

الجمهورية
الجزائرية الديمقراطية
الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جامعة أبي بكر بلقايد - تلمسان

Université Aboubakr Belkaïd – Tlemcen –
Faculté de TECHNOLOGIE



THESE

Présentée pour l'obtention du **grade de DOCTORAT LMD**

En : Génie Mécanique

Spécialité : Energétique et thermique appliquée

Par : Darfilal Djamal

Sujet

**Étude théorique et numérique d'un réacteur solaire de production
d'hydrogène par cycle thermochimique**

Soutenue publiquement, le 04/05/2019, devant le jury composé de :

M KORTI NABIL	Professeur	Univ. Tlemcen	Président
M SELADJI CHAKIB	Professeur	Univ. Tlemcen	Directeur de thèse
M RAMCHANDRA BHANDARI	Professeur	Univ. ITT Köln Allemagne	Co- Directeur de thèse
M SAIM RACHID	Professeur	Univ. Tlemcen	Examineur 1
M BOUKLI HACENE FOUAD	MCA	E.S.S.A Tlemcen	Examineur 2



جامعة أبو بكر بلقايد

ⵜⴰⵎⴰⵏⴻⵜ ⵏ ⵓⵎⵓⵔ ⵏ ⵜⴰⵎⴰⵏⴻⵜ

UNIVERSITY OF TLEMCEN



UNITED NATIONS
UNIVERSITY

DÉDIÉ:

A l'âme de mon père Mohammed ;

A ma mère Djamila, à qui je dois la réussite, pour l'éducation qu'elle m'a prodigué depuis mon enfance ;

A mon épouse Salihanur pour ses sacrifices sa compréhension et la patience ;

À mon frère Mhammed et à ma sœur Wafaa ;

REMERCIEMENTS

Les travaux de recherches présentés dans ce mémoire ont été menés à l'Université De Tlemcen au laboratoire Energétique et Thermique Appliquée (ETAP), au sein de l'équipe « Transfert de Masse et d'Énergie dans les milieux hétérogènes ». Ce projet a été réalisé en coopération avec « Institute for Technology and Resources Management in the Tropics and Subtropics ITT» et l'Université des Nations Unies dans le cadre du projet WESA au profit de l'Université Panafricaine (PAUWES institut);

Je tiens à remercier très particulièrement mes superviseurs Les professeurs SELADJI Chakib et BHANDARI Ramchandra pour leur précieux soutien, leur patience, leurs conseils et leur compréhension tout au long de mon doctorat. Je remercie également les membres du jury M. KORTI NABIL, M. SAIM RACHID, M. BOUKLI HACENE FOUAD pour avoir accepté d'examiner ce mémoire.

Un remerciement particulier à tous mes collègues du laboratoire à qui j'ai une dette énorme: M. BENAMAR Benameur, M. BENDERMEEL Othman, M. FRAINE Youssef, M.RACHEDI Khouiled, pour leur collaboration, leurs disponibilités et leurs enthousiasmes pour aider. Merci au personnel de l'Université de Tlemcen et l'Université des Nations Unies pour leur collaboration durant mes études.

المخلص

الاحتياجات الطاقية المتزايدة الضرورية لمواكبة الفقرة الاقتصادية صارت تحديا حقيقيا للجزائر خصوصا, ولدول الاتحاد الاوربي المجاورة والتي تعاني من ازمة اقتصادية و طاقية حادة.

الحل لكل هذه التعقيدات, يكمن في استخدام الطاقة الشمسية المتوفرة, ولكن التحدي الاكبر للإنسانية في الوقت الحالي يتمثل في تخزين هذه الطاقة وتحويلها الى وقود قابل للتخزين والاستعمال.

واحدة من بين التكنولوجيات الواعدة, هي التحليل الكيميوحراري للماء, لأجل هذا اقترحنا في هذا البحث البدا في دراسة و تطوير نموذج مطور لمفاعل حراري بتقنية مبسطة مع امكانية انجازه في الجزائر.

خطوات البحث الرئيسية تتمثل في:

- اعداد بحث مرجعي يشمل اكبر عدد من المراجع المتوفرة للطرق الكيميوحراري الممكن استعمالها مع مصادر حرارية شمسية, مع الأخذ بعين الاعتبار كل الجوانب المؤثرة كنوع التكنولوجيا المستخدمة, التكلفة وايضا التأثير على البيئة.

- الدراسة النظرية للظاهرة الفيزيائية بكل جوانبها الحرارية و الديناميكية بغرض تحسين النموذج المقترح. النمذجة الرياضية والحل الرقمي المقترح مع الأخذ بعين الاعتبار الجانب التقني و الاقتصادي.

النتائج المتحصل عليها تؤكد فعالية استعمال بنية مسامية من كرات السيراميك كمستقبل/مفاعل لصناعة الهيدروجين الشمسي, نتائج المحاكات كانت جد مشجعة , التحليل سمح لنا بفهم السلوك الحراري للبنية المسامية المقترحة , تحت مختلف الظروف , ومنحت لنا القدرة على اتخاذ اجراءات لتحسين البنية المقترحة للمفاعل.

الكلمات المفتاحية : المفاعل الشمسي, انتاج الهيدروجين, الدورة الكيميوحرارية, النمذجة

ABSTRACT

The current energy needs associated with the need for economic recovery is a real challenge for Algeria as well as all European countries in crisis. These can find the answer in potentially available solar energy. However, the conversion of this energy into clean fuel is currently and in the near future one of the most important technological stakes for humanity. One of the technologies that represent a promising future is the water splitting by thermochemical cycle. For this, we propose to contribute to the study and the development of an improved solar reactor model that can be realized in Algeria. The research work consists of:

- The elaboration of a bibliographic research as wide as possible to allow the selection of an appropriate cycle adapted to a solar heat source; this approach will take into account several criteria (process, technology and environmental aspects).
- The theoretical study including thermal and thermodynamic aspects to allow the optimization of the process. Mathematical modeling and numerical resolution of the model including technical and economic aspects.

The results obtained confirm the feasibility of using a fixed bed based on ceramic balls as receiver / reactor for the production of solar hydrogen. The simulations results are very encouraging, the analysis allowed us to understand the thermal behavior of the proposed porous structure, under different conditions and offers a decisive help in optimizing the final structure of the reactor.

Keywords: solar reactor, hydrogen production, thermochemical cycle, modeling

RESUMÉ

Les besoins énergétiques actuels associés à la nécessité d'une relance économique est un véritable challenge pour l'Algérie ainsi que tous les pays européens en situation de crise. Ces derniers peuvent trouver la réponse dans l'énergie solaire abondante. Toutefois, la conversion de cette énergie en combustible propre représente actuellement et dans un futur proche l'un des enjeux technologiques des plus importants pour l'humanité. L'une des technologies prometteuses est la dissociation de l'eau par cycle thermochimique. Pour cela, nous nous proposons de contribuer à l'étude et au développement d'un modèle amélioré de réacteur solaire que l'on peut réaliser en Algérie. Le travail de recherche consiste en :

- L'élaboration d'une recherche bibliographique la plus large possible devant permettre la sélection d'un cycle approprié et adapté à une source de chaleur d'origine solaire, cette démarche va tenir compte de plusieurs critères (procédé, technologie, aspects environnementaux).
- L'Etude théorique incluant les aspects thermiques et thermodynamiques devra permettre l'optimisation du processus, la modélisation mathématique et résolution numérique du modèle incluant les aspects techniques et économiques.

Les résultats obtenus confirment la possibilité d'utiliser un lit fixe à base de billes en céramique comme récepteur/réacteur pour la production d'hydrogène solaire. Les résultats des simulations sont très encourageants, l'analyse nous a permis de bien comprendre le comportement thermique de la structure poreuse proposé, sous différentes conditions et offre une aide décisive en optimisant la structure final du réacteur.

Mots clés : réacteur solaire, production d'hydrogène, cycle thermochimique, modélisation

Tables des matières

Tables des matières	viii
Liste des Figures	xi
Liste des Tables	xv
Nomenclature.....	16
Introduction générale	19
CHAPITRE 1 : RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE.....	23
1.1 Introduction	24
1.2 Production d'hydrogène solaire par dissociation de l'eau.....	24
1.3 Efforts dans le développement des réacteurs.....	26
1.4 Modélisation mathématique des réacteurs solaires.....	33
1.4.1 Approche globale.....	33
1.4.2 Approche CFD.....	33
1.5 Conclusion.....	38
CHAPITRE 2: ECOULEMENT DE FLUIDE A TRAVERS UN REACTEUR SOLAIRE DE STRUCTURE POREUSE	40
2.1 Introduction	41
2.1.1 Structure poreuse pour réacteurs	41
2.2 La notion de porosité.....	44
2.3 Perméabilité	45
2.3.1 Equation de Darcy	45
2.3.2 Tortuosity	46
2.4 Formulation du problème	46
2.5 Hypothèses	49
2.6 Équations gouvernantes.....	51
2.6.1 Equation du mouvement	51
2.6.2 Equation d'énergie.....	52
2.6.3 Réaction Thermochimique	55
2.7 Design du réacteur	56
2.1 Caractéristiques thermiques du réacteur :	57

2.3	Distribution du flux solaire.....	59
2.4	Stabilité chimique:	59
2.5	Procédé de fabrication du système.....	60
2.6	Conclusion:.....	67
CHAPITRE 3 : MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES MILIEUX POREUX UTILISANT ANSYS		
		68
3.1	Introduction	69
3.1.1	Équation de continuité et de mouvement	69
3.1.2	Equation d'énergie	71
3.1.3	Coefficients de viscosité et d'inertiel.....	73
3.1.4	Equation de la réaction.....	74
3.2	Méthodologie de la résolution	76
3.2.1	Les conditions aux limites.....	76
3.2.2	Méthode des volumes finis.....	77
3.2.3	Discrétisation UPWIND.....	78
3.2.4	Algorithme SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations). 78	
3.2.5	Critère de convergence :.....	80
3.2.6	Facteurs de la réaction:.....	80
3.3	Conclusion.....	81
CHAPITRE 4 RESULTATS ET DISCUSSION		
		83
4.1	Introduction	84
4.2	Test de maillage.....	84
4.3	Validation	84
4.4	Optimisation	91
4.5	Analyse des produits de la réaction thermochimique	95
4.6	L'effet du canal (Channeling).....	96
4.7	Montage expérimental.....	103
4.8	Conclusion:.....	107
Conclusion générale		108
Appendix A UDFs		110
Appendix B Publication		113
References.....		116

Liste des Figures

Figure 1 Consommation d'hydrogène par secteur industrielle	20
Figure 2 Réacteurs solaire : (A) Réacteur HYDROSOL 2, (B) Réacteur CR5, (C) Réacteur SOLARJET.....	28
Figure 3 Réacteurs Solaires: (A) Réacteur ZIRRUS ;(B) Réacteur 2G-RC5; (C) Réacteur GRAFSTRR.....	30
Figure 4: Géométrie du modèle de réacteur avec conditions aux limites	34
Figure 5 Comportement thermique du réacteur.....	35
Figure 6 Schéma en coupe du réacteur solaire	36
Figure 7 Comportement thermique des phases fluide et solide.....	37
Figure 8 Comportement thermique échelle 2 et 3.....	38
Figure 9 structure monolithique	42
Figure 10 structure en mousse	43
Figure 11 processus de fabrication 3DFD	43
Figure 12 billes en céramique	44
Figure 13 porosité	44
Figure 14 Conception du réacteur proposé.....	47
Figure 15 arrangement des billes d'un réacteur.....	47
Figure 16 le réacteur SOLZINC	48
Figure 17 billes en céramique	49
Figure 18 Design du réacteur.....	56
Figure 19 Simulateur solaire DLR.....	57
Figure 20 isolation propose pour le réacteur	58
Figure 21 l'orientation horizontale du réacteur.....	59
Figure 22 Céramique (SSiC)	60
Figure 23 3D model of the reactor.....	61
Figure 24 Matériaux de réacteur.....	62
Figure 25 Design du réacteur.....	63

Figure 26 Fenêtre en quartz.....	64
Figure 27 corps de réacteur	65
Figure 28 Disque d'ouverture.....	66
Figure 29 Présentation des conditions aux limites.....	76
Figure 30 méthode des volumes finis.....	77
Figure 31 Principe du schéma UPWIND	78
Figure 32 Algorithme SIMPLE	79
Figure 33 Maillage décalé	80
Figure 34 matériau de mousse céramique étudié par Zhiyong Wu et al.....	85
Figure 35 résultats numériques obtenus par Zhiyong Wu et al (distribution des températures pour les deux phases fluide et solide)	85
Figure 36 comparaison des résultats numérique et expérimental obtenus par Zhiyong Wu et al	86
Figure 37 validation du modèle (phase fluide).....	87
Figure 38 validation du modèle (phase solide).....	87
Figure 39 l'effet du diamètre de la bille sur le coefficient de perte d'inertie pour différents arrangements.....	88
Figure 40 l'effet du diamètre de la bille sur la perméabilité pour différents arrangements.....	89
Figure 41 l'effet du diamètre de la bille sur la surface d'échange	90
Figure 42 Comportement thermique (Phase fluide).....	91
Figure 43 Comportement thermique (Phase Solide).....	91
Figure 44 L'effet de la puissance solaire sure le comportement thermique pour la phase fluide	92
Figure 45 L'effet de la puissance solaire sure le comportement thermique pour la phase solide	92
Figure 46 l'effet de la vitesse sur le comportement thermique le long de l'axe de symétrie (phase fluide)	93
Figure 47 l'effet de la vitesse sur le comportement thermique le long de l'axe de symétrie (phase solide)	93
Figure 48 Comportement thermique, phase solide (arrangement triclinique).....	94
Figure 49 Comportement thermique, phase solide (arrangement cubique)	94
Figure 50 Comportement de la température du solide (S) avec et sans réaction de réduction	95
Figure 51 fraction molaire de l'oxygène	96
Figure 52 l'effet canalisation.....	97
Figure 53 l'effet de canalisation	98
Figure 54 Phase solide.....	99

Figure 55 phase fluide	99
Figure 56 deuxième cas: phase fluide	100
Figure 57 vecteur des vitesses	100
Figure 58 zoom sur les vecteurs de vitesse	101
Figure 59 la température solide pour le second cas	101
Figure 60 Phase fluide pour le troisième cas	102
Figure 61 temperature du solide (troisieme cas).....	102
Figure 62 Camera thermique testo 890	103
Figure 63 Swagelok fittings.....	105
Figure 64 experimental setup build materials.....	106

Liste des Tables

Table 1 Investissements dans les cycles thermochimiques solaire	25
Table 2 Résumé des développements expérimentaux des réacteurs solaires.	31
Table 3 Effet de l'arrangement sur la porosité	48
Table 4 Différents modèles pour le calcul du Coefficient de transfert de chaleur par convection.....	53
Table 5 données utilisées pour la réaction.....	81
Table 6 Propriétés des matériaux	81
Table 7 la première commande des équipements et connecteurs SWAGELOK.....	104
Table 8 la deuxième commande des équipement et connecteurs SWAGELOK.....	105

Nomenclature

Lettres latines

A_{fs}	surface d'échange entre la matrice solide et le fluide
C_E	Coefficient inertiel
C_1, C_2	Constant du modèle de turbulence
C_p	Chaleur spécifique
$D_{i,m}$	Coefficient de diffusion en masse pour l'espèce i
d_p	Diamètre de particule
d_s	Diamètre
E	Energie
$E_{a,h}$	Energie d'activation de la phase hydrolyse
$E_{a,r}$	Energie d'activation de la phase réduction
eff	Effective
f	Fluide
F	Force extérieur
G_i	Constante du modèle de turbulence k- ϵ
h_{fs}	Coefficient de transfert de chaleur par convection volumétrique

I	Tenseur
k_{eff}	Conductivité effective
$k_{o,h}$	Facteur pré-exponentiel de la phase hydrolyse
$k_{o,r}$	Facteur pré-exponentiel de la phase réduction
k_t	Energie cinétique de turbulence
k	Conductivité thermique
L	Longueur du lit
M_i	Masse moléculaire
P	Pression
Pr	Nombre de Prandtl
$R_{chem,i}$	terme source chimique correspond au taux de production net de l'espèce i
Re	Nombre de Reynolds
S	Terme de source volumétrique de chaleur
s	Solide
T	Température
v	Vitesse superficielle
v'	Fluctuation de vitesse
Y_i	fraction de masse locale de l'espèce i

Symboles grecs

α	Permeabilité
μ	Viscosité dynamique
ρ	Densité
ε	Taux de dissipation

ε_p

Porosité

$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$

Constante du modèle de turbulence k- ε

τ

Tenseur de contraintes

Introduction générale

La production d'hydrogène « vert » est jugée comme la technologie la plus prometteuse pour l'avenir car elle possède une capacité prodigieuse de réduction des gaz à effet de serre et autres polluants environnementaux (C_nH_m , NO_x , métaux lourds, radioactivité) émis par les systèmes d'énergétique actuel. On considère que les moteurs fonctionnant à l'hydrogène [1-3] peuvent réduire considérablement la dépendance aux sources de carburant non renouvelables [4]. Ainsi, l'utilisation de l'hydrogène comme vecteur de carburant alternatif ouvre la voie à la conversion potentielle de l'énergie du rayonnement solaire en énergie chimique stockable. Il est envisagé que l'hydrogène remplacera progressivement les ressources en énergie fossile de l'industrie automobile grâce à la technologie des piles à combustible. Il serait plus efficace comme carburant pour les moteurs à combustion interne avec des performances comparables, émettant seulement de la vapeur d'eau [4, 5].

Historiquement, on a observé une tendance à la dé-carbonisation des sources d'énergie, des combustibles solides aux combustibles liquides en passant par les gaz, du charbon au pétrole en passant par le gaz naturel, le rapport carbone/ hydrogène dans la molécule de chaque source d'énergie successive a diminué [6], ce qui confirme la tendance mondiale à l'utilisation de l'hydrogène comme source d'énergie future. On observe actuellement une croissance de la demande en hydrogène, avec des applications majeures dans la production d'ammoniac, la transformation du pétrole, la production pétrochimique, l'hydrogénation du pétrole et des graisses, la production d'engrais, les applications métallurgiques et l'industrie électronique [7] (Figure 1). Il est également prévu que l'utilisation de l'hydrogène comme carburant pour l'industrie automobile suscitera encore davantage la demande de carburant vert. Il est donc impératif d'étendre la capacité de production d'hydrogène existante en utilisant des sources d'énergie renouvelables, afin de répondre à la demande croissante. La figure suivante illustre la consommation d'hydrogène dans différentes applications[4].

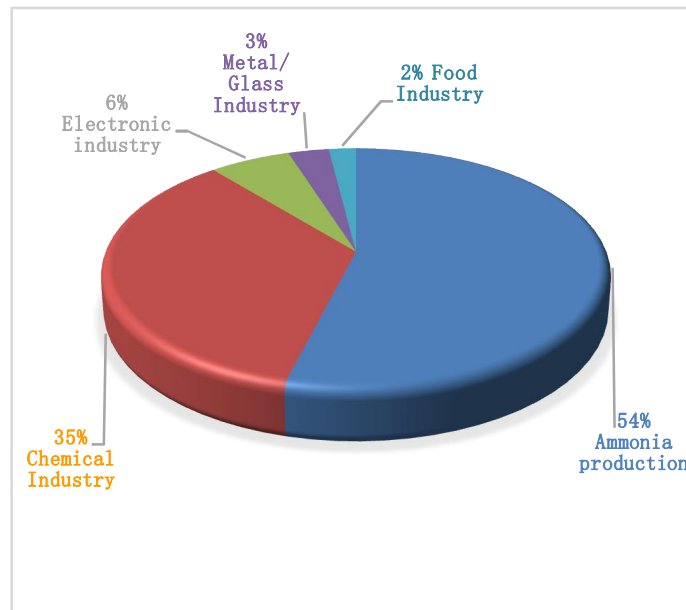


Figure 1 Consommation d'hydrogène par secteur industrielle

Afin de construire un réacteur solaire réalisable à faible coût, un réacteur à lit fixe à base de billes en céramique est proposé. Le corps de ce réacteur / récepteur est constitué de billes sphériques en carbure de silicium (SiC) recouvertes du matériau ferrite réactif.

L'idée d'étudier et d'analyser le récepteur / réacteur solaire à lit fixe est intéressante pour les raisons suivantes:

- Les billes / sphères sont peu onéreuses comparativement au structure monolithique et au structure mousse et peuvent remplir l'espace de la cavité sans problème de support périphérique ;
- Le procédé de couche lavis (wash-coating) est beaucoup plus facile à mettre en œuvre et garantit des structures avec une meilleure homogénéité par rapport aux autres structures poreuses existantes;

L'étude présente une approche de la modélisation mathématique d'un récepteur / réacteur solaire volumétrique consistant en une cavité d'absorption remplie de billes de céramique et irradiée depuis la face d'entrée du flux. Le comportement thermique du réacteur est examiné pour différents arrangements des billes, tandis qu'une comparaison avec des résultats expérimentaux

tiers est présentée. Le modèle de résolution proposé est un modèle 2D d'un milieu poreux homogène avec non-équilibre thermique du procédé (deux phases énergétiques fluide et solide).

La méthodologie employée pour cette étude est la suivante:

- Analyse théorique et numérique d'une nouvelle conception d'un réacteur solaire à lit fixe à base des billes céramique;
- Développement d'un modèle de calcul bidimensionnel d'un échangeur de chaleur à haute température et d'un décomposeur pour la production d'hydrogène, basé sur la dissociation de l'eau (water splitting) en oxygène et hydrogène par couples rédox ferrites. Basé sur ce modèle, la dynamique des fluides, le transfert de chaleur et les réactions chimiques sont étudiés;
- Réaliser une étude paramétrique du transfert de chaleur et de la décomposition chimique dans le but d'obtenir la conception optimale pouvant fournir des performances maximales tout en maintenant les pertes de charge dans les limites de conception.

Dans le premier chapitre, nous présenterons, en premier lieu, les différentes techniques de production d'hydrogène. En second lieu, nous résumerons les cycles thermochimiques existants et leurs applications expérimentales. En troisième lieu, nous citerons les réacteurs existants et en développement.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons les différentes structures poreuses à savoir la structure monolithique, Mouse, 3DFD, lit fixe. En second lieu nous présenterons des généralités sur les principaux paramètres d'un milieu poreux et les notions théoriques de base pour la compréhension du phénomène d'écoulement à travers une structure poreuse, ainsi que la description du problème physique étudié, sa modélisation mathématique, et les conditions aux limites adoptés. En troisième lieu, nous proposerons un nouveau design basé sur les billes en céramique.

Nous nous consacrerons dans Le troisième chapitre, à la résolution numérique de l'écoulement à travers la structure poreuse par le logiciel « ANSYS / FLUENT » 14.0 et à la présentation des formulations mathématiques. Les équations gouvernantes (continuité, quantité

de mouvement, énergie, espèces chimique), le modèle de turbulence, la méthodologie de résolution seront présentées.

Le quatrième chapitre de ce manuscrit sera réservé aux résultats et les discussions de l'étude paramétrique du réacteur. Les effets des différents paramètres thermo-physiques influents seront analysés.

CHAPITRE 1 : RECHERCHE
BIBLIOGRAPHIQUE

1.1 Introduction

Il existe trois voies principales pour la production d'hydrogène: les méthodes électrochimiques, thermochimiques et biologiques. L'une des méthodes les plus attrayantes pour la production d'hydrogène pourrait être la dissociation thermochimique de la molécule d'eau. Le processus de production d'hydrogène thermochimique nécessite uniquement de l'eau comme apport de matière et de la chaleur comme source d'énergie (plutôt que de l'électricité pour le procédé d'électrolyse). Les produits du processus sont H_2 et O_2 . Le processus lui-même comprend un ensemble de réactions chimiques qui a comme but la dissociation de la molécule d'eau H_2O [8]



La section suivante décrit brièvement les méthodes de production thermochimique d'hydrogène couplées à une source d'énergie solaire.

1.2 Production d'hydrogène solaire par dissociation de l'eau

L'énergie solaire potentiellement disponible est gigantesque. Sa collecte, puis sa conversion en combustible stockable tel que l'hydrogène, représentent des enjeux technologiques d'un intérêt majeur pour notre futur proche [9]. Il existe essentiellement trois méthodes et leurs combinaisons pour la production d'hydrogène solaire: photochimique, électrochimique et thermochimique [10, 11] Cette dernière est basé sur l'utilisation du rayonnement solaire concentré comme source d'énergie pour produire de l'hydrogène à partir de la transformation de sa matière première [4]. Il existe différentes voies de production thermochimiques d'hydrogène, à savoir le reformage à la vapeur [12-15], le craquage de gaz [16, 17] et la dissociation de l'eau [9, 18-20]. Plusieurs articles dans la littérature ont passé en revue les cycles thermochimiques existants de la production d'hydrogène [21-24] (Table 1). Les recherches sur les cycles

thermochimiques susceptibles de générer une production efficace d'hydrogène par dissociation de la molécule de l'eau ont été introduite à la fin des années 1960 par James E. Funk et RM Reinstrom [8, 25].

Table 1 Investissements dans les cycles thermochimiques solaire

Cycle Thermochimique	Projet	Investisseur
Cycles à base des ferrites;	Projet EU-FP5 HYDROSOL, Projet EU-FP6 HYDROSOL 2	APTL (GR), DLR (D), Johnson Matthey (UK), StobbeTech (DK), CIEMAT (E)
	-	CNRS-PROMES (F)
	Projet DOE	Sandia, NREL, U. of Colorado, Pinnacle West (USA)
	-	Tokyo Institute / Niigata U. (Japan)
Cycle ZnO/Zn ;	-	PSI/ETH (CH), U. of Minnesota (USA)
	Projet EU-FP5 SOLZINC	PSI/ETH (CH), CNRS-PROMES (F), ScanArc (S)
	-	CNRS-PROMES (F)
	Projet DOE	Sandia, NREL, U. of Colorado, Pinnacle West (USA)
Cycle Sulfur iodine (SI);	Projet DOE	Sandia, NREL, U. of Colorado, Pinnacle West (USA)
	Projet EU-FP6 HYTHEC	CEA (F), DLR (D), ProSim (F), U. of Sheffield (UK), DIMI (I), Empresarios Agrupados (E)
	Projet EU-FP7 HCYCLES	DLR (D), CEA (France), ETH (CH), U. of Sheffield (UK), BoosTec (F), Empresarios Agrupados (E), APTL (GR), JRC (EU), ENEA (I), General Atomics (USA), Westinghouse (USA), JAEA (Japan), CSIRO (Australia)

Cycle Thermochimique	Projet	Investisseur
Cycles à base du cérium;	-	CNRS-PROMES (F)
Cycle UT3-;	-	ENEA (I)
Cycle SnO_2/SnO ;	-	CNRS-PROMES (F)
Cycle Hybrid sulfuric acid;	Projet EU-FP6 HYTHEC	CEA (F), DLR (D), ProSim (F), U. of Sheffield (UK), DIMI (I), Empresarios Agrupados (E)

James E. Funk [21] a été le premier à évaluer les besoins en énergie pour la production d'hydrogène à partir d'eau et la possibilité de la décomposition de l'eau via un cycle thermochimique haute température en deux étapes. Une évaluation détaillée des cycles thermochimique a été élaboré dans [22] par « Sandia National Laboratories ».

De plus de 350 cycles thermochimiques à plusieurs étapes initialement sélectionnés [22], 14 cycles sont jugés appropriés pour l'application solaire. Les cycles thermochimiques les plus prometteurs sont à base des ferrites, l'oxyde de zinc, l'oxyde d'étain et les sulfates d'iode. Un cycle semble attrayant pour la production d'hydrogène est la dissociation thermochimique solaire de l'eau en deux étapes. L'état de l'art de la «Thermochimie solaire» pour la dissociation de l'eau en hydrogène et oxygène en deux étapes est basé sur des réactions mettant en jeu des couples oxydoreducteurs, matériaux qui peuvent jouer comme dissociateurs de l'eau à certaines températures. En plus ce cycle implique des réactions moins complexes, utilisant des matériaux non corrosifs et non toxiques.

1.3 Efforts dans le développement des réacteurs

Récemment, des efforts énormes ont été déployés pour développer des systèmes de concentration dépassant les rapports de concentration 5000 soleils, capables d'atteindre des températures supérieures à 1400 ° C, nécessaires pour déclencher des réactions thermochimiques en deux étapes utilisant des couples oxydoreducteurs (les réacteurs fonctionnel sont présentés

dans les Figures 2,3). Le cycle thermochimique à base de ferrite a été le cycle le plus exploré [23], il a été étudié successivement dans plusieurs projets ; 100; 750 kW du projet HYDROSOL, HYDROSOL 2, HYDROSOL-PLANT. Les modèles des réacteurs monolithiques à base de SiC utilisé dans les projets cités précédemment est similaire au convertisseur catalytique utilisé pour traitement des gaz d'échappement des automobiles. Ces réacteurs sont construits à partir de monolithes en céramiques à canaux multiples qui absorbent le flux de rayonnement solaire [24]. Le cycle à base de ferrite a fait l'objet d'études approfondies dans les fours solaires des instituts de technologie de Tokyo [26] et des laboratoires nationaux Sandia [22, 27] avec réalisation des prototypes de réacteurs solaires développés localement.

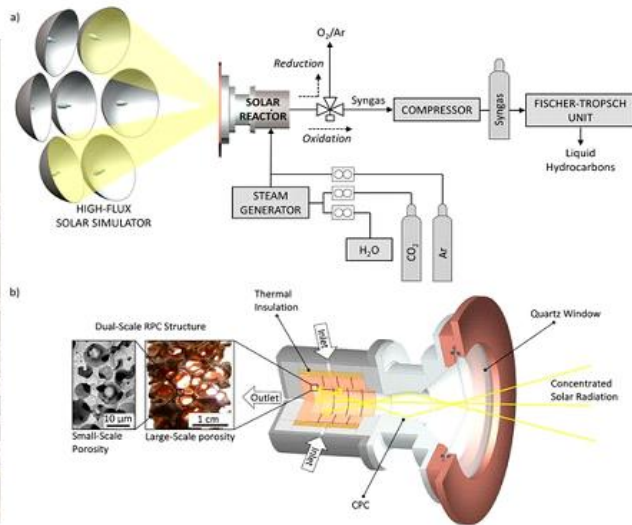
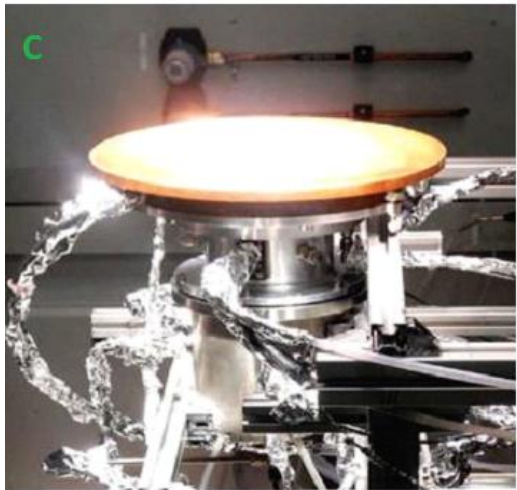
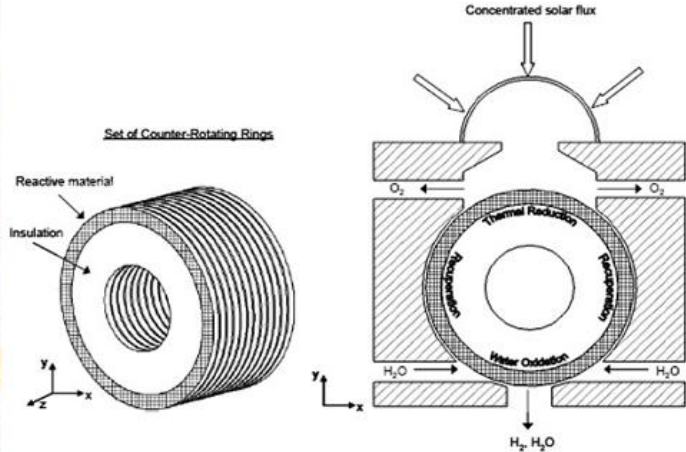
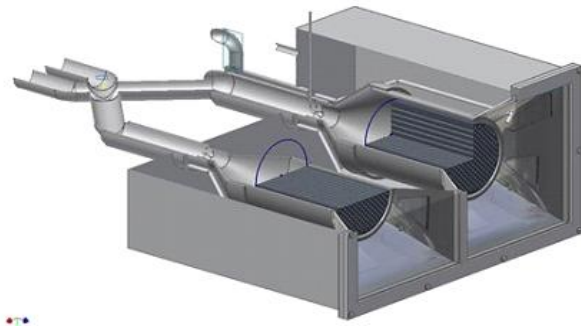


Figure 2 Réacteurs solaire : (A) Réacteur HYDROSOL 2, (B) Réacteur CR5, (C) Réacteur SOLARJET

Le cycle **ZnO/Zn** est l'un des cycles thermochimiques les plus étudiés. La réduction du **ZnO** en **Zn** et **O₂** à des températures élevées a été démontrée expérimentalement principalement à PSI, CNRS-PROMES et UD FCRL USA. La réaction se déroule comme suit:

Première Etape: régénération



Deuxième Etape: réaction



Pour ce procédé chimique, plusieurs réacteurs solaires ont été mis au point et testés dans les fours solaires du PSI, les réacteurs ZIRRUS et ROCA ont été démontrés à 10 kW de rayonnement solaire. La température atteint une valeur supérieure à 1900 K pour les deux réacteurs.

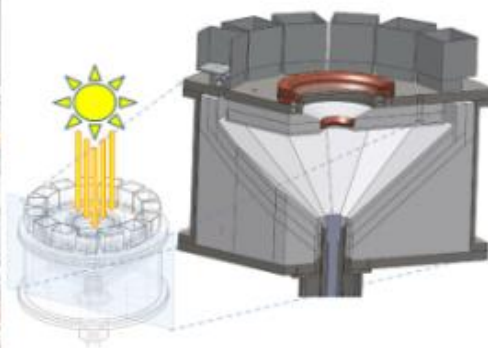
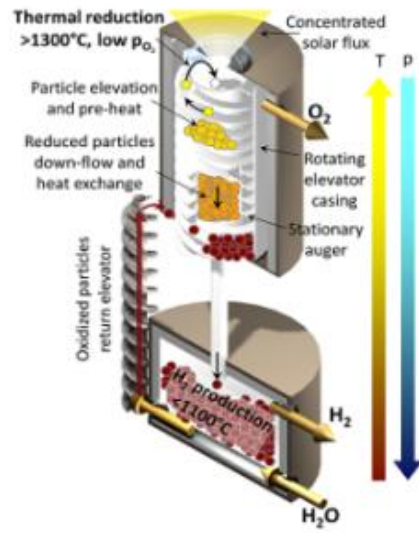
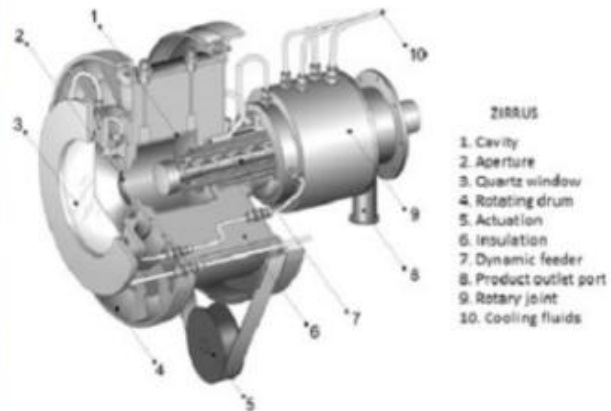
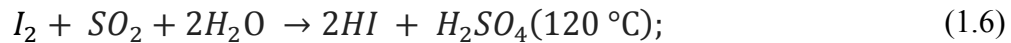


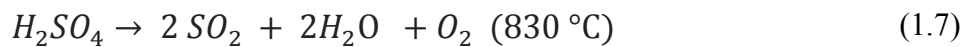
Figure 3 Réacteurs Solaires: (A) Réacteur ZIRRUS ;(B) Réacteur 2G-RC5; (C) Réacteur GRAFSTRR

Un autre cycle thermochimique prometteur de deux étapes est le cycle SnO_2/SnO . Des expériences ont montré que la réduction de SnO_2 peut être effectuée efficacement à 1773 K. Un prototype de réacteur solaire de 1 kW a été développé et testé avec succès à CNRS-PROMES. Le candidat de choix pour les cycles thermochimiques à plusieurs étapes est en réalité le cycle à trois étapes du SI (soufre-iode) basé sur la décomposition thermique de l'acide sulfurique à 1123 K.

Reaction de Bunsen



Distillation



Le cycle de SI a été mise en évidence dans les projets USA DOE, EU-FP6 HYTHEC et EU-FP7 HYCYCLES.

Pour résumé le tableau 2 présente les différents cycles thermochimiques avec leurs caractéristiques principales. Il y'a lieu de noter que le cycle aux ferrites présente de gros avantages en terme de performance et de températures d'activation beaucoup moins importantes.

Table 2 Résumé des développements expérimentaux des réacteurs solaires.

Installation d'essai	Réacteur	Puissance Solaire à l'entrée (kW)	Couples oxydoreducteurs	Température de Réaction K
Four solaire DLR [25, 28-30]	HYDROSOL	3	Cycles à base des ferrites;	1523
	HYDROSOL-II	100	Cycles à base des ferrites;	1473
	HYDROSOL-PLANT	750	Cycles à base des ferrites;	1473
	Rotary Kiln	22	Cycle Co_3O_4/CoO	1173

Installation d'essai	Réacteur	Puissance Solaire à l'entrée (kW)	Couples oxydoreducteurs	Température de Réaction K
Four solaire SNL [31]	CR5	9	Cycles à base du cérium;	1697
	2G/CR5	1	Cycles à base du cérium;	1873
Four solaire PSI Swiss [32]	GRAFSTRR	10	Cycle ZnO/Zn	1900
	SYNMET	5	Cycle ZnO/Zn	1600
	SYNPET5	5	Petcoke Gasification	1800
	TREMPER		MnO_2 , Fe_2O_3 et Fe_3O_4 reduction	2080
	ROCA	10	Cycle ZnO/Zn	2000
	ZIRRUS	10	Cycle ZnO/Zn	1900
Projet EU- project	SOLREF	300 – 500		1123
Four solaire CNRS-PROMES Odeillo, France.[33]	SOLHYCARB	5,10,50	Cracking of CH_4	2073
	Réacteur a cavité rotative	1	Cycle ZnO/Zn	1773
NREL Golden, Colorado [34]	Réacteur TUBULAR	10	Dissociation du NG	2000
ETH Zurich [35]	SOLARJET		Cycles à base du cérium;	1773
Institut de technologie de Tokyo [26]	Réacteur TTR	20	Cycles à base des ferrites;	1773
UD FCRL USA [36]	Réacteur GRAFSTRR	10	Cycle ZnO/Zn cycle	
IMDEA Energy solar		1	Mn_3O_4	1673
		2	Mn_2O_3 , Mn_3O_4 and $Ce O_2$	1723

1.4 Modélisation mathématique des réacteurs solaires

Plusieurs paramètres influent sur le comportement thermique des réacteurs solaires et donc, l'efficacité et le taux de production. Le contrôle expérimental de tous ces paramètres est une tâche très compliquée et coûteuse. Pour réduire le coût de l'expérimentales, de nombreux auteurs ont proposé des modèles numériques pour ces types de réacteur solaire. Ces modèles ont largement contribué au développement des réacteurs, et à la prédiction de leurs performances en augmentant l'efficacité et le rendement. Les techniques de modélisation permettent d'optimiser la forme et les paramètres thermo-physiques du réacteur. Diverses techniques de modélisation ont été utilisées pour analyser ces systèmes selon le choix technologique du système étudié.

1.4.1 Approche globale

De nombreux travaux basés sur l'approche globale, ont été publiés dans la littérature. Cette méthode est basée sur la résolution des bilans énergétiques élaborés au niveau des différents composants du système. Ces bilans utilisent souvent des équations semi-empiriques pour améliorer leurs précisions. Bien que cette méthode soit rapide, elle ne prend pas en compte un certain nombre de paramètres comme la géométrie et le transfert réel de la chaleur, Sa'ck et al. (2012) [37] ont présenté une étude numérique et expérimentale du processus de production d'hydrogène solaire utilisant une source solaire thermique générée par une tour solaire. Les auteurs ont utilisé la méthode des bilans énergétiques pour résoudre le problème. Ils ont obtenu un bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux.

1.4.2 Approche CFD

La mécanique computationnelle des fluides, plus souvent désignée par le terme anglais Computational Fluid Dynamics (CFD), utilise les équations gouvernantes résolues en utilisant des méthodes de discrétisation de l'ensemble du domaine calcul, en l'occurrence les méthodes MEF, MVF, MDF. Les profils de température de vitesse et de température sont obtenus en chaque point du système. Cette approche a été largement utilisée pour l'étude thermique des réacteurs solaires. Nous avons constaté que peu de travaux ont été publiés sur ce sujet. Un réacteur solaire de laboratoire destiné à la production d'oxydes métalliques a été conçu et simulé

par S. Abanades et al. (2007) [38]. Le réacteur solaire est constitué d'un récepteur à cavité rotative solaire dans lequel l'oxyde de métal réactif est injecté. L'oxyde peut être alimenté en continu dans la cavité sous forme de poudre et les produits gazeux réduits sont évacués du réacteur par un gaz inerte. Le profil de concentration des espèces chimiques ont été étudiées et modélisées à l'aide du code Fluent (Figure 4).

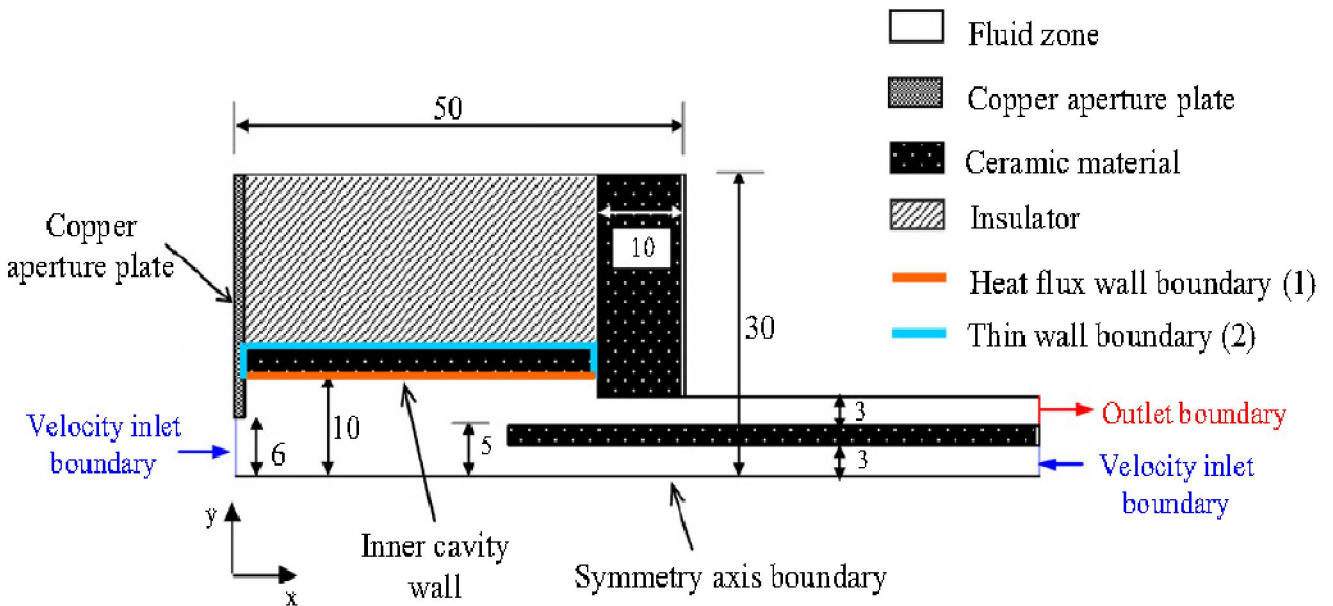


Figure 4: Géométrie du modèle de réacteur avec conditions aux limites

Deux diamètres de cavité (30 et 20 mm) ont été testés expérimentalement afin de montrer l'influence de la température sur le rendement en Zn. La caractérisation des produits (par rayons X) a montré que presque aucun zinc n'était produit lorsqu'on utilisait un diamètre interne de 30 mm. car la température à l'intérieur de la cavité n'était pas suffisamment élevée pour permettre la réaction de dissociation du ZnO.

Pour un diamètre interne de 20mm, le rendement expérimental en Zn était d'environ 70%, ce qui a montré que le processus de réaction était efficace. Les résultats expérimentaux étaient en accord avec les prévisions du modèle (Figure 5) et ont confirmé que le diamètre de la cavité avait un effet important sur le taux de dissociation du ZnO.

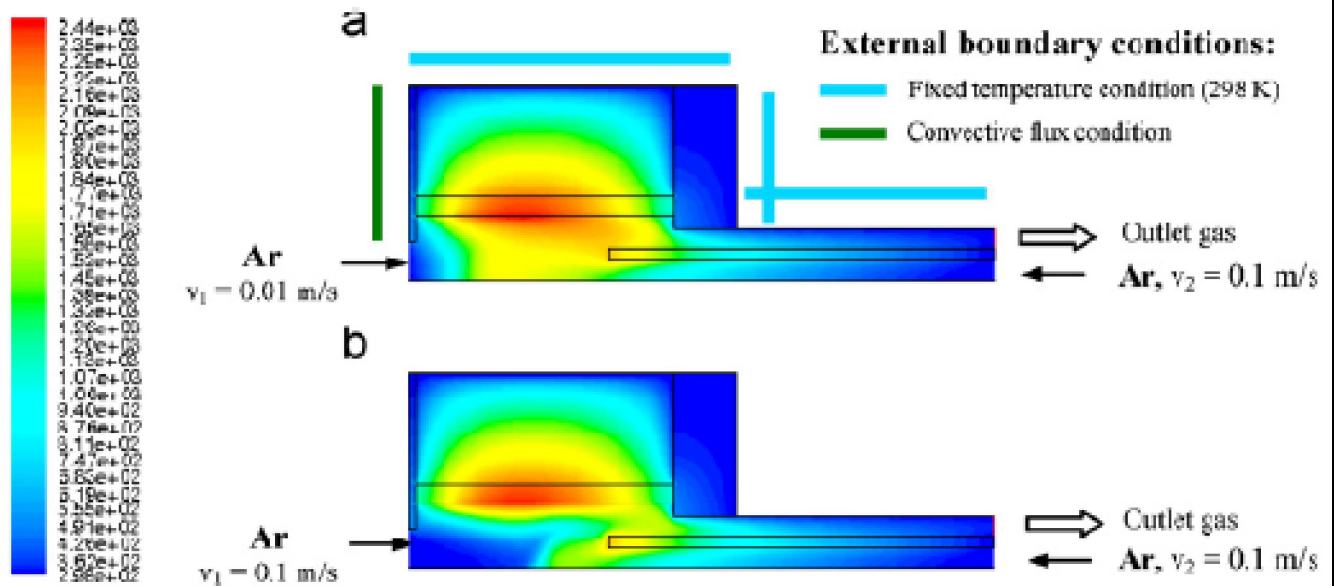


Figure 5 Comportement thermique du réacteur

H.I. Villafán-Vidales et al. (2011) [39] ont étudié expérimentalement et numériquement (en utilisant le code Fluent) une nouvelle conception de réacteur. Le réacteur solaire thermochimique de 1 kW est constitué principalement d'une structure en mousse de céramique poreuse, la structure proposée (Figure 6) est analysé numériquement pour prévoir les transferts thermiques à l'intérieur du récepteur solaire.

Ce réacteur est dédié à la production d'hydrogène à partir de cycles thermochimiques en deux étapes. Il présente un milieu poreux revêtu du matériau ferrite réactif directement irradié par l'énergie solaire concentrée. Le modèle numérique développé associe la dynamique du fluide, le transfert de chaleur et de masse et les réactions chimiques.

Le modèle complet a été utilisé pour prédire le comportement thermique du récepteur dans différentes conditions de fonctionnement, ce qui concerne le débit du gaz inerte, le flux solaire incident, la porosité, la taille moyenne des cellules de la mousse, la longueur du récepteur solaire et l'influence des réactions chimiques.

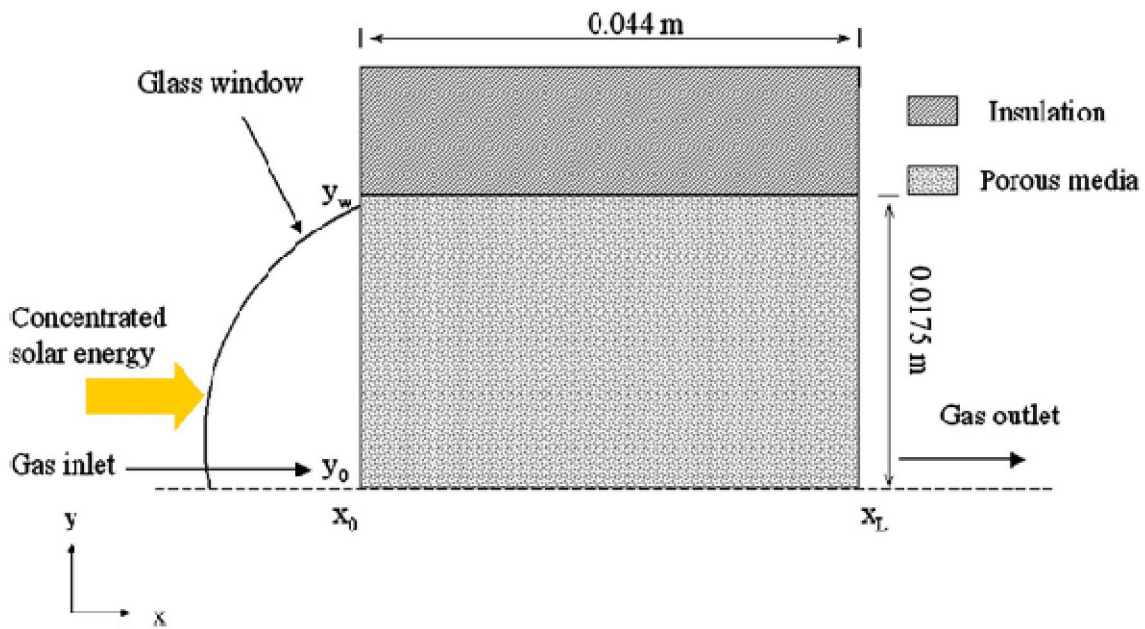


Figure 6 Schéma en coupe du réacteur solaire

Les résultats montrent que la température maximale de la mousse est d'environ 1710 K avec 6 Ln / min N₂ pour une concentration solaire moyenne de 1040 soleils (Figure 7). Plus le débit de gaz est élevé, plus la température de la mousse est basse.

Les conditions de fonctionnement appropriées ont été définies pour effectuer les réactions de réduction et d'hydrolyse dans tout le volume du réacteur à 1400 K et 1200 K, respectivement. Une validation du modèle a été réalisée avec les données expérimentales obtenues à partir de l'essai du réacteur au foyer d'un four solaire.

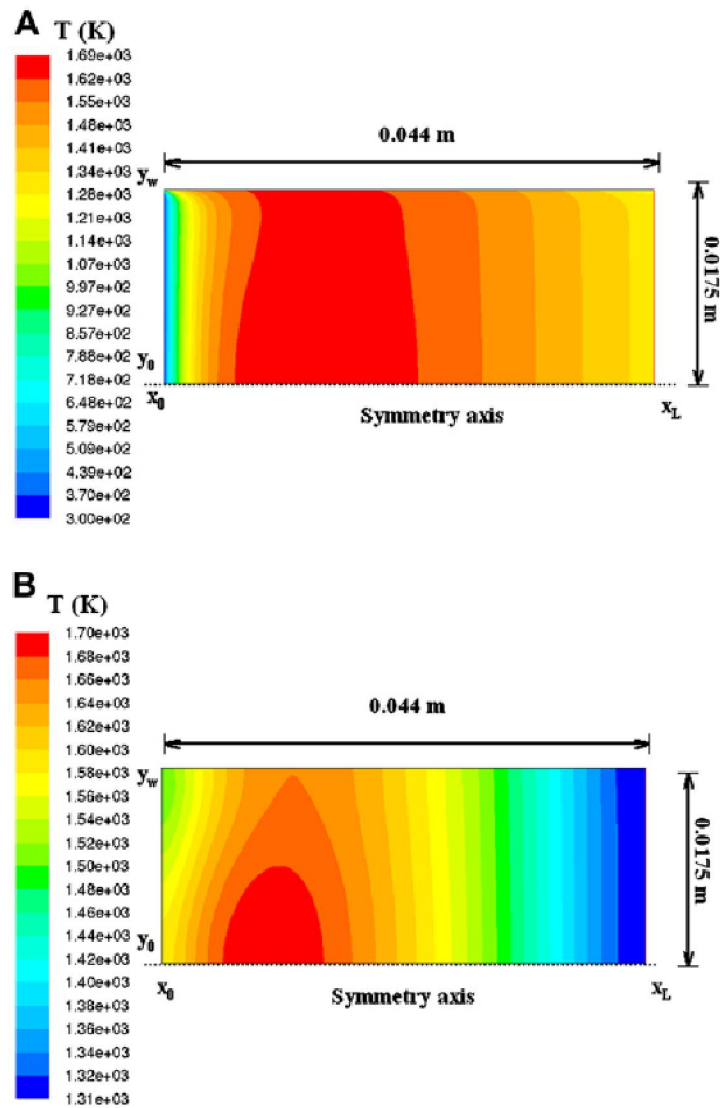


Figure 7 Comportement thermique des phases fluide et solide

M. Kostoglou, et al.(2011) [40] ont présenté une étude numérique tridimensionnel d'un réacteur solaire avec son boîtier (**Figure 8**). Plusieurs aspects ont été inclus dans ce modèle, l'auteur à étudié le réacteur a trois échelles. La première échelle (niveau) se réfère à des phénomènes qui se produisant sur les murs du monolithe, le deuxième niveau aux phénomènes se produisant le long des canaux monolithiques et le troisième niveau aux phénomènes se produisant à l'échelle macroscopique du monolithe. Les sous-modèles pour chaque niveau ont été développés afin d'en déduire un modèle pour l'ensemble processus.

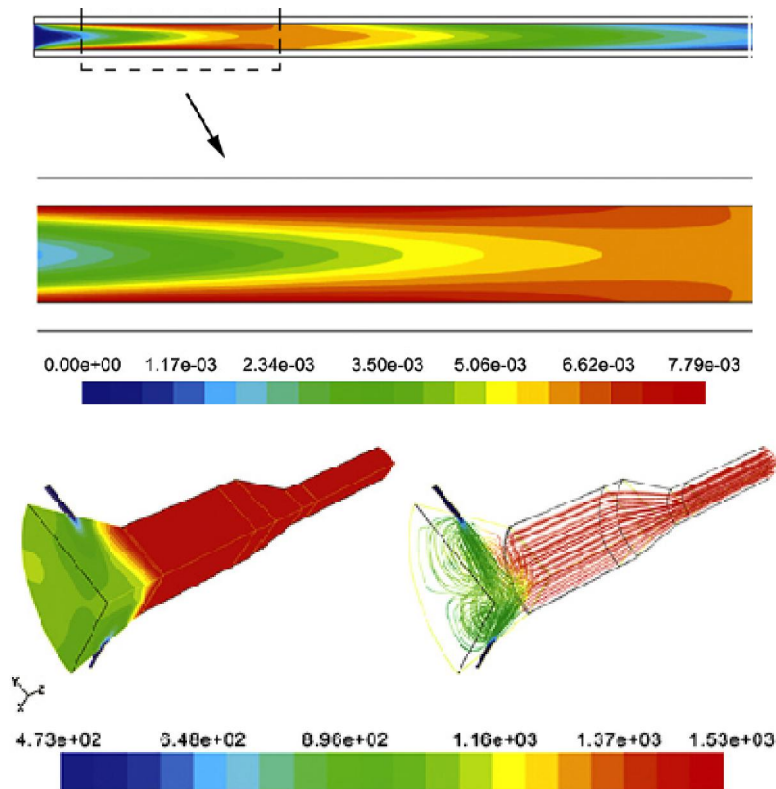


Figure 8 Comportement thermique échelle 2 et 3

En ce qui concerne le matériau monolithique, l'étude a montré que la conductivité thermique élevée du carbure de silicium simplifie considérablement les exigences de modélisation en éliminant les gradients de température transversaux et en ignorant le transfert de chaleur par rayonnement intra-canal. Les exigences de calcul sont beaucoup plus élevées pour les matériaux à faible conductivité tels que la cordiérite dans lesquels des fronts de température raides apparaissent, rendant nécessaire la prise en compte de la non-uniformité transversale et du rayonnement intra-canal par le modèle.

1.5 Conclusion

A travers cette étude bibliographique qui regroupe les différentes technologies utilisées pour la production solaire de l'hydrogène, on a pu constater les remarques suivantes :

1. La technologie de production d'hydrogène à partir de l'énergie solaire thermique est validée et peut assurer de performances meilleures que d'autres technologies ;

2. La recherche bibliographique a permis d'identifier une tendance vers l'utilisation de la technologie de la dissociation de la molécule d'eau par cycle thermochimique ;
3. Les cycles thermochimiques les plus utilisés sont à base des ferrites, ces cycles ont démontrés une meilleur performance, et peuvent être utilisés pour des températures d'activation basses en comparant avec d'autres cycles ;

Après l'élaboration d'une recherche bibliographique approfondie, nous avons remarqué que peu d'études ont été faites sur l'effet de la structure poreuse sur l'efficacité du réacteur. En conséquence, le chapitre 2 sera consacré à l'identification d'un catalyseur adéquat et enfin proposer une structure d'un réacteur efficace à faible coût.

CHAPITRE 2: ECOULEMENT DE
FLUIDE A TRAVERS UN REACTEUR SOLAIRE
DE STRUCTURE POREUSE

2.1 Introduction

Un milieu poreux est un solide contenant des pores (vides). La partie squelettique du métal (Matrix) peut être connectée ou non, y être dispersée de manière régulière (Ex: monolithe) ou aléatoire (Ex: mousse). En règle générale, les pores peuvent contenir un fluide (liquide ou gazeux). La modélisation de l'écoulement à travers un support poreux est extrêmement importante dans de nombreux systèmes industriels, naturels et biologiques, où les supports poreux jouent un rôle important lorsque la technologie le requiert comme outil [41];

- Géoscience: le milieu poreux est le sol qui contient et transporte l'eau et les nutriments
- Hydrogéologie: l'eau est considérée comme un milieu poreux, où elle supporte et scelle la couche.
- Géologie pétrolière: le pétrole brut et le gaz naturel sont stockés dans un réservoir de roche poreuse.
- Biologie: les tissus biologiques comme les os, le bois et le liège sont considérés comme des milieux poreux.
- Science des matériaux: les filtres ou les catalyseurs sont considérés comme des milieux poreux.

Le milieu poreux (matrice solide et phase fluide) se caractérise généralement par les propriétés suivantes: porosité, perméabilité, résistance à la traction, conductivité électrique et tortuosité.

2.1.1 Structure poreuse pour réacteurs

La structure du milieu poreux peut être hétérogène ou homogène; les structures uniformes les plus familières sont les suivantes:

Structures monolithiques

Le paramètre le plus avantageux de la structure monolithique [42, 43] (Figure 9) est sa faible perte de charge; il est largement utilisé dans les applications automobiles et le traitement des effluents gazeux. La structure monolithique peut offrir des avantages pour les réactions multiphasés en comparaison aux autres réacteurs traditionnels. La faible perte de charge par rapport aux autres structures est le principal avantage. Les structures en monolithe sont le meilleur choix pour les processus qui nécessitent la conversion de grands volumes de mélanges de gaz, tels que les hydrogénations. En réaction très exothermique, le transfert de chaleur à haut rendement de ce type de structure peut poser de nombreux problèmes (cas des réacteurs solaires), ce qui limite son utilisation pour les réacteurs à haute température [7, 9, 13].



Figure 9 structure monolithique [44]

Structures en mousse

Cette structure (Figure 10) poreuse est généralement utilisée pour des applications similaires à celle des milieux poreux à structure monolithique. Cette structure présente un bon comportement dans les écoulements à flux mélangés, qui est assuré par le chemin sinueux que les fluides doivent suivre à travers cette structure [14]. La principale limite de cette structure est la faible flexibilité de conception due à sa structure aléatoire. Cette structure est largement utilisée dans la distillation catalytique, où les étapes de réaction et de séparation peuvent être effectuées en un seul processus.[9, 15].



Figure 10 structure en mousse [45]

Structures de ‘Robocasting (3DFD)’

Il s’agit d’une structure innovante en céramique ou en métal (Figure 11 :procédé de dépôt de fibres en trois dimensions). La structure présente de nombreux avantages tels que la faible perte de charge, bon transfert de masse et de chaleur et un bon taux de mélange. Le principal avantage est que les la conception des réacteurs se fait après un calcul bien optimisé, ce qui permet de bénéficier d’un rendement maximal du réacteur.

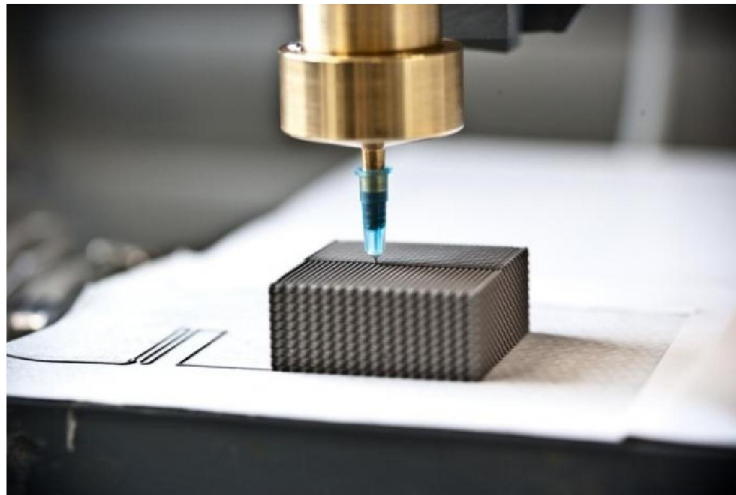


Figure 11 processus de fabrication 3DFD [46]

Lit fixe

Il y a lieu de rappeler que le lit fixe (Figure 12) consiste en arrangements de particules de façon aléatoire ou ordonnées. Ce dernier présente des avantages multiples tel que un coefficient de charge élevé du catalyseur et des temps de séjour élevés. Ils peuvent être chargés dans

différentes conceptions de réacteurs, ce qui induit une conception de réacteurs à faible cout [12]. D'autre part, en raison d'effets indésirables de la dynamique des fluides, les lits garnis présentent souvent un processus catalytique incomplet et un faible transfert de masse [9]. Cela peut être évité par un choix judicieux de la porosité, en jouant sur le diamètre et l'arrangement des billes.



Figure 12 billes en céramique [47]

2.2 La notion de porosité

La porosité est la propriété la plus souvent utilisé pour caractériser le milieu poreux. La porosité (Φ) est numériquement définie comme le rapport entre le volume des vides V_v et le volume total d'un milieu poreux V_T (illustration dans la figure 13)

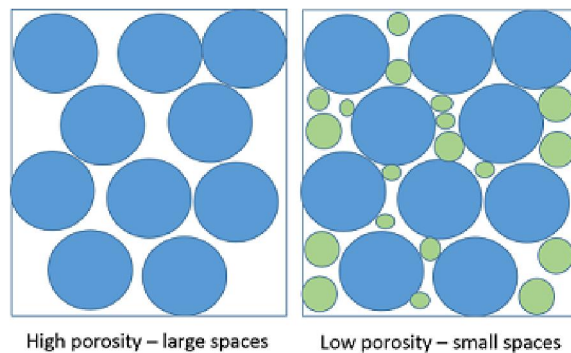


Figure 13 porosité

$$\Phi = \frac{V_V}{V_T} \quad (2.1)$$

La porosité est un paramètre assez facile à définir, mais certainement pas facile à quantifier. La raison est que le vide / espace dans les bio-agrégats par exemple peut aller de quelques nanomètres à quelques centimètres ou plus. Il n'existe en réalité aucune méthode permettant de couvrir adéquatement cet énorme éventail d'échelles. En outre, la porosité peut être modifiée ou changée par divers procédés au cours de l'essai, tels que la déformation, l'altération hydrothermique et la production de porosités secondaire ou de fracture. Enfin, la forme des pores et la structure de connexion (ouverte et fermée) ont un effet significatif sur la porosité.

2.3 Perméabilité

La perméabilité est une aptitude d'un milieu à se laisser traverser par un fluide. La perméabilité dépend de différents paramètres physiques tels que le nombre de pores, la géométrie, la structure, les fractures et les capillaires. La perméabilité est définie soit par la grandeur dite perméabilité intrinsèque, soit par le coefficient de perméabilité k associé à la loi de Darcy. L'unité de perméabilité est par surface, liée à section de passage d'écoulement transversal; l'unité du système international est m^2 . L'unité commune utilisée pour la perméabilité est le Darcy (D).

2.3.1 Equation de Darcy

En 1856 l'ingénieur français H. Darcy a étudié l'écoulement d'eau à travers un lit de sable. Il a réalisé 35 expériences avec son équipe. Il a constaté que la force motrice et le transport de fluide obéissaient à la relation suivante [48].

$$-\nabla p = \mu/\alpha u \quad (2.2)$$

Ou

∇p : gradient de pression

α : perméabilité

u : la vitesse superficielle

En présence d'un champ de force externe, la loi de Darcy peut être étendue comme suit:

$$-\nabla p + f = \frac{\mu}{\alpha} u \quad (2.3)$$

Forchheimer (1901) et Jules Dupuit (1863) ont corrigé l'équation de Darcy en prenant en compte les effets inertiels pour les débits importants de fluide en milieu poreux.

$$-\nabla p = \frac{\mu}{\alpha} u + \frac{C_E}{\sqrt{\alpha}} \rho u |u| \quad (2.4)$$

2.3.2 Tortuosity

La tortuosité est définie généralement en fonction de la porosité, elle dépend principalement de la forme des pores et de la connectivité des milieux poreux. Plusieurs expressions existantes peuvent définir ce paramètre, la plus connue de ces expressions est la relation de Bruggeman.

2.4 Formulation du problème

Afin de construire un réacteur solaire réalisable à faible coût, un lit fixe à base de céramique est proposé. Le corps de ce réacteur / récepteur est constitué de billes sphériques en carbure de silicium (Figure 14) recouvertes du matériau ferrite réactif.

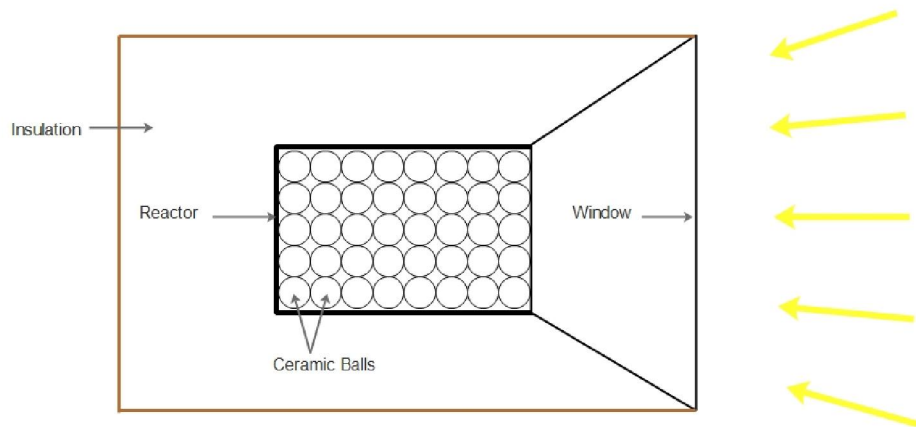


Figure 14 Conception du réacteur proposé

Un lit fixe à base de particules peut souvent être conçu comme un ensemble de sphères identiques occupant un espace déterminé

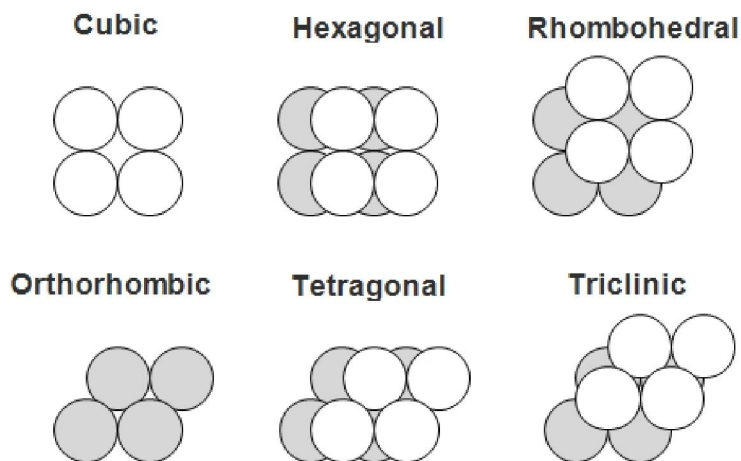


Figure 15 arrangement des billes d'un réacteur

Lorsque cet espace est limité à un espace prédéterminé, tel que des canaux cylindriques d'une structure poreuse nano-structurée remplie d'atomes ou de molécules d'une substance, les propriétés géométriques et thermo-physiques (conductivité thermique, porosité..) de la matrice poreuse résultante dépendent fortement sur la disposition et l'arrangement (figure 15) des billes (porosité comme exemple dans le tableau 3) [49-51]

Table 3 Effet de l'arrangement sur la porosité

Structure	Porosité %
Cubique	47.6
Hexagonale	39.5
Rhomboédrique	26
Orthorhombique	39.5
Tétragonal	30.2
Triclinic	26

Les réacteurs à lits fixe sont utilisés dans de plusieurs applications des systèmes thermo fluidique industriels, telles que les réacteurs nucléaires [52,53], les catalyseurs [54] et la cryogénie [55,56]. Un certain nombre d'études exploratoires ont étudié la réaction thermo chimique solaire dans un réacteur à lit fixe à base des billes (Figure 16) [57-60]. Un réacteur solaire de 5 kW, soumis à un rayonnement solaire allant jusqu'à 2 953 soleils et fonctionnant à des températures allant jusqu'à 1 490 K a été mis en marche à PSI [61]

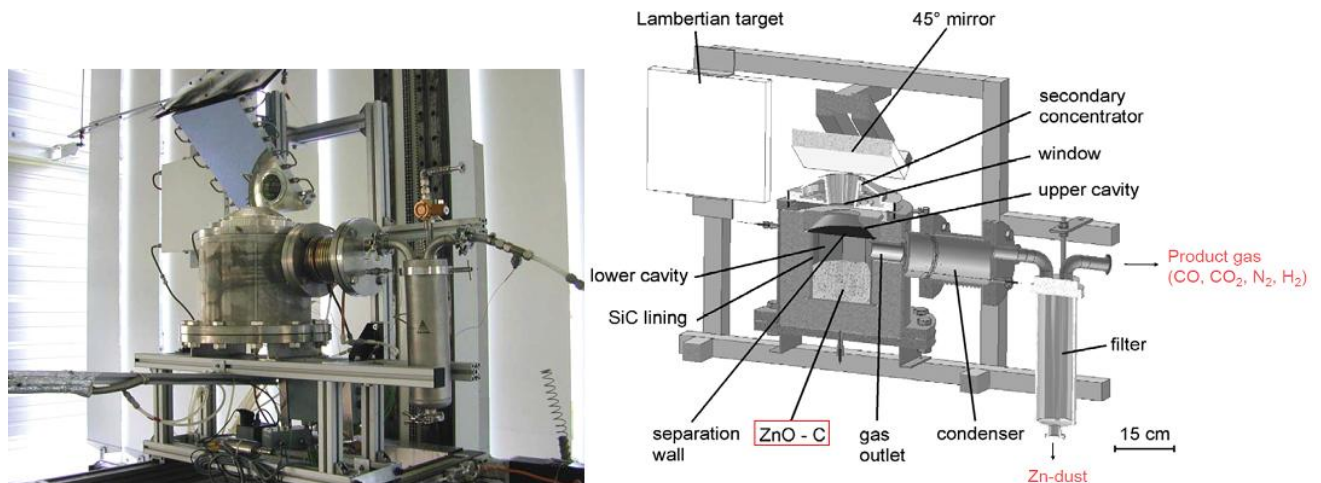


Figure 16 le réacteur SOLZINC [61]

Le but de la présente recherche est d'étudier la faisabilité de l'utilisation de ce type de structure poreuse comme récepteur / réacteur pour la dissociation thermique directe de l'eau. Il est important de mentionner que cette conception spécifique de réacteur directement irradié utilisant des billes de céramique (figure 17) n'a pas encore été étudiée de manière approfondie et pourrait être très intéressante sur le plan technique. Le corps du récepteur / réacteur consiste en

une chambre cylindrique (0,05 m de diamètre interne et 0,05 m de long) contenant les billes sphériques en céramique. En amont le récepteur / réacteur est directement irradié par l'énergie solaire concentrée (puissance maximale de flux solaire constante de 2 kW).



Figure 17 billes en céramique [62]

La chambre du réacteur est entourée d'un isolant. Une fenêtre en quartz est proposée pour séparer le système de la température ambiante afin de créer un environnement contrôlé à l'intérieur de la chambre.

2.5 Hypothèses

Lorsque les dimensions géométriques des pores est supérieures aux dimensions des molécules, chaque phase peut être considérée comme un milieu continu et le milieu poreux comme un ensemble de milieux continus imbriqués. Les phénomènes qui se déroulent au sein des pores sont décrits par les équations microscopiques de la thermodynamique et de la mécanique des milieux continus. Mais en pratique cette description n'est pas utilisée, car elle est compliquée (problèmes aux limites complexes, géométrie du milieu mal connue,...)

Une approche pour décrire ces phénomènes, est de supposer qu'il est possible de définir une échelle plus grande par rapport à l'échelle des pores et d'écrire les équations dites macroscopiques. Plusieurs méthodes d'homogénéisation peuvent être utilisées pour effectuer le changement d'échelle.

Théorie de l'homogénéisation

Pour aboutir à une représentation homogénéisée, au moins trois méthodes peuvent être appliquées[63]. Il s'agit de la méthode d'homogénéisation [64], de la méthode des moments [65] et de la méthode de la prise de moyenne [66]. Les trois méthodes citées correspondent à des analyses différentes de l'écoulement. La méthode d'homogénéisation est très certainement la plus rigoureuse au niveau mathématique, mais peut apparaître éloignée de la physique des phénomènes entrant en jeu. La méthode de prise de moyenne s'inscrit dans une vision phénoménologique et peut paraître moins rigoureuse sur le plan mathématique (car les approximations ne sont pas entrées dans les hypothèses de départ mais sont faites au fur et à mesure du raisonnement). Quant à la méthode des moments, elle s'approche de la méthode de prise de moyenne, mais elle reste peu exploitée.

Ce travail porte sur la modélisation à l'échelle macroscopique d'un écoulement turbulent au sein d'un milieu poreux qui repose sur la moyenne d'équations fondamentales des écoulements tels que la continuité, la quantité de mouvement et l'énergie, ainsi que la turbulence sur un volume représentatif du milieu poreux [54]. La plupart des travaux de recherche sur le calcul de l'écoulement turbulent dans un milieu poreux [55, 57] ont été basé sur le développement d'équations macroscopiques à l'aide des techniques de calcul du volume moyen du modèle de turbulence k- ϵ .

Les hypothèses qui régissent notre modèle sont les suivantes:

- Porosité uniforme à travers la structure poreuse.
- le champ d'écoulement est turbulent
- Effet de la flottabilité, la dispersion hydrodynamique et la dissipation visqueuse sont négligeables.
- La dilatation thermique est négligeable. Ceci est justifié par le fait que la céramique est très peu influençable par les gradients de température.
- L'effet de la radiation des matériaux utilisées est négligé, considérant l'effet conductif est dominant pour ce type de matériau (la céramique SIC). Plusieurs études ont formulé la même hypothèse de travail .

2.6 Équations gouvernantes

2.6.1 Equation du mouvement

Selon les hypothèses citées, l'équation moyenne de la continuité et de la quantité de mouvement pour le modèle proposé est la suivante:

$$\nabla (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.5)$$

$$-\frac{\mu}{\alpha} \langle v \rangle - \frac{\rho_f C_2 \varepsilon_p}{\sqrt{\alpha}} [\langle v \rangle \cdot \langle v \rangle] + \frac{\mu}{\varepsilon_p} \nabla^2 \langle v \rangle - \nabla \langle P \rangle = 0 \quad (2.6)$$

Où α est la perméabilité du milieu poreux, C_2 est le coefficient d'inertie. Les termes $\frac{\mu}{\varepsilon_p} \nabla^2 \langle v \rangle$ et $\nabla \langle P \rangle$ sont les termes source de l'équation de mouvement.

Le modèle de turbulence est obtenu en faisant la moyenne de l'énergie cinétique de turbulence standard et de l'équation du taux de dissipation.

$$\nabla \cdot (\rho_f v \langle k_t \rangle) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t\varepsilon}}{\sigma_k} \right) \nabla (\varepsilon_p \langle k_t \rangle) \right] + P_i + G_i - \rho_f \varepsilon_p \langle \varepsilon \rangle \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot (\rho_f v \langle \varepsilon \rangle) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t\varepsilon}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla (\varepsilon_p \langle \varepsilon \rangle) \right] + C_1 P_i \frac{\langle \varepsilon \rangle}{\langle k_t \rangle} + C_2 \frac{\langle \varepsilon \rangle}{\langle k_t \rangle} (G_i - \rho_f \varepsilon_p \langle \varepsilon \rangle) \quad (2.8)$$

Où $C_1, C_2, \sigma_k, \sigma_\varepsilon$ sont les constantes du modèle $k - \varepsilon$, P_i est le taux de production de $\langle k_t \rangle$ dû aux gradients de v et G_i est le taux de génération de la moyenne intrinsèque de k_t due à l'action de la phase solide du milieu poreux

2.6.2 Equation d'énergie

Dans l'approche du modèle énergétique LTNE (non-equilibrium model), les phases solide et fluide coïncident spatialement et interagissent entre elles en ce qui concerne le transfert de chaleur (terme source), deux équations sont résolues séparément pour les phases fluide et solide dans le modèle proposé. L'équation de phase fluide dans des conditions d'état stable est la suivante:

$$(\rho C_p)_f \langle v \rangle \cdot \nabla \langle T_f \rangle = \nabla \cdot \{k_{feff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle\} + S_{conv} \quad (2.9)$$

S_{conv} Présente le terme source de l'échange de chaleur par convection entre les phases solide et fluide

L'équation d'énergie de la phase solide en régime permanent est la suivante:

$$\nabla \cdot \{k_{seff} \cdot \nabla \langle T_s \rangle\} - S = 0 \quad (2.10)$$

Où $S = S_{chem} + S_{conv}$

$$S_{conv} = h_{fs} A_{fs} (\langle T_s \rangle - \langle T_f \rangle) \quad (2.11)$$

Où h_{fs} present le coefficient de transfert de chaleur par convection et A_{fs} is la surface d'échange entre la matrice solide et le fluide.

- **Coefficient de transfert de chaleur par convection**

Selon les références suivantes [67] et [68], Coefficient de transfert de chaleur par convection est constant sur la longueur du réacteur. Le tableau 4 donne un aperçu de certains modèles existants dans la littérature.

Table 4 Différents modèles pour le calcul du Coefficient de transfert de chaleur par convection

$h_{fs} = \overline{h_{fs}}$	A_{fs}	Ref
$\left[2,096 \varepsilon_p^{0,38} \lambda_f \cdot Re^{0,438} \cdot (-8,278 \varepsilon_p^{0,38} + 57,384 \varepsilon_p^{1,38} - 106,63 \varepsilon_p^{2,38} + 95,756 \varepsilon_p^{3,38} - 37,24 \varepsilon_p^{4,38}) \right] / d_s^2$ <p>For $(0.66 < \varepsilon_p < 0.93)$ & $(0.66 < Re < 0.93)$</p>		[39]
$\frac{k_f (2 + 1,1 \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \cdot Re^{0,6})}{d_p}$	$\frac{6 \cdot (1 - \varepsilon_p)}{d_p}$	[69]
$0,0040 \left(\frac{k_f}{d_v} \right) \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \cdot Re^{1,35} (Re < 100)$ $0,0156 \left(\frac{k_f}{d_v} \right) \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \cdot Re^{1,04} (Re \geq 100)$	$20,346 \cdot (1 - \varepsilon_p) \varepsilon_p^2$	[70]
$\left(\frac{d_p \cdot \varepsilon_p}{0,5555 \cdot Pr^{\frac{1}{3}} Re^{2/3} \cdot k_f} + \frac{d_p}{10 \cdot k_s} \right)^{-1}$	$\frac{6 \cdot (1 - \varepsilon_p)}{d_p}$	[71]
$\left((1,18 Re^{0,58})^4 + (0,23 Re_h^{0,75})^4 \right)^{\frac{1}{4}} / (d_p k_f)$ <p>Where $Re_h = \frac{Re}{1 - \varepsilon_p}$</p>	$\frac{6 \cdot (1 - \varepsilon_p)}{d_p}$	[72]

La corrélation utilisée pour calculer le coefficient de transfert de chaleur et la surface d'interface est une corrélation adaptée à tous les types des réacteurs basés sur le concept lit fixe [69]:

$$h_{fs} = \frac{k_f (2 + 1,1 \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \cdot Re^{0,6})}{d_p} \quad (2.13)$$

La corrélation de surface pour ce modèle est donnée par:

$$A_{fs} = \frac{6 \cdot (1 - \varepsilon_p)}{d_p} \quad (2.14)$$

- **Conductivité effective**

La conductivité thermique effective est la conductivité thermique utilisée dans les milieux poreux. Elle est généralement calculée par corrélation. La formule la plus précise [73] est utilisée dans cette étude. (Le modèle par défaut utilisé pour le logiciel ANSYS FLUENT)

$$k_f = (\varepsilon k_f) \quad (2.15)$$

$$k_s = \frac{1}{3}(1 - \varepsilon) \times k_s \quad (2.16)$$

$$k_{eff} = (\varepsilon k_f) + \frac{1}{3}(1 - \varepsilon) \times k_s \quad (2.17)$$

- **Coefficients de perméabilité et d'inertie :**

L'équation d'Ergun est une corrélation semi-empirique applicable sur une large gamme de nombres de Reynold et s'applique à de nombreux types de réacteur à Garnissage:

$$\frac{|\Delta p|}{L} = 150 \frac{\mu}{D_p^2} ((1 - \varepsilon)^2 / \varepsilon^3) v_\infty + (1.75 \rho / D_p) ((1 - \varepsilon) / \varepsilon^3) v_\infty^2 \quad (2.18)$$

Pour la corrélation d'Ergun, les coefficients de perméabilité et de perte d'inertie sont identifiés comme :

$$\alpha = \frac{D_p^2}{150} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (2.19)$$

$$C_2 = \frac{3.5 (1 - \varepsilon)}{D_p \varepsilon^3} \quad (2.20)$$

$$S_{conv} = h_{fs} A_{fs} (< T_s > - < T_f >) \quad (2.21)$$

2.6.3 Réaction Thermochimique

Les réactions supposées se produire sur le matériau d'enrobage des billes. Les équations des réactions chimiques est donnée par [74]:



L'équation de transport d'espèces chimiques est donné par:

$$\nabla(\rho \vec{u} Y_i) = \rho D_{i,m} \Delta Y_i + M_i R_{chem,i} \quad (2.24)$$

Y_i : fraction de masse locale de l'espèce i

$D_{i,m}$: coefficient de diffusion de masse pour l'espèce i

M_i : masse moléculaire

$R_{chem,i}$: terme source chimique du taux de production net de l'espèce i

Le terme source de chaleur chimique dû à la forte réaction endothermique est donné par:

Pour la phase réduction:

$$S_{chem} = k_{0,R} \exp\left(\frac{-E_{a,R}}{R_g T_s}\right) \cdot \Delta H_{red} \quad (2.25)$$

Pour la phase hydrolyse:

$$S_{chem} = k_{0,H} \exp\left(\frac{-E_{a,H}}{R_g T_s}\right) \cdot \Delta H_{hyd} \quad (2.26)$$

ΔH est l'enthalpie de la réaction

$k_{0,R}$: Facteur pré – exponentiel de la phase réduction

$k_{0,H}$: Facteur pré – exponentiel de la phase réduction

2.7 Design du réacteur

L'idée principale de la conception du réacteur solaire est de permettre au matériau catalytique d'être chauffé à travers la structure poreuse à l'aide d'un simulateur solaire figure 18. Le simulateur solaire HFSS est composé de lampes xénon à arc, chacune entourée d'un ellipsoïde miroir qui concentre le rayonnement sur le réacteur.



Figure 18 Design du réacteur

Le simulateur solaire HFSS a pour rôle de remplacer le rayonnement solaire naturel et peut être aussi utilisé comme source de chaleur pour les tests de laboratoire. Dans notre approche de

recherche, le réacteur a été choisi pour être directement chauffé à travers une fenêtre de quartz à l'ouverture. Pour atteindre les objectifs de la recherche, un réacteur d'essai solaire a été conçu en 3D. Le réacteur (Figure 18) contient une structure de support cylindrique en céramique pouvant accueillir différentes structures poreuses afin de comparer différents systèmes de catalyseurs. Le boîtier du réacteur est en céramique et en acier inoxydable SS316 et comporte une fenêtre en quartz permettant de chauffer la structure poreuse (Figure 23). Le réacteur proposé est conçu pour résister à des températures allant jusqu'à 1800 K. Le réacteur proposé sera raccordé à un instrument de traitement des gaz permettant l'analyse des produits.



Figure 19 Simulateur solaire DLR

2.1 Caractéristiques thermiques du réacteur :

En termes de température de service maximale, le réacteur est conçu pour résister à une température maximale de 1800 ° K. Bien que la température maximale de fonctionnement soit de 1500 ° K, il a été noté qu'il peut y avoir des points chauds locaux dans certaines zones, créant ainsi une zone de 300 ° K supérieure à la température moyenne sur le reste du réacteur. Afin de réduire les pertes de chaleur du réacteur, le rayon minimal possible du réacteur a été identifié.

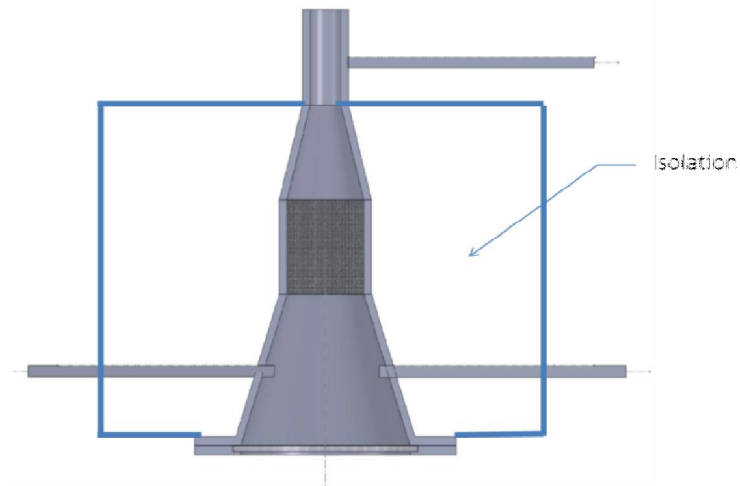


Figure 20 isolation propose pour le réacteur

Afin de rendre la production d'hydrogène plus efficace, une augmentation rapide de la température allant de la température ambiante aux températures de réaction, ainsi qu'un chauffage et un refroidissement plus rapides lors des cycles entre les deux modes de production sont nécessaires.

Un écart de température plus élevées signifie un choc thermique élevé en raison des contraintes thermiques développées dans le matériau du réacteur. Les spécifications de conception étaient telles que le matériau devrait résisté aux chocs thermiques associés à des vitesses supérieures à $300\text{ }^{\circ}\text{K} / \text{min}$.

2.3 Distribution du flux solaire

La distribution linéaire du flux fournit non seulement des conditions thermiques uniformes aux réactifs dans le lit fixe conduisant à des comportements cinétiques similaires, mais simplifie également la modélisation numérique du réacteur. Une orientation horizontale du réacteur (figure 21) a été choisie à cet effet, par opposition à l'orientation verticale qui présente une distribution non uniforme dans le lit.

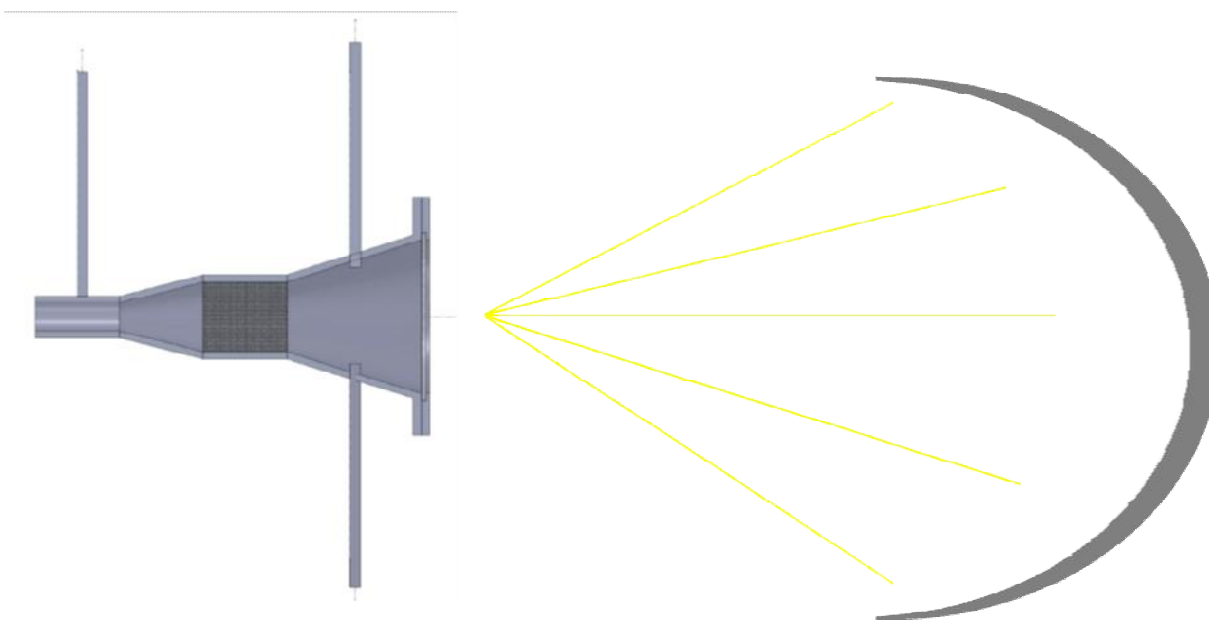


Figure 21 l'orientation horizontale du réacteur

2.4 Stabilité chimique:

Etant donné que le matériau catalytique entoure les billes dans le lit, le matériau des billes doit être chimiquement inerte vis-à-vis du matériau réactif. De plus, il est essentiel que le matériau des billes ne réagisse pas avec le réactif ni les gaz produits. Ces conditions conduisent à l'utilisation d'une céramique traitée spéciale (SSiC) (figure 22).



Figure 22 Céramique (SSiC)

2.5 Procédé de fabrication du système

- **Composants du réacteur**

Les figures 25 à 28 illustrent le modèle détaillé SOLIDWORKS des différents composants du réacteur. Il y a cinq composants principaux dans le réacteur (Figure 23). Le disque qui fait face à l'ouverture (Figure 28) est le couvercle avant. Le corps du réacteur est conçu pour collecter les radiations avec un angle d'ouverture de 40° comme illustré à la figure 27, à travers une fenêtre en quartes (Figure 26). Derrière le corps du réacteur se trouve un cylindre SS 316 à extrémité ouverte qui sert comme cavité.

Les deux tuyaux frontaux sont utilisés pour l'injection d'eau et d'azote, le tuyau de la cavité est utilisé pour l'analyse du produit.

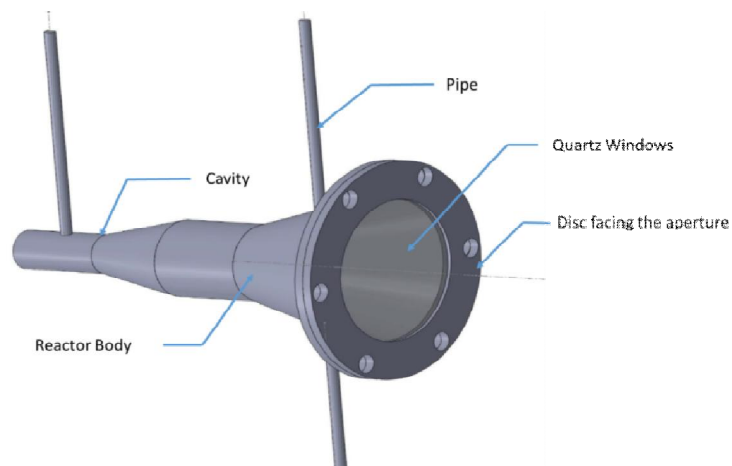


Figure 23 3D model of the reactor

- **Facilité de fabrication**

La réalisation d'une conception complexe de composants en céramique est coûteuse, par conséquent la conception du réacteur proposée a été maintenue aussi simple que possible et modulaire au même temps, garantissent que, si un composant tombe en panne, il n'affecte pas l'ensemble du réacteur.

- **Sélection des matériaux**

Le carbure de silicium (SSiC) a été choisi comme matériau de construction du réacteur en raison de ses caractéristiques physiques et chimiques:

- Faible densité (3.07 to 3.15 g/cm^3) ;
- Dureté élevée ($HV10 \geq 22 \text{ GPa}$) ;
- Module de Young élevé (380 to 430 MPa) ;
- Haute conductivité thermique (120 à 200 W / mK) ;
- Faible coefficient de dilatation linéaire (3.6 to $4.1 \times 10^{-6} / \text{K}$ at 20 to $400 \text{ }^\circ\text{C}$) ;
- Température de fonctionnement maximale du SSiC sous gaz inerte: 2070 K ;
- Excellente résistance au choc thermique de SiSiC: ΔT 1100 K ;
- Érodable ;
- Résistance à la corrosion et à l'usure même à des températures élevées ;

- Non toxique;

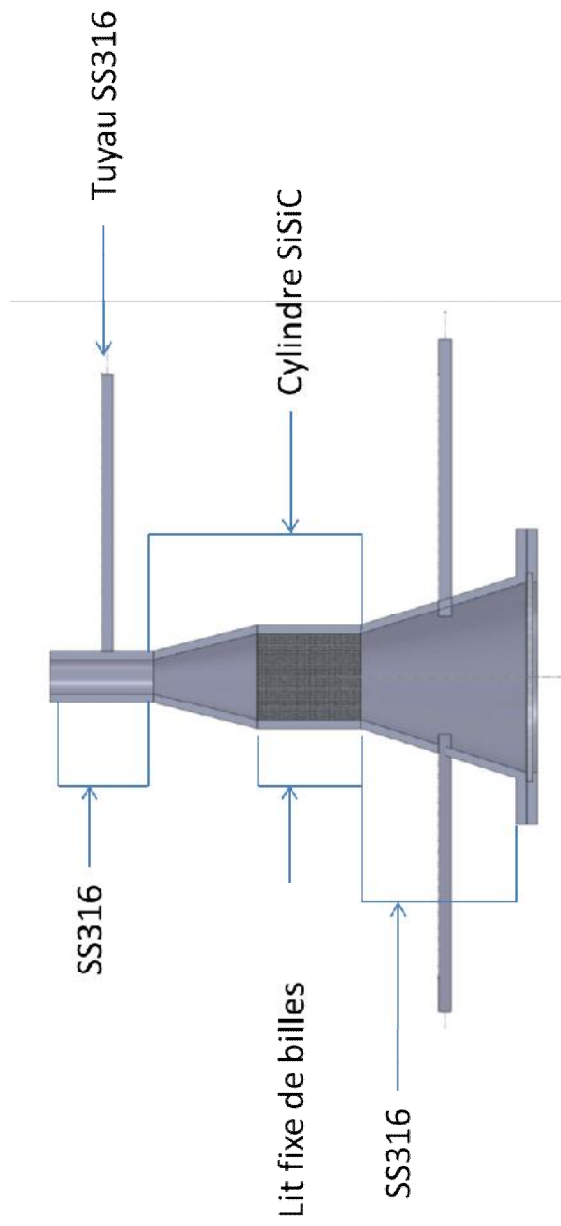
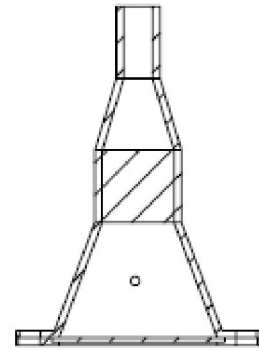
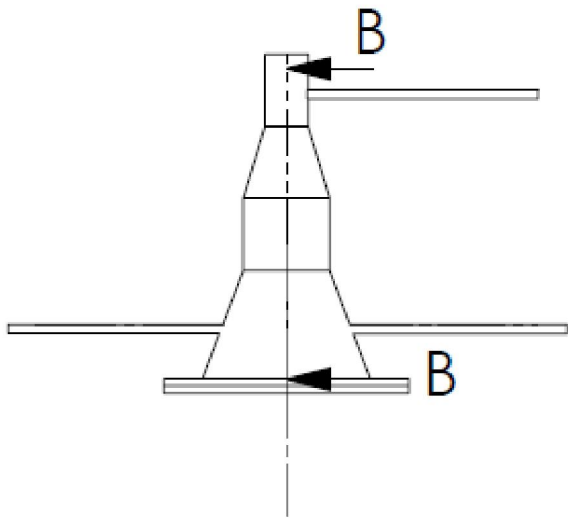


Figure 24 Matériaux de réacteur



COUPE_{B-B}

ECHELLE 1 : 5

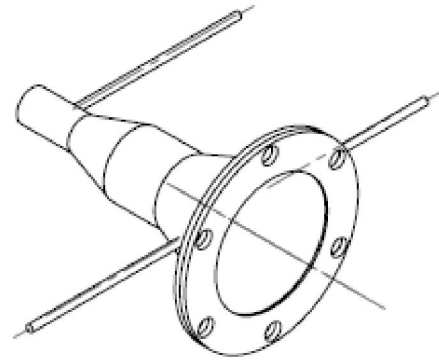
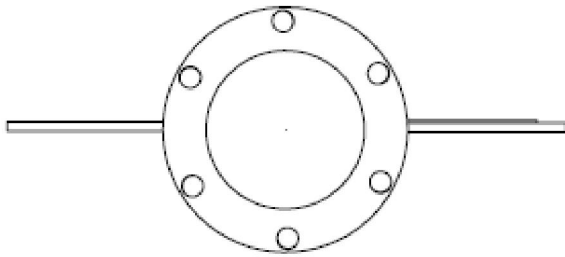


Figure 25 Design du réacteur

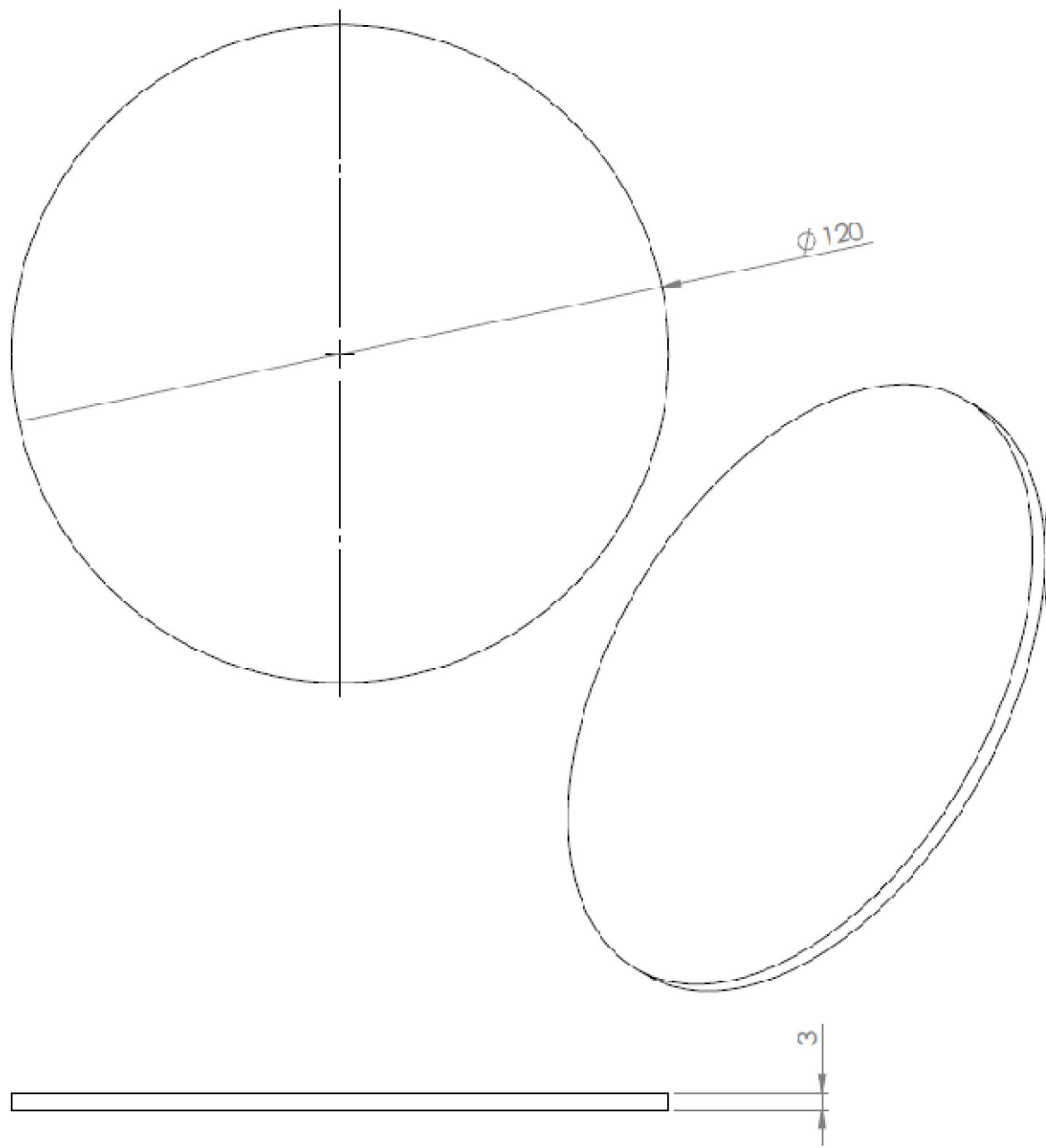


Figure 26 Fenêtre en quartz

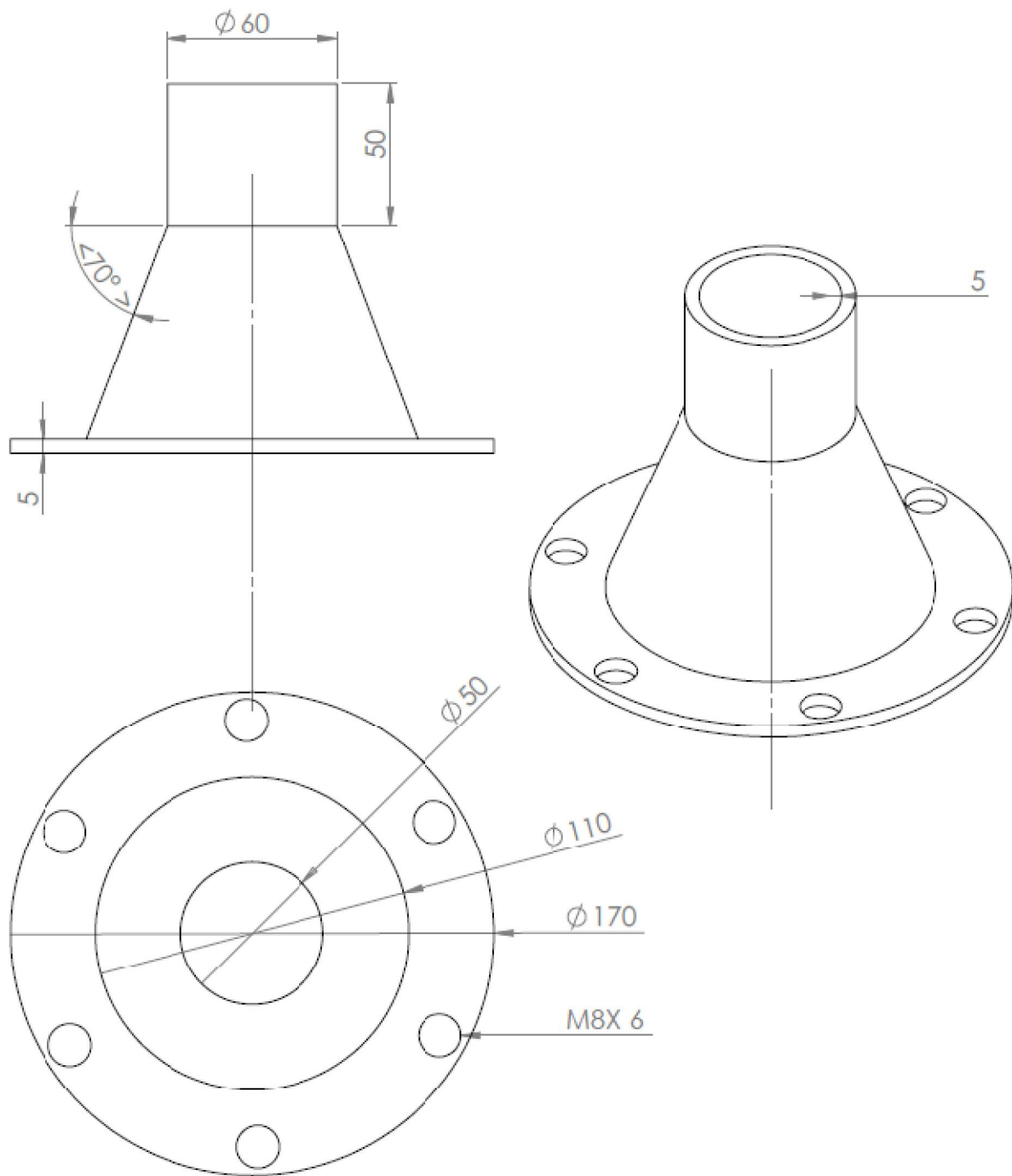
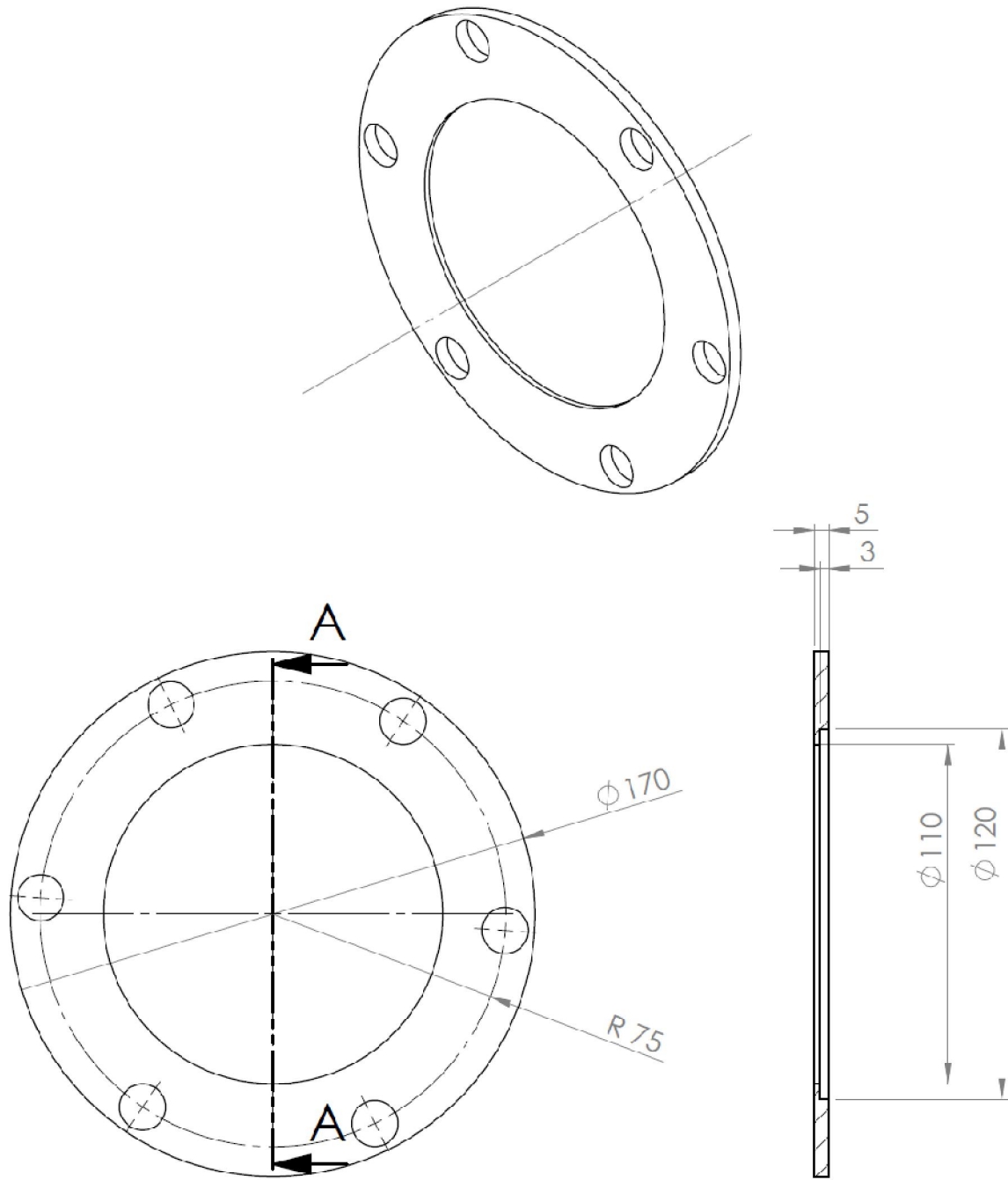


Figure 27 corps de réacteur



COUPE_{A-A}

Figure 28 Disque d'ouverture

2.6 Conclusion:

Dans ce chapitre, nous nous sommes attachés à introduire le contexte de notre travail qui se ramène au design d'un nouveau réacteur de production d'hydrogène basé sur une structure poreuse en billes de céramique. Une description générale du système, ainsi que les détails du CAD du réacteur a été présentée.

Dans le chapitre suivant, la méthode CFD est utilisée pour la modélisation numérique du réacteur par le biais du logiciel « ANSYS / FLUENT » 14.0.

CHAPITRE 3 : MODÉLISATION
NUMÉRIQUE DES MILIEUX POREUX UTILISANT
ANSYS

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la résolution numérique de l'écoulement à travers la structure poreuse du réacteur. Les équations de la conservation présentées précédemment n'ont pas de solutions analytiques conventionnelles, l'utilisation des techniques de résolution numérique est nécessaire. La mise en place des méthodes de résolution numériques des problèmes de la mécanique des fluides telles que les méthodes des différences, éléments et volumes finis ont servi à mettre au point des codes traitant les principaux problèmes lié à ces phénomènes physiques, notamment : les transferts de masse et de chaleur, la réaction chimique, etc. Dans cette thèse, le calcul sera effectué à l'aide du logiciel d'aide à la décision « ANSYS / FLUENT » 14.0 qui est basé sur la méthode des volumes finis.

Le logiciel ANSYS Fluent est l'un des plus puissants outils disponible de calcul numérique en dynamique des fluides. Fluent comprend des modèles physiques bien validés fournissant des résultats rapides et précis sur une large gamme d'applications. Le logiciel ANSYS Fluent contient les modèles physiques généraux nécessaires à la modélisation du l'écoulement, de la turbulence, du transfert de chaleur et des réactions pour différentes applications physiques. Fluent couvre une large gamme de domaines, y compris des modèles spéciaux, capables de modéliser un écoulement dans un réacteur basé sur un milieu poreux. [75]

3.1.1 Équation de continuité et de mouvement

La forme générale de l'équation de la continuité (conservation de la masse) dans ANSYS fluent est la suivante

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = S_m \quad (3.1)$$

Les milieux poreux sont modélisés par l'équation standard de conservation de la quantité de mouvement en ajoutant un terme source composé de deux parties.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3.2)$$

p : pression statique

$\bar{\tau}$: tenseur des contraintes

$\rho \vec{g}$: force du corps gravitationnel

\vec{F} : forces extérieures

Le tenseur de contrainte est donné par

$$\bar{\tau} = \mu((\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I) \quad (3.3)$$

Ou

μ : viscosité des molécules

I : tenseur unitaire

Les forces externes du corps F contiennent les sources définies par l'utilisateur, ainsi que d'autres termes source dépendants du modèle, tels que milieu poreux. Le terme source du milieu poreux est composé de deux parties, le terme inertiel (3.4) qui apparaît à des vitesses d'écoulement élevées (Négligeable pour le flux laminaire) et le terme de Darcy (3.5) représentant le terme visqueux.

Terme inertiel

$$\sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j \quad (3.4)$$

Terme de Darcy

$$\sum_{j=1}^3 D_{ij} u v_j \quad (3.5)$$

Le terme source \vec{F} du milieu poreux est donné par

$$\vec{F} = \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j + \sum_{j=1}^3 D_{ij} u v_j \quad (3.6)$$

Le terme source de l'équation de mouvement d'un milieu poreux homogène simple est le suivant :

$$\vec{F} = -\left(\frac{\mu}{\alpha} v_i + C_2 \frac{1}{2} \rho |v| v_j\right) \quad (3.7)$$

α : *permiabilité*

C_2 : *Facteur de resistance inertiel*

Le terme source de quantité de mouvement peut également être modélisé dans ANSYS Fluent en tant que puissance de la vitesse

$$\vec{F} = -C_0 |v|^{C_1} = -C_0 |v|^{C_1-1} v_i \quad (3.8)$$

C_0, C_1 : *Coefficients empiriques*

3.1.2 Equation d'énergie

ANSYS offre la possibilité d'utiliser deux modèles thermiques différents pour l'écoulement dans un milieu poreux, le modèle à équilibre thermique et le modèle thermique non équilibré. Dans le cas d'un écart de température important entre la matrice poreuse et le fluide, une approche à deux cellules est utilisée (appelé modèle thermique non équilibré), les phases solide et

fluide coïncident spatialement et interagissent entre elles en ce qui concerne le transfert de chaleur, les équations sont résolues séparément pour les phases fluide et solide

L'équation pour la phase fluide est la suivante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\gamma\rho_f E_f) + \nabla \cdot (\bar{v}(\rho_f E_f + p)) \\ = \nabla \cdot \left[\gamma k_f \nabla T_f - \left(\sum_i h_{ij} \right) + (\bar{\tau} \cdot \bar{v}) \right] + S_f^h + h_{fs} A_{fs} (T_s - T_f) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Pour la phase solide, l'équation résolue est

$$\frac{\partial}{\partial t}((1 - \gamma)\rho_s E_s) = \nabla \cdot ((1 - \gamma)k_s \nabla T_s) + S_s^h + h_{fs} A_{fs} (T_f - T_s) \quad (3.10)$$

$E_f =$ Energie totale du fluide

$E_s =$ Energie totale du solide

$\rho_f =$ densité du fluide

$\rho_s =$ densité du solide

$\gamma =$ porosité

$k_f =$ Conductivité thermique du fluide

$k_s =$ conductivité thermique du solide

$h_{fs} =$ coefficient du transfert thermique

$A_{fs} =$ densité de la surface interfaciale .

$T_f =$ Temperature du fluide

$T_s =$ Temperature du solide

$S_f^h = \text{terme source enthalpie fluide}$

$S_s^h = \text{terme source enthalpie solide}$

3.1.3 Coefficients de viscosité et d'inertiel

Les coefficients de résistance visqueuse et inertielle sont définis de la même manière. L'approche de base d'ANSYS Fluent pour définir ces coefficients est à l'aide d'un système de coordonnées cartésiennes consiste à choisir un vecteur de direction en 2D ou deux vecteurs de direction en 3D, puis d'identifier les coefficients dans chaque direction.

Il est aussi permis d'utiliser la fonction "utilisateur" pour caractériser les coefficients de résistance visqueuse ou inertielle. Basé sur la vitesse superficielle, les entrées du milieu poreux peuvent être calculées à l'aide de la perte de charge connue. L'équation d'Ergun peut être aussi utilisée pour calculer les paramètres du milieu poreux. L'équation d'Ergun est une corrélation semi-empirique applicable sur une large gamme de nombres de Reynolds et s'applique également à de nombreux types de garnissage.

$$\frac{|\Delta p|}{L} = 150 \frac{\mu}{D_p^2} ((1 - \varepsilon)^2 / \varepsilon^3) v_\infty + (1.75 \rho / D_p) ((1 - \varepsilon) / \varepsilon^3) v_\infty^2 \quad (3.11)$$

Lorsque l'écoulement est laminaire, le second terme (4.11) peut être négligé, ce qui donne l'équation de Blake-Kozeny

$$\frac{|\Delta p|}{L} = 150 \frac{\mu}{D_p^2} ((1 - \varepsilon)^2 / \varepsilon^3) v_\infty \quad (3.12)$$

Ou:

$\mu = \text{viscosité}$

$D_p = \text{diamètre moyen des particules}$

$L = \text{Longueur du lit}$

$\varepsilon = \text{fraction du vide}$

Le coefficient de perméabilité et de perte d'inertie sont identifiés comme suit:

$$\alpha = \frac{D_p^2}{150} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (3.13)$$

$$C_2 = \frac{3.5 (1 - \varepsilon)}{D_p \varepsilon^3} \quad (3.14)$$

3.1.4 Equation de la réaction

L'équation de transport d'espèce chimique utilisé par ANSYS est la suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + R_i + S_i \quad (3.15)$$

Y_i : fraction massique de l'espèce chimique i

D_i : coefficient de diffusion

R_i : terme source de la reaction

S_i : autre terme source.

La signification physique des termes de l'équation est la suivante:

A gauche, le premier terme $\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i)$ est le taux de variation, $\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_i)$ est le taux de débit net (convection), dans la partie droite, le premier terme $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right)$ est le taux de changement dû à la diffusion, le second R_i est le taux de changement dû aux sources de réaction, dernier terme S_i est le taux de variation dû à d'autres sources. La source nette d'espèce chimique i due à la réaction R_i est calculée comme la somme des sources de réaction sur les réactions N_R à laquelle l'espèce participe :

$$R_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} \widehat{R}_{i,r} \quad (3.16)$$

$M_{w,i}$: est la masse moléculaire de l'espèce i

$\widehat{R}_{i,r}$: est le taux molaire de destruction/ création de l'espèce i en réaction r

Pour une réaction irréversible, le taux molaire de création / destruction des espèces i dans la réaction r est donné par:

$$\widehat{R}_{i,r} = \Gamma (v''_{i,r} - v'_{i,r}) (k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r})}) \quad (3.17)$$

Où

$\eta'_{j,r}$: taux d'exposant de production des espèces réactives j dans la réaction r

$\eta''_{j,r}$: taux d'exposant de production des espèces réactives j dans la réaction r

Γ présente l'effet net des corps tiers sur le taux de réaction. Ce terme peut être calculé à l'aide de l'équation suivante:

$$\Gamma = \sum_j^N \gamma_{j,r} C_j \quad (3.18)$$

Où $\gamma_{j,r}$ présente l'efficacité du troisième corps de l'espèce jth dans la rth réaction. Constante de vitesse de la réaction r, $k_{f,r}$ est calculée dans ANSYS utilisant l'expression d'Arrhenius.

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{\frac{-E_r}{RT}} \quad (3.19)$$

Où

A_r est le facteur pré-exponentiel, β_r est l'exposant de la température (sans dimension), E_r est l'énergie d'activation de la réaction (J / kgmol) et R est la constante de gaz universelle (J / kgmol-K).

3.2 Méthodologie de la résolution

3.2.1 Les conditions aux limites

La résolution numérique du modèle mathématique adopté est régie par des conditions initiales et des conditions aux limites appliquées aux frontières du domaine. Le fluide dans le réacteur est initialement à une vitesse superficielle uniforme. Les différentes conditions appliquées dans notre étude sont illustrées dans la Figure 29.

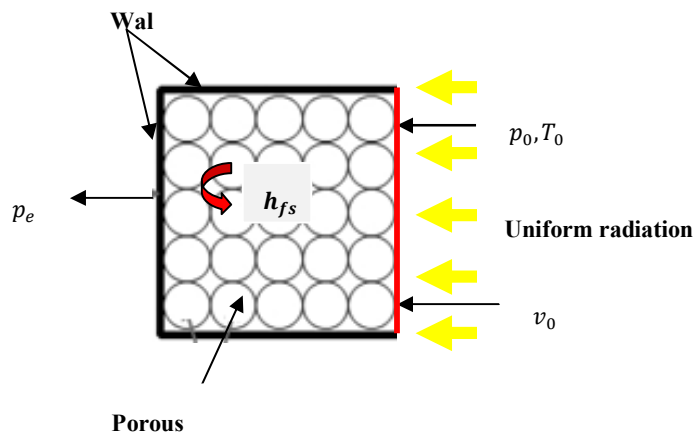


Figure 29 Présentation des conditions aux limites

Lors de l'analyse, le flux radiatif solaire concentré entrant a été traité comme parallèle, constante et uniforme. Les parois latérales du réacteur étaient considérées statiques et adiabatiques ;

La limite d'entrée a été définie pour avoir une pression p_0 (de 2000 Pa au-dessus de la valeur de référence) et une température $T_0 = 300$ K. La limite de sortie a été définie avec une pression statique de 0 Pa. La pression référentielle a été fixée à 101 325 Pa. La porosité standard utilisée dans ce modèle est celle de l'arrangement cubique (0.476). Cette valeur est utilisée tenant compte que la structure ordonnée influe peu sur la valeur de la porosité que l'on peut retrouver en 2D.

h_{fs} Désigne le coefficient d'échange par convection entre la phase fluide et solide ; il est calculé à partir de la corrélation suivante :

$$h_{fs} = \frac{k_f (2 + 1,1 \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \cdot Re^{0.6})}{d_p} \quad (3.20)$$

Cette fonction a été implémentée dans le code utilisant une fonction UDF

3.2.2 Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est une méthode numérique qui transforme les équations différentielles, représentant les lois de conservation, en équations algébriques discrètes sur des volumes finis (Figure 30).

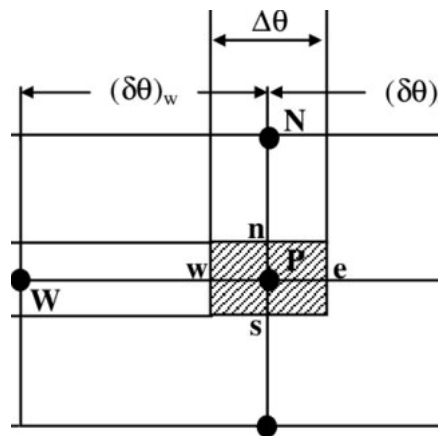


Figure 30 méthode des volumes finis

Cette méthode a été décrite pour la première fois en 1971 par Patankar et publiée en 1980 [76]. La première étape du processus de solution est la discrétisation du domaine géométrique en volumes de contrôle qui entourent les nœuds. Les faces d'un volume de contrôle bidimensionnel sont localisées au point e, w, n, s (Figure 30) avec P le centre du volume de contrôle considéré. Les équations différentielles sont ensuite transformées en équations algébriques en les intégrant sur chaque volume de contrôle. Le logiciel ANSYS/Fluent enregistre par défaut les valeurs discrètes au centre des cellules. Comme le calcul de ces grandeurs est nécessaire sur les faces pour exprimer le terme de convection et de pression. Ces valeurs vont être interpolées à partir des valeurs au centre des cellules. Ceci est accompli en utilisant un schéma. FLUENT dispose de plusieurs schémas : QUICK, loi de puissance, schéma musclé, UPWIND et autre.

3.2.3 Discrétisation UPWIND

Pour cette modélisation, Le schéma utilisé est « UPWIND ». Dans ce schéma, la valeur de la variable de l'équation différentielle à l'interface n'est pas interpolée, elle est exprimée en fonction des valeurs de variable dans les nœuds voisins (Figure 31).

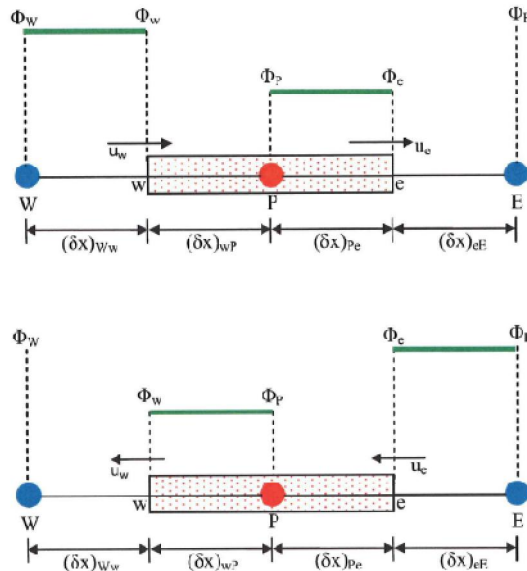


Figure 31 Principe du schéma UPWIND

Le schéma UPWIND prend aussi en considération la direction de l'écoulement pour la détermination des grandeurs convectives sur les faces des volumes élémentaire.

3.2.4 Algorithme SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations)

Pour initier la résolution des équations du modèle mathématique, il est nécessaire de connaître le champ de pression. Dans le cas où ce champ est inconnu, l'établissement d'une équation de pression est nécessaire

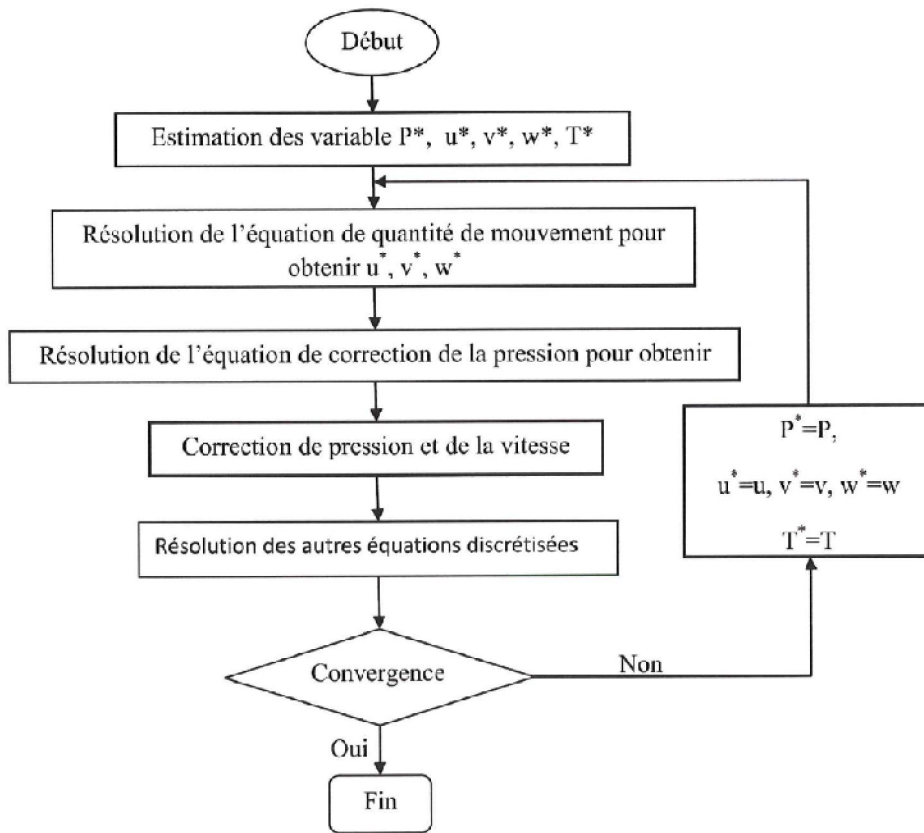


Figure 32 Algorithme SIMPLE

Nous utilisons dans le présent travail l'algorithme SIMPLE (Figure 32) de Patankar [76]. C'est l'algorithme le plus universel et le plus utilisé pour le couplage pression/vitesse. C'est une procédure de prédiction correction, avec laquelle il nous sera possible de tirer un champ de pression et de vitesse vérifiant à la fois les équations de quantité de mouvement et celle de continuité (Figure 33).

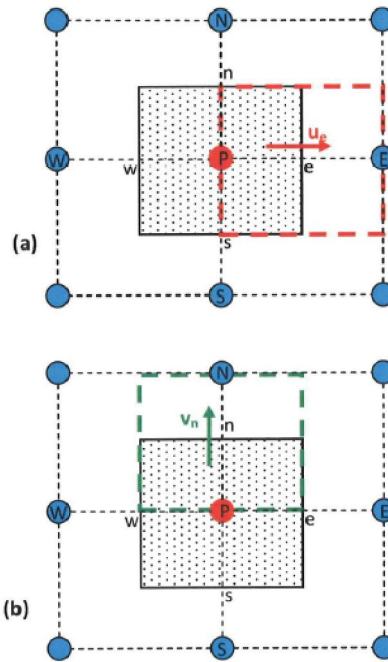


Figure 33 Maillage décalé

3.2.5 Critère de convergence :

Un processus itératif atteint la convergence lorsque toutes les erreurs tendent vers zéro. Au cours des itérations, les écarts entre les différentes grandeurs calculées deviennent de plus en plus faibles et le processus itératif converge dès qu'un critère sur le résidu, ε fixé par l'utilisateur est atteint. Le critère de convergence est donc utilisé pour arrêter les itérations lorsqu'il est satisfait. Dans notre cas d'étude, la convergence est assurée lorsque le maximum du résidu de toutes les variables atteint la valeur de 10^{-5} .

3.2.6 Facteurs de la réaction:

Une analyse a d'abord été réalisée pour l'écoulement du N_2 afin de déterminer le comportement thermique du lit; des réactions chimiques ont ensuite été incluses dans le modèle pour analyser la cinétique des réactions et leur impact sur le comportement thermique du réacteur.

Les données utilisées pour la réaction chimique sont mentionnées dans les tableaux 5 et 6 :

Table 5 données utilisées pour la réaction

$\Delta H_{red} (J mol^{-1})$	319000
$\Delta H_{hyd} (J mol^{-1})$	286000
$E_{a,R} (J mol^{-1})$	240000
$E_{a,H} (J mol^{-1})$	10^5
$k_{0,R} (mol m^{-3} s^{-1})$	10^6
$k_{0,H} (s^{-1})$	35
$\psi (mol m^{-2})$	0.1

Table 6 Propriétés des matériaux [77-80]

Propriétés	$NiFe_2O_4$	NiO	FeO
Densité ($\frac{Kg}{m^3}$)	5360	6670	5740
C_p ($\frac{j}{KgK}$)	564,73	620	668,71
λ ($\frac{w}{mK}$)	10	25,78	11
M (g/mol)	234,38	74,69	71,84
SS entropie ($\frac{j}{K} mol K$)	131370	37990	58500
	-1077700000	-239700000	-271900000

3.3 Conclusion

Au terme de ce chapitre, il est à noter que la méthode des volumes finis présente des avantages numériques très conviviaux. Le SIMPLE ayant pour but le couplage entre la pression

est la vitesse sera utilisé pour résoudre les équations gouvernantes présentées précédemment.
Dans ce qui va suivre, nous présenterons les résultats émanant de notre calcul numérique.

**CHAPITRE 4 RESULTATS ET
DISCUSSION**

4.1 Introduction

Avant d'exploiter les résultats de la simulation numérique, il est important d'effectuer une étude sur l'indépendance du maillage. Pour cela, nous avons analysé plusieurs grilles de maillage. On constate que les écarts obtenus pour les grilles étudiées est très faible. Pour la suite, nous avons adopté pour nos calculs la grille structuré qui donne un bon compromis entre taille de stockage et temps de calcul.

4.2 Test de maillage

Avant d'exploiter les résultats de la simulation numérique, il est important d'effectuer une étude sur l'indépendance du maillage. Pour cela, nous avons analysé plusieurs grilles de maillage. On constate que les écarts obtenus pour les grilles étudiées est très faible. Pour la suite, nous avons adopté pour nos calculs la grille structuré qui donne un bon compromis entre taille de stockage et temps de calcul.

4.3 Validation

Afin de valider nos résultats numériques, nous les avons comparés avec les travaux publiés par Zhiyong Wu et al , (2011) [81]. Il s'agit d'une étude expérimentale et numérique sur l'écoulement dans un récepteur d'air solaire volumétrique en mousse avec une cavité cylindrique Figure 34. Les résultats publiés par Zhiyong Wu et al sont obtenus dans les conditions opératoires suivant :

- Une pression d'entrée $p_0 = 101\,325$ Pa et une température statique $T_0 = 300$ K.
- Une pression statique de 0 Pa a la sortie de la structure poreuse.
- La propriété phasique de la structure poreuse sont : la porosité = 0.8 et $d = 1.5$ mm.
- La concentration du flux incident est de 600 kW/m

L'adaptation de notre modèle et la méthode de résolution c'est effectué en respectant les mêmes condition opératoires des travaux de Zhiyong Wu et al , (2011) [81]

Les résultats expérimentaux et numériques obtenus par Zhiyong Wu et al sont présentés Figure 35 et 36.

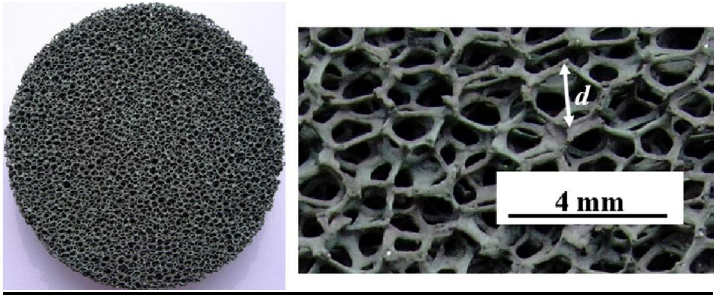


Figure 34 matériau de mousse céramique étudié par Zhiyong Wu et al

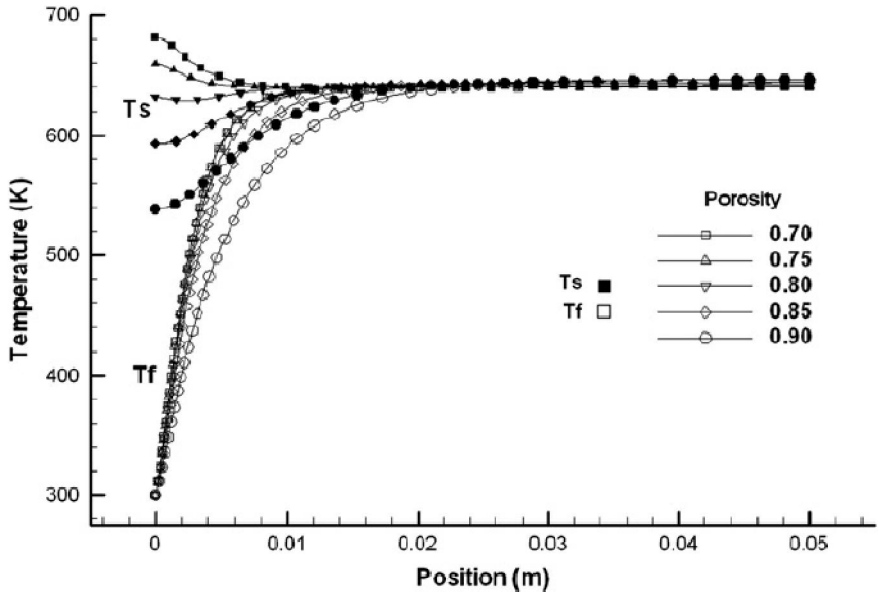


Figure 35 résultats numériques obtenus par Zhiyong Wu et al (distribution des températures pour les deux phases fluide et solide)

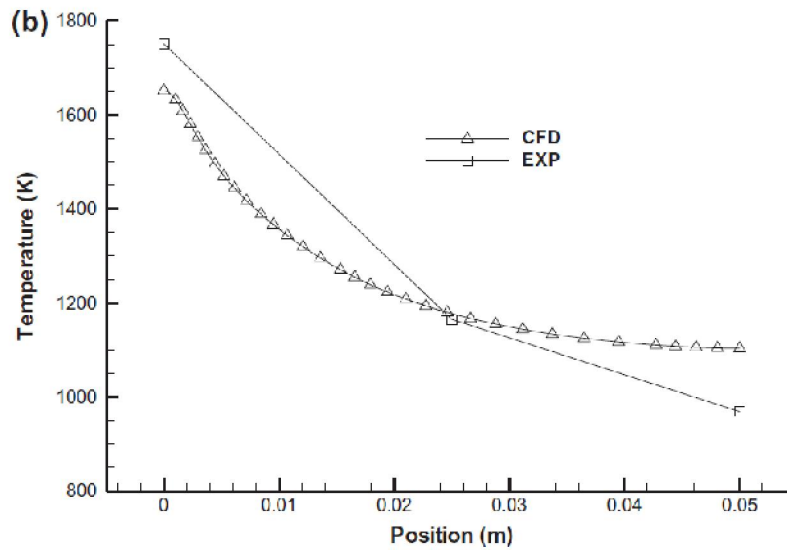
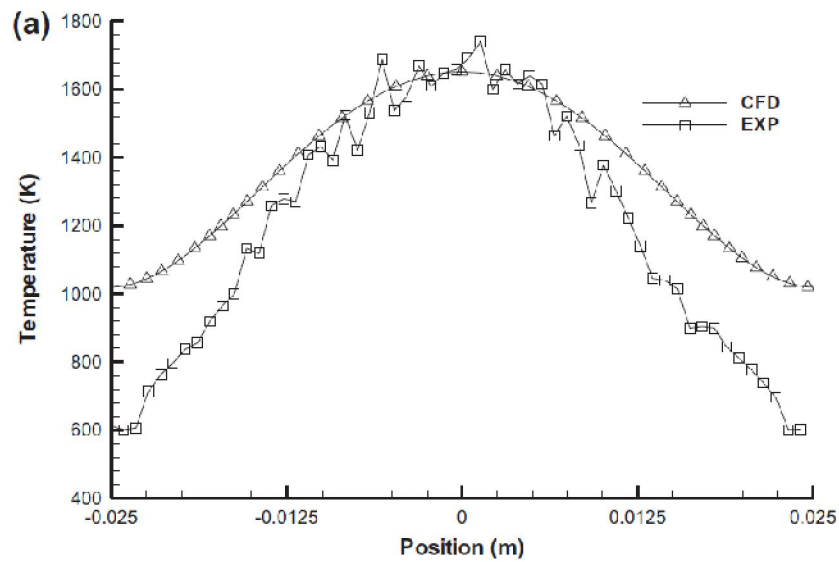


Figure 36 comparaison des résultats numérique et expérimental obtenus par Zhiyong Wu et al

les résultats obtenus par notre model montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux obtenus par Zhiyong Wu et al., (2011) [81] (Figures 37 et 38) avec des erreurs relatives moyennes observées de l'ordre de 8% pour la température. Alors on voit que le model proposé dans ce travail repose sur une approche CFD qui est correcte et qui permet de prédire correctement le comportement dynamique et thermique du réacteur solaire

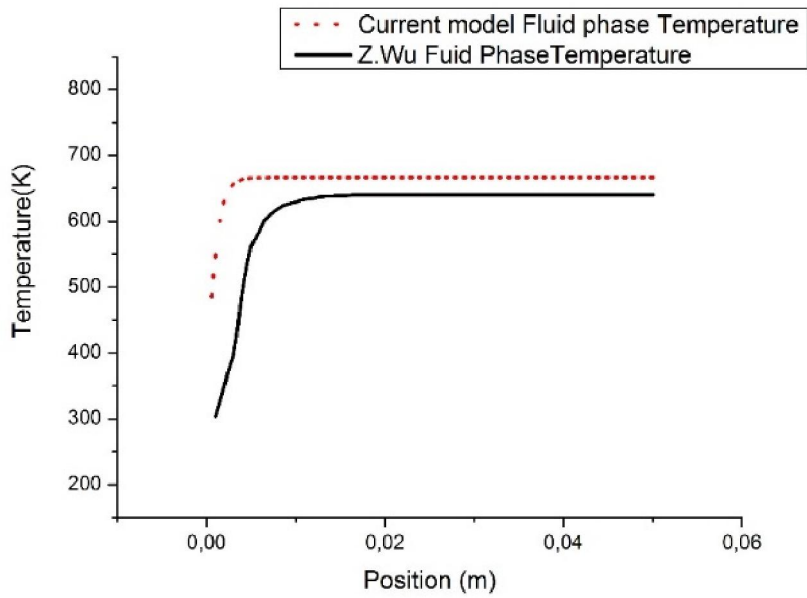


Figure 37 validation du modèle (phase fluide)

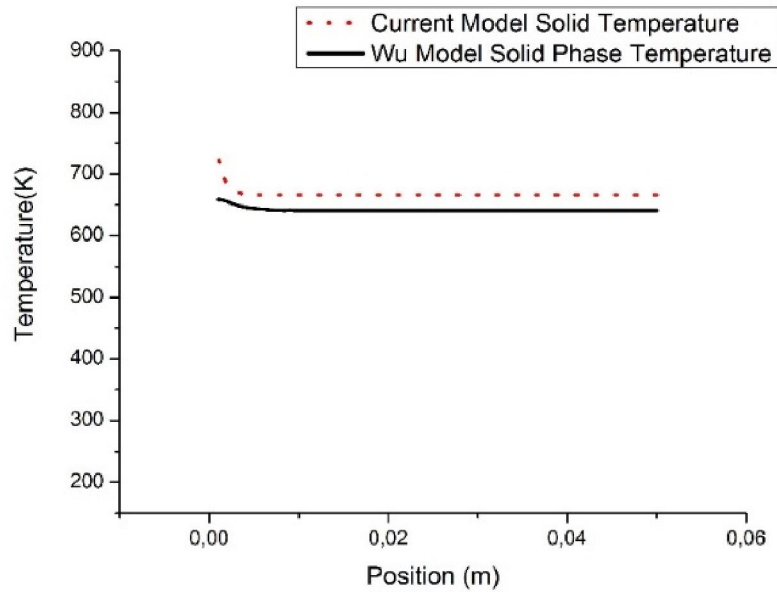


Figure 38 validation du modèle (phase solide)

Une différence moyennes observées de l'ordre de 8% entre la présente étude et le modèle de Zhiyong Wu et al., (2011) [81], cela peut s'expliquer par les détails du modèle utilisé qui ne sont pas exactement identique, on cite par exemple la corrélation du coefficient d'échange h_{fs} qui

n'est pas la même (l'auteur n'a pas présenté quelle corrélation a utilisé) et qui peut affecter les résultats numérique obtenu.

Pour la sélection du diamètre et de la disposition appropriés des billes, une série d'études a été réalisée pour déterminer leur relation avec les paramètres physiques de la structure poreuse

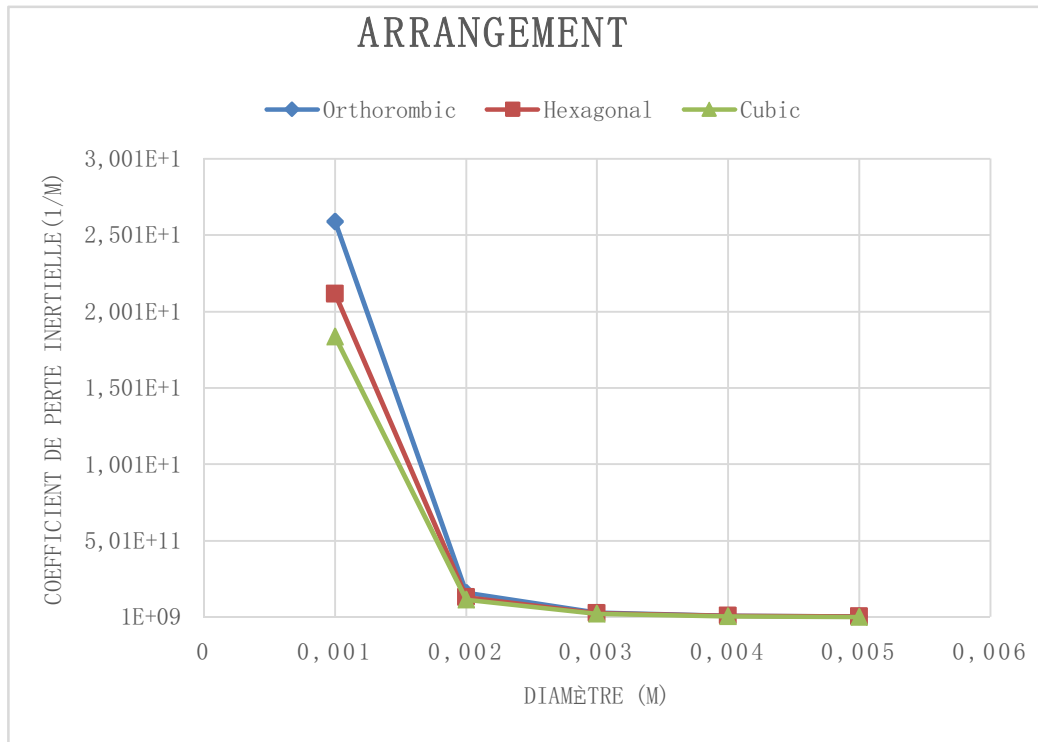


Figure 39 l'effet du diamètre de la bille sur le coefficient de perte d'inertie pour différents arrangements

Les résultats (figure 39) montrent que pour le diamètre des billes supérieur à 2 mm, le coefficient de jeu inertiel est presque identique. pour les billes de diamètre inférieur à 2 mm, l'écart entre les différents arrangement continue à croître en diminuant la valeur du diamètre. Dans notre cas, pour éviter un coefficient inertiel important, un diamètre de bille de 2 mm a été sélectionné pour cette étude. Il est montré que la valeur de perte d'inertie la plus élevée est celle de l'arrangement orthorhombique, qui présente la valeur de porosité la plus faible.

Le coefficient inertiel le plus faible est trouvé pour l'arrangement cubique où la porosité a la valeur la plus importante. Dans ce contexte, nous avons également étudié l'effet de l'arrangement et du diamètre sur la perméabilité. Les résultats sont présentés dans la figure suivante:

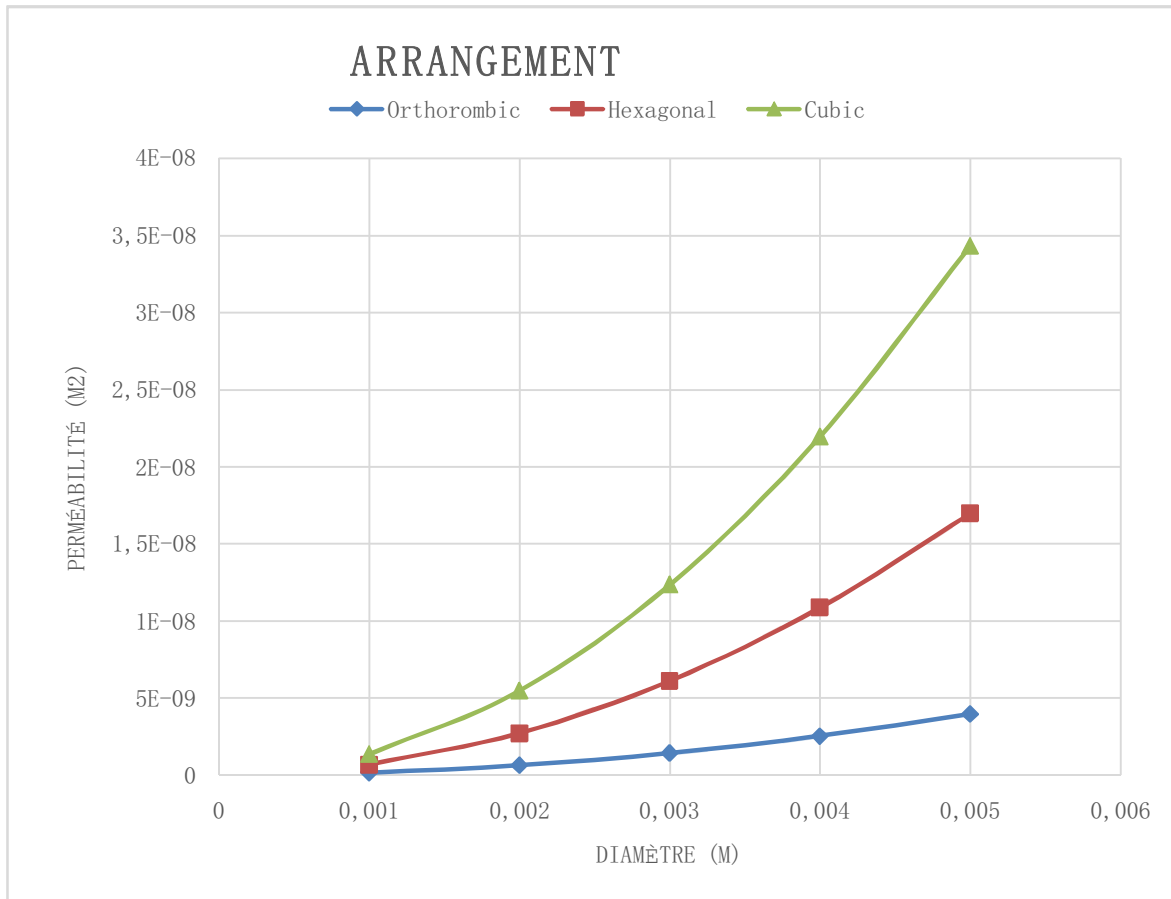


Figure 40 l'effet du diamètre de la bille sur la perméabilité pour différents arrangements

Comme le montre la figure 40, la valeur de perméabilité la plus élevée trouvée pour l'arrangement cubique et la plus basse pour l'orthorhombique. Elle montre également que lorsque le diamètre augmente, la perméabilité augmente pour tous les types d'arrangement.

Pour la circulation à travers le support poreux, la perméabilité la plus élevée est préférée, mais de l'autre côté, une perméabilité élevée signifie une petite surface d'interface, ce qui est préjudiciable dans notre cas, car nous recherchons une valeur élevée de la surface d'interface. Pour comprendre la relation entre ces deux paramètres et afin de trouver une valeur de compromis optimale, l'impact du diamètre des billes sur la surface d'interface est illustré dans la figure 41:

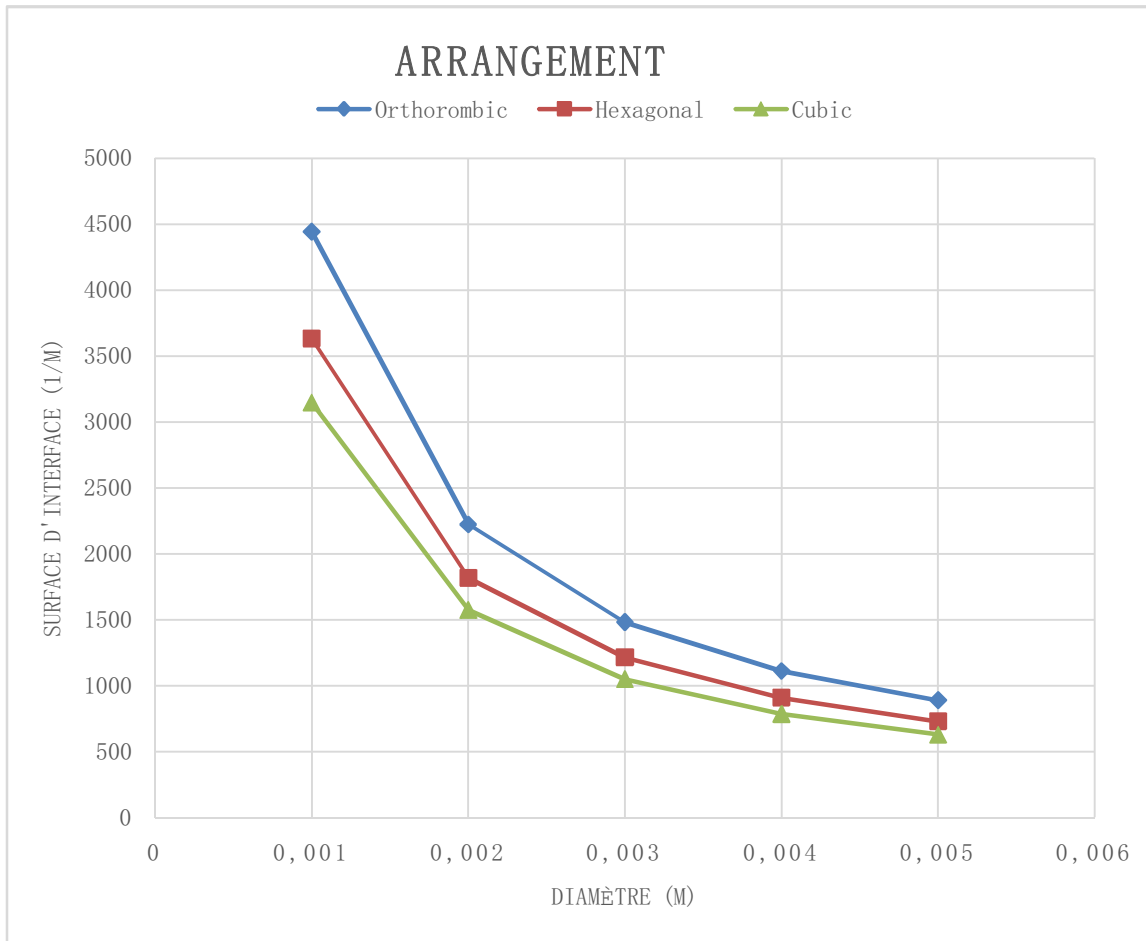


Figure 41 l'effet du diamètre de la bille sur la surface d'échange

Comme prévue, lorsque l'arrangement orthorhombique a la porosité la plus basse, la surface d'interface est importante. Les résultats montrent que l'écart entre les différentes dispositions ne cesse de croître lors de la réduction du diamètre des billes.

Pour le diamètre sélectionné (2mm), la valeur de la surface d'interface est d'environ 1500 (1 / m), ce qui est généralement acceptable pour ce type d'application

4.4 Optimisation

Afin d'optimiser les performances du récepteur solaire à lit fixe proposé, nous avons mené une série de simulations pour étudier l'effet de la vitesse à l'entrée, de la disposition des billes et du flux solaire.

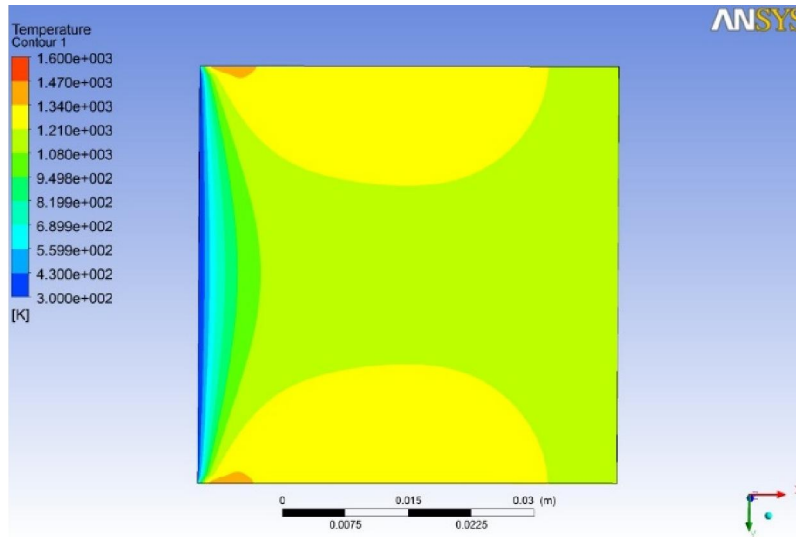


Figure 42 Comportement thermique (Phase fluide)

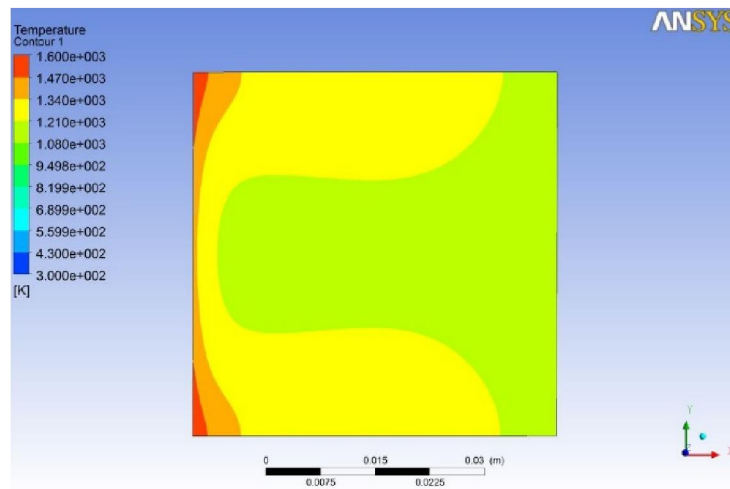


Figure 43 Comportement thermique (Phase Solide)

L'impact du flux solaire incident sur la distribution de la température des phases solide et fluide est étudié afin de sélectionner le flux d'énergie solaire optimal (Figure 44 et Figure 45). En

conséquence, la valeur optimale trouver de l'énergie solaire pour la réaction à la température de travail de 1200 K est d'au moins 2 KW et ne doit pas dépasser 2,5 KW.

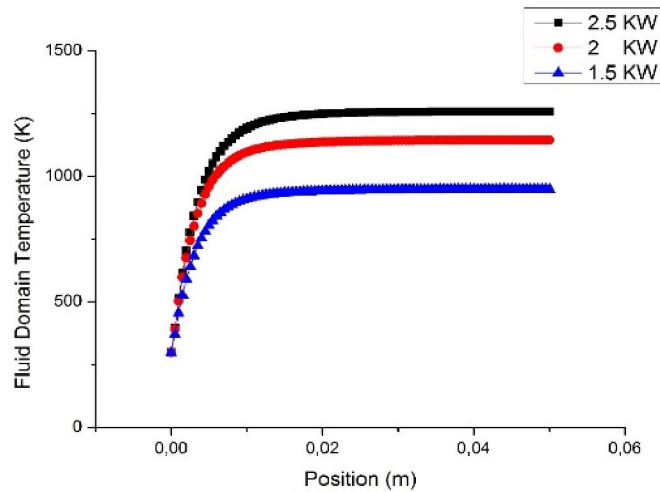


Figure 44 L'effet de la puissance solaire sure le comportement thermique pour la phase fluide

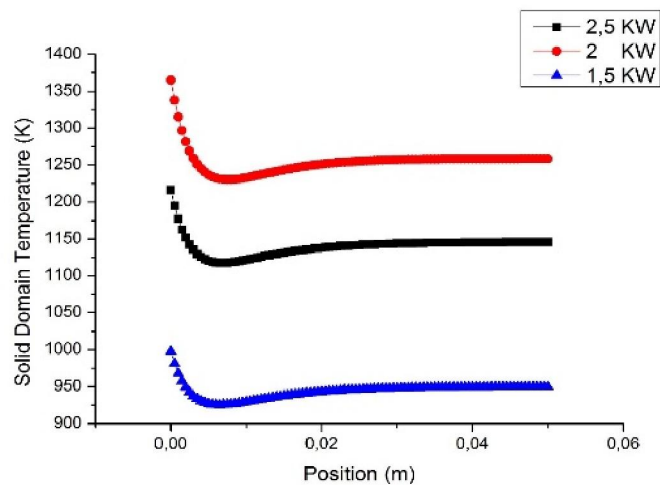


Figure 45 L'effet de la puissance solaire sure le comportement thermique pour la phase solide

Les Figures 46 et 47 présentent les comportements thermiques de la phase fluide et de la phase solide avec les mêmes propriétés d'absorbeur ($d = 0,72$ mm, / porosité = 0,476), sous différentes vitesses superficielles d'entrée. Cette figure montre que lorsque la vitesse d'entrée augmente, la température de sortie diminue et la température du solide devient plus uniforme. De plus, le lieu de température maximale se situe toujours à l'intérieur de l'absorbeur.

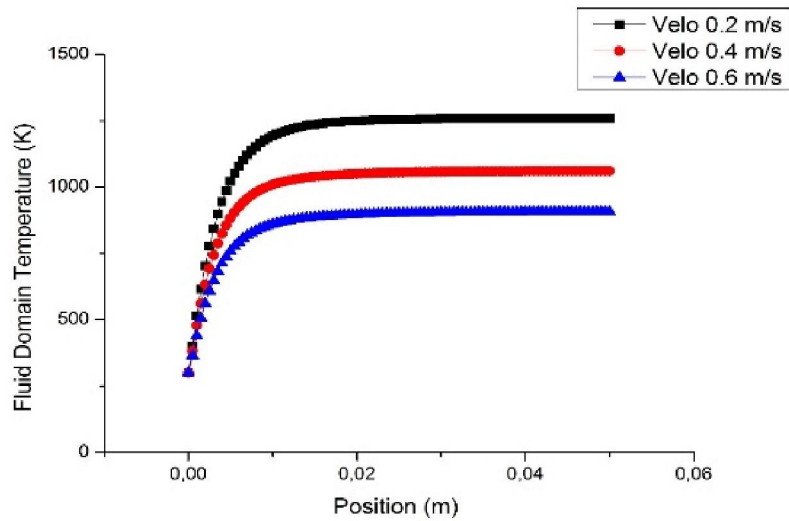


Figure 46 l'effet de la vitesse sur le comportement thermique le long de l'axe de symétrie (phase fluide)

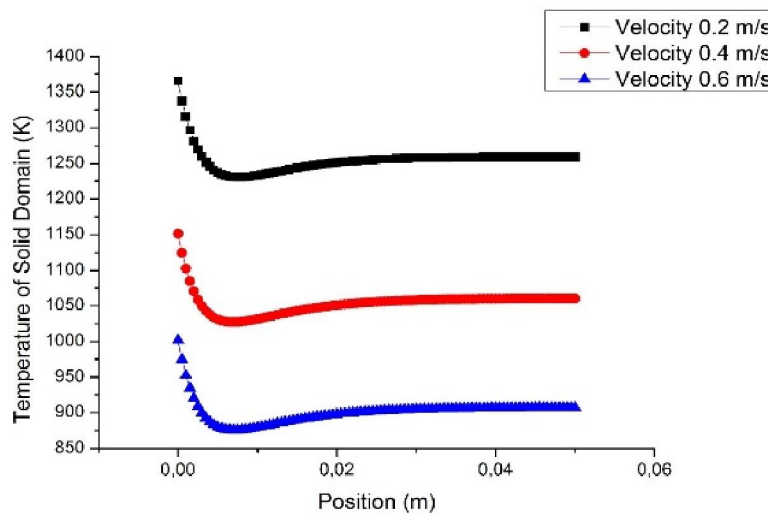


Figure 47 l'effet de la vitesse sur le comportement thermique le long de l'axe de symétrie (phase solide)

Une autre étude paramétrique portait sur la disposition des billes de céramique dans le lit qui affecte considérablement le comportement thermique de la structure poreuse, en particulier près de la surface avant. Les figures 48 et 49 montrent que la méthode d'arrangement affecte fortement le comportement thermique (comparaison entre les dispositions triclinique et cubique)

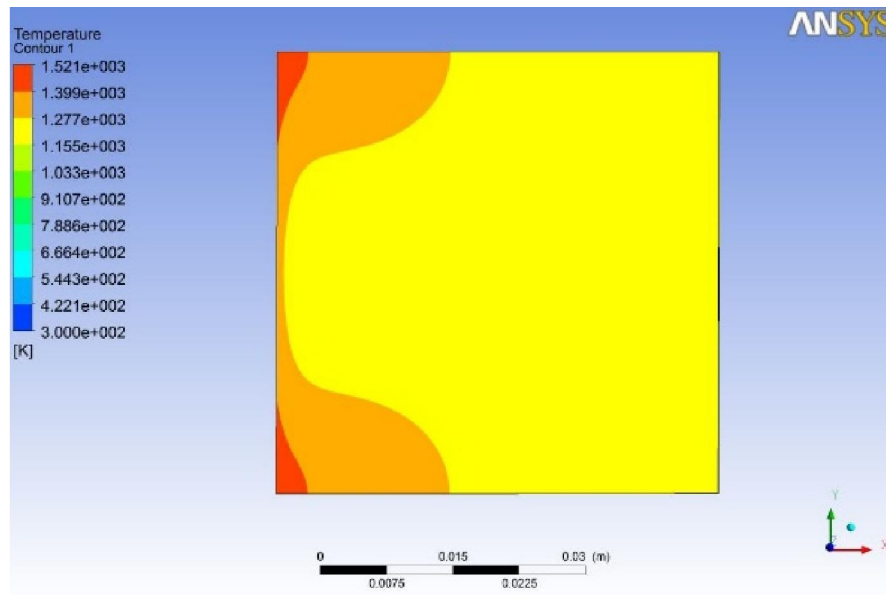


Figure 48 Comportement thermique, phase solide (arrangement triclinique)

L'arrangement cubique nous a donné le comportement suivant :

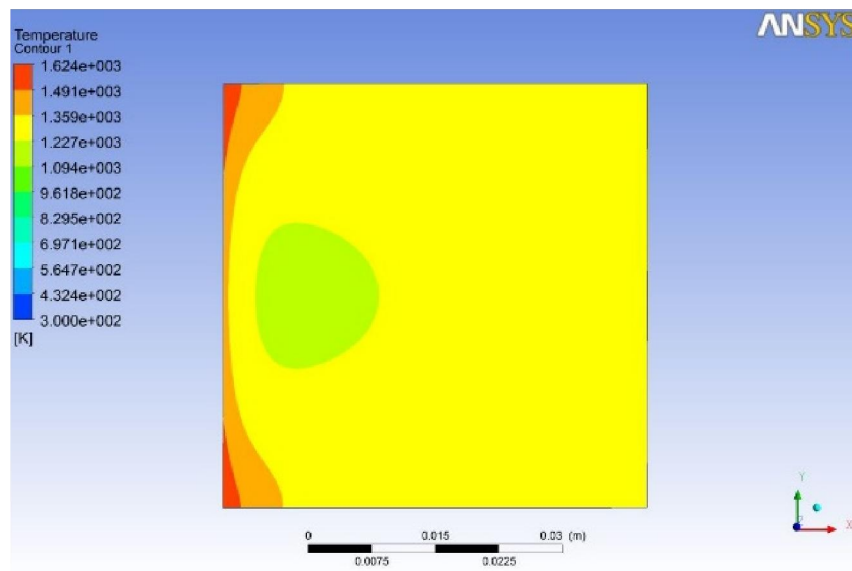


Figure 49 Comportement thermique, phase solide (arrangement cubique)

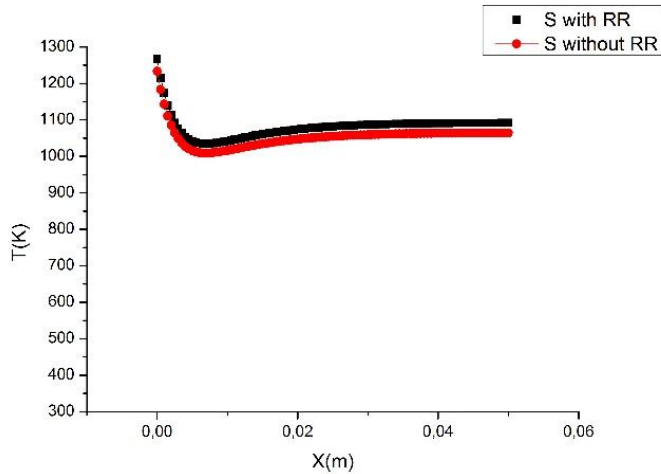


Figure 50 Comportement de la température du solide (S) avec et sans réaction de réduction

Comme prévu, les températures des solides et des fluides diminuent lorsque l'on tient compte de la réaction de réduction. La figure 50 présente le comportement thermique avec et sans réaction de réduction. La température des phases solide et fluide tend à s'homogénéiser après environ 1 cm de l'entrée du lit. Les résultats montrent que l'effet de la réaction sur les températures est limité; cependant, la réaction chimique ne consomme qu'une faible fraction de l'énergie solaire entrant dans le réacteur

4.5 Analyse des produits de la réaction thermochimique

La quantité de gaz produite peut être présentée soit par production d'hydrogène, soit par production d'oxygène. La figure suivante présente la fraction molaire d'oxygène le long de l'axe de symétrie:

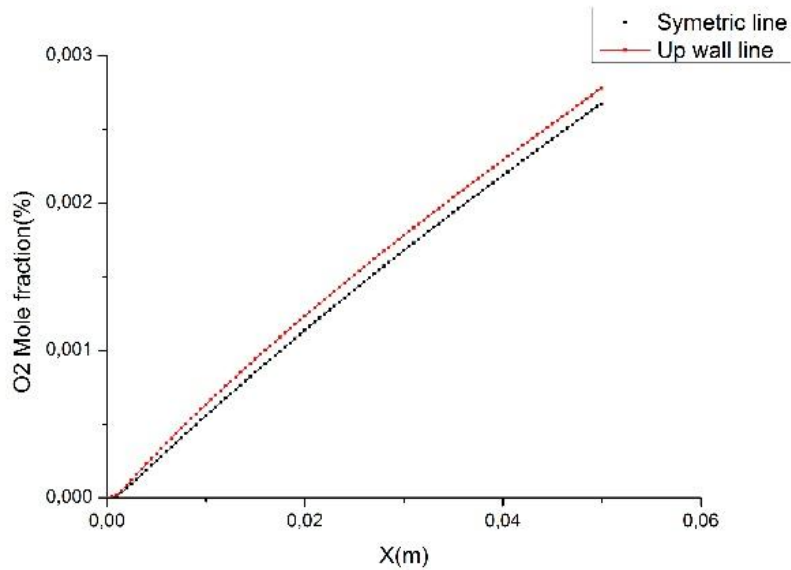


Figure 51 fraction molaire de l'oxygène

La figure 51 illustre la répartition de l'oxygène dans le réacteur pendant l'étape de réduction pour les lignes symétriques et les lignes de paroi. Les résultats montrent des concentrations d'oxygène élevées près de la paroi causées par l'effet de viscosité.

4.6 L'effet du canal (Channeling)

Les réacteurs à lit fixe présentent de nombreux avantages, parmi lesquels:

- Conversion plus élevée par unité de masse de catalyseur;
- Faible coût d'exploitation;
- Conception simple;

De l'autre côté, cela présente certains inconvénients, en particulier lorsque le remplissage du réacteur est inégal. Dans ce cas, le fluide ne s'écoule généralement pas de manière uniforme dans le réacteur en raison de l'effet de canalisation (Figure 52).

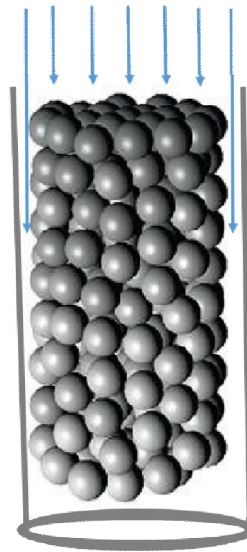


Figure 52 l'effet canalisation

En raison de l'impact du mur sur le paramètre thermo-physique du lit de fixe, la porosité du lit peut changer fortement et est très différente de la distribution de la porosité dans la zone éloignée du mur, ce qui affecte directement la distribution de l'écoulement du fluide. En fait, la porosité du lit dans la zone proche de la paroi est supérieure à celle de la zone interne, une plus grande quantité de fluide a tendance à s'écouler à travers la zone proche de la paroi (Figure 52), ce qui entraîne un déséquilibre de la distribution des vitesses en section d'entrée, phénomène connu sous forme d'effets de canalisation ou d'effets de paroi. L'effet de channelling a un effet important sur le phénomène physique du lit [82, 83].

La conception du lit, en particulier lorsqu'il s'agit d'un grand diamètre, doit tenir compte de la répartition de la porosité du lit. Considérons l'anisotropie radiale de la porosité du lit, elle est très importante pour la modélisation des structures à lit compacté.

Comme décrit, l'effet de canalisation est un phénomène crucial pour la conception et le fonctionnement des structures de lits fixes; pour comprendre ce phénomène et ses effets sur le comportement thermique et dynamique, ainsi que sur l'utilisation possible de ce phénomène pour améliorer l'efficacité, une série de simulations a été réalisée à l'aide de la configuration illustrée dans la figure suivante (Figure 53).

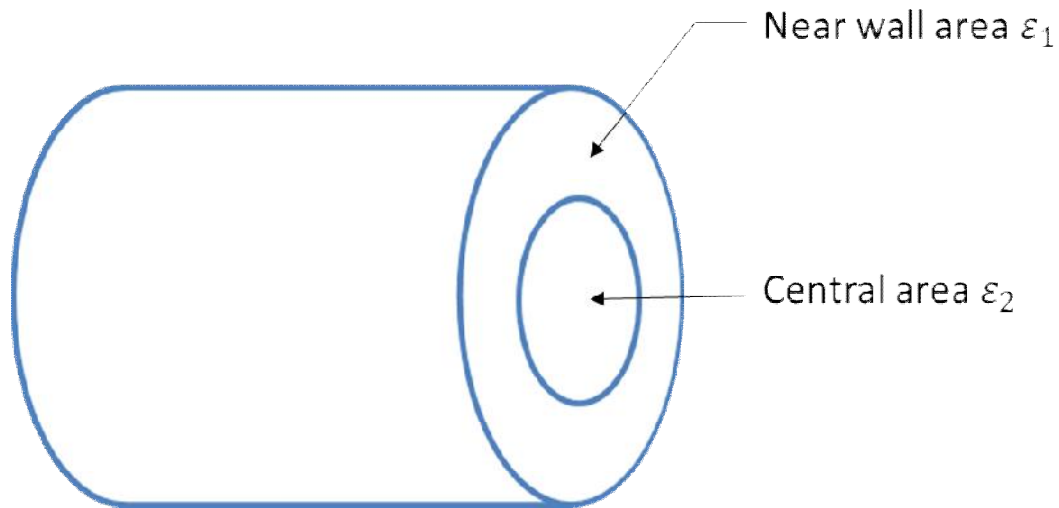


Figure 53 l'effet de canalisation

The reactor is supposed to be divided into two zones, near wall area, and central area, the following results show the effect of the porosity gradient between the two zone can affect the temperature behavior.

Pour la simulation, Le réacteur est divisé en deux zones, près de la paroi et de la zone centrale, les résultats suivants montrent que l'effet du gradient de porosité entre les deux zones peut influencer sur le comportement en température.

Le premier cas est une étude de référence où les deux zones ont la même porosité $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.4$. Les résultats sont présentés dans les figures 54 et 55:

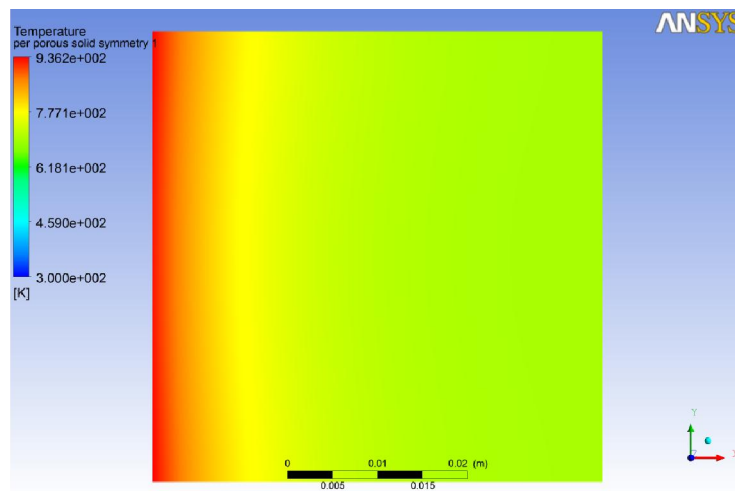


Figure 54 Phase solide

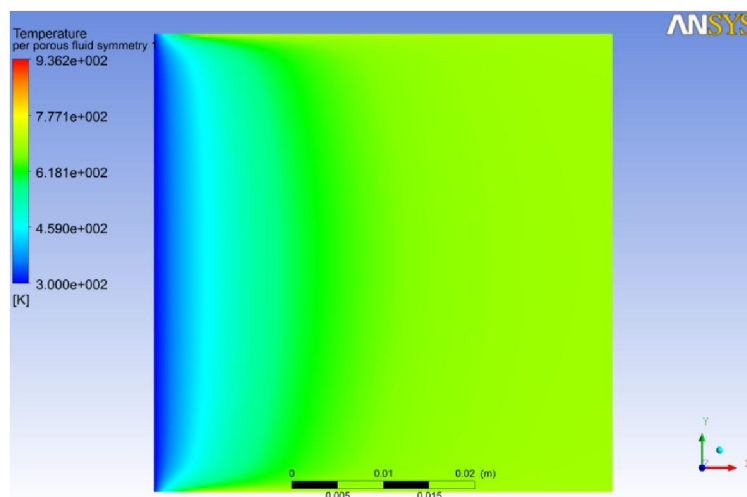


Figure 55 phase fluide

Les figures présentent le comportement thermique des deux phases solide et fluide. Dans ce cas, les résultats montrent une diminution homogène pour les deux phases, pour la phase solide, la valeur la plus élevée trouvée est d'environ 1000 ° K à la surface frontale, pour la phase fluide, la température a tendance à s'homogénéiser à 700 ° K après environ 1 cm de la surface frontale.

Le deuxième cas étudié est celui où la porosité de la zone proche du mur ($\epsilon_1 = 0.2$) est inférieure à celle de la zone centrale ($\epsilon_2 = 0.4$), les résultats sont présentés dans les figures suivantes 56-59.

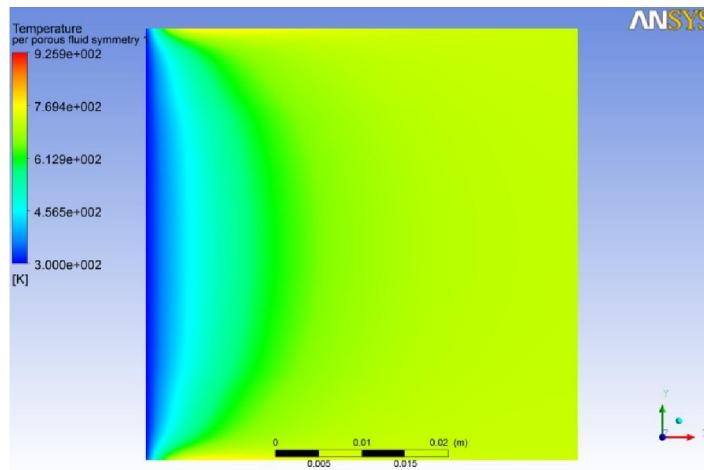


Figure 56 deuxième cas: phase fluide

Dans ce cas, la distribution de la température dans la phase fluide montre que la température est plus élevée près des parois, pour avoir une compréhension approfondie du phénomène, les vecteurs de vitesse à travers la structure sont ensuite tracés.

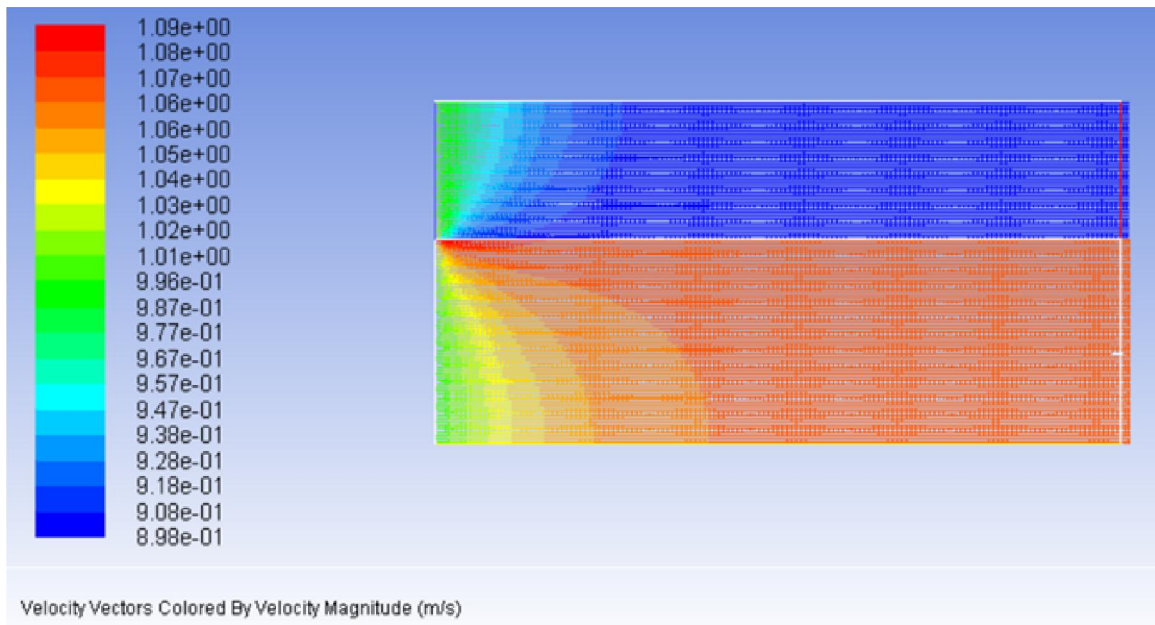


Figure 57 vecteur des vitesses

La figure montre que le fluide s'accélère près de la surface frontale à la frontière entre les deux zones. La figure suivante illustre le comportement de l'écoulement:

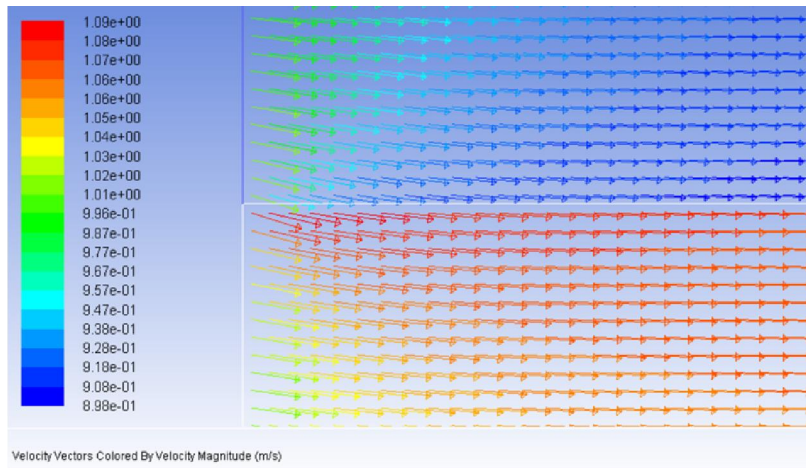


Figure 58 zoom sur les vecteurs de vitesse

Lorsque le flux s'accélère de la zone proche du mur à la zone centrale, la température du réacteur en amont pour ce cas est inférieure à celle du cas de référence.

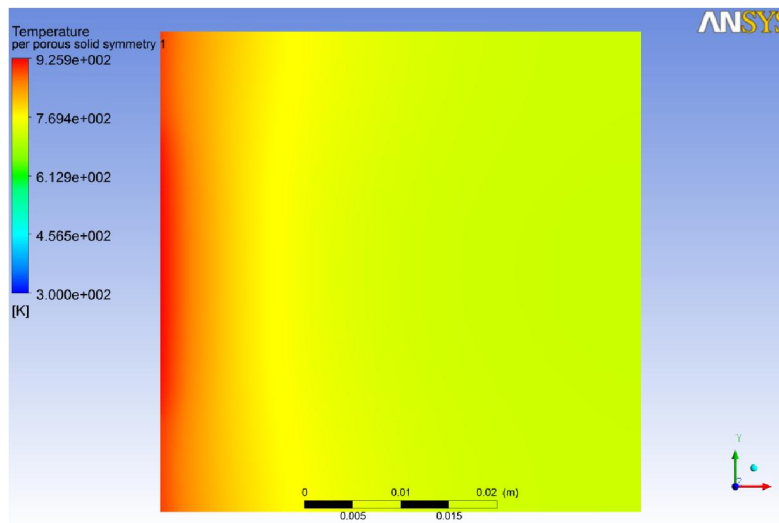


Figure 59 la température solide pour le second cas

Le troisième cas est l'inverse du deuxième cas, la porosité de la zone centrale ($\varepsilon_1 = 0.2$) et la porosité de la zone proche de la paroi ($\varepsilon_2 = 0.4$), les résultats sont présentés dans les figures suivantes:

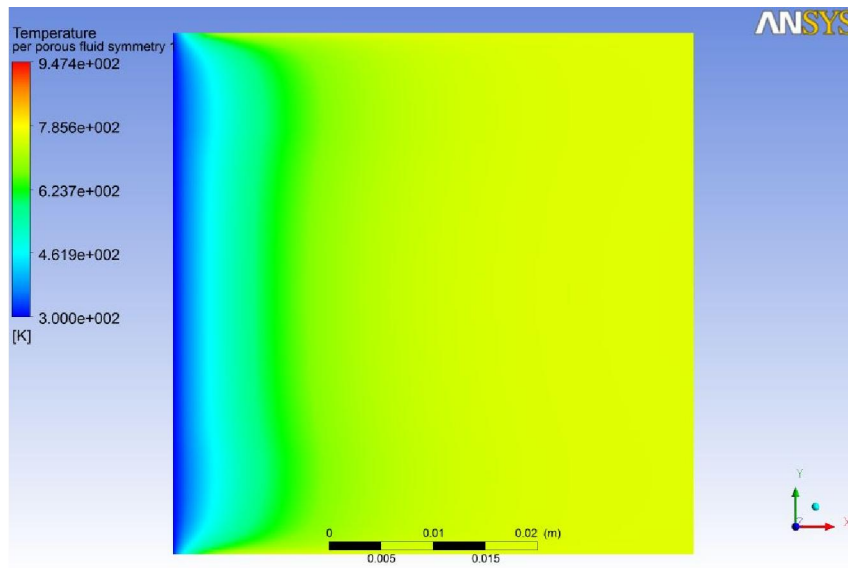


Figure 60 Phase fluide pour le troisième cas

Comme on peut s'y attendre, dans ce cas, nous observons que la transition dans la zone proche de la paroi est plus longue que dans le cas de référence, dans ce cas, la température du fluide prend plus de temps pour être homogénéisée et la température moyenne est inférieure au premier cas.

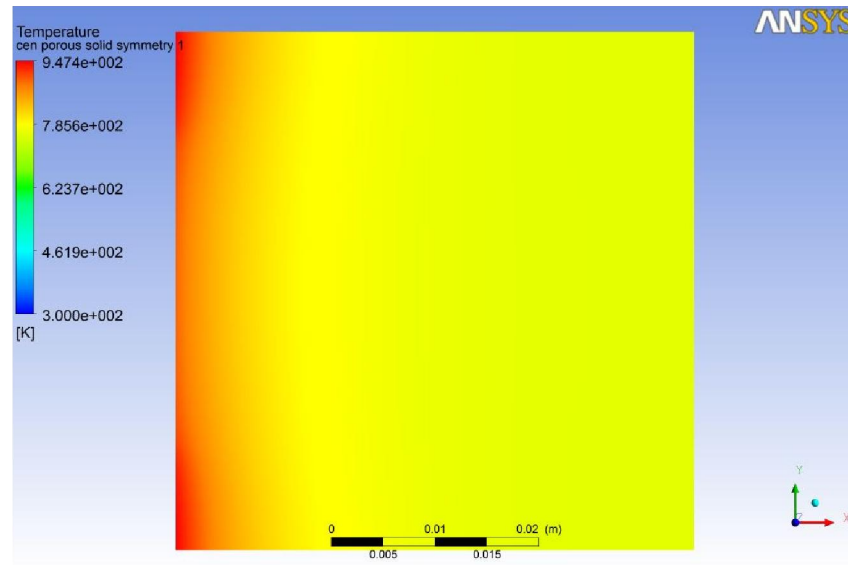


Figure 61 température du solide (troisième cas)

4.7 Montage expérimental

Dans cette partie, les éléments essentiels pour exécuter l'étude expérimentale sont élaborés. Cela consiste à dimensionner le réacteur, identifier les équipements connexes ainsi que le montage du procédé ;

La liste des équipements est divisée en trois familles :

- Equipement de mesure;
- Matériel et équipement de tuyauterie ;
- Matériel de support d'essai ;

Les équipements acquis dans ce projet sont : (Caméra thermique présentée sur la figure 63, la première commande SWAGELOK présentée sur le tableau 7), la réception d'équipement restant est en cours (la deuxième commande SWAGELOK tableau 8, Matériel de support d'essai présentée sur la figure 64),

Thermal Camera testo 890



Figure 62 Camera thermique testo 890

Connecteurs et raccords SWAGELOK

Table 7 la première commande des équipements et connecteurs SWAGELOK

Reference		Number
MS-TC-308	Tube Cutter for Stainless Steel, Soft Copper, and Aluminum Tubing from 3/1	2
MS-HTB-4T	Hand Tube Benders	1
MS-HTB-4	Hand Tube Benders	1
MS-BTB-M	Bench Top Tube Benders	1
MS-44CT-27	Swagelok deburring tool for the inside diameter of 1/4, 3/8, and 9/16 in.	2
MS-TW-4	Tee Wrench, 1/4 in. and 6 mm	2
SS-4P4T	Stainless Steel Quarter Turn Instrument Plug Valve, 1/4 in. Swagelok Tube Fitting, 1.6 Cv	4
SS-T4-S-035-20	Tube inox 316/ 316L, sans soudure, diam. ext. 1/4" x paroi 0,035" x 20 pieds (Prix et commande au Pied ; Commande par multiple de 20 Pieds)	12m
SS-400-6	SS Swagelok Tube Fitting, Union, 1/4 in. Tube OD Working pressure: 10200 PSI	10
SS-400-61	SS Swagelok Tube Fitting, Bulkhead Union, 1/4 in. Tube OD	10
SS-400-C	Stainless Steel Cap for 1/4 in. Swagelok Tube Fitting	10
	Stainless Steel Plug for 1/4 in. Swagelok Tube Fitting	10
SS-400-9	SS Swagelok Tube Fitting, Union Elbow, 1/4 in. Tube OD	10
SS-400-2-4	SS Swagelok Tube Fitting, Male Elbow, 1/4 in. Tube OD x 1/4 in. Male NPTWP:10,000psi	10

Table 8 la deuxième commande des équipement et connecteurs SWAGELOK

Reference		Number
PGI-63B-BC9-L AQ X-ABEFH	MANOMETRE POUR USAGE GENERAL EN ACIER INOXYDABLE	4
PFA-T4-062-100	PFA Series PFA Tubing 1/4 in.	2
SS-42GXS4	SWITCHING valves	8
SS-42GS4	SWITCHING valves	15
SS-62TS4-T-35-C-HT	Pneumatic Actuators	2



Figure 63 Swagelok fittings

Matériel de support d'essai :

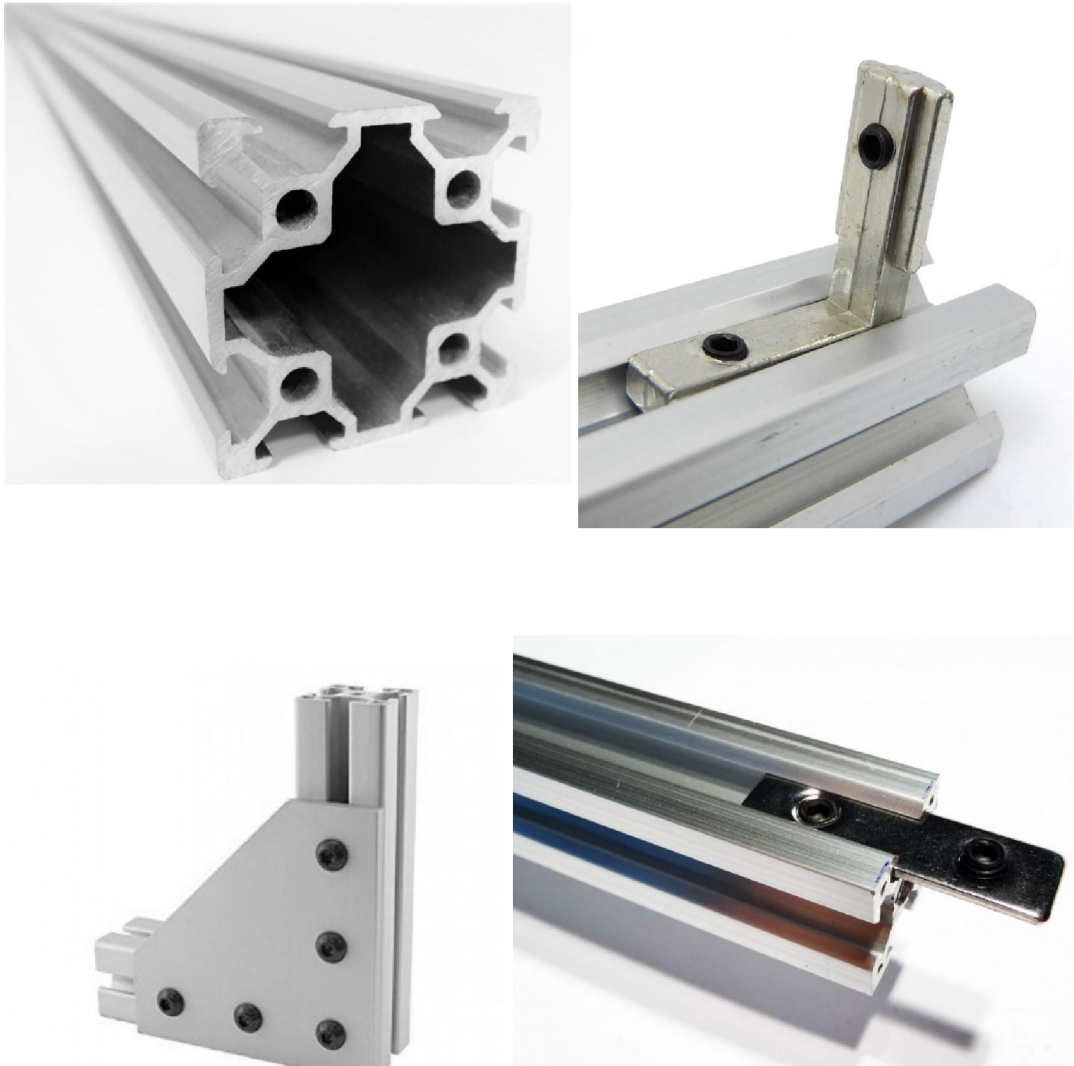


Figure 64 experimental setup build materials

Les parties à acquérir sont le simulateur solaire devant assurer la température minimal d'activation. La figure 14 illustre le dispositif correspondant.

4.8 Conclusion:

Dans la présente étude, une analyse par CFD du réacteur solaire de dissociation de l'eau est entreprise. Le modèle de non-équilibre thermique local a été utilisé pour étudier les distributions de température. Une étude numérique a été réalisée pour étudier l'effet de la vitesse d'entrée, du rayonnement solaire, de la disposition des billes et de la réaction. Les simulations ont également été comparées avec des données expérimentales. Les résultats montrent que la distribution de la température dépend fortement des conditions de travail et des propriétés du support poreux. Les résultats montrent que la répartition idéale de la température ainsi que la température maximale de la structure poreuse solide est située à l'intérieur du réacteur. Il est remarquable que la disposition des billes garnies influe considérablement sur la répartition de la température à l'intérieur du réacteur. En ce qui concerne les simulations d'écoulement réactif, l'impact de la réaction sur les distributions de température a été analysé, une diminution de la température atteignant environ 60 K a été mise en évidence en raison de la réaction endothermique.

Conclusion générale

Le potentiel énergétique solaire se trouve en abondance en Algérie. Sa collecte, puis sa conversion en combustible stockable tel que l'hydrogène, représentent un des enjeux technologiques d'un intérêt majeur pour l'humanité. Par ailleurs, une des techniques ayant un grand intérêt économique au vu du faible cout du réactif initial est la dissociation de l'eau (water splitting) en oxygène et hydrogène par cycle thermochimique.

Dans ce contexte, l'objectif de cette thèse constitue une nouvelle contribution dans les études des réacteurs solaires de production d'hydrogène. Il s'agit de proposer un nouveau design basé sur des billes en céramique et aussi de mieux contrôler et améliorer le comportement thermique afin de trouver la conception optimale du réacteur.

La première partie du travail consistait à étudier numériquement le comportement thermique et dynamique du réacteur, destiné à la production cyclique de l'hydrogène et l'oxygène. En premier lieu et pour étudier le comportement thermique sans réaction chimique, le fluide qui s'écoule à travers le réacteur est l'azote. L'écoulement est considéré bidimensionnel, stationnaire et en régime turbulent. Le rayonnement solaire à l'entrée du réacteur a une valeur optimal de 2.5 KW La simulation numérique est assurée à l'aide du code de calcul ANSYS-FLUENT.

Dans la seconde partie du travail réaction chimique a été incluse. Le fluide dans cette partie est la vapeur d'eau. Il s'agissait donc de voir l'effet de la réaction sur le comportement thermique.

Compte tenu des résultats obtenus, nous pouvons conclure ce qui suit :

1. Il existe une configuration optimale des billes pour laquelle la perméabilité est maximale pour une porosité optimale. Ce qui engendre une perte de charge minimale. Cette configuration est assurée par un arrangement cubique des billes.

2. L'échange de chaleur entre la matrice poreuse et le fluide se trouve ainsi maximiser sans altération de l'écoulement.

3. Le diamètre des billes correspondant à la configuration optimale est de 2mm.

4. Le flux optimal permettant d'atteindre la température d'activation de 1200K est de 2,5 kW.

5. Une homogénéité de la température dans le réacteur est assurée par une distribution cubique des billes avec un diamètre de 2mm. Ce qui permet d'assurer une température d'activation dans tout le réacteur.

6. L'énergie nécessaire intervenant dans la réaction endothermique n'influe pas sur le comportement thermique du réacteur.

7. L'effet channeling peut influencer considérablement sur l'écoulement du fluide et par voie de conséquence sur la distribution de la température dans le réacteur. Afin de diminuer cet effet, il est recommandé de réduire la taille des billes en contact avec les parois du réacteur.

Appendix A UDFs

Packed bed structure h coefficient

```
#include "udf.h"
```

```
DEFINE_PROFILE(Heat_Transfer_coef, t, i)
```

```
{ cell_t c;
```

```
    real rho = 1.225;
```

```
    real cp = C_CP(c,t);
```

```
    real dp = 0.00072;
```

```
    real kf = 0.0242;
```

```
    real Pr = 0.744;
```

```
    real mu = 0.000017894;
```

```
    real U;
```

```
    real x_vel = C_U(c,t);
```

```
    real y_vel = C_V(c,t);
```

```
    real Re;
```

```
    real hv;
```

```
    U=sqrt((x_vel*x_vel)+(y_vel*y_vel));
```

```
    Re = (U*dp*rho)/mu;
```

```
    begin_c_loop(c, t)
```

```
        { hv = (kf*(2+1.1*pow(Pr,0.333)*pow(Re,0.6)))/dp;
```

```
        C_PROFILE(c, t, i) = hv;
    }
end_c_loop(c, t)
```

Foam structure h coefficient

```
#include "udf.h"

DEFINE_PROFILE(Heat_Transfer_coef, t, i)
{
    cell_t c;

        real rho = 1.225;
    real po = 0.7;
    real cp = C_CP(c,t);
    real ds = 0.002;
    real dp = 0.001029;
    real kf = 0.0242;
    real mu = 0.000017894;
    real U;
    real x_vel = C_U(c,t);
    real y_vel = C_V(c,t);
        real Re;
    real hv;
        U=sqrt((x_vel*x_vel)+(y_vel*y_vel));
    Re = (U*dp*rho)/mu;
```

```
begin_c_loop(c, t)
{
    hv = kf*pow(Re,0.438)*2.096*pow(po,0.38)*((-
8.278*pow(po,0.38))+(57.384*pow(po,1.38))-(106.63*pow(po,2.38))+(95.756*pow(po,3.38))-
(37.24*pow(po,4.38)))/ds;
    C_PROFILE(c, t, i) = hv;
}
end_c_loop(c, t)
```


Appendix B Publication

Feasibility of using spherical packed bed of ceramic as solar receiver/ reactor for hydrogen production from water

Darfilal Djamel^{1,2}, Seladji Chakib¹

¹ *Département de Génie mécanique / Laboratoire Energétique et Thermique Appliquée ETAP, Abou-Bekr BELKAÏD University, B.P 119, 13000 Tlemcen, Algeria*

² *Centre de Développement des Satellites CDS / Algerian Space Agency ASAL / BP 4065, Ibn Rochd USTO 31130 Oran, Algeria*

Abstract

The main objective of this study is to analyze numerically using finite volume method a flow through a packed bed of ceramic in order to predict the thermal and flow behavior under different operational conditions (inlet velocity, packing arrangement and solar concentrated flux).

The temperature fields of the solid & the fluid phases were attained using the LTNE (local thermal non-equilibrium model). This model shows high reliability compared to experimental data, given from experiments performed with solar packed bed solar receiver. The results illustrate that the studied packed bed thermo physical parameters effect substantially the temperature distribution. Results show that the maximal temperature Achieved of the packed bed is around 1600 K with absorber properties (Mean partical diameter = 0.72 mm, / Porosity = 0.476) for a mean solar concentration of 2 kW.

Keywords: Packed bed, Balls, receiver, porosity, modeling.

1. Introduction

When the world consumption of fossil fuels grows at an alarming rate, the associated emissions of greenhouse gases are reaching levels that are environmentally unacceptable [1]. In order to minimize the greenhouse gas effect, the world wide now show an increasing interest in using hydrogen as an alternative fuel for the immediate future [2]. By far the most attractive reaction for the production of hydrogen using renewable energy is the solar thermal water splitting also known as “water thermolysis”, yielding directly high purity hydrogen [3]. However, because of thermodynamic restrictions, acceptable production rate in the

direct thermal decomposition of water is significant at temperatures above 2500 K. Such high temperatures impose extraordinary demands on materials and reactor design [4]. Therefore, thermochemical water splitting is one of the best process to generate hydrogen at a moderate temperature (Generally Less than 1273 K) [5] which are manageable by using state-of-the-art engineering materials. From all thermochemical technological possibilities, the most interesting is the thermochemical two-step water splitting process using redox systems [3]. In a two-step water-splitting thermochemical cycle, the starting oxide is reduced in the endothermic first step (activation), releasing oxygen, and then reacted with water (hydrolysis)

SOLAR HYDROGEN PRODUCTION BY THERMOCHEMICAL REACTION: DEVELOPMENT OF A PACKED-BED REACTOR

D. Darfilal^{1,2,*}, C. Seladji¹, R. Bhandari³

ABSTRACT

Solar water splitting is a promising process for the storage and conversion of sunlight power into clean-burning hydrogen gas. This paper presents a CFD analysis of hydrogen production via a proposed packed bed thermochemical receiver/reactor system. The idea of this study is the use of packed bed of spherical ceramic particles coated with active redox ferrite materials. The first step is an endothermic reaction, nickel ferrite (NiFe₂O₄) dissociate thermally into nickel oxide (NiO), ferrous oxide (FeO) and oxygen at 1473 K. This reaction takes place under 2 kW concentrated solar energy. The second is the hydrolysis step at 1073 K to form hydrogen and NiFe₂O₄, the latter is recycled to the first step for a new production cycle. The CFD code solves the momentum, energy and species transport equations. The temperature fields of the reactor solid & the fluid phases were attained using the local thermal non-equilibrium model (LTNE). The LTNE model source terms were computed through the user-defined functions to couple the energy equations of the fluid phase and solid phase. The complete model was used to analyse numerically the reaction through the packed bed in order to predict the thermal behavior under different conditions (inlet velocity, packing arrangement and solar concentrated flux).

Keywords: Hydrogen, Packed bed, CFD, balls.

INTRODUCTION

Hydrogen is actually considered as the most promising green fuel vector for the future as it has prodigious capability of reducing greenhouse gas and other environmental pollutants (C_nH_m, NO_x, heavy metals, radioactivity) emitted by fossil energy systems. It is considered that engines operating with hydrogen [1-3] can tremendously reduce dependence on nonrenewable fuel sources [4]. Thus, the use of hydrogen as an alternative fuel vector unlocks potential means of converting energy from solar radiation to storable chemical energy. It is envisaged that the hydrogen will replace smoothly fossil energy resources in automotive industry through fuel cell technology. It would be more efficient as fuel for internal combustion engines with comparable performance, emitting just water vapour [4, 5].

Historically, it is observed that there has been a tendency toward the decarbonization of energy sources from solid to liquid to gaseous fuels. From coal to oil back to natural gas again, the ratio of carbon to hydrogen in the molecule of each successive source of energy has decreased [6], which confirms the global tendency towards using hydrogen as a future source of energy. Currently a growth in demand for hydrogen is observed, with major applications in ammonia production, petroleum processing, petrochemical production, oil and fat hydrogenation, fertilizer production, metallurgical applications and electronics industry [7], it is also anticipated that interest in using hydrogen as fuel for automotive industry will further enhance the demand of the green fuel.

Hence, it is necessary to expand the existing hydrogen production capacity by using renewable energy resources, in order to meet the world's increasing demand. Consumption of hydrogen in different applications is shown in the following Figure [4].

This paper was recommended for publication in revised form by Regional Editor Prof. Dr. Jaap Hoffman Hoffman

¹Département de Génie mécanique / Laboratoire Energétique et Thermique Appliquée ETAP, Abou-Bekr BELKAID University, B.P 119, 13000 Tlemcen, Algeria

²Centre de Développement des Satellites CDS/ Algerian Space Agency ASAL / BP 4065, Ibn Rochd USTO 31130 Oran, Algeria

*E-mail address: ddarfilal@cds.asal.dz

³Institute for Technology and Resources Management in the Tropics and Subtropics (ITT) / Technische Hochschule Köln / University of Applied Sciences

Betzdorfer Strasse 2 / 50679 Cologne, Germany

Manuscript Received, Accepted

References

- [1] C. White, R. Steeper, and A. Lutz, "The hydrogen-fueled internal combustion engine: a technical review," *International journal of hydrogen energy*, vol. 31, pp. 1292-1305, 2006.
- [2] Antunes, Jorge Manuel Gomes. "The use of hydrogen as a fuel for compression ignition engines." PhD diss., Newcastle University, 2011..
- [3] J. G. Antunes, R. Mikalsen, and A. Roskilly, "An investigation of hydrogen-fuelled HCCI engine performance and operation," *International journal of hydrogen energy*, vol. 33, pp. 5823-5828, 2008.
- [4] R. Chaubey, S. Sahu, O. O. James, and S. Maity, "A review on development of industrial processes and emerging techniques for production of hydrogen from renewable and sustainable sources," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 23, pp. 443-462, 2013.
- [5] K. Blok, R. Williams, R. Katofsky, and C. A. Hendriks, "Hydrogen production from natural gas, sequestration of recovered CO₂ in depleted gas wells and enhanced natural gas recovery," *Energy*, vol. 22, pp. 161-168, 1997.
- [6] S. Dunn, "Hydrogen futures: toward a sustainable energy system," *International journal of hydrogen energy*, vol. 27, pp. 235-264, 2002.
- [7] R. Ramachandran and R. K. Menon, "An overview of industrial uses of hydrogen," *International journal of hydrogen energy*, vol. 23, pp. 593-598, 1998.
- [8] J. E. Funk, "Thermochemical hydrogen production: past and present," *International journal of hydrogen energy*, vol. 26, pp. 185-190, 2001.
- [9] C. Agrafiotis, M. Roeb, A. G. Konstandopoulos, L. Nalbandian, V. Zaspalis, C. Sattler, P. Stobbe, and A. Steele, "Solar water splitting for hydrogen production with monolithic reactors," *Solar Energy*, vol. 79, pp. 409-421, 2005.
- [10] L. Xiao, S.-Y. Wu, and Y.-R. Li, "Advances in solar hydrogen production via two-step water-splitting thermochemical cycles based on metal redox reactions," *Renewable Energy*, vol. 41, pp. 1-12, 2012.

- [11] O. BIČÁKOVÁ and P. Straka, "The resources and methods of hydrogen production," *Acta Geodyn. Geomater*, vol. 7, p. 175, 2010.
- [12] M. Epstein, "Solar thermal reforming of methane," SFERA Winter School. Switzerland. Zürich, 2011.
- [13] A. Giaconia, G. Monteleone, B. Morico, A. Salladini, K. Shabtai, M. Sheintuch, D. Boettge, J. Adler, V. Palma, and S. Voutetakis, "Multi-fuelled solar steam reforming for pure hydrogen production using solar salts as heat transfer fluid," *Energy Procedia*, vol. 69, pp. 1750-1758, 2015.
- [14] D. S. Simakov, M. M. Wright, S. Ahmed, E. M. Mokheimer, and Y. Román-Leshkov, "Solar thermal catalytic reforming of natural gas: a review on chemistry, catalysis and system design," *Catalysis Science & Technology*, vol. 5, pp. 1991-2016, 2015.
- [15] J. K. Dahl, J. Tamburini, A. W. Weimer, A. Lewandowski, R. Pitts, and C. Bingham, "Solar-thermal processing of methane to produce hydrogen and syngas," *Energy & fuels*, vol. 15, pp. 1227-1232, 2001.
- [16] S. Abanades and G. Flamant, "High-temperature solar chemical reactors for hydrogen production from natural gas cracking," *Chemical Engineering Communications*, vol. 195, pp. 1159-1175, 2008.
- [17] A. Abánades, E. Ruiz, E. Ferruelo, F. Hernández, A. Cabanillas, J. Martínez-Val, J. Rubio, C. López, R. Gavela, and G. Barrera, "Experimental analysis of direct thermal methane cracking," *International journal of hydrogen energy*, vol. 36, pp. 12877-12886, 2011.
- [18] A. Steinfeld, "Solar hydrogen production via a two-step water-splitting thermochemical cycle based on Zn/ZnO redox reactions," *International journal of hydrogen energy*, vol. 27, pp. 611-619, 2002.
- [19] S. Abanades and G. Flamant, "Thermochemical hydrogen production from a two-step solar-driven water-splitting cycle based on cerium oxides," *Solar Energy*, vol. 80, pp. 1611-1623, 2006.
- [20] Y. Tamaura, A. Steinfeld, P. Kuhn, and K. Ehrensberger, "Production of solar hydrogen by a novel, 2-step, water-splitting thermochemical cycle," *Energy*, vol. 20, pp. 325-330, 1995.
- [21] J. E. Funk and R. M. Reinstrom, "Energy requirements in production of hydrogen from water," *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 5, pp. 336-342, 1966.
- [22] R. Perret, "Solar Thermochemical hydrogen production research (STCH)," Sandia National Lab.(SNL-CA), Livermore, CA (United States)2011.
- [23] D. Yadav and R. Banerjee, "A review of solar thermochemical processes," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 54, pp. 497-532, 2016.

- [24] A. G. Konstandopoulos and S. Lorentzou, "Novel Monolithic Reactors for Solar Thermochemical Water Splitting," *On Solar Hydrogen & Nanotechnology*, pp. 621-639, 2009.
- [25] M. Roeb, M. Neises, N. Monnerie, C. Sattler, and R. Pitz-Paal, "Technologies and trends in solar power and fuels," *Energy & Environmental Science*, vol. 4, pp. 2503-2511, 2011.
- [26] H. Kaneko, Y. Ishikawa, C.-i. Lee, G. Hart, W. Stein, and Y. Tamaura, "Simulation study of Tokyo Tech rotary-type solar reactor on solar field test at CSIRO in Australia," in *Proceedings of the ASME 2011 5th International Conference on Energy Sustainability (ES2011)*, ESFuelCell2011-54568, Washington, DC, 2011.
- [27] (2014). High-Efficiency Solar Thermochemical Reactor for Hydrogen Production. [online] Available at: <http://Website URL> [23/05/2019].
- [28] M. Neises, S. Tescari, L. de Oliveira, M. Roeb, C. Sattler, and B. Wong, "Solar-heated rotary kiln for thermochemical energy storage," *Solar Energy*, vol. 86, pp. 3040-3048, 2012.
- [29] M. Pagliaro, A. G. Konstandopoulos, R. Ciriminna, and G. Palmisano, "Solar hydrogen: fuel of the near future," *Energy & Environmental Science*, vol. 3, pp. 279-287, 2010.
- [30] EnergyBusinessEurope. (2016, 21/08). HYDROSOL Plant Project – Hydrogen power for zero CO2 emissions. Available: <http://www.energybusinesseurope.com/hydrogen-power-for-zero-co2-emissions-and-energy-security/>
- [31] A. OTERO. (2013). Concentrating on Sunshine to Advance the Hydrogen Economy. [online] Available at: <http://crf.sandia.gov/concentrating-on-sunshine-to-advance-the-hydrogen-economy/> [23/05/2019].
- [32] E. Alonso and M. Romero, "Review of experimental investigation on directly irradiated particles solar reactors," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 41, pp. 53-67, 2015.
- [33] M. CHAMBON, "Thermochemical cycles based on the ZnO/Zn or SnO₂/SnO redox couples : Kinetic characterizations and study of solar reactors," ed. ETH Zürich: SFERA Winter School Solar Fuels & Materials, 2011, p. 13.
- [34] P. R. Lichty, A. M. Scott, C. M. Perkins, C. Bingham, and A. Weimer, "Solar thermal reactor materials characterization," National Renewable Energy Laboratory (NREL), Golden, CO.2008.
- [35] E. F.-A. a. A. TRANSPORT. (2014). *EU-Project SOLARJET – Solar Production of Jet Fuel from H₂O and CO₂*. [online] Available at: <http://www.prec.ethz.ch/research/solar-fuels/solarjet.html> [23/05/2019].

- [36] K. E.E. (2010). Solar-Thermochemical Hydrogen. [online] Available at: http://www.me.udel.edu/research_groups/prasad/research/solartherm.html [2017].
- [37] J.-P. Sačká, M. Roeb, C. Sattler, R. Pitz-Paal, A. Heinzl, "Development of a system model for a hydrogen production process on a solar tower," *Solar Energy*, vol. 86, pp. 99-111, 2012.
- [38] Stéphane Abanades, Patrice Charvin, Gilles Flamant, "Design and simulation of a solar chemical reactor for the thermal reduction of metal oxides: Case study of zinc oxide dissociation" *Chemical Engineering Science*, vol. 62, pp. 6323 – 6333, 2007.
- [39] H. Villafán-Vidales, S. Abanades, C. Caliot, and H. Romero-Paredes, "Heat transfer simulation in a thermochemical solar reactor based on a volumetric porous receiver," *Applied Thermal Engineering*, vol. 31, pp. 3377-3386, 2011.
- [40] M. Kostoglou, C.P. Lekkos, A.G. Konstandopoulos, "On mathematical modeling of solar hydrogen production in monolithic reactors" *Applied Thermal Engineering*, vol. 35, pp. 1915– 1922, 2011.
- [41] J. Bear, *Dynamics of fluids in porous media*: Courier Corporation, 2013.
- [42] S. Roy, T. Bauer, M. Al-Dahhan, P. Lehner, and T. Turek, "Monoliths as multiphase reactors: a review," *AIChE Journal*, vol. 50, pp. 2918-2938, 2004.
- [43] M. T. Kreutzer, F. Kapteijn, J. A. Moulijn, and J. J. Heiszwolf, "Multiphase monolith reactors: chemical reaction engineering of segmented flow in microchannels," *Chemical Engineering Science*, vol. 60, pp. 5895-5916, 2005.
- [44] ACTIVATED CARBON MONOLITH CATALYSTS. [online] Available at: <http://Website URL> [23/05/2019].
- [45] Silicon Carbide Ceramic Foam Filter [online] Available at: http://www.ceramic_honeycombs.com/ceramic/Silicon_Carbide_Ceramic_Foam_Casting_Filter.htm [23/05/2019].
- [46] [online] Available at: <https://vito.be/en/materials/optimising-products-and-processes/shaping-with-3d-robocasting> [23/05/2019].
- [47] J. Van Noyen, S. Mullens, F. Snijkers, and J. Luyten, "Catalyst design with porous functional structures," *Sustainable chemistry, WIT transactions on ecology and the environment*, vol. 154, pp. 93-102, 2011.
- [48] H. Teng and T. Zhao, "An extension of Darcy's law to non-Stokes flow in porous media," *Chemical Engineering Science*, vol. 55, pp. 2727-2735, 2000.

- [49] G. Tingate, "Some geometrical properties of packings of equal spheres in cylindrical vessels," *Nuclear Engineering and design*, vol. 24, pp. 153-179, 1973.
- [50] L. Burtseva, B. V. Salas, F. Werner, and V. Petranovskii, *Modeling of Monosized Sphere Packings into Cylinders: Univ., Fak. für Mathematik*, 2015.
- [51] W. Van Antwerpen, C. Du Toit, and P. Rousseau, "A review of correlations to model the packing structure and effective thermal conductivity in packed beds of mono-sized spherical particles," *Nuclear Engineering and design*, vol. 240, pp. 1803-1818, 2010.
- [52] M. Fumizawa, Y. Kaneko, and M. Izumi, "Porosity Effect in the Core Thermal Hydraulics for Ultra High Temperature Gas-Cooled Reactor," *Journal of Systemics, Cybernetics and Informatics*, vol. 6, pp. 86-92, 2008.
- [53] H. Oktajianto, E. Setiawati, and V. Richardina, "Modelling of HTR (High Temperature Reactor) Pebble-Bed 10 MW to Determine Criticality as A Variations of Enrichment and Radius of the Fuel (Kernel) With the Monte Carlo Code MCNP4C," *International Journal of Science and Engineering*, vol. 8, pp. 42-46, 2015.
- [54] A. Cervone, L. Torre, L. d'Agostino, A. J. Musker, G. T. Roberts, C. Bramanti, and G. Saccoccia, "Development of hydrogen peroxide monopropellant rockets," *AIAA paper*, vol. 5239, p. 2006, 2006.
- [55] M. Tuinier, M. van Sint Annaland, G. Kramer, and J. Kuipers, "Cryogenic CO₂ capture using dynamically operated packed beds," *Chemical Engineering Science*, vol. 65, pp. 114-119, 2010.
- [56] A. H. Ali, S. Ganguly, and A. B. M. Shariff, "Simulation of cryogenic packed bed using 1-dimensional pseudo homogeneous model," *J. Appl. Sci.*, vol. 14, pp. 3118-3121, 2014.
- [57] C. Wieckert, A. Obrist, P. v. Zedtwitz, G. Maag, and A. Steinfeld, "Syngas production by thermochemical gasification of carbonaceous waste materials in a 150 kWth packed-bed solar reactor," *Energy & fuels*, vol. 27, pp. 4770-4776, 2013.
- [58] L. Reich, R. Bader, T. Simon, and W. Lipiński, "Heat and mass transfer model of a packed-bed reactor for solar thermochemical CO₂ capture," in *Proc. of 15th Int. Heat Trans. Conf*, 2014.
- [59] N. Piatkowski, C. Wieckert, and A. Steinfeld, "Experimental investigation of a packed-bed solar reactor for the steam-gasification of carbonaceous feedstocks," *Fuel processing technology*, vol. 90, pp. 360-366, 2009.
- [60] Q. Bellouard, S. Abanades, S. Rodat, and N. Dupassieux, "A high temperature drop-tube and packed-bed solar reactor for continuous biomass gasification," in *AIP Conference Proceedings*, 2017, p. 100001.
- [61] C. Wieckert, "Solar Carbothermic Production of Zinc," ed: *SFERA Winter School Solar Fuels & Materials*, 2011, p. 32.

- [62] D. I. Pvt.Ltd. Inert Ceramic Balls. [online] Available at: <http://devsongroup.com/site/index.php?pid=0009.0001> [2017].
- [63] F. Pinson, "Modélisation à l'échelle macroscopique d'un écoulement turbulent au sein d'un milieu poreux," Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.
- [64] A. Bensoussan, J.-L. Lions, and G. Papanicolaou, Asymptotic analysis for periodic structures vol. 374: American Mathematical Soc., 2011.
- [65] H. Brenner, "Dispersion resulting from flow through spatially periodic porous media," Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, vol. 297, pp. 81-133, 1980.
- [66] D. Vandromme, "Turbulence modeling for compressible flows and implementation in Navier-Stokes solvers," VKI An Introduction to Modeling Turbulence, 1993.
- [67] C. Xu, Z. Song, and Y. Zhen, "Numerical investigation on porous media heat transfer in a solar tower receiver," Renewable Energy, vol. 36, pp. 1138-1144, 2011.
- [68] B. Alazmi and K. Vafai, "Analysis of variants within the porous media transport models," Journal of Heat Transfer, vol. 122, pp. 303-326, 2000.
- [69] K. a. A. Vafai, A, "Non-Darcian Effects in a confined Forced convective Flows,," Chemical Engineering Sciences pp. 2523-2532, 1998.
- [70] G. J. C. C. H. Hwang, "Heat Transfer Measurment and Analysis for Sintred Porous Channels " ASME Journal Of Heat Transfer pp. 456-464 1994
- [71] A. G. C. Dixon, D. L., "Theoretical Prediction of effective Heat Transfer Parameters in Pached Bed " AIChE Journal pp. 663-676, 1979.
- [72] E. Abenbach, "Heat and flow characteristics of packed beds," Experimental Thermal and fluid Science, pp. 17-27, 1995.
- [73] Kamiuto, K., 2008. Modeling of Composite Heat Transfer in Open-Cellular Porous Materials at High Temperatures. *Cellular and Porous Materials: Thermal Properties Simulation and Prediction*, pp.165-198.
- [74] C. p. C.C Agrafiotis, S.Lorentzou,M.Kostoglou,A.Konstandopoulos, "Hydrogen production in solar reactor," Catalysis Today pp. 265-277, 2007.
- [75] ANSYS. Available at: <https://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent> [23/05/2019]
- [76] S. Patankar, Numerical heat transfer and fluid flow: CRC press, 1980.
- [77] A. T. Nelson, J. T. White, D. A. Andersson, J. A. Aguiar, K. J. McClellan, D. D. Byler, M. P. Short, and C. R. Stanek, "Thermal expansion, heat capacity, and thermal conductivity of Nickel Ferrite (NiFe₂O₄)," Journal of the American Ceramic Society, vol. 97, pp. 1559-1565, 2014.

- [78] M. Massot, A. Oleaga, A. Salazar, D. Prabhakaran, M. Martin, P. Berthet, and G. Dhalenne, "Critical behavior of CoO and NiO from specific heat, thermal conductivity, and thermal diffusivity measurements," *Physical Review B*, vol. 77, p. 134438, 2008.
- [79] F. Schrettle, C. Kant, P. Lunkenheimer, F. Mayr, J. Deisenhofer, and A. Loidl, "Wüstite: electric, thermodynamic and optical properties of FeO," *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 85, pp. 1-12, 2012.
- [80] F. Lewis and N. Saunders, "The thermal conductivity of NiO and CoO at the Neel temperature," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 6, p. 2525, 1973.
- [81] Z. Wu, C. Caliot, G. Flamant, and Z. Wang, "Coupled radiation and flow modeling in ceramic foam volumetric solar air receivers," *Solar Energy*, vol. 85, pp. 2374-2385, 2011.
- [82] H. S. Fogler, "Elements of chemical reaction engineering," 1999.
- [83] S. REBUGHINI, "Fundamental assessment of gas to particle mass transfer in microchannel packed bed reactors," 2013.