

Chapitre 3

Populations de particules

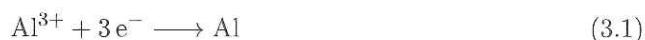
{chap:populations}

3.1 Introduction

{sec:populations-introduction}

Une cuve d'électrolyse d'aluminium industrielle est caractérisée par le fait que plusieurs phénomènes physiques entrent en jeu et interagissent sur elle à des échelles similaires. Tout d'abord, le courant électrique continu qui traverse une cuve d'électrolyse industrielle moderne est de l'ordre de 500 kA à 1 MA. Une telle intensité de courant génère d'une part un champs d'induction magnétique qui affecte l'opération de la cuve, mais également de ses voisines de série. D'autre part, la chute de potentiel d'environ 4 V à travers les électrodes et les fluides [Hau95] provoque la dissipation de grandes quantités d'énergie sous forme thermique. Cette production de chaleur est nécessaire car elle permet de maintenir le bain électrolytique sous forme liquide. Cependant, une surchauffe trop importante est néfaste pour une cuve, qui risque alors de subir une usure et une fin de vie prématuée en plus d'occasionner des pertes d'énergie.

Au niveau de la cathode en carbone qui forme le fond de la cuve, la réaction d'électrolyse



produit de l'aluminium sous forme métallique. L'aluminium métallique, qui est peu soluble dans l'électrolyte, est liquide à la température d'opération d'une cuve et de densité légèrement supérieure à celle de l'électrolyte. Il forme une couche de métal en fusion au fond de la cuve. C'est alors la surface du métal en fusion qui joue véritablement le rôle de cathode sur laquelle a lieu la réaction d'électrolyse.

Le bain électrolytique et le métal liquide sont traversés par l'ensemble du courant électrique et, en présence du champs d'induction magnétique, subissent une force de Lorentz qui les met en mouvement. L'écoulement dans les fluides est bénéfique. Il permet de transporter la chaleur à l'extérieur du système plus rapidement que par conduction pure, homogénéise la distribution de la température et la composition chimique dans l'ensemble du bain et facilite le transport et la dispersion des particules d'alumine injectées à intervalles réguliers dans le bain.

Cependant, il est crucial que l'interface bain-métal soit aussi stable que possible. Pour des raisons d'économie d'énergie, la distance moyenne entre le fond des anodes¹ et l'interface est réduite autant que possible. Dans une cuve moderne, cette distance est de l'ordre de 2 à 4 cm. Si les écoulements dans les fluides deviennent trop rapides, des turbulences se

1. Le fond des anodes est défini comme la surface des anodes orientée vers le bas, face à la cathode.

forment et viennent perturber la forme de l'interface. De plus, le système magnétohydrodynamique formé par le circuit électrique, le champ d'induction magnétique et les deux fluides peut devenir, sous certaines conditions, physiquement instable, c'est-à-dire que de petites perturbations du système sont amplifiées par elles-mêmes. De telles instabilités affectent la forme de l'interface bain-métal, et leur occurrence présente un défi qui a déjà fait l'objet de nombreux travaux de recherche. Le lecteur intéressé se référera par exemple à [DFR98], [Sne85] ou encore [MR96].

Le métal liquide ayant une conductivité électrique bien supérieure à celle du bain électrolytique ([WPT92], [Apf03]), le contact entre les anodes et la nappe de métal pourrait créer un court-circuit. Les court-circuits diminuent le rendement du procédé et peuvent créer des défauts à la surface des anodes qui affectent l'opération de la cuve à long terme.

De l'alumine doit être injectée régulièrement dans le bain électrolytique, sous forme de poudre, pour compléter l'alumine dissoute consommée par la réaction d'électrolyse. Puisque la majeure partie du bain est recouverte par les blocs anodiques et en raison de la présence de la croûte qui protège sa surface libre, l'injection de poudre d'alumine ne peut avoir lieu que en quelques points d'injection distribués le long du canal central. Dans une cuve industrielle, le nombre de points d'injection est typiquement compris entre 4 et 6. La dispersion et le transport des particules d'alumine et de la concentration d'alumine qui résulte de leur dissolution dépend crucialement de la présence et de la force de l'écoulement dans le bain électrolytique. De nombreux travaux de recherche ont pour objectif la modélisation et l'approximation numérique des écoulements dans le bain et le métal d'une cuve d'électrolyse industrielle. Dans ce travail, nous utiliserons les résultats de S. Pain [Pai06], G. Steiner [Ste09] et J. Rochat [Roc16] à cette fin. Le modèle d'écoulement proposé dans [Ste09] consiste à considérer un système couplé formé par le problème du potentiel électrique dans les conducteurs, par les équations de Maxwell dans le vide, dans le caisson ferromagnétique, dans le bain électrolytique et dans le métal, et finalement par des équations de Navier-Stokes dans chaque fluide. Dans ce problème, l'interface bain-métal est une inconnue. Les écoulements dans les fluides sont turbulents. Les structures des écoulements dont la taille est inférieure à la résolution de la grille de discréttisation sont modélisés par un modèle de longueur de mélange de Smagorinski [Roc16]. Dans ce chapitre nous utiliserons ce modèle, implémenté dans le logiciel Alucell, pour obtenir le domaine Ω occupé par le bain d'une cuve d'électrolyse industrielle, une approximation de la vitesse d'écoulement stationnaire u_h et une approximation de la densité de courant électrique stationnaire j_h dans Ω .

(détail)
Suggestion:
On s'intéresse
à la modélisation
... en suivant
l'approche
adoptée ...
On représente
l'évolution ...

Ce travail porte sur la modélisation des particules d'alumine injectées dans le bain et leur dissolution. On suivra l'approche adoptée par T. Hofer [Hof11] et on représentera l'évolution d'une famille de particules sous la forme d'une distribution en taille et en espace n_p . Cette population évolue d'une part dans le bain par le biais de la vitesse d'écoulement u de celui-ci, et d'autre part par la dissolution des particules au cours du temps, en fonction de la concentration d'alumine locale dans le bain et de sa température telle que décrite par la vitesse de dissolution f introduite dans la section 2.3. En plus de la densité de particule n_p , nous modéliserons l'évolution de la concentration d'alumine dissoute c et la température Θ dans le bain, puisque la dissolution des particules en dépend.

Dans la section 3.2, nous introduisons les équations qui décrivent l'évolution de la densité de particules n_p , la concentration d'alumine dissoute c et la température du bain Θ . Dans la section 3.3 nous traitons la discréttisation en temps du système formé par les équations pour n_p , c et Θ introduites dans 3.2. Finalement, dans la section 3.4 nous considérons et discutons l'application du modèle de transport et dissolution de particules d'alumine au cas d'une cuve d'électrolyse industrielle AP32.

3.2 Modèle de transport et dissolution d'alumine

(sec:population-model)

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un domaine ouvert donné, occupé par le bain électrolytique. Ce bain est animé par une vitesse d'écoulement $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ stationnaire donnée et telle que $\operatorname{div} u = 0$ dans Ω et $u \cdot \nu = 0$ sur le bord $\partial\Omega$ de Ω , où ici ν est la normale unité. On note T le temps auquel nous souhaitons connaître la solution. Dans ce chapitre on note $c(t, x)$ la concentration d'alumine dissoute en mol m^{-3} et $\Theta(t, x)$ la température dans le bain en Kelvin à l'instant $t \in [0, T]$ et à l'endroit $x \in \Omega$.

Vitesse de transport La force de gravité a pour effet d'entraîner les particules d'alumine vers le fond de la cuve. Nous avons vu dans la section 2.5 que le temps caractéristique nécessaire pour qu'une particule typique atteigne d'une part sa vitesse stationnaire de chute et d'autre part la vitesse de l'écoulement du bain est de l'ordre de quelques millisecondes. La vitesse maximale de l'écoulement stationnaire dans une cuve d'électrolyse d'aluminium étant de l'ordre de 0.1 m s^{-1} , cette période transitoire s'étend sur des distances d'environ $1 \times 10^{-4} \text{ m}$, ce qui est largement inférieure à la résolution spatiale des grilles que l'on utilise dans des calculs industriels. Par conséquent, nous ferons deux hypothèses simplificatrices dans le cadre du modèle de transport et dissolution de particules d'alumine. Premièrement, nous supposerons que le champ de gravité a pour effet de transporter les particules vers le fond de la cuve. On prendra comme vitesse de transport la vitesse stationnaire de chute (2.73) d'une particule soumise à la force de traînée de Stokes. Cette force dépend du rayon des particules. Ce transport gravitationnel des particules, qui a lieu dans l'ensemble du bain, est modélisé par un champ $w(r) : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$ défini par

$$w(r) = -\frac{2g(\rho_{\text{Al}} - \rho_e)}{9\mu} r^2 \hat{e}_3 \quad (3.2)$$

(eq:fall-velocity)

en vertu de (2.73). On a noté \hat{e}_3 le vecteur unitaire vertical dirigé vers le haut. Clairement, le champ w est tel que $\operatorname{div} w = 0$ dans Ω . Deuxièmement, nous supposerons que les particules suivent exactement les lignes de courant du champ de transport $u + w$ dans le domaine Ω . Par ailleurs, la concentration d'alumine dissoute c et la température du bain électrolytique Θ seront transporté par la vitesse d'écoulement u , et diffusés.

→ $w : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^3$
 défini par
 (w ne dépend que de)
 je préciserais
 $u(x) + w(r) \dots$

pour $k=1, \dots, K$,

Populations de particules Dans une cuve industrielle, de l'alumine en poudre doit être injectée à intervalles réguliers dans le bain. Nous modélisons ces injections sous la forme d'une série d'événements instantanés, successifs dans le temps. Soit K le nombre total d'injections et soit un ensemble de nombres réels τ^k tels que $0 \leq \tau^k < T \forall k$, où les τ_k représentent les instants auxquels surviennent chaque injection. Soit pour toute injection $k = 1, 2, \dots, K$ la distribution initiale de particule $S^k : \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ issue de l'injection k , supposée donnée.

On note $n_p^k(t, x, r)$, $k = 1, 2, \dots, K$, la densité en espace et en taille de particule issues de l'injection k dans le bain électrolytique à l'instant $t \in [0, T]$. Autrement dit, la quantité $n_p^k(t, x, r) dx dr$ représente le nombre de particules, à l'instant t , dans le volume infinitésimal dx autour du point $x \in \Omega$ (entre x et $x + dx$) et dont la taille est comprise dans l'intervalle $[r, r + dr]$. Soit $\Theta_{\text{Lat}} \geq 0$ le temps de latence avant que les particules ne commencent à se dissoudre suite à leur injection dans le bain. Ce temps de latence a fait l'objet d'une discussion dans la section 2.2. Chaque population de particules n_p^k , $k = 1, 2, \dots, K$,

boule de rayon
dx autour de x ?

Comme à la section
2.2, j'utiliserais
une autre lettre
pour Θ_{Lat} ...

satisfait les équations lorsque $x \in \Omega$, $r \in \mathbb{R}_+$:

$$\begin{aligned} n_p^k(t, x, r) &= 0, \\ n_p^k(\tau^k, x, r) &= S^k(x, r), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial n_p^k}{\partial t} + (u(x) + w(r)) \cdot \nabla n_p^k = 0,$$

$$\frac{\partial n_p^k}{\partial t} + (u(x) + w(r)) \cdot \nabla n_p^k + \frac{\partial}{\partial r} \left(f(r, c, \Theta) n_p^k \right) = 0, \quad \tau^k < t \leq \tau^k + \Theta_{\text{Lat}}, \quad (3.5)$$

{eq:population-pre-injection}

$0 \leq t < \tau^k$ (3.3)

(3.4)

{eq:population-transport}

$\tau^k < t \leq \tau^k + \Theta_{\text{Lat}}$, (3.5)

{eq:population-dissolution}

$\tau^k + \Theta_{\text{Lat}} < t \leq T$ (3.6)

où l'opérateur $\nabla = (\partial_{x_1}, \partial_{x_2}, \partial_{x_3})^t$. La vitesse de dissolution f qui intervient dans l'équation (3.6) a déjà été définie dans la section 2.3 par l'expression (2.53). Les équations (3.5) et (3.6) sont complétées par une condition aux limites sur le bord entrant. Plus précisément, soit Γ^- la partie du bord $\partial\Omega$ de Ω définie par

$$\Gamma^- = \{x \in \partial\Omega \mid \nu \cdot w < 0\}. \quad (3.7)$$

Ici, ν est le vecteur normal unitaire extérieur à la surface $\partial\Omega$. La condition aux limites sur le bord entrant s'écrit alors pour tout $k = 1, 2, \dots, K$ et $t > \tau_k$

$$\frac{\partial n_p^k}{\partial \nu}(t, x) = 0, \quad x \in \Gamma^-. \quad (3.8)$$

La densité totale de particules au temps $t \in [0, T]$, à l'endroit $x \in \Omega$ et fonction de r est donnée par

$$n_p(t, x, r) = \sum_{k=1}^K n_p^k(t, x, r). \quad (3.9)$$

Les conditions initiales de l'équation (3.6) sont celles obtenues de (3.5) en $t = \tau_k + \Theta_{\text{Lat}}$.

Remarque 7. Les quantités n_p^k introduites ici sont similaires au champ n_p décrit dans la section 2.4, à ceci près que les champs n_p^k sont des fonctions du temps t et du rayon r des particules, mais aussi du lieu x dans le domaine Ω occupé par le bain électrolytique.

Consommation de l'alumine dissoute La concentration d'alumine dissoute est consommée² par la réaction d'électrolyse. Si I est le courant électrique total imposé traversant la cuve, le débit total d'alumine dissoute consommée en mol s^{-1} est proportionnel à I et s'écrit

$$\frac{I}{6F} \quad (3.10)$$

où $F = 96\,485.33 \text{ C mol}^{-1}$ est la constante de Faraday. Le facteur 6 provient du fait qu'il faut 6 électrons pour réduire une molécule d' Al_2O_3 , et produire deux molécules d'aluminium métallique Al .

On suppose que la consommation d'alumine dissoute qui a lieu dans le bain électrolytique est proportionnelle à la densité de courant électrique locale $j : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$. On définit alors le terme de disparition de la concentration d'alumine q_1 associé à la consommation par la réaction d'électrolyse

$$q_1(x) = -\frac{I}{6F} \frac{|j(x)|}{\int_{\Omega} |j(x)| \, dx} \quad (3.11)$$

de sorte à avoir la consommation totale sur Ω

$$\int_{\Omega} q_1(x) \, dx = -\frac{I}{6F}. \quad (3.12)$$

2. On parle de consommation de l'alumine dissoute lorsqu'une paire de ions Al^{3+} issus de la dissociation d'une molécule d' Al_2O_3 est réduite au niveau de la cathode.

je ne comprends pas $\nu \cdot w$...
ce ne serait pas plutôt $\nu \cdot u$?
(non car $\nu \cdot u = 0$...)
Ou alors $\nu \cdot (u(x) + w(r))$
quel cas
 $\Gamma^- = \Gamma^-(r) ...$

Dissolution des particules d'alumine La masse perdue par la population de particules d'alumine n_p vient contribuer à la concentration d'alumine dissoute. On définit q_2 le terme source de la concentration qui représente l'apport dû à la dissolution des particules de la manière suivante. Si $t \in [0, T]$, on note $\bar{k}(t)$ l'entier tel que $\bar{k}(t) = \max_{1 \leq k \leq K} \{k \mid \tau_k + \Theta_{\text{Lat}} < t\}$. Alors on définit

$$q_2(t, x) = - \sum_{k=1}^{\bar{k}(t)} \frac{4\pi\rho_{\text{Al}}}{[\text{Al}_2\text{O}_3]} \int_{\mathbb{R}_+} n_p^k(t, x, r) f(r, c(t, x), \Theta(t, x)) r^2 \, dr \quad (3.13)$$

où $[\text{Al}_2\text{O}_3] = 0.102 \text{ kg mol}^{-1}$ la masse molaire de l'alumine. L'ensemble des indices $\{k \mid 1 \leq k \leq \bar{k}(t)\}$ représente l'ensemble des populations de particules n_p^k qui se dissolvent dans le bain à l'instant $t \in [0, T]$.

Concentration d'alumine dissoute La concentration d'alumine dissoute c est transportée dans le bain par la vitesse d'écoulement u , mais est de plus sujette à une diffusion liée d'une part à l'agitation moléculaire, et d'autre part aux turbulences de l'écoulement. Soit $D_c : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_+^*$ la diffusivité de la concentration d'alumine dissoute dans le bain, supposée donnée. Alors la concentration c doit satisfaire l'équation

$$\frac{\partial c}{\partial t}(t, x) + u(x) \cdot \nabla c(t, x) - \operatorname{div}(D_c(x) \nabla c(t, x)) = q_1(x) + q_2(t, x), \quad \forall x \in \Omega, \quad (3.14)$$

Puisque qu'il ne peut y avoir de flux de masse d'alumine à travers le bord du domaine Ω , la concentration doit satisfaire la condition aux limites de Neumann homogène

$$\frac{\partial c}{\partial \nu}(t, x) = 0 \quad \forall x \in \partial \Omega, \quad t \in [0, T]. \quad (3.15)$$

te(0T).

Termes sources de la température du bain Pour simplifier le modèle, on fait l'hypothèse que le bain électrolytique est isolé thermiquement, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de flux d'énergie thermique à travers le bord du domaine occupé par le bain.

L'énergie thermique du bain provient de trois sources distinctes. Premièrement, les particules d'alumine sont injectées avec une température $\Theta_{\text{Inj}} < \Theta$, la température locale du bain. De l'énergie thermique est prélevée dans le bain pour rétablir l'équilibre thermique entre celui-ci et les particules. On note $p_1(t, x)$ la densité de puissance thermique extraite du bain pour réchauffer les particules, que l'on définit par

$$p_1(t, x) = -(\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) \sum_{k=1}^K \delta(t - \tau_k) \int_{\mathbb{R}_+} \rho_{\text{Al}} C_{\text{p}, \text{Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 S_k^k(x, r) \, dr \quad (3.16)$$

où δ est une masse de Dirac et Θ_{Init} la température initiale du bain. Dans (3.16) et pour rappel, Θ_{Init} est la température initiale du bain électrolytique, $C_{\text{p}, \text{Al}}$ et ρ_{Al} sont la chaleur spécifique et la densité de l'alumine, tandis que les S_k sont les distribution en espace et en rayon des doses de poudre d'alumine qui interviennent dans le membre de droite de (3.4).

Remarque 8. En réalité, la puissance nécessaire à réchauffer les particules $p_1(t, x)$ est proportionnelle à $\Theta(t, x) - \Theta_{\text{Inj}}$. Cependant, dans (3.16) on utilise la température initiale du bain Θ_{Init} à la place de $\Theta(t, x)$, ce qui revient à négliger l'écart entre $\Theta(t, x)$ et Θ_{Init} , qui est faible devant $\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}$.

Deuxièmement, la réaction de dissolution de la poudre d'alumine est endothermique. On note $p_2(t, x)$ la densité de puissance thermique utilisée par la réaction, que l'on définit pour tout $x \in \Omega$ et $t \in [0, T]$ par

$$p_2(t, x) = -\Delta H_{\text{Diss}} q_2(t, x), \quad \boxed{\text{eq:p2}}$$
(3.17)

où ΔH_{Diss} est l'enthalpie molaire nécessaire à la dissolution de l'alumine. On rappelle que $q_2(t, .)$ est le débit molaire par unité de volume d'alumine dissoute à l'instant t .

Et troisièmement, la résistivité électrique de l'électrolyte engendre la conversion d'une partie de l'énergie électrique en énergie thermique par effet Joule. Cette source d'énergie thermique p_3 par effet Joule dépend de la densité de courant stationnaire j et s'écrit

$$p_3(x) = \frac{j \cdot j}{\sigma}. \quad \boxed{\text{eq:p3}}$$
(3.18)

où le nombre réel $\sigma > 0$ est la conductivité du bain que l'on suppose constante dans tout Ω .

Température du bain Tout comme la concentration d'alumine, la température du bain électrolytique Θ est transportée par la vitesse d'écoulement u et diffuse dans le bain. Cette diffusion est due à la l'agitation moléculaire d'une part, et à aux turbulences de l'écoulement d'autre part. Soit $D_\Theta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_+^*$ la diffusivité de la température dans le bain, supposée donnée. Comme précédemment on a noté ρ_e , $C_{p,e}$ la densité et la chaleur spécifique du bain électrolytique. Alors la température Θ doit satisfaire l'équation

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t}(t, x) + u(x) \cdot \nabla \Theta - \operatorname{div}(D_\Theta(x) \nabla \Theta(t, x)) = \frac{1}{\rho_e C_{p,e}} \sum_{i=1}^3 p_i(t, x), \quad \forall x \in \Omega, t \in (0, T). \quad \boxed{\text{eq:temperature}}$$
(3.19)

De plus, et conformément à l'hypothèse d'isolation thermique, la température Θ doit satisfaire une condition de Neumann homogène

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \nu}(t, x) = 0, \quad \forall x \in \partial \Omega, t \in [0, T]. \quad \boxed{\text{eq:t=bc}}$$
(3.20)

$\Theta \in C^1(\overline{\Omega})$

Formulation du problème Le problème de transport et dissolution d'alumine en fonction de la température consiste à chercher des fonctions $n_p^k : (0, T) \times \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, $c : (0, T) \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ et $\Theta : (0, T) \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ qui satisfont les équations couplées (3.3) à (3.6), (3.14) et (3.19) ainsi que les conditions aux limites (3.7), (3.15) et (3.20), auxquelles on ajoutera des conditions initiales appropriées.

La section suivante traite de la discrétisation en temps de ce système d'équations.

3.3 Discrétisation en temps

On répète ici, par soucis de clarté, le système d'équations aux dérivées partielles qui correspondent au modèle de transport et dissolution d'alumine en fonction de la température, soit les équations (3.3 à (3.6), (3.14) et (3.19). On a $\forall k = 1, 2, \dots, K$

$$n_p^k(t, x, r) = 0, \quad 0 \leq t < \tau^k, \quad \boxed{\text{eq:mdl-eq-1}} \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial n_p^k}{\partial t} + (u(x) + w(r)) \cdot \nabla n_p^k = 0, \quad \tau^k < t \leq \tau^k + \Theta_{\text{Lat}}, \quad \boxed{\text{eq:mdl-eq-2}} \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial n_p^k}{\partial t} + (u(x) + w(r)) \cdot \nabla n_p^k + \frac{\partial}{\partial r} (f(r, c, \Theta) n_p^k) = 0, \quad \tau^k + \Theta_{\text{Lat}} < t \leq T, \quad \boxed{\text{eq:mdl-eq-3}} \quad (3.23)$$

(car pas indiqué ci-dessous)
mais ça a l'avantage de clarifier la dépendance de n_p ...

pour $x \in \Omega$ et $r \in \mathbb{R}_+$,

et

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u(x) \cdot \nabla c - \operatorname{div}(D_c(x) \nabla c) = q_1 + q_2, \quad \forall t \in (0, T), \quad \boxed{\text{eq:md1-eq-4}} \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + u(x) \cdot \nabla \Theta - \operatorname{div}(D_\Theta(x) \nabla \Theta) = \frac{1}{\rho_e C_{p,e}} \sum_{i=1}^3 p_i, \quad \forall t \in (0, T) \quad \boxed{\text{eq:md1-eq-5}} \quad (3.25)$$

dans Ω . Les termes source de la concentration c sont

$$q_1(x) = -\frac{I}{6F} \frac{|j(x)|}{\int_{\Omega} |j(x)| \, dx} \quad (3.26)$$

et

$$q_2(t, x) = -\sum_{k=1}^{\bar{k}(t)} \frac{4\pi\rho_{\text{Al}}}{[\text{Al}_2\text{O}_3]} \int_{\mathbb{R}_+} n_p^k(t, x, r) f(r, c(t, x), \Theta(t, x)) r^2 \, dr. \quad (3.27)$$

Les termes source de la température Θ sont

$$p_1(t, x) = -(\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) \sum_{k=1}^K \delta(t - \tau_k) \int_{\mathbb{R}_+} \rho_{\text{Al}} C_{p,\text{Al}} \frac{4}{3}\pi r^3 S^k(x, r) \, dr, \quad (3.28)$$

$$p_2(t, x) = -\Delta H_{\text{Diss}} q_2(t, x), \quad (3.29)$$

et

$$p_3(x) = \frac{j \cdot j}{\sigma}. \quad (3.30)$$

Ces équations munies de conditions limites et initiales forment un système couplé pour les inconnues n_p^k , c et Θ . En effet, la densité de particules n_p dépend de la concentration c et de la température Θ par l'intermédiaire de la vitesse de dissolution f , tandis que la concentration et la température dépendent de la densité de particule n_p à travers leurs termes sources respectifs q_2 , p_1 et p_2 .

En suivant l'approche adoptée dans [Hof11], on propose de discréteriser les équations (3.21) à (3.25) par une méthode de splitting en temps de la façon suivante. Soit un nombre de pas de temps N et soit $\Delta t = T/N$ un pas de temps uniforme. Soient $t_n = n\Delta t$, $n = 0, 1, \dots, N$, une subdivision de l'intervalle de temps $[0, T]$. On note $n_{p,n}^k$ une approximation de $n_p^k(t_n, \cdot, \cdot)$, $n_{p,n}$ une approximation de $n_p(t_n, \cdot, \cdot)$, c_n une approximation de $c(t_n, \cdot)$ et Θ_n une approximation de $\Theta(t_n, \cdot)$. Puisque k est l'indice de l'injection d'une population de particules, on définit p^k et q^k tels que

$$p^k = \max \{j \in \mathbb{N} \mid j\Delta t < \tau^k\}, \quad q^k = \max \{j \in \mathbb{N} \mid j\Delta t < \tau^k + \Theta_{\text{Lat}}\}. \quad (3.31)$$

En d'autres termes, p^k est l'indice du dernier pas de temps qui précède l'injection de la population k , et q^k est l'indice du dernier pas de temps qui précède le début de la dissolution de la population k . Bien entendu, si $\Theta_{\text{Lat}} = 0$ alors $p_k = q_k$. $p^k = q^k$.

Étant donnés $n_{p,n}^k \forall k = 1, 2, \dots, K$, c_n et Θ_n , on pose

$$n_{p,n+1}^k = 0, \quad \text{si } n+1 < p^k + 1, \quad \boxed{\text{eq:splitting-npl-init}} \quad (3.32)$$

$$n_{p,n+1}^k = S^k, \quad \text{si } n+1 = p^k + 1, \quad \boxed{\text{eq:splitting-npl-1}} \quad (3.33)$$

$$\frac{n_{p,n+1}^k - n_{p,n}^k}{\Delta t} + u \cdot \nabla n_{p,n+1}^k = 0, \quad \text{si } p^k + 1 < n+1 \leq q^k. \quad \boxed{\text{eq:splitting-npl-2}} \quad (3.34)$$

Δp^k vs p^k
 Δq^k vs q^k

p^k
 q^k

dans Ω et pour tout $r > 0$. Puis, si n est tel que $q^k < n + 1 \leq N$, on pose

$$\frac{\bar{n}_{p,n+1}^k - n_{p,n}^k}{\Delta t} + u \cdot \nabla \bar{n}_{p,n+1}^k = 0, \quad \text{on définit } \bar{n}_{p,n+1}^k, \bar{n}_{p,n+1} \text{ et } n_{p,n+1}^k \text{ par} \quad \text{(3.35)}$$

$$\frac{\bar{n}_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}}{\Delta t} + w(r) \cdot \nabla \bar{n}_{p,n+1}^k = 0, \quad \text{(3.36)}$$

$$\frac{n_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}^k}{\Delta t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(f(r, c_n, \Theta_n) n_{p,n+1}^k \right) = 0 \quad \text{(3.37)}$$

dans Ω et pour tout $r > 0$. Et finalement

$$\frac{c_{n+1} - c_n}{\Delta t} + u \cdot \nabla c_{n+1} - \operatorname{div}(L_c \nabla c_{n+1}) = q_1 + q_{2,n+1}, \quad \text{(3.38)}$$

$$\frac{\Theta_{n+1} - \Theta_n}{\Delta t} + u \cdot \nabla \Theta_{n+1} - \operatorname{div}(D_\Theta \nabla \Theta_{n+1}) = \frac{1}{\rho_e C_{p,e}} \left(\sum_{i=1}^2 p_{i,n+1} + p_3 \right) \quad \text{(3.39)}$$

dans Ω . On précise maintenant la forme des termes sources discrétisés $q_{2,n+1}$, $p_{i,n+1}$, $i = 1, 2$.

Discrétisation de la source d'alumine q_2 . Le terme source q_2 qui apparaît dans l'équation (3.24) correspond à la masse d'alumine qui est transférée entre les particules qui se dissolvent et l'alumine dissoute par unité de temps. Afin de permettre une conservation exacte de la masse d'alumine par le schéma numérique entre les champs n_p et c , nous tirons parti du splitting en temps des équations (3.23) et (3.24) [Hof11]. Plus précisément, grâce au splitting en temps, les quantités $n_{p,n+1}^k$ et $\bar{n}_{p,n+1}^k$, $k = 1, 2, \dots, K$, sont indépendantes de c_{n+1} . On pose alors

$$q_{2,n+1}(x) = -\frac{1}{\Delta t} \sum_{\substack{1 \leq k \leq K \\ q^k < n+1}} \int_0^\infty \frac{\rho_{\text{Al}}}{[\text{Al}_2\text{O}_3]} \frac{4}{3} \pi r^3 \left(n_{p,n+1}^k(x) - \bar{n}_{p,n+1}^k(x) \right) dr, \quad x \in \Omega. \quad \text{(3.40)}$$

(que veut dire
[Al₂O₃] ?)

Ici, la somme porte sur toutes les populations de particules qui se dissolvent à l'instant t_n , c'est-à-dire les populations k telles que $t_{q^k} < t_n$.

Discrétisation des sources de puissance thermique p_1 et p_2 . Le terme source de puissance thermique p_1 (voir (3.16)) est discrétisé en régularisant la masse de Dirac sur les intervalles $[t_{p^k}, t_{p^k} + \Delta t]$, $k = 1, 2, \dots, K$. On pose

$$p_{1,n+1}(x) = -(\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) \sum_{k=1}^K \frac{1}{\Delta t} \delta_{n+1,p^k} \int_{\mathbb{R}_+} \rho_{\text{Al}} C_{\text{p,Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k(x, r) dr \quad \text{(3.41)}$$

où $\delta_{i,j}$ est le symbol de Kronecker défini par

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad \text{(3.42)}$$

Le terme source p_2 qui correspond à la puissance thermique nécessaire à la dissolution des particules (voir (3.17)) est discrétisé en utilisant $q_{2,n+1}$:

$$p_{2,n+1} = -[\text{Al}_2\text{O}_3] \Delta H_{\text{Diss}} q_{2,n+1}. \quad \text{(3.43)}$$

L'équation (3.37) est discrétisée selon r à l'aide du schéma des caractéristiques présenté dans la section 2.4. Les équations (3.34), (3.35), (3.36), (3.38) et (3.39) sont des équations d'advection ou d'advection-diffusion et sont discrétisées en espace selon la méthode adoptée dans [Hof11]. La discrétisation est basée sur une méthode d'éléments finis continus linéaires par morceaux et stabilisée par une méthode de type SUPG [QV08].

j'ais seulement
souligné cette
partie... redis-
moi si tu veux
que je la lise
en détail...

Propriétés de conservation du schéma de discréttisation Nous établissons maintenant le bilan de masse d'alumine dans les champs $n_{p,n+1}^k$, $k = 1, \dots, K$ et c_{n+1} à l'instant t_{n+1} dans le cas particulier où la vitesse de sédimentation des particules est nulles, i.e., lorsque $w(r) = 0$. On note la masse de particules d'alumine dans la population k à l'instant t_{n+1} par

$$N_{p,n+1}^k = \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{\text{Al}} n_{p,n+1}^k \frac{4}{3} \pi r^3 dr dx. \quad \text{(3.44)}$$

On notera encore la masse totale de particules d'alumine à l'instant t_{n+1} par $N_{p,n+1} = \sum_{k=1}^K N_{p,n+1}^k$ et la masse d'alumine dissoute à l'instant t_{n+1} par

$$C_{n+1} = [\text{Al}_2\text{O}_3] \int_{\Omega} c_n dx. \quad \text{(3.45)}$$

En vertu des équations (3.32) à (3.37), l'accroissement de la masse d'alumine de la population k entre les instants t_n et t_{n+1} s'écrit

$$N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k = \begin{cases} 0, & \text{si } n+1 \leq p^k, \\ \int_{\Omega} dx \int_0^{\infty} dr \rho_{\text{Al}} S^k \frac{4}{3} \pi r^3, & \text{si } n+1 = p^k + 1, \\ 0, & \text{si } p^k + 1 < n+1 \leq q^k, \\ \int_{\Omega} dx \int_0^{\infty} dr \rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}), & \text{si } q^k < n+1 \leq N_{\text{accr}} \end{cases} \quad \text{(3.46)}$$

On obtient l'accroissement de la masse totale de particules entre les instants t_n et t_{n+1} en sommant sur $k = 1$ à K :

$$\begin{aligned} N_{p,n+1} - N_{p,n} &= \sum_{\substack{k \\ n+1 \leq p^k}} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) + \sum_{\substack{k \\ n+1 = p^k + 1}} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) \\ &\quad + \sum_{\substack{k \\ p^k + 1 < n+1 \leq q^k}} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) + \sum_{\substack{k \\ q^k < n+1}} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k). \end{aligned}$$

Puisque

$$\sum_{\substack{k \\ n+1 \leq p^k}} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{\substack{k \\ p^k + 1 < n+1 \leq q^k}} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) = 0$$

en vertu de (3.46), on obtient

$$\begin{aligned} N_{p,n+1} - N_{p,n} &= \sum_{\substack{k \\ n+1 = p^k + 1}} \int_{\Omega} dx \int_0^{\infty} dr \rho_{\text{Al}} S^k \frac{4}{3} \pi r^3 \\ &\quad + \sum_{\substack{k \\ q^k < n+1}} \int_{\Omega} dx \int_0^{\infty} dr \rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}^k), \end{aligned} \quad \text{(3.47)}$$

En intégrant les expressions (3.35), (3.36) sur Ω , en utilisant le théorème de la divergence et en se rappelant que $\operatorname{div} u = 0$ dans Ω , que $u \cdot \nu = 0$ sur $\partial\Omega$ et que $\frac{\partial n_{p,n+1}}{\partial \nu} = 0$ sur $\partial\Omega$, on obtient que

$$\int_{\Omega} \bar{n}_{p,n+1}^k dx = \int_{\Omega} n_{p,n}^k dx. \quad \text{(3.48)}$$

En utilisant le théorème de la divergence, et en utilisant le fait que $\operatorname{div} u = 0$ dans Ω , que $\frac{\partial \Theta_{n+1}}{\partial \nu} = 0$ et $u \cdot \nu = 0$ sur $\partial\Omega$ il reste

$$\int_{\Omega} \rho_e C_{p,e} (\Theta_{n+1} - \Theta_n) dx = \Delta t \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} p_{i,n+1} dx + \Delta t \int_{\Omega} p_3 dx. \quad (3.54)$$

En remplaçant les expressions (3.41), (3.43) et (3.18) pour le termes sources $p_{1,n+1}$, $p_{2,n+1}$ et p_3 on obtient

$$\begin{aligned} \rho_e C_{p,e} \int_{\Omega} (\Theta_{n+1} - \Theta_n) dx &= \frac{\Delta t}{\sigma} \int_{\Omega} j \cdot j dx \\ &\quad - C_{p,Al} (\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k dr dx \\ &\quad + \Delta H_{\text{Diss}} \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k - n_{p,n}^k) dr dx. \end{aligned}$$

A nouveau par récurrence sur n on obtient

$$\begin{aligned} \rho_e C_{p,e} \int_{\Omega} (\Theta_{n+1} - \Theta_0) dx &= \frac{t_{n+1}}{\sigma} \int_{\Omega} j \cdot j dx \\ &\quad - C_{p,Al} (\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k dr dx \\ &\quad + \Delta H_{\text{Diss}} \sum_{m=0}^n \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,m+1}^k - n_{p,m}^k) dr dx, \end{aligned} \quad \boxed{\text{(eq:energy-mass-balance)}} \quad (3.55)$$

c'est-à-dire que l'énergie thermique du bain $\rho_e C_{p,e} \int_{\Omega} \Theta_n dx$ dépend uniquement de l'énergie thermique initiale, de l'intensité de l'effet Joule, de la masse des doses d'alumine injectées antérieurement à l'instant t_n et de la masse de particule d'alumine dissoute durant l'intervalle de temps $[0, t_n]$.

Remarque 9. En général, les bilans de masse (3.52) et (3.55) sont valables pour autant que la totalité des particules se dissolvent à l'intérieur du bain. Cette condition est satisfaite si la vitesse de sédimentation $w = 0$ comme on l'a supposé dans ce dernier paragraphe. Cette condition est aussi satisfaite si $n_p^k = 0$ sur $\partial\Omega$, puisque le terme

$$\int_{\partial\Omega} n_p^k w \cdot \nu ds = 0 \quad (3.56)$$

également, i.e., le flux de particule à travers la frontière de Ω est nul.

Remarque 10. Les bilans de masse et d'énergie ci-dessus ont été dérivés à partir du modèle de transport et dissolution semi-discretisé. Pour que ces bilans restent valables pour le problème discréte en temps et en espace, il est essentiel que la discréttisation en espace des équations d'advection-diffusion (3.34), (3.35), (3.36), (3.38) (3.39) conservent exactement les intégrales de $n_{p,n}$, c_n et Θ_n sur Ω . Cette condition est garantie par le schéma de discréttisation proposé dans [Flotron2013b] que l'on utilise ici.

pourquoi en gral?

+ discréttisation
selon r ?

La section suivant traite de l'application de ce modèle numérique à une cuve d'électrolyse d'aluminium industrielle.

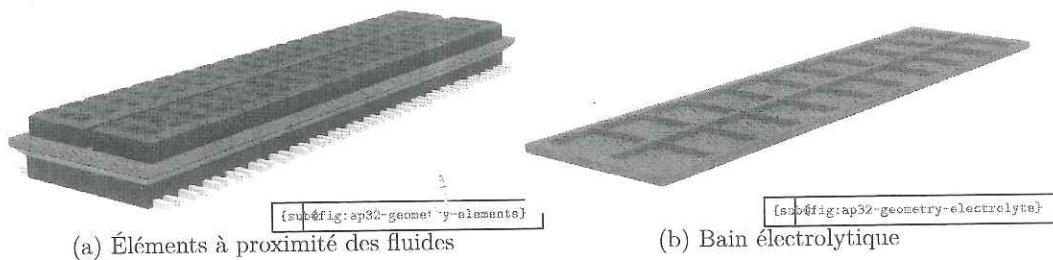


FIGURE 3.1 – Géométrie des éléments importants à proximité du bain électrolytique dans une cuve AP32 (fig. 3.1a), et détail du volume occupé par le bain électrolytique dans cette même cuve (fig. 3.1b). On distingue les anodes en haut et la cathode en bas (noir), le bain électrolytique (orange), le métal liquide (jaune) et les bus bar (gris clair).

3.4 Dissolution de poudre d'alumine dans une cuve industrielle

Dans cette section nous appliquons le modèle de transport et dissolution d'alumine en fonction de la température proposé dans la section 3.2 dans le cadre d'une cuve d'électrolyse industrielle pour déterminer la répartition de l'alumine dissoute dans le bain de celle-ci. Nous utilisons la cuve AP32, qui exploite la technologie de cuve d'électrolyse AP Technology™ développée par RioTinto. Les premières cuves basées sur la technologie AP ont été mises en production au début des années 1990 et plus de 4000 d'entre elles fonctionnent encore actuellement dans les halles de productions à travers le monde [Rio18].

Nous commençons par présenter le design et le mode d'opération de la cuve AP32. Nous détaillerons ensuite le choix des différentes données qui interviennent dans modèle numérique proposé dans la section 3.3 et dans le cadre de la cuve AP32. Finalement, nous présenterons une sélection de résultats numériques obtenus.

Géométrie de la cuve AP32 La structure de la cuve AP32 occupe au sol une longueur d'environ 17 m et une largeur d'environ 7 m. L'ensemble de la structure s'élève sur environ 5 m. La figure 3.1 montre la disposition des différents éléments à l'intérieur de la cuve. Les fluides s'étendent horizontalement sur environ 14 m par 3.5 m. L'épaisseur de la couche d'aluminium liquide (en jaune sur la figure 3.1a) en contact avec la cathode est d'environ 17 cm, tandis que l'épaisseur maximale du bain électrolytique, au niveau des canaux entre les blocs anodiques, est d'environ 20 cm. La figure 3.1b illustre le volume occupé par le bain dans lequel nous nous intéressons à déterminer la concentration d'alumine (en orange). Les indentations rectangulaires à la surface de celui-ci correspondent au volume occupé par les anodes partiellement immergées. L'ACD est typiquement de l'ordre de 3 cm. Ces différentes épaisseurs des fluides varient d'un point à l'autre de la cuve à cause des écoulements dans les fluides, de la déformation de l'interface bain-métal et des irrégularités à la surface des anodes. De plus, le volume de métal liquide varie constamment, d'une part à cause du produit de la réaction d'électrolyse, et d'autre part à cause des opérations de siphonnage du métal, qui interviennent environ une fois par jour.

Le plan anodique est composée de deux rangées de 10 anodes chacune, représentées en noir sur la figure 3.1a. La surface du plan anodique est d'environ 40.3 m^2 et seulement 25% de la surface du bain est libre, le reste étant recouvert par les anodes. La cuve est conçue pour que l'électrolyte soit traversé par un courant électrique total de $I = 320\,000 \text{ A}$, ce

qui correspond à une densité de courant d'environ 0.8 A cm^{-2} à la surface des anodes. En supposant un rendement de réaction de 100%, ce courant électrique permet de réduire par électrolyse 29.8 g s^{-1} ou 2577 kg par jour d'aluminium métallique, i.e., un peu plus qu'1 m³ de métal par jour. Cet accroissement de volume de métal correspond à une variation de l'épaisseur du métal liquide d'environ 2 cm.

Du côté des anodes, la réaction d'électrolyse produit environ 0.8 mol s^{-1} d'oxygène O₂. Cet oxygène réagit immédiatement avec le carbone de l'anode pour former du CO₂. Dans l'ensemble de la cuve, l'électrolyse produit au total environ 80 L par seconde de gaz, qui remonte vers la surface du bain par le canal central et les canaux latéraux. La réaction de l'oxygène avec le carbone des anodes³ provoque l'érosion de celles-ci à une vitesse d'environ 1100 kg par jour. Étant donné le nombre total d'anodes et leur taille respectives, chaque anode d'une cuve AP32 a une durée de vie d'environ 30 jours, après quoi elle doit être remplacée par une anode neuve.

Pour compenser l'alumine dissoute qui est consommée par la réaction d'électrolyse, il faut injecter en moyenne au cours du temps 56.3 g s^{-1} de poudre d'alumine. Comme déjà mentionné dans la section 1.1, la poudre d'alumine est déposée à la surface du bain dans le canal central par une série d'injecteurs dont la position est fixe. Un piqueur vient percer mécaniquement un trou dans la croûte et créer un accès à la surface libre du bain avant chaque injection. Ce trou se rebouche rapidement et pour cette raison l'injection de la poudre d'alumine ne peut pas avoir lieu continûment.

Pour maintenir un rendement énergétique maximum, éviter l'émission de gaz fluorés et éviter l'occurrence des effets d'anodes, il est crucial que la concentration d'oxyde d'aluminium dissout dans le bain soit maintenue dans un intervalle très précis. Malheureusement, pour de nombreuses raisons, il est impossible de maintenir un bilan précis de la quantité d'alumine dans le bain en fonction de ce qui est injecté et de ce qui est consommé. En effet, l'environnement rend difficile la pesée précise des quantités déposées, une partie des particules volatiles ne parviennent jamais dans le bain, des agrégats se forment, dont une partie s'accumule au fond de la cuve sur la cathode, et des réactions chimiques parasites viennent, entre autres, grever ce bilan.

Pour contourner cette difficulté, les opérateurs exploitent le fait que la résistivité du bain électrolytique dépend de la concentration d'alumine dissoute, et atteint un minimum à la concentration optimale $c \approx 3\%$ masse. En mesurant la chute de potentiel électrique à travers le bain électrolytique, on maintient la concentration d'alumine dissoute au voisinage de la concentration optimale en alternant une phase de sur-alimentation en alumine et une phase de sous-alimentation. Durant la phase de sur-alimentation, la concentration d'alumine va passer au-delà de la concentration optimale et par conséquent accroître la résistivité du bain. Passé un certain seuil, on débute une phase de sous-alimentation, durant laquelle la résistivité commence par chuter, puis croît à nouveau. Passé un certain seuil, on amorce une phase de sur-alimentation, et ainsi de suite.

répétition...

Dans chacune des phases de sur-alimentation ou sous-alimentation, les injecteurs déposent les doses d'alumine selon une cadence préétablie et périodique. La période et une taille des doses peuvent être spécifiées indépendamment pour chaque injecteur.

Calcul de l'écoulement dans le bain Une approximation de vitesse d'écoulement du bain u et de la densité de courant j dans la cuve AP32 est obtenue par l'intermédiaire du modèle multi-physique stationnaire proposé par S. Steiner [Ste09], J. Rochat [Roc16] déjà

3. L'oxydation du carbone qui constitue les anodes par l'oxygène qui résulte de la réaction d'électrolyse forme du CO₂ sous forme gazeuse.

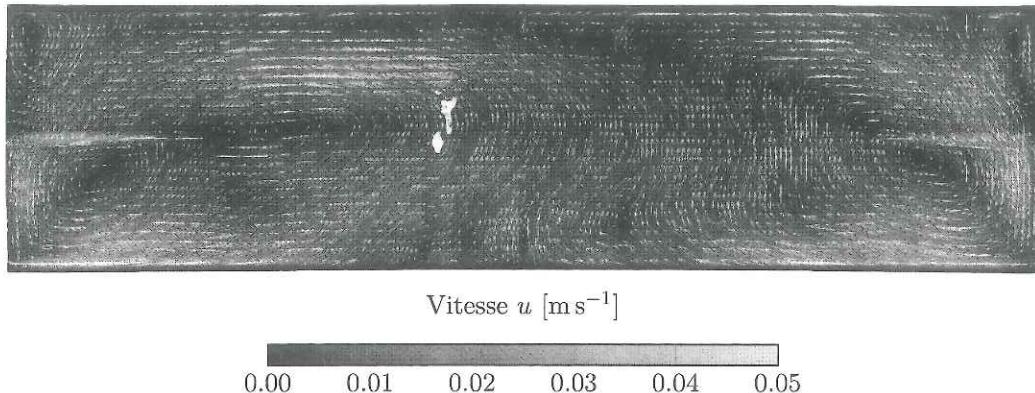


FIGURE 3.2 – Champ de vitesse u dans le bain électrolytique d'une cuve AP32 restreint sur une surface placée à mi-hauteur de l'ACD, vue depuis dessus. Cette situation correspond à un état d'opération standard.

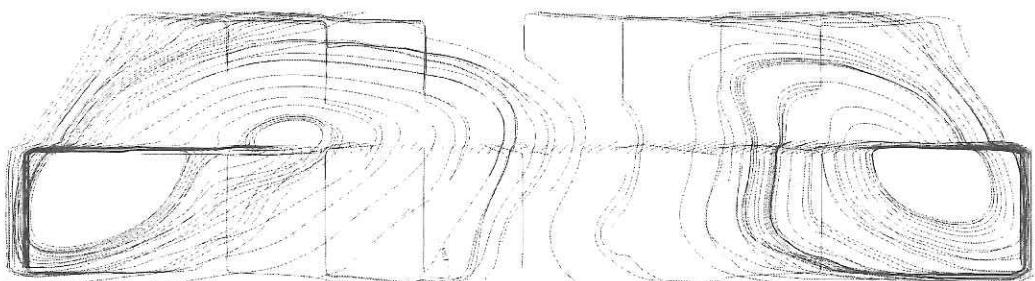


FIGURE 3.3 – Lignes de courant correspondant au champ de vitesse représenté sur la figure 3.2. Les lignes de courant prennent leur origine le long du canal central.

introduit dans la section 3.1. La figure 3.2 représente la vitesse d'écoulement ainsi calculée par le logiciel Alucell dans le bain électrolytique de la cuve AP32, dans l'ACD. Lorsque la densité de courant électrique est répartie uniformément sur toutes les anodes, l'écoulement dans les fluides forme deux tourbillons principaux qui tournent en sens opposés. Deux petits tourbillons se forment dans les coins aval. Les vitesses maximales de l'écoulement (5 cm s^{-1} environ) sont atteintes dans le canal central au niveau des extrémités de la cuve, ainsi que le long de la paroi amont, de part et d'autre de la cuve. Dans le reste du bain, et en particulier sous les anodes, la vitesse d'écoulement dépasse rarement 2 cm s^{-1} . La figure 3.3 illustre les lignes de courant de l'écoulement dans le bain. On remarque les lignes de courant s'engagent dans les canaux latéraux et dans le bain en pourtour des rangées d'anodes.

Conditions sur l'injection et l'effet Joule Le schéma numérique proposé dans la section 3.3 est conçu de manière à conserver exactement d'une part la masse d'alumine dans les populations de particules n_p et ¹⁰ concentration d'alumine dissoute c , et d'autre part la quantité d'énergie thermique liée à la température du bain Θ . Pour des raisons déjà évoquées, ces bilans ne sont pas exactement respectés dans une cuve industrielle réelle¹¹ et il faut en général injecter un peu plus d'alumine que ce qui est consommé par la réaction d'électrolyse. Quand à l'énergie thermique, nous avons supposé que le bain est isolé thermiquement, alors que dans une cuve réelle une quantité non négligeable d'énergie

Quant

3.4. DISSOLUTION DE POUDRE D'ALUMINE DANS UNE CUVE INDUSTRIELLE

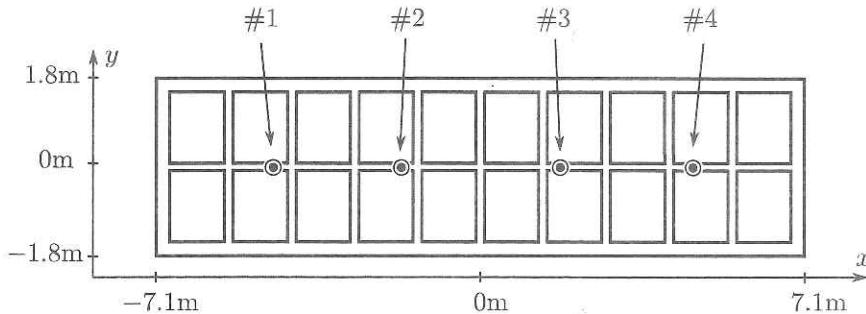


FIGURE 3.4 – Vue schématique de la partie supérieure du bain électrolytique. Les blocs rectangulaires représentent l'emplacement des anodes, tandis que les cercles indiqués par les flèches et numérotés marquent l'emplacement des injecteurs disposés le long du canal central.

TABLE 3.1 – Paramètres caractérisant les 4 injecteurs de la cuve AP32.

Injecteur	Position	Première injection	Intervalle d'injection	Masse de dose
#1	-4.4m	16s	16s	0.225kg
#2	-1.6m	32s	32s	0.451kg
#3	1.6m	48s	48s	0.676kg
#4	4.4m	64s	24s	0.338kg

s'échappe par le métal, les parois latérales de la cuve, les anodes, la surface du bain et par le CO₂ qui s'échappe dans l'atmosphère.

Pour éviter que la masse totale d'alumine dans la cuve croisse sans limite au cours du temps, il faut s'assurer que dans un état pseudo stationnaire, la masse d'alumine reste proche de la masse d'alumine initialement présente dans le bain. En d'autres termes, si M_n est la masse totale d'alumine dans le bain à l'instant t_n telle que définie dans la section (3.3), alors on demande à ce que

impose

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{M_{n+1} - M_0}{t_n} = 0,$$

c'est-à-dire que

$$\frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{n+1}} \sum_k \int_{\Omega} dx \int_0^{\infty} dr \rho_{\text{Al}} S^k \frac{4}{3} \pi r^3. \quad (3.57)$$

Il faut donc choisir la masse des doses d'alumine injectées S^k , $k = 1, 2, \dots$ et les temps d'injection τ^k , $k = 1, 2, \dots$ de sorte à ce que le débit de masse de poudre d'alumine moyen au cours du temps soit égal à $\frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F}$, c'est-à-dire $56.382 \times 10^{-3} \text{ kg s}^{-1}$.

La cuve AP32 possède 4 injecteurs placés au-dessus du canal central, numérotés de 1 à 4, dans le sens de la coordonnée x croissante (voir la figure 3.4). Les paramètres qui définissent chaque injecteur sont regroupés dans la table 3.1.

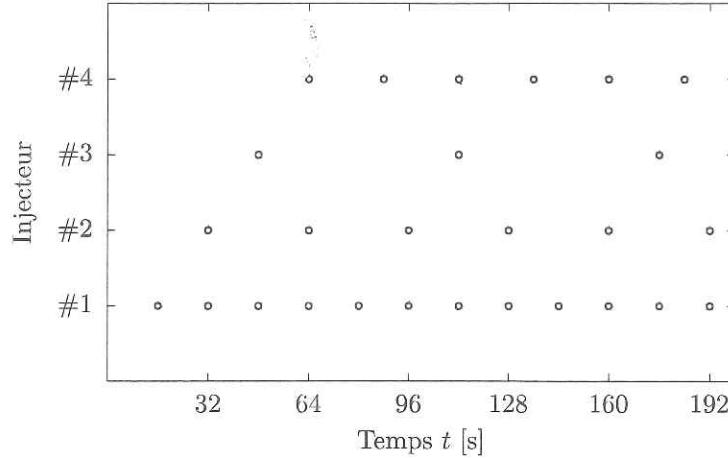


FIGURE 3.5 – Temps d’injections des différents injecteurs de la cuve AP32. Chaque cercle fig:inj-times représente une injection. Chaque ligne correspond à l’un des 4 injecteurs.

La masse des doses dans le tableau 3.1 est choisie de telle sorte à ce que l’ensemble des 4 injecteurs injecte 25% de la masse d’alumine en moyenne. La région de répartition des densités des particules initiales S^k est décrite dans [Hof11]. Plus précisément, chaque quantité S^k est une fonction lisse à support compact centrée autour du point d’injection de l’injecteur correspondant. La distribution initiale en rayon est approximée par une loi log-normale basée sur des mesures expérimentales. Puisque les rapports des périodes d’injection des 4 injecteurs sont des nombres rationnels, on peut définir une période globale P liée à l’ensemble des 4 injecteurs. Étant donné les périodes d’injections reportées dans le tableau 3.1, le cycle d’injection global est périodique après une transition initiale de 64 s, avec une période de $P = 192$ s. La figure 3.5 représente les injections qui ont lieu durant les 192 premières secondes de la simulation.

On détermine maintenant une condition sur la conductivité électrique σ , issue d’un argument similaire à celui fait sur l’énergie thermique du bain. Pour que l’énergie thermique du bain reste proche de l’énergie thermique initiale, on demande à ce que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\rho_e C_{p,e} \int_{\Omega} (\Theta_{n+1} - \Theta_0) dx}{t_{n+1}} = 0, \quad (3.58)$$

ce qui correspond à la condition, en considérant (3.55), à la condition:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} \int_{\Omega} j \cdot j dx &= C_{p,Al} (\Theta_{Init} - \Theta_{Inj}) \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{n+1}} \sum_k \int_{\Omega} dx \int_0^{\infty} dr \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k \\ &\quad - \Delta H_{Diss} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{n+1}} \sum_{m=0}^n \sum_k \int_{\Omega} dx \int_0^{\infty} dr \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,m+1}^k - n_{p,m}^k). \end{aligned} \quad \text{(eq:energy-condition)} \quad (3.59)$$

Le premier terme du membre de droite de (3.59) est égal à

$$C_{p,Al} (\Theta_{Init} - \Theta_{Inj}) \frac{I[Al_2O_3]}{6F}$$

en vertu de (3.57). Pour que le deuxième terme du membre de droite de (3.59) converge, il est suffisant que chaque population $k \geq 1$ se dissolve en un temps fini quelque soit k . Plus précisément, les populations $n_{p,q}^k$ se dissolvent en un temps fini s'il existe un entier positif q' tel que $n_{p,n}^k = 0$ pour tout $n > q^k + q'$.

Le cas échéant on peut télescopier la somme sur k et en remarquant que

$$\int_{\Omega} n_{p,q}^k dx = \int_{\Omega} S^k dx$$

pour tout $k \leq 1$ et pour tout $r > 0$ lorsque la vitesse de chute $w = 0$, le deuxième terme du membre de droite de (3.59) se réduit à

$$\Delta H_{\text{Diss}} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{n+1}} \sum_k \int_{\Omega} dx \int_0^{c^k} dr \rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k.$$

Ainsi finalement,

$$\frac{1}{\sigma} \int_{\Omega} j \cdot j dx = C_{p,\text{Al}} (\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} + \Delta H_{\text{Diss}} \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F}$$

et on fixe σ de sorte à satisfaire cette dernière relation, c'est-à-dire que

$$\sigma = \frac{\int_{\Omega} j \cdot j dx}{(C_{p,\text{Al}} (\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}) + \Delta H_{\text{Diss}}) \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F}} \quad \boxed{\text{eq:conductivity-condition}} \quad (3.60)$$

Diffusivité du bain électrolytique La vitesse d'écoulement stationnaire du bain u obtenue par la méthode introduite dans [Ste09], [Roc16] est la vitesse moyenne d'un écoulement turbulent. Les structures turbulentes du fluide sont décrites par un modèle de longueur de mélange de Smagorinsky [Roc16]. Dans le modèle de Smagorinsky, les structures turbulentes de l'écoulement se traduisent par une viscosité de l'écoulement moyen u proportionnelle au tenseur des déformations \mathcal{E} de u . Dans le présent travail, nous caractérisons la diffusivité D_c de la concentration c et la diffusivité D_{Θ} de la température Θ par quatre réels D_{Θ}^M , D_{Θ}^T , D_c^M et D_c^T pour tout $x \in \Omega$ de la manière suivante :

$$D_{\Theta}(x) = D_{\Theta}^M + D_{\Theta}^T \left(2 \sum_{i,j} \mathcal{E}_{ij}(x) \mathcal{E}_{ij}(x) \right)^{1/2}, \quad (3.61)$$

$$D_c(x) = D_c^M + D_c^T \left(2 \sum_{i,j} \mathcal{E}_{ij}(x) \mathcal{E}_{ij}(x) \right)^{1/2}, \quad (3.62)$$

où \mathcal{E}_{ij} , $i, j = 1, 2, 3$ est le tenseur des déformations de l'écoulement défini par

$$\mathcal{E}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.63)$$

Les valeurs du paramètre D_c^M , associé à la diffusion moléculaire et de D_c^T , associé à la diffusion induite par les turbulences de l'écoulement, sont rapportées dans le tableau 3.2.

La valeur des paramètres D_{Θ}^M et D_{Θ}^T , associés à ..., et D_c^T et D_c^T , associés à ...

ϵ_{ij} ou ϵ_{ij}
(selon la notation
choisie au
chapitre 4)

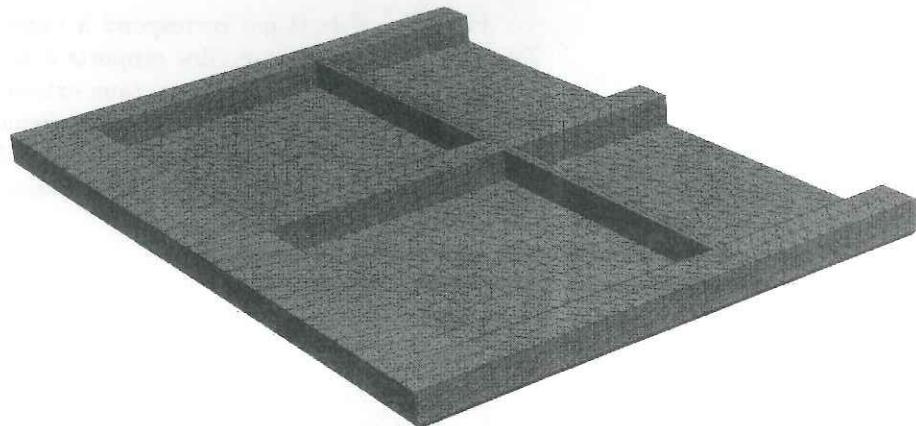


FIGURE 3.6 – Aperçu du maillage du domaine occupé par le bain électrolytique dans la cuve AP32.

Conditions initiales de la concentration et de la température Les conditions initiales des populations de particules n_p^k sont données implicitement dans la description du modèle par la relation (3.32). Plus précisément, aucune particule n'est présente dans le bain électrolytique à $t = 0$, et donc $n_p(0, x, r) = 0$ pour $r > 0$ et $x \in \Omega$.

On observe expérimentalement sur des cuves d'électrolyse industrielles que celle-ci atteignent un état stationnaire périodique lié à la période du cycle d'injection après un temps caractéristique de transition. On observe typiquement l'établissement de cet état périodique par d'intermédiaire de mesures indirectes de la résistivité électrique de la cuve. Par analogie, dans le cadre du modèle de transport et dissolution d'alumine, nous nous attendons à ce que la densité de particules n_p , la concentration c et la température Θ atteignent asymptotiquement lorsque $t \rightarrow \infty$, un état périodique de période P identique à la période du cycle d'injection global, soit 192s dans notre cas.

Il est clair que plus les conditions initiales pour c et Θ sont éloignées de l'état périodique asymptotique, plus le temps nécessaire pour atteindre un tel état est long. Par conséquent, nous choisissons des conditions initiales uniformes en espace pour la concentration et la température, et qui soient égales aux conditions optimales d'opération de la cuve AP32 :

$$\begin{aligned} c(0, x) &= c_{\text{Init}}, \quad \forall x \in \Omega, \\ \Theta(0, x) &= \Theta_{\text{Init}}, \quad \forall x \in \Omega \end{aligned}$$

où c_{Init} , Θ_{Init} sont donnés dans la table 3.2. Remarquons que la concentration initiale c_{Init} en mol m^{-3} s'exprime en fonction de la concentration initiale $c_{\text{init}, \%w}$ en % masse à l'aide de la formule :

$$c_{\text{Init}} = \frac{c_{\text{Init}, \%w} \cdot 100^{-1}}{\rho_e [\text{Al}_2\text{O}_3] \left(1 - c_{\text{Init}, \%w} \cdot 100^{-1} \left(1 - \frac{\rho_e}{\rho_{\text{Al}}} \right) \right)}$$

Nous exploiterons également cette dernière formule pour convertir les valeurs du champ de concentration en % masse lors de la visualisation des résultats. Les deux valeurs de la concentration initiale selon les unités physique sont rapportées dans la table 3.2.

Paramètres de discréétisation Le maillage du domaine Ω est obtenu en même temps que les champs u et j par la méthode déjà évoquée plus haut proposée par [Ste09], [Roc16].

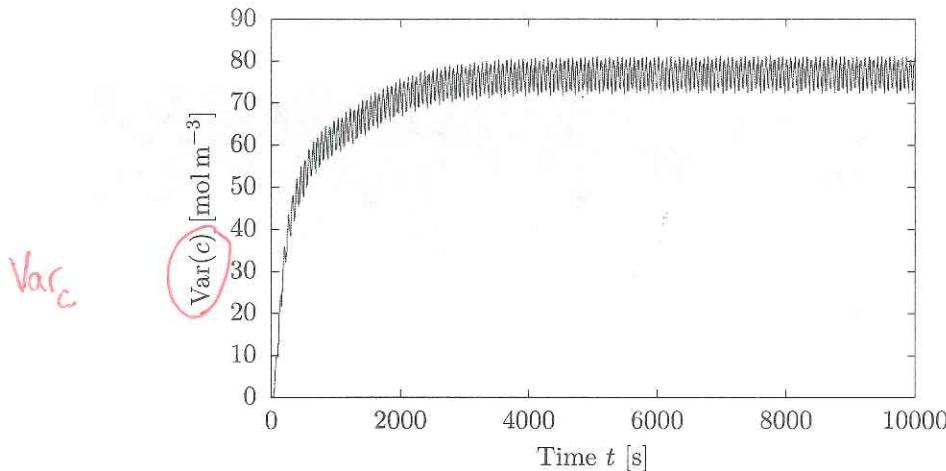


FIGURE 3.7 – Évolution de Var_c au cours du temps sur l'intervalle $[0, T]$ dans le bain électrolytique de la cuve AP32 lorsque la température n'est pas prise en compte dans la vitesse de dissolution des particules.

des particules provoque un accroissement rapide de la concentration d'alumine dissoute localement autour du point d'injection. Lorsque la dose est totalement dissoute, ce pic de concentration est atténué par la diffusion de la concentration dans l'électrolyte. Cet effet se traduit par un accroissement de la variance de la concentration immédiatement après l'injection d'une dose, puis par une décroissance de la variance.

Cependant, ces variations de la concentration dans l'état périodique sont très localisées autour des points d'injection. Dans le reste du bain électrolytique, les variations de la concentration restent de l'ordre de 1%.

Puisque, lorsque l'état périodique est atteint, la concentration varie peu au cours du cycle d'injection global, nous pouvons nous permettre de visualiser la distribution de la concentration dans le bain électrolytique à un instant arbitraire du cycle d'injection global. Le temps $T = 10\ 000$ s auquel la solution est évaluée correspond donc à environ 51 périodes du cycle d'injection global, sans compter la phase transitoire initiale de 64 s.

On s'intéresse à la distribution de la concentration d'alumine là où a lieu la réaction d'électrolyse, c'est-à-dire essentiellement dans l' ACD . On se contente donc de visualiser la distribution de la concentration d'alumine dans cette zone. Dans le domaine Ω occupé par l'électrolyte, l' ACD est maintenue constante avec 3.2 cm d'épaisseur sur l'ensemble de l'interface. Pour visualiser la concentration d'alumine dissoute dans l' ACD , on évalue c sur une surface fictive placée dans l'électrolyte, parallèle à l'interface et à une distance égale à la moitié de l' ACD . La figure 3.8 présente la distribution de la concentration d'alumine dans le bain électrolytique.

On remarque sur la figure 3.8 que la concentration atteint des maximums locaux aux voisinages des points d'injection, ce qui montre que l'essentiel de la poudre d'alumine se dissout dans ces régions. Cette alumine dissoute est ensuite transportée par l'écoulement. Les deux injecteurs de gauche alimentent le tourbillon de gauche (voir figure 3.2), tandis que les deux injecteurs de droite alimentent essentiellement le tourbillon de droite. Les régions du bain sous-alimentées sont les coins en aval, où la concentration descend en dessous de 3 %w et où l'écoulement est caractérisé par la présence de petits tourbillons