

JR 28/02/2018

d'énergie thermique p_3 par effet Joule dépend de la densité de courant stationnaire j et s'écrit

$$p_3(x) = \frac{j \cdot j}{\sigma}. \quad (3.18)$$

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

Remarque 6. 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 $\Theta_{\text{Init}} - \Theta_{\text{Inj}}$.

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 de du bain électrolytique. Alors la température Θ doit satisfaire l'équation

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

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

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

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. On a $\forall k = 1, 2, \dots, K$

$$n_p^k(t, x, r) = 0, \quad 0 \leq t < \tau^k, \quad (3.21)$$

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

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

(multe références
Eqr (3.3), (3.4)... etc

*

3.3. DISCRÉTISATION EN TEMPS

45

et

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

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

dans Ω .

Ces équations 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 discrétiser les équations (3.21) à (3.25) par une méthode de splitting en temps de la façon suivante. Soit l'entier N , le nombre de pas de temps et $\Delta t = T/N$ 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 $\Theta(t_n, \cdot)$. Si k est l'indice de l'injection d'une population de particules, on définit p^k et q^k les plus grands entiers tels que

$$t_{p^k} < \tau^k \quad \text{et} \quad t_{q^k} < \tau^k + \Theta_{\text{Lat}}, \quad (3.26)$$

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

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

$$n_{p,n+1}^k = 0, \quad \text{si } n+1 < p^k + 1, \quad (3.27)$$

$$n_{p,n+1}^k = S^k, \quad \text{si } n+1 = p^k + 1, \quad (3.28)$$

$$\frac{n_{p,n+1}^k - n_{p,n}^k}{\Delta t} + u \cdot \nabla n_{p,n+1}^k = 0, \quad \text{si } p^k + 1 < n+1 \leq q^k. \quad (3.29)$$

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

$$\frac{\bar{n}_{p,n+1}^k - n_{p,n}^k}{\Delta t} + u \cdot \nabla \bar{n}_{p,n+1}^k = 0, \quad (3.30)$$

$$\frac{\bar{n}_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}^k}{\Delta t} + w \cdot \nabla \bar{n}_{p,n+1}^k = 0, \quad (3.31)$$

$$\frac{n_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}^k}{\Delta t} + \frac{\partial}{\partial r} (f(r, c_n, \Theta_n) n_{p,n+1}^k) = 0 \quad (3.32)$$

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

$$\frac{c_{n+1} - c_n}{\Delta t} + u \cdot \nabla c_{n+1} - \operatorname{div}(D_c \nabla c_{n+1}) = q_1 + q_{2,n+1}, \quad (3.33)$$

$$\frac{\Theta_{n+1} - \Theta_n}{\Delta t} + u \cdot \nabla \Theta_{n+1} - \operatorname{div}(D_\Theta \nabla \Theta_{n+1}) = \frac{1}{\rho_e C_{p,e}} \left(\sum_{i=1}^2 p_{i,n+1} + p_3 \right) \quad (3.34)$$

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

$$p^k = \max \{ j : j \Delta t < \tau^k \}, \quad q^k = \max \{ j : j \Delta t < \tau^k + \Theta_{\text{Lat}} \}$$

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 (voir le rappel en haut p45!)

$$q_{2,n+1}(x) = -\frac{1}{\Delta t} \sum_{\substack{1 \leq k \leq K \\ q^k < n+1}} \int_0^\infty \frac{\rho_{Al}}{[Al_2O_3]} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k(x) - \bar{n}_{p,n+1}^k(x)) dr, \quad x \in \Omega. \quad (3.35)$$

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 $t_{q^k} \leq t_n$.

Discrétisation des source de puissance thermique p_1 et p_2 . Le terme source de puissance thermique p_1 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

$$p_{1,n+1}(x) = -(\Theta_{Init} - \Theta_{Inj}) \sum_{k=1}^K \frac{1}{\Delta t} \delta_{n+1,p^k} \int_{\mathbb{R}^+} \rho_{Al} C_{p,Al} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k(x, r) dr \quad (3.36)$$

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

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (3.37)$$

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

$$p_{2,n+1} = -[Al_2O_3] \Delta H_{Diss} q_{2,n+1}. \quad (3.38)$$

L'équation (3.32) est discrétisé selon r à l'aide du schéma de caractéristiques présenté dans la section 2.4. Les équations (3.29), (3.30), (3.31), (3.33) et (3.34) 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 des éléments finis stabilisée par la méthode SUPG [QV08].

Propriétés de conservation du schéma de discrétisation 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 nulle, 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 :

$$N_{p,n+1}^k = \int_{\Omega} \int_0^\infty \rho_{Al} n_{p,n+1}^k \frac{4}{3} \pi r^3 dr dx. \quad (3.39)$$

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

$$C_{n+1} = [Al_2O_3] \int_{\Omega} c_n dx. \quad (3.40)$$

Noter $\int_{\Omega} dx \cdot \int_0^{\infty} dr \dots$

3.3. DISCRÉTISATION EN TEMPS

47

Finalement on définit

et la masse totale d'alumine dans le bain $M_{n+1} = N_{p,n+1} + C_n$. En vertu des équations (3.27) à (3.32), l'accroissement de la masse d'alumine de la population k entre les instants t_n et t_{n+1} s'écrit

$$N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k = \begin{cases} 0, & \text{si } n+1 \leq p^k, \\ \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} S^k \frac{4}{3} \pi r^3 dr dx, & \text{si } n+1 = p^k + 1, \\ 0, & \text{si } p^k + 1 < n+1 \leq q^k, \\ \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}^k) dr dx, & \text{si } q^k < n+1 \leq N. \end{cases} \quad (3.41)$$

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 :

$$N_{p,n+1} - N_{p,n} = \sum_{n+1 \leq p^k} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) + \sum_{n+1 = p^k + 1} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) + \sum_{p^k + 1 < n+1 \leq q^k} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) + \sum_{q^k < n+1} (N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k) \cdot$$

On obtient $N_{p,n+1} - N_{p,n} = \sum_{n+1 = p^k + 1} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} S^k \frac{4}{3} \pi r^3 dr dx + \sum_{q^k < n+1} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k - \bar{n}_{p,n+1}^k) dr dx \quad (3.42)$

Puisque

$$\sum_k N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k = 0 \quad \text{et} \quad \sum_k N_{p,n+1}^k - N_{p,n}^k = 0$$

en vertu de (3.41), En intégrant les expressions (3.30), (3.31) sur Ω , en utilisant le théorème de la divergence et en se rappelant que $\text{div} u = 0$ 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

Alors que

$$\int_{\Omega} \bar{n}_{p,n+1}^k dx = \int_{\Omega} n_{p,n}^k dx. \quad (3.43)$$

En remplaçant (3.43) dans (3.42), l'accroissement de masse totale de particules s'écrit

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

Il faut croiser les intégrales ! (plus logique)

On dérive maintenant une expression pour l'accroissement de la masse d'alumine dissoute. En intégrant l'équation (3.33) où le terme source $q_{2,n+1}$ est donné par l'expression (3.35), en utilisant le théorème de la divergence et en utilisant à nouveau le fait que $\text{div} u = 0$ dans Ω , et que $u \cdot \nu = 0$ et $\frac{\partial c_n}{\partial \nu} = 0$ sur $\partial\Omega$, on obtient

$$[Al_2O_3] \int_{\Omega} c_{n+1} dx - [Al_2O_3] \int_{\Omega} c_n dx = - \frac{\Delta t K [Al_2O_3]}{6F} \sum_{q^k < n+1} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k - n_{p,n}^k) dr dx,$$

En fait $w(r)$ est un champ de vitesse donné et constant.

On a $\text{div} w(r) = 0$. De plus $\sum_{k=1}^K \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1}^k - n_{p,n}^k) dr dx = 0$ si dissolution complète à l'instant t_{n+1} .

et ainsi par (3.40),

$$C_{n+1} - C_n = -\frac{\Delta t I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} - \sum_{\substack{k \\ q^k < n+1}} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{\text{Al}} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,n+1} - n_{p,n}) dr dx. \quad (3.45)$$

On obtient l'accroissement total de masse d'alumine dans le bain entre t_n et t_{n+1} en sommant (3.44) et (3.45). On obtient

$$M_{n+1} - M_n = -\Delta t \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} + \sum_{\substack{k \\ n+1=p^k+1}} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{\text{Al}} S^k \frac{4}{3} \pi r^3 dr dx. \quad (3.46)$$

Par récurrence sur n on obtient

$$M_{n+1} - M_0 = -t_{n+1} \frac{I[\text{Al}_2\text{O}_3]}{6F} + \sum_{\substack{k \\ p^k+1 \leq n+1}} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{\text{Al}} S^k \frac{4}{3} \pi r^3 dr dx, \quad (3.47)$$

c'est-à-dire que la masse totale d'alumine dans le bain dépend uniquement du taux de consommation de l'alumine dissoute par l'électrolyse (premier terme du membre de droite de (3.47)) et de la masse des doses injectées antérieurement au temps t_{n+1} (deuxième terme du membre de droite de (3.47)).

Nous concluons cette section en établissant un bilan de l'énergie thermique dans le bain. En intégrant l'équation (3.34) sur Ω et en multipliant par $\Delta t \rho_e C_{p,e}$ on a

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho_e C_{p,e} (\Theta_{n+1} - \Theta_n) dx + \Delta t \rho_e C_{p,e} \left(\int_{\Omega} u \cdot \nabla \Theta_{n+1} dx - \int_{\Omega} \text{div} (D_{\Theta} \nabla \Theta_{n+1}) \right) \\ = \Delta t \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} p_{i,n+1} dx + \Delta t \int_{\Omega} p_3 dx. \end{aligned} \quad (3.48)$$

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

$$\int_{\Omega} \rho_e C_{p,e} (\Theta_{n+1} - \Theta_n) dx = \Delta t \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} p_{i,n+1} dx + \Delta t \int_{\Omega} p_3 dx. \quad (3.49)$$

En remplaçant les expressions (3.36), (3.38) et (3.18) pour les termes sources $p_{1,n+1}$, $p_{2,n+1}$ et p_3 on obtient

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

3.4. DISSOLUTION DE POUDRE D'ALUMINE DANS UNE CUVE INDUSTRIELLE49

A nouveau par récurrence sur n on obtient

$$\begin{aligned} \rho_e C_{p,e} \int_{\Omega} (\Theta_{n+1} - \Theta_0) dx &= \frac{t_{n+1}}{\sigma} \int_{\Omega} j \cdot j dx \\ &\quad - C_{p,Al} (\Theta_{Init} - \Theta_{Inj}) \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 S^k dr dx \\ &\quad + \Delta H_{Diss} \sum_{m=0}^n \sum_k \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \rho_{Al} \frac{4}{3} \pi r^3 (n_{p,m+1}^k - n_{p,m}^k) dr dx, \end{aligned} \quad (3.50)$$

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 7. Les bilans de masse (3.47) et (3.50) ne sont valable que si la vitesse de sédimentation des particules w est strictement nulle, i.e., $w(r) = 0 \forall r > 0$. Dans le cas contraire, il peut exister un flux de particules non nulle à travers le bord $\partial\Omega$ que l'on ne peut pas contrôler.

Remarque 8. Les bilans de masse et d'énergie ci-dessus ont été dérivés à partir du modèle de transport et dissolution semi-discrétisé. Pour que ces bilans restent valables pour le problème discrétisé en temps et en espace, il est essentiel que la discrétisation en espace des équations d'advection-diffusion (3.29), (3.30), (3.31), (3.33) (3.34) conservent exactement les intégrales de $n_{p,n}$, c_n et Θ_n . Cette condition est garantie par le schéma de discrétisation proposé dans [Hof11] que l'on utilise ici.

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

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 TechnologyTM 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

Mettre une
autre ref
(Florent JR)

Je ne dirais pas ça
Je dirais que le
résultat est
juste à la
particule
soit toutes
discretisées
dans le bain
n.