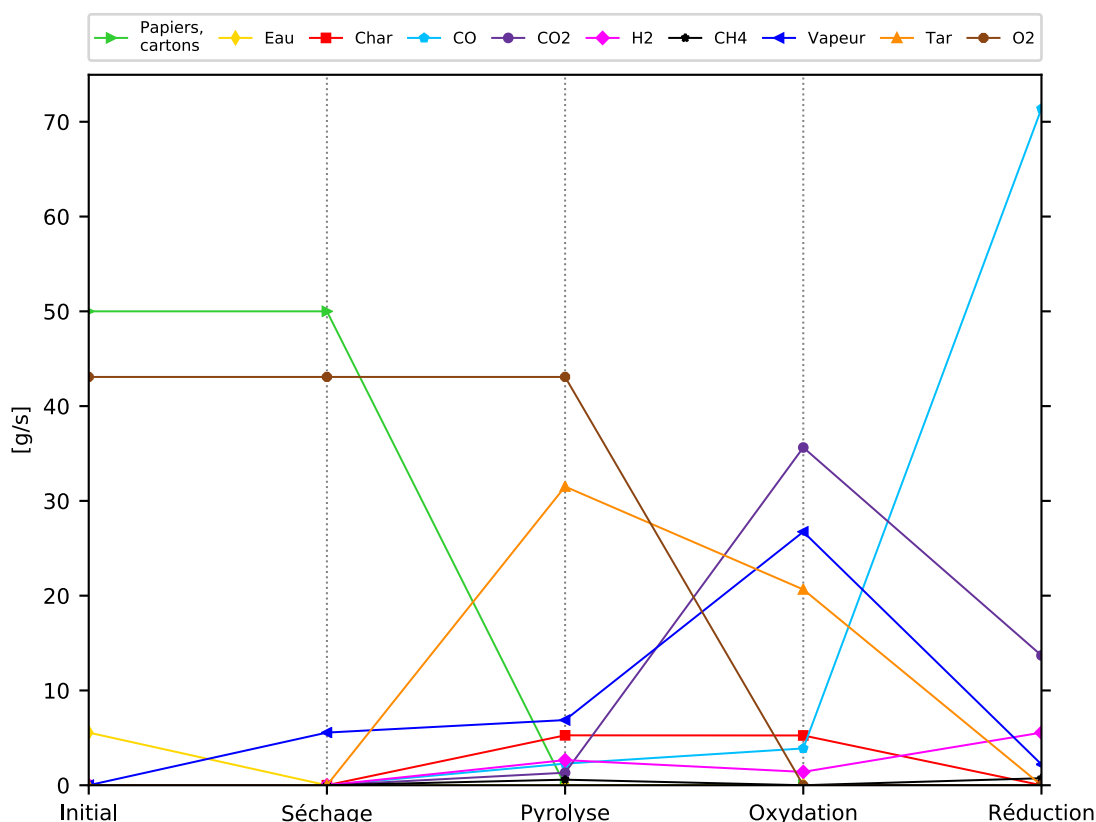


Figure 6-5 Flux massiques des différents produits de la gazéification de papiers/cartons à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5,  $D_p=0.06$  m, oxydant=air)

En posant un ER de 0.5, assez d'oxygène est présent pour oxyder complètement le  $H_2$ , le CO, le  $CH_4$  et partiellement le tar et le char. Lors de cette étape, de la vapeur d'eau et du  $CO_2$  sont produits. En raison de la réaction de *Water-gas shift*, du CO et du  $H_2$  sont aussi produits. Finalement, les gaz d'oxydation et le char sont réduits dans l'étape de réduction. À la Figure 6-9 présentée plus bas, les profils des différents flux molaires dans la zone de réduction sont présentés. Dans cette figure, il est possible d'observer que le char produit par les papiers/cartons prend plus de temps à être consommé. Ceci est dû au fait qu'initialement plus de char est produit durant l'étape de pyrolyse et peu de vapeur d'eau est disponible pour réduire ce dernier ( $R_{R2}$ ). Ainsi, le char prend plus de temps à être réduit. Pendant ce temps, du  $H_2$  est produit par les autres réactions. Ainsi, plus de  $H_2$  est disponible pour réduire le char en  $CH_4$  ( $R_{R4}$ ). Enfin, il est aussi possible d'observer à la Figure 6-9 que la réaction  $R_{R1}$  engendre une réduction de la quantité de  $CO_2$ .

### 6.1.1.3 Plastiques

À la Figure 6-6, les flux massiques impliqués dans la gazéification des plastiques sont présentés. Après l'étape de séchage, les plastiques sont dévolatilisés.

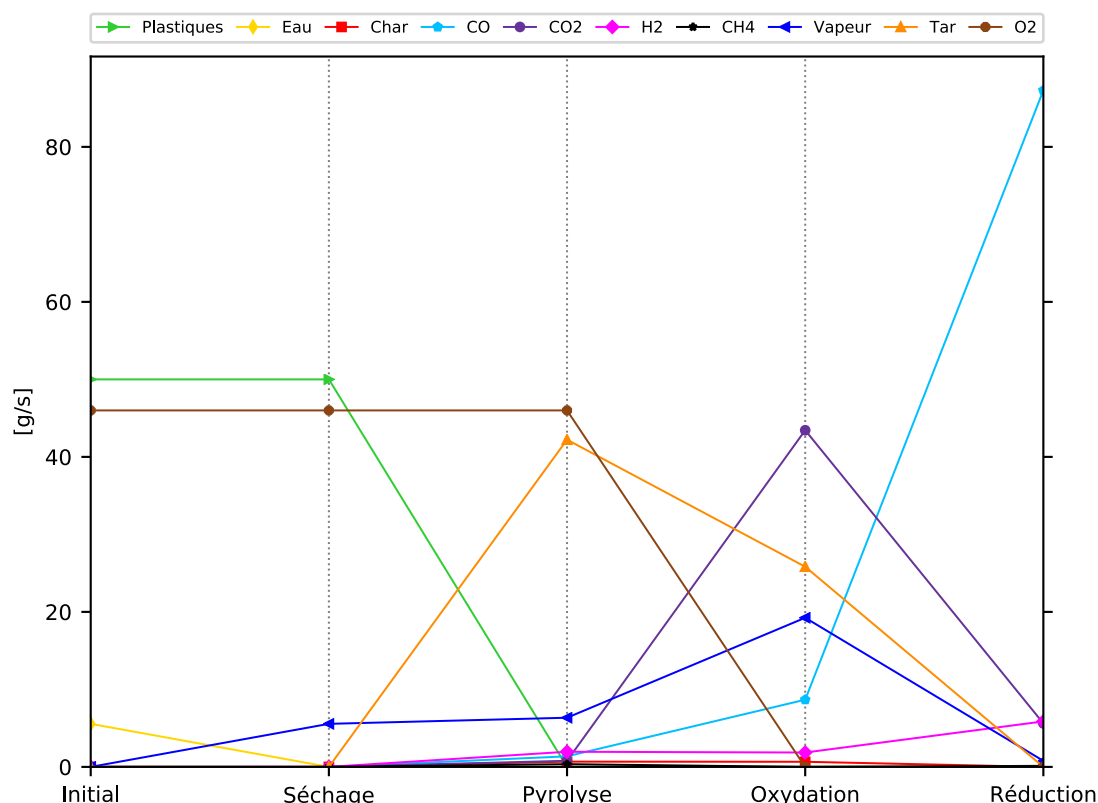


Figure 6-6 Flux massiques des différents produits de la gazéification de plastiques à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

Puisque les plastiques sont caractérisés par un faible contenu en carbone fixe, beaucoup moins de char est produit. De plus, en raison du ratio H/C initialement élevé, la dévolatilisation de cette matière produit une très grande quantité de tar ( $C_6H_{6.2}O_{0.2}$ ). En posant un ER de 0.5, assez d'oxygène est présent pour oxyder complètement le  $H_2$ , le CO, le  $CH_4$  et partiellement le tar et le char. Ainsi, de  $CO_2$  et de la vapeur d'eau est produit. De plus, la réaction de *Water-gas shift*, produits du CO et du  $H_2$ . Lors de l'étape de la réduction, peu de  $CH_4$  est produit en raison de la faible quantité de char initialement présente. De plus, puisque beaucoup de tar est produit lors de l'étape de pyrolyse, il n'est pas complètement consommé durant l'étape de réduction. Il reste donc

une quantité importante de tar dans le syngaz produit à partir des plastiques. Par contre, cette quantité considérable de tar produit d'importantes quantités de CO et de H<sub>2</sub> (R<sub>R5</sub>).

#### 6.1.1.4 Organiques

À la Figure 6-7, les flux massiques produits lors de la gazéification des organiques sont présentés. En comparaison avec le flux de CDD, le flux d'organiques contient plus de carbone fixe. Ainsi, plus de char est produit lors de la pyrolyse de ces matières. Il est aussi possible de constater que lors de la dévolatilisation des organiques, des quantités importantes de CO, CO<sub>2</sub> et de H<sub>2</sub>O sont produites. Ceci est expliqué par le fait que ce flux contient initialement plus d'oxygène. De plus, en produisant plus de CO<sub>2</sub>, plus de CH<sub>4</sub> est produit en raison du ratio  $\frac{\dot{X}_{CH_4,2}}{\dot{X}_{CO_2,2}}$ . Il est aussi possible d'observer que peu de tar est produit pour le flux d'organiques, en raison de leurs ratio C/H initialement faible.

Dans le cas des organiques, en posant un ER de 0.5, assez d'oxygène est présent pour oxyder complètement le H<sub>2</sub> et le CO. Cette différence de degré d'oxydation provient du fait que les organiques produisent plus de CO durant l'étape de pyrolyse que les CDD, demandant ainsi une plus grande quantité d'oxygène pour complètement réagir avec le CO, laissant ainsi très peu pour oxyder le CH<sub>4</sub>, le tar et le char. Lors de l'étape de réduction, peu de H<sub>2</sub> et de CO sont produits, car très peu de tar est disponible pour la réduction. Puisque beaucoup de vapeur d'eau est présente dans la zone de réduction, le CH<sub>4</sub> est rapidement consommé par la réaction R<sub>R4</sub>. De plus, même si beaucoup de char est produit par la dévolatilisation du flux d'organiques, ce dernier est consommé rapidement puisque beaucoup de vapeur d'eau est présente (R<sub>R2</sub>). Enfin, la grande quantité de vapeur produit plus de CO<sub>2</sub> en raison de la réaction de *Water-gas shift*.



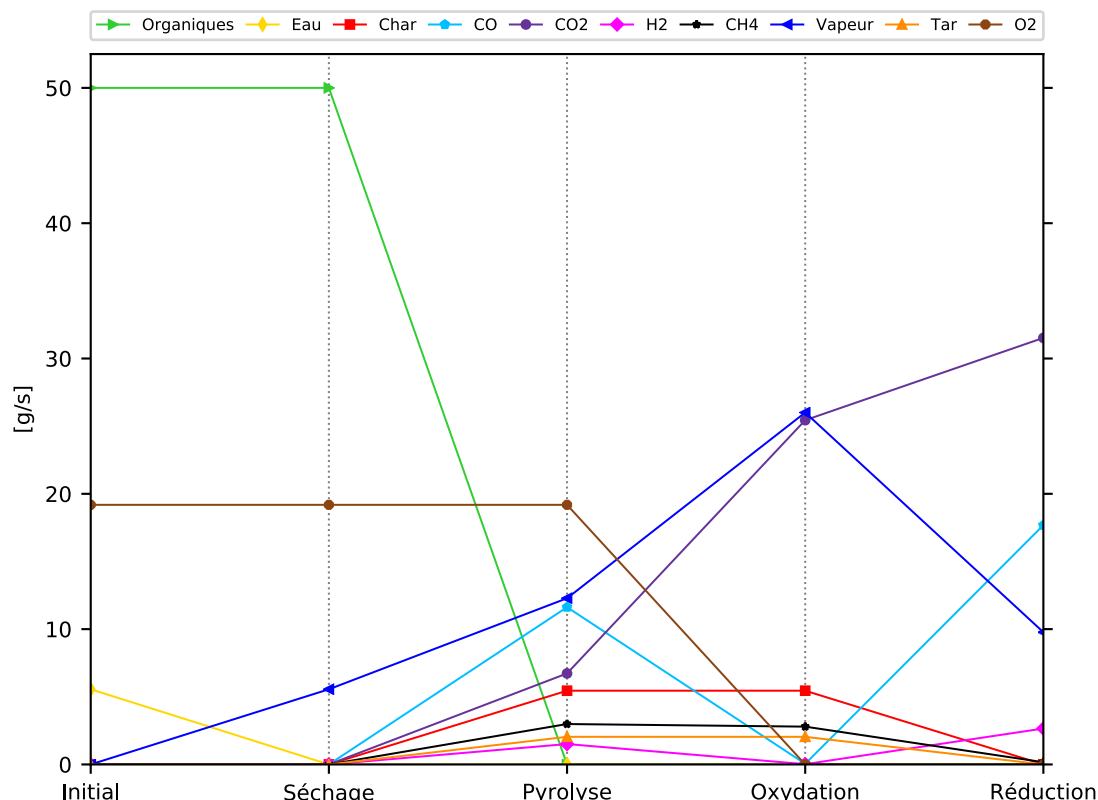


Figure 6-7 Flux massiques des différents produits de la gazéification d'organiques à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

### 6.1.1.5 Textiles et caoutchoucs

À la Figure 6-8, les flux massiques produits lors de la gazéification des textiles et des caoutchoucs sont présentés. Lors de la dévolatilisation des textiles et caoutchoucs, des quantités importantes de char sont produites en raison de leurs teneurs en carbone fixe initialement élevées. De plus, le flux de textiles/caoutchoucs produit des quantités importantes de CO, CO<sub>2</sub> et de H<sub>2</sub>O lors de l'étape de la pyrolyse en raison de leurs contenus importants en oxygène. Ainsi, en produisant plus de CO<sub>2</sub>, plus de CH<sub>4</sub> est produit en raison du ratio  $\frac{\dot{X}_{CH_4,2}}{\dot{X}_{CO_2,2}}$ . Dans le cas des textiles et caoutchoucs, en posant un ER de 0.5, assez d'oxygène est présent pour oxyder complètement le H<sub>2</sub>, le CO, le CH<sub>4</sub> et partiellement le tar et le char. Puisque peu de tar est produit lors de la dévolatilisation des textiles et caoutchoucs, la réduction de ce dernier produit très peu de CO et de H<sub>2</sub>. Enfin, le char produit lors de l'étape de dévolatilisation est rapidement consommé en raison des grandes quantités d'eau.

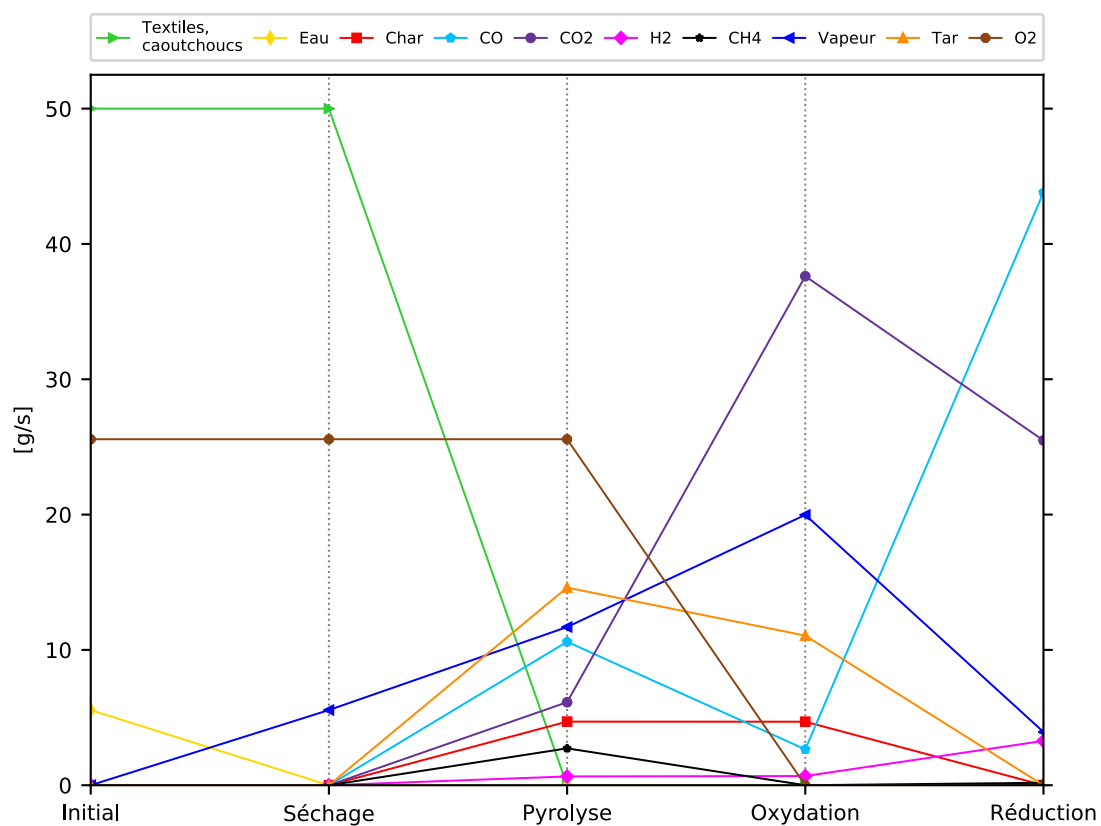


Figure 6-8 Flux massiques des différents produits de la gazéification textiles/caoutchoucs à travers les zones de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

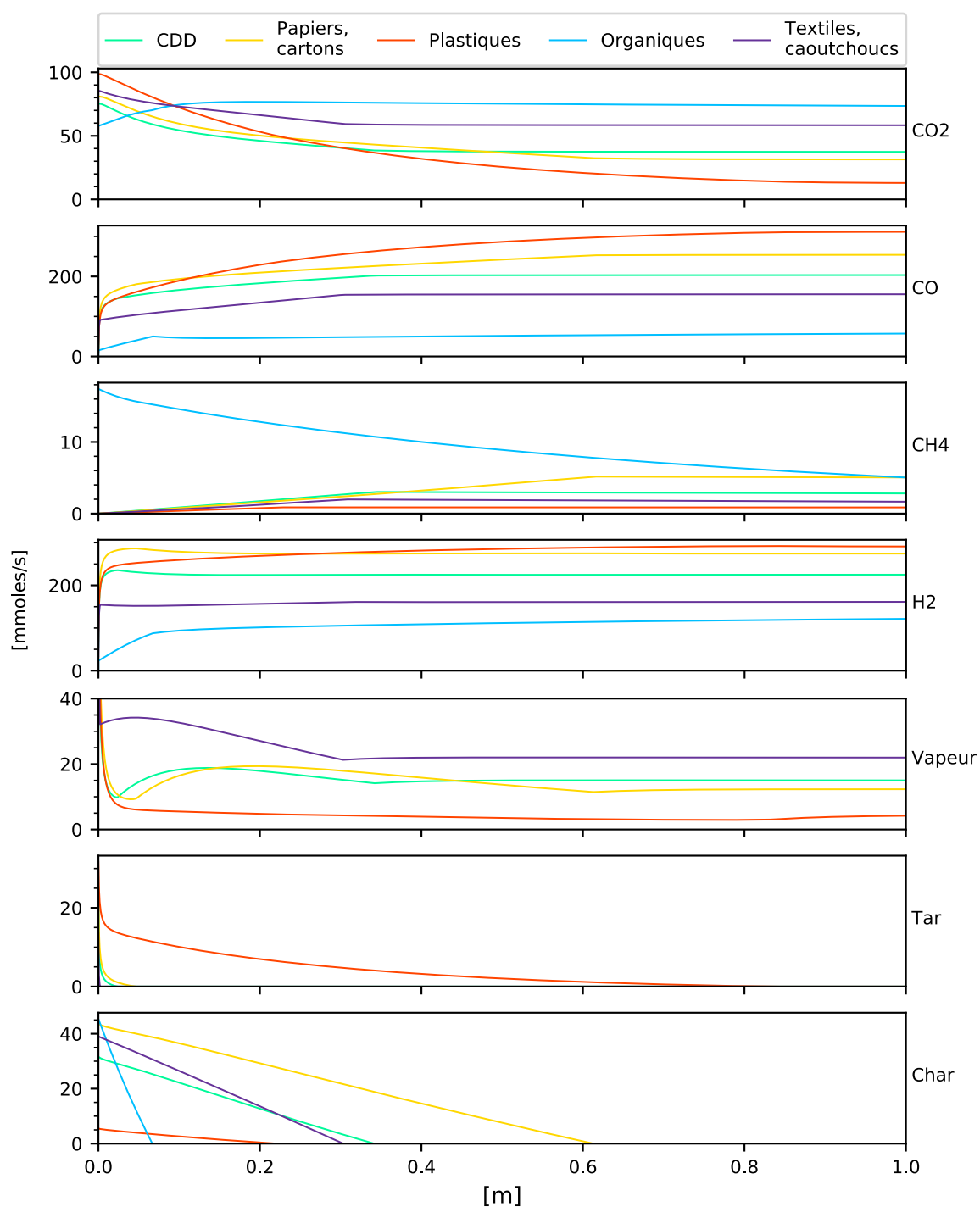


Figure 6-9 Profils des flux molaires des CDD, papiers/cartons, plastiques, organiques et textiles/caoutchoucs dans la zone de réduction (humidité 10%,  $ER=0.5$ ,  $D_p=0.06$  m, oxydant=air)

### 6.1.1.6 Synthèse

Au Tableau 6-3, les flux massiques finaux sont présentés, ainsi que les ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$  des syngaz produits. Initialement, les mêmes quantités de matières sèches et d'eau (10%) sont alimentées pour les flux de CDD, de papiers/cartons, de plastiques, d'organiques et de textiles/caoutchoucs afin de capturer les effets des compositions élémentaires.

Ainsi, en comparant les données présentées dans le Tableau 6-3, il est possible de constater que les papiers produisent le plus de  $CO$ ,  $CH_4$  et  $H_2$  et requièrent le plus d'air pour atteindre un ratio ER de 0.5. Les syngaz produits contiennent peu de  $CO_2$  et de contaminants. En ce qui a trait aux plastiques, ceux-ci produisent un syngaz contenant le moins de  $CH_4$ , de vapeur d'eau, de cendres, de  $NH_3$  et de  $H_2S$  et contient du tar. Le syngaz produit par la gazéification des organiques contient le plus de  $CO_2$ , de vapeur, de cendres et de  $H_2S$  et contient le moins de  $CO$ , de  $H_2$  et ne contient pas de tar. Peu d'air est requis pour oxyder ce flux. Enfin, le syngaz produit lors de la gazéification des textiles et caoutchoucs contient le plus de  $NH_3$  et ne contient pas de tar.

De plus, en comparant les données présentées dans le Tableau 6-3, il est possible de constater que le flux d'organiques produit le ratio  $H_2/CO$  le plus élevé alors que les flux de papiers/cartons et plastiques produisent les meilleurs ratios  $H_2/CO/CO_2$ . Ainsi, selon les résultats obtenus, les syngaz produit à partir des cinq flux de matières résiduelles conviendraient à la synthèse Fischer-Tropsch (catalyseurs Fe) et à la synthèse d'alcools mixtes. Cependant, seuls les syngaz produits à partir des CDD, des papiers/cartons et des plastiques conviendraient à la synthèse de méthanol (catalyseur liquide). En observant les valeurs des différents polluants présentés au Tableau 6-4, il est possible de constater que les syngaz produit à partir des cinq flux de matières résiduelles dépassent les limites en termes de  $H_2S$  (<100 ppb),  $NH_3$  (<10 ppb), halogènes (<10 ppb), métaux alcalins (<10 ppb) et particules de cendres (<1000 ppb) en plus de contenir différents éléments traces devant être retirés du flux de syngaz en vue d'une valorisation moléculaire. Ainsi, plusieurs unités de traitements seraient nécessaires pour nettoyer ces syngaz.

Tableau 6-3 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD, papiers/cartons, plastiques, organiques et textiles/caoutchoucs (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

	<b>CDD</b>	<b>Papiers/ cartons</b>	<b>Plastiques</b>	<b>Organiques</b>	<b>Textiles/ caoutchoucs</b>
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés de l'alimentation</b>					
Matières sèches (kg/s)	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$
Eau (kg/s)	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$
Humidité (%)	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés des produits</b>					
CO (kg/s)	$5.72 \times 10^{-3}$	$7.14 \times 10^{-3}$	$8.73 \times 10^{-3}$	$1.77 \times 10^{-3}$	$4.38 \times 10^{-3}$
CO <sub>2</sub> (kg/s)	$1.63 \times 10^{-3}$	$1.37 \times 10^{-3}$	$5.62 \times 10^{-4}$	$3.15 \times 10^{-3}$	$2.55 \times 10^{-3}$
CH <sub>4</sub> (kg/s)	$3.84 \times 10^{-5}$	$7.40 \times 10^{-5}$	$1.34 \times 10^{-5}$	$1.65 \times 10^{-5}$	$1.82 \times 10^{-5}$
Vapeur (kg/s)	$2.68 \times 10^{-4}$	$2.20 \times 10^{-4}$	$7.80 \times 10^{-5}$	$9.77 \times 10^{-4}$	$3.94 \times 10^{-4}$
H <sub>2</sub> (kg/s)	$4.56 \times 10^{-4}$	$5.55 \times 10^{-4}$	$5.87 \times 10^{-4}$	$2.65 \times 10^{-4}$	$3.28 \times 10^{-4}$
Tar (kg/s)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
N <sub>2</sub> (kg/s)	$1.14 \times 10^{-2}$	$1.42 \times 10^{-2}$	$1.51 \times 10^{-2}$	$6.32 \times 10^{-3}$	$8.42 \times 10^{-3}$
Cendres (kg/s)	$8.60 \times 10^{-4}$	$4.66 \times 10^{-4}$	$1.70 \times 10^{-4}$	$1.21 \times 10^{-3}$	$3.21 \times 10^{-4}$
NH <sub>3</sub> (kg/s)	$4.87 \times 10^{-5}$	$3.98 \times 10^{-5}$	$1.57 \times 10^{-5}$	$7.93 \times 10^{-5}$	$1.24 \times 10^{-4}$
H <sub>2</sub> S (kg/s)	$1.40 \times 10^{-7}$	$9.10 \times 10^{-8}$	$3.38 \times 10^{-8}$	$3.50 \times 10^{-7}$	$3.28 \times 10^{-7}$
Contaminants (kg/s)	$1.83 \times 10^{-5}$	$5.08 \times 10^{-6}$	$5.41 \times 10^{-6}$	$1.81 \times 10^{-5}$	$1.75 \times 10^{-5}$
Ratio H <sub>2</sub> /CO	1.12	1.09	0.94	2.102	1.047
Ratio H <sub>2</sub> /CO/CO <sub>2</sub>	0.79	0.86	0.86	0.453	0.494

Tableau 6-4 Éléments traces des syngaz produits à partir de la gazéification des CDD, papiers/cartons, plastiques, organiques et textiles/caoutchoucs (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

	<b>CDD</b>	<b>Papiers/ cartons</b>	<b>Plastiques</b>	<b>Organiques</b>	<b>Textiles/ caoutchoucs</b>
H <sub>2</sub> S (ppb)	$4.11 \times 10^5$	$9.33 \times 10^4$	$9.30 \times 10^4$	$3.11 \times 10^5$	$3.01 \times 10^5$
NH <sub>3</sub> (ppb)	$2.19 \times 10^6$	$9.62 \times 10^{14}$	$5.40 \times 10^5$	$2.73 \times 10^6$	$4.26 \times 10^6$
Cl (ppb)	$3.05 \times 10^5$	$6.14 \times 10^4$	$7.70 \times 10^4$	$3.12 \times 10^5$	$4.53 \times 10^5$
Br (ppb)	$1.64 \times 10^3$	$2.26 \times 10^2$	$2.53 \times 10^3$	$5.32 \times 10^2$	$1.13 \times 10^3$
F (ppb)	$4.54 \times 10^3$	$3.08 \times 10^3$	$1.06 \times 10^3$	$1.83 \times 10^4$	$3.99 \times 10^3$
Na (ppb)	$5.49 \times 10^3$	$1.40 \times 10^3$	$7.89 \times 10^2$	$2.21 \times 10^4$	$8.72 \times 10^2$
K (ppb)	$1.76 \times 10^3$	$5.23 \times 10^2$	$1.52 \times 10^2$	$9.64 \times 10^3$	$6.21 \times 10^2$
As (ppb)	$1.28 \times 10$	$6.00 \times 10^{-1}$	$5.00 \times 10^{-1}$	$2.43 \times 10$	$2.76 \times 10$
P (ppb)	$3.07 \times 10^2$	$1.70 \times 10^2$	$1.48 \times 10^2$	$9.87 \times 10^2$	$2.98 \times 10^2$
Pb (ppb)	$4.49 \times 10$	$6.04 \times 10^{-1}$	$4.41 \times 10^{-1}$	$4.41 \times 10$	$9.26 \times 10$
Co (ppb)	$6.58 \times 10^{-1}$	$7.21 \times 10^{-1}$	$7.64 \times 10^{-1}$	$5.17 \times 10^{-1}$	$6.05 \times 10^{-1}$
Ni (ppb)	$1.62 \times 10^1$	$7.00 \times 10^{-1}$	$3.85 \times 10$	$7.02 \times 10$	$5.16 \times 10$
Fe (ppb)	$2.33 \times 10^3$	$3.28 \times 10^2$	$1.72 \times 10^2$	$2.54 \times 10^3$	$4.22 \times 10^2$
Tar (ppb)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Particules (ppb)	$1.10 \times 10^7$	$4.86 \times 10^6$	$1.66 \times 10^6$	$1.18 \times 10^7$	$3.13 \times 10^6$

Les bilans énergétiques des différentes étapes sont présentés Tableau 6-5. Il est possible de constater que tous les bilans énergétiques sont exothermiques. Les énergies de préséchage des CDD, des papiers/cartons, des plastiques, des organiques et des textiles/caoutchoucs, à un taux d'humidité de 10% (initialement 21.3%, 21.6%, 10.3%, 27.3% et 12.4%, respectivement), sont présentés au Tableau 6-5.

Tableau 6-5 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD, des papiers/cartons, des plastiques, des organiques et des textiles/caoutchoucs (humidité 10%, ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

	<b>CDD</b>	<b>Papiers/ cartons</b>	<b>Plastiques</b>	<b>Organiques</b>	<b>Textiles/ caoutchoucs</b>
Séchage (kJ/s)	2.30	2.15	2.32	2.58	2.12
Pyrolyse (kJ/s)	19.39	23.22	23.42	13.69	13.96
Oxydation (kJ/s)	-19.32	-24.81	-23.54	-13.35	-12.88
Réduction (kJ/s)	19.51	24.18	25.48	11.15	15.38
Syngaz (kJ/s)	-32.45	-39.08	-41.08	-21.57	-26.51
<b>Total (kJ/s)</b>	<b>-10.58</b>	<b>-14.35</b>	<b>-13.40</b>	<b>-7.50</b>	<b>-7.93</b>
Pré-séchage (kJ/s)	2.49	2.34	0.82	3.48	1.00

### 6.1.2 Teneur en humidité

Afin d'étudier les effets de la variation de la teneur en humidité sur les performances de la gazéification, cinq flux de composés de la même quantité de matières sèches, mais contenant différentes teneurs en humidités (0%, 5%, 10%, 15%, 20%) sont alimentés au modèle. Pour cette étude, un flux de CDD est sélectionné, d'une taille de particules de 0.06 mètre. Les profils des flux molaires dans la zone de réduction sont présentés à la Figure 6-10. Dans cette figure, il est possible de constater que plus la teneur en humidité augmente, plus la quantité de vapeur d'eau augmente aussi. Quant à la quantité de tar, plus il y a de la vapeur d'eau présente moins il y a du tar présent dans le syngaz final, en raison de la réaction  $R_{R5}$ . De plus, la quantité de  $H_2$  présente dans le syngaz augmente en fonction de la teneur en humidité, en raison des réactions  $R_{R2}$ ,  $R_{R4}$ ,  $R_{R5}$  et de la réaction de *Water-gas shift*. À haute teneur en humidité, il est aussi possible de constater que plus de CO est consommé par la réaction de *Water-gas shift*, pour produire du  $CO_2$ . Le char est quant à lui réduit plus rapidement lorsque la quantité de vapeur d'eau est élevée ( $R_{R2}$ ). Cependant, il est intéressant de constater qu'à une teneur en humidité de 10 %, plus de  $CH_4$  est produit. Ceci est expliqué par le fait qu'à 10% d'humidité, il y a la bonne quantité de vapeur d'eau pour ne pas consommer trop rapidement le char (qui produit du  $CH_4$ ) et accélérer juste assez la vitesse de réaction  $R_{R4}$  pour produire plus de  $CH_4$  qu'à 0% ou 5% d'humidité. Enfin, plus de CO et moins de

CO<sub>2</sub> sont produits pour une teneur en humidité de 10% en raison d'un meilleur équilibre entre les réactions et la réaction de *Water-gas shift*.

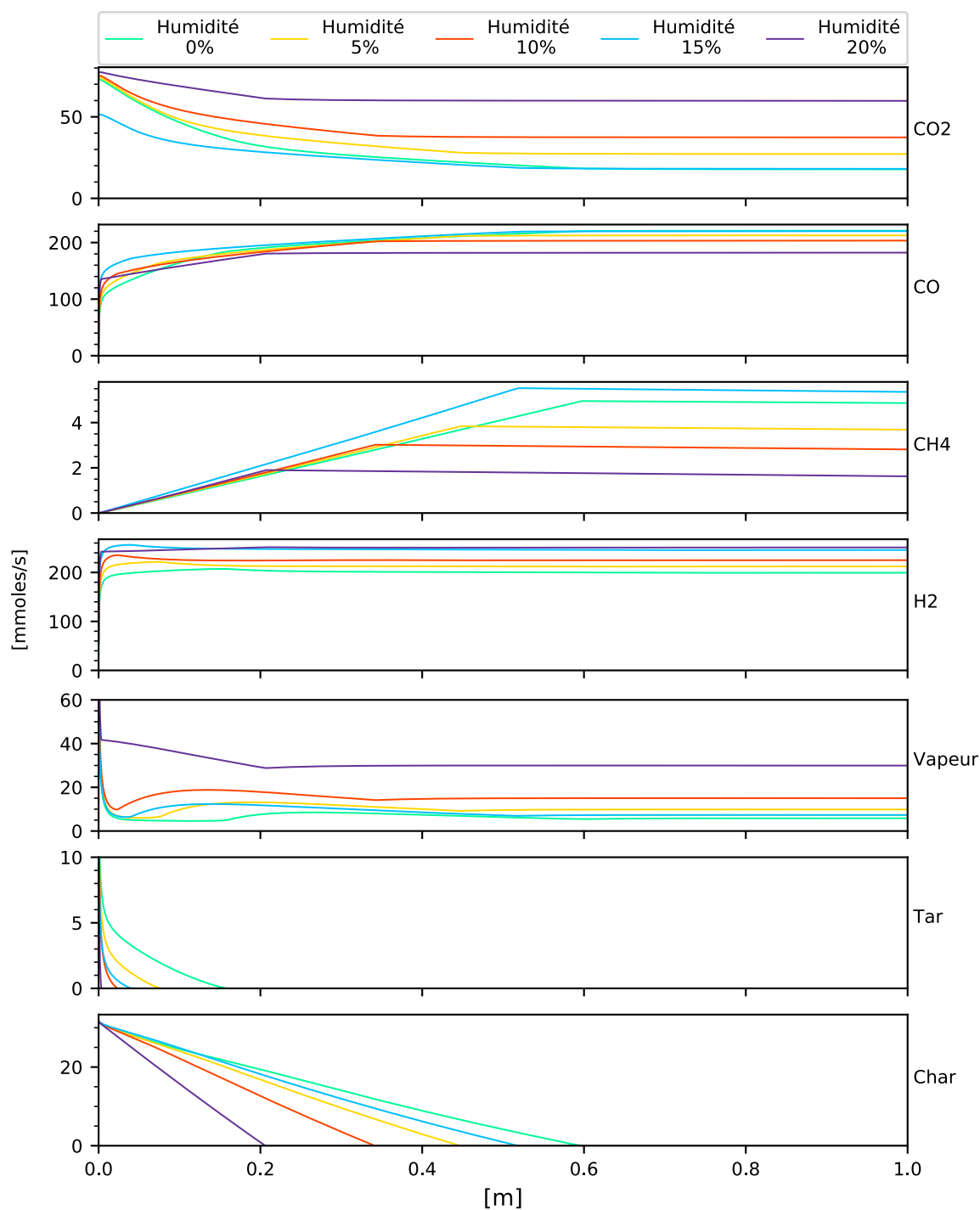


Figure 6-10 Profils des flux molaires des CDD d'une teneur en humidité de 0%, 5%, 10%, 15% et 20% dans la zone de réduction (ER=0.5,  $D_p=0.06$  m, oxydant=air)

Dans le Tableau 6-6, les flux massiques finaux des cinq alimentations du modèle sont présentés, ainsi que les ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$  des syngaz produits. Il est possible de constater qu'un meilleur ratio  $H_2/CO$  est obtenu lorsque le syngaz contient de plus grandes quantité d'eau. Par contre, le ratio  $H_2/CO/CO_2$  est optimisé pour une teneur en humidité de 15% puisqu'à cette teneur, moins de  $CO_2$  est produit. 2Le flux de CDD à 0 % d'humidité serait donc un bon candidat pour la synthèse Fischer-Tropsch et la synthèse d'alcools mixtes alors que le flux de CDD caractérisés par une teneur en humidité de 15% serait un bon candidat pour la synthèse de méthanol.

Tableau 6-6 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 0%, 5%, 10%, 15% et 20%, (ER=0.5,  $D_p=0.06$  m, oxydant=air)

	Humidité 0%	Humidité 5%	Humidité 10%	Humidité 15%	Humidité 20%
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés de l'alimentation</b>					
Matières sèches (kg/s)	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$
Eau (kg/s)	0.00	$2.63 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$8.82 \times 10^{-4}$	$1.25 \times 10^{-3}$
Humidité (%)	0.00	5.00	10.00	15.00	20.00
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés des produits</b>					
CO (kg/s)	$6.19 \times 10^{-3}$	$5.96 \times 10^{-3}$	$5.70 \times 10^{-3}$	$6.18 \times 10^{-3}$	$5.10 \times 10^{-3}$
$CO_2$ (kg/s)	$7.83 \times 10^{-4}$	$1.20 \times 10^{-3}$	$1.65 \times 10^{-3}$	$7.91 \times 10^{-4}$	$2.63 \times 10^{-3}$
$CH_4$ (kg/s)	$7.80 \times 10^{-5}$	$5.91 \times 10^{-5}$	$4.51 \times 10^{-5}$	$8.33 \times 10^{-5}$	$2.61 \times 10^{-3}$
Vapeur (kg/s)	$1.05 \times 10^{-4}$	$1.77 \times 10^{-4}$	$2.70 \times 10^{-4}$	$1.31 \times 10^{-4}$	$5.39 \times 10^{-4}$
$H_2$ (kg/s)	$4.02 \times 10^{-4}$	$4.28 \times 10^{-4}$	$4.54 \times 10^{-4}$	$4.96 \times 10^{-4}$	$5.06 \times 10^{-4}$
Tar (kg/s)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$N_2$ (kg/s)	$1.14 \times 10^{-2}$	$1.14 \times 10^{-2}$	$1.14 \times 10^{-2}$	$8.90 \times 10^{-3}$	$1.14 \times 10^{-2}$
Cendres (kg/s)	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$
$NH_3$ (kg/s)	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$
$H_2S$ (kg/s)	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$
Ratio $H_2/CO$	0.91	1.01	1.11	1.13	1.39
Ratio $H_2/CO/CO_2$	0.77	0.78	0.79	0.96	0.80

Les bilans énergétiques sont présentés au Tableau 6-7. Il est possible d'observer que plus la teneur en humidité est faible, plus le bilan énergétique devient exothermique. En effet, en réduisant la teneur en humidité, l'étape de séchage requiert une moins grande quantité d'énergie pour évaporer le peu d'eau. De plus, l'étape de pyrolyse demande moins d'énergie, car peu de vapeur d'eau est chauffée de 400 K à 900 K. De ce fait même, l'étape d'oxydation est plus exothermique, car moins de vapeur d'eau est chauffée de 900 K à 1500 K. cependant, les syngaz produits libèrent moins d'énergie qu'il est caractérisé par une moins grande quantité de vapeur d'eau. Enfin, en comparant



l'énergie requise pour le préséchage de la matière il est possible de constater qu'il faut plus d'énergie pour pré sécher les CDD à 0% d'humidité.

Tableau 6-7 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 0%, 5%, 10%, 15%, 20% (ER=0.5, Dp=0.06 m, oxydant=air)

	<b>Humidité 0%</b>	<b>Humidité 5%</b>	<b>Humidité 10%</b>	<b>Humidité 15%</b>	<b>Humidité 20%</b>
Séchage (kJ/s)	0.83	1.53	2.30	3.16	4.13
Pyrolyse (kJ/s)	18.82	19.09	19.39	19.73	20.10
Oxydation (kJ/s)	-20.06	-19.71	-19.32	-19.01	-18.38
Réduction (kJ/s)	19.46	19.48	19.41	19.30	19.06
Syngaz (kJ/s)	-30.83	-31.60	-32.45	-33.10	-34.42
<b>Total (kJ/s)</b>	-11.78	-11.22	-10.68	-9.93	-9.51
Pré-séchage (kJ/s)	3.75	3.12	2.49	1.86	1.23

### 6.1.3 Tailles des particules

Afin d'étudier les effets de la variation de la taille des particules sur les performances de la gazéification, différentes tailles de particules (0.02, 0.04, 0.06, 0.08 et 0.1 mètre) de CDD d'une teneur en humidité de 10% sont alimentées au modèle. À la Figure 6-11, les profils des flux molaires dans la zone de réduction sont présentés. En observant cette figure, il est possible de constater que plus la taille de la particule de char est petite, plus celle-ci est consommée rapidement dans la zone de réduction. De ce fait même, plus le char est consommé rapidement, moins de CH<sub>4</sub> est produit puisque la réaction R<sub>R2</sub> est arrêtée. Dans le Tableau 6-8, présentant les flux massiques des syngaz produits, il est aussi possible de constater que plus de CO et moins de CO<sub>2</sub> sont produits pour les plus petites particules. Ceci est dû au fait que les vitesses de réaction des réactions R<sub>R1</sub>, R<sub>R2</sub> et R<sub>R3</sub> sont plus grandes pour des plus petites particules en raison des termes  $k_{mi}$  et  $a_c$  qui varient de manière inversement proportionnelle à la taille de particule. Dans le Tableau 6-8, les ratios H<sub>2</sub>/CO et H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub> des syngaz produits aussi présentés. Il est possible de constater que plus la particule est petite, meilleure sont les ratios H<sub>2</sub>/CO et H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub>. Cependant, les effets des tailles de particules sur ces ratios sont minimales.

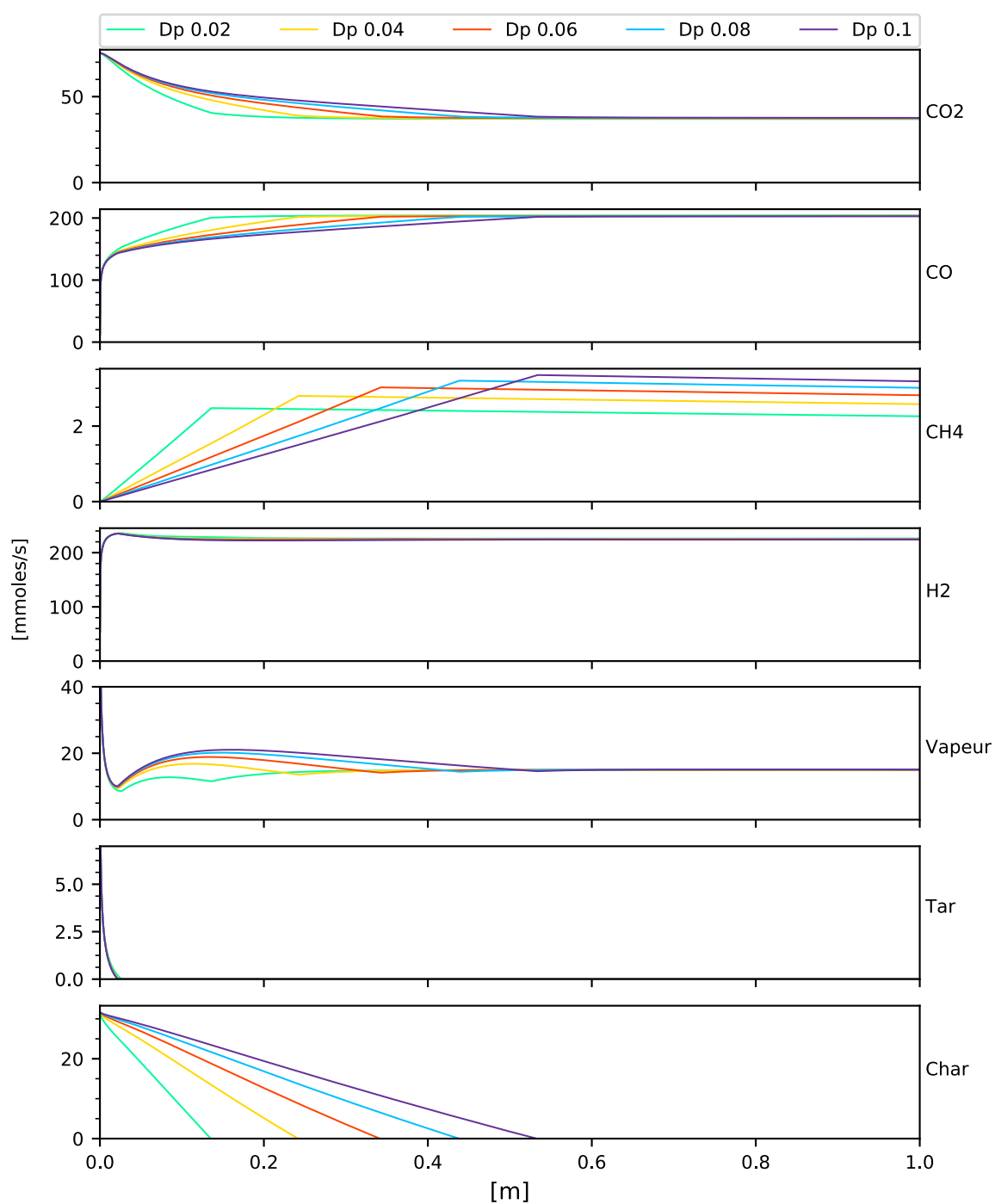


Figure 6-11 Profils des flux molaires des CDD d'une taille de particule de 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 et 0.1 mètre (humidité 10%, ER=0.5, oxydant=air)

Tableau 6-8 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD d'une taille de particule de 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 et 0.1 mètre (humidité 10%, ER=0.5, oxydant=air)

	<b>Dp 0.02</b>	<b>Dp 0.04</b>	<b>Dp 0.06</b>	<b>Dp 0.08</b>	<b>Dp 0.1</b>
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés de l'alimentation</b>					
Matières sèches (kg/s)	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$
Eau (kg/s)	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$
Humidité (%)	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés des produits</b>					
CO (kg/s)	$5.73 \times 10^{-3}$	$5.72 \times 10^{-3}$	$5.70 \times 10^{-3}$	$5.70 \times 10^{-3}$	$5.69 \times 10^{-3}$
CO <sub>2</sub> (kg/s)	$1.62 \times 10^{-3}$	$1.63 \times 10^{-3}$	$1.64 \times 10^{-3}$	$1.65 \times 10^{-3}$	$1.65 \times 10^{-3}$
CH <sub>4</sub> (kg/s)	$3.44 \times 10^{-5}$	$3.92 \times 10^{-5}$	$4.28 \times 10^{-5}$	$4.58 \times 10^{-5}$	$4.84 \times 10^{-5}$
Vapeur (kg/s)	$2.67 \times 10^{-4}$	$2.69 \times 10^{-4}$	$2.70 \times 10^{-4}$	$2.71 \times 10^{-4}$	$2.71 \times 10^{-4}$
H <sub>2</sub> (kg/s)	$4.57 \times 10^{-4}$	$4.55 \times 10^{-4}$	$4.54 \times 10^{-4}$	$4.53 \times 10^{-4}$	$4.53 \times 10^{-4}$
Tar (kg/s)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
N <sub>2</sub> (kg/s)	$1.14 \times 10^{-2}$	$1.14 \times 10^{-2}$	$1.14 \times 10^{-2}$	$1.14 \times 10^{-2}$	$1.14 \times 10^{-2}$
Cendres (kg/s)	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$
NH <sub>3</sub> (kg/s)	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$
H <sub>2</sub> S (kg/s)	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$
Ratio H <sub>2</sub> /CO	1.12	1.12	1.11	1.11	1.11
Ratio H <sub>2</sub> /CO/CO <sub>2</sub>	0.79	0.79	0.79	0.79	0.78

Les bilans énergétiques sont présentés au Tableau 6-9. Comme démontré dans ce tableau, les cinq bilans sont très semblables. Cependant, il est possible d'observer que le bilan énergétique pour la plus petite particule est légèrement plus endothermique.

Tableau 6-9 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD d'une taille de particule de 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 et 0.1 mètre (humidité 10%, ER=0.5, oxydant=air)

	<b>Dp 0.02</b>	<b>Dp 0.04</b>	<b>Dp 0.06</b>	<b>Dp 0.08</b>	<b>Dp 0.1</b>
Séchage (kJ/s)	2.30	2.30	2.30	2.30	2.30
Pyrolyse (kJ/s)	19.39	19.39	19.39	19.39	19.39
Oxydation (kJ/s)	-19.32	-19.32	-19.32	-19.32	-19.32
Réduction (kJ/s)	19.57	19.50	19.44	19.40	19.36
Syngaz (kJ/s)	-32.45	-32.45	-32.45	-32.45	-32.45
<b>Total (kJ/s)</b>	-10.52	-10.59	-10.65	-10.69	-10.73
Pré-séchage (kJ/s)	2.49	2.49	2.49	2.49	2.49

### 6.1.4 Autres paramètres chimiques et physiques

Les effets des variations de la teneur en cendres et de la teneur matières volatile ne sont pas présentés dans cette section. En effet, puisque la variation de la teneur en cendres en affecte uniquement la quantité de cendres se retrouvant dans les produits finaux, il est jugé non pertinent

de montrer les effets de sa variation sur les performances de la gazéification. De plus, puisque les effets de la variation des volatiles sont indirectement considérés à la section 6.1.1 avec la variation du carbone fixe, il n'est pas nécessaire de présenter ces résultats.

## 6.2 Effets des conditions d'opérations

Les effets associés aux variations du ratio ER, du type d'oxydant et des températures d'opérations des zones de pyrolyse et d'oxydation sont présentés dans cette section.

### 6.2.1 Ratio ER

Afin d'étudier les effets de la variation du ratio ER sur les performances de la gazéification, différents ratios de ER de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 sont utilisés pour la gazéification de 20 kg/h de CDD caractérisés par une teneur en humidité de 10% et d'une taille de particule de 0.06 mètre. Les températures d'opérations sont présentées au Tableau 6-1. À la Figure 6-12, les profils des flux molaires dans la zone de réduction sont présentés. Lorsqu'un ratio ER de 0.2 est utilisé, la première réaction d'oxydation, étant celle du  $H_2$ , est incomplète. Ainsi, il ne reste plus d'oxygène pour oxyder le CO, le  $CH_4$ , le tar et le char. Donc, très peu de vapeur d'eau et de  $CO_2$  se retrouve dans le syngaz final, comme il est possible d'observer à la Figure 6-12. De plus, en comparaison avec les compositions des syngaz produits avec les autres ratio ER, moins de CO et de  $H_2$  sont présents dans le syngaz final. La faible quantité de CO est attribuée au fait que la réaction d'oxydation du tar, produisant 6 kilomoles de CO par kilomole de tar oxydé, n'a pas eu lieu dans la zone d'oxydation. Ainsi, moins de CO est présent dans le syngaz lorsqu'un ratio ER de 0.2 est utilisé. La faible quantité de  $H_2$  est aussi attribuée au fait que la réaction d'oxydation du tar n'a pas eu lieu. En effet, puisque moins de vapeur d'eau est présente dans le gaz, moins d'atomes d'hydrogène est disponible pour la réaction de *Water-gas shift* produisant du  $H_2$ . De plus, il est aussi possible d'observer dans cette figure qu'une quantité importante de  $CH_4$  est alimentée à la zone d'oxydation lorsqu'un ratio ER de 0.2 est sélectionné, puisque pas assez d'oxygène est présent pour oxyder ce dernier. En addition, il est possible de constater que dans la zone de réduction, le char prend plus de temps à être réduit puisque moins de  $CO_2$ , de  $H_2O$  et de  $H_2$  sont présents ( $R_{R1}$ ,  $R_{R2}$  et  $R_{R3}$ ). Enfin, pour un ratio ER de 0.2, moins de  $N_2$  se retrouvent dans les produits finaux, puisque moins d'air est alimenté au réacteur, comme présenté au Tableau 6-10.

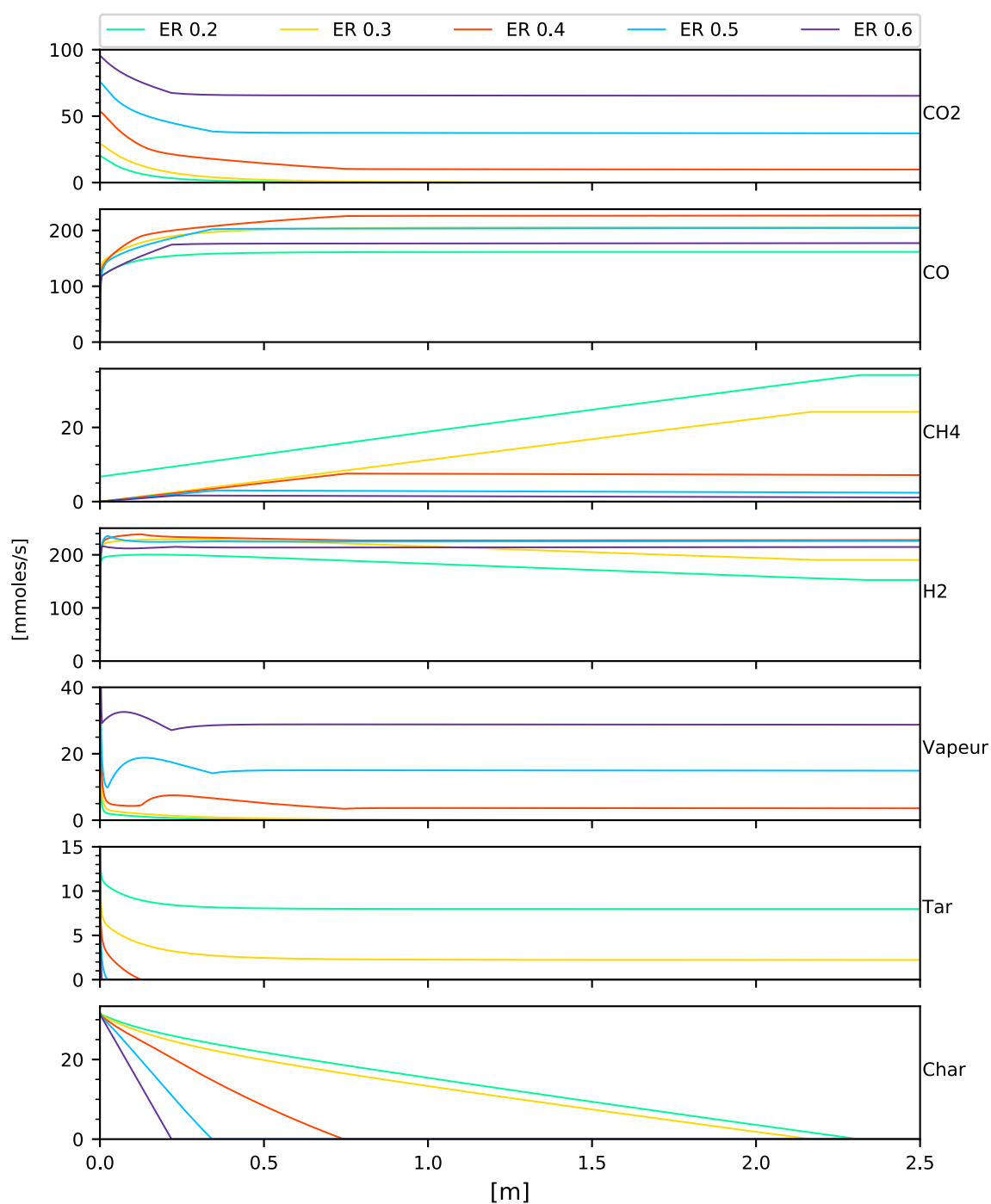


Figure 6-12 Profils des flux molaires de CDD pour des ratios ER de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 (humidité 10%,  $D_p=0.06$  m, oxydant=air)

Lorsqu'un ratio ER de 0.3 est utilisé, tout le  $H_2$ , le CO, le  $CH_4$  et une partie du tar et du char sont consommés dans la zone d'oxydation. Ainsi, en comparaison avec un ratio ER de 0.2, plus de vapeur et de  $CO_2$  sont produits lors de cette étape. De plus, aucun  $CH_4$  n'est alimenté à la zone de réduction. De plus, en comparaison avec le ratio ER de 0.2, plus de  $H_2$  et de CO et moins de tar sont alimentés à la zone de réduction lorsqu'un ratio ER de 0.3 est utilisé. Pour les ratios ER de 0.4, 0.5 et 0.6, les mêmes réactifs qu'à un ratio ER de 0.3 sont oxydés dans la zone d'oxydation. Ainsi, plus le ratio ER augmente, plus des quantités importantes de tar et de char sont oxydées, produisant ainsi de plus grandes quantités de vapeur d'eau et de  $CO_2$  dans la zone d'oxydation. À la Figure 6-12, il est intéressant de constater que plus de CO est produit à un ratio ER de 0.4 qu'à un ratio ER de 0.6. Ceci peut être expliqué par le fait que plus de vapeur d'eau est présente à un ratio ER de 0.6, consommant ainsi davantage le CO pour le transformer en  $H_2$  et en  $CO_2$  via la réaction de *Water-gas shift*. De plus, plus le ratio ER augmente, plus le char est consommé rapidement, car plus de vapeur d'eau est disponible pour le réduire. Donc, puisque le char est consommé plus rapidement pour un ratio ER élevé, moins de  $CH_4$  est produit par le biais de la réaction  $R_{R3}$ . Enfin, comme il est possible d'observer dans le Tableau 6-10, plus le ratio ER augmente, plus il y a du  $N_2$  qui se retrouve dans le syngaz.

Dans le Tableau 6-10, les flux massiques finaux des cinq flux alimentés au modèle sont présentés, ainsi que les ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$  des syngaz produits. Il est possible de constater qu'un ratio  $H_2/CO$  maximal est obtenu pour un ratio ER de 0.6 alors qu'un ratio  $H_2/CO/CO_2$  maximal est obtenu pour un ratio ER de 0.2.

Les bilans énergétiques globaux pour les cinq différents ratios de ER sont présentés au Tableau 6-11. En raison des plus grandes quantités de réactifs oxydées, il est possible d'observer que plus le ratio ER est grand, plus l'étape d'oxydation est exothermique. Ainsi, pour un CDD d'une teneur en humidité de 10% alimentés à un lit fixe co-courants opérant aux conditions d'opérations présentées dans le Tableau 6-1, le bilan énergétique devient exothermique environs à un ratio ER de 0.4.

Tableau 6-10 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 10% pour des ratios ER de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 (humidité 10%,  $D_p=0.06$  m, oxydant=air)

	ER 0.2	ER 0.3	ER 0.4	ER 0.5	ER 0.6
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés de l'alimentation</b>					
Matières sèches (kg/s)	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$
Eau (kg/s)	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$
Humidité (%)	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés des produits</b>					
CO (kg/s)	$4.53 \times 10^{-3}$	$5.77 \times 10^{-3}$	$6.35 \times 10^{-3}$	$6.37 \times 10^{-3}$	$4.96 \times 10^{-3}$
CO <sub>2</sub> (kg/s)	$2.33 \times 10^{-7}$	$1.74 \times 10^{-6}$	$4.32 \times 10^{-4}$	$3.37 \times 10^{-4}$	$2.87 \times 10^{-3}$
CH <sub>4</sub> (kg/s)	$5.48 \times 10^{-4}$	$3.88 \times 10^{-4}$	$1.15 \times 10^{-4}$	$1.36 \times 10^{-4}$	$1.79 \times 10^{-5}$
Vapeur (kg/s)	$3.17 \times 10^{-8}$	$2.29 \times 10^{-7}$	$6.45 \times 10^{-5}$	$4.96 \times 10^{-5}$	$5.18 \times 10^{-4}$
H <sub>2</sub> (kg/s)	$3.08 \times 10^{-4}$	$3.84 \times 10^{-4}$	$4.59 \times 10^{-4}$	$4.55 \times 10^{-4}$	$4.33 \times 10^{-4}$
Tar (kg/s)	$6.50 \times 10^{-4}$	$1.81 \times 10^{-4}$	0.00	0.00	0.00
N <sub>2</sub> (kg/s)	$4.57 \times 10^{-3}$	$6.85 \times 10^{-3}$	$9.13 \times 10^{-3}$	$8.90 \times 10^{-3}$	$1.37 \times 10^{-2}$
Cendres (kg/s)	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$
NH <sub>3</sub> (kg/s)	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$
H <sub>2</sub> S (kg/s)	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$
Ratio H <sub>2</sub> /CO	0.95	0.93	1.01	1.00	1.22
Ratio H <sub>2</sub> /CO/CO <sub>2</sub>	0.95	0.93	0.93	0.94	0.62

Tableau 6-11 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD d'une teneur en humidité de 10% pour des ratios ER de 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 (humidité 10%,  $D_p=0.06$  m, oxydant=air)

	ER 0.2	ER 0.3	ER 0.4	ER 0.5	ER 0.6
Séchage (kJ/s)	2.30	2.30	2.30	2.30	2.30
Pyrolyse (kJ/s)	19.39	19.39	19.39	19.39	19.39
Oxydation (kJ/s)	-5.71	-11.10	-15.25	-19.32	-23.33
Réduction (kJ/s)	14.70	19.56	22.02	19.51	16.11
Syngaz (kJ/s)	-21.11	-24.86	-28.71	-32.45	-36.15
<b>Total (kJ/s)</b>	9.57	5.28	-0.26	-10.58	-21.67
Pré-séchage (kJ/s)	2.49	2.49	2.49	2.49	2.49

## 6.2.2 Type d'oxydant

Afin d'étudier les effets de la variation du type d'oxydant sur les performances de la gazéification, différents types d'oxydants sont alimentés au procédé de gazéification de CDD d'une teneur en

humidité de 10%. De l'air (21% O<sub>2</sub>, 79% N<sub>2</sub>), de l'air enrichi à 35% de O<sub>2</sub>, de l'air enrichi à 50% de O<sub>2</sub>, de l'oxygène pur et de la vapeur d'eau sont comparés. Un ratio ER de 0.5 est sélectionné pour l'air un et un ratio vapeur/CDD de 0.5 est sélectionné pour la vapeur d'eau. Les particules sont de 0.06 mètre de diamètre et les conditions d'opérations présentées au Tableau 6-1 sont utilisées.

À la Figure 6-13, les profils des flux molaires dans la zone de réduction sont présentés. Il est possible de constater que lorsque de la vapeur d'eau est utilisée, moins de CO<sub>2</sub>, de CO, de vapeur d'eau et de H<sub>2</sub> et plus de CH<sub>4</sub> et de tar sont présents dans le syngaz. En effet, en raison de l'absence de la zone d'oxydation produisant du CO<sub>2</sub> et de la vapeur d'eau, beaucoup moins de ces substances sont présentes dans le syngaz final. De plus, puisqu'il n'y a pas de zone d'oxydation, le tar n'est pas oxydé en CO et en H<sub>2</sub>. Ainsi, beaucoup moins de ces substances sont alimentées dans la zone de réduction. Enfin, puisqu'il y a moins de CO<sub>2</sub> et de vapeur d'eau pour consommer le char via les réactions R<sub>R1</sub> et R<sub>R2</sub>, il reste plus de char pour produire du CH<sub>4</sub> (R<sub>R3</sub>). En observant les résultats de l'air, de l'air enrichi à 35% de O<sub>2</sub>, de l'air enrichi à 50% de O<sub>2</sub>, et de l'oxygène pur, il est possible de constater que ces types d'oxydants offrent sensiblement les mêmes performances. En effet, puisqu'ils ces quatre types d'oxydants sont alimentés à un ratio ER de 0.5, seules les quantités de N<sub>2</sub> changent.



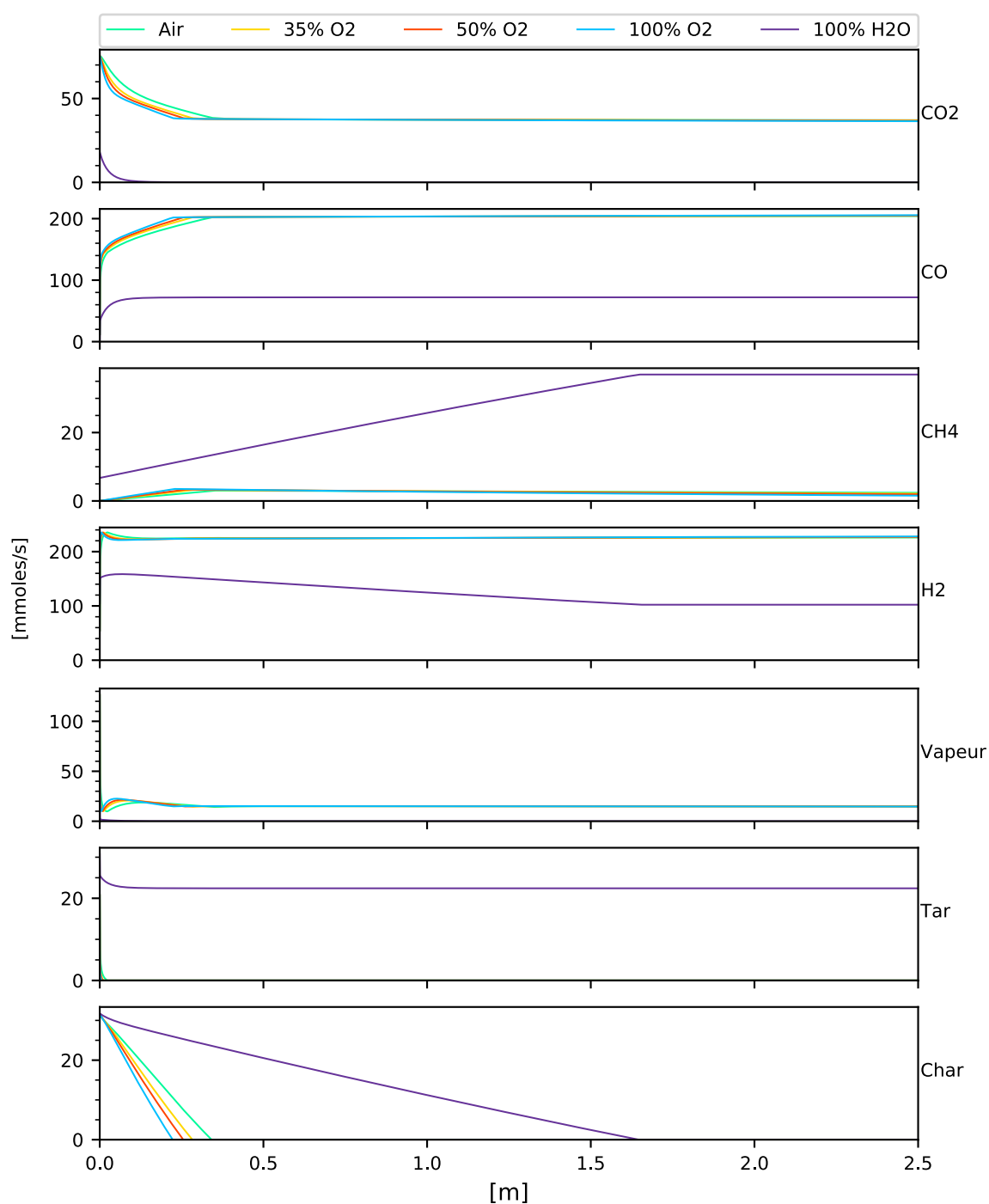


Figure 6-13 Profils des flux molaires de CDD pour une alimentation d'air (21% O<sub>2</sub>, 79% N<sub>2</sub>), d'air enrichi à 35% de O<sub>2</sub>, d'air enrichi à 50% de O<sub>2</sub>, d'oxygène pur et de vapeur d'eau (humidité 10%, D<sub>p</sub>=0.06 m, ER=0.5)

Dans le Tableau 6-12, les flux massiques finaux des cinq flux alimentés au modèle sont présentés, ainsi que les ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$  des syngaz produits. Il est possible de constater que lorsque de la vapeur d'eau est utilisée, les ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$  sont maximisés, étant donné que moins de CO et de  $CO_2$  sont produits.

Tableau 6-12 Caractéristiques du flux d'alimentation et de sortie de la gazéification des CDD pour une alimentation d'air (21%  $O_2$ , 79%  $N_2$ ), d'air enrichi à 35% de  $O_2$ , d'air enrichi à 50% de  $O_2$ , d'oxygène pur et de vapeur d'eau (humidité 10%,  $D_p=0.06$  m,  $ER=0.5$ )

	Air 21 % $O_2$	Air enrichi 35% $O_2$	Air enrichi 50% $O_2$	Oxygène 100% $O_2$	Vapeur 100% $H_2O$
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés de l'alimentation</b>					
Matières sèches (kg/s)	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$	$5.00 \times 10^{-3}$
Eau (kg/s)	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$	$5.56 \times 10^{-4}$
Humidité (%)	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00
<b>Biens <math>\dot{M}</math> et propriétés des produits</b>					
CO (kg/s)	$5.72 \times 10^{-3}$	$5.73 \times 10^{-3}$	$5.74 \times 10^{-3}$	$5.76 \times 10^{-3}$	$2.02 \times 10^{-3}$
$CO_2$ (kg/s)	$1.63 \times 10^{-3}$	$1.62 \times 10^{-3}$	$1.62 \times 10^{-3}$	$1.60 \times 10^{-3}$	$4.14 \times 10^{-10}$
$CH_4$ (kg/s)	$3.84 \times 10^{-5}$	$3.44 \times 10^{-5}$	$3.10 \times 10^{-5}$	$2.47 \times 10^{-5}$	$5.93 \times 10^{-4}$
Vapeur (kg/s)	$2.68 \times 10^{-4}$	$2.67 \times 10^{-4}$	$2.66 \times 10^{-4}$	$2.64 \times 10^{-4}$	$8.34 \times 10^{-11}$
$H_2$ (kg/s)	$4.56 \times 10^{-4}$	$4.57 \times 10^{-4}$	$4.58 \times 10^{-4}$	$4.59 \times 10^{-4}$	$2.06 \times 10^{-4}$
Tar (kg/s)	0.00	0.00	0.00	0.00	$1.83 \times 10^{-3}$
$N_2$ (kg/s)	$1.14 \times 10^{-2}$	$5.64 \times 10^{-3}$	$3.03 \times 10^{-3}$	0.00	0.00
Cendres (kg/s)	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$	$8.60 \times 10^{-4}$
$NH_3$ (kg/s)	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$	$4.87 \times 10^{-5}$
$H_2S$ (kg/s)	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$	$1.40 \times 10^{-7}$
Ratio $H_2/CO$	1.12	1.12	1.12	1.12	1.43
Ratio $H_2/CO/CO_2$	0.79	0.79	0.79	0.80	1.43

Les bilans énergétiques globaux pour les cinq différents types d'oxydants sont présentés au Tableau 6-13. Bien que le syngaz produit lors d'une gazéification à la vapeur est caractérisé par un PCI plus élevé, le bilan énergétique de ce type de gazéification demande l'apport d'une grande quantité de chaleur. Ainsi, lorsque vient le temps de sélectionner un type d'oxydant, il est nécessaire de prendre en considération le fait que lorsque de la vapeur d'eau est utilisée, un syngaz de qualité supérieure est produit, mais le bilan énergétique du procédé est endothermique.

Tableau 6-13 Bilans énergétiques des différentes zones de la gazéification des CDD pour une alimentation d'air (21%  $O_2$ , 79%  $N_2$ ), d'air enrichi à 35% de  $O_2$ , d'air enrichi à 50% de  $O_2$ , d'oxygène pur et de vapeur d'eau (humidité 10%,  $D_p=0.06$  m,  $ER=0.5$ )

	Air	Air enrichi	Air enrichi	Oxygène	Vapeur
--	-----	-------------	-------------	---------	--------

	21 % O <sub>2</sub>	35% O <sub>2</sub>	50% O <sub>2</sub>	100% O <sub>2</sub>	100% H <sub>2</sub> O
Séchage (kJ/s)	2.30	2.30	2.30	2.30	2.30
Pyrolyse (kJ/s)	19.39	19.39	19.39	19.39	19.39
Oxydation (kJ/s)	-19.32	-27.25	-30.82	-34.98	0.00
Réduction (kJ/s)	19.51	19.57	19.63	19.72	3.82
Syngaz (kJ/s)	-32.45	-25.14	-21.86	-18.02	-13.78
<b>Total (kJ/s)</b>	-10.58	-11.14	-11.36	-11.59	11.72
Pré-séchage (kJ/s)	2.49	2.49	2.49	2.49	2.49

### 6.2.3 Températures des zones de pyrolyse et d'oxydation

Dans cette section, les effets des variations de température des zones de pyrolyse et d'oxydation sur les performances de la gazéification sont étudiés. Un flux de CDD d'une teneur en humidité de 10% et d'une taille de particule de 0.01 mètre est utilisé comme matière première au gazéificateur. Les effets de la variation de la température de la zone de séchage ne sont pas étudiés, puisqu'initialement, l'hypothèse d'une évaporation complète est posée. Ainsi, un changement de température de cette zone engendre majoritairement des effets sur le bilan énergétique. De plus, les effets de la variation de la température de la zone de réduction ne sont aussi pas étudiés, puisque la longueur de la zone de réduction est posée comme étant suffisamment longue pour que le régime permanent s'installe. Ainsi, un changement de température de cette zone affecte seulement les vitesses auxquelles les produits atteignent le régime permanent.

Cependant, les températures des zones de pyrolyse et d'oxydation affectent considérablement la qualité du syngaz produit. En effet, puisque dans la zone de pyrolyse les ratios  $\frac{\dot{x}_{CO,2}}{\dot{x}_{CO_2,2}}$ ,  $\frac{\dot{x}_{H_2O(v),2^*}}{\dot{x}_{CO_2,2}}$  et  $\frac{\dot{x}_{CH_4,2}}{\dot{x}_{CO_2,2}}$  (équations 4-28, 4-29 et 4-30) sont fonctions de la température, les quantités de CO, de vapeur d'eau et de CH<sub>4</sub> produits peuvent drastiquement changer dépendamment de la température sélectionnée. En ce qui concerne la zone d'oxydation, la température affecte aussi considérablement les quantités de CO, de H<sub>2</sub>, de CO<sub>2</sub> et vapeurs d'eau produites en raison du ratio du *Water-gas shift*  $\frac{\dot{x}_{CO_2,3} \dot{x}_{H_2,3}}{\dot{x}_{CO,3} \dot{x}_{H_2O,3}}$ , qui est aussi fonction de la température (équation 4-51).

Puisque le but de ce projet est de produire une molécule d'intérêt à partir du syngaz produit, les ratios H<sub>2</sub>/CO et H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub> sont sélectionnés pour quantifier les performances de la gazéification. Ainsi, en faisant varier simultanément les températures de pyrolyse et d'oxydation, différentes compositions de syngaz, caractérisés par des ratios H<sub>2</sub>/CO et H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub>, sont produites. Les effets

d'une température de pyrolyse variant entre 873 K et 1073 K et d'une température d'oxydation variant entre 1200 K et 1600 K sur ces ratios sont présentés à la Figure 6-14 et Figure 6-15.

Il est possible d'observer qu'un meilleur ratio  $H_2/CO$ , soit de 1.12, est obtenu lorsque les températures de la pyrolyse et de l'oxydation sont maximales. Inversement, à faibles températures, le ratio  $H_2/CO$  est minimisé. En ce qui concerne le ratio  $H_2/CO/CO_2$ , ce dernier est optimisé (0.8) pour de faibles températures de pyrolyse et d'oxydation. Ainsi, lorsque le syngaz produit est destiné à être utilisé dans une synthèse Fischer-Tropsch ou une synthèse d'alcools mixtes, il est préférable d'opérer à haute température. Cependant, si le syngaz est destiné à être utilisé dans la synthèse du méthanol, il est préférable d'opérer à basse température.

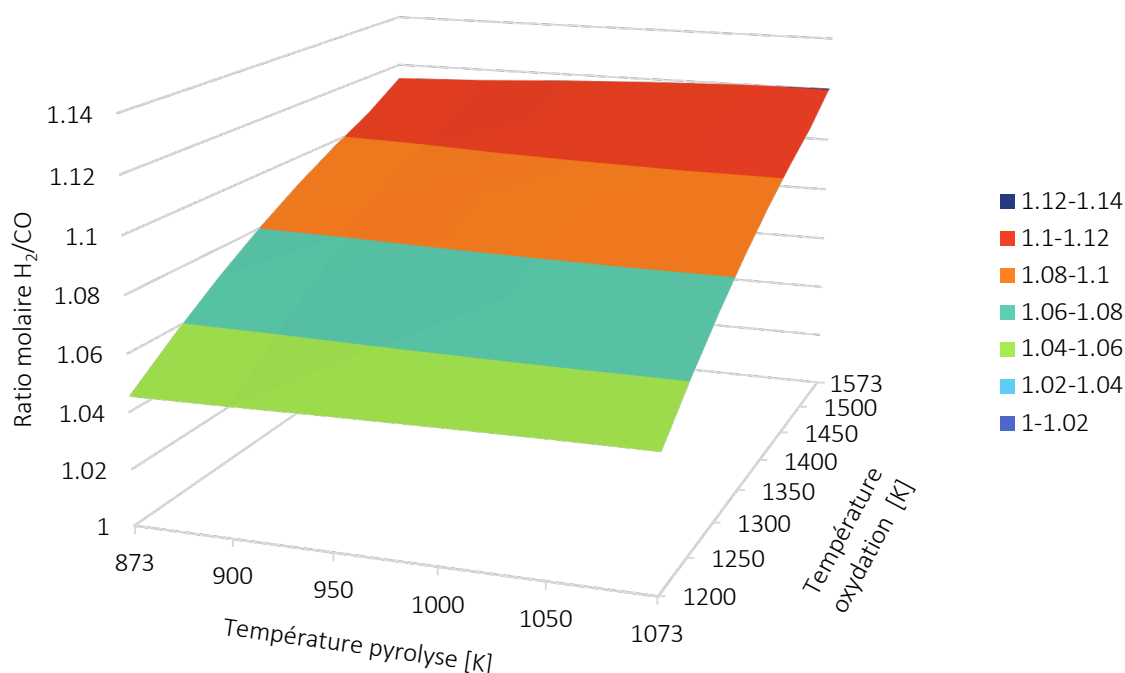


Figure 6-14 Effets d'une température de pyrolyse variant entre 873 K et 1073 K et d'une température d'oxydation variant entre 1200 K et 1600 K sur le ratio  $H_2/CO$

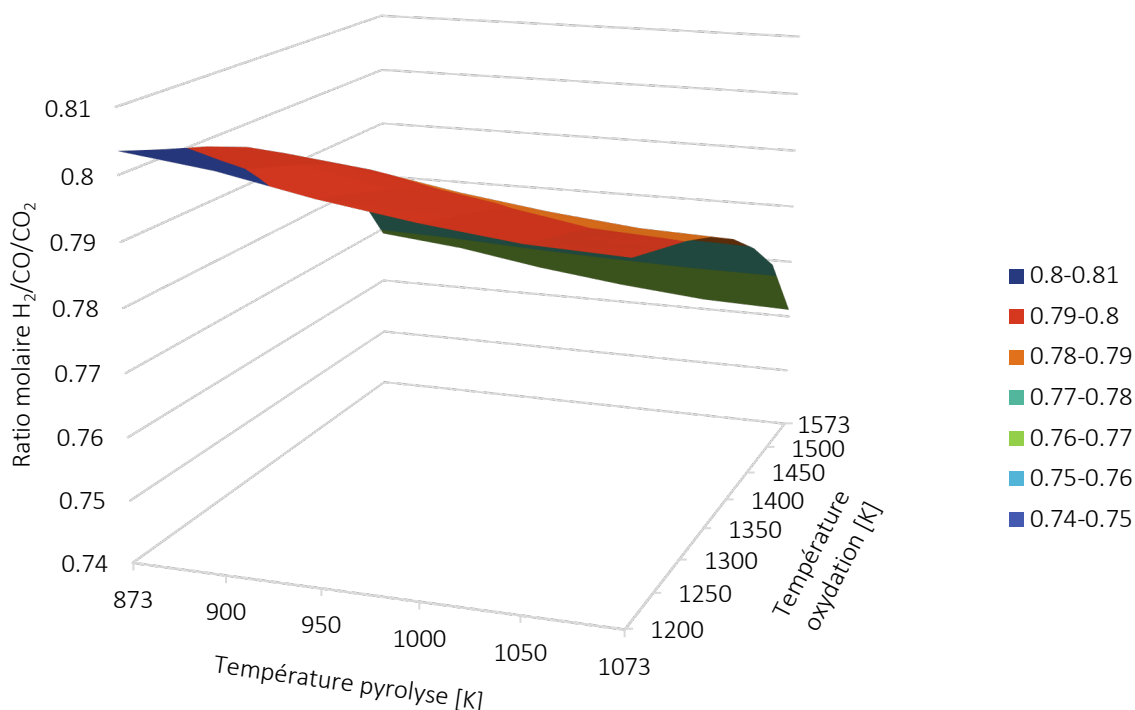


Figure 6-15 Effets d'une température de pyrolyse variant entre 873 K et 1073 K et d'une température d'oxydation variant entre 1200 K et 1600 K sur le ratio  $H_2/CO/CO_2$

## 6.3 Discussion

Après le traitement par gazéification, le syngaz ( $\dot{M}_{Syngaz}$ ) composés des substances  $CO$ ,  $H_2$  et  $CH_4$  et les substances autres ( $\dot{M}_{Autres}$ ) tels que le  $NH_3$ ,  $H_2S$ , cendres, vapeur,  $CO_2$  et tar sont réinsérés dans le cadre MFA de VMR-Sys pour alimenter l'inventaire ACV de VMR-Imp.

Le courant de syngaz ( $\dot{F}_{Syngaz}$ ) peut servir à la production de chaleur, d'électricité ou de molécules chimiques intermédiaires ( $CO$ ,  $H_2$ ), utilisées pour la production de molécules d'intérêts tels que le diesel, le méthanol, l'éthanol, le propanol, le butanol, l'acide acétique et d'autres. Dans ce projet, la possibilité d'une valorisation du syngaz produit à partir de la gazéification de CDD en molécules chimiques intermédiaires est étudiée. Avec l'aide de ce modèle, il a été démontré qu'une valorisation moléculaire du syngaz produit à partir des matières résiduelles serait possible. En effet, différents ratios  $H_2/CO$  et  $H_2/CO/CO_2$  adéquats sont atteints. La variation de ces ratios selon la composition élémentaire, la teneur en humidité, la taille de particules, le ratio ER, du type d'oxydant et la température a été étudié.

Cependant, comme il a été démontré dans la section de validations, le modèle prédit légèrement plus de  $H_2$  et légèrement moins de CO que les données provenant de la littérature. Ainsi, les ratios  $H_2/CO$  sont légèrement surestimés alors que les ratios  $H_2/CO/CO_2$  sont légèrement sous-estimés. De plus, dans la section des résultats, il est possible de constater que les syngaz produit à partir des matières résiduelles dépassent les limites en termes de  $H_2S$  (<100 ppb),  $NH_3$  (<10 ppb), halogènes (<10 ppb), métaux alcalins (<10 ppb) et particules de cendres (<1000 ppb) en plus de contenir différents éléments traces devant être retirés du flux de syngaz en vue d'une valorisation moléculaire. Ainsi, plusieurs unités de traitement seraient nécessaires pour nettoyer ces syngaz.

Enfin, puisque très peu de vapeur est disponible pour être converti en  $H_2$  dans la zone de réduction, la réaction de *Water-Gas Shift* dans cette zone semble avoir peu d'effets. En effet, peu de vapeur est disponible pour cette réaction d'équilibre puisque celle-ci est consommée rapidement par les réactions de réduction du char, du tar et du méthane. Ainsi, en ajoutant de la vapeur dans la zone de réduction, il deviendrait alors possible de produire plus de  $H_2$ , pour ainsi augmenter le ratio  $H_2/CO$ .

## CHAPITRE 7 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

La MFA est un outil d'aide à la décision grandement utilisé en GMR. Cependant, étant modélisés à l'aide de données empiriques, les procédés de traitements de matières résiduelles ne sont pas en mesure de capturer les effets de la composition et des caractéristiques du flux entrant ainsi que des conditions opératoires sur les performances de la gazéification. Ainsi, un modèle de gazéification phénoménologique destiné à être inséré dans une représentation par MFA d'un système de GMR est développé dans ce projet. Une combinaison de plusieurs modèles est utilisée pour représenter les étapes distinctes de séchage, de pyrolyse, d'oxydation et de réduction. Ce modèle simple et flexible permet de bien reproduire des résultats expérimentaux. Dans ce projet, il a été démontré que ce modèle est en mesure de capturer les effets des variations de la composition élémentaire, de la teneur en humidité, de la taille des particules, du ratio d'équivalence (ER) et de la température sur les performances de la gazéification. Ces performances sont quantifiées en termes avec le ratio  $H_2/CO$ , avec le ratio  $H_2/CO/CO_2$ , compositions en contaminants et en inertes et avec le bilan énergétique.

Cependant, puisque les prédictions de ce modèle en termes de  $CO$ ,  $CO_2$  et  $H_2$  dévient légèrement des résultats présentés dans la littérature, il serait intéressant de conduire d'autres travaux sur ce modèle au sein de la CRVMR. De plus, il serait pertinent de tester les limites de ce modèle avec une campagne d'expérimentation sur un gazogène de taille pilote. Dans une optique d'optimisation des caractéristiques du syngaz, il serait pertinent de jumeler ce modèle de gazéification avec un modèle de prétraitement de matières résiduelles déjà en place au sein de VMR-Sys. Ainsi, en implémentant une boucle de rétro-actions, un prétraitement adapté serait administré aux matières résiduelles afin d'augmenter les performances de la gazéification pour ainsi produire un syngaz adéquat pour la valorisation moléculaire. De plus, en introduisant d'autres configurations de gazogènes dans le modèle, il serait possible de comparer les performances de ceux-ci afin d'ultimement optimiser la qualité du syngaz destiné à la valorisation moléculaire en choisissant une configuration appropriée selon les caractéristiques du flux d'alimentation.

Enfin, il serait intéressant de faire une étude de cas avec les spécifications du centre pilote de prétraitement des ordures ménagères prévu pour Montréal dans les années à venir. Ce centre, d'une capacité maximale de traitement de 25 000 tonnes annuellement, sera en mesure de trier les ordures ménagères afin de détournées et réintroduites dans l'économie circulaire les matières recyclables

et organiques produisant ainsi un combustible dérivé de déchets avec les matières restantes (Ville de Montréal, 2019). Ce flux de CDD pourrait servir de flux d'alimentation au modèle de gazéification afin d'étudier la possibilité d'une symbiose industrielle avec les industries de l'Est de Montréal (voir ANNEXE G).



## BIBLIOGRAPHIE

- AIEM. (2016, mars). *Quand énergie rime avec écologie*.
- Allesch, A., & Brunner, P. H. (2015). Material Flow Analysis as a Decision Support Tool for Waste Management: A Literature Review. *Journal of Industrial Ecology*, 19(5), 753-764. <https://doi.org/10.1111/jiec.12354>
- Arafat, H. A., & Jijakli, K. (2013). Modeling and comparative assessment of municipal solid waste gasification for energy production. *Waste Management*, 33(8), 1704-1713. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2013.04.008>
- Arena, U. (2012). Process and technological aspects of municipal solid waste gasification. A review. *Waste Management*, 32(4), 625-639. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2011.09.025>
- Arena, U., & Di Gregorio, F. (2013). Element partitioning in combustion- and gasification-based waste-to-energy units. *Waste Management*, 33(5), 1142-1150. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2013.01.035>
- Ariyaratne, W. K. H., Malagalage, A., Melaen, M. C., & Tokheim, L.-A. (2015). CFD modelling of meat and bone meal combustion in a cement rotary kiln – Investigation of fuel particle size and fuel feeding position impacts. *Chemical Engineering Science*, 123, 596-608. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.10.048>
- ASM. (2010). *ASM Handbook, Volume 15 - Casting*. Consulté à l'adresse [https://app.knovel.com/web/toc.v/cid:kpASMHVC04/viewerType:toc//root\\_slug:asm-handbook-volume-15/url\\_slug:table-3-density-hardness?b-q=material\\_or\\_substance\\_name%3A%20sio2%20AND%20\(%20specific\\_heat\\_mf%3A%5B%20\\*%20TO%20\\*%20%5D%20OR%20specific\\_heat\\_capacity\\_mf%3A%5B%20\\*%20TO%20\\*%20%5D%20\)&b-subscription=TRUE&b-group-by=true&b-dsQuery=%3Fmn&b-sort-on=default&b-content-type=all\\_references&include\\_synonyms=no&b-dsQuery=%3Fmn](https://app.knovel.com/web/toc.v/cid:kpASMHVC04/viewerType:toc//root_slug:asm-handbook-volume-15/url_slug:table-3-density-hardness?b-q=material_or_substance_name%3A%20sio2%20AND%20(%20specific_heat_mf%3A%5B%20*%20TO%20*%20%5D%20OR%20specific_heat_capacity_mf%3A%5B%20*%20TO%20*%20%5D%20)&b-subscription=TRUE&b-group-by=true&b-dsQuery=%3Fmn&b-sort-on=default&b-content-type=all_references&include_synonyms=no&b-dsQuery=%3Fmn)
- Babu, B. V., & Sheth, P. N. (2006). Modeling and simulation of reduction zone of downdraft biomass gasifier: Effect of char reactivity factor. *Energy Conversion and Management*, 47(15), 2602-2611. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2005.10.032>

- Bailie, R. C., Everett, J. W., Liptak, B. G., Liu, D. H. F., Rugg, F. M., & Switzenbaum, M. S. (1997). Solid waste. Dans *Environmental Engineers' Handbook* (Second Edition). Consulté à l'adresse <https://www.taylorfrancis.com/books/9781584888598>
- Basu, P. (2010a). Design of biomass gasifiers. Dans *Biomass Gasification and Pyrolysis: Practical Design and Theory*. Consulté à l'adresse <http://ebookcentral.proquest.com/lib/polymtl-ebooks/detail.action?docID=648812>
- Basu, P. (2010b). Gasification Theory and Modeling of Gasifiers. Dans *Biomass Gasification Design Handbook* (p. 117-165). <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-374988-8.00005-2>
- Basu, P. (2013). *Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction: Practical Design and Theory*. Consulté à l'adresse <http://ebookcentral.proquest.com/lib/polymtl-ebooks/detail.action?docID=1319046>
- Brauner, N. (2016). *Complex chemical equilibrium by gibbs energy minimization*. Consulté à l'adresse The Iby and Aladar Fleischman Faculty of Engineering website: <http://www.eng.tau.ac.il/~brauner/Workshop08Participant/Example-9/Prob-4.5.pdf>
- Brunner, P. H., Rechberger, H., & Rechberger, H. (2016). *Handbook of Material Flow Analysis : For Environmental, Resource, and Waste Engineers, Second Edition*. <https://doi.org/10.1201/9781315313450>
- Budhathoki, R. (2013). *Three zone modeling of Downdraft biomass Gasification: Equilibrium and finite Kinetic Approach* (Master's thesis Master's Degree, Program in Renewable Energy Department of Chemistry). Jyväskylä.
- Cao, Y., Gao, Z., Jin, J., Zhou, H., Cohron, M., Zhao, H., ... Pan, W. (2008). Synthesis Gas Production with an Adjustable H<sub>2</sub> /CO Ratio through the Coal Gasification Process: Effects of Coal Ranks And Methane Addition. *Energy & Fuels*, 22(3), 1720-1730. <https://doi.org/10.1021/ef7005707>
- Clarke, L. B., & Sloss, L. L. (1992). *Trace elements - emissions from coal combustion and gasification*. Dans *IEACR: Vol. 49*. London: IEA Coal Research.
- Coker, A. K. (2007). *Ludwig's Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants* (4th éd., Vol. 1). Consulté à l'adresse <https://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpLAPDCPP1/ludwigs-applied-process/ludwigs-applied-process>

- Couto, N., Silva, V., Monteiro, E., Teixeira, S., Chacartegui, R., Bouziane, K., ... Rouboa, A. (2015). Numerical and experimental analysis of municipal solid wastes gasification process. *Applied Thermal Engineering*, 78, 185-195. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.12.036>
- Dejtrakulwong, C., & Patumsawad, S. (2014). Four Zones Modeling of the Downdraft Biomass Gasification Process: Effects of Moisture Content and Air to Fuel Ratio. *Energy Procedia*, 52, 142-149. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.07.064>
- Di Blasi. (2000). Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical Engineering Science*, 55(15), 2931-2944. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(99\)00562-X](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(99)00562-X)
- Di Blasi, & Branca. (2013). Modeling a stratified downdraft wood gasifier with primary and secondary air entry. *Fuel*, 104, 847-860. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.10.014>
- Faitli, J., Magyar, T., Erdélyi, A., & Murányi, A. (2015). Characterization of thermal properties of municipal solid waste landfills. *Waste Management*, 36, 213-221. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2014.10.028>
- Farand, P. (2013). *Analyse des procédés-GCH1110*.
- Ferreira, S., Monteiro, E., Brito, P., & Vilarinho, C. (2019). A Holistic Review on Biomass Gasification Modified Equilibrium Models. *Energies*, 12(1), 160. <https://doi.org/10.3390/en12010160>
- Gil, C., & Sebastián, F. (2016). *Downdraft gasifier modeling*. 63.
- Giltrap, D. L., McKibbin, R., & Barnes, G. R. G. (2003). A steady state model of gas-char reactions in a downdraft biomass gasifier. *Solar Energy*, 74(1), 785-791. [https://doi.org/10.1016/S0038-092X\(03\)00091-4](https://doi.org/10.1016/S0038-092X(03)00091-4)
- Götze, R., Pivnenko, K., Boldrin, A., Scheutz, C., & Astrup, T. F. (2016). Physico-chemical characterisation of material fractions in residual and source-segregated household waste in Denmark. *Waste Management*, 54, 13-26. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2016.05.009>
- Grammelis, P., Basinas, P., Malliopoulou, A., & Sakellariopoulos, G. (2009). Pyrolysis kinetics and combustion characteristics of waste recovered fuels. *Fuel*, 88(1), 195-205. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2008.02.002>
- Gupta, S., & Bhaskaran, S. (2018). Numerical Modelling of Fluidized Bed Gasification: An Overview. Dans S. De, A. K. Agarwal, V. S. Moholkar, & B. Thallada (Éd.), *Coal and Biomass Gasification* (p. 243-280). [https://doi.org/10.1007/978-981-10-7335-9\\_10](https://doi.org/10.1007/978-981-10-7335-9_10)

- Jayah, T. H., Aye, L., Fuller, R. J., & Stewart, D. F. (2003). Computer simulation of a downdraft wood gasifier for tea drying. *Biomass and Bioenergy*, 25(4), 459-469. [https://doi.org/10.1016/S0961-9534\(03\)00037-0](https://doi.org/10.1016/S0961-9534(03)00037-0)
- Jung, C. H., Matsuto, T., & Tanaka, N. (2005). Behavior of metals in ash melting and gasification-melting of municipal solid waste (MSW). *Waste Management*, 25(3), 301-310. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2004.08.012>
- Kamińska-Pietrzak, N., & Smoliński, A. (2013). Selected Environmental Aspects of Gasification and Co-Gasification of Various Types of Waste. *Journal of Sustainable Mining*, 12(4), 6-13. <https://doi.org/10.7424/jsm130402>
- Kumar, A., Jones, D., & Hanna, M. (2009). Thermochemical Biomass Gasification: A Review of the Current Status of the Technology. *Energies*, 2(3), 556-581. <https://doi.org/10.3390/en20300556>
- Lamarche, P. (2011). *Contribution à l'étude expérimentale et à la modélisation de la gazéification étagée de la biomasse en lit fixe*. École polytechnique de l'Université de Nantes, Nantes.
- Lee, U., Chung, J. N., & Ingley, H. A. (2014). High-Temperature Steam Gasification of Municipal Solid Waste, Rubber, Plastic and Wood. *Energy & Fuels*, 28(7), 4573-4587. <https://doi.org/10.1021/ef500713j>
- Liu, H., Elkamel, A., Lohi, A., & Biglari, M. (2013). Computational Fluid Dynamics Modeling of Biomass Gasification in Circulating Fluidized-Bed Reactor Using the Eulerian–Eulerian Approach. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(51), 18162-18174. <https://doi.org/10.1021/ie4024148>
- Matveev, I. B., & Serbin, S. I. (2007). Modeling of the Coal Gasification Processes in a Hybrid Plasma Torch. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 35(6), 1639-1647. <https://doi.org/10.1109/TPS.2007.910134>
- Montejo, C., Ramos, P., Costa, C., & Márquez, M. C. (2010). Analysis of the presence of improper materials in the composting process performed in ten MBT plants. *Bioresource Technology*, 101(21), 8267-8272. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.06.024>
- NNFCC, & E4tech. (2009). *Review of Technologies for Gasification of Biomass and Wastes*. Consulté à l'adresse <http://www.e4tech.com/wp-content/uploads/2016/01/gasification2009.pdf>

- Pandey, D. S., Das, S., Pan, I., Leahy, J. J., & Kwapinski, W. (2016). Artificial neural network based modelling approach for municipal solid waste gasification in a fluidized bed reactor. *Waste Management*, 58, 202-213. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2016.08.023>
- Patra, T. K., & Sheth, P. N. (2015). Biomass gasification models for downdraft gasifier: A state-of-the-art review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 50, 583-593. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.05.012>
- Provost Savard, A. (2017). *Évaluation des perspectives de traitement des matières résiduelles générées par la ville de Montréal en vue de leur réutilisation au sein des industries de l'Est de Montréal*. Polytechnique Montréal.
- Recyc-Québec, & EEQ. (2015). *Caractérisation des matières résiduelles du secteur résidentiel 2012-2013*. Consulté à l'adresse <https://www.recyc-quebec.gouv.qc.ca/sites/default/files/documents/carac-2012-2013-rapport-synthese.pdf>
- Riazi, M. R., & Chiaramonti, D. (Éd.). (2018). *Biofuels production and processing technology*. Boca Raton: Taylor & Francis, a CRC title, part of the Taylor & Francis imprint, a member of the Taylor & Francis Group, the academic division of T&F Informa, plc.
- Salem, A. M., & Paul, M. C. (2018). An integrated kinetic model for downdraft gasifier based on a novel approach that optimises the reduction zone of gasifier. *Biomass and Bioenergy*, 109, 172-181. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2017.12.030>
- Sarc, R., & Lorber, K. E. (2013). Production, quality and quality assurance of Refuse Derived Fuels (RDFs). *Waste Management*, 33(9), 1825-1834. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2013.05.004>
- Sharma. (2011). Modeling and simulation of a downdraft biomass gasifier 1. Model development and validation. *Energy Conversion and Management*, 52(2), 1386-1396. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2010.10.001>
- Sharma, Ravi, M. R., & Kohli, S. (2006). *Modelling product composition in slow pyrolysis of wood*. 13.
- Sheth, P. N., & Babu, B. V. (2006). Kinetic Modeling of the Pyrolysis of Biomass. *National Conference on Environmental Conservation (NCEC-2006)*, 453-458. Pilani, India.
- Sikarwar, V. S., Zhao, M., Clough, P., Yao, J., Zhong, X., Memon, M. Z., ... Fennell, P. S. (2016). An overview of advances in biomass gasification. *Energy & Environmental Science*, 9(10), 2939-2977. <https://doi.org/10.1039/C6EE00935B>

- Souza-Santos, M. L. de. (2010). *Solid Fuels Combustion and Gasification : Modeling, Simulation, and Equipment Operations Second Edition*. <https://doi.org/10.1201/9781420047509>
- Tanigaki, N., & Ishida, Y. (2014). *Waste Gasification Technology with Direct Melting for Energy and Material Recovery*. 14. Consulté à l'adresse [http://www.vivis.de/phocadownload/Download/2014\\_wm/2014\\_wm\\_365\\_378\\_tanigaki.pdf](http://www.vivis.de/phocadownload/Download/2014_wm/2014_wm_365_378_tanigaki.pdf)
- Thakare, S., & Nandi, S. (2016). Study on Potential of Gasification Technology for Municipal Solid Waste (MSW) in Pune City. *Energy Procedia*, 90, 509-517. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2016.11.218>
- Themelis, N. J., Kim, Y. H., & Brady, M. H. (2002). Energy recovery from New York City solid wastes. *Waste Management and Research*, 20(3), 223-233. Consulté à l'adresse <https://doi.org/10.1177/0734242X0202000303>
- Thunman, H., Niklasson, F., Johnsson, F., & Leckner, B. (2001). Composition of Volatile Gases and Thermochemical Properties of Wood for Modeling of Fixed or Fluidized Beds. *Energy & Fuels*, 15(6), 1488-1497. <https://doi.org/10.1021/ef010097q>
- Tinaut, F. V., Melgar, A., Pérez, J. F., & Horrillo, A. (2008). Effect of biomass particle size and air superficial velocity on the gasification process in a downdraft fixed bed gasifier. An experimental and modelling study. *Fuel Processing Technology*, 89(11), 1076-1089. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2008.04.010>
- US department of Energy. (2008). *Municipal Solid Waste (MSW) to Liquid Fuels Synthesis, Volume I: Availability of Feedstock and Technology*.
- Vejahati, F., Xu, Z., & Gupta, R. (2010). Trace elements in coal: Associations with coal and minerals and their behavior during coal utilization – A review. *Fuel*, 89(4), 904-911. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2009.06.013>
- Ville de Montréal. (2019). Ville de Montréal - Environnement - Cinq nouvelles infrastructures [Web page]. Consulté 3 avril 2019, à l'adresse [http://ville.montreal.qc.ca/portal/page?\\_pageid=7237,142039539&\\_dad=portal&\\_schema=PORTAL](http://ville.montreal.qc.ca/portal/page?_pageid=7237,142039539&_dad=portal&_schema=PORTAL)
- Walawender, W. P., Chern, S. M., & Fan, L. T. (1985). Wood Chip Gasification in a Commercial Downdraft Gasifier. Dans R. P. Overend, T. A. Milne, & L. K. Mudge (Éd.), *Fundamentals*

- of Thermochemical Biomass Conversion* (p. 911-921). [https://doi.org/10.1007/978-94-009-4932-4\\_50](https://doi.org/10.1007/978-94-009-4932-4_50)
- Wang, Y., & Kinoshita, C. M. (1993). Temperature Fields in Downdraft Biomass Gasification. Dans A. V. Bridgwater (Éd.), *Advances in Thermochemical Biomass Conversion* (p. 280-287). [https://doi.org/10.1007/978-94-011-1336-6\\_21](https://doi.org/10.1007/978-94-011-1336-6_21)
- Xu, B.-Q., Sun, K.-Q., Zhu, Q.-M., & Sachtler, W. M. H. (2000). Unusual selectivity of oxygenate synthesis: Formation of acetic acid from syngas over unpromoted Rh in NaY zeolite. *Catalysis Today*, 63(2), 453-460. [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(00\)00491-0](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(00)00491-0)
- Xu, P., Jin, Y., & Cheng, Y. (2017). Thermodynamic Analysis of the Gasification of Municipal Solid Waste. *Engineering*, 3(3), 416-422. <https://doi.org/10.1016/J.ENG.2017.03.004>
- Yaws, C. L. (2010). *Yaws' Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons* (Electronic Edition). Consulté à l'adresse <https://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpYTPCHE02/yaws-thermophysical-properties/yaws-thermophysical-properties>
- Yaws, C. L. (2011). *Yaws' Handbook of Properties of the Chemical Elements*. Consulté à l'adresse <https://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpYHPCE007/yaws-handbook-properties/yaws-handbook-properties>
- Zhang, Q., Dor, L., Biswas, A. K., Yang, W., & Blasiak, W. (2013). Modeling of steam plasma gasification for municipal solid waste. *Fuel Processing Technology*, 106, 546-554. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2012.09.026>

## ANNEXE A USINES DE TRAITEMENTS PAR GAZÉIFICATION

Procédé/ compagnie	Pays	Ville	Date d'opération	Capacité	Intrants	Extrants	Source
Mitsui Babcock- R21 (procédé Siemens Schwel-Brenn)	Japon	Toyohashi	2002	400 TPJ	MR	8.7 MW	(Mobius Enviro-Solutions, 2003)
		Koga Seibu	2003	260 TPJ	MR + boues d'épuration	4.5 MW	
		Yame Seibu	2000	220 TPJ	MR	2 MW	
		Nishi Iburi	2003	210 TPJ	MR	2 MW	
		Kyohoku	2003	160 TPJ	MR	1.5 MW	
		Ebetsu city	2002	140 TPJ	MR	2 MW	
Techtrade	Allemagne	Hamm	2001	353 TPJ	MR broyés + capacité de 50 % plastiques + automobile broyées	15 MW	(Chen, Yin, Wang, & He, 2014; Rappahannock Regional Solid Waste Management Board, 2013; Waight, Russell, Flitcroft, Stacey, & Horn, 2005)
Technip/ WasteGen	Allemagne	Burgau	1984	154 TPJ	MR + boues d'épuration	2.2 MW	(Lee, Speight, & Loyalka, 2015; Rappahannock Regional Solid Waste Management Board, 2013)
Takuma	Japon	Kokubu	2003	178 TPJ	MR + résidus industriels + boues d'épuration	Vapeurs + électricité	(Chen et al., 2014; S. Pytlar, Jr., 2007)
		Oshima	X	132 TPJ			
		Kakegawa Plant	X	140 TPJ			
Von Roll RCP technology	Allemagne	Bremerhaven	1997	6 TPH	MR pré-traités + résidus industriels + résidus du recyclage	Vapeurs + électricité	(Chen et al., 2014; ECN, 2000)
Procédé pilote	Chine	Tianjin	X	200 kg/h	MR pré-traités	Syngaz	(Chen et al., 2014)
Energos	Norvège	Ranheim	1998	10 000 TPA	Résidus commerciaux + industriels	Vapeurs + électricité	(Baidu, 2011; Energos, s. d.)
		Averoy	2000	30 000 TPA	MR		
		Hurum	2001	35 000 TPA	MR + résidus industriels		
		Sarpsborg	2002	70 000 TPA	MR + résidus industriels		
		Forus	2002	37 000 TPA	MR		
		Minden	2002	37 000 TPA	MR + résidus commerciaux		
Enerkem/ Novera	Canada	Québec	2009	1 600 TPA	Plastiques + boues d'épuration + bois + MR en granules	Énergie + Éthanol + méthanol	(Baidu, 2011; Energos, s. d.; Enerkem, s. d.)
		Edmonton	2014	100 000 TPA	MR		
Future Energy	Allemagne	Freiberg	1996	12 000 TPA boues 5 760 TPA MR	MR + boues d'épuration séchées	Chaleur + métaux utilisés en construction	(Baidu, 2011; Chen et al., 2014)
IET Energy	Malaisie	Singapour	1997	72 TPJ	Résidus de transformation alimentaires	5.8 MW	(Baidu, 2011; Mason, 2013; Rappahannock Regional Solid Waste Management Board, 2013)
	Corée du sud	X	X	60 TPJ	MR	Électricité	
	Corée du sud	X	X	30 TPJ	MR	Électricité	
	Chine	Hong Kong	X	58 TPJ	MR	Électricité	
	Malaisie	X	X	40 TPJ	MR	Électricité	
	Pologne	X	2004	1 750 TPA	MR	Électricité	
Thide Environment	France	Arras	2004	50 000 TPA	MR broyés + résidus industriels + boues d'épuration	Gaz (12 MJ/kg) brûlés pour la génération d'énergie, coke (16 MJ/kg), CARBOR®	(Baidu, 2011; Chen et al., 2014; University of California, 2004)
	Japon	Izumo	2003	70 000 TPA			
	Japon	Itoigawa	2002	25 000 TPA			
Thermoselect	Japon	Chiba	1999	100 000 TPA			



Procédé/ compagnie	Pays	Ville	Date d'opération	Capacité	Intrants	Extrants	Source
		Mutsu	2003	50 000 TPA	Résidus commerciaux + industriels broyés	Une partie des gaz sont utilisés pour préchauffer les MR	(Baidu, 2011; Chen et al., 2014)
Serpac/ Basse sambre	Islande	Keflavic	2003	12 000 TPA	MR + résidus industriels + résidus d'hôpitaux	Vapeurs	(Baidu, 2011; Chen et al., 2014)
PKA	Allemagne	Aalen	2001	25 000 TPA	MR + résidus industriels + pneus usés + plastiques + sols contaminés	Gaz riche en CO / H <sub>2</sub>	(Baidu, 2011; Chen et al., 2014)
Envirotherm	Allemagne	SVZ	2001	275 000 TPA	Plastiques broyés + boues industrielles + boues d'épuration + bois + résidus pétroliers	Méthanol + vapeurs	(S. Pytlar, Jr., 2007; Sander, Daradimos, & Hirschfelder, 2003)
Nippon Steel	Japon	Ibaraki	1980	500 TPJ	MR + résidus pétroliers + boues d'épuration + résidus de récupération des sites d'enfouissement + cendres de fonte de l'incinérateur + résidus de cliniques + pneus + amiante (tous sans pré-traitement)	Scories recyclées dans les blocs de béton, le pavage d'asphalte, des engrais, des blocs marins et d'autres utilisations agricoles, (qualité des scories presque identique à celle du sable naturel). Métaux recyclés pour la production d'acier et comme contrepoids pour les machines de construction.	(ISWA, 2011; Nippon Steel, s. d.; S. Pytlar, Jr., 2007)
		Akita	2002	475 TPJ			
		Oita	2003	428 TPJ			
		Ibaraki #2	1996	332 TPJ			
		Narashino City	2002	222 TPJ			
		Itoshima-Kumiai	2000	220 TPJ			
		Kazusa	2002	220 TPJ			
		Kagawatobu-Kumiai	1997	216 TPJ			
		Lizuka City	1998	198 TPJ			
		Tajimi City	2003	188 TPJ			
		Genkai Envir. Union	2003	176 YPJ			
		Ibaraki #3	1999	166 TPJ			
		Kocki West Envir.	2002	154 TPJ			
		Toyokama Union	2003	140 TPJ			
		Iryu-Kumiai	1997	132 TPJ			
Ebara	Japon	Maki-Machi-Kumiai	2002	132 TPJ	MR + résidus pétroliers + automobiles broyés + plastiques + boues d'épuration + résidus de cliniques	Scories recyclées dans les matériaux de construction et métaux vendus.	(ASME, 2007; ISWA, 2011; S. Pytlar, Jr., 2007)
		Kamaishi	1979	110 TPJ			
		Takizawa	2002	110 TPJ			
		Seino Waste	2004	99 TPJ			
		Kameyama	2000	88 TPJ			
		Chuno Union	2003	186 TPJ			
		Minami-Shinshu	2003	155 TPJ			
		Kawaguchi	2002	475 TPJ			
		Nagareyama	2004	229 TPJ			
		Ube City	2002	218 TPJ			
		Sakata	2002	217 TPJ			

## ANNEXE B CARACTÉRISATION DES MATIÈRES RÉSIDUELLES

Analyse ultimée ( % C, H, N, O, S) et proximée (% humidité, cendres, matières volatiles, carbone fixe) (Bailie et al., 1997; Recyc-Québec & EEQ, 2015; Götze, Pivnenko, Boldrin, Scheutz, & Astrup, 2016)

ID caract_1	ID caract_2	ID DTU_1	ID DTU_2	Catégorie	Ordures [%wt]	Humidité [%wt]	Cendres [wt%]	Matières volatiles [wt%]	Carbone fixe [wt%]	C [%TS]	H [%TS]	N [%TS]	O [%TS]	S [mg/kgTS]
A	1	PC	2	Journaux	0.67%	23.20%	5.20%	83.80%	11.10%	4.47E+01	6.41E+00	3.79x10-1	n.a.	9.37E+02
A	2	PC	2	Publications et circulaires en papier journal	0.58%	23.20%	5.20%	83.80%	11.10%	4.47E+01	6.41E+00	3.79x10-1	n.a.	9.37E+02
A	3	PC	1	Revue et magazines	0.20%	8.60%	20.40%	71.80%	7.90%	3.38E+01	5.48E+00	1.52x10-1	3.49E+01	6.36E+02
A	4	PC	6	Catalogues et documents reliés	0.31%	28.70%	6.90%	83.80%	9.30%	4.28E+01	7.10E+00	3.52x10-1	n.a.	1.19E+03
A	5	PC	1	Bottins	0.02%	8.60%	20.40%	71.80%	7.90%	3.38E+01	5.48E+00	1.52x10-1	3.49E+01	6.36E+02
A	6	PC	3	Papier à usage général / Papier de bureau	0.37%	24.00%	6.30%	83.50%	10.10%	3.74E+01	5.23E+00	7.86x10-1	n.a.	7.74E+02
A	7	PC	6	Autres imprimés	0.88%	28.70%	6.90%	83.80%	9.30%	4.28E+01	7.10E+00	3.52x10-1	n.a.	1.19E+03
A	8	PC	4	Livres	0.08%	8.60%	20.40%	71.80%	7.90%	3.66E+01	5.07E+00	1.74x10-1	n.a.	5.14E+02
J	1	C	2	Textiles et chaussures	3.95%	12.40%	6.60%	84.00%	9.40%	5.33E+01	6.92E+00	2.10E+00	3.41E+01	6.35E+03
B	1	PC	7	Carton ondulé	1.34%	21.20%	2.20%	85.80%	12.10%	4.14E+01	6.38E+00	4.04x10-1	n.a.	1.06E+03
B	2	PC	7	Sacs d'emplettes de papier kraft	0.19%	21.20%	2.20%	85.80%	12.10%	4.14E+01	6.38E+00	4.04x10-1	n.a.	1.06E+03
B	3	PC	7	Emballages de papier kraft	0.22%	21.20%	2.20%	85.80%	12.10%	4.14E+01	6.38E+00	4.04x10-1	n.a.	1.06E+03
B	4	PC	7	Carton pressé	0.18%	21.20%	2.20%	85.80%	12.10%	4.14E+01	6.38E+00	4.04x10-1	n.a.	1.06E+03
B	5	PC	7	Carton plat d'emballage	1.87%	21.20%	2.20%	85.80%	12.10%	4.14E+01	6.38E+00	4.04x10-1	n.a.	1.06E+03
B	6	PC	6	Autres emballages de papier	0.10%	28.70%	6.90%	83.80%	9.30%	4.28E+01	7.10E+00	3.52x10-1	n.a.	1.19E+03
A	9	PC	6	Autres imprimés non visés par EEQ	0.04%	28.70%	6.90%	83.80%	9.30%	4.28E+01	7.10E+00	3.52x10-1	n.a.	1.19E+03
B	7	PC	8	Contenants multicouches	0.18%	9.30%	9.10%	83.40%	7.50%	4.94E+01	8.80E+00	2.88x10-1	3.99E+01	8.00E+02
B	9	PC	8	Papier laminé	0.16%	9.30%	9.10%	83.40%	7.50%	4.94E+01	8.80E+00	2.88x10-1	3.99E+01	8.00E+02
B	10	PC	8	Contenants composites	0.10%	9.30%	9.10%	83.40%	7.50%	4.94E+01	8.80E+00	2.88x10-1	3.99E+01	8.00E+02
B	11	PC	8	Tetra Pak et autres contenants aseptiques multicouches	0.16%	9.30%	9.10%	83.40%	7.50%	4.94E+01	8.80E+00	2.88x10-1	3.99E+01	8.00E+02

ID caract_1	ID caract_2	ID DTU_1	ID DTU_2	Catégorie	Ordures [%wt]	Humidité [%wt]	Cendres [wt%]	Matières volatiles [wt%]	Carbone fixe [wt%]	C [%TS]	H [%TS]	N [%TS]	O [%TS]	S [mg/kgTS]
F	2	Y	1	Feuilles	2.81%	44.00%	7.30%	72.70%	20.10%	3.22E+01	4.67E+00	1.99E+00	2.91E+01	4.71E+03
B	8	PC	8	Contenants laminés	0.14%	9.30%	9.10%	83.40%	7.50%	4.94E+01	8.80E+00	2.88x10-1	3.99E+01	8.00E+02
C	1	G	2	Bouteilles consignées de boisson alcoolisée	0.19%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	5.00x10-1	1.14x10-1	3.98E-2	5.52x10-1	2.34E+02
C	2	G	2	Bouteilles consignées de boisson non alcoolisée	0.03%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	5.00x10-1	1.14x10-1	3.98E-2	5.52x10-1	2.34E+02
C	3	G	2	Bouteilles non consignées de boisson alcoolisée	0.59%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	5.00x10-1	1.14x10-1	3.98E-2	5.52x10-1	2.34E+02
C	4	G	3	Bouteilles non consignées de boisson non alcoolisée	0.09%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.60E+00	2.23x10-1	3.99E-2	1.39E+00	3.04E+02
C	5	G	1	Contenants alimentaires	0.77%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.56E+00	2.21x10-1	7.00E-2	1.18E+00	8.28E+02
C	6	G	5	Verre plat, grès, céramique et autre verre	1.11%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.60E+00	1.69x10-1	4.01E-2	5.85x10-1	1.00E+03
D	1	M	1	Canettes consignées	0.10%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	8.31E+00	1.41E+00	3.30x10-1	1.53E+00	2.37E+02
D	2	M	1	Canettes de boisson en aluminium non consignées	0.01%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	8.31E+00	1.41E+00	3.30x10-1	1.53E+00	2.37E+02
D	3	M	1	Autres emballages en aluminium rigide	0.21%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	8.31E+00	1.41E+00	3.30x10-1	1.53E+00	2.37E+02
D	4	M	3	Papier aluminium et contenants en métal	0.28%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	9.28E+00	1.76E+00	4.20x10-1	2.06E+00	1.77E+03
D	5	M	4	Aérosols et tubes métalliques acier	0.13%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.86E+01	2.88E+00	1.29E+00	4.50E+00	2.42E+03
D	6	M	5	Autres contenants et emballages non consignés en métal	0.48%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	4.62E+01	7.00E+00	6.03x10-1	3.70E+00	2.79E+02
D	7	M	4	Autres métaux	0.72%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.86E+01	2.88E+00	1.29E+00	4.50E+00	2.42E+03
E	1	P	1	Bouteilles de boisson consignées	0.07%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02
E	2	P	1	Bouteilles d'eau à remplissage unique	0.18%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02
E	3	P	1	Bouteilles de boisson non consignées # 1 transparentes - clair, bleu ou vert pâle	0.08%	3.60%	1.30%	95.00%	3.60%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02
E	4	P	1	Bouteilles et contenants avec bouchons # 1 transparentes - clair, bleu ou vert pâle	0.19%	3.60%	1.30%	95.00%	3.60%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02

ID caract_1	ID caract_2	ID DTU_1	ID DTU_2	Catégorie	Ordures [%wt]	Humidité [%wt]	Cendres [wt%]	Matières volatiles [wt%]	Carbone fixe [wt%]	C [%TS]	H [%TS]	N [%TS]	O [%TS]	S [mg/kgTS]
E	5	P	1	Bouteilles de boisson non consignées # 1 opaques ou transparentes autres que clair, bleu ou vert pâle	0.02%	3.60%	1.30%	95.00%	3.60%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02
E	6	P	1	Bouteilles et contenants avec bouchons # 1 opaques ou transparents autres que clair, bleu ou vert pâle	0.05%	3.60%	1.30%	95.00%	3.60%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02
E	7	P	1	Autres emballages # 1 opaques ou transparents autres que clair, bleu ou vert pâle	0.07%	3.60%	1.30%	95.00%	3.60%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02
E	8	P	1	Autres emballages # 1 transparents - clair, bleu ou vert pâle	0.22%	3.60%	1.30%	95.00%	3.60%	6.40E+01	5.20E+00	1.58x10-1	2.76E+01	5.03E+02
E	9	P	2	Bouteilles de boisson # 2	0.10%	7.00%	2.40%	97.40%	0.20%	8.25E+01	1.46E+01	1.60x10-1	n.a.	1.26E+03
E	10	P	2	Bouteilles et contenants à bouchon # 2	0.25%	7.00%	2.40%	97.40%	0.20%	8.25E+01	1.46E+01	1.60x10-1	n.a.	1.26E+03
E	11	P	2	Autres emballages # 2	0.02%	7.00%	2.40%	97.40%	0.20%	8.25E+01	1.46E+01	1.60x10-1	n.a.	1.26E+03
E	12	P	6	Bouteilles et contenants alimentaires et autres # 3	0.02%	3.20%	0.60%	46.20%	3.20%	6.82E+01	8.14E+00	1.80x10-1	n.a.	3.88E+02
E	13	P	14	Plastique rigide # 4	0.01%	19.10%	8.80%	90.10%	1.10%	8.31E+01	1.59E+01	1.62x10-1	n.a.	5.08E+02
E	14	P	3	Plastique rigide # 5	0.36%	10.50%	4.20%	94.10%	1.70%	7.76E+01	1.34E+01	3.53x10-1	n.a.	4.50E+02
E	15	P	2	Seaux, chaudières et couvercles # 2 et # 5	0.16%	7.00%	2.40%	97.40%	0.20%	8.25E+01	1.46E+01	1.60x10-1	n.a.	1.26E+03
E	16	P	13	Autres emballages rigides sans code et plastique # 7 (non PLA)	0.47%	10.50%	4.20%	94.10%	1.70%	7.71E+01	1.13E+01	7.03x10-1	n.a.	2.02E+03
E	17	P	5	Contenants et emballages - # 6 – polystyrène expansé de protection	0.44%	10.80%	1.80%	97.80%	0.40%	8.37E+01	8.41E+00	4.40x10-1	n.a.	6.37E+02
E	18	P	5	Contenants et emballages # 6 – polystyrène expansé alimentaire	0.14%	10.80%	1.80%	97.80%	0.40%	8.37E+01	8.41E+00	4.40x10-1	n.a.	6.37E+02
E	19	P	4	Contenants et emballages # 6 - polystyrène non expansé	0.21%	10.80%	1.80%	97.80%	0.40%	8.32E+01	8.60E+00	5.33x10-1	n.a.	3.99E+02

ID caract_1	ID caract_2	ID DTU_1	ID DTU_2	Catégorie	Ordures [%wt]	Humidité [%wt]	Cendres [%wt]	Matières volatiles [%wt]	Carbone fixe [%wt]	C [%TS]	H [%TS]	N [%TS]	O [%TS]	S [mg/kgTS]
E	20	P	7	Sachets autoportants ( <i>stand-up pouches</i> )	0.03%	10.80%	1.80%	97.80%	0.40%	8.03E+01	1.42E+01	1.60x10 <sup>-1</sup>	n.a.	2.12E+02
E	21	P	8	Autres sacs, lms plastique et laminés	0.89%	10.50%	4.20%	94.10%	1.70%	7.74E+01	1.40E+01	7.55x10 <sup>-1</sup>	n.a.	8.17E+02
E	22	P	14	Pellicules et sacs d'emballage # 2 et # 4	0.55%	19.10%	8.80%	90.10%	1.10%	8.31E+01	1.59E+01	1.62x10 <sup>-1</sup>	n.a.	5.08E+02
E	23	P	7	Sacs d'emplettes dégradables	0.14%	10.80%	1.80%	97.80%	0.40%	8.03E+01	1.42E+01	1.60x10 <sup>-1</sup>	n.a.	2.12E+02
E	24	P	14	Sacs d'emplettes non dégradables	0.66%	19.10%	8.80%	90.10%	1.10%	8.31E+01	1.59E+01	1.62x10 <sup>-1</sup>	n.a.	5.08E+02
E	25	P	7	Poly lactiques (PLA) et autres plastiques dégradables	0.03%	10.80%	1.80%	97.80%	0.40%	8.03E+01	1.42E+01	1.60x10 <sup>-1</sup>	n.a.	2.12E+02
E	26	P	14	Autres lms plastique (non-emballage)	0.92%	19.10%	8.80%	90.10%	1.10%	8.31E+01	1.59E+01	1.62x10 <sup>-1</sup>	n.a.	5.08E+02
F	1	Y	1	Herbes	2.57%	63.90%	9.70%	75.60%	14.70%	3.22E+01	4.67E+00	1.99E+00	2.91E+01	4.71E+03
F	3	Y	1	Autres résidus de jardin	7.07%	53.90%	9.60%	73.00%	17.40%	3.22E+01	4.67E+00	1.99E+00	2.91E+01	4.71E+03
F	4	F	2	Résidus de table	25.76%	65.40%	11.00%	79.00%	10.00%	4.34E+01	7.05E+00	2.01E+00	3.80E+01	5.32E+03
B	12	C	3	Contenants et emballages en bois	0.13%	14.80%	2.80%	83.00%	14.10%	4.81E+01	6.76E+00	1.17E+00	4.57E+01	4.17E+03
H	1	C	3	Bois d'œuvre	2.03%	14.80%	2.80%	83.00%	14.10%	4.81E+01	6.76E+00	1.17E+00	4.57E+01	4.17E+03
E	27	P	7	Autres plastiques	0.97%	10.80%	1.80%	97.80%	0.40%	8.03E+01	1.42E+01	1.60x10 <sup>-1</sup>	n.a.	2.12E+02
F	6	C	1	Couches jetables	3.75%	66.90%	4.10%	87.10%	8.70%	5.51E+01	8.74E+00	1.29E+00	2.78E+01	4.01E+03
F	7	I	3	Autres matières compostables généralement non acceptées dans une collecte de 3e voie	9.64%	32.50%	7.70%	82.60%	9.60%	6.17x10 <sup>-1</sup>	1.05E+00	4.23x10 <sup>-1</sup>	n.a.	2.12E+03
G	1	I	5	Gros et petits appareils électroménagers, appareils de réfrigération et outils électriques	1.22%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.34E+01	4.09x10 <sup>-1</sup>	1.83x10 <sup>-1</sup>	n.a.	3.85E+03
F	5	PC	5	Autres matières compostables pouvant être acceptées dans une collecte de 3e voie	5.18%	32.50%	7.70%	82.60%	9.60%	4.23E+01	6.86E+00	9.48x10 <sup>-1</sup>	4.68E+01	4.81E+03
G	2	C	5	Autres meubles et encombrants et autres articles de maison	3.57%	14.80%	2.80%	83.00%	14.10%	3.54E+01	5.47E+00	1.18E+00	1.92E+01	6.41E+03
H	2	I	4	Autres résidus de CRD	8.92%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.06E+00	5.04x10 <sup>-1</sup>	6.67E-2	n.a.	2.74E+03

ID caract_1	ID caract_2	ID DTU_1	ID DTU_2	Catégorie	Ordures [%wt]	Humidité [%wt]	Cendres [wt%]	Matières volatiles [wt%]	Carbone fixe [wt%]	C [%TS]	H [%TS]	N [%TS]	O [%TS]	S [mg/kgTS]
I	1	I	5	Résidus domestiques dangereux	1.06%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.34E+01	4.09x10- 1	1.83x10-1	n.a.	3.85E+03
K	1	I	5	Objets divers	1.92%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.34E+01	4.09x10- 1	1.83x10-1	n.a.	3.85E+03
K	2	I	5	Autres matières résiduelles	0.68%	0.00%	100.00%	100.00%	100.00%	1.34E+01	4.09x10- 1	1.83x10-1	n.a.	3.85E+03

## ANNEXE C COEFFICIENTS A, B, C, D POUR CALCULÉ LA CHALEUR SENSIBLE DES SUBSTANCES I (J/KMOL.K)

Substances	Approx.	$\Delta h_f^\circ$ (J/kmol)	$T_{vap}$ (K)	$\Delta h_{vap}$ (J/kmol)	Forme	Unités (J/kmol °C)	Unité (J/kmol K)	A	B	C	D	Source
H <sub>2</sub> O <sub>(l)</sub>	N/A	-2.86E+08	373	4.07E+07	1	1	0	7.54E+04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	(Farand, 2013)
Char <sub>(s)</sub>	Graphite	0.00E+00	4473	0.00E+00	2	0	1	1.12E+04	1.10E+01	-4.89E+08	0.00E+00	(Farand, 2013)
CO <sub>(g)</sub>	N/A	-1.11E+08	81.5	6.04E+06	1	1	0	2.90E+04	4.11E+00	3.55E-3	-2.22x10-6	(Farand, 2013)
CO <sub>2(g)</sub>	N/A	-3.94E+08	195	0.00E+00	1	1	0	3.61E+04	4.23E+01	-2.89E-2	7.46x10-6	(Farand, 2013)
CH <sub>4(g)</sub>	N/A	-7.49E+07	111.5	8.18E+06	1	1	0	3.43E+04	5.47E+01	3.66E-3	-1.10E-5	(Farand, 2013)
H <sub>2</sub> O <sub>(v)</sub>	N/A	-2.42E+08	373	4.07E+07	1	1	0	3.35E+04	6.88E+00	7.60E-3	-3.59x10-6	(Farand, 2013)
H <sub>2(g)</sub>	N/A	0.00E+00	20.24	9.04E+05	1	1	0	2.88E+04	7.65E-2	3.29E-3	-8.70x10-7	(Farand, 2013)
Tar <sub>(g)</sub>	Benzène	8.28E+07	353.1	3.08E+07	1	1	0	7.41E+04	3.30E+02	-2.52x10-1	7.76E-5	(Farand, 2013)
O <sub>2(g)</sub>	N/A	0.00E+00	90.19	6.79E+09	1	1	0	2.91E+04	1.16E+01	-6.08E-3	1.31x10-6	(ASM, 2010)
N <sub>2(g)</sub>	N/A	0.00E+00	77.2	5.58E+06	1	1	0	2.90E+04	2.20E+00	5.72E-3	-2.87x10-6	(Farand, 2013)
Cendres <sub>(s)</sub>	SiO <sub>2(s)</sub>	-8.51E+08	2503	0.00E+00	1	0	1	1.17E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	(Farand, 2013)
NH <sub>3(g)</sub>	N/A	-4.62E+07	239.57	2.34E+07	1	1	0	3.52E+04	2.95E+01	4.42E-3	-6.69x10-6	(Farand, 2013)
H <sub>2</sub> S <sub>(g)</sub>	N/A	-2.00E+07	212.7	1.87E+07	1	1	0	3.35E+04	1.55E+01	3.01E-3	-3.29x10-6	(Farand, 2013)
NO <sub>(g)</sub>	N/A	9.04E+07	121.2	1.38E+07	1	1	0	2.95E+04	8.19E+00	-2.93E-3	3.65x10-7	(Farand, 2013)
SO <sub>2(g)</sub>	N/A	-2.97E+08	262.98	2.49E+07	1	1	0	3.89E+04	3.90E+01	-3.10E-2	8.61x10-6	(Farand, 2013)

## ANNEXE D COEFFICIENTS DE DIFFUSIVITÉS DU O<sub>2</sub>, DU CO<sub>2</sub>, DE LA VAPEUR ET DU H<sub>2</sub> (M<sup>2</sup>/S)

Coefficients de diffusivités du O<sub>2</sub>, du CO<sub>2</sub>, de la vapeur et du H<sub>2</sub> (m<sup>2</sup>/s) (Gil & Sebastián, 2016)

Substances	$D_i$ (m <sup>2</sup> /s)
O <sub>2(g)</sub>	$7.22 \times 10^{-4}$
CO <sub>2(g)</sub>	$6.16 \times 10^{-4}$
H <sub>2</sub> O <sub>(v)</sub>	$9.63 \times 10^{-4}$
H <sub>2(g)</sub>	$28.89 \times 10^{-4}$



### ANNEXE E COEFFICIENTS $\alpha_i$ , $\beta_i$ , $\gamma_i$ ET $\delta_i$ POUR CALCULER LA VISCOSITÉ (PA.S)

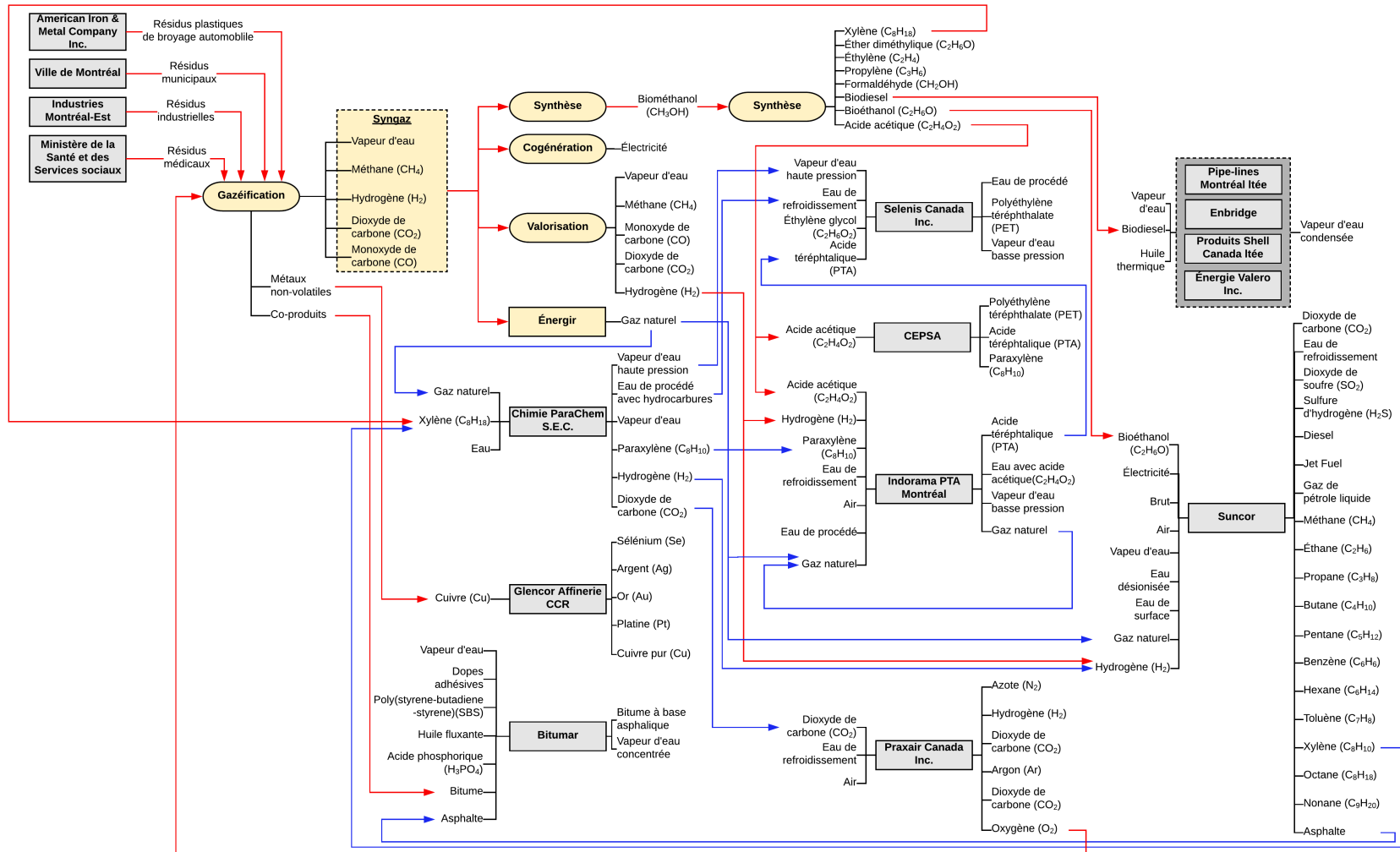
Substances	$\alpha_i$ (Pa.s)	$\beta_i$ (Pa.s)	$\gamma_i$ (Pa.s)	$\delta_i$ (Pa.s)	Source
H <sub>2</sub> O <sub>(l)</sub>	-1.02x10 <sup>-6</sup>	0.00017925	1.77x10 <sup>-9</sup>	-1.26E-12	(Coker, 2007)
CO <sub>(g)</sub>	1.80x10 <sup>-6</sup>	6.38x10 <sup>-8</sup>	-3.57E-11	1.03E-14	(Yaws, 2010)
CO <sub>2(g)</sub>	1.18x10 <sup>-6</sup>	4.98x10 <sup>-8</sup>	-1.09E-11	0.00E+0	(Yaws, 2010)
CH <sub>4(g)</sub>	1.26x10 <sup>-7</sup>	4.38x10 <sup>-8</sup>	-2.43E-11	7.10E-15	(Yaws, 2010)
H <sub>2</sub> O <sub>(v)</sub>	-3.68x10 <sup>-6</sup>	4.29x10 <sup>-8</sup>	-1.62E-12	0.00E+0	(Coker, 2007)
H <sub>2(g)</sub>	1.76x10 <sup>-7</sup>	3.42x10 <sup>-8</sup>	-1.84E-11	5.11E-15	(Yaws, 2011)
Tar <sub>(g)</sub>	2.66x10 <sup>-7</sup>	2.37x10 <sup>-8</sup>	3.78E-12	-3.41E-15	(Yaws, 2010)
O <sub>2(g)</sub>	-4.94x10 <sup>-7</sup>	8.07x10 <sup>-8</sup>	-4.04E-11	1.01E-14	(Yaws, 2011)
N <sub>2(g)</sub>	4.47x10 <sup>-7</sup>	6.38x10 <sup>-8</sup>	-2.66E-11	5.41E-15	(Yaws, 2011)
NH <sub>3(g)</sub>	-7.87x10 <sup>-7</sup>	3.67x10 <sup>-8</sup>	-4.47E-13	0.00E+0	(Coker, 2007)
H <sub>2</sub> S <sub>(g)</sub>	1.92E-5	-3.99x10 <sup>-8</sup>	9.65E-11	-2.82E-14	(Yaws, 2010)

## ANNEXE F RÉPARTITIONS DES ÉLÉMENTS DANS LES DIFFÉRENTS FLUX DE SORTIES

(Arena & Di Gregorio, 2013; Clarke & Sloss, 1992; Gupta & Bhaskaran, 2018; Jung, Matsuto, & Tanaka, 2005; Kamińska-Pietrzak & Smoliński, 2013; Tanigaki & Ishida, 2014; Vejahati, Xu, & Gupta, 2010)

Éléments	Phase gazeuse	Cendres volantes	Cendres de grilles
Al	0	0.25	0.75
As	0	0.75	0.25
B	0.5	0.5	0
Ba	0	0.5	0.5
Be	0	0.5	0.5
Br	1	0	0
C	0	1	0
Ca	0	0.75	0.25
Cd	0	1	0
Cl	1	0	0
Co	0	0.5	0.5
Cr	0	0	1
Cu	0	0	1
F	1	0	0
Fe	0	0	1
Hg	1	0	0
I	1	0	0
K	0	0.75	0.25
Mg	0	0.25	0.75
Mn	0	0.25	0.75
Mo	0	0.5	0.5
Na	0	0.5	0.5
Ni	0	0.5	0.5
P	0	0.75	0.25
Pb	0	1	0
S	0	0.75	0.25
Se	0.5	0.5	0
Si	0	0.75	0.25
Sn	0	0.75	0.25
Tl	0	0.75	0.25
Zn	0	1	0

## ANNEXE G FLUX DES INDUSTRIES DE L'AIEM ACTUELS ET FLUX DE LA GAZÉIFICATION DES MATIÈRES RÉSIDUELLES



(AIEM, 2016; provost savard, 2017)