

Étude numérique de la production de gaz de synthèse par combustion riche du méthane dans un brûleur poreux

par

Yann ROUSSEL

MÉMOIRE PAR ARTICLES PRÉSENTÉ À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE
SUPÉRIEURE COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION DE
LA MAITRISE AVEC MÉMOIRE EN GÉNIE AÉROSPATIAL
M. Sc. A.

MONTREAL, LE 21 SEPTEMBRE 2022

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC



Yann Roussel, 2022



Cette licence [Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/) signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette œuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'œuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. Patrice Seers, directeur de mémoire
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Romain Lemaire, codirecteur de mémoire
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Giuseppe Di Labbio, président du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. François Morency, membre du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 1 SEPTEMBRE 2022

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

REMERCIEMENTS

Je souhaiterais tout d'abord, remercier ceux qui m'ont aidé à réaliser ce travail. En particulier mon directeur de recherche, M. Patrice Seers que je remercie chaleureusement. Il m'a aidé et guidé tout au long de cette aventure en prodiguant des conseils toujours avisés. Merci de m'avoir fait confiance dans ce projet et de m'avoir permis de découvrir le monde de la recherche.

Un grand merci à mon codirecteur M. Romain Lemaire pour les suggestions, corrections et recommandations qui m'ont permis d'améliorer ce travail. Enfin, un grand merci à M. Pierre-Lou Billerot pour m'avoir aidé dans la rédaction de l'article et plus globalement dans la compréhension du sujet et la mise en œuvre de mon travail.

Cette aventure à l'ÉTS m'a permis de découvrir un nouveau pays et de rencontrer des personnes chaleureuses en tout temps. Même si les premiers temps ont été difficiles, à cause de la COVID, je garde un super souvenir de ces deux années passées au Canada. J'aimerais également remercier les super personnes du laboratoire en particulier Mohamed et Sébastien qui m'ont toujours soutenu.

ÉTUDE NUMÉRIQUE DE LA PRODUCTION DE GAZ DE SYNTHÈSE PAR COMBUSTION RICHE DU MÉTHANE DANS UN BRÛLEUR POREUX

Yann ROUSSEL

RÉSUMÉ

Les syngas sont des produits valorisables utilisés en chimie industrielle pour produire des biocarburants ou du méthanol. La combustion d'un mélange air-carburant à forte richesse dans un milieu poreux permet la production de gaz de synthèse. L'objectif de ce mémoire est de modéliser numériquement la production de syngas dans un brûleur poreux, basé sur la maille de diamant, par combustion riche du méthane.

La géométrie de la matrice poreuse est inspirée du travail de Samoilenko et al., 2019 pour obtenir des matrices poreuses régulières avec des structures en maille de diamant (obtenable par impression 3D) avec les mêmes propriétés (perméabilité et porosité) que des mousses industrielles. Les différents paramètres étudiés sont la porosité et la densité de pores. La nouveauté est l'introduction d'un brûleur à géométrie étagée.

La simulation direct 3D à l'échelle des pores est utilisée en raison de la complexité géométrique de la matrice poreuse. La combustion d'un mélange air-méthane d'une richesse de 2 est modélisée, l'écoulement étant laminaire. Le débit est ajusté pour stabiliser la flamme et étudier les syngas produits. Le modèle numérique et la résolution sont réalisés sur le logiciel Star-CCM+.

Les syngas obtenus ont un ratio H_2/CO proche de 1 dans tous les cas étudiés, mais les quantités de syngas produites sont différentes. L'efficacité de conversion varie de 41 % pour le cas de référence à 43% lorsque la densité de pores augmente. Elle monte à 59% lorsque la porosité diminue (divisé par 2) et atteint même 63% pour la géométrie étagée. L'étude des précurseurs de suie montre également une diminution de 10% pour ce dernier cas. Indépendamment des cas, l'augmentation du préchauffage se traduit par une augmentation de la production de syngas. Également, la réaction a lieu dans une cellule de la structure dans tous les cas.

La conversion en syngas est donc favorisée par la recirculation de la chaleur dans le matériau solide (ici SiSiC). On peut donc influencer cette conversion en jouant sur les paramètres suivants : augmenter la densité de pores ou diminuer la porosité pour maximiser la surface d'échange ou bien avoir une géométrie variable avec des pores denses dans la zone de préchauffage et plus d'espace dans la zone de réaction. La géométrie variable représente une alternative pour améliorer les rendements de conversion sans recourir à un catalyseur tout en étant facilement réalisable par impression 3D.

Mots clés : brûleur poreux, syngas, modélisation 3D, maille diamant, brûleur étagé

NUMERICAL STUDY OF SYNTHESIS GAS PRODUCTION BY RICH METHANE COMBUSTION IN A POROUS BURNER

Yann ROUSSEL

ABSTRACT

Syngas is a valuable product used in the chemical industry to produce biofuels or methanol. The combustion of an air-fuel mixture at a high equivalence ratio in a porous medium enables the production of syngas. The objective of the present research is to numerically model the production of syngas in a porous burner, based on a diamond lattice structure, through the rich combustion of methane.

The geometry of the porous matrix is derived from the one proposed by Samoilenko et al., 2019 to obtain regular porous matrices with a diamond lattice structure (obtainable by 3D printing) having similar properties (in terms of permeability and porosity) than industrial foam. The different parameters studied are the porosity and pore density. The novelty is the introduction of a burner having a graded geometry.

Direct 3D simulation at the pore scale is used because of the geometrical complexity of the porous matrix. The combustion of an air-methane mixture with an equivalence ratio of 2 is modelled considering laminar flows. The flow rate is adjusted to stabilize the flame and study the nature of the so-produced syngas. The numerical model and the resolution are performed using the Star-CCM+ CFD software.

The produced syngas exhibits a H_2/CO ratio close to 1 in all the studied cases but the quantities of the syngas produced are different. The conversion efficiency varies from 41% for the reference case to 43% when the pore density increases. It rises up to 59% when the porosity decreases (divided by 2) and it even reaches 63% for the graded geometry. The study of soot precursors also shows a 10% decrease in the latter case. In any cases, the increase in the preheating efficiency results in an increase in the production of syngas. Also, the reaction takes place in one cell of the structure in all cases.

The conversion to syngas is thus promoted by the recirculation of heat in the solid material (here SiSiC). To that end, the following parameters can be influenced: increasing the pore density or decreasing the porosity to maximize the exchange surface or having a variable geometry with dense pores in the preheating zone and more space in the reaction zone. The variable geometry represents an alternative to improve the conversion yields without requiring the use of catalyst materials. It can, moreover, be easily obtained by 3D printing.

Keywords: porous burner, syngas, 3D modeling, diamond lattice, graded burner

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE.....	5
1.1 Matériaux poreux	5
1.1.1 Caractérisation morphologique des milieux poreux	5
1.1.2 Méthode de fabrication par impression 3D.....	8
1.1.3 Grandeurs et échelles	9
1.1.4 Caractérisation expérimentale des écoulements en milieu poreux	11
1.1.4.1 Approche macroscopique et gradient de pression	11
1.1.4.2 Corrélations du gradient de pression.....	15
1.2 Combustion	16
1.2.1 Flamme laminaire prémélangée.....	18
1.2.1.1 Profil de température.....	18
1.2.1.2 Température de flamme adiabatique.....	19
1.2.1.3 Vitesse de flamme laminaire.....	21
1.2.1.4 Limites d'inflammabilité et stabilité.....	23
1.3 Combustion en milieu poreux	23
1.3.1 Applications de la CMP	24
1.3.2 Profils de température dans un brûleur poreux	24
1.3.3 Stabilité de la combustion dans un milieu poreux	27
1.4 Gaz de synthèse.....	28
1.4.1 Risque de sécurité	28
1.4.2 Applications des syngas	29
1.4.3 Production de syngas	29
1.4.3.1 Production par reformage	30
1.4.3.2 Production par réaction avec de l'oxygène.....	31
1.4.3.3 Réaction du gaz à l'eau	32
1.4.4 Caractérisation de la production de syngas par CMP	32
1.5 Synthèse de la revue et formulation de la problématique	33
CHAPITRE 2 ÉTUDE PRÉLIMINAIRE ET MODÈLE NUMÉRIQUE.....	37
2.1 Motivation.....	37
2.2 Équations fondamentales de la dynamique des fluides : Navier-Stokes.....	37
2.2.1 Principe de résolution : Méthode des volumes finis	38
2.2.2 Discrétisation temporelle	39
2.2.2.1 Terme transitoire.....	40
2.2.3 Discrétisation spatiale	40
2.2.3.1 Intégrale volumique : Terme source et instationnaire.....	41
2.2.3.2 Intégrale surfacique : Terme conductif et convectif	41
2.3 Modèles liés à la combustion en milieu poreux.....	43
2.3.1 Transport des espèces chimiques	44

2.3.2	Modélisation des réactions de combustion	45
2.3.2.1	Conservation de l'énergie dans la phase solide	46
2.3.2.2	Conservation de l'énergie dans la phase gazeuse	49
2.4	Géométrie, conditions initiales, conditions aux limites	50
2.4.1	Géométrie.....	51
2.4.2	Conditions aux limites	55
2.4.3	Conditions initiales	57
2.5	Récapitulatif des hypothèses simplificatrices	57
CHAPITRE 3 MISE EN PLACE ET VERIFICATION DU MAILLAGE : ÉTUDE PRÉLIMINAIRE D'UN ÉCOULEMENT FROID EN MILIEU POREUX ET VALIDATION DU MODÈLE DE CMP.....		
3.1	Survol du chapitre	59
3.2	Étude préliminaire.....	59
3.2.1	Conditions utilisées pour l'étude de l'écoulement à froid	59
3.2.2	Choix de la discrétisation spatiale.....	60
3.3	Vérification du maillage : Écoulement froid	63
3.3.1	Corrélations du gradient de pression.....	63
3.3.2	Corrélations adimensionnelles du gradient de pression.....	65
3.4	Validation du maillage : Écoulement avec combustion.....	68
3.5	Bilan général de la vérification	70
CHAPITRE 4 NUMERICAL STUDY OF THE IMPACT OF TAILORED POROUS MEDIA DESIGN ON SYNGAS PRODUCTION FROM METHANE RICH COMBUSTION.....		
4.1	Introduction.....	74
4.2	Methodology	77
4.2.1	Geometry and computational domain	77
4.2.2	Numerical setup	79
4.2.3	Boundary conditions	82
4.2.4	Solution Method.....	82
4.3	Grid Independence and Numerical Model Validation	83
4.4	Results.....	87
4.4.1	Flame Structure	87
4.4.2	Heat Transfer and Energy Recirculation.....	88
4.4.3	Influence of the matrix geometry at the macroscale	90
4.4.4	Flow Analysis	92
4.4.5	Variable pore density	93
4.4.5.1	Temperature profiles.....	94
4.4.5.2	Syngas production.....	95
4.4.6	Soot precursor emissions	97
4.5	Conclusion	99
CONCLUSION.....		101
RECOMMANDATIONS		105

LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	107
---	-----

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 1-1	Porosité moyenne de matériaux courants Extrait de Johnson, (1971)9
Tableau 1-2	Corrélations des coefficients du gradient de pression dans le régime de Forhheimer en fonction de la porosité et du diamètre de pore.....16
Tableau 1-3	Paramètres influençant le ratio H ₂ /CO Extrait de Wilhelm et al. (2001)32
Tableau 2-1	Propriétés physiques, thermiques et optiques de la matrice céramique SiSiC EngiCer et Hashemi & Hashemi (2017).....49
Tableau 2-2	Grandeurs géométriques. Cas A et B issus de Samoilenko et al. (2019).....52
Tableau 3-1	Grandeurs caractéristiques des maillages63
Tableau 3-2	Coefficients de corrélations du gradient de pression adimensionné dans le régime de Forhheimer66
Table 4-1	Description of the geometric characteristics of the matrices and inlet conditions78
Table 4-2	Mesh characteristics85
Table 4-3	Influence of the matrix design on the peak temperature, flame thickness and heat recirculation efficiency90
Table 4-4	Characteristics of each layer of the variable pore density matrix94
Table 4-5	Influence of the geometry on burner efficiency97

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1-1	Différents milieux poreux assemblés (gauche) et continus (droite) Extrait de Bedoya, (2016)6
Figure 1-2	Matériaux stochastique (gauche) et régulier (droite) Extrait de Samoilenko et al., (2019)7
Figure 1-3	Cellules ouvertes (gauche) et cellules fermées (droite) Extrait de Chen et al., (2021)7
Figure 1-4	Maille diamant Extrait de Bristol, <i>school of chemistry</i>8
Figure 1-5	Représentation schématique de la tortuosité Extrait de Johnson, (1971)11
Figure 1-6	Évolution du gradient de pression en fonction de la vitesse pour différentes porosités Extrait de Weclas, (2010)14
Figure 1-7	Gradient de pression en fonction du nombre de Reynolds Extrait de Boettcher et al., (2022)14
Figure 1-8	Structure d'une flamme laminaire prémélangée Extrait et traduit de Turns, (2012)19
Figure 1-9	Température de flamme adiabatique en fonction de la richesse pour différents carburants Extrait et adapté de Law, (2006)20
Figure 1-10	Température de flamme adiabatique en fonction de la température du mélange froid pour différents mélanges Extrait et traduit de Chen et al., (2011)21
Figure 1-11	Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse pour le méthane Extrait de Amirante et al., (2017)22
Figure 1-12	Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse pour différentes températures de préchauffage Extrait et traduit de Amirante et al., (2017)22
Figure 1-13	Profil de températures fluide (bleu), solide (rouge) et d'énergie de réaction dans un brûleur poreux Extrait de Billerot, (2018)25
Figure 1-14	Schématisation des transferts de chaleur dans un brûleur poreux Extrait de Billerot et al., (2020)26

Figure 1-15	Profil de température solide (traits pointillés) et du gaz (traits pleins) en fonction du débit d'entrée Extrait de Vandadi & Park (2018).....	27
Figure 2-1	Paramètres géométriques : cellule et pore d'une matrice de type « maille diamant ».....	53
Figure 2-2	Maille diamant (10 ppi) imprimée	53
Figure 2-3	Brique élémentaire et un étage de la structure	54
Figure 2-4	Matrice 3D CAD (gauche), milieu solide (centre) et milieu fluide (droite).....	55
Figure 2-5	Conditions aux limites	56
Figure 3-1	Erreur relative numérique en fonction du nombre total de mailles pour la matrice A	62
Figure 3-2	Comparaison des corrélations du gradient de pression avec le rayon de pores comme taille caractéristique. (a) Cas A; (b) Cas B	64
Figure 3-3	Corrélations entre le gradient de pression adimensionné par la perméabilité et le nombre de Reynolds basé sur la perméabilité.....	66
Figure 3-4	Gradient de pression adimensionné pour le cas A	68
Figure 3-5	Fraction molaire de CO et de H ₂ sur le plan médian du cas A pour deux richesses différentes	70
Figure 4-1	Geometric parameters	79
Figure 4-2	Description of the geometry and boundary conditions Left: CAD model of a unit cell; Right: CAD model of the column for CFD calculations	82
Figure 4-3	Mesh convergence study	83
Figure 4-4	Validation of the macroscopic pressure gradient with pressure drop law correlations (a) Case A; (b) Case B.....	84
Figure 4-5	Influence of the equivalent ratio on CO and H ₂ scalar fields for geometry A at an equivalence ratio of 2 (left) and 1.5 (right)	86
Figure 4-6	Temperature and HRR profiles related to case A	88

Figure 4-7	Influence of pore diameter (case A vs. case B) and porosity (cases A and B vs. case C) on the gas-to-solid convective heat transfer.....	89
Figure 4-8	Influence of pore diameter (case A vs. case B) and porosity (cases A, B vs. case C) on the temperature profiles.....	91
Figure 4-9	Influence of porosity on streamlines: high porosity (case A, left) vs. low porosity (case C, right)	93
Figure 4-10	Influence of variable pore diameter on temperature profiles.....	95
Figure 4-11	Scalar fields of CO and H ₂ mole fractions together with fluid temperatures for cases A to D	96
Figure 4-12	Influence of burner geometry on soot precursors at burner outlet.....	98

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
CMP	Combustion en milieu poreux
CFD	Dynamique des fluides numérique (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
LHV	Pouvoir calorifique inférieur (<i>Lower Heating Value</i>)
PPI	Pores par pouce (<i>pores per inch</i>)
WGS	Réaction du gaz à l'eau (<i>Water-gas shift reaction</i>)
RWGS	Réaction du gaz à l'eau inverse (<i>Reverse Water-gas shift reaction</i>)

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

Espèces chimiques et matériaux

C_2H_6	Acétylène
$MgAl_2O_4$	Aluminate de magnésium
$NiAl_2O_4$	Aluminate de nickel
N_2	Azote
$SiSiC$	Carbure de silicium infiltré de silicium
DME	Diméthoxyéthane
CO_2	Dioxyde de carbone
H_2O	Eau
C_2H_4	Éthane
C_2H_2	Éthylène
H_2	Hydrogène
CH_4	Méthane
CO	Monoxyde de carbone
Ni	Nickel
Al_2O_3	Oxyde d'aluminium ou alumine
NO_x	Oxyde d'azote
Pt	Platine
Rh	Rhodium

Symboles grecs

α	Coefficient d'extinction
δ	Coefficient de diffusion
ν	Coefficient stœchiométrique de réaction
σ_b	Constante de Stefan-Boltzmann ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$)
Γ	Diffusivité de la surface

δ_L	Épaisseur de flamme (m)
λ	Longueur d'onde
ρ	Masse volumique ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)
Δx	Pas d'espace (m)
Δt	Pas de temps (s)
ϵ	Porosité
ϕ	Richesse
$\dot{\omega}$	Taux de réaction ($\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}$)
$\underline{\underline{\tau}}$	Tenseur des contraintes visqueuses (Pa)
τ	Tortuosité
μ	Viscosité dynamique ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$)

Symboles latins

C_p	Capacité thermique à pression constante ($\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$)
h_{conv}	Coefficient de transfert convectif ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$)
C_1, C_2	Coefficients de corrélations du gradient de pression (m^{-2} et m^{-1})
$[X]$	Concentration molaire ($\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$)
k	Conductivité thermique ($\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}$)
k	Constante de Kozeny-Carman
D_p	Diamètre de pore (m)
A	Facteur pré-exponentielle de la loi d'Arrhenius (s^{-1})
q	Flux de chaleur ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$)
J	Flux diffusif d'une espèce chimique ($\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$)
W	Fraction massique
Y	Fraction molaire
I_b	Intensité radiative du corps noir
m	Masse (kg)
W	Masse molaire ($\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$)

$\underline{\underline{I}}$	Matrice identité
n	Nombre de moles (mol)
Re_K	Nombres de Reynolds issus du diamètre de perméabilité
Re_p	Nombres de Reynolds issus du diamètre de pore
K	Perméabilité (m^2)
P	Pression (Pa)
f_s	Ratio air-carburant
S	Surface (m^2)
S_v	Surface spécifique ($m^2 \cdot m^{-3}$)
Q	Taux de chaleur dégagé par la réaction ($W \cdot m^{-3}$)
T	Température (K)
$\underline{\underline{D}}$	Tenseur des déformations (s^{-1})
R	Constante universelle des gaz parfaits ($J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$)
\underline{v}	Vecteur vitesse du fluide ($m \cdot s^{-1}$)
u_D	Vitesse de Darcy ($m \cdot s^{-1}$)
s_l	Vitesse de flamme laminaire ($m \cdot s^{-1}$)
V	Volume (m^3)

INTRODUCTION

Il existe différents procédés pour produire des gaz de synthèses tels que le reformage, la gazéification et l'oxydation partielle. Les gaz de synthèse, mélanges composés de monoxyde de carbone CO et d'hydrogène H₂, sont des produits valorisables et en demande particulièrement dans l'industrie chimique (Vosloo, 2001; Chae et al., 2020; Cui & Kær, 2020; Santos & Alencar, 2020). Ils sont également utilisés dans la production de biocarburants comme le biodiesel grâce à la réaction de Fischer-Tropsch ou encore dans la production de méthanol qui est un précurseur de nombreux produits tels que l'éthylène, le diméthoxyéthane (DME) ou encore le formaldéhyde (Chae et al., 2020). Enfin, les gaz de synthèses peuvent être brûlés tels quels pour la production d'énergie ou bien purifiés pour isoler l'hydrogène. Néanmoins, depuis une vingtaine d'années (Drayton et al., 1998), une approche de production des gaz de synthèse de plus en plus étudiée est basée sur l'utilisation de mélanges riches en carburant, voire très riches. L'intérêt est que la quantité d'air est insuffisante pour oxyder totalement les hydrocarbures résultant ainsi dans la production de monoxyde de carbone et non de dioxyde de carbone. Toutefois, comme la limite d'inflammabilité en mélange riche limite cette approche à l'aide de brûleurs classiques, l'utilisation de la combustion en milieu poreux semble prometteuse, car elle permet de repousser cette limite. La combustion en milieu poreux repose sur l'utilisation d'un matériau solide, poreux, conducteur et résistant aux hautes températures directement dans le brûleur pour améliorer la combustion sans bloquer l'écoulement. Le principe de fonctionnement repose sur la recirculation de la chaleur produite par la réaction qui permet de préchauffer partiellement les gaz frais entrant dans le brûleur, ce qui a pour conséquence d'augmenter la température et la vitesse de flamme laminaire et d'améliorer la stabilité du brûleur (Barra & Ellzey, 2004; Bedoya, 2016; Y. Wu et al., 2016).

La combustion en milieu poreux fait l'objet de nombreuses études numériques et expérimentales pour mettre en avant ce phénomène de recirculation de la chaleur. Il existe plusieurs techniques de production de ces matériaux poreux qui sont principalement en céramique (carbure de silicium ou alumine) ou en métal (chrome-cobalt, par exemple). Les matériaux doivent être capables de résister à des conditions extrêmes sans se déformer ou se

briser (point de fusion élevée, faible expansion thermique). Ces milieux poreux avaient au début principalement un aspect d'éponge très aléatoire, anisotrope et non homogène, ce qui rendait leur caractérisation complexe et diminuait leur résistance. Par la suite, des milieux poreux obtenus par accumulation de billes, qui étaient plus prévisibles en termes de caractérisation, ont été proposés. Par contre, il était difficile d'obtenir des informations sur la géométrie des interstices. Or aujourd'hui, il est possible de produire des milieux poreux réguliers par impression 3D, et cela de manière fiable et reproductible. En l'occurrence, le présent travail s'appuie sur celui de Samoilenko et al., 2019 qui a produit par fabrication additive des brûleurs réguliers avec des mailles en forme de diamant ayant la même porosité et perméabilité que des mousses industrielles. L'avantage de la fabrication additive ou impression 3D est qu'elle permet d'envisager et de produire différentes géométries. Ce mémoire présente donc une étude numérique dans laquelle quatre géométries, telles qu'elles pourraient être obtenues par fabrication additive, sont évaluées afin de voir le potentiel de cette approche à produire du syngas à partir de la combustion d'un mélange combustible/comburant riche en méthane. L'objectif principal est de quantifier numériquement l'influence de la géométrie du milieu poreux sur le fonctionnement du brûleur et sur la production de syngas.

Pour commencer ce travail, le premier chapitre contient une revue de littérature qui présente et détaille les travaux concernant la combustion, les milieux poreux et la combustion en milieu poreux. D'autre part, les gaz de synthèses, leur production et leurs utilisations sont également présentés. Cet état des lieux permet alors de dégager la problématique que ce mémoire tente de résoudre. Le second chapitre permet de détailler le modèle numérique avec les équations à résoudre et les hypothèses faites ainsi que le maillage utilisé pour cette étude. Il précède le chapitre trois qui détaille la validation du modèle numérique qui est découpé en deux parties. Premièrement, un écoulement froid est utilisé pour caractériser les pertes de pressions causées par la géométrie en fonction du niveau de raffinement du maillage. Deuxièmement un écoulement avec combustion est considéré (sur la base du maillage identifié à l'étape précédente) ce qui permet ainsi de comparer les résultats obtenus avec quelques données tirées de la littérature. Le chapitre 4 contiendra ensuite le cœur du travail réalisé sous la forme d'un article scientifique et permettra de mettre en avant les paramètres jouant un rôle important sur

la production de gaz de synthèse. Pour terminer, une conclusion générale de l'ensemble de résultats sera présentée en même temps qu'une évaluation des objectifs de cette étude. Une ouverture contenant des pistes de travail et des recommandations pour les recherches ultérieures viendra clore ce manuscrit.

CHAPITRE 1

REVUE DE LITTÉRATURE

Ce premier chapitre consiste en un état de l'art relatif aux deux thèmes principaux étudiés dans ce travail à savoir, en premier lieu, la combustion en milieu poreux qui inclut au préalable le rappel de notions importantes pour la compréhension des milieux poreux et de la combustion en général. Puis dans un second temps, une description des gaz de synthèse, de leurs moyens de production et de leurs utilisations sera proposée.

1.1 Matériaux poreux

Un milieu poreux est constitué d'un solide ou d'une collection de corps solides entourés d'espaces ouverts appelés « vides » permettant la circulation d'un fluide à travers ou autour d'eux (Shamey & Zhao, 2014). Il existe une très grande variété de choix de milieux poreux en termes de géométrie et de nature des matériaux utilisés, et ce, en fonction de l'utilisation visée. La combustion en milieu poreux peut-être classée en différentes catégories dépendamment des propriétés physico-chimiques du matériau solide. Lorsque le matériau solide participe « activement » au processus de combustion d'un point de vue chimique, ce dernier peut soit être consommé par la réaction (milieu poreux combustible), soit jouer le rôle de catalyseur (milieu poreux catalytique). Ce dernier cas est très étudié, car les applications associées sont nombreuses. Des membranes céramiques permettent par exemple, l'élimination des polluants atmosphériques (Julbe et al., 2001) ou la production de gaz de synthèse (Tsodikov et al., 2016). Concernant la deuxième catégorie pour laquelle le milieu solide ne participe pas au processus de combustion bien qu'il l'influence, on parle dans ce cas de milieu inerte. Cette dernière possibilité concerne les brûleurs poreux.

1.1.1 Caractérisation morphologique des milieux poreux

Dans le cas des brûleurs poreux ou encore des milieux poreux catalytiques, il existe deux grandes familles de structures géométriques. La première est un assemblage d'éléments

discrets (« *packed discrete elements* » en anglais), c'est-à-dire, une accumulation d'éléments solides (perles solides, structure de Raschig) discontinus, mais qui combler l'espace tel qu'illustré dans la Figure 1-1-gauche.

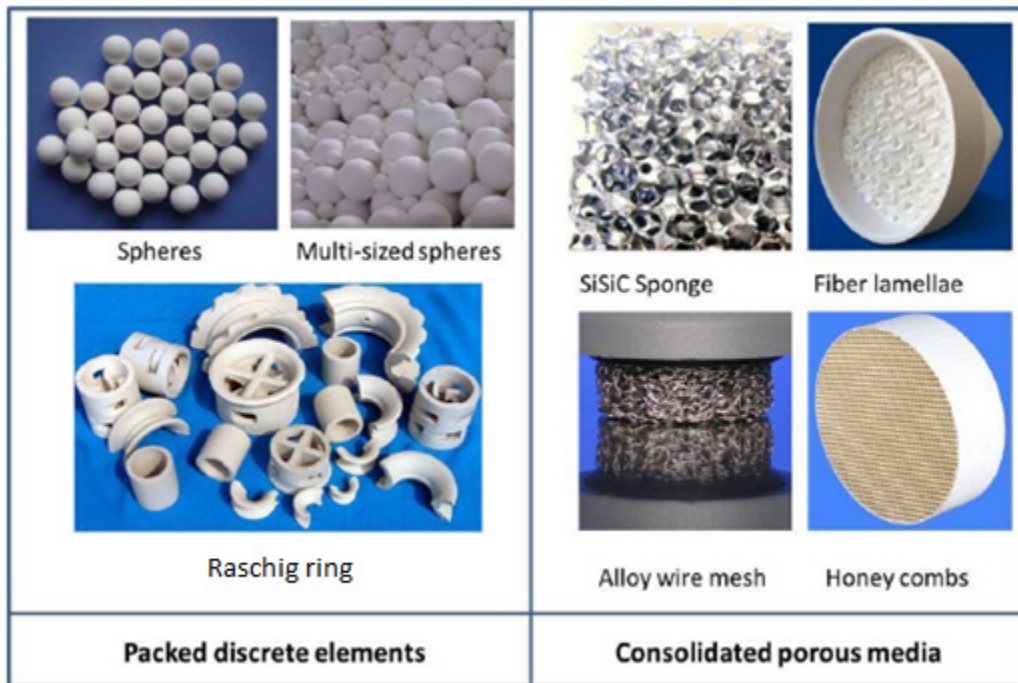


Figure 1-1 Différents milieux poreux assemblés (gauche) et continus (droite)
Extrait de Bedoya, (2016)

La seconde est basée sur des structures consolidées ou continues comme illustrées sur la Figure 1-1-droite. Il s'agit donc de matériaux continus (mousses de type éponge, nid d'abeille, faisceau de tubes, etc.). Les structures consolidées présentent des similitudes avec les structures assemblées de par leur surface d'échange importante. Parmi les structures consolidées, on peut distinguer deux paramètres importants pour classer les différents milieux continus. Le premier concerne la régularité du milieu et dépend principalement du procédé de fabrication. Si le milieu est obtenu par répétition d'un motif, on parle de milieu régulier. Dans les autres cas, on parle de milieu stochastique ou aléatoire (Samoilenko et al., 2019). L'avantage d'avoir une structure régulière (voir Figure 1-2-droite) est que les propriétés géométriques et physiques sont semblables en tout point de la structure. Les propriétés des matériaux stochastiques (voir

Figure 1-2-gauche) sont difficiles à estimer et nécessitent des approches statistiques (Dodson & Sampson, 2000).

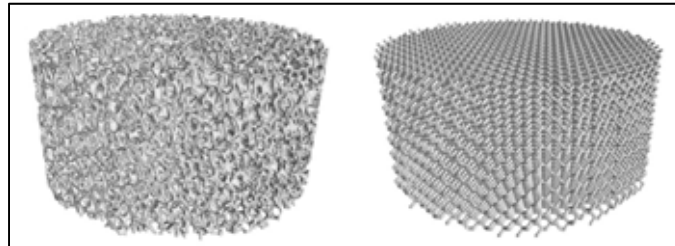


Figure 1-2 Matériaux stochastique (gauche) et régulier (droite)
Extrait de Samoilenko et al., (2019)

Le deuxième paramètre définissant un milieu poreux est lié à la structure interne du milieu. On distingue les structures fermées et ouvertes (Koru, 2016) (voir Figure 1-3), c'est-à-dire que les cellules ne sont pas forcément connectées. Les milieux avec structures closes (les structures alvéolaires en nid d'abeille, par exemple) permettent d'obtenir des surfaces internes importantes. Ils peuvent contenir des cellules entièrement closes, ce qui permet d'assurer une excellente isolation thermique. Néanmoins, dans le cadre de la combustion en milieu poreux, les milieux avec des cellules ouvertes permettant la circulation des fluides sont privilégiés (Chen et al., 2021). L'idée est de profiter de la surface interne importante et de la matrice solide sans trop perturber l'écoulement.

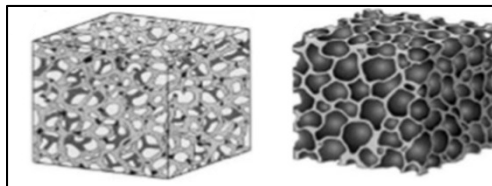


Figure 1-3 Cellules ouvertes (gauche) et cellules fermées (droite)
Extrait de Chen et al., (2021)

Comme il existe une infinité de structures envisageables pour faire le motif d'un milieu poreux régulier, les premiers candidats sont les structures issues de la cristallographie, telles

qu'offertes par un milieu régulier utilisant la maille de diamant illustré à la Figure 1-4 qui semble être un bon candidat (Samoilenko et al., 2019).

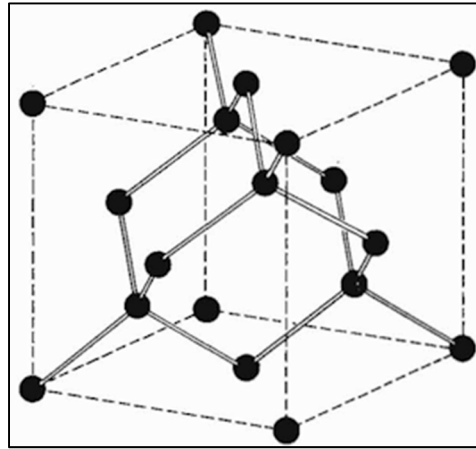


Figure 1-4 Maille diamant
Extrait de Bristol, *school of chemistry*

1.1.2 Méthode de fabrication par impression 3D

Il existe différentes méthodes de fabrication de milieu poreux en fonction du produit que l'on souhaite obtenir. Ceci inclut l'impression 3D, l'immersion d'éponges polymériques, la synthèse haute température, etc. Lorsque l'impression 3D est utilisée, les deux types de matériaux communément employés pour les applications en combustion sont les alliages métalliques (e.g., chrome-cobalt) ou céramiques (e.g., carbure de silicium). Le point commun entre ces techniques de production concerne l'utilisation de l'impression 3D ou fabrication additive qui implique, par exemple, le dépôt de fils en fusion pour les céramiques (Tu & Jiang, 2018) ou la fusion sur lit de poudre (Samoilenko et al., 2019) pour les métaux.

La fabrication additive possède de nombreux avantages. Les progrès de la technique permettent d'avoir un contrôle important sur le processus de fabrication, mais aussi une grande précision (Wong & Hernandez, 2012). Le laser utilisé dans la fusion sur lit de poudre peut être contrôlé pour que les couches successives aient des orientations particulières augmentant la rigidité de la structure (Leutenecker-Twelsiek et al., 2016). On peut donc produire des matériaux poreux réguliers et résistants à la combustion avec une grande précision.

1.1.3 Grandeurs et échelles

Afin de caractériser les milieux poreux, quelques grandeurs géométriques permettant des comparaisons sont utilisées. La notion la plus importante est la porosité qui correspond au pourcentage d'espaces vide dans le milieu. Il est défini de la manière suivante (Johnson, 1971) :

$$\varepsilon = \frac{V_{vide}}{V_{total}} = \frac{V_{vide}}{V_{solide} + V_{vide}} \quad (1.1)$$

Plus la porosité est faible, c'est-à-dire proche de 0, plus le matériau est compact. Les plages de porosités usuelles pour les matériaux classiques sont indiquées dans le Tableau 1-1. Pour les brûleurs poreux, la porosité est comprise entre ~30% et ~90% (Du Plessis et al., 1994; Fand et al., 1987; Macdonald et al., 1979). Pour les brûleurs faits à partir de billes, la porosité tourne autour de 40% alors qu'elle est d'environ 70% pour les mousses.

Tableau 1-1 Porosité moyenne de matériaux courants
Extrait de Johnson, (1971)

Matériaux	Porosité (%)
Argile	37-84
Limon	50-54
Sable propre	26-53
Sable fin	44-49
Roche concassée	37-44
Gravier	24-44
Roche	2-29

Il est commun de définir en plus de la porosité globale du milieu, la notion de densité de pores ou de cellules. Cette approche est fréquemment utilisée pour les milieux poreux ressemblant à des éponges. Ainsi, le nombre de pores par pouce (*pores per inch* ou PPI en anglais) correspond au nombre de pores moyen sur une distance linéaire (Samoilenko et al., 2019). Le PPI des mousses industrielles est calculé conformément à la norme de mesure ASTM D3576-15. Plus un matériau possède une valeur de pores par pouce élevée, plus il sera difficile de distinguer chaque pore. De plus, il est possible d'avoir une porosité similaire (0.8 par exemple), mais des valeurs de pores par pouce différent (10 et 60 ppi). Pour les matériaux irréguliers, les valeurs de PPI sont des grandeurs moyennes (Samoilenko et al., 2019).

Une seconde grandeur caractéristique souvent utilisée est la surface spécifique du milieu noté S_v (en m^{-1}). Elle correspond au ratio entre la surface des pores à l'interface entre le vide et la partie solide, et le volume total du milieu (Johnson, 1971).

$$S_v = \frac{S_{interface}}{V_{total}} \quad (1.2)$$

Enfin, on définit plus rarement la tortuosité qui permet de mettre en avant les détours du fluide traversant le matériau. Elle est définie comme la distance parcourue par le fluide par rapport à la hauteur du milieu poreux comme indiqué par l'Équation (1.3), alors que les grandeurs sont indiquées sur la Figure 1-5 (Johnson, 1971):

$$\tau = \frac{L}{x} \quad (1.3)$$

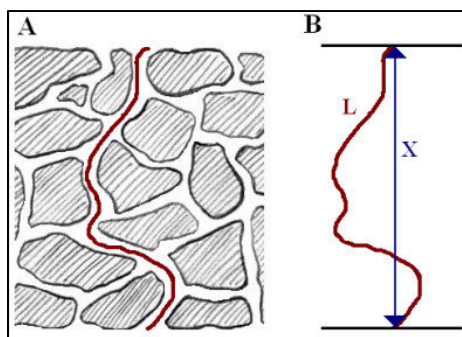


Figure 1-5 Représentation schématique de la tortuosité
Extrait de Johnson, (1971)

Dans tous les cas, ces grandeurs sont définies localement (i.e., microéchelle) et peuvent être généralisées à la structure complète (i.e., macroéchelle). Dans le cas des structures régulières, ces grandeurs sont identiques, mais pour les structures stochastiques, des approches statistiques sont utilisées pour obtenir des grandeurs moyennes (Samoilenko et al., 2019). Pour la combustion en milieu poreux, les matériaux sont en général peu denses avec une porosité élevée, autour de 0.8 (Mujeebu et al., 2010). Ils doivent posséder une capacité thermique importante pour servir d'accumulateur de chaleur ainsi que de bonnes résistances thermique et mécanique (Weclas, 2010).

1.1.4 Caractérisation expérimentale des écoulements en milieu poreux

La géométrie complexe des matériaux poreux rend leur étude et caractérisation difficile. Il existe cependant deux approches complémentaires pour étudier les différents types d'écoulement au sein de ces matériaux. Le choix de l'une des méthodes par rapport à l'autre se fait en fonction des objectifs souhaités.

1.1.4.1 Approche macroscopique et gradient de pression

L'approche macroscopique considère l'écoulement dans sa globalité, c'est-à-dire que les détails de la structure sont remplacés par des caractéristiques dites à « grande échelle » associées au milieu poreux. Cette approche néglige donc tous les phénomènes locaux. Les premiers travaux de cette nature ont été réalisés par Darcy, (1856). Il étudiait alors les

écoulements à travers du sable et a mis en évidence la relation entre les pertes de pression et la vitesse d'écoulement dans le matériau. Les grandeurs intéressantes sont alors définies globalement et les tailles caractéristiques sont souvent des données géométriques moyennées sur l'ensemble du matériau. Pour caractériser les pertes de pression dans les milieux poreux, le gradient de pression macroscopique est utilisé et la longueur caractéristique est représentée par l'épaisseur du matériau dans la direction de l'écoulement.

$$-\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{P_{sortie} - P_{entrée}}{L} \quad (1.4)$$

Les écoulements à faibles vitesses en milieu poreux ont été nommés, plus tard, en son honneur et porte donc le nom d'écoulements de Darcy, pour lesquelles les forces visqueuses sont prépondérantes sur les forces inertielles (Kaviany, 2012). On parle également d'écoulement rampant lorsqu'un nombre de Reynolds est compris entre 1 et 10. Le nombre de Reynolds dont la définition est donnée par l'équation (1.5) représente le rapport entre les forces inertielles et les forces visqueuses. Il existe plusieurs définitions possibles du nombre de Reynolds pour caractériser les milieux poreux, et ce, en fonction de l'approche utilisée (Lage et al., 1997). Le nombre de Reynolds utilisant le diamètre moyen des pores (D) (Weclas, 2010) est présenté ci-dessous, sachant qu'il existe d'autres définitions faisant intervenir d'autres paramètres géométriques du matériau. Dans l'équation (1.5), les grandeurs ρ_f (masse volumique) et μ (viscosité dynamique) sont les caractéristiques du fluide. Les deux autres paramètres sont plus difficiles à définir à cause de la complexité de l'écoulement dans le milieu poreux. Pour la vitesse caractéristique, il est possible de prendre la vitesse de Darcy définie de la manière suivante $u_D = \langle u_z \rangle \cdot \varepsilon$. Dans cette équation ε représente la porosité alors que $\langle \rangle$ indique la valeur moyenne.

$$Re_p = \frac{\rho_f u_D D}{\mu} \quad (1.5)$$

Il est possible de définir également un nombre de Reynolds à partir de la perméabilité, K (Weclas, 2010) qui correspond à l'efficacité d'interaction entre le milieu poreux et le fluide.

Elle apparaît dans la loi de Darcy :

$$\frac{dP}{dz} = -\frac{\mu u}{K} \quad (1.6)$$

avec u la vitesse du fluide et μ la viscosité dynamique. La perméabilité permet de faire le lien entre le gradient de pression et la vitesse moyenne (*bulk velocity* sur la figure Figure 1-6) du fluide dans le milieu poreux. La perméabilité dépend des facteurs géométriques du milieu et son expression est issue d'une formule semi-empirique (Kececioglu & Jiang, 1994).

$$K = \frac{\varepsilon^3}{S_v^2 k (1 - \varepsilon)^2} \quad (1.7)$$

Le facteur k correspond à la constante de Kozeny-Carman et permet de traduire la tortuosité de l'écoulement. L'écoulement du fluide à travers le milieu poreux entraîne une perte de pression, causée par les frottements visqueux ainsi que les effets inertiels (Ergun & Orning, 1949). Le gradient de pression est dépendant du nombre de Reynolds de l'écoulement et de la géométrie, comme illustré sur la Figure 1-6 pour différentes structures stochastiques caractérisées en PPI.

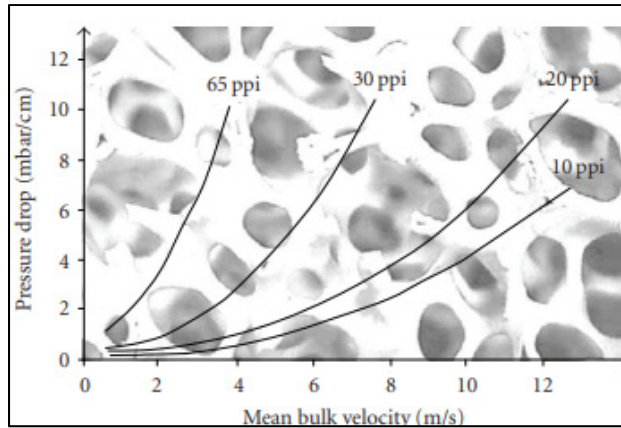


Figure 1-6 Évolution du gradient de pression en fonction de la vitesse pour différentes porosités
Extrait de Weclas, (2010)

À partir d'une telle caractérisation d'un milieu poreux, il est alors fréquent de tracer l'évolution du gradient de pression adimensionnel, sans dimension, en fonction de la vitesse afin d'observer les différents régimes d'écoulement pour une géométrie donnée, comme illustrés sur la Figure 1-7 (Bloschanskaya et al., 2017).

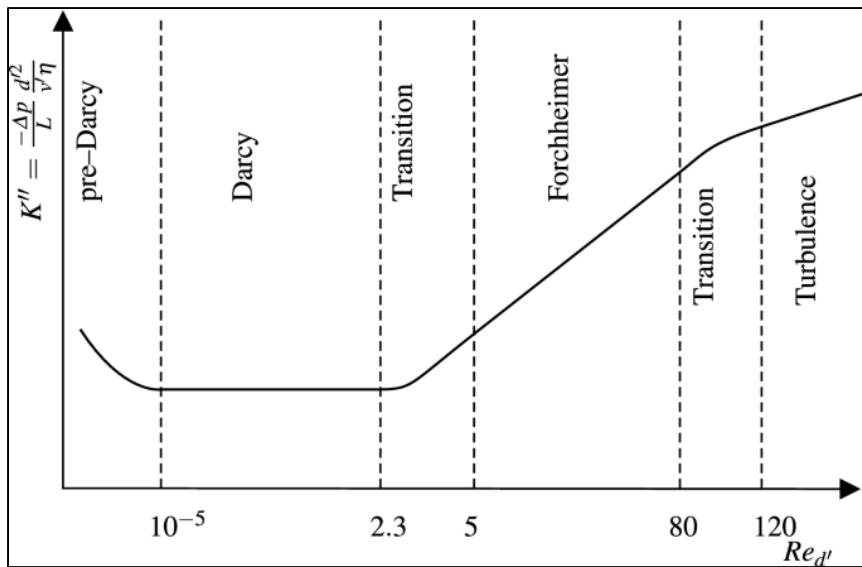


Figure 1-7 Gradient de pression en fonction du nombre de Reynolds
Extrait de Boettcher et al., (2022)

Sur la Figure 1-7 on peut distinguer différentes zones ayant chacune des caractéristiques d'écoulement différentes en fonction du nombre de Reynolds. Ces zones peuvent être délimitées conformément aux travaux de Fand et al., 1987. Néanmoins, ces limites peuvent varier selon les milieux poreux étudiés avec un nombre de Reynolds de transition du régime de Darcy vers le régime de Forchheimer qui varie entre ~ 10 et ~ 1000 (Bloschanskaya et al., 2017).

À partir d'une telle figure caractérisant l'écoulement au sein d'un milieu poreux, il est possible de distinguer trois grandes zones ayant chacune un comportement différent. Dans la première zone, appelée zone de Darcy, qui est comprise entre $10^{-5} < Re_p < 2.3$, le gradient de pression, sans dimension, est constant et ne dépend pas du nombre de Reynolds. Un palier est alors observé et provient des forces visqueuses importantes qui dominent l'écoulement (Ergun & Orning, 1949). La deuxième zone correspond au régime de Forchheimer (entre $5 < Re_p < 80$) avec un comportement affiné du gradient de pression à cause des forces inertielles et qui sera détaillées dans la section suivante. Lorsque le Reynolds atteint une valeur supérieure à ~ 120 (sur la Figure 1-7), l'écoulement est considéré turbulent. Entre chaque régime, des zones de transition correspondent à des ruptures de pente. L'écoulement est considéré laminaire partout sauf dans la zone turbulente.

1.1.4.2 Corrélations du gradient de pression

Depuis les travaux initiaux de Ergun & Orning, (1949), plusieurs corrélations ont été développées pour décrire l'évolution du gradient de pression en fonction de la vitesse de Darcy de sorte qu'elle s'applique également au régime de Forchheimer qui sera décrit dans la prochaine section. Les corrélations sont de la forme générale :

$$-\frac{\partial P}{\partial z} = C_1 \mu u_D + C_2 \rho u_D^2 \quad (1.8)$$

Les valeurs des coefficients C_1 et C_2 sont décrites dans le Tableau 1-2 pour différentes études (Ergun & Orning, 1949; Fand et al., 1987; Du Plessis et al., 1994). Elles dépendent des

caractéristiques des milieux poreux telles que le diamètre des pores et la porosité, mais aussi la tortuosité pour Du Plessis et al. Pour les études de Ergun et Fand, les expériences portaient sur des colonnes remplies de particules granuleuses (du sable par exemple) ou des sphères solides. Dans les deux cas, les porosités étudiées sont voisines de 0.4. Dans ces études, on ne peut pas parler de pores et la longueur caractéristique est le diamètre (statistique moyenne si besoin) des particules. Enfin, les études de Du Plessis avaient pour objet d'étudier des mousses métalliques de porosité très grande et à des vitesses d'écoulement relativement faibles de l'ordre de 0.1 m/s (valeurs comprises entre 0.01 et 0.7 m/s). Dans ce cas, les matériaux étudiés sont fabriqués par la répétition de motifs (par impression 3D céramique par exemple) et la longueur caractéristique de l'écoulement est prise comme étant le diamètre des pores.

Tableau 1-2 Corrélations des coefficients du gradient de pression dans le régime de Forheimer en fonction de la porosité et du diamètre de pore

Étude	Coefficient $C_1 (m^{-2})$	Coefficient $C_2 (m^{-1})$
Ergun (Ergun & Orning, 1949)	$150 \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 D_p}$	$1.75 \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^3 D_p}$
Fand et al. (Fand et al., 1987)	$182 \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 D_p}$	$150 \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon^3 D_p}$
Du Plessis et al. (Du Plessis et al., 1994)	$36\tau \frac{(\tau - 1)}{\varepsilon^2 D_p}$	$2.05\tau \frac{(\tau - 1)}{\varepsilon^2 (3 - \tau) D_p}$

1.2 Combustion

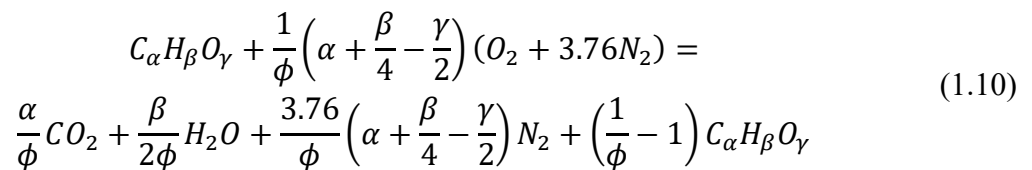
La combustion des combustibles hydrocarbonés de formule chimique globale $C_\alpha H_\beta O_\gamma$ fait intervenir des réactions thermochimiques exothermiques. Elle a lieu en présence d'un comburant, souvent l'air (ou bien du dioxygène dans de rares cas). La réaction produit une grande quantité d'énergie qui se traduit par une augmentation de la température et qui peut être utilisée pour faire un travail (McAllister et al., 2011). Le dégagement de chaleur entraîne une augmentation de la température qui peut atteindre plus de 2000 K pour la combustion du méthane.

De façon générale, on distingue deux types de flammes : les flammes de diffusion et les flammes prémélangées. Dans le cadre des flammes de diffusion (flammes de bougie par exemple), le carburant et le comburant sont parfaitement séparés alors que les flammes prémélangées impliquent que le mélange air-carburant soit opéré en amont de la flamme.

Afin de caractériser la combustion des flammes prémélangées et donc du mélange qui a eu lieu en amont, on parle de combustion stœchiométrique pour représenter un mélange faisant intervenir la quantité minimale et nécessaire d'oxydant (air) pour oxyder une unité massique de carburant selon une combustion théorique ne produisant que de l'eau et du dioxyde de carbone (l'azote étant considéré comme ne réagissant pas). Ce mélange stœchiométrique permet d'introduire un paramètre important : la richesse. Elle compare le ratio massique air-carburant f du mélange considéré au ratio air-carburant stœchiométrique f_s comme présenté à l'équation (1.9)) sur une base massique ou molaire (McAllister et al., 2011).

$$\phi = \frac{f}{f_s} = \frac{m_f / m_a}{m_f / m_{a_s}} = \frac{m_{a_s}}{m_a} = \frac{n_{a_s}}{n_a} \quad (1.9)$$

Si la richesse est inférieure à 1, le mélange est dit pauvre en carburant, car la quantité d'air introduite est supérieure à celle requise pour oxyder tout le carburant. Si la richesse est de 1, on est alors à la stœchiométrie. Si la richesse est supérieure à 1, le mélange est dit riche en carburant et il y a un excédent de carburant. C'est ce cas qui nous intéresse dans ce travail. On peut alors écrire la réaction globale de combustion pour un mélange hydrocarbure $C_\alpha H_\beta O_\gamma$ -air riche comme présenté au sein de l'Équation (1.10) qui ne prend pas en compte les réactions intermédiaires.



Finalement, pour les flammes de diffusion, le mélange a lieu uniquement au niveau de la flamme dans des conditions proches de la stœchiométrie (McAllister et al., 2011).

1.2.1 Flamme laminaire prémélangée

Ainsi et comme vu précédemment, une flamme est dite prémélangée lorsque le mélange air-carburant est réalisé préalablement puis introduit dans le brûleur (McAllister et al., 2011). Cette section portera de fait sur la caractérisation générale des flammes laminaires.

1.2.1.1 Profil de température

Dans cette partie, le concept théorique de flamme laminaire libre sera abordé et illustré sur le modèle à une dimension présenté à la Figure 1-8 (Turns, 2012). La structure de la flamme se décompose de la manière suivante. La première zone en amont de la flamme correspond à la zone de préchauffage (en jaune sur la figure). Dans cette zone, la température des réactifs augmente. Une petite portion des réactifs est également consommée et la chaleur dégagée par la réaction se diffuse vers les gaz froids. Ensuite, il y a la zone de réaction que l'on peut décomposer en deux. La première (en orange sur la figure) correspond à la flamme visible. C'est dans cette zone relativement fine de quelques millimètres où le taux de réactions est le plus élevé (McAllister et al., 2011; Turns, 2012). La température du mélange atteint sa température d'inflammation et s'enflamme. Les réactions de dissociation des réactifs permettent alors de générer des espèces intermédiaires plus réactives et des espèces polluantes (McAllister et al., 2011). Les réactions entre deux espèces sont prédominantes et les réactifs sont entièrement consommés. La seconde zone de réaction, en aval de la flamme, est également notée zone de recombinaison (en bleu sur la figure) en raison des réactions de recombinaison trimoléculaires plus lentes qui se mettent en place avec les radicaux générés au niveau de la flamme. La température y est maximale. Dans cette zone l'oxydation se complète et forme les espèces stables.

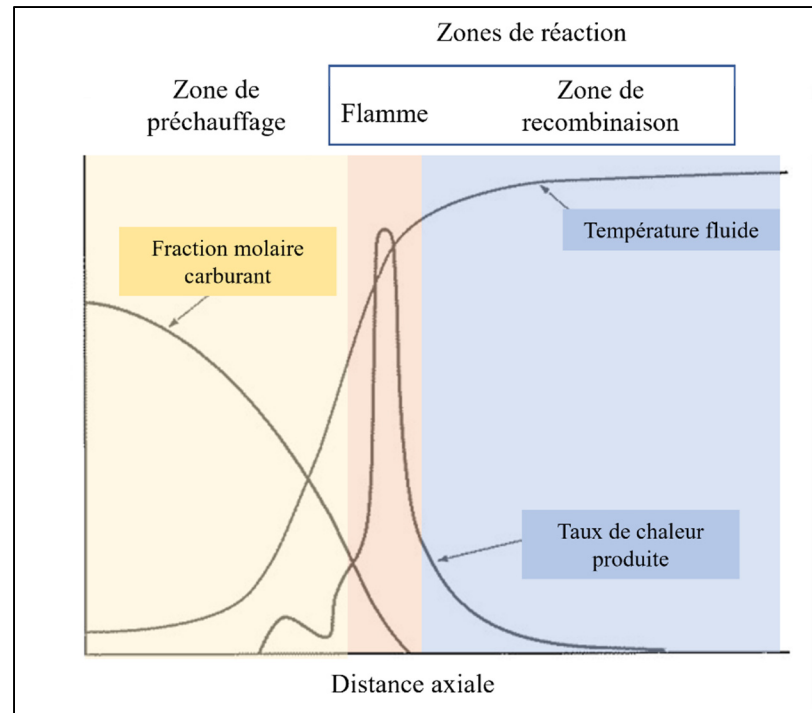


Figure 1-8 Structure d'une flamme laminaire prémélangée
Extrait et traduit de Turns, (2012)

1.2.1.2 Température de flamme adiabatique

L'énergie délivrée par la réaction de combustion sert de moteur au processus global. En effet, les réactions de combustion sont exothermiques, c'est-à-dire qu'elles dégagent une grande quantité de chaleur tant qu'elles sont alimentées en réactifs. S'il n'y a aucune perte d'énergie vers le milieu extérieur, la réaction est dite adiabatique et maximise la température atteinte par la flamme et les gaz brûlés. Cette température dépend du carburant et de la richesse du mélange. La température maximale est atteinte lorsque le mélange est légèrement riche, soit vers une richesse de 1.1 (McAllister et al., 2011). La Figure 1-9 illustre les températures de flamme adiabatique de carburants gazeux courants en fonction de la richesse (Law, 2006).

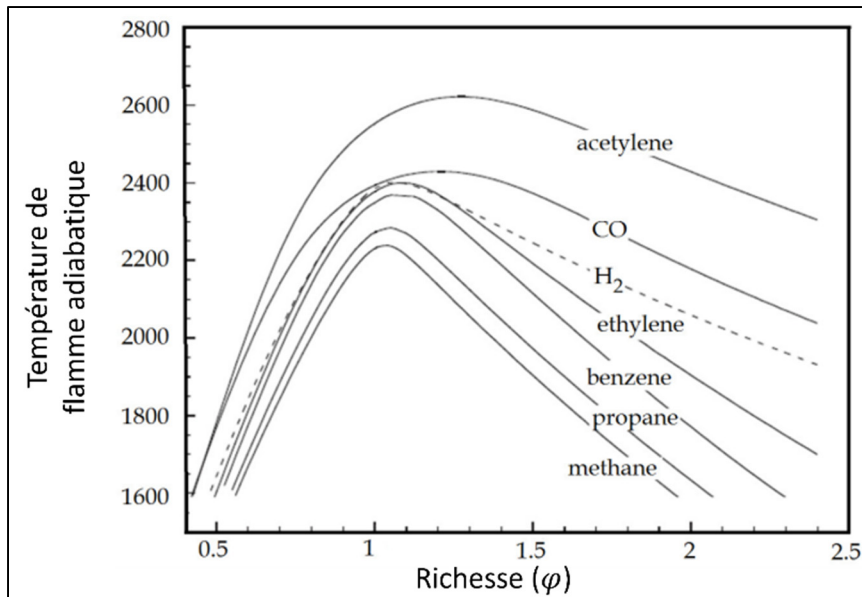


Figure 1-9 Température de flamme adiabatique en fonction de la richesse pour différents carburants

Extrait et adapté de Law, (2006)

D'autres paramètres importants exercent une influence sur la température de flamme adiabatique : la pression et la température de préchauffage (Wu et al., 2016). Plus on augmente la température d'entrée des gaz, plus la température de la flamme augmente comme illustré sur la Figure 1-10. Toutefois, comme la Figure 1-10 l'illustre également, l'augmentation de la température de flamme adiabatique correspond à une fraction du niveau de préchauffe.

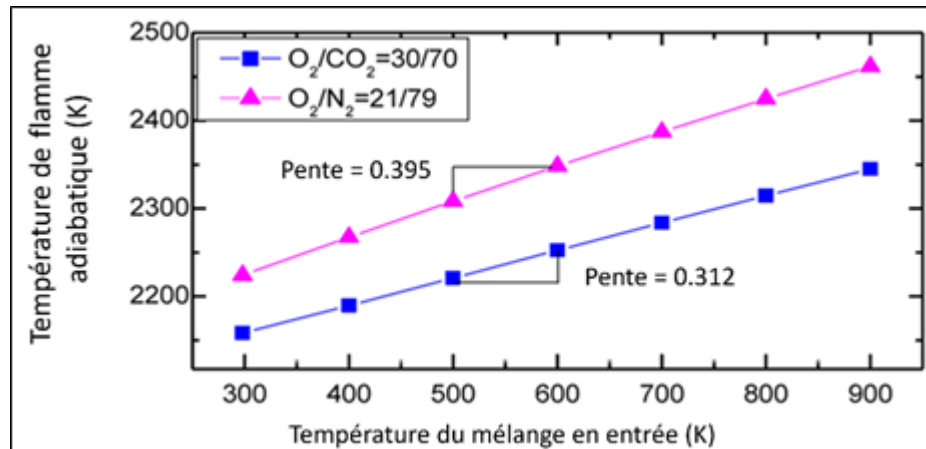


Figure 1-10 Température de flamme adiabatique en fonction de la température du mélange froid pour différents mélanges
Extrait et traduit de Chen et al., (2011)

1.2.1.3 Vitesse de flamme laminaire

Le comportement de la flamme est analogue à une onde se propageant depuis la zone de gaz brûlés vers les gaz froids à une vitesse notée S_l , aussi appelée vitesse de flamme laminaire (Bedoya, 2016). La vitesse de la flamme dépend de plusieurs paramètres : les espèces mises en jeu, la richesse du mélange, la température du mélange frais ainsi que la pression (Wu et al., 2016). Pour la plupart des hydrocarbures, la vitesse de flamme laminaire maximale est atteinte pour des mélanges légèrement riches (autour d'une richesse de 1.1) comme pour la température maximale adiabatique (Amirante et al., 2017). Cette valeur de S_l maximale dépend toutefois des carburants, car il y a des exceptions telles que les flammes d'hydrogène, d'éthène ou encore de monoxyde de carbone pour lesquelles la valeur maximale est atteinte à des richesses plus élevées. La Figure 1-11 illustre la vitesse de flamme laminaire libre pour un hydrocarbure classique, le méthane.

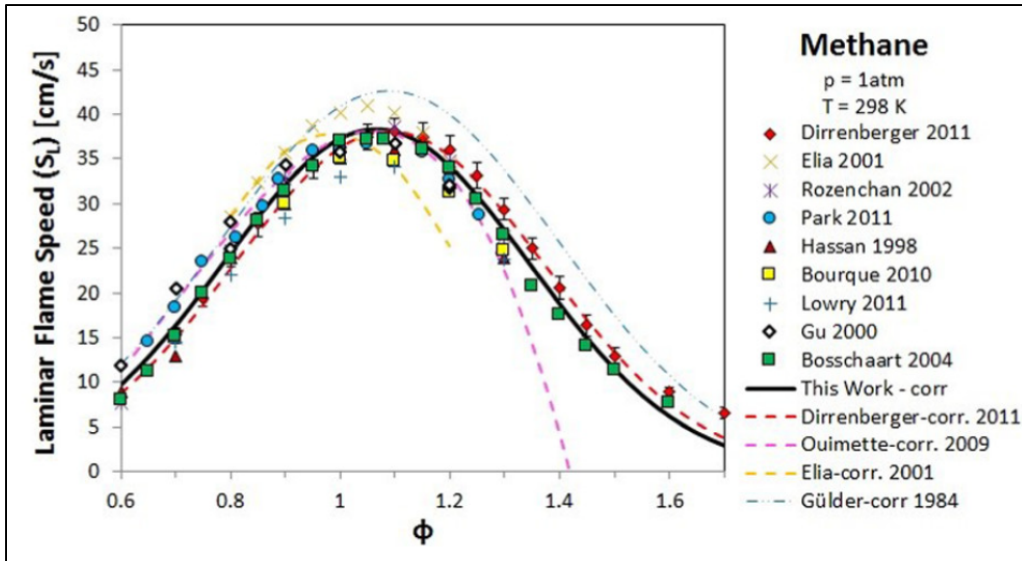


Figure 1-11 Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse pour le méthane
 Extrait de Amirante et al., (2017)

Comme les vitesses de flamme laminaire dépendent de plusieurs paramètres et afin d'illustrer l'effet particulier de la température du mélange frais, la Figure 1-13 est considérée. Sur cette figure la température initiale du mélange frais varie entre 300 et 473 K et il est possible d'observer une augmentation de S_L et ce, pour toutes les richesses considérées.

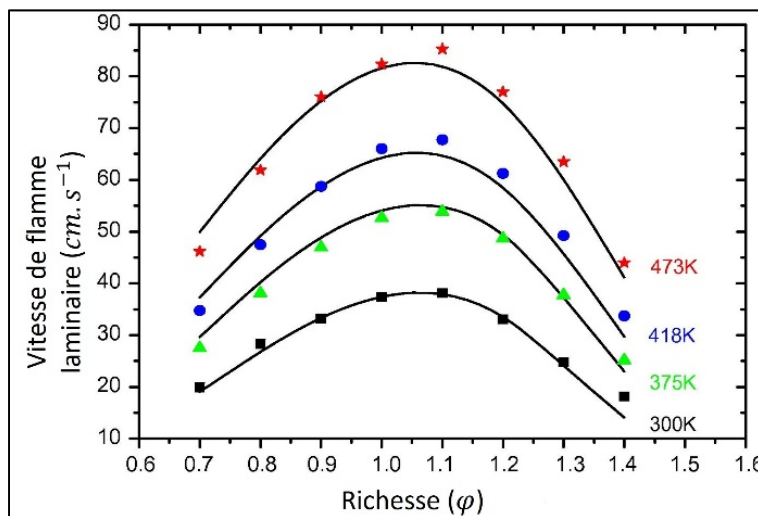


Figure 1-12 Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse pour différentes températures de préchauffage
 Extrait et traduit de Amirante et al., (2017)

La température initiale du mélange influençant de manière importante la vitesse de flamme laminaire, celle-ci intervient de fait au sein de l'Équation 1.11 qui est une corrélation permettant de corriger la vitesse de flamme laminaire tabulée dans les conditions standard afin de faire intervenir la température des gaz frais ainsi que la pression. L'effet de la température du mélange frais est important puisque $1.5 < \alpha < 2.5$ tandis que toute augmentation de la pression va tendre à réduire S_l du fait que $-1.5 < \beta < -1$ pour les carburants classiques (McAllister et al., 2011).

$$S_l(\phi, P, T) = S_{l,ref}(\phi) \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\alpha \left(\frac{P}{P_{ref}} \right)^\beta \quad (1.11)$$

1.2.1.4 Limites d'inflammabilité et stabilité

Pour les flammes prémélangées lorsque le mélange réactionnel s'appauvrit ou s'enrichit en carburant à partir de la richesse maximisant S_l , la vitesse de flamme diminue avec pour conséquence éventuelle l'atteinte de l'extinction de la flamme. Ainsi, les deux limites correspondant à des mélanges trop pauvres ou trop riches sont nommées limites d'inflammabilité inférieure et limite d'inflammabilité supérieure, respectivement. Elles définissent ainsi la plage d'inflammabilité au-delà de laquelle le mélange ne peut plus s'enflammer. Cette plage dépend du carburant, entre autres. Pour les hydrocarbures, elle est en général comprise entre 1% et 15% de carburant sur une base volumique aux conditions standards. Pour le dihydrogène, la plage est bien plus importante, de 4% à 75% (McAllister et al., 2011).

1.3 Combustion en milieu poreux

La combustion en milieu poreux a fait l'objet de nombreux sujets de recherche (Banerjee & Paul, 2021; Mujeebu et al., 2009; Trimis & Durst, 1996; Viskanta, 2011; Wood & Harris, 2008). L'intérêt est d'utiliser les propriétés conductrices du matériau solide afin d'emmagasiner une partie de l'énergie et de la restituer afin de préchauffer le mélange frais. Avec cette approche la flamme est confinée dans la matrice solide.

1.3.1 Applications de la CMP

Il existe de nombreuses applications à la combustion en milieu poreux (CMP) selon Mujeebu et al., (2010) qui identifie ainsi les moteurs à combustion interne et les turbines à gaz, entre autres. Les brûleurs poreux permettent un stockage de l'énergie dans la chambre de combustion et augmentent la température de flamme grâce au préchauffage du mélange frais. Cette approche favoriserait également l'évaporation des gouttelettes de carburant liquide. Ainsi l'ajout d'un système de régénération avec un matériau poreux permet d'augmenter l'efficacité d'un moteur Diesel de 43% à 53% (Mujeebu et al., 2009). On trouve également des applications dans les systèmes d'éclairage. On parle alors de brûleur radiant permettant de produire un rayonnement à faible éblouissement et faible émission à partir de matériaux combustibles. Enfin, la CMP permet également la production de gaz de synthèse et la combustion de mélanges très pauvres ou très riches en carburant grâce aux phénomènes de recirculation de l'énergie et du préchauffage associés à la CMP qui permettent de repousser les limites d'inflammabilité identifiées précédemment dans les flammes libres. Les caractéristiques de la CMP seront détaillées dans les sections suivantes.

1.3.2 Profils de température dans un brûleur poreux

Comme la CMP implique la présence d'un milieu solide dans lequel la phase gazeuse se propage, le système ainsi créé n'est pas en équilibre thermique. Les profils de température du solide et du gaz sont donc considérés séparément et permettent de comprendre l'interaction entre les deux phases.

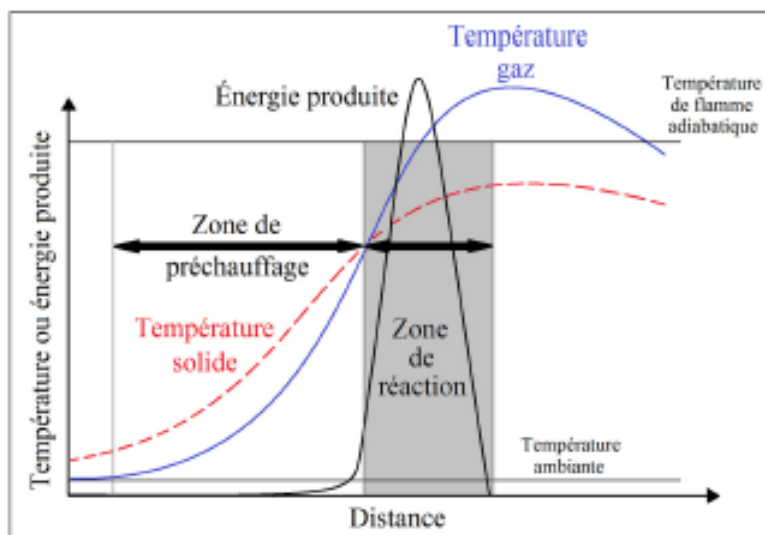


Figure 1-13 Profil de températures fluide (bleu), solide (rouge) et d'énergie de réaction dans un brûleur poreux
Extrait de Billerot, (2018)

De façon générale, le profil de température du fluide est similaire au cas d'une flamme libre comme cela peut être observé au sein de la Figure 1-13 qui présente les profils de température du gaz et du solide d'un brûleur poreux. Le dégagement d'énergie lié à la combustion est également présent et identifié par la ligne noire. On remarque que la température des gaz frais augmente et que cette augmentation provient du transfert d'énergie provenant du milieu solide (Kennedy & Saveliev, 1995) qui se trouve à une température supérieure. La zone de réaction peut être définie comme la zone où l'énergie dégagée par les réactions chimiques est non nulle comme illustrée sur la Figure 1-13 (Barra & Ellzey, 2004; Wood & Harris, 2008). Dans cette zone, qui sera plus longue que dans le cas d'une flamme libre, la température du fluide est supérieure à celle du solide et la température maximale atteinte par le gaz peut surpasser la température adiabatique. Dans cette région du brûleur, le transfert de chaleur se fait des gaz vers le solide. Finalement après la zone de réaction les températures du gaz et du solide peuvent atteindre un état d'équilibre. À partir de la Figure 1-14 qui implique la présence de transferts de chaleur entre les deux milieux, ces échanges thermiques se font par conduction et le rayonnement pour le solide alors que la conduction et la convection ont lieu dans le fluide. De façon générale, les effets radiatifs du fluide sont négligés à cause de la faible absorptivité devant les autres modes de transferts (Bedoya, 2016). Lors de simulations numériques, cette

hypothèse est utilisée dans les cas 3D, mais n'est pas réaliste pour les simulations 1D et 2D (Bedoya, 2016). L'ensemble des modes de transfert de chaleur est illustré sur la Figure 1-14.

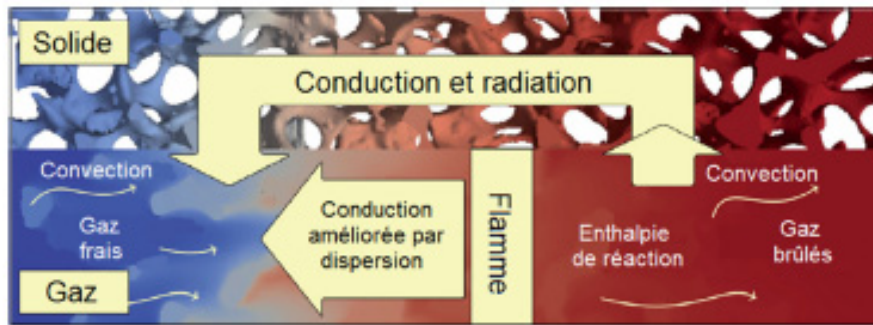


Figure 1-14 Schématisation des transferts de chaleur dans un brûleur poreux
Extrait de Billerot et al., (2020)

Pour les échanges entre les deux milieux, le transfert de chaleur de l'un vers l'autre se fait par convection au niveau de l'interface solide-gaz. Comme le solide est un meilleur conducteur thermique que le fluide, l'énergie reçue par le solide se diffuse dans celui-ci par conduction et radiation, vers l'amont de l'écoulement. Ainsi, dans la zone de préchauffage de la flamme, le solide est plus chaud que le fluide, ce qui a pour conséquence de favoriser l'échange thermique avec le fluide en entrée. Comme la température des gaz frais est un paramètre essentiel déterminant la vitesse et la température de la flamme laminaire, le préchauffage du mélange frais par le solide a pour conséquence d'augmenter la vitesse et la température de flamme en accord avec la section précédente. Dans les brûleurs poreux, la température augmente et peut dépasser la température de flamme adiabatique. On parle alors de comportement super-adiabatique (Drayton et al., 1998) ou de combustion à excès d'enthalpie ou encore de combustion auto récupératrice (Viskanta, 2011; Wood & Harris, 2008). L'augmentation de la température au-delà de la température de flamme adiabatique peut atteindre une centaine de degrés pour des flammes de méthane (Bedoya, 2016; Billerot et al., 2020; Viskanta, 2011; Wood & Harris, 2008).

Le préchauffage des gaz frais est fonction de la vitesse d'entrée des gaz qui impactera les transferts de chaleur qui sont favorisés par de forts gradients de température. Des travaux réalisés par Vandadi & Park, (2018) pour déterminer la forme analytique de la température dans les deux phases en prenant en compte l'effet de la recirculation montrent que la vitesse d'entrée des gaz frais influence la distribution de la température du solide. Le résultat est illustré au sein de la Figure 1-15 sur laquelle il est observé que la température d'inflammation du mélange est également influencée par la vitesse d'entrée des gaz (voir coin droit de la Figure 1-15).

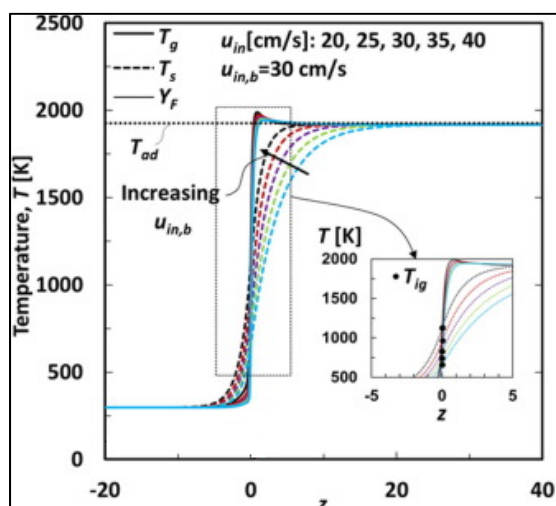


Figure 1-15 Profil de température solide (traits pointillés) et du gaz (traits pleins) en fonction du débit d'entrée
Extrait de Vandadi & Park (2018)

L'augmentation de la température permet également d'augmenter les rendements de conversion en dihydrogène ce qui permet de se passer de catalyseur (Fernández-Galisteo et al., 2019).

1.3.3 Stabilité de la combustion dans un milieu poreux

La présence de la matrice solide a un autre avantage, à savoir qu'elle permet de stabiliser la flamme (Banerjee et al., 2020). Les propriétés physiques (conductivité thermique, absorptivité)

et structurelles (géométrie complexe) sont importantes pour la stabilité de la flamme. Cette plus grande stabilité se caractérise également par une modification des limites d'inflammabilité des carburants en raison du préchauffage induit par la présence du solide. Ainsi, des mélanges plus pauvres (Bedoya, 2016; Billerot et al., 2020) ou plus riches que dans une flamme libre (Fernández-Galisteo et al., 2019; Ripoll & Toledo, 2021) peuvent brûler à l'aide de la CMP. À titre d'exemple, pour le cas du méthanol, la limite d'inflammabilité est doublée (Fernández-Galisteo et al., 2019). Finalement, la recirculation de la chaleur et le préchauffage qui en découle permettent d'améliorer le rendement des réactions et de diminuer la consommation de carburants (Bedoya, 2016; Voss et al., 2013) pour une même puissance d'énergie dégagée ou une même température de flamme.

1.4 Gaz de synthèse

Les gaz de synthèse, également appelés syngas, correspondent à des mélanges gazeux contenant majoritairement deux gaz combustibles : le monoxyde de carbone (CO) et le dihydrogène (H_2) (Toledo et al., 2016). Ils peuvent également contenir du dioxyde de carbone (CO_2), du méthane (CH_4), du diazote (N_2) ainsi que de la vapeur d'eau (H_2O). Le ratio H_2/CO est le paramètre important quant à la qualité du gaz de synthèse obtenu. Il représente également l'efficacité du procédé et le rapport entre la gazéification et la combustion (Zohreh Ravaghi-Ardebili et al., 2014).

1.4.1 Risque de sécurité

Les deux gaz composant les syngas présentent des problématiques de stockage, de transport et d'utilisation. Le CO est un gaz inodore et incolore qui limite l'apport d'oxygène dans le corps, ce qui peut entraîner des problèmes de santé grave. L'hydrogène présente des risques en termes de stockage et de transport du fait de sa très faible masse et de sa très grande réactivité (Bentaib et al., 2015).

1.4.2 Applications des syngas

Les syngas peuvent être utilisés tels quels comme carburant et sont également des produits intermédiaires dans plusieurs applications de production de carburant en fonction du ratio H_2/CO . La première concerne la production de biocarburants tels que l'éthanol qui pourrait être possible via le procédé Fischer-Tropsch (FT) (Santos & Alencar, 2020; Subramani & Gangwal, 2008). Ensuite on trouve les applications en chimie industrielle avec la production de méthanol (Cui & Kær, 2020) qui nécessite un ratio H_2/CO proche de 2. Le méthanol produit est un précurseur pour la production de formaldéhyde, de diméthyléther, d'acide acétique, etc. (Chae et al., 2020). Il est également noté qu'un rapport H_2/CO égal ou inférieur à 1 permet la synthèse de l'éthanol (Chae et al., 2020). On trouve ensuite des applications nécessitant un syngas ayant une forte concentration en hydrogène avec des ratios H_2/CO supérieurs à 50 permettant une utilisation comme carburant ou encore pour la production de fertilisant, par exemple. Dans ce dernier cas, l'hydrogène permet la production d'engrais avec la synthèse de l'ammoniac grâce au processus Haber-Bosch (Kandemir et al., 2013). Finalement, l'utilisation directe de gaz de synthèse dans les moteurs à combustion est considérée comme une solution intermédiaire pour permettre une transition des hydrocarbures vers des carburants hydrogénés (Fiore et al., 2020).

1.4.3 Production de syngas

Il existe plusieurs méthodes de production des gaz de synthèse en fonction des combustibles utilisés (Rostrup-Nielsen, 2002; Wilhelm et al., 2001). Les combustibles les plus courants sont les hydrocarbures, principalement le méthane, le gaz naturel, et le charbon. La production de syngas à partir de la biomasse fait également l'objet de nombreuses études (Jesús Rico et al., 2020; Santos & Alencar, 2020; Sun et al., 2013), car elle permet de valoriser certains déchets pour les transformer en combustible. Enfin il existe d'autres méthodes de fabrication telles que l'utilisation d'énergie solaire comme source externe de chaleur (Agrafiotis et al., 2014) pour la réaction de vaporeformage ou bien l'électrolyse du CO_2 (Stoots et al., 2009). La production actuelle de syngas est néanmoins très centrée sur l'utilisation des combustibles fossiles (M. Wang et al., 2021). Il existe différents procédés de conversion de ces matières premières en

syngas. On peut séparer ces procédés en fonction de la présence ou non d'oxygène. D'une part, on trouve le reformage à la vapeur (Wilhelm et al., 2001) ou au CO₂ (Fidalgo & Menéndez, 2011) qui ne nécessitent pas la présence d'oxygène. D'autre part, on retrouve l'oxydation partielle (Wilhelm et al., 2001), la gazéification (Lv et al., 2007; Santos & Alencar, 2020; Sun et al., 2013 a, b) ou le reformage autothermique (Wilhelm et al., 2001).

1.4.3.1 Production par reformage

Les réactions de reformage à la vapeur et au CO₂ sont endothermiques. Le vaporeformage ou reformage à la vapeur est la méthode de production la plus exploitée. La réaction endothermique de vaporeformage du méthane est présentée à l'Équation (1.12):



Elle permet d'obtenir des syngas avec un ratio H₂/CO élevé, idéal pour la production d'hydrogène, mais qui est trop élevé pour certaines applications telles que la réaction FT (Wilhelm et al., 2001). La réaction endothermique nécessite l'apport d'une source externe de chaleur telle que la combustion d'hydrocarbures ou l'énergie solaire (Agrafiotis et al., 2014). L'utilisation d'un catalyseur permet de faciliter la réaction et d'avoir une température de réaction relativement faible autour de 800°C (Fidalgo & Menéndez, 2011). Cependant, l'ajout d'un catalyseur comme du NiAl₂O₄ (Salhi et al., 2011) ou du MgAl₂O₄ (Ghoneim et al., 2016) entraîne une augmentation du coût d'exploitation. La réaction de reformage au CO₂ (Équation (1.13)) est similaire dans son fonctionnement, mais le ratio H₂/CO obtenu est plus faible (Fidalgo & Menéndez, 2011). Cette réaction permet néanmoins de valoriser deux gaz à effets de serre à savoir le CH₄ et le CO₂. Ce procédé nécessite toutefois l'utilisation de catalyseur (Ni, Pt, Rh, par exemple) pour avoir une température de réaction située autour des 1270 K (Wang et al., 1996).



1.4.3.2 Production par réaction avec de l'oxygène

Contrairement aux procédés énoncés précédemment, les techniques de production suivantes requièrent la présence d'oxygène pour avoir une transformation de la matière. Pour commencer, la gazéification est une technique en plein développement pour transformer des matières premières fossiles (Wang et al., 2021) ou la biomasse (Abdoulmoumine et al., 2015; Göransson et al., 2011; Wang et al., 2021) en syngas. Différentes catégories de biomasse sont envisagées afin d'être valorisées en syngas telles que les déchets (Kalisz et al., 2008), les huiles végétales (Samiran et al., 2016) ou encore les matières lignocellulosiques (Ciliberti et al., 2020). Le processus de gazéification se décompose en plusieurs étapes dans un environnement sous haute température et sous environnement atmosphérique ou pressurisé. Après déshydratation, la dévolatilisation par pyrolyse de la biomasse permet d'obtenir les espèces volatiles et des résidus solides appelés « chars ». Les espèces volatiles passent par des étapes de craquage et de reformage afin d'obtenir des espèces gazeuses (H_2 , CH_4 , CO , CO_2). Les chars suivent un processus de gazéification afin d'obtenir les mêmes espèces. Les deux autres méthodes de production fonctionnent avec des réactions exothermiques et donc des températures plus élevées. Le reformage autothermique utilise l'oxygène, le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau pour produire des gaz de synthèses (Vosloo, 2001). La réaction se fait de nouveau en présence d'un catalyseur et permet d'obtenir des syngas avec des ratios H_2/CO compris entre 1 et 2.5. Enfin l'oxydation partielle se fait uniquement en présence d'oxygène. Les températures atteintes sont les plus élevées, vers $1400^\circ C$, et le syngas obtenu possède un ratio H_2/CO compris entre 1 et 2. C'est donc avec cette approche que les brûleurs poreux peuvent convertir un hydrocarbure en syngas. L'absence de catalyseur entraîne toutefois une plus grande consommation d'oxygène et la production de suies sous certaines conditions (Dhal et al., 2017; Jiaqiang et al., 2022). Un procédé avec catalyseur est possible pour diminuer la température et limiter la production de suies, mais présente des inconvénients en termes de coût et de traitement (Bharadwaj & Schmidt, 1995).

1.4.3.3 Réaction du gaz à l’eau

Il est également possible d’influencer le ratio H₂/CO obtenu à l’aide de la réaction du gaz à l’eau (*Water Gas Shift* ou WGS en anglais) qui est une réaction chimique importante permettant d’ajuster ce ratio (Fan et al., 2009).



La réaction est réversible et légèrement exothermique dans le sens direct (+42 kJ · mol⁻¹) (Martinelli et al., 2020). Ainsi, le Tableau 1-3 montre comment il est possible d’augmenter (colonne de gauche) ou de diminuer (colonne de droite) le ratio H₂/CO

Tableau 1-3 Paramètres influençant le ratio H₂/CO
Extrait de Wilhelm et al. (2001)

Augmente le ratio	Diminue le ratio
Ajouter de la vapeur	Enlever le H ₂ avec une membrane
Enlever le CO ₂	Ajouter du CO ₂
Ajouter un convertisseur WGS	Recycler le CO ₂

1.4.4 Caractérisation de la production de syngas par CMP

Le procédé d’oxydation partielle du CH₄ est étudié dans ce travail. La réaction classique utilise un mélange pauvre en carburant (Speight, 2015). Cependant, le développement de la CMP a permis d’envisager des combustions riches stables pour l’oxydation partielle des hydrocarbures (Drayton et al., 1998). L’idée est d’utiliser le caractère super-adiabatique de la CMP lors de la combustion très riche en carburant pour faciliter le craquage thermique et l’oxydation partielle (Dai et al., 2021; Drayton et al., 1998; J. Shi et al., 2022; Sun et al., 2013; Toledo et al., 2009). Les principaux paramètres étudiés concernent le carburant ou mélange de carburants, la richesse du mélange ainsi que la géométrie du milieu poreux lui-même. Ainsi parmi les différents carburants qui ont été testés pour produire des syngas, on compte le

méthane (Dai et al., 2021), le propane, le butane, et le gazole (Toledo et al., 2016) ainsi que l'octane, le méthanol et l'essence (Pedersen-Mjaanes et al., 2005). Pour caractériser la production de syngas, l'efficacité de conversion (1.15) est définie et s'appuie sur le pouvoir calorifique inférieur ou LHV (*Lower Heating Value*) du syngas produit et celui du carburant initial (Shi et al., 2020a).

$$\eta_{\text{carburant-syngas}} = \frac{\dot{y}_{H_2} LHV_{H_2} + \dot{y}_{CO} LHV_{CO}}{\dot{y}_{\text{carburant}} LHV_{\text{carburant}}} \quad (1.15)$$

avec \dot{y} la fraction massique. Cette caractérisation du processus de production de syngas est fréquemment utilisée. Ainsi, Dai et al., (2021) ont testé des mélanges méthane-air avec une richesse comprise entre 1.5 et 3.5 dans un brûleur à deux étages avec des billes en alumine. Ils ont obtenu une efficacité de conversion maximale de 45.9% pour une richesse de 2. Pedersen-Mjaanes et al., 2005 ont également obtenu une efficacité maximale de 45% pour le méthane avec une richesse de 2 dans une configuration similaire. Cependant, l'efficacité de conversion maximale s'est avérée être dépendante de la nature du carburant sachant qu'une valeur de 36% a été obtenue pour l'isooctane, à titre d'exemple, pour une richesse de 1.5. Plusieurs géométries de brûleurs poreux ont également été étudiées avec principalement des mousses céramiques ou des billes. Pedersen-Mjaanes et al. ont montré que la limite d'inflammabilité supérieure pour le méthanol passait d'une richesse maximale de 4, pour la flamme libre, à 6 avec une mousse en alumine et même à 9 pour des billes en alumine. De même pour le méthane dont la richesse maximale est de 1.64 pour une flamme libre, Pedersen-Mjaanes et al. ont réussi à repousser cette richesse à 1.9 avec la mousse en alumine. Cette limite riche du méthane a été repoussée davantage par Loukou et al., 2012 qui ont pu opérer une combustion jusqu'à une richesse de 2.9. Ils ont également mis en avant que les propriétés de conduction de la chaleur influent sur les limites d'inflammabilité et sur le rendement de conversion.

1.5 Synthèse de la revue et formulation de la problématique

Depuis les années 1990, le développement des matériaux poreux et de leurs applications en combustion a fait l'objet de nombreuses études. La compréhension des phénomènes physiques

a été rendue possible par des observations expérimentales ou des simulations numériques qui mettent en avant les paramètres importants et le comportement des écoulements aux échelles macroscopique et microscopique. Initialement les milieux poreux étaient principalement des assemblages de billes ou des mousses irrégulières et anisotropes ce qui rendait leur caractérisation complexe. Néanmoins, avec le développement des techniques de fabrication additive, il est désormais possible de fabriquer des milieux sur mesure. De plus, il existe une gamme de matériaux candidats principalement métalliques et céramiques utilisables dans ces conditions extrêmes. Les premiers modèles numériques étaient souvent des modèles 1D et 2D en raison de la complexité des géométries mises en jeu. Petit à petit, des modèles 3D sont apparus permettant la simulation directe des phénomènes d'intérêt au niveau des pores permettant de modéliser fidèlement les phénomènes ayant lieu dans le brûleur.

Il existe plusieurs techniques de production de syngas comme le reformage, l'oxydation partielle et la gazéification. La CMP a de nombreuses applications, dont la possibilité de produire des syngas par combustion riche (oxydation partielle). Ce processus est rendu possible par les propriétés super-adiabatiques de la CMP, qui permet d'utiliser un mélange air-carburant plus riche que dans un brûleur classique. Comme la CMP de mélange riche afin d'obtenir des syngas en utilisant des milieux poreux structurés (tels qu'obtenus par impression) est absente dans la littérature, il apparaît donc important d'étudier l'influence de la géométrie du brûleur sur les propriétés des syngas obtenus. Ainsi, l'objectif de cette étude est de modéliser la production de syngas à partir de méthane et de comparer différentes géométries de brûleur, pouvant être obtenues par impression 3D, pour mettre en avant les principales caractéristiques opérationnelles dudit brûleur ainsi que du syngas obtenu. Pour atteindre cet objectif principal, les sous-objectifs suivants sont proposés :

- Définir un modèle CFD permettant de simuler la production de syngas à partir de méthane;
- Caractériser l'impact de la porosité et du nombre de pores sur l'opération du brûleur et les propriétés du syngas obtenu;
- Déterminer l'impact d'un milieu poreux à pores et porosité variables sur les caractéristiques opérationnelles du brûleur;

Le CHAPITRE 2 concernera la mise en place du modèle numérique qui permettra de modéliser la CMP, la conversion du méthane en syngas et d'étudier les différentes géométries considérées au sein de ce travail. Une fois le modèle numérique établi, le CHAPITRE 3 présentera le maillage utilisé dans l'étude avec sa validation. Les chapitres 2 et 3 permettront ainsi d'atteindre le premier sous-objectif de ce mémoire. Enfin le CHAPITRE 4 présentera les résultats obtenus sous la forme d'un article scientifique en lien avec les sous-objectifs 2 et 3.

CHAPITRE 2

ÉTUDE PRÉLIMINAIRE ET MODÈLE NUMÉRIQUE

Les détails du modèle numérique ainsi que la description de la géométrie sont présentés dans ce chapitre. Préalablement à l'étude de la combustion en milieu poreux qui sera abordée dans les chapitres suivants, une étude d'écoulement « froid » sera conduite pour mettre en avant les paramètres géométriques importants et afin de vérifier la validité du maillage mise en œuvre.

2.1 Motivation

Dans le cadre d'écoulements en milieu poreux, la complexité de la géométrie en présence perturbe l'écoulement des fluides. Les équations de Navier-Stokes qui régissent l'écoulement requièrent des méthodes numériques approchées pour être résolues. Cette difficulté pour résoudre les équations de la mécanique des fluides rend l'utilisation d'ordinateurs indispensables. Le développement des supercalculateurs permet d'obtenir une puissance de calcul capable d'obtenir des solutions numériques approchées précises en un temps acceptable. Dans le cadre des simulations numériques de ce mémoire, le logiciel utilise la méthode des volumes finis. Ce chapitre permet de mettre en place le modèle numérique utilisé dans ce travail. Cette approche est inspirée des travaux de Billerot (2019).

2.2 Équations fondamentales de la dynamique des fluides : Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes régissent le comportement du fluide. Les différentes équations sont dérivées des lois de conservation. Elles traduisent le comportement d'un fluide newtonien instationnaire et compressible en trois dimensions, avec les équations suivantes (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021).

Équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla (\rho_f \underline{v}) = 0 \quad (2.1)$$

Équation de bilan de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial (\rho_f \underline{v})}{\partial t} + \nabla \rho_f (\underline{v} \otimes \underline{v}) = -\nabla (P \underline{I}) + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (2.2)$$

avec \underline{v} le vecteur vitesse, ρ_f la masse volumique du fluide, P la pression, τ le tenseur des contraintes visqueuses. Pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes s'exprime en fonction du taux de déformation. Une première simplification peut être faite en considérant l'écoulement incompressible, car la vitesse de l'écoulement laminaire est faible (nombre de Mach faible) dans le cas qui nous concerne. Le tenseur des contraintes devient alors (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021) :

$$\underline{\underline{\tau}} = 2\mu \underline{\underline{D}} \quad (2.3)$$

avec :

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} \left((\nabla \underline{v}) + (\nabla \underline{v})^T \right) \quad (2.4)$$

2.2.1 Principe de résolution : Méthode des volumes finis

Pour obtenir des solutions numériques approchées, la méthode des volumes finis est utilisée dans ce travail. Le principe des méthodes numériques est d'obtenir un système d'équations algébriques fermées. Cela implique de discrétiser les équations de façon spatiale et temporelle afin de les résoudre. Dans la méthode des volumes finis utilisée par le logiciel Star-CCM+, les équations générales sont intégrées sur les différents volumes. Pour toute grandeur scalaire τ quelconque, on a l'équation (2.5) ci-dessous :

$$\begin{array}{|c|} \hline \frac{d}{dt} \int_V \rho \tau dV \\ \hline \text{Terme} \\ \text{transitoire :} \\ \text{Taux de} \\ \text{changement} \\ \text{de } \tau \text{ dans le} \\ \text{volume} \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|} \hline \int_S \rho v \tau ds \\ \hline \text{Terme de} \\ \text{convection :} \\ \text{Taux de} \\ \text{variation de } \tau \\ \text{qui traverse} \\ \text{les parois par} \\ \text{convection} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \int_A \Gamma \nabla \tau da \\ \hline \text{Terme de} \\ \text{diffusion :} \\ \text{Taux de} \\ \text{variation de } \tau \\ \text{qui traverse} \\ \text{les parois par} \\ \text{diffusion} \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|} \hline \int_V S_\tau dV \\ \hline \text{Terme de création :} \\ \text{Génération/Destruction} \\ \text{de } \tau \text{ dans le volume de} \\ \text{contrôle} \\ \hline \end{array} \quad (2.5)$$

La résolution des différentes équations nécessite d'exprimer les dérivées partielles en temps ou en espace en fonction de valeurs connues à certains points. Il existe plusieurs schémas possibles en fonction des applications. De plus, chaque schéma est associé à un ordre (nombre entier positif non nul) de précision. Plus l'ordre est grand, plus l'erreur numérique diminue, mais plus le temps de calcul augmente.

2.2.2 Discrétisation temporelle

Pour le cas de la discrétisation temporelle, il existe deux grandes familles de schémas numériques : explicite ou implicite. On définit dans tous les cas une subdivision du temps avec un pas de temps Δt . Le choix du pas de temps est important pour la modélisation. Le pas de temps peut être variable, mais cela diminue l'ordre du schéma et par conséquent la précision (Malalasekera & Versteeg, 2007). Le calcul de la grandeur A à l'instant $n + 1$ se fait connaissant les variables à l'instant n (en connaissant le présent) pour le cas explicite, et $n + 1$ (en connaissant le futur) dans le cas implicite. La méthode de résolution diffère entre les deux cas, il s'agit en général d'une matrice à inverser. Néanmoins, dans le cas explicite, le critère Courant–Friedrichs–Lewy (CFL), défini de la manière suivante : $C = v \Delta t / \Delta x$ où Δx est le pas d'espace, permet de définir une limite. En effet, lorsque le nombre CFL dépasse 1, la stabilité n'est plus assurée (Russell, 1989). A contrario, le cas implicite est

inconditionnellement stable, c'est pourquoi il est préféré dans cette étude. La matrice à résoudre est alors tridiagonale, ce qui demande plus de puissance de calcul que dans le cas explicite avec une matrice diagonale (Malalasekera & Versteeg, 2007).

2.2.2.1 Terme transitoire

Pour la discrétisation du terme transitoire des équations générales de transport, un schéma temporel d'ordre 2 est privilégié pour la précision en diminuant les erreurs de troncature (Malalasekera & Versteeg, 2007). Le calcul de la solution à l'instant $n + 1$, nécessite la connaissance des instants n et $n - 1$ suivant la méthode BDF2 (Backward Differentiation Formula 2) représentée par l'équation (2.6) (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021).

$$\frac{d}{dt}(\rho\tau v) = \left(\frac{3}{2}(\rho\tau v)_{n+1} - 2(\rho\tau v)_n + \frac{1}{2}(\rho\tau v)_{n-1} \right) \frac{1}{\Delta t} \quad (2.6)$$

Le choix du pas de temps est un paramètre important pour l'étude numérique. La modélisation de la combustion en milieu poreux fait intervenir différents phénomènes physiques avec des temps caractéristiques différents. L'échelle de temps pour les équations de mélange est environ de 10^{-3} à 10^{-4} s, alors qu'on atteint des temps caractéristiques inférieurs pour certaines réactions chimiques comme par exemple le temps de demi-vie d'un radical hydroxyle qui est de 10^{-9} s (Villamena, 2017).

2.2.3 Discrétisation spatiale

Comme pour la discrétisation temporelle, un schéma d'ordre 2 est utilisé. Pour garantir la précision, il est impératif que le centre de chaque face soit le barycentre de celle-ci et que le centre de la cellule soit le centre géométrique. L'équation de transport généralisé (2.5) présente deux types d'intégrales : volumique et surfacique. Leurs méthodes de résolution sont différentes.

2.2.3.1 Intégrale volumique : Terme source et instationnaire

Pour calculer le terme source, le logiciel Star-CCM+ fait l'approximation que la valeur du terme source est constante et égale à la valeur moyenne au centre de la cellule. Le calcul de l'intégrale revient donc à faire le produit entre la valeur moyenne au centre de la cellule et le volume de cette dernière.

$$\int_V S_\tau dV = S_{\tau_0} V_0 \varepsilon = \frac{V_{vide}}{V_{total}} = \frac{V_{vide}}{V_{solide} + V_{vide}} \quad (2.7)$$

Dans le terme instationnaire, le calcul de l'intégrale est réalisé en premier avant de passer par le schéma temporel. Ainsi $S_\tau = \rho \tau$ dans l'Équation (2.5) pour calculer l'intégrale du terme instationnaire.

2.2.3.2 Intégrale surfacique : Terme conductif et convectif

Star-CCM+ utilise des approximations quadratiques pour calculer les intégrales de surface (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). En premier lieu, un schéma centré est utilisé. Pour chaque face, le produit entre la surface de la cellule et la valeur au centre est calculé. Or, ces valeurs sont souvent inconnues, mais peuvent être approximées par interpolations. L'intégrale correspond alors à la somme sur les différentes faces, telle qu'exprimée par l'Équation (2.8).

$$\int_S J_\tau dA = \sum_{faces} J_f^\tau a_f \quad (2.8)$$

Terme convectif

Le flux convectif d'une grandeur scalaire A à travers une face S de normale \underline{n} peut s'exprimer à l'aide de l'Équation (2.9) en fonction du débit massique de la surface.

$$(\tau \rho \underline{v} \cdot \underline{n})_f = \dot{m}_f \tau_f \quad (2.9)$$

Plusieurs schémas d'ordre différents sont alors possibles en fonction des besoins. Parmi les différents schémas proposés par le logiciel, le plus simple est le décentré avant d'ordre 1 (Upwind) qui présente l'avantage d'être particulièrement robuste, mais peu précis. Il n'est recommandé qu'en première approximation (Star-CCM+). Le logiciel propose plusieurs schémas d'ordre 2 alors que le schéma décentré avant d'ordre 2 (Upwind) est utilisé dans ce travail, car les autres schémas d'ordre 2 sont à privilégier pour des cas turbulents (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). Le principe est identique au schéma du premier ordre, mais il induit cependant moins de dissipation numérique. Il est formulé (Équation (2.10)) de la manière suivante (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021):

$$\dot{m}_0 \phi_0 = \begin{cases} \dot{m}_f \tau_{f,0} & s_i \dot{m}_f \geq 0 \\ \dot{m}_f \tau_{f,1} & s_i \dot{m}_f < 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

Concernant les valeurs de $\tau_{f,0}$ et $\tau_{f,1}$, celles-ci sont obtenues par interpolation linéaire en fonction des valeurs aux centres des cellules (barycentre des cellules x_0 et x_1) de part et d'autre de la surface considérée ainsi que du gradient :

$$\begin{aligned} \tau_{f,0} &= \tau_0 + (x_f - x_0)(\nabla \tau)_{r,0} \\ \tau_{f,1} &= \tau_0 + (x_f - x_1)(\nabla \tau)_{r,1} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Terme diffusif

Pour le terme de diffusivité $(\Gamma \nabla \tau \cdot \underline{n})_f$ avec Γ la diffusivité de la surface, Star-CCM+ utilise un schéma d'ordre 2. Le calcul se fait en fonction des valeurs τ_0 et τ_1 des cellules situées de chaque côté de la surface et avec $\nabla \tau_0$, le gradient de la grandeur scalaire τ_0 comme illustré au sein de l'Équation (2.12) :

$$\Delta \tau_f = (\tau_1 - \tau_2) \underline{n} + \left(\frac{\nabla \tau_0 + \nabla \tau_1}{2} \right) - \frac{\nabla \tau_0 + \nabla \tau_1}{2} (\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \underline{n} \quad (2.12)$$

Algorithme de résolution

Deux grandes familles de solveur pour résoudre les équations sont proposées dans le logiciel utilisé : couplée (coupled) ou non (segregated). Dans le premier cas, les différentes équations sont résolues en même temps sous la forme d'un vecteur d'équations. La précision est donc plus importante, mais en contrepartie, le temps de calcul augmente et la stabilité diminue. Le solveur couplé est indiqué dans le cas de vitesses élevées avec un nombre de Mach élevé (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). L'autre approche consiste à résoudre les équations les unes à la suite des autres. Deux algorithmes sont proposés par le logiciel : PISO et SIMPLE. L'algorithme SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation) procède par prédiction-correction. Il s'agit d'une méthode itérative. Une première estimation des grandeurs : vitesse v^* et débit massique \dot{m}_f^* permet de résoudre l'équation de correction de la pression p' à partir des conditions aux limites. Après correction de la pression, le nouveau débit massique \dot{m}_f' ainsi que le nouveau champ de vitesse v' sont calculés. Une correction est alors apportée sur la valeur estimée puis réinjectée dans les équations. L'itération s'arrête lorsqu'il y a convergence. Dans ce processus, une grandeur scalaire τ est décomposée en une valeur estimée τ' et une correction τ^* de sorte que : $\tau = \tau' + \tau^*$. Le principe de l'algorithme PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) est très proche. Néanmoins sa précision diminue lorsque les pas de temps deviennent grands ou lorsque le régime permanent est atteint (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). C'est pourquoi l'algorithme SIMPLE est préféré dans ce mémoire sachant qu'il est également utilisé dans la littérature (Dong et al., 2022; H. Liu et al., 2010; Y. Liu et al., 2016; Shi et al., 2021).

2.3 Modèles liés à la combustion en milieu poreux

En plus des équations déjà explicitées (équations de Navier-Stokes, équation de transport, schéma de discrétisation), d'autres équations sont nécessaires pour modéliser la combustion en milieu poreux. Il faut prendre en compte deux aspects liés à la CMP : les réactions chimiques de combustion et le transport des espèces chimiques ainsi que la conservation de l'énergie et les transferts de chaleur dans les deux phases. Pour simplifier la modélisation chimique,

plusieurs hypothèses communes en CMP seront faites (Abdul Mujeebu, 2016; Billerot, 2018; Viskanta, 2011).

2.3.1 Transport des espèces chimiques

Cette étude vise à modéliser la combustion d'une flamme laminaire prémélangée. Dans le cadre d'une combustion laminaire dans un brûleur, le modèle de transport des espèces chimiques (*Reacting Species Transport*) apparaît comme le meilleur candidat. L'autre modèle principal (*Flamelet*) est plutôt indiqué pour le cas d'écoulements turbulents ou avec des flammes de diffusion (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). Le mélange gazeux est constitué d'un grand nombre d'espèces en quantités variables (les espèces pouvant être consommées dans des réactions). L'évolution de chaque espèce, k , est contrôlée par l'équation de transport (2.13) (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f Y_k) + \nabla \cdot (\rho_f Y_k \underline{u}) = \nabla \cdot \underline{J}_k + \dot{\omega}_k W_k \quad (2.13)$$

avec Y_k et W_k qui représentent respectivement la fraction et la masse molaire de l'espèce k tandis que le flux diffusif \underline{J}_k est obtenu à partir de la loi de Fick en fonction de la diffusivité moléculaire $D_{k,m}$ de l'espèce k dans le mélange (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021):

$$\underline{J}_k = \rho_f D_{k,m} \nabla Y_k \quad (2.14)$$

Cette approche prend en compte la diffusion moléculaire alors que la diffusion thermique ou l'effet Soret (transport diffusif lié aux différences de température) est négligé (Hashemi & Hashemi, 2017). La diffusivité moléculaire $D_{k,m}$, repose sur le coefficient de diffusion binaire $D_{k,j}$ entre deux espèces k et j ainsi que sur les fractions molaires des espèces Y_i tel qu'exprimé au sein de l'Équation (2.15).

$$D_{k,m} = \frac{1 - Y_m}{\sum_{i=1, i \neq k}^n \frac{Y_i}{D_{h,j}}} \quad (2.15)$$

La théorie cinétique des gaz et le modèle de Chapman-Enskog sont utilisés pour déterminer le coefficient de diffusion binaire (Équation (2.16)).

$$D_{k,j} = \frac{2,66 \times 10^{-7} T^{3/2}}{P \left(\frac{2W_k W_j}{W_k + W_j} \right)^{1/2} \sigma_{k,j}^2 \Omega \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_{k,j}} \right)} \quad (2.16)$$

où $\sigma_{k,j}$ est la longueur caractéristique de Lennard-Jones qui représente le diamètre de collision entre une paire de particules k et j ; P représente la pression, Ω est une fonction de la température permettant de calculer les collisions entre les espèces, k_B correspond à la constante de Boltzmann tandis que $\varepsilon_{k,j}$ représente l'énergie caractéristique de Lennard-Jones pour le couple d'espèces.

2.3.2 Modélisation des réactions de combustion

Après avoir déterminé le modèle de transport des espèces, le modèle de chimie complexe est utilisé, car il permet de faire appel à une cinétique chimique détaillée. Malgré son coût de calcul un peu plus élevé que d'autres modèles, cette approche s'adapte bien au régime laminaire (Billerot et al., 2020; *Simcenter STAR-CCM+*, 2021). La combustion du mélange air-méthane utilisé dans cette étude repose sur un mécanisme complet : GRI-Mech 1.2 avec 32 espèces et 177 réactions (Frenklach et al., 1995).

Chaque espèce chimique a un taux de réaction chimique $\dot{\omega}_k$ associé pour traduire son évolution (création ou consommation des espèces). Le taux dépend de toutes les réactions faisant intervenir l'espèce h et des concentrations de toutes les espèces impliquées dans les réactions comme illustré dans l'Équation (2.17).

$$\dot{\omega}_h = \frac{\partial[X_h]}{\partial t} = k_{fh} \prod_{i, \text{réactifs}} [A_i]^{\nu_r} - k_{bh} \prod_{i, \text{produit}} [A_i]^{\nu_p} \quad (2.17)$$

Cela fait intervenir les coefficients stœchiométriques de réaction ν_r pour les réactifs et ν_p pour les produits ainsi que les constantes de réaction k_f (*forward*, dans le sens direct) et k_b (*backward*, dans le sens inverse), du fait du caractère réversible des réactions. Les constantes de réaction k sont déterminées avec la loi d'Arrhenius (Équation (2.18)):

$$k = AT^\beta \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (2.18)$$

Les différents coefficients de cette loi sont : le facteur préexponentiel A (1/s, cm³/mol/s ou cm⁶/mol²/s en fonction de l'ordre de la réaction), l'énergie d'activation E_a (cal/mol/K), β le facteur de température et R est la constante des gaz parfaits.

2.3.2.1 Conservation de l'énergie dans la phase solide

Les transferts de chaleur dans le fluide et le solide et entre les deux phases jouent un rôle primordial dans la compréhension de la CMP. Les deux phases sont considérées comme étant en non-équilibre thermique local (Talukdar et al., 2004). La conservation de l'énergie repose sur un modèle à deux équations, une pour chacune des phases. La conservation de l'énergie pour la phase solide est gouvernée par l'équation (2.19) (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s C p_s T_s) = \nabla(k_s \nabla T_s) + h_{conv}(T_f - T_s) + \nabla \underline{\dot{q}_{rad}} \quad (2.19)$$

où les propriétés thermophysiques ρ_s , $C p_s$, k_s représentent respectivement, la masse volumique, la chaleur spécifique et la conductivité thermique de la matrice solide. Ces propriétés sont considérées constantes. Cette hypothèse forte est considérée par plusieurs études numériques (Barra et al., 2003; Hsu et al., 1993; Y. Liu et al., 2016) afin de diminuer le coût des calculs et en raison de l'absence de données sur les plages de températures rencontrées lors des CMP. Les valeurs utilisées sont présentées dans le Tableau 2-1.

Les transferts thermiques dans le solide ont lieu par conduction ($\nabla(k_s \nabla T_s)$) et rayonnement ($\nabla \dot{q}_{rad}$) solide-solide. Le terme ($h_{conv}(T_f - T_s)$) permet de faire le couplage entre le solide et la phase gazeuse (*conjugated heat transfer*) (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). Le flux radiatif $\overrightarrow{q_{rad}}$ est calculée en fonction de l'intensité radiative $I_\lambda(s)$ qui est intégré sur toutes les longueurs d'onde λ et toutes les directions s (angle solide) à l'aide de l'Équation (2.20):

$$\underline{\dot{q}_{rad}} = \int_0^{+\infty} \left(\int_{4\pi} I_\lambda(n) n d\Omega \right) d\lambda \quad (2.20)$$

La divergence du terme radiatif permet de coupler l'énergie du milieu solide et le champ radiatif du milieu solide (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021) :

$$\nabla \underline{\dot{q}_{rad}} = \int_0^{+\infty} \alpha_\lambda \left[4\pi I_{b\lambda} - \int_{4\pi} I_\lambda(\Omega) d\Omega \right] d\lambda \quad (2.21)$$

où α_λ est le coefficient d'absorption et $I_{b\lambda}$ est l'intensité spectrale d'un corps noir pour une longueur d'onde λ . Le calcul de $I_{b\lambda}$ utilise la loi de Planck représentée par l'Équation (2.22) :

$$I_{b\lambda} = \frac{2G_1}{\lambda^5 (e^{G_2/\lambda T} - 1)} \quad (2.22)$$

avec les constantes $G_1 = 0.595522 \times 10^{-16} \text{ W.m}^2/\text{s}$ et $G_2 = 0.01439 \text{ m.K}$. I_λ est l'intensité radiative à la longueur d'onde λ . Cette intensité varie dans le milieu radiatif en raison de phénomènes d'absorption et de diffusion. Pour une direction Ω , l'équation de transport radiative est :

$$\frac{dI_\lambda}{dt} = \alpha_\lambda I_{b\lambda} + (\alpha_\lambda + \delta_\lambda) I_\lambda + \frac{\delta_\lambda}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\Omega) d\Omega \quad (2.23)$$

Les coefficients optiques α_λ (absorption) et δ_λ (diffusion) permettent de représenter le comportement du solide pour une longueur d'onde donnée. Une hypothèse couramment employée dans la CMP (Billerot et al., 2020; Hayashi et al., 2004; Liu et al., 2010; Liu et al., 2016) consiste à prendre le milieu solide comme un corps gris. Les coefficients optiques ont des valeurs constantes, peu importe la longueur d'onde. La matrice solide agit alors comme un milieu gris homogène capable d'absorber et de diffuser les radiations (Howell et al., 1996). La discrétisation de l'équation de transport radiatif ainsi que sa résolution utilise la méthode *Discrete Ordinates Method* (Malalasekera & Versteeg, 2007). Elle permet le calcul de l'intensité radiative dans une direction s , fixe, déterminée par son angle solide Ω . Un schéma de quadrature permet le découpage de l'hémisphère en un nombre fini d'angles solides. L'ordre du schéma de discrétisation N et le nombre de directions n sont liés par la relation suivante : $n = N(N + 2)$. Le schéma retenu pour l'étude est d'ordre 4, ce qui fait 24 directions. Pour chaque direction i l'équation (2.23) devient alors l'Équation (2.24):

$$s_i \cdot \nabla I_i = \alpha I_i - \beta I_i + \frac{\delta}{4\pi} \sum_{j=1}^n w_j I_j \quad (2.24)$$

où les coefficients w_j sont des pondérations dépendant du schéma de quadrature. Les données optiques de la matrice solide sont indiquées dans le Tableau 2-1. Le matériau choisi pour la matrice solide est le carbure de silicium. Son application en CMP est liée à ses bonnes résistances physique et thermique dans des conditions de hautes températures. Le carbure de silicium présente également l'avantage d'avoir une conductivité thermique élevée, une émissivité élevée pour diffuser facilement la chaleur, mais également une très faible dilatation thermique permettant de résister aux chocs et à la fatigue (Wood & Harris, 2008). Les propriétés thermophysiques correspondantes sont fournies par le fournisseur du matériau (EngiCer).

Tableau 2-1 Propriétés physiques, thermiques et optiques de la matrice céramique SiSiC
EngiCer et Hashemi & Hashemi (2017)

Propriété	Valeur	Unité
Densité ρ	2900	kg/m ³
Chaleur spécifique C_{ps}	1100	J/kg/K
Conductivité thermique k_s	18	W/m/K
Coefficient d'absorption α	28	1/m
Coefficient de diffusion δ	66	1/m
Émissivité ε	0.9	-

2.3.2.2 Conservation de l'énergie dans la phase gazeuse

Le mélange gazeux s'écoulant à travers le milieu poreux est considéré comme un gaz incompressible et idéal. L'équation des gaz parfaits pour un mélange de N espèces gazeuses k s'écrit à l'aide de l'Équation (2.25):

$$\rho_f = \frac{P}{RT_f} \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{Y_k}{W_k}} \quad (2.25)$$

avec Y_k et W_k la fraction massique et la masse molaire de chaque espèce k . La conservation de l'énergie dans la phase gazeuse s'écrit sous forme d'équation de transport (2.26) (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f C_{p_f} T_f) + \nabla(\rho_f C_{p_f} T_f v) + Q_{ch} = -h_{conv}(T_f - T_s) - \nabla(k_f \nabla T_f) \quad (2.26)$$

où k_f est la conductivité thermique du mélange gazeux et Q_{ch} représente la chaleur produite par la réaction de combustion calculée de la manière suivante :

$$Q_{ch} = \sum_k \dot{\omega}_k h_k W_k \quad (2.27)$$

avec h_k l'enthalpie molaire et $\dot{\omega}_k$ le taux de production. La chaleur spécifique (de même que la viscosité dynamique) est calculée selon une somme pondérée par la fraction massique de chaque espèce chimique (2.28).

$$Cp_f = \sum_k Y_k Cp_k \quad (2.28)$$

La conductivité thermique du gaz k_f est calculée selon la loi empirique moyenne de Mathur-Saxena en fonction des fractions massiques et des conductivités thermiques de chaque espèce (2.29) (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021).

$$k_f = \frac{1}{2} \left[\sum_k W_k k_k + \left(\sum_k \frac{W_k}{k_k} \right)^{-1} \right] \quad (2.29)$$

Les transferts par radiation dans la phase fluide sont négligés. D'une part, l'émissivité des mélanges gazeux est faible avec une valeur de 0.03 à 1800 K pour un mélange $\text{CH}_4\text{-H}_2\text{O}$, ce qui est très inférieur à celle de la matrice solide (Hsu et al., 1993). De plus, la transmittance (inverse de l'absorption) des gaz est proche de 0.9 pour la plupart des longueurs d'onde.

2.4 Géométrie, conditions initiales, conditions aux limites

Après avoir décrit les équations du modèle, cette section détaille la géométrie étudiée avec les conditions initiales et les conditions aux limites. La géométrie de la matrice solide étudiée dans ce travail est basée sur une maille en forme de diamant. Les données géométriques sont issues d'une étude de la combustion en milieu poreux pour une géométrie de maille de diamant réalisée expérimentalement par Samoilenko et al., (2019).

2.4.1 Géométrie

Dans le travail de Samoilenko et al., 2019, les auteurs ont fabriqué des brûleurs poreux avec des structures régulières ayant les mêmes propriétés que des mousses industrielles. Leurs structures en forme de maille de diamant offrent une porosité et une perméabilité équivalente à des mousses de 10 et 30 PPI. Les caractéristiques géométriques des mousses ont été obtenues, entre autres, par tomographie aux rayons X et un modèle analytique de tétrakaïdécaèdre. Les travaux de Samoilenko et al. sont la base de ce qui a été développé dans ce mémoire.

Ainsi, les différentes géométries étudiées sont toutes basées sur la maille de diamant tout en ayant différentes propriétés physiques. Les propriétés des différentes géométries sont présentées dans le Tableau 1-1. Comme ce travail s'inscrit dans une suite logique des travaux de Samoilenko et al., les brûleurs A et B sont des matrices de diamant équivalentes aux mousses réticulées de 10 et 30 PPI ayant une porosité élevée. L'influence de la porosité est obtenue en comparant le cas B au cas C. Finalement, et afin de profiter des avantages de l'impression 3D, le cas D présente une taille variable de pores entre l'entrée et la sortie du milieu poreux. Dans le contexte d'un milieu régulier, les valeurs de PPI sont plus faibles que pour le milieu non structuré. Par exemple la taille des pores de la matrice diamant équivalente à la mousse 30 PPI font 1.8 mm ce qui donne une valeur réelle de 14.1 PPI. Pour simplifier la nomenclature et éviter les confusions entre les PPI des mousses et des mailles de diamant, les différentes géométries testées ici sont étiquetées cas A à D dans le Tableau 2-2.

Tableau 2-2 Grandeurs géométriques. Cas A et B issus de
Samoilenko et al.(2019)

Cas	A (Référence)	B	C	D
PPI réelle (-)	8.2	14.1	13.4	13.4-6.9
Porosité (%)	82	86	44	86
Épaisseur des liaisons (mm)	0.95	0.69	2.2	0.69-0.88
Diamètre des pores (mm)	3.1	1.8	1.9	1.9-3.7
Diamètre des cellules (mm)	4.5	2.6	2.7	2.6-4.2
Surface spécifique (m ² /m ³)	508	865	726	793
Richesse (-)	1.5 et 2	2	2	2
Commentaire	Equivalent à une mousse 10 PPI (Samoilenko et al., 2019)	Equivalent à une mousse 30 PPI (Samoilenko et al., 2019)	Porosité deux fois plus faible que A	Taille de pores variable

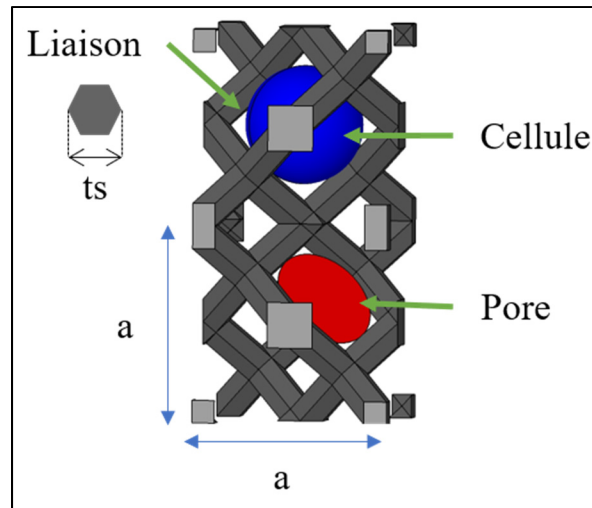


Figure 2-1 Paramètres géométriques : cellule et pore d'une matrice de type « maille diamant »

La Figure 2-1 illustre une section de la structure utilisée tout en identifiant les paramètres géométriques d'une structure unitaire. Ainsi, la figure permet d'identifier la différence entre une cellule et un pore. Pour obtenir le brûleur complet, le motif est répliqué dans les trois directions tel qu'illustré dans la Figure 2-2 qui présente un milieu poreux imprimé. Toutefois, pour simplifier le domaine de calcul et réduire le temps de calcul, une seule colonne centrale, dans la direction de l'écoulement, est modélisée en utilisant les caractéristiques de périodicités sur les côtés.

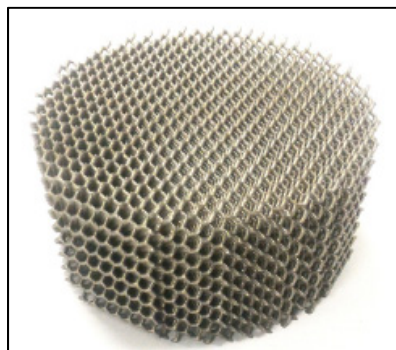


Figure 2-2 Maille diamant (10 ppi) imprimée

Le modèle 3D est réalisé en utilisant le logiciel Catia V5 à partir des données du Tableau 2-2. Pour simplifier les explications, on utilisera les mêmes termes qu'en cristallographie avec les liaisons qui relient les atomes entre eux. Tous les atomes dans la maille de diamant possèdent quatre liaisons en forme de tétraèdre (pyramide dont toutes les faces sont des triangles identiques) dont l'atome en est le centre (voir Figure 2-3, gauche). C'est donc la brique élémentaire du modèle. En positionnant les atomes, il est possible de former une maille (Figure 2-3, droite).

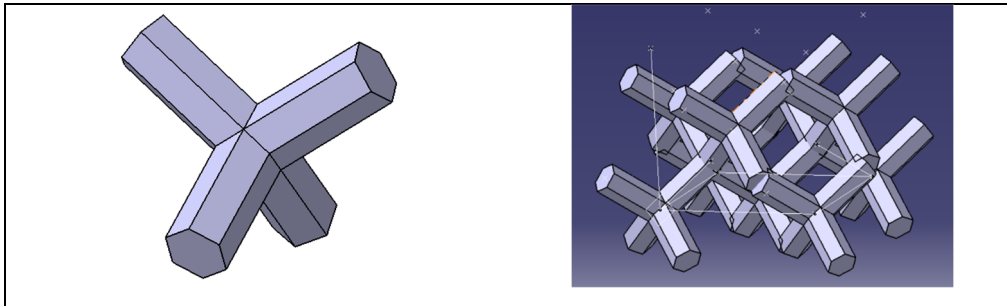


Figure 2-3 Brique élémentaire et un étage de la structure

La structure complète, telle qu'étudiée, est donc la répétition des étages de la Figure 2-3. Le résultat obtenu est ensuite importé au sein du logiciel de simulation StarCCM+, le domaine de calcul étant une colonne à base carrée pour exploiter les périodicités du problème. Le modèle 3D obtenu est composé de deux domaines (opérations booléennes) : la section du fluide par union entre la boîte et la géométrie 3D et par soustraction du domaine solide avec la boîte comme indiqué sur la Figure 2-4.

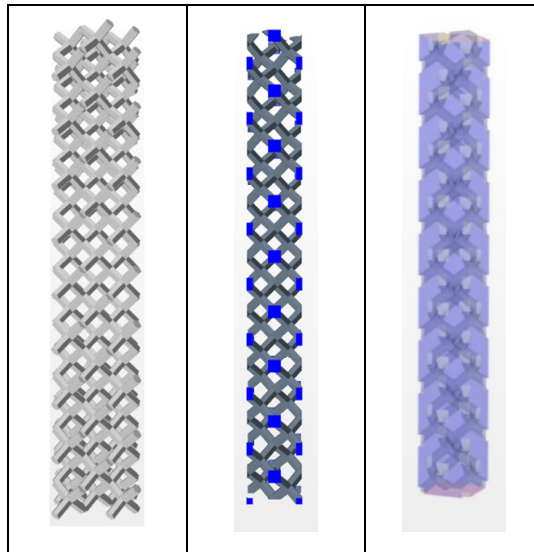


Figure 2-4 Matrice 3D CAD (gauche), milieu solide (centre) et milieu fluide (droite)

2.4.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont présentées sur la Figure 2-5. La base de la colonne est constituée d'une entrée (*velocity inlet*) par laquelle le mélange de gaz froid à 300 K pénètre avec une richesse et une vitesse imposée. Les vitesses d'entrée sont ajustées pour obtenir une flamme stable dans le brûleur. Cette vitesse est influencée par le phénomène de recirculation de la chaleur et par la géométrie du solide. En général, la vitesse d'entrée est proche de la vitesse de flamme laminaire à la richesse d'intérêt pour un brûleur à flamme libre. Or la recirculation de la chaleur de la CMP a pour effet d'augmenter la température des gaz frais par effet de préchauffage, ce qui a pour effet d'augmenter la vitesse de flamme laminaire ainsi que la température de flamme. Le choix de la vitesse de départ est important pour éviter les phénomènes d'extinction de flamme ou soufflage. On suppose dans un premier temps que la température des gaz frais augmentera de 300 K à 600 K, ce qui permet d'estimer une vitesse de flamme laminaire à appliquer au gaz frais en entrée du brûleur. En haut de la colonne, la sortie utilise une condition de pression (*pressure outlet*). La pression est spécifiée comme étant la pression ambiante.

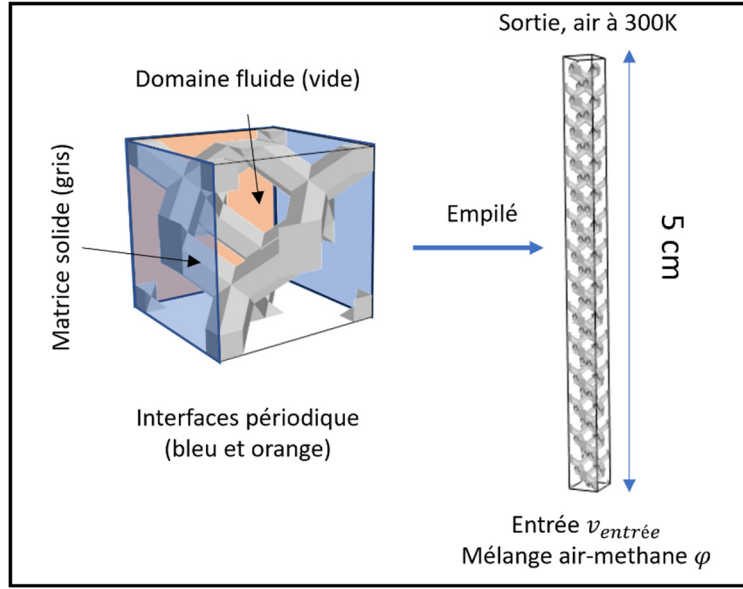


Figure 2-5 Conditions aux limites

Sur les surfaces extérieures latérales, une condition de périodicité est appliquée pour représenter un brûleur complet. La condition de périodicité est utilisée pour le fluide et le solide. Pour toute grandeur physique τ , la condition s'applique dans les deux directions perpendiculaires à l'écoulement :

$$\begin{cases} \tau(x_{max}) = \tau(x = 0) \\ \tau(y_{max}) = \tau(y = 0) \end{cases} \quad (2.30)$$

Pour le domaine solide, toutes les surfaces du domaine solide sont des parois, alors qu'aux extrémités, on permet les transferts thermiques par radiation vers l'environnement à 300 K. Les extrémités de la phase solide rayonnent (rayonnement de corps noir) avec le milieu extérieur à la température ambiante de 300 K tel que décrit par l'équation (2.31), avec σ_B , la constante de Stefan-Boltzmann.

$$k_s \nabla T|_{sortie} = -\sigma_B \varepsilon (T_{sortie}^4 - T_{ambiante}^4) \quad (2.31)$$

Enfin la surface entre le fluide et le solide est imperméable, mais une interface est ajoutée pour gérer les transferts de chaleur et une condition de non-glissement est appliquée. La conformité du maillage au niveau des surfaces externes et de l'interface fluide-solide est primordiale pour la précision de la solution (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021).

2.4.3 Conditions initiales

Le fluide est initialement au repos et à 300 K à l'intérieur de la structure poreuse. La composition du mélange gazeux est identique à celle imposée à l'entrée. La température de la matrice solide est soumise à un gradient de température soit 600 K à l'entrée jusqu'à mi-hauteur, puis 1400 K de la mi-hauteur jusqu'à la sortie pour initier la combustion, qui est l'approche utilisée également par Barra & Ellzey, (2004).

2.5 Récapitulatif des hypothèses simplificatrices

Les principales hypothèses admises dans ce modèle sont listées ci-dessous. Elles sont rencontrées dans la littérature (Abdul Mujeebu et al., 2010; Viskanta, 2011) :

- L'écoulement est laminaire, le fluide est considéré comme un gaz parfait incompressible.
- Le mélange de gaz réactifs est parfaitement prémélangé à l'entrée.
- Les propriétés thermophysiques du gaz dépendent de la température et de la concentration des espèces.
- Le rayonnement et la gravitation du gaz ont été négligés.
- La matrice solide en SiSiC est considérée comme un milieu gris, homogène et inerte avec des propriétés thermophysiques constantes.
- Le mécanisme de réaction est GRI-Mech 1.2
- Les effets Dufour et Soret sont négligés.

Ce chapitre a donc permis de présenter les équations du modèle proposé. Le chapitre qui suit permettra de valider le choix du maillage et complètera les étapes nécessaires pour atteindre le sous-objectif 1, défini à la fin du chapitre 1.

CHAPITRE 3

MISE EN PLACE ET VERIFICATION DU MAILLAGE : ÉTUDE PRÉLIMINAIRE D'UN ÉCOULEMENT FROID EN MILIEU POREUX ET VALIDATION DU MODÈLE DE CMP

3.1 Survol du chapitre

Ce chapitre porte sur le choix du maillage et la validation du modèle. Pour ce faire une première étude permet d'évaluer l'impact du maillage sur la solution obtenue dans le cas d'un écoulement à froid. Ceci permet de choisir le maillage utilisé dans la suite de ce mémoire. Une simulation avec réaction chimique est ensuite opérée afin de comparer les principales espèces obtenues avec quelques résultats de la littérature. Il est entendu que puisqu'il n'y a pas d'étude expérimentale qui utilise le même type de brûleur, cette seconde vérification porte donc sur l'ordre de grandeur des concentrations des espèces considérées.

3.2 Étude préliminaire

Une étude préliminaire d'un écoulement isotherme est réalisée. L'objectif consiste à modéliser un écoulement d'air froid à 300 K à travers la matrice solide. Cela permettra la mise en place du maillage et de caractériser le gradient de pression engendré par le milieu poreux afin de le comparer aux valeurs obtenues en utilisant des corrélations présentées dans la littérature.

3.2.1 Conditions utilisées pour l'étude de l'écoulement à froid

Le solide n'est pas modélisé pour diminuer le temps de calcul, car le problème résolu est isotherme. Pour le fluide, les conditions aux limites et initiales sont également adaptées. Le fluide modélisé est ici de l'air et aucune réaction chimique n'est prise en compte. L'écoulement est laminaire et isotherme. Au niveau de l'entrée d'air, la vitesse est spécifiée avec un profil constant à température constante de 300 K. Le fluide est initialement au repos et à 300 K à l'intérieur du brûleur poreux.

Dans cette section, l'écoulement macroscopique est étudié. En traversant le milieu poreux, la présence de la matrice solide perturbe l'écoulement par les frottements visqueux du fluide avec les parois et par les effets inertiels (Ergun & Orning, 1949). Le régime d'écoulement est identifié et le gradient de pression à travers le milieu est caractérisé et comparé à des corrélations issues de la littérature afin de valider le comportement macroscopique du modèle proposé.

Les calculs sont effectués avec le logiciel commercial STAR-CCM+. Les équations sont résolues et un critère de convergence de 10^{-5} est utilisé et strictement vérifié en particulier pour l'énergie (Shi et al., 2020). Les calculs ont été effectués sur le superordinateur Graham géré par Compute Canada.

Le choix du pas de temps est un paramètre important pour l'étude numérique. La modélisation de la combustion en milieu poreux fait intervenir différents phénomènes physiques avec des temps caractéristiques différents comme il l'a été mentionné dans le chapitre 2. Dans les études antérieures, les pas de temps utilisés pour la modélisation étaient de $8 \cdot 10^{-5}$ pour Yakovlev & Zambalov, (2019) alors qu'une valeur de 10^{-5} s a été utilisée par Billerot, (2018) avec une géométrie très similaire à celle de ce mémoire. Finalement une valeur de 10^{-6} s a été utilisée pour des calculs en DNS par Dinkov et al., (2015). Le pas de temps choisi pour cette étude est de 10^{-5} s basé sur les travaux de Billerot, (2018).

3.2.2 Choix de la discrétisation spatiale

L'idée est de développer une approche globale sur tout le domaine de calcul et de réaliser un maillage régulier (avec des mailles polyédriques), adapté pour la modélisation de la combustion, afin de diminuer le nombre total de mailles (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). Dans un premier temps un seul type de maille polyédrique est utilisée alors que pour améliorer la précision au niveau de la paroi, la taille des mailles est réduite arbitrairement par cinq. Ainsi, différentes tailles seront évaluées. Dans un second temps, l'impact d'ajouter des couches prismatiques sera évalué. La taille de ces éléments est choisie comme représentant 5% du

diamètre de la tige de la structure solide. L'écoulement est étudié avec les géométries correspondant aux cas A et B, alors qu'une vitesse identique de 10 cm/s est imposée. Le gradient de pression est estimé entre l'entrée et la sortie de la colonne.

Dans la première étape, le nombre de mailles polyédrique augmente progressivement d'environ 5×10^5 à plus de 7×10^6 cellules. La vérification du maillage porte sur le gradient de pression engendré par la géométrie. La Figure 3-1 présente l'erreur relative en fonction du nombre de mailles pour la solution obtenue avec 7.6×10^6 cellules que l'on considère proche de la solution réelle (les gradients de pression étant de 3.28 Pa/m et 14.24 Pa/m pour les cas A et B, respectivement). La figure montre que l'erreur diminue rapidement pour passer sous 1% autour de 2,3 millions de cellules (voir la courbe dont le symbole utilisé est le cercle). Dans un second temps, l'effet d'ajouter des couches prismatiques est étudié. Comme l'épaisseur des couches prismatiques est fixe, l'ajout de ce type d'élément permet d'augmenter la précision au niveau des parois, mais augmente les cellules de la matrice poreuse. Pour déterminer le nombre idéal de couches prismatiques, l'approche suivante est proposée. Trois maillages ayant respectivement un nombre total constant d'environ 10^6 cellules (maillage grossier), 2×10^6 cellules (maillage moyen) et de 3×10^6 cellules (maillage fin) sont considérés. Pour chacun de ces trois maillages, on trouve des cellules prismatiques au niveau de la surface d'échange et des cellules polyédriques partout ailleurs. Le nombre de couches prismatiques est augmenté de 1 à 10 couches (avec un facteur de croissance des couches prismatiques de 1,5), tout en diminuant le nombre de couches polyédriques. Le nombre de couches prismatiques sélectionné pour cette étude est alors celui qui présente les écarts relatifs les plus faibles avec le maillage le plus fin. À partir des résultats obtenus avec les 3 maillages de base susmentionnés, il a été observé que 8 couches prismatiques donnaient la meilleure convergence. Toutefois, afin d'avoir une meilleure représentation de la sensibilité de la taille des mailles sur la solution, le nombre de polyèdres a été varié afin de maintenir un maillage ayant un nombre total de cellules autour de 2 millions, pour des raisons de temps de calcul, tout en maintenant 8 couches prismatiques. Le résultat est illustré à la Figure 3-1 qui présente l'erreur relative en fonction du nombre de cellules avec et sans les couches prismatiques. La figure montre également que

la convergence est beaucoup plus rapide avec l'ajout de couches prismatiques, par rapport à l'utilisation unique de polyèdres.

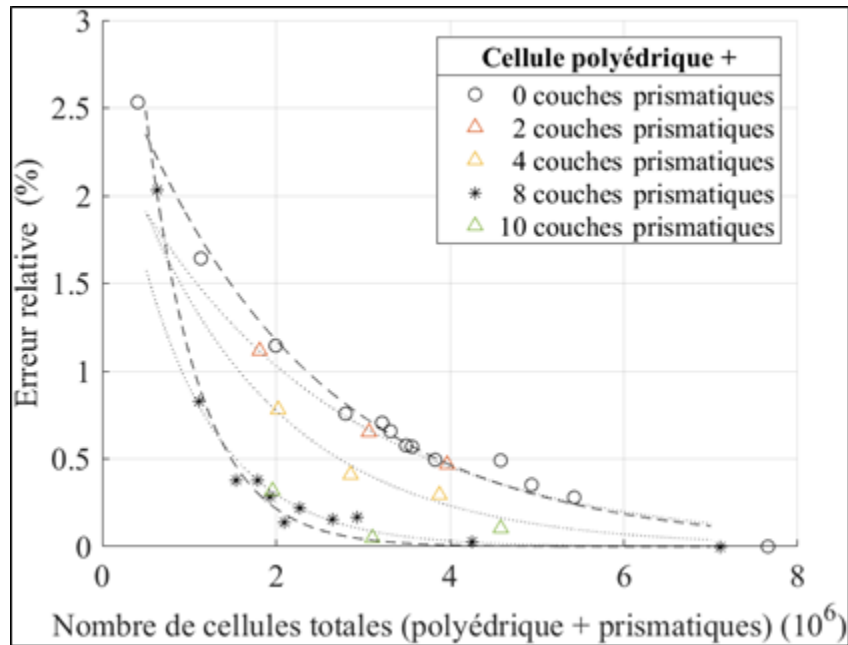


Figure 3-1 Erreur relative numérique en fonction du nombre total de mailles pour la matrice A

La même approche a été utilisée pour la géométrie B et l'ajout de 8 couches prismatiques s'est avéré être le meilleur choix. Ainsi, la taille caractéristique moyenne des cellules de fluide est respectivement de 80 μm pour le cas A et de 65 μm pour le cas B. Le maillage du domaine solide est contraint par le maillage du domaine fluide ce qui permet d'obtenir des mailles de tailles moyennes de 81 μm pour le cas A et de 68 μm pour le cas B. Les maillages des géométries C et D sont obtenus en appliquant la taille moyenne des cellules à partir des valeurs obtenues pour A et B. Ainsi la géométrie C est similaire à la géométrie A, car le volume total (colonne entière) modélisé est identique alors que la géométrie D possède une taille d'élément similaire au cas B. L'ensemble des caractéristiques des cellules est synthétisé dans le Tableau 3-1.

Tableau 3-1 Grandeurs caractéristiques des maillages

Cas	Cellules fluides (10^6)	Cellules solides (10^5)	\bar{d}_{fluide} (μm)	\bar{d}_{solide} (μm)	$d_{min,fluide}$ (μm)	$d_{max,fluide}$ (μm)
A	2.8	4.2	80	81	5	372
B	1.9	3.7	65	68	5	336
C	1.9	6.7	78	112	7	324
D	1.9	3.5	66	72	7	388

3.3 Vérification du maillage : Écoulement froid

3.3.1 Corrélations du gradient de pression

La première étape de la validation est effectuée en comparant 1) les gradients de pression obtenus avec le modèle numérique dont le maillage présente les caractéristiques décrites dans le Tableau 3-1 et 2) les gradients de pression calculés à l'aide de corrélations issues de la littérature (1.8) du CHAPITRE 1). Les résultats sont présentés dans la Figure 3-2 pour les cas A et B. La vitesse d'entrée de la colonne est ajustée afin de couvrir des plages permettant un écoulement dans le régime de Forheimer ($6 < Re_p < 65$) pour lequel les corrélations sont valides. Les corrélations nécessitent de déterminer la dimension qui caractérise les cavités de la géométrie qui diffère fortement dans le cas présent (structure de diamant contre mousse ou billes). Il est alors proposé d'utiliser le rayon des pores comme taille caractéristique. Cette définition coïncide avec le fait que le rayon d'un pore hexagonal fait la même taille que les liaisons. Comme le nombre de Reynolds mesure l'influence des obstacles sur l'écoulement, on peut considérer que le matériau est constitué d'un grillage de petits obstacles dont la taille correspond au rayon des pores. Les résultats obtenus avec les géométries A et B sont présentés sur la Figure 3-2 qui comprend également les courbes obtenues à partir des corrélations.

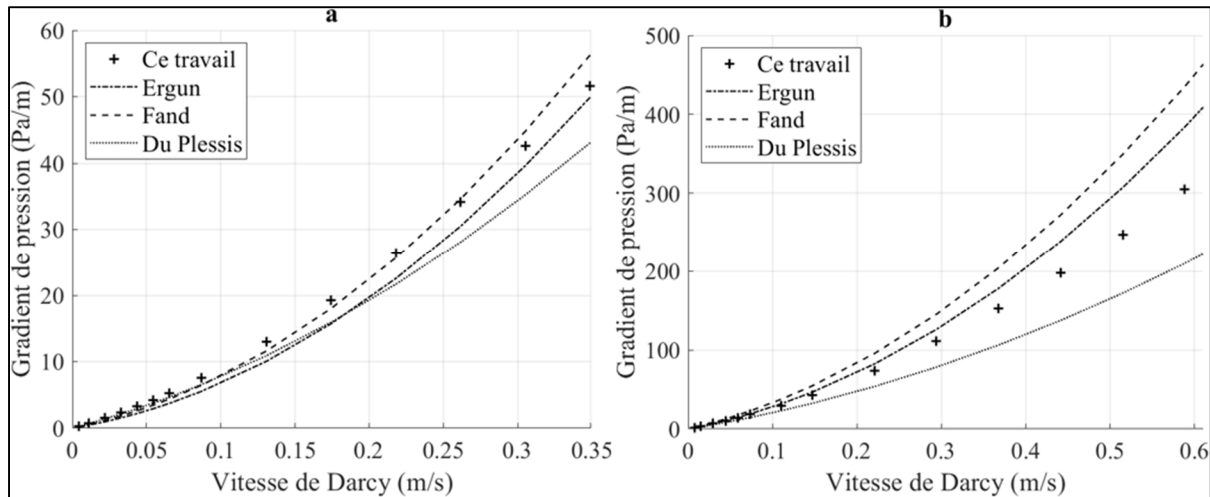


Figure 3-2 Comparaison des corrélations du gradient de pression avec le rayon de pores comme taille caractéristique. (a) Cas A; (b) Cas B

De façon générale, les résultats numériques mettent en évidence des tendances cohérentes vis-à-vis des résultats issus de l'emploi des corrélations de la littérature. La Figure 3-2 illustre le caractère non linéaire de l'équation avec une évolution quadratique du gradient de pression dans le régime de Forchheimer (Bear, 1988; Billerot, 2018; Tosco et al., 2013). Ce comportement quadratique traduit la prédominance des forces inertielles sur les effets visqueux (Bear, 1988; Billerot, 2018). Les pertes de pression sont cependant plus importantes pour le cas B, car la densité d'obstacles est plus importante même si les obstacles sont plus grands qu'avec la matrice A. Les écarts entre les différentes corrélations observées dans le cas B peuvent provenir du fait que la densité de pore n'est pas prise en compte. À la vitesse de Darcy maximale étudiée, l'écart entre les corrélations et les résultats numériques est d'environ 10 Pa/m soit 22% par rapport à la corrélation de Du Plessis pour le cas A et de 150 Pa/m soit 50% par rapport à la corrélation de Fand pour le cas B. Toutefois, le modèle numérique proposé offre une meilleure concordance avec la corrélation d'Ergun (écarts de 4% pour le cas A et de 33% pour le cas B) et ce pour les deux géométries. L'écart important qui peut être observé entre les résultats numériques et les différentes corrélations pour les vitesses de Darcy élevées peut s'expliquer par le passage dans un régime d'écoulement laminaire dit non linéaire qui pourrait nécessiter un modèle de turbulence, par exemple. Toutefois, il sera montré plus tard que lors

des calculs effectués en mode réactif (i.e., en présence de combustion), un Re_p maximal de 24 est atteint. Ceci correspond à une vitesse de 0,26 m/s sachant qu'une erreur de 10% avec la corrélation d'Ergun est alors observée comme le montre la Figure 3-2. Ainsi, le modèle est jugé comme offrant une approximation acceptable des résultats de la littérature tant en termes de tendances générales que de valeurs.

3.3.2 Corrélations adimensionnelles du gradient de pression

Pour caractériser les différents régimes d'écoulement, il est courant d'utiliser des grandeurs adimensionnées. On introduit donc le nombre de Reynolds basé sur la perméabilité Re_K , qui est définie de la manière suivante :

$$Re_K = \frac{\rho_f u_D \sqrt{\frac{K}{\varepsilon^3}}}{\mu} \quad (3.1)$$

Les corrélations adimensionnées par la perméabilité se présentent sous la forme d'équations du premier ordre :

$$\frac{dP}{dz} \frac{K}{\mu u_D} = C'_1 + C'_2 Re_K \quad (3.2)$$

Les valeurs des coefficients C'_1 et C'_2 sont indiqués dans le Tableau 3-2 pour différentes études. Chaque corrélation est associée à une plage de validité. Les résultats numériques sont ensuite comparés à ces corrélations.

Tableau 3-2 Coefficients de corrélations du gradient de pression adimensionné dans le régime de Forheimer

Étude	Coefficient C_1' (m^{-2})	Coefficient C_2' (m^{-1})	Validité
Ergun & Orning, 1949	0.83	0.19	$0,08 \leq Re_K \leq 196$
Fand et al., 1987	1.00	0.14	$0,003 \leq Re_K \leq 32$
Macdonald et al., 1979	0.93	0.19	$0,57 \leq Re_K \leq 9.0$

Les valeurs de perméabilité proviennent du travail de Samoilenko et al., 2019 dont sont issues les données géométriques des géométries à mailles de diamant. Les résultats des cas A et B sont comparés avec les corrélations de la littérature au sein de la Figure 3-3.

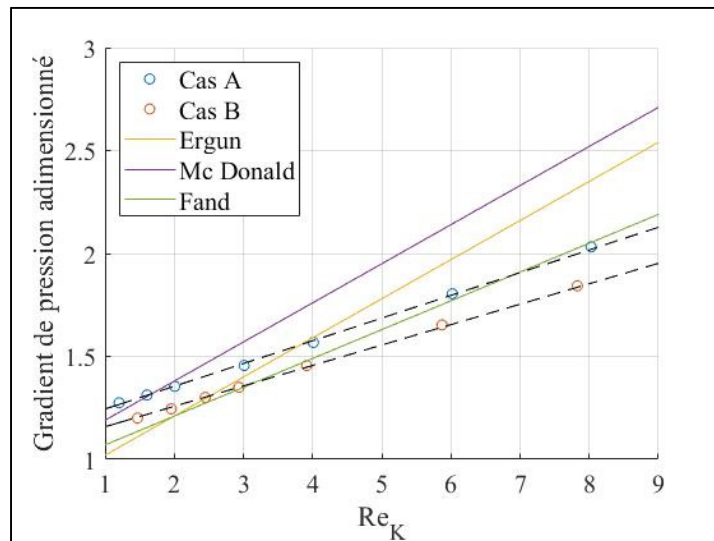


Figure 3-3 Corrélations entre le gradient de pression adimensionné par la perméabilité et le nombre de Reynolds basé sur la perméabilité

Les résultats obtenus numériquement offrent un comportement linéaire tout comme les corrélations. La corrélation de Fand et al., (1987) est celle qui concorde le mieux avec les résultats numériques malgré le fait que les milieux étudiés soient de nature différente. En effet, l'étude de Fand et al. portait sur des colonnes remplies de sables qui avaient une porosité

voisine de 0.4 (i.e., inférieure aux cas étudiés ici). Les matrices A et B sont très poreuses, ce qui signifie que l'écoulement est peu modifié par la présence du milieu solide lorsque comparé à une colonne de sable. Le gradient de pression sans dimension est plus grand dans le cas B à cause des pores plus petits qui accélèrent l'écoulement. Ainsi, les différences observées entre les résultats numériques et les corrélations proposées peuvent être attribuées, entre autres, à la nature même de la structure du milieu poreux utilisé qui diffère fortement de celles mises en œuvre pour obtenir les corrélations. Cette différence majeure de structure a également un impact sur la définition des grandeurs caractéristiques utilisées qui influence ainsi les valeurs obtenues.

Toutefois, afin d'avoir un portrait global de la performance du modèle, l'étude s'intéresse maintenant à ce qu'il se passe si on dépasse les limites de validité de la corrélation de Fand et al., (1987) afin de voir la réponse du modèle et de la comparer à ce qui est prévu dans la littérature, de façon générale. La Figure 3-4 présente les résultats uniquement pour le cas A sur une plage de Re_K plus grande. On observe que le modèle numérique prédit des ruptures de pente aux limites du régime de Forchheimer, ce qui correspond à la limite de validité de la corrélation de Fand et al. Lorsque le nombre de Reynolds diminue et devient inférieur à 1, l'écoulement se trouve être dans la zone des écoulements de Darcy. A contrario, lorsque Re_K dépasse 9, l'écoulement rentre dans une zone de transition non linéaire vers le régime turbulent. Le comportement du modèle numérique proposé se comporte donc bien comme prévu par la théorie des écoulements en milieu poreux illustré sur la Figure 1-7 (Fand et al., 1987). Comme le comportement macroscopique du modèle semble adéquat pour prédire les pertes de charge d'un écoulement à froid, la validation du modèle va se poursuivre afin d'appréhender son aptitude à prédire la nature et les concentrations des espèces chimiques dans des conditions réactives.

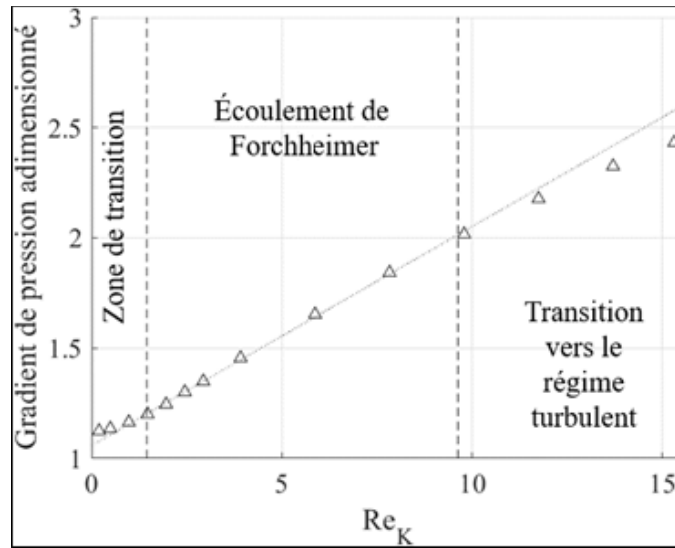


Figure 3-4 Gradient de pression adimensionné pour le cas A

3.4 Validation du maillage : Écoulement avec combustion

Le but de cette section est de vérifier que le modèle incluant la cinétique de combustion et le transfert de chaleur donne des résultats cohérents avec ceux de la littérature pour des cas similaires. Cette étape est un contrôle supplémentaire de la validité du maillage avec l'ajout de la matrice solide et de la chimie complète. Cette double méthode de contrôle permet de répondre à l'objectif de développer un modèle numérique CFD pour la production de syngas. La deuxième étape de la validation du modèle est donc réalisée sur un écoulement réactif en utilisant la chimie du méthane (GRI Mech 1.2 (Frenklach et al., 1995)) et en incluant les équations d'énergie du solide et de la phase gazeuse telles que décrites au CHAPITRE 2. L'idée est de comparer les quantités de syngas produits pour une richesse de 1.5 et une richesse de 2 avec la géométrie A et de les comparer avec la littérature. Ainsi, le modèle prédit des fractions molaires en sortie du brûleur pour la richesse de 1.5 de 8.3% pour le CO et 8.5 pour le H₂. Ces valeurs sont proches des résultats obtenus expérimentalement ou numériquement (avec un écart très faible) par Zeng et al., (2017) qui rapportaient 7.8% pour les deux espèces lors de mesures expérimentales et calculs numériques opérés pour un brûleur à deux couches en alumine (AlO₃). Ils sont également en accord avec ceux de Shi et al., (2020) qui ont rapporté des valeurs de 7.6% et 7.4% pour les fractions de CO et de H₂ lors de la modélisation 2D du

brûleur de Zeng et al., (2017). La valeur de température maximale prévue par le modèle numérique pour une richesse de 1.5 est de 1812 K. Elle atteint 1880 K environ pour Zeng et al., (2017) et 1920 K pour Shi et al., (2020) soit des erreurs relatives de 3.6% et 5.6% respectivement.

Pour le cas A à une richesse de 2, le modèle numérique prévoit des fractions de 9.4% pour le CO et 11% pour le H₂. Dai et al., (2021) ont obtenue des résultats expérimentaux et numériques similaires avec 10% pour le CO et 12 % pour le H₂ dans un brûleur à deux couches dont la section du deuxième étage était divergente. Dans ce cas la température maximale prévue par le modèle est de 1804 K contre 1641 K rapportés par (Dai et al., 2021). Cet écart de 9% par rapport aux données numériques de Dai et al. peuvent s'expliquer par la différence de débit entrant dans la colonne avec une vitesse d'entrée similaire de 15 cm/s dans les deux cas, mais un débit plus important dans le cas A en raison de la porosité plus grande.

Les fractions molaires de CO et de H₂ sont illustrées sur la Figure 3-5 pour la géométrie A, et ce pour les deux richesses étudiées. Pour la richesse de 1.5, on observe sur le plan médian un pic de CO juste au-dessus de la flamme. Ce comportement est également rapporté par Shi et al. et Zeng et al. qui expliquent qu'après ce maximum local de CO lié à des réactions exothermiques rapides qui entraînent un non-équilibre chimique, la réaction WGS est alors responsable, par réaction avec l'eau, de la réduction de cette concentration favorisant ainsi la formation d'H₂ (Shi et al., 2020) comme observé sur la Figure 3-5 de gauche. Pour la richesse de 2, il n'y a pas de pic visible et la fraction de CO varie plus graduellement. La différence de température n'est que de 8 K entre les deux richesses, mais le comportement n'est pas le même. Or, la concentration de CO₂ intervient dans la réaction WGS et dans le cas de la combustion avec une richesse de 2, la quantité de CO₂ est plus faible, car la concentration en oxygène ne permet pas l'oxydation complète du CO. La concentration de CO n'est pas assez élevée pour favoriser la réaction.

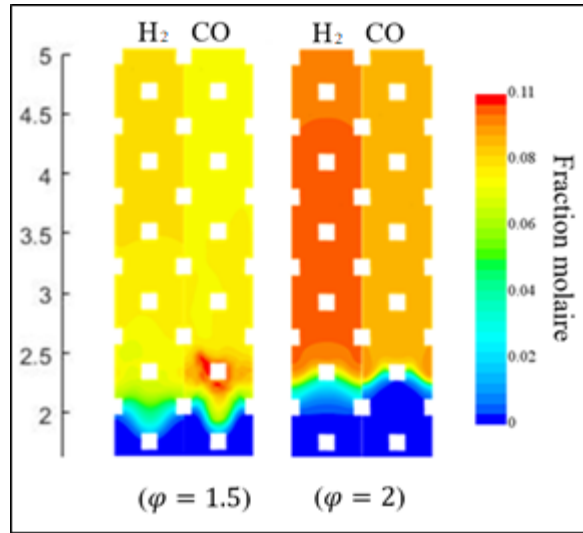


Figure 3-5 Fraction molaire de CO et de H₂ sur le plan médian du cas A pour deux richesses différentes

Les écarts observés dans ce mémoire sont conformes aux valeurs rapportées dans la littérature. Par exemple, des écarts de 5% et 3% ont été obtenus par Shi et al., (2020) lors de la comparaison de leur modèle avec des données expérimentales pour les espèces et la température maximale, respectivement. De même, Shahnazari et al., (2020) ont obtenu une différence maximale de 7% pour la température et de 12% pour la production de H₂ en sortie du brûleur. Finalement, considérant les concentrations et les températures prédites ainsi que les différences de comportement observées entre les deux richesses étudiées qui sont en accord avec la littérature, le modèle est considéré comme satisfaisant.

3.5 Bilan général de la vérification

La technique de maillage de la colonne proposée dans cette étude est une technique modulaire qui s'appuie sur la régularité de la géométrie. La première étape consistait à étudier l'effet du maillage sur un écoulement isotherme. Après identification de la discrétisation spatiale offrant un compromis par rapport au temps de calcul, différentes simulations avec différentes valeurs de Reynolds ont été comparées avec des corrélations de la littérature et provenant d'études expérimentales. Les résultats obtenus sont cohérents avec les corrélations et les résultats numériques offrent un comportement linéaire et non linéaire en fonction du nombre de

Reynolds, comme cela est attendu d'après la littérature. Dans un second temps, les données issues de simulations avec réactions chimiques et transferts de chaleur ont été comparées avec des résultats expérimentaux obtenus pour des richesses de 1.5 et 2. Les résultats relatifs aux concentrations de CO et H₂ sont en accord avec les valeurs rapportées dans certaines études expérimentales de la littérature (différence relative maximale de 8,9%). Pour la température maximale prédite, le modèle offre une différence relative maximale de 3,6% par rapport à l'expérimentation pour une richesse de 1,5. Ainsi le modèle est jugé adéquat pour prédire le comportement de brûleurs poreux à mailles de diamant et permet l'atteinte du premier sous-objectif de ce mémoire. Le modèle décrit sera utilisé dans ce qui suit. Le prochain chapitre contient le cœur du travail avec la comparaison des différentes géométries étudiées et la nouveauté apportée via l'étude d'un brûleur à densité de pores étagée.

CHAPITRE 4

NUMERICAL STUDY OF THE IMPACT OF TAILORED POROUS MEDIA DESIGN ON SYNGAS PRODUCTION FROM METHANE RICH COMBUSTION

Yann Roussel ^a, Pierre-Lou Billerot ^b, Romain Lemaire ^c, Patrice Seers ^d

^{a,b,c,d} Département de génie mécanique, École de technologie supérieure,
1100 Rue Notre-Dame Ouest, Montréal, QC, Canada, H3C 1K3

Article soumis pour publication dans « International Journal of Hydrogen Energy »
août 2022

Abstract

This numerical study investigates the impact of four proposed porous burner designs, which are based on a diamond lattice structure similar to what could be obtained with additive manufacturing technology, on H₂/CO syngas production. The performances of all the burners were compared, and the results showed that for a given porosity, the recirculation efficiency increased with increasing the pore density. Decreasing the porosity by a factor 2 increased the recirculation efficiency thanks to the presence of higher thermal inertia and local temperature, which allowed to achieve a 53% fuel conversion. Promising results were obtained with the new linearly varying pore diameter matrix, with an observed conversion efficiency of 63% and a reduction in the soot precursor production. This latter behavior itself resulted from an increase in the size of the reaction zone, where elevated temperatures led to high concentrations of H₂ and to the partial oxidation of C₂ species.

Keywords

Porous burner; Linearly varying pore diameter geometry; Syngas production; 3D modeling; Diamond lattice

Highlights

- A 3D pore-resolved CFD model of a diamond lattice-based porous burner is proposed
- A new tailored graded geometry was tested and compared to isotropic matrices
- The energy recirculation efficiency was maximized with a higher specific surface
- The methane-to-syngas conversion ratio was maximized with the graded geometry
- The graded matrix led to low levels of soot precursors due to a longer oxidation zone

4.1 Introduction

Syngas is a valuable flammable gas mixture, consisting of hydrogen (H_2) and carbon monoxide (CO), which can be used as a fuel, or as a chemical feedstock (when the H_2/CO ratio is close to unity) in the production of synthetic fuels, alcohols, etc. (Vosloo, 2001). Syngas is produced mainly from fossil fuels (methane, oil, gasoline, coal), and to a lesser extent, from biomass (Abdul Mujeebu, 2016). Syngas can notably be produced from the partial oxidation of methane under fuel-rich combustion conditions ($CH_4 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO + 2H_2$), noting that other routes, such as the dry methane reforming reaction ($CH_4 + CO_2 \rightarrow 2H_2 + 2CO$) and the water-gas shift reaction ($CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$) can play a significant role in the reforming efficiency (Zeng et al., 2017). In the presence of a catalyst, steam reforming of methane remains the most common way to generate syngas, although it is an endothermic reaction taking place at a relatively high temperature (~ 1000 K) (X. Shi et al., 2021). In the review by Abdul Mujeebu, 2016, combustion in porous media (CPM) has been identified as a promising approach which does not require a catalyst to produce syngas and H_2 . In CPM, the combustion is confined within a highly porous medium (foam, beads, etc. (Bedoya, 2016)) while some of the heat produced during this process is transferred and conducted through the solid, and preheat the incoming fuel-air mixture by heat convection. This preheat of the fluid also increases the flame temperature. As the present work proposes a numerical study of four porous media used to convert a methane-rich mixture to syngas, a short survey on methane conversion and modeling approaches is presented.

Experiments reported in the literature illustrate the diversity of porous media used to produce syngas. For example, experiments using sponge-type matrices have shown syngas production with H_2/CO ratios between 1.5 and 1.9 with methane-rich mixtures having equivalence ratios (ϕ) lying between 2.5 and 2.9 (Nourbakhsh et al., 2019, 2020). Another approach used stacked pellets or beads to obtain a porous medium. This approach was used by Dai et al. (2021) to create a divergent packed burner aimed at decreasing the velocity of the gas for a greater flame stability. From the authors' numerical parametric study, a ϕ of 2 was shown to offer a higher methane-to- H_2/CO energy conversion efficiency. Fay et al. (2005) experimentally compared a packed bed to a reticulated porous ceramic burner and with the latter, observed a significant increase in the methane-to-hydrogen conversion rate. They suggested that this higher conversion rate could be attributable to the higher interstitial velocity and temperature obtained with a reticulated ceramic. Irrespective of the nature of the porous medium used, other experimental studies from the literature have found consistent results, with the methane reforming efficiency maximized at an equivalence ratio close to 2 (Loukou et al., 2017; Shahnazari et al., 2020; Y. Wang et al., 2018).

While different methods can be used to simulate CPM, and to some extent, syngas production, many recent studies have used one of two modeling approaches. The first approach is the volume-averaged method (VAM), which is often used in the literature, based on the survey of Mujeebu et al. (2010). With this technique, the porous burner is defined based on its main characteristics, such as the porosity, but lacks the physical microscale description of the medium. Thus, 1D (Barra et al., 2003; Caldeira & Susantez, 2020), 2D (Hashemi & Hashemi, 2017; Shin & Kim, 2014; Zeng et al., 2017), and more rarely, 3D (Hoda et al., 2019) models are used, and the results do not allow to obtain information such as how the solid and fluid interact at a smaller scale. However, the approach has the advantage of having a low computational cost. The second approach consists of a pore-scale simulation, and involves a more in-depth modeling of the physical structure and of its interaction with the fluid in combination to reduced or detailed kinetics. With pore-scale simulations, 2D (J. Shi et al., 2020b) and 3D (Bedoya et al., 2015; Billerot et al., 2020; Z. Wu et al., 2021; Yakovlev & Zambalov, 2019) techniques are used. With regard to the 2D simulations, Shi et al. (2020)

modeled a two-layer burner consisting of 2.5 mm and 7.5 mm beads in the upstream and downstream sections, respectively, and considered the effect of adding CO₂ to a rich methane-air mixture. They observed a decrease in H₂ production and an increase in CO production as CO₂ was added to a rich methane-air mixture. With the 3D model approach, either a single column (Billerot et al., 2020; Z. Wu et al., 2021) or an entire burner (Bedoya et al., 2015; Yakovlev & Zambalov, 2019) can be modeled. In both cases, the approach has the advantage of capturing small-scale phenomena such as spatial velocity fluctuations, a task that is not possible with the volume-averaged method. For example, Yakovlev & Zambalov (2019) modeled a 3D random packed spheres burner with a rich methane-air mixture having a ϕ of 2.5. Observations at the pore scale revealed large spatial variations of the temperature and velocity fields due to the inhomogeneity of the matrix. Furthermore, they analyzed the fluid-solid interactions leading to unsteadiness of the front flame at the pore level.

While the porous burners are made of foam or pellets/beads in the above literature survey, new designs are proposed such as a porous radiant burner where the combustion takes place within a volume confined by a porous structure having a high pore density (porosity close to 65% and 30-70 pores per inch (PPI)) (Vahidhosseini et al., 2020, 2021, 2022). This approach, named internal combustion regime (ICR), is said to offer radiant efficiency greater than 50% without mixture preheat (Vahidhosseini et al., 2020). Other recent approaches based on the idea of using tailored porous structures have recently emerged as a potential applications to CPM (Samoilenko et al., 2019; Sobhani et al., 2021). One example of a tailored design is the biomimetic inspired leaf-type hierarchical porous medium studied by Shi et al. (2021) for solar driven methane reforming. By optimizing the solar porous reactor with respect to temperature distribution, such a leaf-inspired structure resulted in a 7% improvement of methane conversion to syngas (X. Shi et al., 2022). The idea of designing structured media with a controlled morphology is driven by the possibility of making them using advanced manufacturing techniques such as additive 3D printing technology (Fee, 2017). This approach has been notably used by Samoilenko et al. (2019) who designed and printed porous media based on a diamond lattice matrix. Their experiments showed the advantage of using diamond lattice structures as compared to foam as the former offer better resistance to deformation and

thermal shock. In the present study, investigations are pursued with the objective of evaluating the influence of the porosity and pore diameter of a diamond lattice medium when used to produce syngas from a methane-rich mixture. The effect of porosity is addressed by comparing two media having the same pore diameter but very different porosity (86% vs. 44%) while the impact of pore diameter is tackled by comparing two media having a constant porosity but with pore diameter of 1.8 and 3.1 mm. Moreover, a new design is proposed using a linearly varying pore diameter which is compared to isotropic matrices having a constant porosity and pore density. The comparison is based on the heat recirculation efficiency and the methane to syngas (H_2/CO) conversion efficiency while the production of C2 soot precursors is also assessed. These parameters are used to illustrate the advantage of the proposed new design.

4.2 Methodology

4.2.1 Geometry and computational domain

In this work, different geometries of porous burners are studied following the work of Samoilenko et al., (2019), in a bid to obtain a regular porous medium based on a diamond lattice matrix. As the objective is to quantify the burner operation, four different designs are compared. In order to facilitate comparisons with a foam burner, diamond lattice structures having equivalent porosity and permeability to a 10 and a 30 PPI foams (porosity of 82% and 86%, respectively) are studied and are identified as cases A and B, respectively. Their main properties are shown in Table 4-1. The impact of the pore diameter, at quite constant porosity, is achieved by comparing case A to case B, while the effect of the porosity is numerically studied by comparing case B to case C. Finally, case D shows an example of the advantage offered by printing technology by presenting a medium with varying pore diameter from the inlet to the outlet of the burner.

Table 4-1 Description of the geometric characteristics of the matrices and inlet conditions

Case	Pore density (PPI)	Porosity (%)	Strut thick. (mm)	Pore dia. (mm)	Cell dia. (mm)	Surf/Vol. (m^{-1})	Eq. ratio (-)	Inlet vel. (cm/s)
A	8.2	82	0.95	3.1	4.5	508	1.5 and 2	17
B	14.1	86	0.69	1.8	2.6	865	2	28
C Lower porosity	13.4	44	2.2	1.9	2.7	726	2	14
D Variable pore dia.	13.4-6.9	86	0.69-0.88	1.9-3.7	2.6-4.2	793	2	15

Although the shape of the lattice is maintained, the geometric parameters of the matrix, such as the strut thickness and the cell size, are changed from one case to another. Their values are given in Table 4-1, while a single lattice is presented in Figure 4-1 illustrating the difference between a cell (a sphere encased within a diamond lattice) and a pore (a disk encased within a hexagon made from the struts of a diamond lattice). In the modeling effort presented herein, a single column taken at the center of a would-be 5 cm high burner is used. Figure 4-2 shows a single unit of the lattice structure (left) and the resulting CFD model (right).

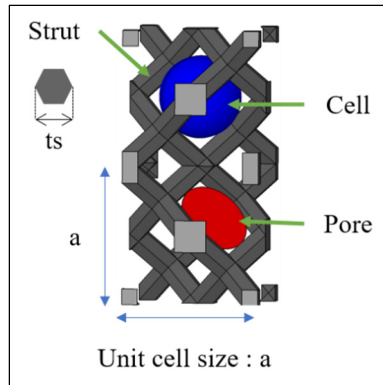


Figure 4-1 Geometric parameters

4.2.2 Numerical setup

The numerical model is similar to the one implemented in the work of Billerot et al., (2020). It uses a two-energy equation model, one for the gas and one for the solid, as the two phases are in non-thermal equilibrium. Heat transfer is carried out by convection between the fluid phase and the solid matrix. The porous medium is assumed to be homogeneous and inert while the solid has the thermo-physical properties of silicon infiltrated silicon carbide (SiSiC) adopted from Billerot et al., (2020). The properties are assumed constant and thus independent from the solid temperature due to a lack of data or correlations.

The proposed CFD model considers the fluid flow as laminar that behaves as an incompressible ideal gas. The reactive gas mixture is perfectly premixed at the inlet and the thermophysical properties of the gas are dependent on the temperature and species concentration as defined in the GRI-Mech 1.2 (Frenklach et al., 1995), which is the reaction mechanism used herein. Additionally, the Dufour and Soret effect are neglected.

Based on the above assumptions, the set of differential equations governing the physics is presented, and Eq. (4.1) first describes the mass conservation:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f) + \nabla \cdot (\rho_f \vec{u}) = 0 \quad (4.1)$$

where \vec{u} is the velocity vector and ρ_f is the gas density. For a multi-component mixture, ρ_f is computed with the ideal gas law (Eq. (4.2)):

$$\rho_f = \frac{P}{RT} \frac{1}{\sum_{k=1}^n \frac{Y_k}{W_k}} \quad (4.2)$$

where P is the static pressure, T_f the fluid temperature and R is the universal ideal gas constant. For each species, k , Y_k and W_k represent the mass fraction and molecular mass, respectively. The momentum equation presented by Eq. (4.3) can be written:

$$\rho_f \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = \nabla P + \nabla \cdot (\bar{\bar{\tau}}) \quad (4.3)$$

in which $\bar{\bar{\tau}}$ is the viscous stress tensor. The conservation of energy in the fluid is represented by Eq. (4.4):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_f C_{p_f} T_f) + \nabla \cdot (\rho_f C_{p_f} T_f \vec{v}) \\ &= -h_{conv}(T_f - T_s) - \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) - Q_{ch} \end{aligned} \quad (4.4)$$

where Q_{ch} is the rate of heat release from the chemical reactions defined as $Q_{ch} = \sum_k (\dot{\omega}_k h_k W_k)$. As for $\dot{\omega}_k$, it stands for the rate of production/consumption of the k^{th} species, while h_k and W_k are its molar enthalpy and molecular weight, respectively. The gas-specific heat, C_{p_f} , has been calculated using the mass-weighted mixture method, while the thermal conductivity follows the Mathur-Saxena averaging method based on the mole fractions of the different species (*Simcenter STAR-CCM+*, 2021). Then, the energy conservation in the fluid is expressed as per Eq. (4.5):

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_s C_s T_s] = \nabla \cdot [k_s \nabla T_s] + h_{conv}(T_f - T_s) - \nabla \cdot \vec{q}_{rad} \quad (4.5)$$

where C_s , T_s , k_s , and ρ_s represent the heat capacity, the temperature, the conductivity, and the density of the solid phase, respectively. Both energy equations (Eqs. (4.4) and (4.5)) are coupled by the heat convection coefficient, h_{conv} , modeled with a conjugate heat transfer boundary condition at the fluid-solid interface. In the fluid energy equation (Eq. (4.4)), gas radiation has not been considered following (Billerot et al., 2020), while the solid matrix is regarded as a gray and homogeneous medium that can absorb, emit or scatter radiation. The radiative heat flux $\nabla \cdot \vec{q}_{rad}$ appearing in Eq. (4.5) is calculated with Eq. (4.6):

$$\nabla \cdot \vec{q}_{rad} = \int_0^{+\infty} \alpha_\lambda [4\pi I_{b_\lambda} - \int I_\lambda(\Omega) d\Omega] d\lambda \quad (4.6)$$

where α_λ is the absorption coefficient at the wavelength λ , and I_{b_λ} is the spectral intensity of a black body evaluated using the Plank's law. The transport of the radiant intensity for a specific wavelength is governed by the radiative transfer equation (RTE) defined in Eq. (4.7):

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = \alpha_\lambda I_{b_\lambda} - (\alpha_\lambda + \delta_\lambda) I_\lambda + \frac{\delta_\lambda}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\Omega) d\Omega \quad (4.7)$$

where δ_λ is the scattering coefficient. Because the matrix acts as a homogeneous gray medium, α_λ and δ_λ can thus be considered as independent of the wavelength. One can add that this equation was solved using the discrete ordinate method.

Lastly, an equation for the species conservation is used (Eq. (4.8)):

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_f Y_k] + \nabla \cdot [\rho_f Y_k \vec{u}] = \nabla \cdot [\rho_f D_{k,m} \nabla Y_k] + \dot{\omega}_k W_k \quad (4.8)$$

where $D_{k,m}$ is the diffusion coefficient between species. The diffusive flux was evaluated based on the Fick's law using the kinetic theory for the calculation of the molecular diffusivity of the species k in the mixture.

4.2.3 Boundary conditions

For this single column burner illustrated in Figure 4-2, the following boundary conditions are imposed on the fluid phase: at the inlet, a perfectly premixed methane-air gas mixture is injected at a constant velocity to ensure a stable flame within the burner; thus, $u_x = u_y = 0$; $u_z = u_{inlet}$; $Y_i = Y_{i,\phi,0}$; $T_f = T_0 = 300$ K. At the outlet, a zero normal gradient is imposed on the specie mass fractions and temperature while the pressure is set to one atmosphere. In the solid, radiation with the environment at 300 K is applied at the inlet and outlet faces and is expressed as $q_{rad,out} = -\varepsilon\sigma(T_s^4 - T_0^4)$, where σ is the Stefan-Boltzmann constant. At the fluid-solid interface, a no-slip condition is applied. Finally, on the four lateral sides of the computational domain, a periodic boundary condition is used to ensure solution continuity of the solid and fluid phases, so as only a single column of the burner is modeled, as illustrated in Figure 4-2.

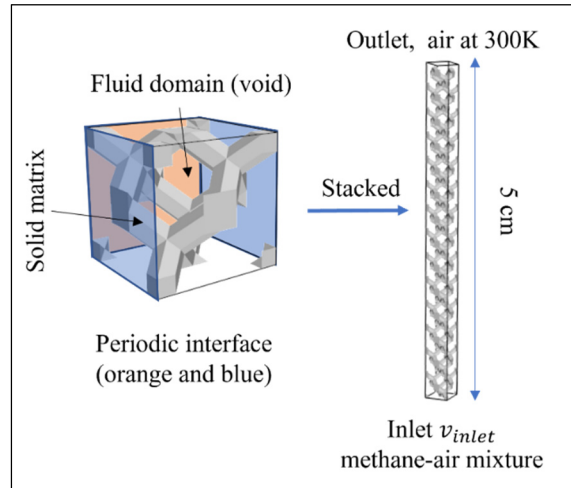


Figure 4-2 Description of the geometry and boundary conditions
Left: CAD model of a unit cell; Right: CAD model of the column for CFD calculations

4.2.4 Solution Method

The calculations are conducted with the commercial CFD software STAR-CCM+. The SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation) algorithm is employed to solve the coupling between the pressure and the velocity in the momentum equation. A second-order

implicit formulation is used for the temporal discretization with a time step of 10^{-5} s. A second-order upwind scheme is used for the spatial discretization. The equations are solved and a convergence criterion of 10^{-5} is required especially for the energy residual (Zeng et al., 2017). Computations were carried out on the Graham supercomputer managed by Compute Canada.

4.3 Grid Independence and Numerical Model Validation

A mesh independence study was first conducted to determine the impact of the mesh refinement on the solution. The study consisted in modeling an isothermal airflow at 300 K in order to validate the pressure drop along the porous matrix. Thus, different mesh densities were tested using the geometry of the reference case A. The mesh study was conducted in two steps. The first consisted in evaluating the influence of the mesh size without using prismatic layers, with a polyhedral mesh size that is gradually increased from about 500,000 to 7.6 million. As observed in Figure 4-3, the relative error decreases toward a minimum as the number of cells increases.

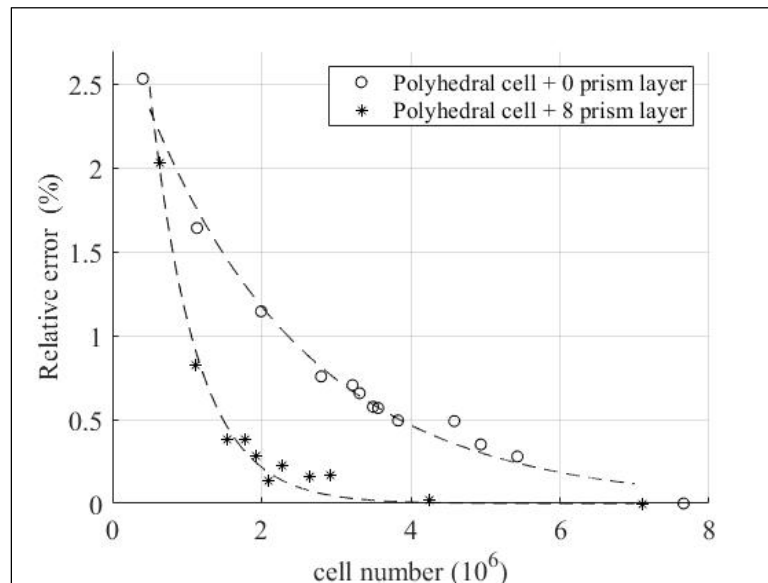


Figure 4-3 Mesh convergence study

In order to reduce the relative error on the pressure loss, the second step looked at the impact of adding prismatic layers to the mesh. The thickness of the prismatic layers was set to 5% of the strut diameter, and the number of layers was varied from 1 to 10. This prismatic layer sensitivity study was conducted on 3 different meshes: coarse (~1 million cells), medium (~2 million cells) and fine (~3 million cells). The results showed that 8 prims layers resulted in a good convergence of the numerical results and thus more mesh sizes were studied. Figure 4-3 presents the impact of the number of cells for a constant 8 prismatic layer. When considering the computation time and the relative error on the pressure drop, a mesh with 2 million cells, including 8 prismatic layers, was chosen as a good compromise with a 0.2% relative error.

Based on this choice, the mesh configuration was applied to cases A and B, and a validation was conducted with a non-reacting flow through the porous medium, with inlet velocities ranging from 1 to 40 cm/s. The results were compared to the Darcy-Forchheimer pressure drop law using the correlations proposed by Ergun & Orning, (1949), Fand et al., (1987) and Du Plessis et al., (1994) based on the porosity (ϕ), pore diameter and tortuosity, as shown in Figure 4-4. The Darcy velocity u_D , also called the superficial velocity, can be defined as $u_D = \phi \langle u_z \rangle$, with $\langle u_z \rangle$ being the average pore flow velocity.

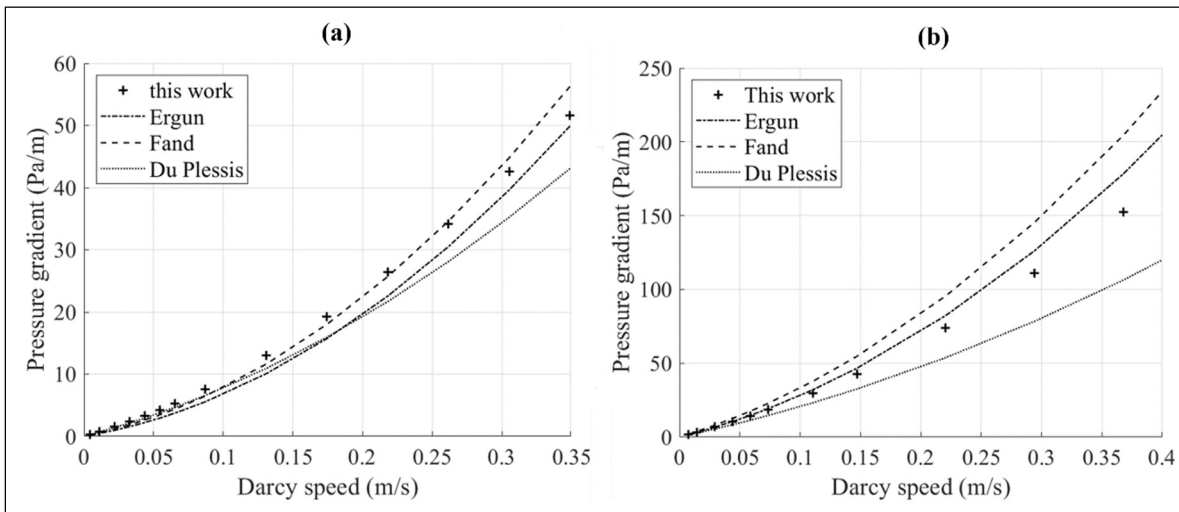


Figure 4-4 Validation of the macroscopic pressure gradient with pressure drop law correlations

(a) Case A; (b) Case B

As illustrated in Figure 4-4, the results, having a quadratic form in both cases, are close to the literature correlations. The results in case A are in very good agreement with the correlations proposed for different types of porous media (foam or beads) and different porosities (maximum relative error of $\sim 3.7\%$ with respect to Ergun & Orning (1949)). Although a more significant deviation with the correlation's predictions is observed for case B (relative error of $\sim 13\%$ with Ergun & Orning, (1949)), the results from the proposed model lie somewhere in-between the correlations of Ergun & Orning (1949) and Du Plessis et al. (1994). It is eventually observed that the pressure drop is higher for matrix B because of its higher pore density as compared to matrix A.

From convergence and isothermal flow study results, it can be stated that the proposed mesh is suitable for predicting the flow characteristics. The characteristic average mesh sizes in the fluid phase for cases A and B are $80\ \mu\text{m}$ and $65\ \mu\text{m}$, respectively. Details of the mesh for the different geometries tested in this study are presented in Table 4-2. Since the geometries of cases C and D are based on cases A and B, respectively, the same meshing approach is used in all cases. In addition to the fluid domain, the solid domain must be meshed, and is constrained by the choice of the fluid region mesh. Due to the refinement of the cells at the interface, the solid cells have an average size of 81 and $68\ \mu\text{m}$ for cases A and B, respectively.

Table 4-2 Mesh characteristics

Case	Fluid cells (10^6)	Solid cells (10^5)	\bar{d}_{fluid} (μm)	\bar{d}_{solid} (μm)	$d_{min,fluid}$ (μm)	$d_{max,fluid}$ (μm)
A	2.8	4.2	80	81	5	372
B	1.9	3.7	65	68	5	336
C	1.9	6.7	73	112	7	324
D	1.9	3.5	66	72	7	388

To complete the model validation, the influence of the equivalence ratio was studied to see the response of the model using ϕ values of 1.5 and 2 with the geometry of case A. To this end, the scalar fields of CO and H₂ mole fractions plotted on a median plane from 1.5 cm to 5 cm are presented in Figure 4-5 for both conditions.

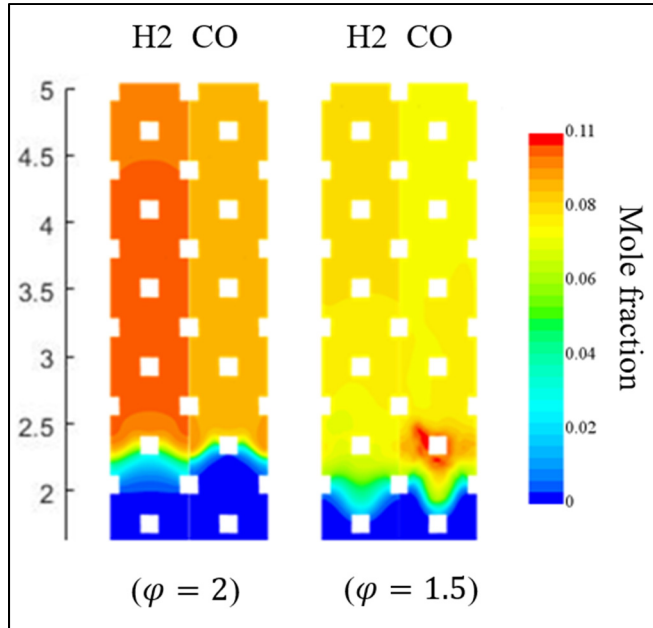


Figure 4-5 Influence of the equivalent ratio on CO and H₂ scalar fields for geometry A at an equivalence ratio of 2 (left) and 1.5 (right)

In first observing the formation of CO (column on the right) at an equivalence ratio of 1.5, a high CO concentration spot is located in the reaction zone, and is then partially oxidized by residual oxygen to form CO₂. This CO concentration peak is not visible at an equivalence ratio of 2 (case A), where CO is formed more gradually. Eventually, the mole fraction of CO produced is, as expected, higher at an equivalence ratio of 2. Moreover, when comparing the concentrations of CO and H₂ at the burner outlet for an equivalence ratio of 1.5 to the experimental results of Zeng et al. (2017) obtained with beads, a good concordance is noted. Indeed, the model predicts CO and H₂ concentrations and a maximum gas temperature of 8.3%, 8.5%, and 1813 K, respectively, while experimental values of 7.8% for both species and a gas temperature of 1880 K are reported in Zeng et al. (2017). Similarly, the values of CO, H₂ and the maximum gas temperature obtained by the model at an equivalence ratio of 2 (9.4%, 11%,

and 1804 K, respectively) are in concordance with the 2D numerical results (VAM and skeletal kinetic mechanism) of Dai et al., 2021, who obtained 10%, 12%, and 1641 K respectively, using a cylindrical pellets bed.

From the above results, the model shows a very good agreement with the pressure loss correlation of Ergun & Orning, (1949) as well as with experimental specie concentrations (maximum relative error of 9%) and maximum gas temperature (relative error of 3.6%) of Zeng et al., (2017). Thus, the model is used as is thereafter.

4.4 Results

In the following sections, four designs exhibiting varied pore diameter and porosity are compared, while a burner with varying pore diameter is also studied. The equivalence ratio is kept constant and equal to 2, but the inlet mass flow rate is adjusted similarly to Bubnovich et al., (2010) for each case in order to provide a stable flame or quasi-steady state with respect to the species, heat release rate and temperature profiles at the macroscopic scale. It could be said that the inlet velocity presented in Table 4-1 is close to the lowest value ensuring a stable burner operation. Indeed, the macroscopic thermal wave can propagate within the matrix on a time scale of 10^1 - 10^2 s although the phenomena at the pore scale are unsteady and local fluctuations are observed (Yakovlev & Zambalov, 2019). The analysis first emphasizes phenomena at the macroscale such as the flame structure, heat recirculation and flow in the burner. Then, the paper highlights the influence of the matrix design parameter on syngas production and pollutant formation.

4.4.1 Flame Structure

As the flame stabilizes in the burner around a quasi-steady position, three zones can be identified when looking at the fluid and solid temperature profiles and the heat release rate (HRR) curve as shown in Figure 4-6 for case A. The results are mass flow-averaged at every 0.5 mm using 100 planes over the height of the column. The first region corresponds to the preheat zone, where the matrix temperature is higher than that of the unburned gas mixture. In

this region, heat is transferred from the solid to the gas by convective heat transfer. At a height of 2.19 mm, the reaction zone begins. This position matches the location where 1% of the peak of HRR is released. Within the reaction zone, the gas temperature is higher than that of the solid due to exothermic reactions. Consequently, heat is transferred from the gas to the matrix by convective heat transfer. The third region corresponds to the post-flame zone, where both phases reach a thermal equilibrium. This region extends from the end of the reaction zone to the burner exit plane. In the vicinity of the burner outlet, an inflection of the temperature is visible because of the heat losses by radiation with the environment at 300 K.

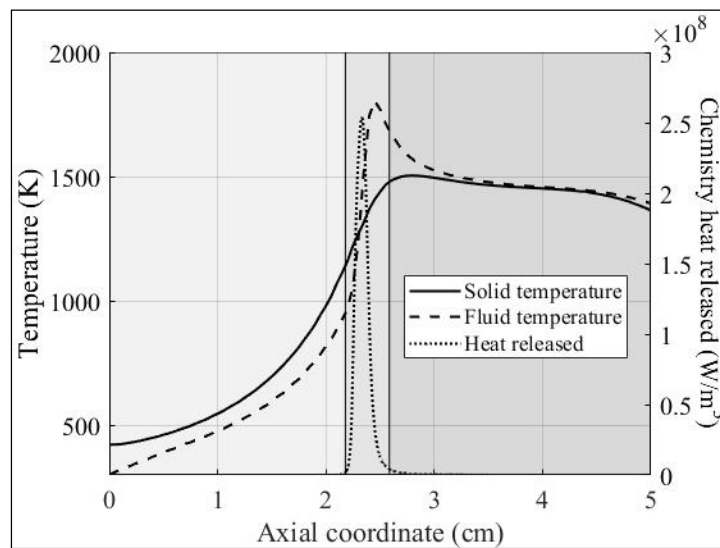


Figure 4-6 Temperature and HRR profiles related to case A

4.4.2 Heat Transfer and Energy Recirculation

The above description is linked to the heat recirculation phenomenon commonly observed in CPM (Barra & Ellzey, 2004). Figure 4-7 presents the non-dimensional volumetric convective heat transfer, defined with respect to the highest value of case B, from the gas to the matrix for cases A, B and C.

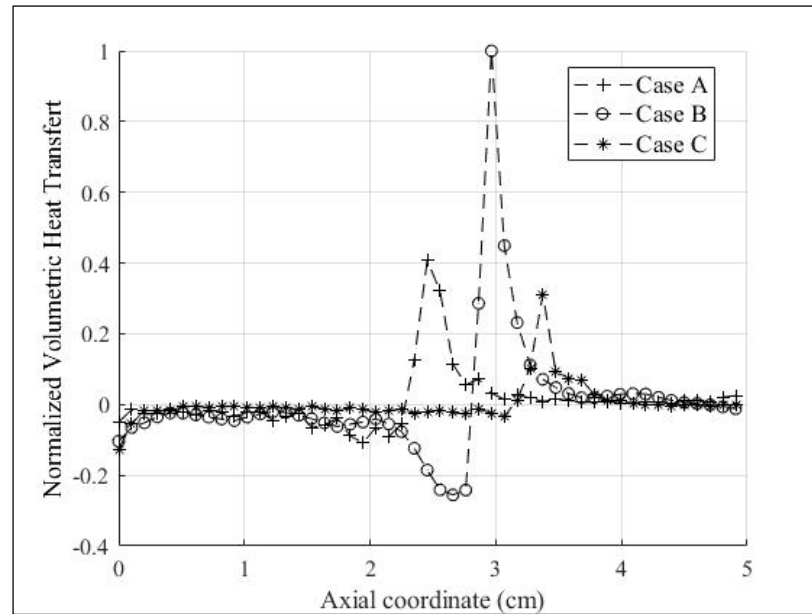


Figure 4-7 Influence of pore diameter (case A vs. case B) and porosity (cases A and B vs. case C) on the gas-to-solid convective heat transfer

The three zones described in section 4.1 can also be identified in Figure 4-7 since the preheat zone is dominated by the heat transfer by convection from the solid to the gas. The heat transfer is negative according to the sign convention adopted herein. Following this energy transfer to the gas, a positive heat transfer (thus, gas to solid) is observed and results from the higher gas temperature due to combustion in the reaction zone. Then, the heat transfer in the post-flame zone is almost zero because a thermal equilibrium between the solid and the gas is reached. The heat recirculation is induced by radiative and conductive heat transfers within the solid phase. The energy gained by the solid from the gas in the reaction zone is then partly transferred upstream in the preheat zone by both mechanisms and increases the solid temperature. Simultaneously, heat transfer by convection in the upstream region increases the entrant gas temperature. The fraction of heat recirculating in the burner can be quantified by calculating the preheat efficiency defined as the ratio between the heat transfer from the solid to the fluid in the preheat zone and the total amount of heat release. From this definition, efficiency of 43%, 53% and 63% is obtained for cases A, B and C, respectively, illustrating the impact of the pore density (case A vs. case B) and porosity (case B vs. case C) on the preheating process. This enhancement of the preheat efficiency with a higher pore density is mainly due to the high

surface-to-volume ratio of the B medium (see Table 4-1) as the porosity of matrices A and B is similar. The net consequence of a higher pore density is a higher amount of energy transferred from the reaction zone to the preheat zone. The width of the preheat zone in case B is also larger, as shown in Figure 4-8 that presents the temperature profiles, which promotes heat transfer to the fluid. For case C, the mass of the burner being higher due to the low porosity, more energy is consequently stored and transferred to the preheat zone. Eventually, the front flame stabilizes close to the outlet (see location of positive heat transfer in Fig. 7), resulting in a larger preheat zone, which contributes to improving the heat recirculation.

Table 4-3 Influence of the matrix design on the peak temperature, flame thickness and heat recirculation efficiency

Case	A	B	C
Diamond lattice cell size (mm)	4.5	2.6	2.3
Flame thickness based on HRR (mm)	4.5	3.0	2.3
Peak flame temperature (K)	1800	1830	1873
Heat recirculation efficiency (%)	43	53	63

4.4.3 Influence of the matrix geometry at the macroscale

Figure 4-8 presents the solid and temperature profiles for three porous geometries tested herein. The maximum flame temperatures were compared in order to look at the impact of the pore diameter at a constant porosity (case A vs. case B) and by comparing the porosity at a constant pore diameter (case B vs. case C). Peak temperatures of 1800 K and 1830 K are obtained for case A and case B, respectively, confirming the presence of a superadiabatic combustion as the adiabatic flame temperature of a methane-air mixture at a ϕ of 2 is 1630 K. Moreover, the results show that halving the porosity by nearly 2, such as in case C, resulted in a higher peak temperature of 1873 K.

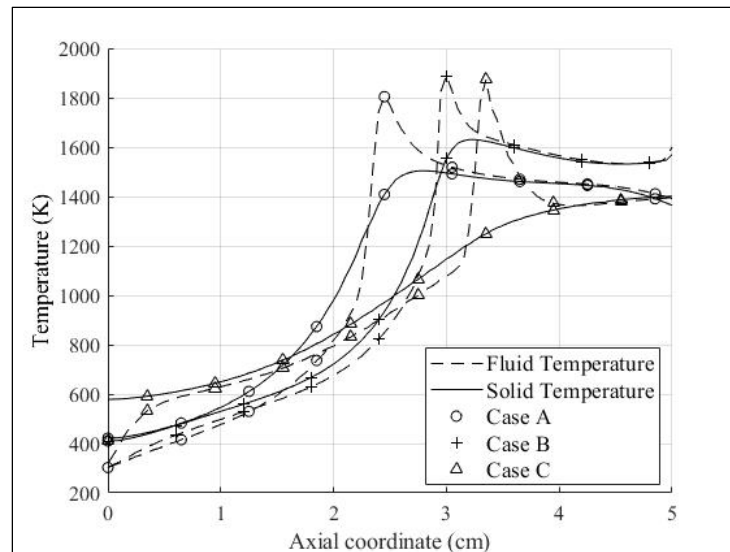


Figure 4-8 Influence of pore diameter (case A vs. case B) and porosity (cases A, B vs. case C) on the temperature profiles

To help explain the differences in maximum temperatures observed, the analysis now looks at the effect of the medium geometry on the reaction zone thickness based on the HRR profile. From the results presented in Table 4-3, it can be observed that the width of the reaction zone differs with the pore density and medium porosity. As the pore diameter decreases by increasing the number of pores per inch, as in case B, or by reducing the porosity, as in case C, the flame thickness is reduced and a strong relationship between the cell size and the flame thickness is obtained. Indeed, the results suggest that chemical reactions are taking place mainly within a single cell for every porous medium tested herein. Matrices with a small cell size thus concentrate the heat release in a smaller volume. For example, the maximum heat release per unit volume is about 2.5 times higher with case B due to a smaller cell volume of that medium as compared to case A, although the entering mass flow rate is 1.6 times less. As a consequence, the local flame temperature and temperature gradient are slightly higher for case B as this geometry offers a greater surface area per volume for heat exchange by convection between the solid and the gas (see Table 4-1, Surf/volume ratio), thus also favoring a higher equilibrium temperature at the outlet (Figure 4-8).

Moreover, it is observed, in Figure 4-8, that case C has the highest solid and gas temperature in the preheat zone. The low porosity matrix, due to its larger mass, recirculates more energy to the fluid when compared to the other media as was shown in Table 4-3. Finally, the temperature profiles in Figure 4-8 also show that the flame in case C, stabilizes farther downstream, although the gas inlet velocity is the lowest (17 cm/s in case A and 28 cm/s in case B vs. 14 cm/s in case C). This is because the pore and cell sizes are smaller in case C (see Table 4-1), leading the flow and the front flame to reach a higher velocity at the pore scale, as will be shown in section 4.4.4.

4.4.4 Flow Analysis

The preheating of the incoming gas mixture highlighted above increases the unburned mixture velocity due to gas expansion. This ensures flame stabilization within the burner whereas the inlet velocity in case A is equal to 17 cm/s, while it is 28 cm/s in case B and 14 cm/s in case C. These values should be put into perspective considering that a laminar flame speed of 3.9 cm/s is obtained for a freely propagating flame at an equivalence ratio of 2. From this observation, the presence of the porous medium allows attaining maximum burned gas velocities of 1.8 m/s, 3.16 m/s and 2.17 m/s in cases A, B, and C, respectively. This can be observed for cases A and C in Figure 4-9 that presents four streamlines of the fluid within the porous medium. Although the inlet velocity is lower in case C than in case A, the peak velocity is higher by a factor 1.2 because of the low porosity of the matrix, which results in narrow openings responsible for accelerating the flow. A similar observation can be made by comparing case A to case B (results not shown for brevity), where the higher pore density reduces the cell size.

Nonetheless, a similarity in the flow pattern is observed in all configurations and is due to a maximum pore Reynolds number ($Re_{p,max}$) of 23 – 24 for cases A and B, while it has a value of 15 for case C. These values are associated with the laminar Forchheimer regime, which is characterized as lying between a flow dominated by the viscous forces (Darcy regime with $Re_{p,max} < 6$) and a flow where the inertial forces are dominant (nonlinear regime with $Re_{p,max} > 60 - 65$) (Fand et al., 1987). The structured nature of the matrix and the laminar

regime of the flow translate into a channeling flow, with a limited interaction between the helicoidal-shaped streamlines, as was already observed by Billerot et al., (2020).

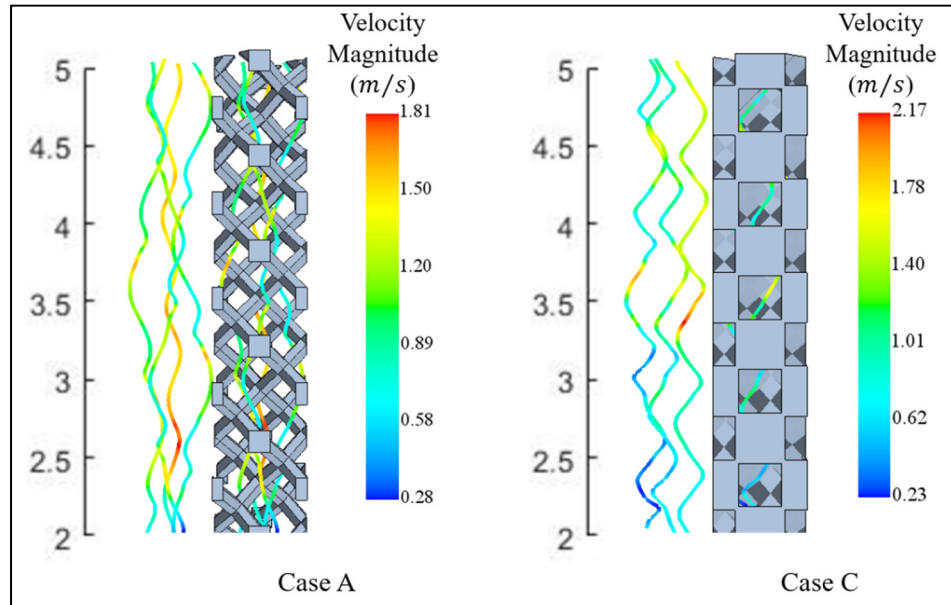


Figure 4-9 Influence of porosity on streamlines: high porosity (case A, left) vs. low porosity (case C, right)

4.4.5 Variable pore density

To enhance the stabilization range and the heat recirculation efficiency, it has been suggested that a graded matrix geometry can be used (Sobhani et al., 2021). Thus, in this section, the effect of linearly varying the pore density along the burner while keeping the porosity equal to 86% (case D) is explored. The bottom layer has the properties of case B and the 5 upper layers are obtained by stretching the lattice in the z-direction in order to get a top layer having the properties of case A. Thus, the pore density decreases from the inlet to the outlet. In order to keep a 5 cm column with the same mesh base size as in the first layer, the first layer mesh is deformed into a rectangular cuboid having the same cell volume as in case B. The deformation factor of the intermediate stages is obtained by linear interpolation between the two extremities. The characteristics of each section are presented in Table 4-4. Because of stretching, the cells of the matrix have an ellipsoidal shape. The equivalent cell size shown in Table 4-4 is calculated from the diameter of a sphere having the same volume.

Table 4-4 Characteristics of each layer of the variable pore density matrix

Layer	Stretching factor	Average Porosity (%)	Equivalent cell size (mm)
1	1	86	2,6
2	1.42		2,9
3	1.96		3,2
4	2.62		3,6
5	3.41		3,9
6	4.34		4,2

4.4.5.1 Temperature profiles

A simulation was conducted at an equivalence ratio of 2 and the results are compared with cases A and B. Figure 4-10 presents the solid and fluid temperature profiles for the three cases. Because the new burner has a variable pore diameter geometry, the front flame stabilizes farther downstream. As a consequence, the preheat zone is larger in comparison with cases A and B, resulting in a highly efficient heat recirculation within the matrix. Indeed, the preheat efficiency is 43% and 53% in cases A and B, respectively, while it rises to 59% in case D. Nevertheless, the performances of the low porosity matrix (case C) are better in terms of heat recirculation (63%) because of its higher thermal inertia although the thermal load applied at the burner inlet is roughly 2 times smaller than in case D.

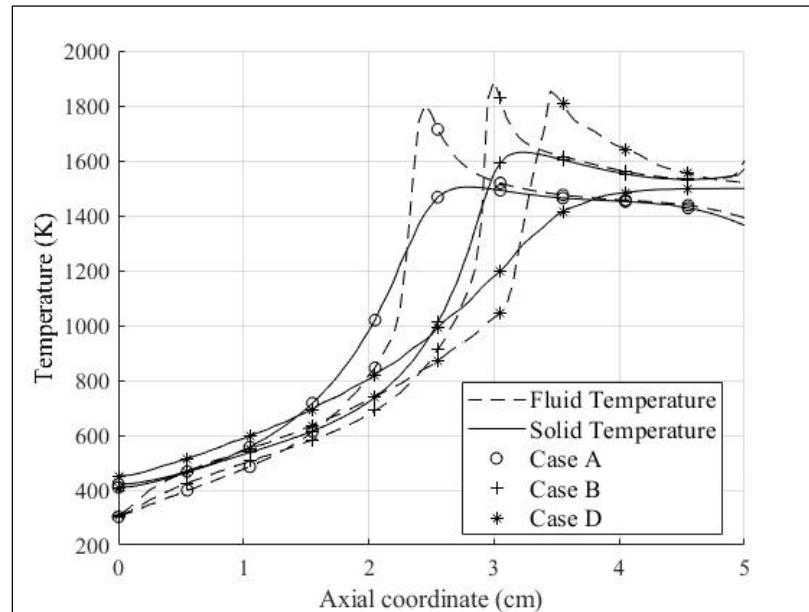


Figure 4-10 Influence of variable pore diameter on temperature profiles

4.4.5.2 Syngas production

In this section, the main species of syngas production are analyzed using Figure 4-11, which presents the scalar field of CO (Figure 4-11-left) and H₂ (Figure 4-11-middle) mole fractions as well as the fluid temperature (Figure 4-11-right). As a first observation, it can be stated that cases A and B (same pore density) do not differ significantly from each other with respect to molar concentrations but differ in flame location. Indeed, the mole fractions of CO and H₂ produced are quite similar although, a modest increase by 5.5% and 2%, respectively, is noted for case B. This slightly improves the H₂/CO ratio and the conversion efficiency calculated in Table 4-5, likely as a result of the higher temperature met in the reaction zone with burner B.

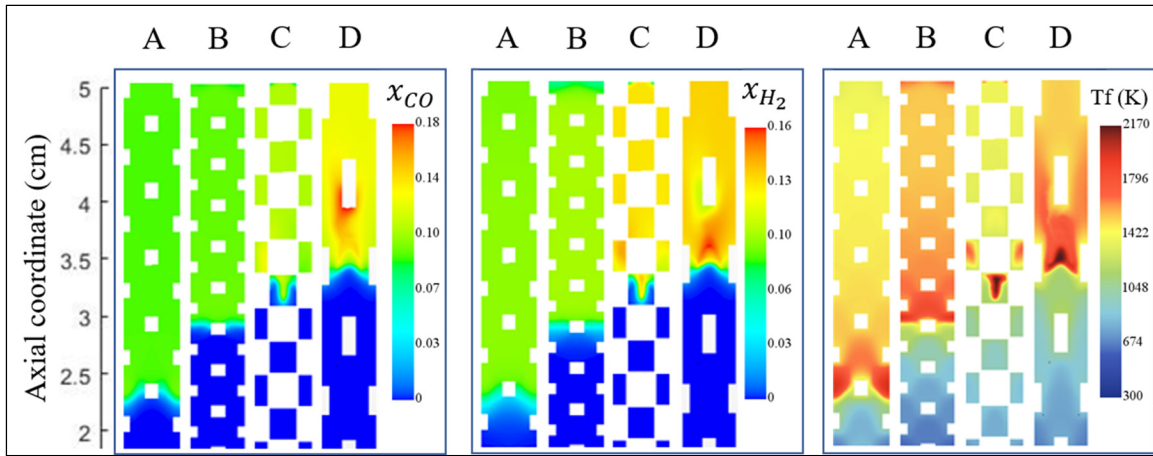


Figure 4-11 Scalar fields of CO and H₂ mole fractions together with fluid temperatures for cases A to D

Lowering the matrix porosity has a positive effect on the production of syngas as the conversion efficiency reported in Table 4-5 for case C (porosity of 44%) is 53%. This thus represents a gain of 10% as compared to case B, which has a similar pore density. This higher conversion efficiency is similar to the experimental results of Y. Wang et al., (2018), who observed an efficiency of 50% at an equivalence ratio of 1.7 using a porous burner made up of pellets with a porosity of 46%. This significant improvement of the conversion efficiency can be attributed to the high local temperature, which reaches 2170 K within a cell of the burner, contributing to producing H₂ and CO at higher levels than in cases A and B. With the pores being small in burner C, no subsequent reactions involving H₂ and CO occur downstream of the main reaction zone.

Stretching the matrix in order to obtain a burner with a graded geometry is even more beneficial for the methane-to-syngas conversion efficiency. Indeed, a high temperature spot is visible in the main reaction zone in burner D, where H₂ and CO are produced. Then, it can be noticed that H₂ is partially oxidized close to a strut of the solid matrix. Meanwhile, at this particular location, CO is formed and reaches a local high concentration. Just ahead of the obstacle, the reverse water gas shift reaction (RWGS: $\text{H}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$) is likely dominant since it was also verified that CO₂ is consumed and H₂O is produced. This concept is also supported by the fact that the local temperature drops and the rate of heat release becomes negative. This was expected since the RWGS reaction is moderately endothermic (Shi et al., 2020). However, the

H₂ and CO concentrations remain higher than in cases A, B and C, but in the same proportion to case A. Eventually, the conversion efficiency jumps to 63% in case D.

Table 4-5 Influence of the geometry on burner efficiency

Case	H ₂ /CO (-)	$\eta_{CH_4-syngas}$ (%)	Thermal load (kW/m ²)
A	1.06	41	1361
B	1.13	43	2236
C	1.15	53	563
D	1.06	63	1200

4.4.6 Soot precursor emissions

Burning rich methane-air mixture for syngas production is also accompanied by the production of particulate matter, as observed by Toledo et al., (2009). Thus, our investigation proceeds by looking at the concentration of three soot precursors (acetylene C₂H₂, ethylene C₂H₄ and ethane C₂H₆), for which a comparison is possible with experimental data. The bar chart presented in Figure 4-12 shows the mole fractions of these species produced at the burner outlet on a wet basis for cases A to D. A comparison with the experimental results of Toledo et al., (2009) is performed. The authors in Toledo et al., (2009) tested a methane-air mixture at an equivalent ratio of 2 in a porous medium consisting of pellets having a porosity of ~40%.

Overall, in terms of order of magnitude, the species production is consistent with the experimental results of Toledo et al., (2009). Nonetheless, a discrepancy of two orders of magnitude is noted for C₂H₆, except for case D, where a negligible amount of ethane is produced, as observed experimentally in Toledo et al., (2009).

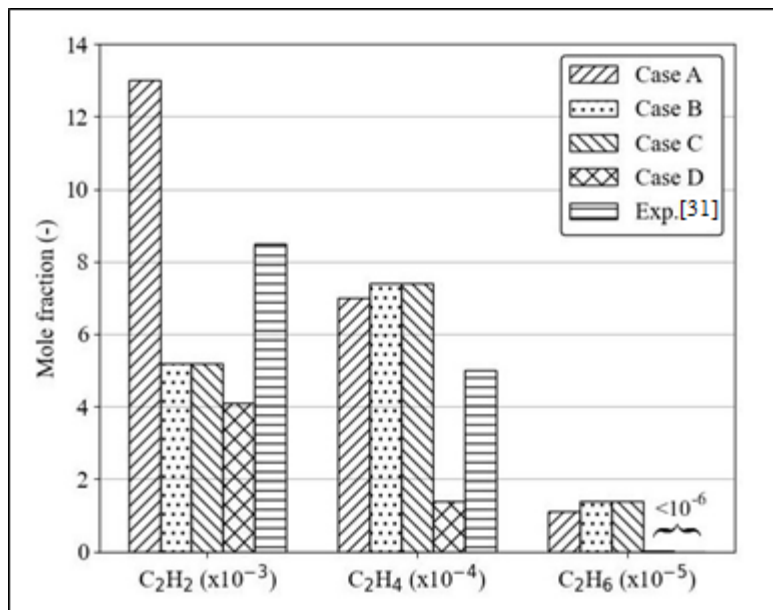


Figure 4-12 Influence of burner geometry on soot precursors at burner outlet

As a first observation, it would seem that the porosity does not impact the production of soot precursors since their molar fractions are almost equal in cases B and C, at the same pore density but different porosity. Conversely, varying the pore density while keeping the porosity constant leads to significant variations in C2 production. For example, the production of acetylene in case A is more than twice the value obtained with case B. The model with the new graded geometry tested herein (case D) exhibits a significant decrease in all soot precursors. Even though the level of acetylene is comparable to cases B and C, ethylene production is divided by 5, and at the same time, ethane is cut by 2 orders of magnitude in comparison with cases A, B and C. A possible explanation for this behavior could be the elongated ellipsoidal shape of the matrix cell obtained by stretching the geometry. As a consequence, a long post-oxidation region is formed downstream of the main reaction zone, where the soot precursors can be oxidized (Pastore & Mastorakos, 2011). In fact, it was verified in case D that the soot precursors produced in the main reaction zone are then partially consumed with residual oxygen, supporting this idea. In comparison, the oxidation of the C2 species was not observed in the other cases.

4.5 Conclusion

In this study, a 3D CFD model of a novel porous burner based on a tailored porous geometry was presented. The model allowed to study the impact of the matrix characteristics on the production of syngas and soot precursors from a methane-rich flame having an equivalence ratio of 2. The following results were obtained from simulations:

The flame settled in one open cell of the matrix, resulting in a thinner flame and reaction zone when the pore density was increased (case B) or the porosity was lowered (case C). A high pore density matrix is characterized by a larger surface-to-volume ratio, which enhances the heat transfer from the solid to the gas, and thus increases the recirculation efficiency from 43 to 53%, as was found in cases A and B, respectively.

As the porosity is decreased by a factor 2 (case C), the mass of the solid matrix is likewise increased, and so does its thermal inertia. As a consequence, the matrix temperature at the inlet is higher due to less cooling, and the temperature difference between the incoming gases and the matrix is higher than for cases A or B. Also, it was observed that the smaller pore diameter in case C resulted in a higher flow velocity, leading the front flame to stabilize farther from the entry and the preheat zone to be wider. The preheat efficiency was increased from 43% in case A to 63% in case C.

Syngas production was evaluated in terms of conversion efficiency and it was observed that a slight improvement from 41 to 43% was obtained with case B. The high local temperature reached in case C allowed to produce higher levels of syngas, resulting in a 10% conversion efficiency gain as compared to case B.

A graded geometry with a decreasing pore density was simulated for the first time, and promising results were obtained with respect to preheat efficiency and for syngas production. Indeed, the wide preheat zone resulted in a 59% recirculation efficiency, while the conversion of CH_4 to syngas was about 20% higher than in cases A and B.

Observations of the combustion at the pore scale revealed that the high amount of H_2 produced locally was then mitigated and partially consumed by the RWGS reaction.

The production of three soot precursors was significantly reduced when burning a rich mixture in the graded geometry. The stretched cells of the matrix form an elongated post-flame zone where the oxidation of three C₂ species studied is possible since all the reactions occur in a single cell.

This study revealed the advantages of using a porous burner having a tailored geometry with a varying pore density. The gains obtained in terms of the preheat efficiency and conversion efficiency were also observed when the matrix porosity was decreased.

Acknowledgements

The authors would like to thank the NSERC discovery grant program for providing financial support. Moreover, Compute Canada is also acknowledged as it provided the necessary computational resources.

Declaration of interests

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

CRedit

CONCLUSION

L'étude numérique de la production de syngas combinée à la grande modularité de l'impression 3D permet de tester quatre géométries pour déterminer les paramètres importants dans l'amélioration du processus de synthèse de ces vecteurs énergétiques d'intérêt croissant. La conversion du méthane en syngas par combustion riche est ainsi réalisable dans un brûleur poreux avec le caractère super-adiabatique due au préchauffage du mélange frais. Dans cette étude, un modèle 3D de simulation numérique (CFD) d'un brûleur poreux à géométrie de maille diamant fait sur mesure a été présenté. Le modèle a permis d'étudier les effets des caractéristiques géométriques de la matrice solide sur la production de gaz de synthèse et de quelques précurseurs de suie à partir d'une flamme de méthane ayant une richesse de 2. Les résultats suivants ont été obtenus à partir des simulations :

- La vérification du maillage a été réalisée, dans un premier temps, en comparant le gradient de pression de l'écoulement à froid avec les résultats obtenus lors de l'emploi de corrélations issues de la littérature. Ainsi sur la plage d'écoulement laminaire considérée, le modèle reproduit les tendances prédites par les corrélations avec une erreur maximale de 10% pour une vitesse de 0,26 m/s. Dans un second temps, la vérification du modèle a été réalisée pour 2 richesses différentes en présence de combustion. Cette comparaison avec des résultats expérimentaux tirés de la littérature a mis en évidence des différences maximales de 8,9% pour les espèces prédites et de 3,6% pour la température maximale.
- La structure de flamme à trois régions (zone de préchauffage, zone de réaction et zone post-flamme) a été retrouvée dans tous les cas testés et une combustion à enthalpie excédentaire a toujours été observée avec un dépassement de température de 14% en moyenne.
- La flamme se stabilise dans une cellule de la matrice, ce qui concentre la flamme et la zone de réaction dans un espace plus confiné lorsque la densité des pores augmente

(cas B) ou que la porosité diminue (cas C). Une matrice à haute densité de pores est caractérisée par un plus grand rapport surface/volume qui améliore le transfert de chaleur du solide vers le gaz et augmente ainsi l'efficacité de la recirculation de 43 à 53% comme cela a été constaté dans les cas A et B, respectivement.

- Lorsque la porosité est réduite d'un facteur deux (cas C), la masse de la matrice solide augmente ainsi que son inertie thermique ce qui se traduit par un temps plus long pour l'atteinte du régime permanent. Par conséquent, la température de la matrice près de l'entrée est plus élevée en raison d'un refroidissement moindre et la différence de température entre les gaz entrants et la matrice est réduite. En effet l'augmentation de la masse augmente le stockage possible d'énergie dans la matrice en SiSiC qui est très conductrice. On observe également que la taille plus petite des pores dans le cas C entraîne une vitesse d'écoulement plus élevée, ce qui conduit la flamme à se stabiliser plus loin de l'entrée (la zone de préchauffage est donc plus longue). L'efficacité du préchauffage passe alors de 43% dans le cas A à 63% dans le cas C.
- La production de gaz de synthèse est analysée en termes d'efficacité de conversion et des résultats similaires de 41 et 43% sont observées entre le cas A et le cas B. La température locale plus élevée de 200 K environ atteinte dans le cas C permet de produire des quantités plus importantes de gaz de synthèse, ce qui se traduit par un gain d'efficacité de conversion de 10% par rapport au cas B.
- Une géométrie étagée avec une densité de pores décroissante a été simulée pour la première fois avec des résultats prometteurs en termes d'efficacité de préchauffage et de production de gaz de synthèse. En effet, la large zone de préchauffage dans la partie dense en pores permet d'atteindre une efficacité de recirculation de 59% de la chaleur dégagée par la combustion alors que la conversion du méthane en gaz de synthèse est environ 20% plus élevée que dans les cas A et B.

- Les observations de la combustion à l'échelle du pore dans le cas de la géométrie variable (cas D) ont révélé que la grande quantité de H_2 produite localement était ensuite atténuée et partiellement consommée par la réaction RWGS.
- La production de trois principaux précurseurs de suie est significativement réduite lors de la combustion du mélange riche dans la géométrie étagée. La forme allongée des cellules de la matrice forme une zone post-flamme plus grande favorisant l'oxydation des espèces carbonées.

RECOMMANDATIONS

Cette étude numérique s'inscrit dans le développement de matériaux imprimables par fabrication additive utilisable en CMP. Elle met en avant les paramètres géométriques importants pour favoriser la production de syngas. Néanmoins, une confrontation des résultats obtenus via le modèle présenté dans cette étude avec des données expérimentales issues d'analyses conduites sur des géométries identiques est requise.

La géométrie proposée dans cette étude repose sur des mailles en diamant, mais d'autres géométries sont envisageables. On trouve par exemple les mailles cubique ou hexagonale qui pourraient remplir ce rôle. L'idée est dans tous les cas de maximiser le transfert de chaleur dans la zone de préchauffage en augmentant le stockage d'énergie et/ou en augmentant la densité de pores pour augmenter la surface de contact.

La position de la flamme est un paramètre important pour augmenter la taille de la zone de préchauffage, mais en évitant que la flamme s'établisse trop près de la sortie du brûleur. L'idée est alors de déterminer la position optimale autrement dit, dans quelle cellule la réaction doit avoir lieu pour favoriser la production de syngas tout en permettant l'oxydation des polluants. Une approche pourrait être de développer un contrôleur ajustant la vitesse d'entrée pour stabiliser la flamme toujours à cette position.

Le mécanisme réactionnel utilisé dans cette étude est le Gri-Mech 1.2 optimisé pour la combustion des petits hydrocarbures comme le méthane. L'étude d'un autre carburant peut néanmoins demander un mécanisme plus complet et donc des travaux exploratoires dans ce domaine. Une approche sur la production de suies peut également être envisagée pour permettre de comprendre les limites de la combustion riche.

Le matériau solide utilisé est le carbure de silicium SiSiC avec des propriétés adaptées pour les conditions extrêmes de températures rencontrées dans le brûleur. D'autres matériaux sont envisageables pour maximiser les transferts thermiques et favoriser le stockage d'énergie dans

la matrice solide. Les propriétés physico-thermiques du matériau sont supposées constantes ici, mais l'utilisation d'un modèle dépendant de la température peut améliorer la précision de la température atteinte par le solide.

LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Abdoulmoumine, N., Adhikari, S., Kulkarni, A., & Chattanathan, S. (2015). A review on biomass gasification syngas cleanup. *Applied Energy*, 155, 294-307. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.05.095>
- Abdul Mujeebu, M. (2016). Hydrogen and syngas production by superadiabatic combustion – A review. *Applied Energy*, 173, 210-224. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.04.018>
- Agrafiotis, C., von Storch, H., Roeb, M., & Sattler, C. (2014). Solar thermal reforming of methane feedstocks for hydrogen and syngas production—A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 29, 656-682. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.08.050>
- Amirante, R., Distaso, E., Tamburrano, P., & Reitz, R. D. (2017). Laminar flame speed correlations for methane, ethane, propane and their mixtures, and natural gas and gasoline for spark-ignition engine simulations. *International Journal of Engine Research*, 18(9), 951-970. <https://doi.org/10.1177/1468087417720018>
- Banerjee, A., Kundu, P., Gnatenko, V., Zelepouga, S., Wagner, J., Chudnovsky, Y., & Saveliev, A. (2020). NO_x Minimization in Staged Combustion Using Rich Premixed Flame in Porous Media. *Combustion Science and Technology*, 192(9), 1633-1649. <https://doi.org/10.1080/00102202.2019.1622532>
- Banerjee, A., & Paul, D. (2021). Developments and applications of porous medium combustion : A recent review. *Energy*, 221, 119868.
- Barra, A. J., Diepvens, G., Ellzey, J. L., & Henneke, M. R. (2003). Numerical study of the effects of material properties on flame stabilization in a porous burner. *Combustion and Flame*, 134(4), 369-379.
- Barra, A. J., & Ellzey, J. L. (2004). Heat recirculation and heat transfer in porous burners. *Combustion and Flame*, 137(1-2), 230-241. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.02.007>
- Bear, J. (1988). *Dynamics of fluids in porous media*. Courier Corporation.
- Bedoya, C. (2016). *Stationary Flames within Porous Inert Media*. <https://doi.org/10.5445/IR/1000052139>

- Bedoya, C., Dinkov, I., Habisreuther, P., Zarzalis, N., Bockhorn, H., & Parthasarathy, P. (2015). Experimental study, 1D volume-averaged calculations and 3D direct pore level simulations of the flame stabilization in porous inert media at elevated pressure. *Combustion and Flame*, 162(10), 3740-3754.
- Bentaib, A., Meynet, N., & Bleyer, A. (2015). Overview on hydrogen risk research and development activities: Methodology and open issues. *Nuclear Engineering and Technology*, 47(1), 26-32. <https://doi.org/10.1016/j.net.2014.12.001>
- Bharadwaj, S. S., & Schmidt, L. D. (1995). Catalytic partial oxidation of natural gas to syngas. *Fuel Processing Technology*, 42(2-3), 109-127. [https://doi.org/10.1016/0378-3820\(94\)00098-E](https://doi.org/10.1016/0378-3820(94)00098-E)
- Billerot, P.-L. (2018). *Étude numérique de l'écoulement à froid et à chaud dans un brûleur poreux*. École de technologie supérieure.
- Billerot, P.-L., Dufresne, L., Lemaire, R., & Seers, P. (2020). 3D CFD analysis of a diamond lattice-based porous burner. *Energy*, 207, 118160. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118160>
- Bloshanskaya, L., Ibragimov, A., Siddiqui, F., & Soliman, M. Y. (2017). productivity index for darcy and pre-/post-darcy flow (analytical approach). *Journal of Porous Media*, 20(9), 769-786. <https://doi.org/10.1615/JPorMedia.v20.i9.10>
- Boettcher, K. E., Fischer, M.-D., Neumann, T., & Ehrhard, P. (2022). Experimental investigation of the pre-Darcy regime. *Experiments in Fluids*, 63(2), 1-18.
- Bristol, U. of. (s. d.). *School of Chemistry | School of Chemistry | University of Bristol*. University of Bristol. Consulté 15 juillet 2022, à l'adresse <http://www.bris.ac.uk/chemistry/>
- Caldeira, A. B., & Susantez, Ç. (2020). A simplified numerical approach to hydrogen and hydrocarbon combustion in single and double-layer porous burners. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(60), 35235-35245. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.04.169>
- Chae, H. J., Kim, J.-H., Lee, S. C., Kim, H.-S., Jo, S. B., Ryu, J.-H., Kim, T. Y., Lee, C. H., Kim, S. J., Kang, S.-H., Kim, J. C., & Park, M.-J. (2020). Catalytic Technologies for CO Hydrogenation for the Production of Light Hydrocarbons and Middle Distillates. *Catalysts*, 10(1), 99. <https://doi.org/10.3390/catal10010099>

- Chen, B., Liu, Y., Liu, K., & Che, D. (2011). Second law analyses on oxy-fuel combustion of gaseous fuels. *International Journal of Exergy*, 9(3), 319. <https://doi.org/10.1504/IJEX.2011.043040>
- Chen, Y., Wang, N., Ola, O., Xia, Y., & Zhu, Y. (2021). Porous ceramics: Light in weight but heavy in energy and environment technologies. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 143, 100589. <https://doi.org/10.1016/j.mser.2020.100589>
- Ciliberti, C., Biundo, A., Albergo, R., Agrimi, G., Braccio, G., de Bari, I., & Pisano, I. (2020). Syngas Derived from Lignocellulosic Biomass Gasification as an Alternative Resource for Innovative Bioprocesses. *Processes*, 8(12), 1567. <https://doi.org/10.3390/pr8121567>
- Cui, X., & Kær, S. K. (2020). A comparative study on three reactor types for methanol synthesis from syngas and CO₂. *Chemical Engineering Journal*, 393, 124632. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.124632>
- Dai, H., Zhu, H., Dai, H., Song, Z., Wang, Z., He, S., & Wang, X. (2021). Syngas production by methane-rich combustion in a divergent burner of porous media. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(45), 23279-23291. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.160>
- Darcy, H. (1856). *Les fontaines publiques de la ville de Dijon : Exposition et application ...* Victor Dalmont.
- Dhal, G. C., Mohan, D., & Prasad, R. (2017). Preparation and application of effective different catalysts for simultaneous control of diesel soot and NO_x emissions: An overview. *Catalysis Science & Technology*, 7(9), 1803-1825.
- Dinkov, I., Habisreuther, P., & Bockhorn, H. (2015). *Direct pore level simulation of premixed gas combustion in porous inert media using detailed chemical kinetics*.
- Dodson, C. T. J., & Sampson, W. W. (2000). Flow Simulation in Stochastic Porous Media. *simulation*, 74(6), 351-358. <https://doi.org/10.1177/003754970007400604>
- Dong, Y., Wang, F., Zhang, Y., Shi, X., Zhang, A., & Shuai, Y. (2022). Experimental and numerical study on flow characteristic and thermal performance of macro-capsules phase change material with biomimetic oval structure. *Energy*, 238, 121830. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.121830>

- Drayton, M. K., Saveliev, A. V., Kennedy, L. A., Fridman, A. A., & Li, Y.-E. (David). (1998). Syngas production using superadiabatic combustion of ultra-rich methane-air mixtures. *Symposium (International) on Combustion*, 27(1), 1361-1367. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(98\)80541-9](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(98)80541-9)
- Du Plessis, P., Montillet, A., Comiti, J., & Legrand, J. (1994). Pressure drop prediction for flow through high porosity metallic foams. *Chemical Engineering Science*, 49(21), 3545-3553. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(94\)00170-7](https://doi.org/10.1016/0009-2509(94)00170-7)
- EngiCer. (s. d.). *Material Data Sheet: SiSiC*.
- Ergun, S., & Orning, A. A. (1949). Fluid Flow through Randomly Packed Columns and Fluidized Beds. *Industrial & Engineering Chemistry*, 41(6), 1179-1184. <https://doi.org/10.1021/ie50474a011>
- Fan, M.-S., Abdullah, A. Z., & Bhatia, S. (2009). Catalytic Technology for Carbon Dioxide Reforming of Methane to Synthesis Gas. *ChemCatChem*, 1(2), 192-208. <https://doi.org/10.1002/cctc.200900025>
- Fand, R. M., Kim, B. Y. K., Lam, A. C. C., & Phan, R. T. (1987). Resistance to the Flow of Fluids Through Simple and Complex Porous Media Whose Matrices Are Composed of Randomly Packed Spheres. *Journal of Fluids Engineering*, 109(3), 268-273. <https://doi.org/10.1115/1.3242658>
- Fay, M., Dhamrat, R., & Ellzey*, J. L. (2005). Effect of porous reactor design on conversion of methane to hydrogen. *Combustion science and technology*, 177(11), 2171-2189.
- Fee, C. (2017). 3D-printed porous bed structures. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 18, 10-15. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2017.07.003>
- Fernández-Galisteo, D., Fernández-Tarrazo, E., Jiménez, C., & Kurdyumov, V. N. (2019). Analysis of an idealized counter-current microchannel-based reactor to produce hydrogen-rich syngas from methanol. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(42), 23807-23820. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.07.098>
- Fidalgo, B., & Menéndez, J. Á. (2011). Carbon Materials as Catalysts for Decomposition and CO₂ Reforming of Methane: A Review. *Chinese Journal of Catalysis*, 32(1-2), 207-216. [https://doi.org/10.1016/S1872-2067\(10\)60166-0](https://doi.org/10.1016/S1872-2067(10)60166-0)

- Fiore, M., Magi, V., & Viggiano, A. (2020). Internal combustion engines powered by syngas: A review. *Applied Energy*, 276, 115415. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2020.115415>
- Frenklach, M., Wang, H., Goldenberg, M., Smith, G., & Golden, D. (1995). *Gri-mech: An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion. Topical report, september 1992-august 1995*. SRI International, Menlo Park, CA (United States).
- Ghoneim, S. A., El-Salamony, R. A., & El-Temtamy, S. A. (2016). Review on Innovative Catalytic Reforming of Natural Gas to Syngas. *World Journal of Engineering and Technology*, 04(01), 116-139. <https://doi.org/10.4236/wjet.2016.41011>
- Göransson, K., Söderlind, U., He, J., & Zhang, W. (2011). Review of syngas production via biomass DFBGs. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15(1), 482-492. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2010.09.032>
- Hashemi, S. M., & Hashemi, S. A. (2017). Flame stability analysis of the premixed methane-air combustion in a two-layer porous media burner by numerical simulation. *Fuel*, 202, 56-65.
- Hayashi, T. C., Malico, I., & Pereira, J. C. F. (2004). Three-dimensional modelling of a two-layer porous burner for household applications. *Computers & structures*, 82(17-19), 1543-1550.
- Hoda, S. N., Nassab, S. A. G., & Ebrahim, J. J. (2019). Three dimensional numerical simulation of combustion and heat transfer in porous radiant burners. *international journal of thermal sciences*, 145, 106024.
- Hsu, P.-F., Howell, J. R., & Matthews, R. D. (1993). *A numerical investigation of premixed combustion within porous inert media*.
- Jesús Rico, J., Patiño, D., Cid, N., & Pérez-Orozco, R. (2020). PM reduction and flame confinement in biomass combustion using a porous inert material. *Fuel*, 280, 118496. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118496>
- Jiaqiang, E., Xu, W., Ma, Y., Tan, D., Peng, Q., Tan, Y., & Chen, L. (2022). Soot formation mechanism of modern automobile engines and methods of reducing soot emissions: A review. *Fuel Processing Technology*, 235, 107373.

- Johnson, M. S. M. (1971). *NCG technical report no. 21 explosive excavation technology*.
- Julbe, A., Farrusseng, D., & Guizard, C. (2001). Porous ceramic membranes for catalytic reactors—Overview and new ideas. *Journal of Membrane Science*, 181(1), 3-20. [https://doi.org/10.1016/S0376-7388\(00\)00375-6](https://doi.org/10.1016/S0376-7388(00)00375-6)
- Kalisz, S., Pronobis, M., & Baxter, D. (2008). Co-firing of biomass waste-derived syngas in coal power boiler. *Energy*, 33(12), 1770-1778. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2008.08.001>
- Kandemir, T., Schuster, M. E., Senyshyn, A., Behrens, M., & Schlögl, R. (2013). The Haber-Bosch Process Revisited: On the Real Structure and Stability of “Ammonia Iron” under Working Conditions. *Angewandte Chemie International Edition*, 52(48), 12723-12726. <https://doi.org/10.1002/anie.201305812>
- Kaviany, M. (2012). *Principles of heat transfer in porous media*. Springer Science & Business Media.
- Kececioğlu, I., & Jiang, Y. (1994). Flow Through Porous Media of Packed Spheres Saturated With Water. *Journal of Fluids Engineering*, 116(1), 164-170. <https://doi.org/10.1115/1.2910229>
- Kennedy, L. A., & Saveliev, A. V. (1995). Superadiabatic Combustion in Porous Media: Wave Propagation, Instabilities, New Type of Chemical Reactor. *International Journal of Fluid Mechanics Research*, 22(2), 1-26. <https://doi.org/10.1615/InterJFluidMechRes.v22.i2.10>
- Koru, M. (2016). Determination of Thermal Conductivity of Closed-Cell Insulation Materials That Depend on Temperature and Density. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 41(11), 4337-4346. <https://doi.org/10.1007/s13369-016-2122-6>
- Lage, J. L., Antohe, B. V., & Nield, D. A. (1997). Two Types of Nonlinear Pressure-Drop Versus Flow-Rate Relation Observed for Saturated Porous Media. *Journal of Fluids Engineering*, 119(3), 700-706. <https://doi.org/10.1115/1.2819301>
- Law, C. K. (2006). *Combustion Physics*. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511754517>
- Leutenecker-Twelsiek, B., Klahn, C., & Meboldt, M. (2016). Considering part orientation in design for additive manufacturing. *Procedia Cirp*, 50, 408-413.

- Liu, H., Dong, S., Li, B.-W., & Chen, H.-G. (2010). Parametric investigations of premixed methane–air combustion in two-section porous media by numerical simulation. *Fuel*, 89(7), 1736-1742.
- Liu, Y., Ning, D., Fan, A., & Yao, H. (2016). Experimental and numerical investigations on flame stability of methane/air mixtures in mesoscale combustors filled with fibrous porous media. *Energy Conversion and Management*, 123, 402-409. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.06.058>
- Loukou, A., Frenzel, I., Klein, J., & Trimis, D. (2012). Experimental study of hydrogen production and soot particulate matter emissions from methane rich-combustion in inert porous media. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(21), 16686-16696. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.02.041>
- Loukou, A., Mendes, M. A. A., Frenzel, I., Pereira, J. M. C., Ray, S., Pereira, J. C. F., & Trimis, D. (2017). Experimental and numerical investigation of methane thermal partial oxidation in a small-scale porous media reformer. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(1), 652-663. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.11.062>
- Lv, P., Yuan, Z., Wu, C., Ma, L., Chen, Y., & Tsubaki, N. (2007). Bio-syngas production from biomass catalytic gasification. *Energy Conversion and Management*, 48(4), 1132-1139. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2006.10.014>
- Macdonald, I. F., El-Sayed, M. S., Mow, K., & Dullien, F. A. L. (1979). Flow through porous media the Ergun equation revisited. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 18(3), 199-208.
- Malalasekera, W., & Versteeg, H. K. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. Pearson Prentice Hall Upper Saddle River, NJ.
- Martinelli, M., Alhraki, N., Castro, J. D., Matamoros, M. E., & Jacobs, G. (2020). Water-gas shift: Effect of Na loading on Pt/m-zirconia catalysts for low-temperature shift for the production and purification of hydrogen. In *New Dimensions in Production and Utilization of Hydrogen* (p. 143-160). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819553-6.00006-4>
- McAllister, S., Chen, J.-Y., & Fernandez-Pello, A. C. (2011). *Fundamentals of combustion processes* (Vol. 302). Springer.

- Mujeebu, M. A., Abdullah, M. Z., Bakar, M. Z. A., Mohamad, A. A., Muhad, R. M. N., & Abdullah, M. K. (2009). Combustion in porous media and its applications – A comprehensive survey. *Journal of Environmental Management*, 90(8), 2287-2312. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2008.10.009>
- Mujeebu, M. A., Abdullah, M. Z., Mohamad, A. A., & Bakar, M. Z. A. (2010). Trends in modeling of porous media combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(6), 627-650. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2010.02.002>
- Nourbakhsh, H., Rahbar Shahrouzi, J., Ebrahimi, H., & Zamaniyan, A. (2020). Experimental study of ultra-rich thermal partial oxidation of methane using a reticulated porous structure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(22), 12298-12307. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.02.182>
- Nourbakhsh, H., Rahbar Shahrouzi, J., Ebrahimi, H., Zamaniyan, A., & Jafari Nasr, M. R. (2019). Experimental and numerical study of syngas production during premixed and ultra-rich partial oxidation of methane in a porous reactor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(60), 31757-31771. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.10.084>
- Pastore, A., & Mastorakos, E. (2011). Syngas production from liquid fuels in a non-catalytic porous burner. *Fuel*, 90(1), 64-76. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.08.003>
- Pedersenmjaanes, H., Chan, L., & Mastorakos, E. (2005). Hydrogen production from rich combustion in porous media. *International Journal of Hydrogen Energy*, 30(6), 579-592. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2004.05.006>
- Ripoll, N., & Toledo, M. (2021). Hydrogen and syngas production from methane-acetylene rich combustion in inert porous media burner. *Results in Engineering*, 12, 100287.
- Rostrup-Nielsen, J. R. (2002). Syngas in perspective. *Catalysis Today*, 71(3-4), 243-247. [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(01\)00454-0](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(01)00454-0)
- Russell, T. F. (1989). Stability analysis and switching criteria for adaptive implicit methods based on the CFL condition. *SPE Symposium on Reservoir Simulation*.
- Salhi, N., Boulahouache, A., Petit, C., Kiennemann, A., & Rabia, C. (2011). Steam reforming of methane to syngas over NiAl₂O₄ spinel catalysts. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(17), 11433-11439. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.11.071>

- Samiran, N. A., Jaafar, M. N. M., Ng, J.-H., Lam, S. S., & Chong, C. T. (2016). Progress in biomass gasification technique – With focus on Malaysian palm biomass for syngas production. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 62, 1047-1062. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.04.049>
- Samoilenko, M., Seers, P., Terriault, P., & Brailovski, V. (2019). Design, manufacture and testing of porous materials with ordered and random porosity: Application to porous medium burners. *Applied Thermal Engineering*, 158, 113724. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2019.113724>
- Santos, R. G. dos, & Alencar, A. C. (2020). Biomass-derived syngas production via gasification process and its catalytic conversion into fuels by Fischer Tropsch synthesis: A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(36), 18114-18132. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.07.133>
- Shahnazari, M. R., Moosavi, M. H., & Saberi, A. (2020). Numerical and experimental investigation of partial oxidation of methane in a porous media to achieve optimum hydrogen production. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 42(5), 625-640. <https://doi.org/10.1080/15567036.2019.1588426>
- Shamey, R., & Zhao, X. (Éds.). (2014). 3—Dye transport in fluid systems. In *Modelling, Simulation and Control of the Dyeing Process* (p. 54-81). Woodhead Publishing. <https://doi.org/10.1533/9780857097583.54>
- Shi, J., Kong, X., Lv, J., Mao, M., & Dan, Z. (2022). Effect of heat loss on the syngas production by fuel-rich combustion in a divergent two-layer burner. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(34), 15270-15281. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.03.042>
- Shi, J., Mao, M., Li, H., Liu, Y., & Lv, J. (2020a). A pore level study of syngas production in two-layer burner formed by staggered arrangement of particles. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(3), 2331-2340. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.017>
- Shi, J., Mao, M., Li, H., Liu, Y., & Lv, J. (2020b). A pore level study of syngas production in two-layer burner formed by staggered arrangement of particles. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(3), 2331-2340. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.017>

- Shi, X., Wang, F., Cheng, Z., Liang, H., Dong, Y., & Chen, X. (2021). Numerical analysis of the biomimetic leaf-type hierarchical porous structure to improve the energy storage efficiency of solar driven steam methane reforming. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(34), 17653-17665. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.02.171>
- Shi, X., Xun, Y., Dong, Y., Wang, F., Zhang, X., & Cheng, Z. (2022). Analysis of biomimetic hierarchical porous structure regulating radiation field to improve solar thermochemical performance based on minimum Gibbs free energy. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(5), 2832-2845. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.246>
- Shin, Y., & Kim, Y. (2014). Numerical modeling for flame dynamics and combustion processes in a two-sectional porous burner with a detailed chemistry. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 28(11), 4797-4805.
- Simcenter STAR-CCM+ (13.06.012). (2021). Siemens gmbh.
- Sobhani, S., Muhunthan, P., Boigné, E., Mohaddes, D., & Ihme, M. (2021). Experimental feasibility of tailored porous media burners enabled via additive manufacturing. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4), 6713-6722. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.120>
- Speight, J. G. (2015). Gasification processes for syngas and hydrogen production. In *Gasification for Synthetic Fuel Production* (p. 119-146). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-85709-802-3.00006-0>
- Stoots, C. M., O'Brien, J. E., Herring, J. S., & Hartvigsen, J. J. (2009). Syngas Production via High-Temperature Coelectrolysis of Steam and Carbon Dioxide. *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, 6(1), 011014. <https://doi.org/10.1115/1.2971061>
- Subramani, V., & Gangwal, S. K. (2008). A review of recent literature to search for an efficient catalytic process for the conversion of syngas to ethanol. *Energy & fuels*, 22(2), 814-839.
- Sun, Y., Li, R., Yang, T., Kai, X., & He, Y. (2013). Gasification of biomass to hydrogen-rich gas in fluidized beds using porous medium as bed material. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(33), 14208-14213. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.08.096>

- Talukdar, P., Mishra, S. C., Trimis, D., & Durst, F. (2004). Heat transfer characteristics of a porous radiant burner under the influence of a 2-D radiation field. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84(4), 527-537.
- Toledo, M., Bubnovich, V., Saveliev, A., & Kennedy, L. (2009). Hydrogen production in ultrarich combustion of hydrocarbon fuels in porous media. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(4), 1818-1827. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.12.001>
- Toledo, M., Gracia, F., Caro, S., Gómez, J., & Jovicic, V. (2016). Hydrocarbons conversion to syngas in inert porous media combustion. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(14), 5857-5864. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.02.065>
- Tosco, T., Marchisio, D. L., Lince, F., & Sethi, R. (2013). Extension of the Darcy–Forchheimer Law for Shear-Thinning Fluids and Validation via Pore-Scale Flow Simulations. *Transport in Porous Media*, 96(1), 1-20. <https://doi.org/10.1007/s11242-012-0070-5>
- Trimis, D., & Durst, F. (1996). Combustion in a porous medium-advances and applications. *Combustion science and technology*, 121(1-6), 153-168.
- Tsodikov, M. V., Fedotov, A. S., Antonov, D. O., Uvarov, V. I., Bychkov, V. Y., & Luck, F. C. (2016). Hydrogen and syngas production by dry reforming of fermentation products on porous ceramic membrane-catalytic converters. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(4), 2424-2431. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.11.113>
- Tu, T., & Jiang, G. (2018). SiC reticulated porous ceramics by 3D printing, gelcasting and liquid drying. *Ceramics International*, 44(3), 3400-3405. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.11.133>
- Turns, S. R. (2012). *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill.
- Vahidhosseini, S. M., Esfahani, J. A., & Kim, K. C. (2020). Cylindrical porous radiant burner with internal combustion regime: Energy saving analysis using response surface method. *Energy*, 207, 118231. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118231>
- Vahidhosseini, S. M., Esfahani, J. A., & Kim, K. C. (2021). Assessment of a cylindrical porous radiant burner with internal combustion regime for sustainable energy: Numerical analysis of the radiant efficiency and NO production. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 43, 100974. <https://doi.org/10.1016/j.seta.2020.100974>

- Vahidhosseini, S. M., Esfahani, J. A., & Kim, K. C. (2022). Experimental study on the radiative heat transfer in a multi-hole porous radiant burner with internal combustion regime. *Applied Thermal Engineering*, 201, 117732. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2021.117732>
- Vandadi, V., & Park, C. (2018). Analytical solutions of superadiabatic filtration combustion. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 117, 740-747. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.10.038>
- Villamena, F. A. (2017). Chemistry of Reactive Species. In *Reactive Species Detection in Biology* (p. 13-64). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-420017-3.00005-0>
- Viskanta, R. (2011). modeling of combustion in porous inert media. *Special Topics & Reviews in Porous Media - An International Journal*, 2(3), 181-204. <https://doi.org/10.1615/SpecialTopicsRevPorousMedia.v2.i3.30>
- Vosloo, A. C. (2001). Fischer–Tropsch: A futuristic view. *Fuel Processing Technology*, 71(1-3), 149-155. [https://doi.org/10.1016/S0378-3820\(01\)00143-6](https://doi.org/10.1016/S0378-3820(01)00143-6)
- Voss, S., Mendes, M. A. A., Pereira, J. M. C., Ray, S., Pereira, J. C. F., & Trimis, D. (2013). Investigation on the thermal flame thickness for lean premixed combustion of low calorific H₂/CO mixtures within porous inert media. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(2), 3335-3342. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2012.06.044>
- Wang, M., Wan, Y., Guo, Q., Bai, Y., Yu, G., Liu, Y., Zhang, H., Zhang, S., & Wei, J. (2021). Brief review on petroleum coke and biomass/coal co-gasification: Syngas production, reactivity characteristics, and synergy behavior. *Fuel*, 304, 121517. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121517>
- Wang, S., Lu, G. Q. (Max), & Millar, G. J. (1996). Carbon Dioxide Reforming of Methane To Produce Synthesis Gas over Metal-Supported Catalysts: State of the Art. *Energy & Fuels*, 10(4), 896-904. <https://doi.org/10.1021/ef950227t>
- Wang, Y., Zeng, H., Shi, Y., & Cai, N. (2018). Methane partial oxidation in a two-layer porous media burner with Al₂O₃ pellets of different diameters. *Fuel*, 217, 45-50. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.12.088>
- Weclas, M. (2010). Potential of Porous-Media Combustion Technology as Applied to Internal Combustion Engines. *Journal of Thermodynamics*, 2010, 1-39. <https://doi.org/10.1155/2010/789262>

- Wilhelm, D. J., Simbeck, D. R., Karp, A. D., & Dickenson, R. L. (2001). Syngas production for gas-to-liquids applications: Technologies, issues and outlook. *Fuel Processing Technology*, 71(1-3), 139-148. [https://doi.org/10.1016/S0378-3820\(01\)00140-0](https://doi.org/10.1016/S0378-3820(01)00140-0)
- Wong, K. V., & Hernandez, A. (2012). A review of additive manufacturing. *International scholarly research notices*, 2012.
- Wood, S., & Harris, A. T. (2008). Porous burners for lean-burn applications. *Progress in energy and combustion science*, 34(5), 667-684.
- Wu, Y., Modica, V., Rossow, B., & Grisch, F. (2016). Effects of pressure and preheating temperature on the laminar flame speed of methane/air and acetone/air mixtures. *Fuel*, 185, 577-588. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.07.110>
- Wu, Z., Wang, J., Xie, B., Yang, J., & Wang, Q. (2021). Methane steam reforming with axial variable diameter particle structures in grille-sphere composite packed bed: A numerical study of hydrogen production performance. *Energy Conversion and Management*, 240, 114163.
- Yakovlev, I., & Zambalov, S. (2019). Three-dimensional pore-scale numerical simulation of methane-air combustion in inert porous media under the conditions of upstream and downstream combustion wave propagation through the media. *Combustion and Flame*, 209, 74-98. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.07.018>
- Zeng, H., Wang, Y., Shi, Y., Ni, M., & Cai, N. (2017). Syngas production from CO₂/CH₄ rich combustion in a porous media burner: Experimental characterization and elementary reaction model. *Fuel*, 199, 413-419. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.03.003>
- Zohreh Ravaghi-Ardebili, Flavio Manenti, Carlo Pirola, Fiona Soares, Michele Corbetta, Sauro Pierucci, & Eliseo Ranzi. (2014). Influence of the effective parameters on h₂/co ratio of syngas at low-temperature gasification. *Chemical Engineering Transactions*, 37, 253-258. <https://doi.org/10.3303/CET1437043>